(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2020년07월02일
(11) 등록번호 10-2128706
(24) 등록일자 2020년06월25일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C08G 64/34 (2006.01) *B01J 31/16* (2006.01)
B01J 31/18 (2006.01) *B01J 31/22* (2006.01)
C07C 279/12 (2006.01) *C07D 487/04* (2006.01)
C07F 15/06 (2006.01) *C07F 9/535* (2006.01)
C08F 4/80 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C08G 64/34 (2013.01)
B01J 31/16 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2019-7006248(분할)
(22) 출원일자(국제) 2009년08월24일
심사청구일자 2019년03월29일
(85) 번역문제출일자 2019년02월28일
(65) 공개번호 10-2019-0026054
(43) 공개일자 2019년03월12일
(62) 원출원 특허 10-2018-7002261
원출원일자(국제) 2009년08월24일
심사청구일자 2018년02월21일
(86) 국제출원번호 PCT/US2009/054773
(87) 국제공개번호 WO 2010/022388
국제공개일자 2010년02월25일
(30) 우선권주장
61/091,013 2008년08월22일 미국(US)
(뒷면에 계속)
(56) 선행기술조사문헌
US7304172 A
(뒷면에 계속)
전체 청구항 수 : 총 85 항

(73) 특허권자
사우디 아람코 테크놀로지스 컴퍼니
사우디 아라비아 다란 31311 사서함 62
(72) 발명자
엘런 스콧 디.
미국 뉴욕주 14850 이타카 스위트 198 댄비 로드 950 노보머, 인코포레이티드 내
체리안 안나 이.
미국 뉴욕주 14850 이타카 스위트 198 댄비 로드 950 노보머, 인코포레이티드 내
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
장훈

심사관 : 김동원

(54) 발명의 명칭 **촉매 및 중합체 합성방법**

(57) 요 약

본 발명은 이산화탄소와 에폭사이드의 공중합에 있어서 증가된 활성을 갖는 일분자 금속 착체를 제공한다. 또한, 중합체의 합성에 이러한 착체를 사용하는 방법을 제공한다. 한 측면에 따라, 본 발명은 착체의 활성 금속 중심에 배위 결합된 다좌배위자 리간드에 테터링된 조촉매 활성을 갖는 활성 화학종을 포함하는 금속 착체를 제공한다.

(52) CPC특허분류
B01J 31/183 (2013.01)
B01J 31/22 (2013.01)
C07C 279/12 (2013.01)
C07D 487/04 (2013.01)
C07F 15/065 (2013.01)
C07F 9/5355 (2013.01)
C08F 4/80 (2013.01)

(72) 발명자
시모노 크리스 에이.
미국 뉴욕주 14850 이타카 스위트 198 댄비 로드 950 노보머, 인코포레이티드 내
파머 제이 제이.
미국 뉴욕주 14850 이타카 스위트 198 댄비 로드 950 노보머, 인코포레이티드 내
코츠 제프리 더블유.
미국 뉴욕주 14850 이타카 스위트 198 댄비 로드 950 노보머, 인코포레이티드 내
그리드네브 알렉세이
미국 뉴욕주 14850 이타카 스위트 198 댄비 로드 950 노보머, 인코포레이티드 내
라포인테 로버트 이.
미국 뉴욕주 14850 이타카 스위트 198 댄비 로드 950 노보머, 인코포레이티드 내

(56) 선행기술조사문헌
KR1020000053288 A
KR1019990045365 A
KR1020070046868 A
KR1020010083091 A
US20050192454 A1
WO2000072893 A2
US20080103040 A1
US07304172 B2
WO2008136591 A1

(30) 우선권주장
61/096,313 2008년09월11일 미국(US)
61/098,739 2008년09월19일 미국(US)

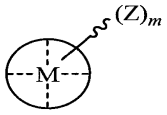
명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1의 금속 착체.

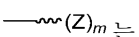
화학식 1



위의 화학식 1에서,

M은 금속 원자이고;

 는 코롤 리간드를 포함하고;

 는 다좌배위자 리간드에 결합된 하나 이상의 활성화 잔기이고, 여기서,

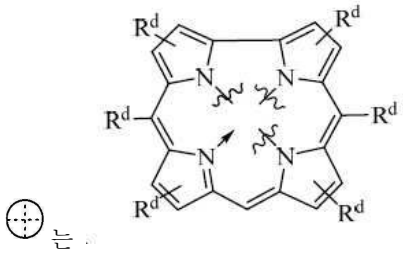
 는 상기 리간드에 공유 커플링된 링커 잔기이고,

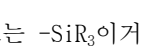
각각의 Z는 활성화 관능성 그룹이고;

m은 개별 링커 잔기에 존재하는 Z 그룹의 수이고, 1 내지 4의 정수이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

 는 를 포함하고; 여기서,

R^d는 각각 독립적으로  그룹, 수소, 할로겐, -OR, $-NR_2$, -SR, -CN, $-NO_2$, $-SO_2R$, -SOR, $-SO_2NR_2$; -CNO, $-NRSO_2R$, -NCO, $-N_3$ 또는 $-SiR_3$이거나; 또는 C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클; 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; 2개 이상의 R^d 그룹은 개재 원자들과 함께 하나 이상의 헤테로원자를 임의로 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고;

R은 각각 독립적으로 수소이거나, 또는 아실; C_{1-6} 지방족; C_{1-6} 헤테로지방족; 카바모일; 아릴알킬; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클; 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원

자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환; 산소 보호 그룹; 및 질소 보호 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고, 동일한 질소원자 상의 2개의 R 그룹은 함께 임의로 치환된 3원 내지 7원 환을 임의로 형성할 수 있는, 금속 착체.

청구항 3

제2항에 있어서, M은 Cr, Mn, V, Fe, Co, Mo, W, Ru, Al 및 Ni로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

청구항 4

제2항에 있어서, M은 Fe인, 금속 착체.

청구항 5

제2항에 있어서, M은 Mn인, 금속 착체.

청구항 6

제2항에 있어서, M은 Co인, 금속 착체.

청구항 7

제3항에 있어서, 각각의 링커 잔기 ~~~는 임의로 치환된 C_3-C_{30} 지방족 그룹으로부터 독립적으로 선택되는, 금속 착체.

청구항 8

제3항에 있어서, 각각의 링커 잔기 ~~~는 임의로 치환된 C_4-C_6 지방족 그룹으로부터 독립적으로 선택되는, 금속 착체.

청구항 9

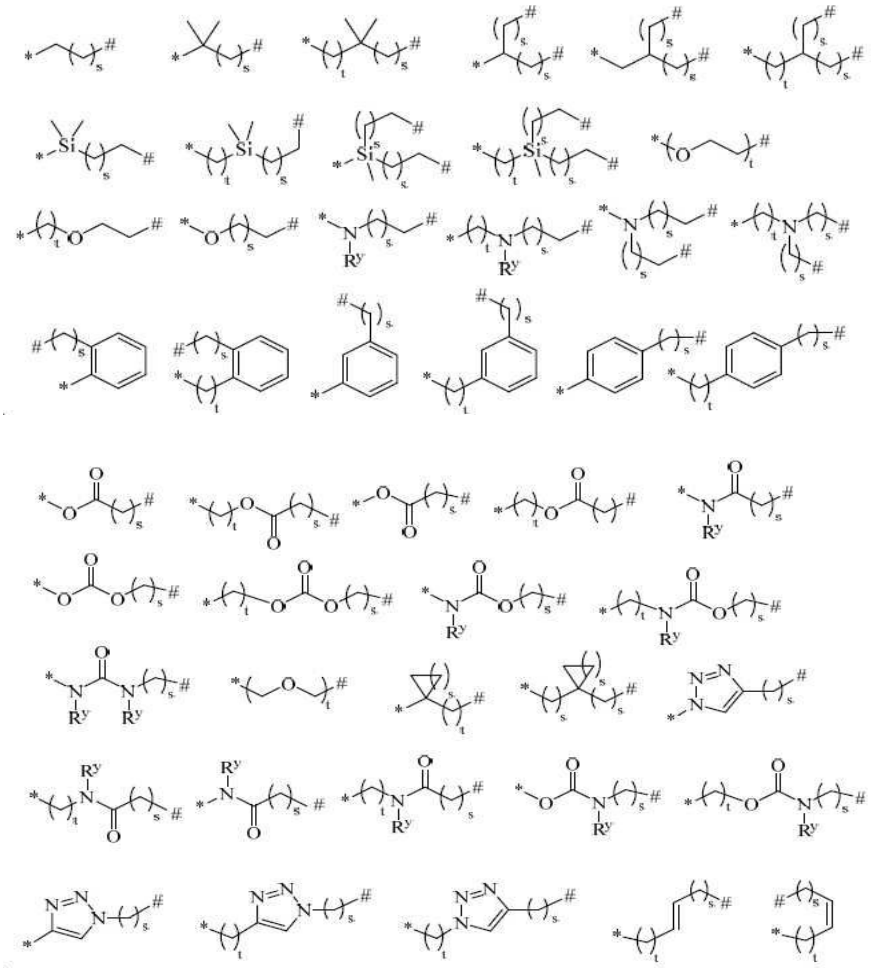
제3항에 있어서, 각각의 링커 잔기 ~~~는 임의로 치환된 C_4 지방족 그룹으로부터 독립적으로 선택되는, 금속 착체.

청구항 10

제3항에 있어서, 각각의 링커 잔기 ~~~는 임의로 치환된 C_3 지방족 그룹으로부터 독립적으로 선택되는, 금속 착체.

청구항 11

제3항에 있어서, 각각의 링커 잔기 ⟿ 는



로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택되고, 여기서,

s는 0 내지 6이고,

t는 1 내지 4이고,

*는 리간드의 결합 부위를 나타내고,

각각의 #은 활성화 관능성 그룹의 결합 부위를 나타내고;

R^y는 각각 독립적으로 -H이거나, 또는 C_{1-6} 지방족, 3원 내지 7원 헤테로사이클릭, 페닐, 및 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼인, 금속 착체.

청구항 12

제1항에 있어서, m은 1인, 금속 착체.

청구항 13

제1항에 있어서, m은 2인, 금속 착체.

청구항 14

제1항에 있어서, m은 3인, 금속 착체.

청구항 15

제1항에 있어서, m은 4인, 금속 착체.

청구항 16

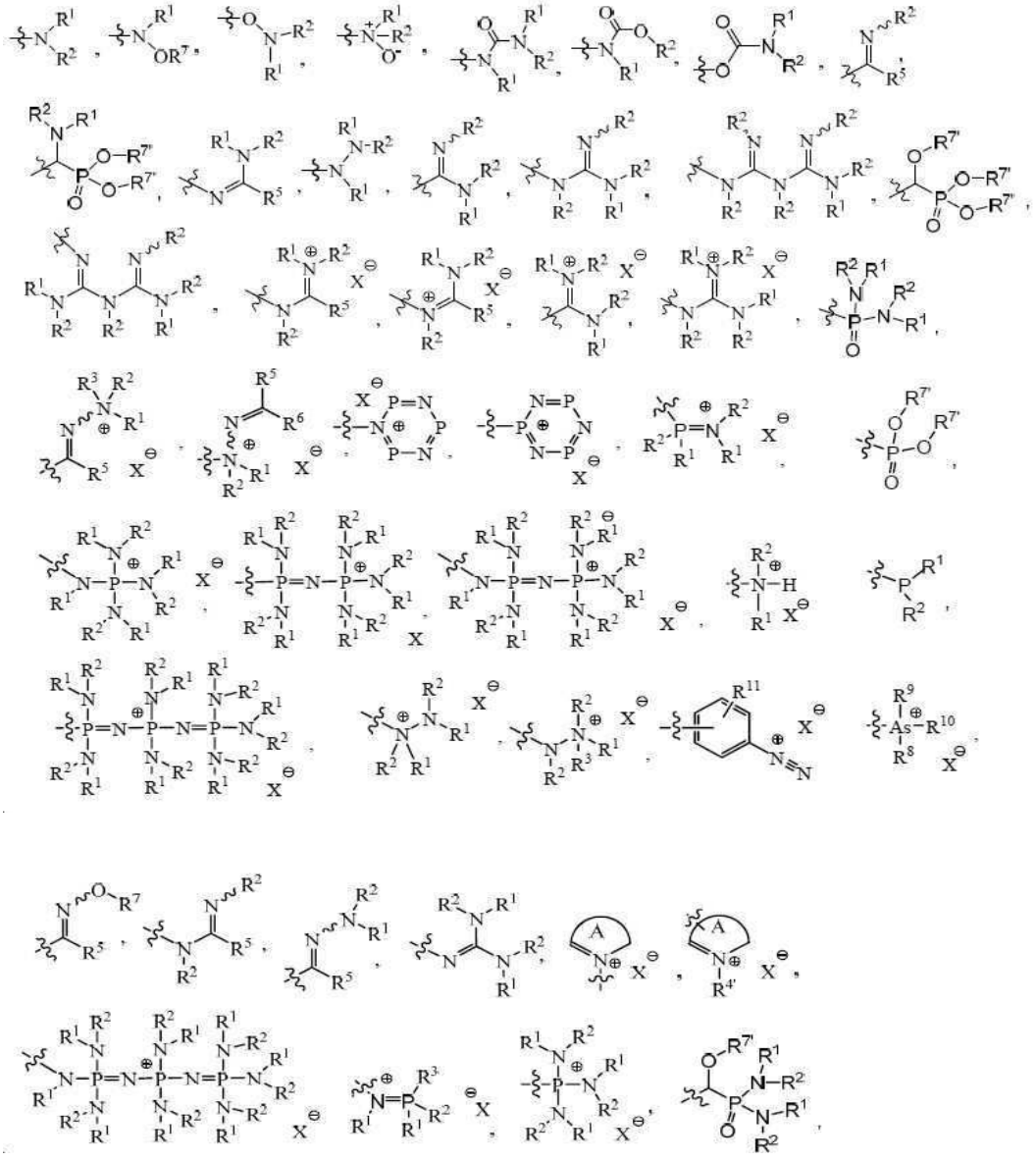
제3항에 있어서, 금속 착체는 총 2개의 Z 그룹을 함유하는, 금속 착체.

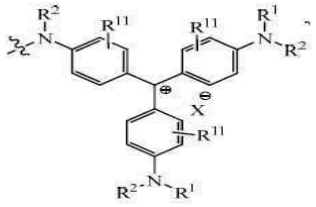
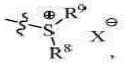
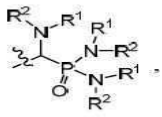
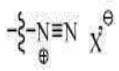
청구항 17

제3항에 있어서, 금속 착체는 총 4개의 Z 그룹을 함유하는, 금속 착체.

청구항 18

제1항 내지 제17항 중 어느 한 항에 있어서, 각각의 Z는



및 로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택된 활성화 관능성 그룹이고; 여기서,

R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로 수소이거나, 또는 C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클; 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; 2개 이상의 R^1, R^2 및 R^3 그룹은 개재 원자들과 함께 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고;

$R^{4'}$는 수소이거나, 또는 C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 8원 내지 10원 아릴; 5원 내지 10원 헤테로아릴; 3원 내지 7원 헤테로사이클릭; 옥사이드 및 하이드록실로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고;

R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 수소이거나, 또는 C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클; 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; R^5와 R^6은 개재 원자들과 함께 하나 이상의 헤테로원자를 임의로 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고, R^5 또는 R^6 그룹은 R^1 또는 R^2 그룹과 함께 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고;

R^7은 각각 독립적으로 수소 또는 하이드록실 보호 그룹이거나, 또는 C_{1-20} 아실; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클; 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고, R^7 그룹은 R^5 그룹과 함께 하나 이상의 헤테로원자를 임의로 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고;

$R^{7'}$는 각각 독립적으로 수소 또는 하이드록실 보호 그룹이거나, 또는 C_{1-20} 아실; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클; 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불

포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; 2개의 $R^{7'}$ 그룹은 개재 원자들과 함께 하나 이상의 헤테로원자를 임의로 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고, $R^{7'}$ 그룹은 R^1 또는 R^2 그룹과 함께 하나 이상의 헤테로원자를 임의로 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고;

R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소이거나, 또는 C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클; 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; 임의의 2개 이상의 R^8, R^9 및 R^{10} 그룹은 개재 원자들과 함께 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고;

R^{11}은 각각 독립적으로 할로겐, $-NO_2$, -CN, $-SR^y$, $-S(O)R^y$, $-S(O)_2R^y$, $-NR^yC(O)R^y$, $-OC(O)R^y$, $-CO_2R^y$, -NCO, $-N_3$, $-OR^7$, $-OC(O)N(R^y)_2$, $-N(R^y)_2$, $-NR^yC(O)R^y$ 및 $-NR^yC(O)OR^y$로 이루어진 그룹으로부터 선택되거나, 또는 C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클; 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고, 2개 이상의 인접한 R^{11} 그룹은 함께 0 내지 4개의 헤테로원자를 함유하는 임의로 치환된 포화, 부분 불포화 또는 방향족 5원 내지 12원 환을 형성할 수 있고; 여기서, R^y는 각각 독립적으로 수소이거나, 또는 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족 그룹 및 임의로 치환된 아릴 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고;

X는 음이온이고;

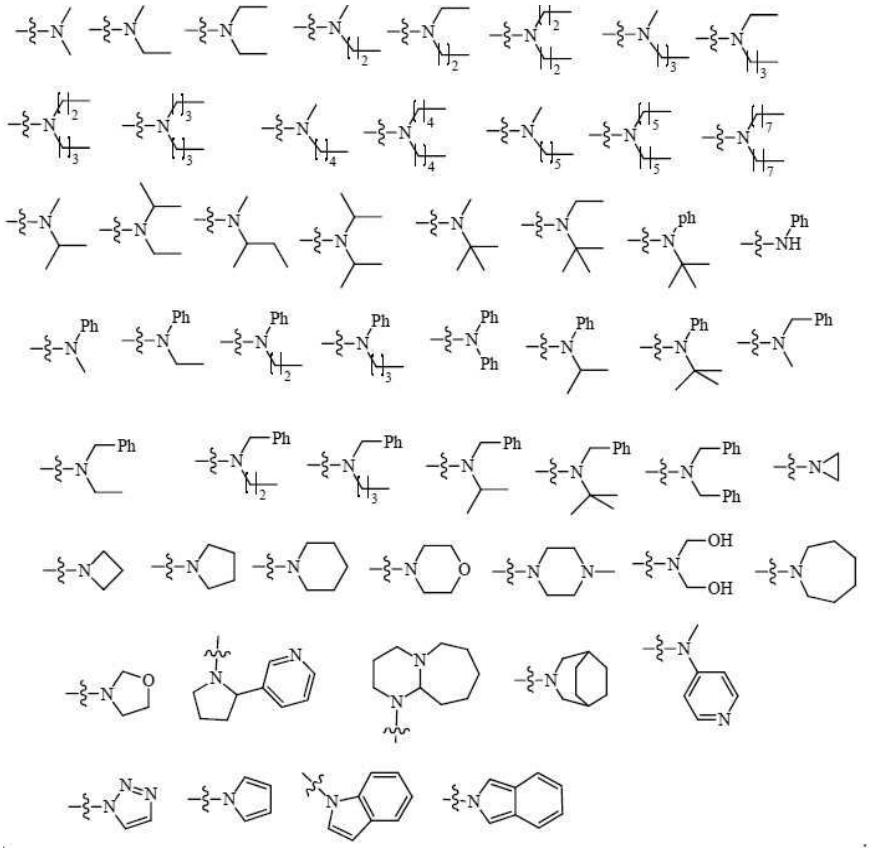
환 A는 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 추가의 헤테로원자를 갖는 임의로 치환된, 5원 내지 10원 헤테로아릴 그룹인, 금속 착체.

청구항 19

제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은  인, 금속 착체.

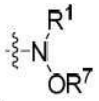
청구항 20

제19항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은



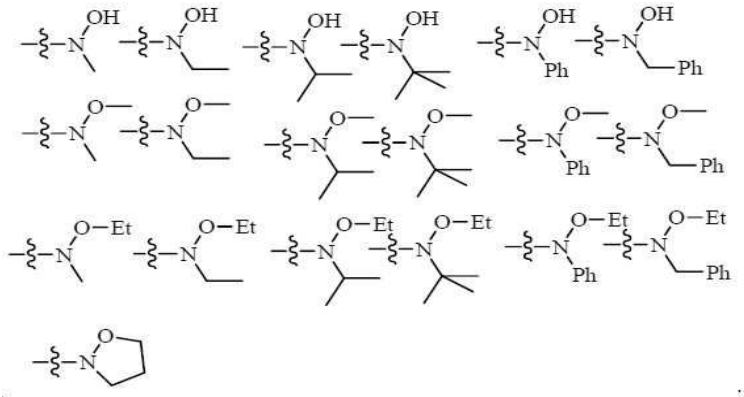
로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

청구항 21

제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은  인, 금속 착체.

청구항 22

제21항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은

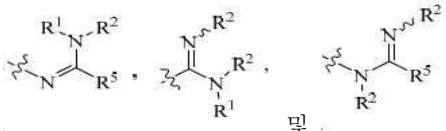


로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

청구항 23

제1항 내지 제17항 중 어느 한 항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은 아미딘, 구아니딘, 아미디늄 및 구아니디늄으로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

청구항 24

제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은  및 로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

청구항 25

제24항에 있어서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소이거나, 또는 C_{1-20} 지방족, C_{1-20} 헤테로지방족, 5원 내지 6원 헤테로아릴, 페닐, 8원 내지 10원 아릴 및 3원 내지 7원 헤테로사이클릭으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼인, 금속 착체.

청구항 26

제24항에 있어서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 C_{1-12} 지방족 및 C_{1-12} 헤테로지방족으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼인, 금속 착체.

청구항 27

제24항에 있어서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족인, 금속 착체.

청구항 28

제24항에 있어서, R^1 및 R^2는 둘 다 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질인, 금속 착체.

청구항 29

제24항에 있어서, R^1 및 R^2는 개재 원자들과 함께 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성하는, 금속 착체.

청구항 30

제29항에 있어서, R^1과 R^2는 함께 $-C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2OC(R^y)_2-$ 및 $-C(R^y)_2NR^yC(R^y)_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성하고; 여기서, R^y는 -H이거나, 또는 C_{1-6} 지방족, 3원 내지 7원 헤테로사이클릭, 페닐, 또는 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼인, 금속 착체.

청구항 31

제29항에 있어서, R^1과 R^2는 함께 $-CH_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH_2OCH_2-$ 및 $-CH_2NR^yCH_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성하고; 여기서, R^y는 -H이거나, 또는 C_{1-6} 지방족, 3원 내지 7원 헤테로사이클릭, 페닐, 또는 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼인, 금속 착체.

청구항 32

제24항에 있어서, R^5는 H인, 금속 착체.

청구항 33

제24항에 있어서, R^5는 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족인, 금속 착체.

청구항 34

제24항에 있어서, 하나 이상의 R^1 또는 R^2 그룹은 R^5 및 개재 원자들과 함께 임의로 치환된 환을 형성하는, 금속 착체.

청구항 35

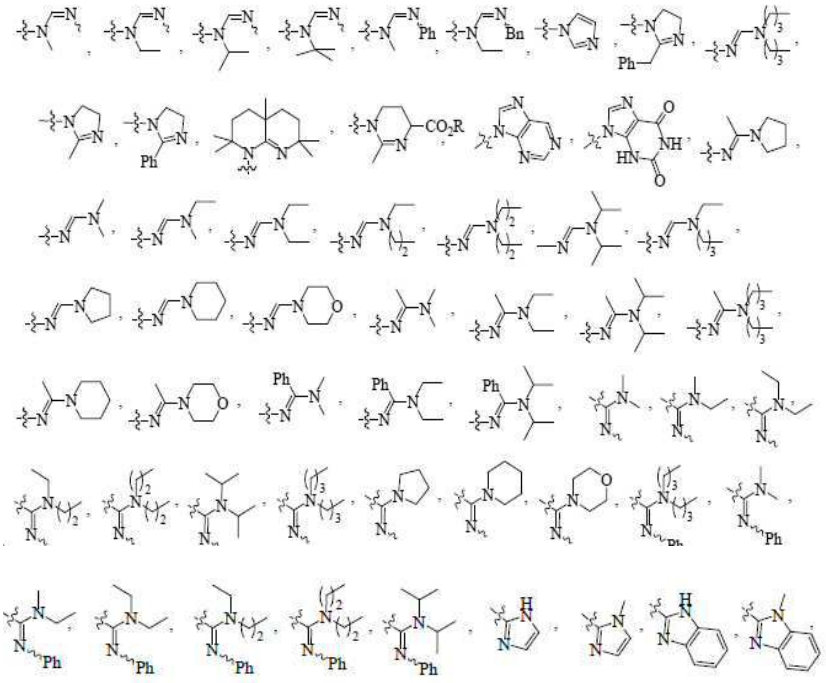
제24항에 있어서, R^1 및 R^5는 함께 임의로 치환된 5원 또는 6원 환을 형성하는, 금속 착체.

청구항 36

제24항에 있어서, R^1, R^2 및 R^5은 함께 임의로 치환된 융합 환 시스템을 형성하는, 금속 착체.

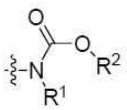
청구항 37

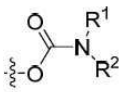
제24항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은



및  로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

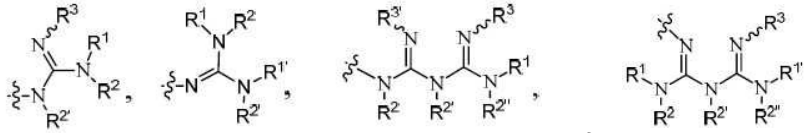
청구항 38



제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은  및 로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

청구항 39

제23항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은



또는 로 이루어진 그룹으로부터 선택되고;

여기서,

R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 독립적으로 수소이거나, 또는 C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클; 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 또는 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; 임의의 2개 이상의 R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$ 그룹은 개재 원자들과 함께 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있는, 금속 착체.

청구항 40

제39항에 있어서, R^1, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 H 또는 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족인, 금속 착체.

청구항 41

제39항에 있어서, R^1, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 메틸 또는 에틸인, 금속 착체.

청구항 42

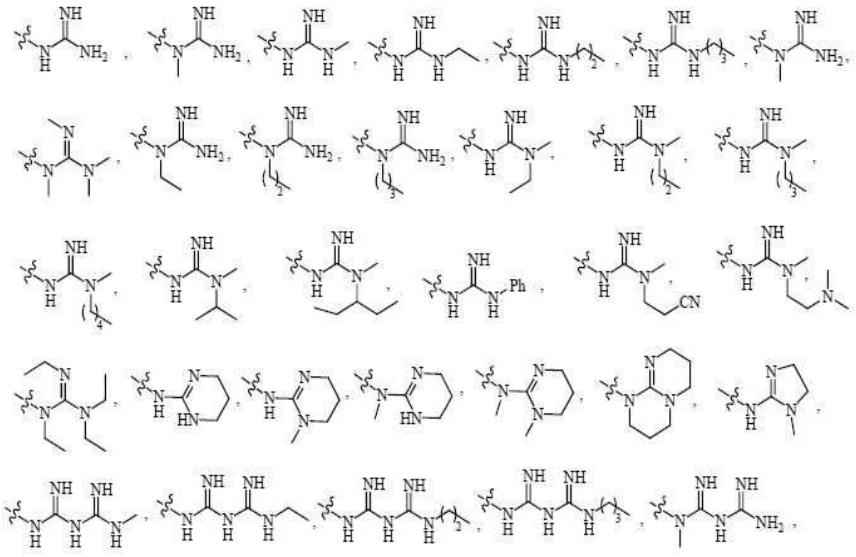
제39항에 있어서, R^2 및 $R^{2'}$는 개재 원자들과 함께 임의로 치환된 환을 형성하는, 금속 착체.

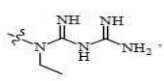
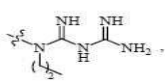
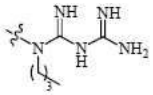
청구항 43

제39항에 있어서, R^1 및 R^3은 개재 원자들과 함께 임의로 치환된 환을 형성하는, 금속 착체.

청구항 44

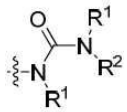
제39항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은



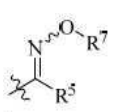
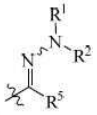
및 로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

청구항 45



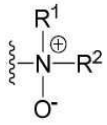
제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은 인, 금속 착체.

청구항 46

제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은 및 로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

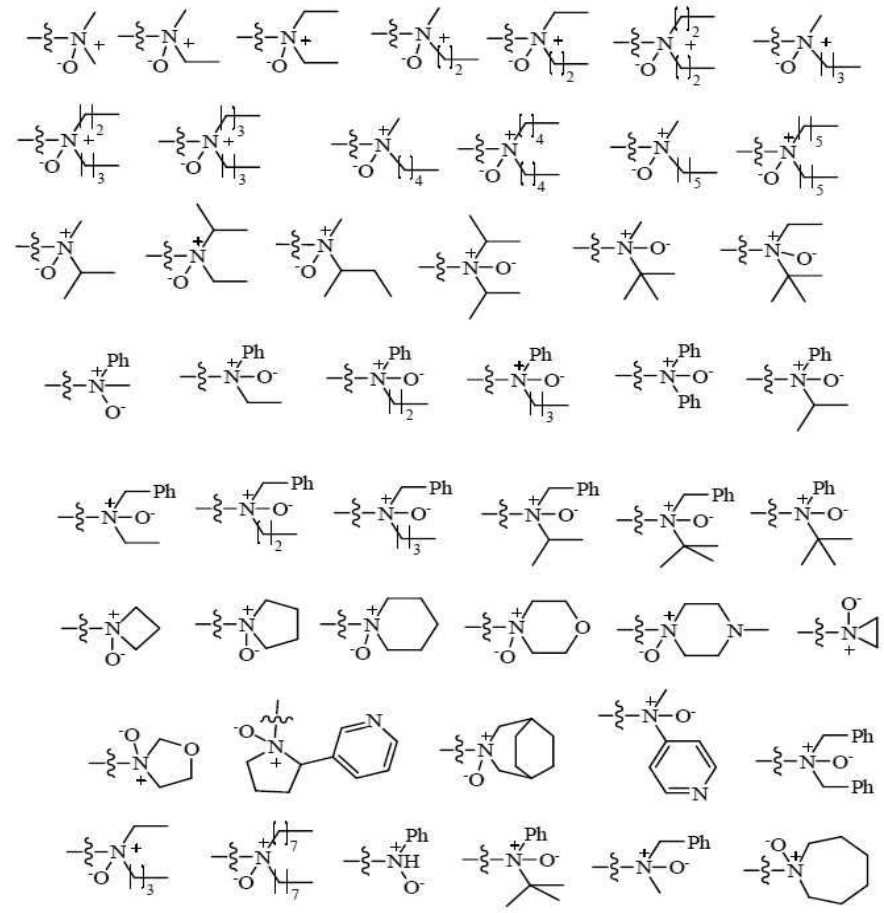
청구항 47



제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은 인, 금속 착체.

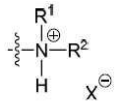
청구항 48

제47항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은



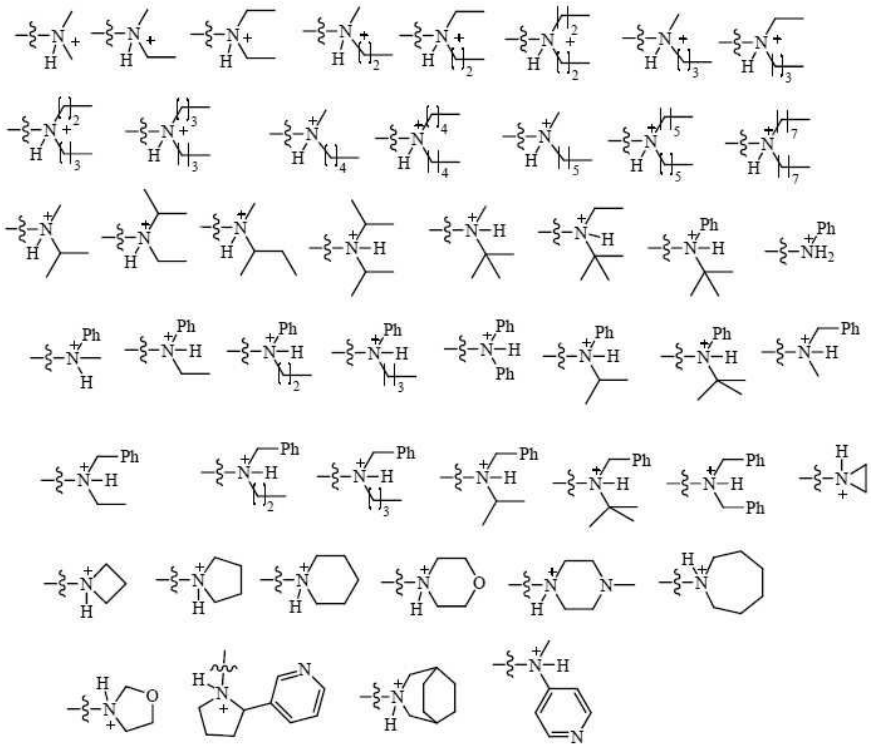
로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

청구항 49

제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은  인, 금속 착체.

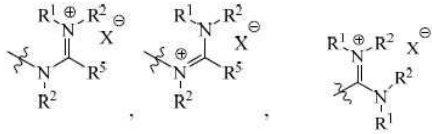
청구항 50

제49항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은



로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

청구항 51



제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은 및 로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

청구항 52

제51항에 있어서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소이거나, 또는 C_{1-20} 지방족, C_{1-20} 헤테로지방족, 5원 내지 6원 헤테로아릴, 페닐, 8원 내지 10원 아릴, 및 3원 내지 7원 헤테로사이클릭으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼인, 금속 착체.

청구항 53

제51항에 있어서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 C_{1-12} 지방족 및 C_{1-12} 헤테로지방족으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼인, 금속 착체.

청구항 54

제51항에 있어서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족인, 금속 착체.

청구항 55

제51항에 있어서, R^1 및 R^2는 둘 다 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질인, 금속 착체.

청구항 56

제51항에 있어서, R^1 및 R^2는 개재 원자들과 함께 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성하는, 금속 착체.

청구항 57

제51항에 있어서, R^1과 R^2는 함께 $-C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2OC(R^y)_2-$ 및 $-C(R^y)_2NR^yC(R^y)_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성하고; 여기서, R^y는 -H이거나, 또는 C_{1-6} 지방족, 3원 내지 7원 헤테로사이클릭, 페닐, 또는 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼인, 금속 착체.

청구항 58

제51항에 있어서, R^1과 R^2는 함께 $-CH_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH_2OCH_2-$ 및 $-CH_2NR^yCH_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성하고; 여기서, R^y는 -H이거나, 또는 C_{1-6} 지방족, 3원 내지 7원 헤테로사이클릭, 페닐, 또는 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼인, 금속 착체.

청구항 59

제51항에 있어서, R^5는 H인, 금속 착체.

청구항 60

제51항에 있어서, R^5는 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족인, 금속 착체.

청구항 61

제51항에 있어서, 하나 이상의 R^1 또는 R^2 그룹은 R^5 및 개재 원자들과 함께 임의로 치환된 환을 형성하는, 금속 착체.

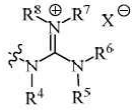
청구항 62

제51항에 있어서, R^1 및 R^5는 함께 임의로 치환된 5원 또는 6원 환을 형성하는, 금속 착체.

청구항 63

제51항에 있어서, R^1, R^2 및 R^5은 함께 임의로 치환된 융합 환 시스템을 형성하는, 금속 착체.

청구항 64

제23항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은  이고; 여기서,

R^4, R^5, R^6, R^7 및 R^8은 각각 독립적으로 수소 또는 C_{1-20} 지방족이고, (R^4와 R^5), (R^5와 R^6), (R^6과 R^7), (R^7과 R^8) 및 (R^4와 R^7) 중의 어느 것이라도 개재 원자들과 함께 환을 형성할 수 있는, 금속 착체.

청구항 65

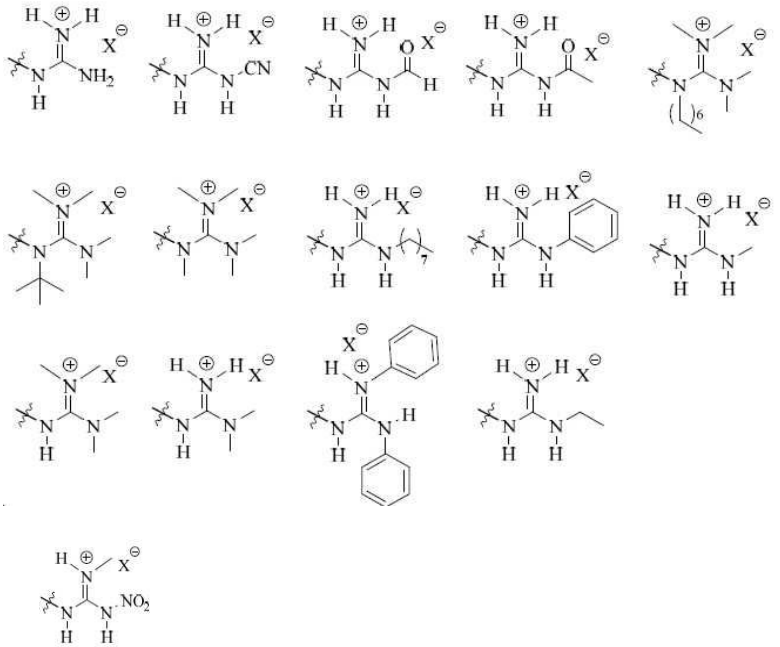
제64항에 있어서, 하나 이상의 R^4, R^5, R^6 및 R^7은 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족인, 금속 착체.

청구항 66

제64항에 있어서, (R^4와 R^5) 및 (R^6과 R^7)은 함께 환을 형성하는, 금속 착체.

청구항 67

제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은



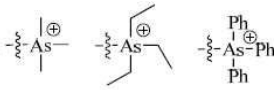
및 로 이루어진 그룹으로부터 선택되고; 여기서,

X는 음이온인, 금속 착체.

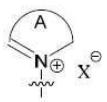
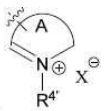
청구항 68

제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은  또는  로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

청구항 69

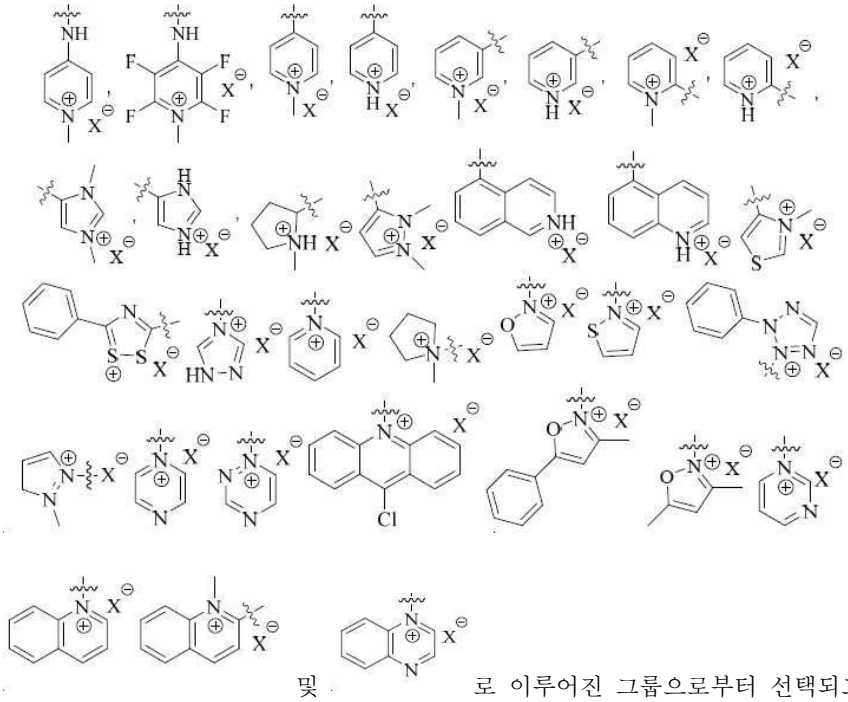
제68항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은  로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

청구항 70

제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은  및  로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 금속 착체.

청구항 71

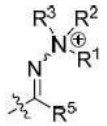
제70항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은



로 이루어진 그룹으로부터 선택되고; 여기서,

X는 음이온인, 금속 착체.

청구항 72

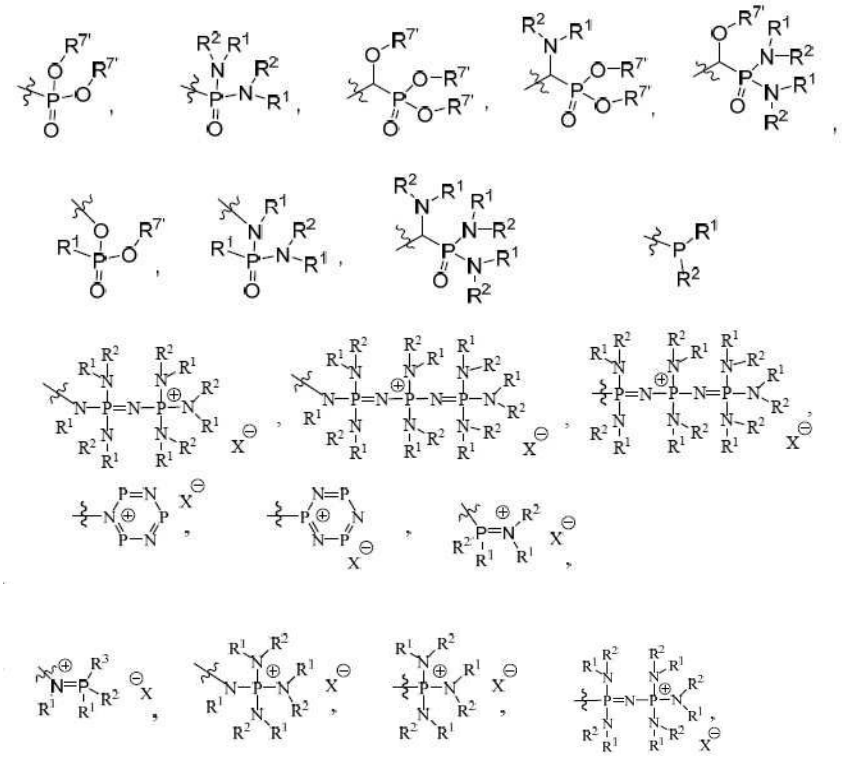
제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은  인, 금속 착체.

청구항 73

제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은  인, 금속 착체.

청구항 74

제1항 내지 제17항 중 어느 한 항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은 포스핀, 포스핀 옥사이드, 포스피나이트, 포스포나이트, 포스파이트,



및

로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택된 인-함유 관능성 그룹이고; 여기서,

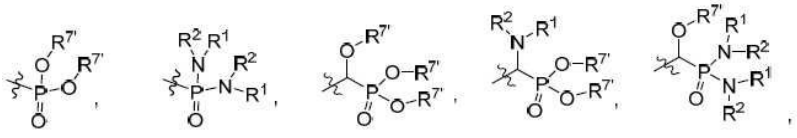
R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로 수소이거나, 또는 C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클; 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; 임의의 2개 이상의 R^1, R^2 및 R^3 그룹은 개재 원자들과 함께 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고;

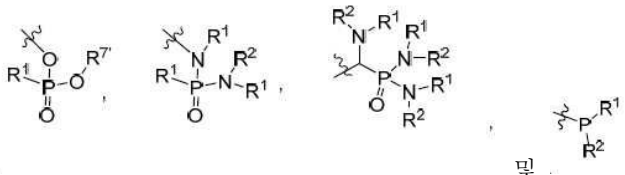
$R^{7'}$는 각각 독립적으로 수소 또는 하이드록실 보호 그룹이거나, 또는 C_{1-20} 아실; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클; 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; 2개의 $R^{7'}$ 그룹은 개재 원자들과 함께 하나 이상의 헤테로원자를 임의로 함유하는 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고;

X는 임의의 음이온인, 금속 착체.

청구항 75

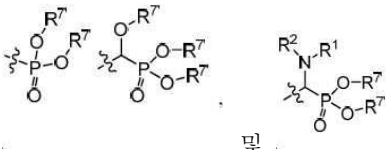
제74항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은





및 로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택되는, 금속 착체.

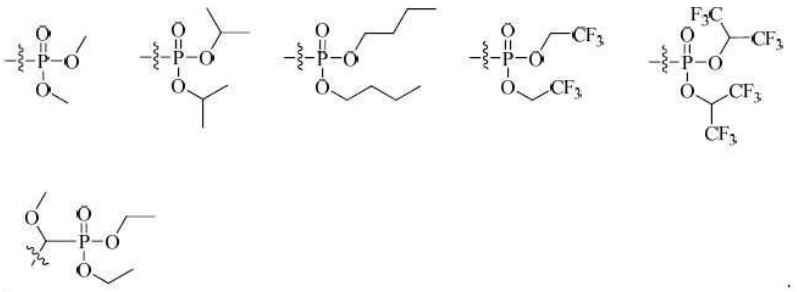
청구항 76



제74항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은 및 로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택되는, 금속 착체.

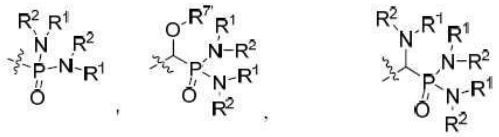
청구항 77

제76항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은



로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택되는, 금속 착체.

청구항 78



제74항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은 또는 로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택되는, 금속 착체.

청구항 79

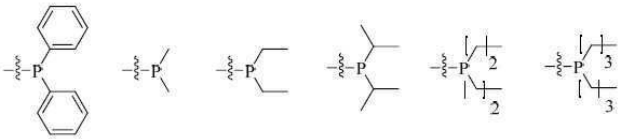
제78항에 있어서, R^1 및 R^2는 각각 메틸인, 금속 착체.

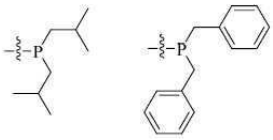
청구항 80

제74항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은  인, 금속 착체.

청구항 81

제80항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은

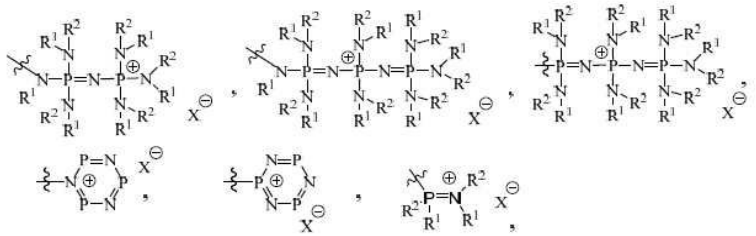


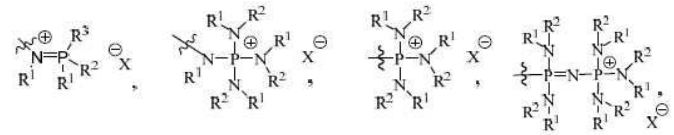


로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택되는, 금속 착체.

청구항 82

제74항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은



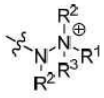


로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택되는, 금속 착체.

청구항 83

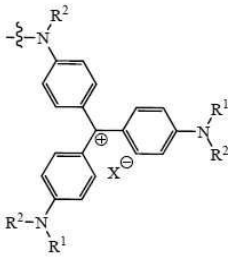
제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은  인, 금속 착체.

청구항 84



제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은 인, 금속 착체.

청구항 85



제18항에 있어서, 하나 이상의 Z 그룹은 인, 금속 착체.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] **우선권 주장**

[0002] 본원은 2008년 8월 22일에 출원된 미국 가특허원 제61/091,013호; 2008년 9월 11일에 출원된 미국 가특허원 제61/096,313호, 및 2008년 9월 19일에 출원된, 미국 가특허원 제61/098,739호에 대해 우선권을 주장한다. 이들 우선권 출원 각각의 전체 내용은 본원에서 참조로 인용된다.

배 경 기 술

[0003] 지방족 폴리카보네이트(APC)를 형성하기 위해 에폭사이드와 이산화탄소의 공중합을 수행할 수 있는 촉매는 1960년대 이래로 당해 기술분야에 공지되어 왔다. 초기의 촉매는 불균질 아연 화합물들을 기재로 하고, 낮은 반응성, 중합체 형성 대 사이클릭 카보네이트 형성에 대한 선택성 부족 및 에테르 연결(linkage)로 오염된 폴리카보네이트를 생성하는 경향이 있었다.

[0004] 지난 10년에 걸쳐 전이 금속을 기재로 한 개선된 촉매들이 밝혀져 왔다. 보다 신규한 이들 촉매들은 증가된 반응성 및 개선된 선택성을 갖는다. 그럼에 불구하고, 미국 특허공보 제7,304,172호에 기재된 것과 같은 매우 활성인 촉매를 사용하여도 고분자량 중합체를 제조하는 데 필요한 반응 시간은 통상적으로 매우 길다. 또한, 상기 '172호 특허에 기재된 최상의 성능 촉매들은 dl최적의 활성을 달성하기 위한 별도의 조촉매(co-catalyst)들의 첨가를 필요로 한다.

[0005] 이러한 단점을 해결하려는 시도가 있어 왔다. 문헌(참조: Nozaki and co-workers, Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7274-7277)에 기재된 촉매는 아민 조촉매를 촉매의 리간드에 테터링(tethering)한다. 이러한 차세대 촉매 시스템은 길고 복잡한 합성 방법 및 중합 개시 전의 바람직하지 않은 유도 시간을 갖는다. 고분자량 APC를 생성하는 데 필요한 중합 시간을 추가로 감소시키는 증가된 활성을 갖는 촉매에 대한 요구가 여전히 남아 있다.

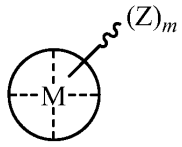
발명의 내용

[0006] **요약**

[0007] 본 발명은 특히, 이산화탄소와 에폭사이드의 공중합에 있어서의 활성을 갖는 일분자(unimolecular) 촉매 시스템 및 이의 사용 방법을 제공한다. 일부 양태에서, 본 발명은 금속 착체의 활성 금속 중심에 배위 결합된 다좌배위자 리간드(multidentate ligand)에 테터링된 조촉매 활성을 갖는 활성화 화학종을 갖는 금속 착체를 제공한다.

[0008] 특정 양태에서, 본 발명은 일분자 금속 착체 및 이산화탄소와 에폭사이드와의 공중합에서의 이의 사용 방법을 제공한다. 일부 양태에서, 제공된 금속 착체는 다음 화학식 1의 구조를 갖는다:

화학식 1

[0009] 

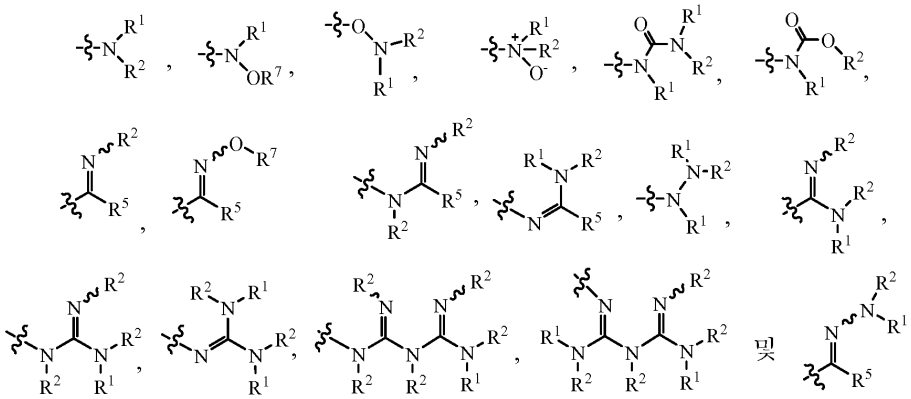
[0010] 위의 화학식 1에서,

[0011] M은 금속 원자이고,

[0012]  는 다좌배위자 리간드를 포함하고,

[0013] 는 다좌배위자 리간드에 결합된 하나 이상의 활성화 잔기(여기서, 는 리간드에 공유 커플링된 링커 잔기(linker moiety)이고, Z는 각각 활성화 관능성 그룹이고, m은 개별적인 링커 잔기에 존재하는 Z 그룹의 수를 나타낸다)이다.

[0014] 일부 양태에서, 테터링된 활성화 관능성 그룹(Z)은 중성 질소 함유 잔기이다. 특정 양태에서, 중성 질소 함유 잔기는

[0015]  또는 이들 중 2개 이상의 조합으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

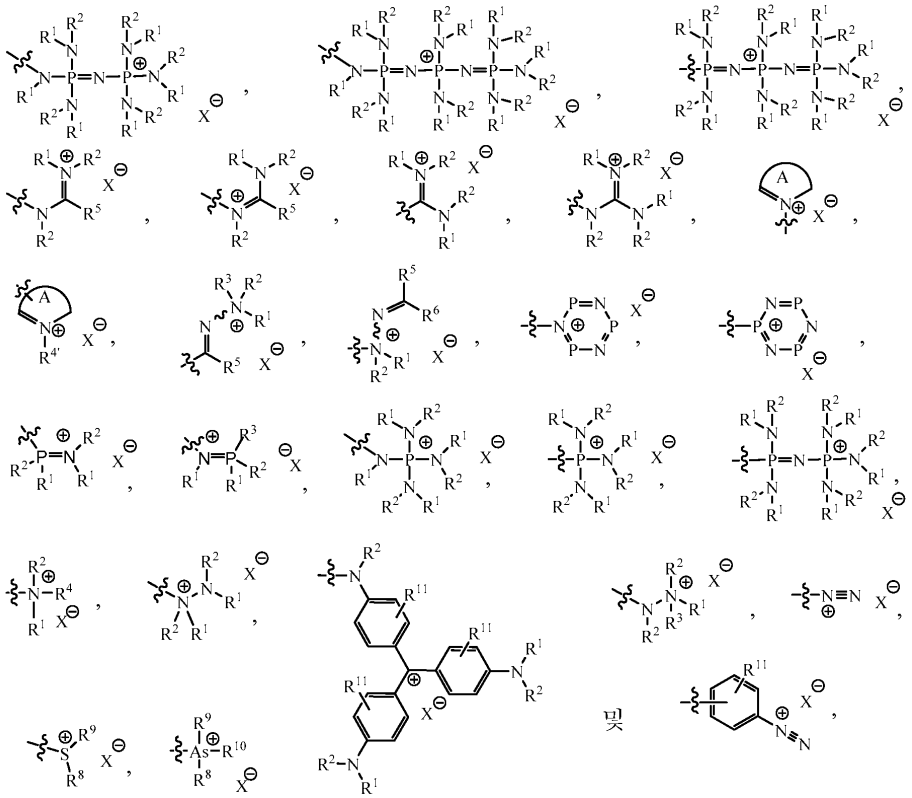
[0016] 여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소이거나, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; R^1과 R^2 그룹은 개재 원자들과 함께, 임의로 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성하고,

[0017] R^5는 각각 독립적으로 수소이거나, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로

치환된 라디칼이고; 상기 R^5 그룹은 R^1 또는 R^2 그룹과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고,

[0018] R^7은 각각 독립적으로, 수소, 또는 하이드록실 보호 그룹이거나, 또는 C_{1-20} 아실; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다.

[0019] 일부 양태에서, 테터링된 활성화 관능성 그룹(Z)은 양이온성 잔기이다. 특정 양태에서, 양이온성 잔기는



[0020] 또는 이들 중 2개 이상의 조합으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

[0021] 여기서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로 수소이거나, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부처 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; R^1, R^2 및 R^3 그룹 중의 임의의 2개 이상은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성하고,

[0022] R^4는 수소 또는 $-OR^7$이고,

[0023] $R^{4'}$는 수소, 하이드록실 또는 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이고,

[0024] R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 수소이거나, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; 상기 R^5와 R^6은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 헤테로원자를 임의로 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고, R^5 또는 R^6 그룹은 R^1 또는 R^2 그룹과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고,

[0025] R^7은 각각 독립적으로, 수소, 또는 하이드록실 보호 그룹이거나, 또는 C_{1-20} 아실; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고,

[0026] R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소이거나, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; 임의의 2개 이상의 R^8, R^9 및 R^{10} 그룹은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고,

[0027] R^{11}은 각각 독립적으로, 할로겐, $-NO_2$, -CN, $-SR^y$, $-S(O)R^y$, $-S(O)_2R^y$, $-NR^yC(O)R^y$, $-OC(O)R^y$, $-CO_2R^y$, -NCO, $-N_3$, $-OR^7$, $-OC(O)N(R^y)_2$, $-N(R^y)_2$, $-NR^yC(O)R^y$, $-NR^yC(O)OR^y$로 이루어진 그룹으로부터 선택되거나; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고, 여기서, 상기 R^y는 각각 독립적으로 -H이거나, C_{1-6} 지방족, 3원 내지 7원 헤테로사이클릭, 페닐 및 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; 2개 이상의 인접한 R^{11} 그룹은 함께, 임의로 치환된 0 내지 4개의 헤테로원자를 함유하는 임의로 치환된 포화, 부분 불포화 또는 방향족 5원 내지 12원 환을 형성할 수 있고,

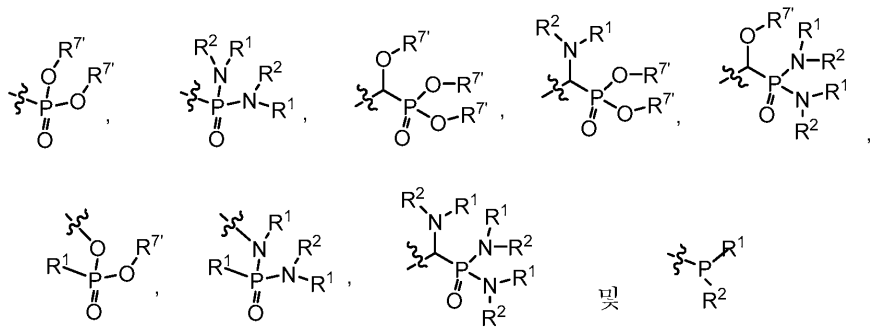
[0028] X^-는 임의의 음이온이고,

[0029] 환 A는 임의로 치환된, 5원 내지 10원 헤테로아릴 그룹이다.

[0030] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹(Z)은 인 함유 관능성 그룹이다.

[0031] 특정 양태에서, 인 함유 관능성 그룹은 포스핀($-PR^{y}_{2}$); 포스핀 옥사이드 $-P(O)R^{y}_{2}$; 포스피나이트 $P(OR^{7})R^{y}_{2}$; 포스포나이트 $P(OR^{7})_{2}R^{y}$; 포스파이트 $P(OR^{7})_{3}$; 포스피네이트 $OP(OR^{7})R^{y}_{2}$; 포스포네이트; $OP(OR^{7})_{2}R^{y}$; 포스페이트 $-OP(OR^{7})_{3}$; 포스포늄 염($[-PR^{y}_{3}]^{+}$)으로 이루어진 그룹[여기서, 상기 인 함유 관능성 그룹은 어떠한 유효한 위치를 통해서라도 금속 착체에 결합될 수 있다(예를 들면, 인원자를 통한, 또는 일부 경우 산소원자를 통한 직접 연결)]으로부터 선택된다.

[0032] 특정 양태에서, 인 함유 관능성 그룹은



[0033] 또는 이들 중 2개 이상의 조합으로 이루어진 그룹[여기서, R^{1} 및 R^{2}는 위에서 정의한 바와 같고,

[0034] $R^{7'}$는 각각 독립적으로, 수소, 또는 하이드록실 보호 그룹이거나, 또는 C_{1-20} 아실; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및는 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; 2개의 $R^{7'}$ 그룹은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 헤테로원자를 임의로 함유하는 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고, $R^{7'}$ 그룹은 R^{1} 또는 R^{2} 그룹과 함께, 임의로 치환된 환을 형성할 수 있다]으로부터 선택된다.

[0035] 일부 양태에서, 인 함유 관능성 그룹은 문헌[참조: The Chemistry of Organophosphorus Compounds, Volume 4, Ter _ and Quinquevalent Phosphorus Acids and their Derivatives. The Chemistry of Functional Group Series Edited by Frank R. Hartley (Cranfield University, Cranfield, U.K.). Wiley: New York. 1996. ISBN 0-471-95706-2]에 기재된 것을 포함하며, 당해 문헌 전체 내용은 본원에서 참조로 인용된다.

[0036] 특정 양태에서, 인 함유 관능성 그룹 화학식 $*-(X)_{b}-[(R^{6}R^{7}R^{8}P)^{+}]_{n}\ Q^{n-}$의 구조[여기서, X는 -O-, -N= 또는 $-NR^{z}-$이고,

[0037] b는 1 또는 0이고,

[0038] R^{6}, R^{7} 및 R^{8}은 각각 독립적으로 존재 또는 부재하며, 존재하는 경우, 임의로 치환된 C_{1}-C_{20} 지방족, 임의로 치환된 C_{6}-C_{14} 아릴, 임의로 치환된 3원 내지 14원 헤테로사이클릭, 임의로 치환된 5원 내지 14원 헤테로아릴, 할로겐, =O, OR^{z}, $=NR^{z}$ 및 $N(R^{z})_{2}$[여기서, R^{z}는 수소이거나, 임의로 치환된 C_{1}-C_{20} 지방족, 임의로 치환된 6원 내지 14원 아릴, 임의로 치환된 3원 내지 14원 헤테로사이클릭 또는 임의로 치환된 5원 내지 14원 헤테로아릴이다}로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택되고,

[0039] Q는 임의의 음이온이고,

[0040] n은 1 내지 4의 정수이다]를 갖는다.

[0041] 일부 양태에서, 본 발명은 에폭사이드와 이산화탄소의 공중합 방법들을 포함하며, 이러한 방법들은 1종 이상의 에폭사이드를 이산화탄소의 존재하에 위에서 기재한 촉매와 접촉시킴을 포함한다.

[0042] 일부 양태에서, 본 발명은 에폭사이드와 이산화탄소로부터의 사이클릭 카보네이트의 형성 방법들을 포함하며, 이러한 방법들은 1종 이상의 에폭사이드를 이산화탄소의 존재하에 위에서 기재한 촉매와 접촉시킴을 포함한다.

[0043] 일부 양태에서, 본 발명은 폴리에테르의 형성 방법들을 포함하여, 이러한 방법들은 1종 이상의 에폭사이드를 위에서 기재한 촉매와 접촉시킴을 포함한다.

[0044] **정의**

[0045] 특정 그룹 및 화학 용어의 정의를 아래에 보다 상세히 설명한다. 본 발명을 위하여, 화학 원소는 문헌[CAS version, Handbook of Chemistry and Physics, 75th Ed.]의 속표지의 원소 주기율표에 따라 확인하고, 특정 관능성 그룹은 일반적으로 여기에 기재된 바와 같이 정의한다. 추가로, 유기 화학의 일반 원리 뿐만 아니라 특정한 관능성 잔기 및 반응성은 문헌[참조: *Organic Chemistry*, Thomas Sorrell, University Science Books, Sausalito, 1999; Smith and March *March's Advanced Organic Chemistry*, 5th Edition, John Wiley & Sons, Inc., New York, 2001; Larock, *Comprehensive Organic Transformations*, VCH Publishers, Inc., New York, 1989; Carruthers, *Some Modern Methods of Organic Synthesis*, 3rd Edition, Cambridge University Press, Cambridge, 1987]에 기재되어 있으며, 상기 문헌 각각의 전체 내용은 본원에서 참조로 인용된다.

[0046] 본 발명의 특정 화합물은 하나 이상의 비대칭 중심을 포함할 수 있으며, 따라서 다양한 입체이성체 형태로, 예를 들면, 거울상이성체 및/또는 부분입체이성체로 존재할 수 있다. 따라서, 본 발명의 화합물 및 이의 조성물은 개별적인 거울상이성체, 부분입체이성체 또는 기하 이성체의 형태로 존재할 수 있거나, 입체이성체의 혼합물 형태일 수 있다. 특정 양태에서, 본 발명의 화합물은 거울상순수(enantiopure) 화합물이다. 특정 양태에서, 거울상이성체 또는 부분입체이성체의 혼합물이 제공된다.

[0047] 추가로, 본원에 기재된 특정 화합물은, 달리 지시되지 않는 한, Z 또는 E 이성체로서 존재할 수 있는 하나 이상의 이중 결합을 가질 수 있다. 본 발명은 기타 이성체가 실질적으로 부재한 개별적인 이성체로서, 또는 다양한 이성체의 혼합물, 예를 들면, 거울상이성체의 라세미 혼합물로서의 화합물을 추가로 포함한다. 위에서 언급한 화합물 자체 이외에, 본 발명은 또한 하나 이상의 화합물을 포함하는 조성물을 포함한다.

[0048] 본원에 사용된 용어 "이성체"는 임의의 및 모든 기하 이성체 및 입체이성체를 포함한다. 예를 들면, "이성체"는 본 발명의 영역 내에 속하는, 시스 및 트랜스 이성체, E 및 Z 이성체, R 및 S 거울상이성체, 부분입체이성체, (D) 이성체, (L) 이성체, 이들의 라세미 혼합물 및 이들의 기타 혼합물을 포함한다. 예를 들면, 화합물은, 일부 양태에서, 하나 이상의 상응하는 입체이성체가 실질적으로 부재하게 제공될 수 있으며, 또한 "입체화학적으로 풍부한" 것으로 언급될 수도 있다.

[0049] 특정 거울상이성체가 바람직한 경우, 이는 일부 양태에서는 반대 거울상이성체가 실질적으로 부재하게 제공될 수 있으며, 또한 "광학적으로 풍부한" 것으로 언급될 수도 있다. 본원에서 사용된, "광학적으로 풍부한"이란, 화합물이 현저하게 큰 비율의 하나의 거울상이성체로 구성됨을 의미한다. 특정 양태에서, 화합물은 거울상이성체 약 90중량% 이상으로 구성된다. 일부 양태에서, 화합물은 거울상이성체 약 95중량%, 97중량%, 98중량%, 99중량%, 99.5중량%, 99.7중량%, 99.8중량% 또는 99.9중량% 이상으로 구성된다. 일부 양태에서, 거울상이성체 과량의 제공된 화합물은 약 90중량%, 95중량%, 97중량%, 98중량%, 99중량%, 99.5중량%, 99.7중량%, 99.8중량% 또는 99.9중량% 이상이다. 일부 양태에서, 거울상이성체는 키랄 고압 액체 크로마토그래피(HPLC) 및 키랄 염의 형성 및 결정화를 포함하는, 당업자에게 공지된 어떠한 방법에 의해서라도 라세미 혼합물로부터 분리할 수 있거나, 비대칭 합성에 의하여 제조할 수 있다. 예를 들면, 문헌[참조: Jacques, et al., *Enantiomers, Racemates and Resolutions* (Wiley Interscience, New York, 1981); Wilen, S.H., et al., *Tetrahedron* 33:2725 (1977); Eliel, E.L. *Stereochemistry of Carbon Compounds* (McGraw-Hill, NY, 1962); Wilen, S.H. *Tables of Resolving Agents and Optical Resolutions* p. 268 (E.L. Eliel, Ed., Univ. of Notre Dame Press, Notre Dame, IN 1972)]을 참조한다.

[0050] 본원에서 사용된 용어 "할로" 및 "할로겐"은 불소(플루오로, -F), 염소(클로로, -Cl), 브롬(브로모, -Br) 및 요오드(요오도, -I)로부터 선택된 원자를 말한다.

[0051] 본원에서 사용된 용어 "지방족" 또는 "지방족 그룹"은 직쇄(즉, 비분지형), 분지형 또는 환형(융합, 브릿징 및

스피로-융합 폴리사이클릭 포함)일 수 있는 탄화수소 잔기를 나타내며, 완전히 포화이거나 방향족이 아닌 하나 이상의 불포화 단위를 함유할 수 있다. 달리 명시되지 않는 한, 지방족 그룹의 탄소수는 1 내지 30이다. 특정 양태에서, 지방족 그룹의 탄소수는 1 내지 12이다. 특정 양태에서, 지방족 그룹의 탄소수는 1 내지 8이다. 특정 양태에서, 지방족 그룹의 탄소수는 1 내지 6이다. 일부 양태에서, 지방족 그룹의 탄소수는 1 내지 5이고, 일부 양태에서, 지방족 그룹의 탄소수는 1 내지 4이고, 기타 양태에서 지방족 그룹의 탄소수는 1 내지 3이고, 기타 양태에서 지방족 그룹의 탄소수는 1 내지 2이다. 적합한 지방족 그룹은, 이들로 제한되지는 않지만, 선형 또는 분지형 알킬, 알케닐 및 알키닐 그룹 및 이들의 하이브리드, 예를 들면, (사이클로알킬)알킬, (사이클로알케닐)알킬 또는 (사이클로알킬)알케닐을 포함한다. 특정 양태에서, 용어 지방족 그룹은 하나 이상의 수소원자가 할로겐 원자로 대체되는 지방족 그룹을 포함한다. 특정 양태에서, 용어 지방족 그룹은 과불소화 화합물을 포함하는 염소화 또는 불소화 지방족 그룹들을 포함한다.

[0052] 본원에서 사용된 용어 "에폭사이드"는 치환되거나 치환되지 않은 옥시란을 말한다. 이러한 치환된 옥시란은 일치환된 옥시란, 이치환된 옥시란, 삼치환된 옥시란 및 사치환된 옥시란을 포함한다. 이러한 에폭사이드는 본원에서 정의된 바와 같이 추가로 임의로 치환될 수 있다. 특정 양태에서, 에폭사이드는 단일 옥시란 잔기를 포함한다. 특정 양태에서, 에폭사이드는 2개 이상의 옥시란 잔기를 포함한다.

[0053] 본원에서 사용된 용어 "중합체"는 이의 구조가 상대적 저분자량의 분자로부터 실제로 또는 개념적으로 유도된 단위의 다수의 반복을 포함하는, 상대적 고분자량의 분자를 말한다. 특정 양태에서, 중합체는 단량체 1종만으로(예: 폴리에틸렌 옥사이드) 구성된다. 특정 양태에서, 본 발명의 중합체는 1종 이상의 에폭사이드의 공중합체, 삼원공중합체, 헤테로중합체, 블록 공중합체 또는 테이퍼링된(tapered) 헤테로중합체이다.

[0054] 본원에서 사용된 용어 "불포화"는 잔기가 하나 이상의 이중 또는 삼중 결합을 가짐을 의미한다.

[0055] 단독으로 또는 보다 큰 잔기의 일부로서 사용된, 용어 "지환족", "카보사이클" 또는 "카보사이클릭"은 본원에 기재된 바와 같이, 3원 내지 12원의, 포화 또는 부분 불포화 사이클릭 지방족 모노사이클릭, 바이사이클릭 또는 폴리사이클릭 환 시스템(여기서, 상기 지방족 환 시스템은 위에서 정의되고 본원에 기재된 바와 같이 임의로 치환된다)을 말한다. 지환족 그룹은, 제한 없이, 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 사이클로펜테닐, 사이클로헥실, 사이클로헥세닐, 사이클로헵틸, 사이클로헵테닐, 사이클로옥틸, 사이클로옥테닐 및 사이클로옥타디에닐을 포함한다. 일부 양태에서, 사이클로알킬은 탄소수가 3 내지 6이다. 용어 "지환족", "카보사이클" 또는 "카보사이클릭"은 또한 하나 이상의 방향족 또는 비방향족 환에 융합된 지방족 환, 예를 들면, 데카하이드로나프틸 또는 테트라하이드로나프틸(여기서, 라디칼 또는 결합점은 지방족 환에 있다)을 포함한다. 일부 양태에서, 카보사이클릭 그룹은 바이사이클릭이다. 일부 양태에서, 카보사이클릭 그룹은 트리사이클릭이다. 일부 양태에서, 카보사이클릭 그룹은 폴리사이클릭이다.

[0056] 본원에서 사용된 용어 "알킬"은 지방족 잔기로부터 단일 수소원자를 제거하여 유도된 포화 직쇄 또는 측쇄 탄화수소 라디칼을 말한다. 달리 명시되지 않는 한, 알킬 그룹은 탄소수가 1 내지 12이다. 특정 양태에서, 알킬 그룹은 탄소수가 1 내지 8이다. 특정 양태에서, 알킬 그룹은 탄소수가 1 내지 6이다. 일부 양태에서, 알킬 그룹은 탄소수가 1 내지 5이고, 일부 양태에서, 알킬 그룹은 탄소수가 1 내지 4이며, 기타 양태에서 알킬 그룹은 탄소수가 1 내지 3이고, 기타 양태에서, 알킬 그룹은 탄소수가 1 내지 2이다. 알킬 라디칼의 예는, 이들로 제한되지는 않지만, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소-부틸, 2급-부틸, 2급-펜틸, 이소-펜틸, 3급-부틸, n-펜틸, 네오펜틸, n-헥실, 2급 헥실, n-헵틸, n-옥틸, n-데실, n-운데실, 도데실 등을 포함한다.

[0057] 본원에서 사용된 용어 "알케닐"은 하나 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 측쇄 지방족 잔기로부터 단일 수소원자를 제거하여 유도된 1가 그룹이다. 달리 명시되지 않는 한, 알케닐 그룹은 탄소수가 2 내지 12이다. 특정 양태에서, 알케닐 그룹은 탄소수가 2 내지 8이다. 특정 양태에서, 알케닐 그룹은 탄소수가 2 내지 6이다. 일부 양태에서, 알케닐 그룹은 탄소수가 2 내지 5이고, 일부 양태에서, 알케닐 그룹은 탄소수가 2 내지 4이고, 기타 양태에서, 알케닐 그룹은 탄소수가 2 내지 3이고, 기타 양태에서 알케닐 그룹은 탄소수가 2이다. 알케닐 그룹은 예를 들면, 에테닐, 프로페닐, 알릴, 1,3-부타디에닐, 부테닐, 1-메틸-2-부텐-1-일, 알릴, 1,3-부타디에닐, 알레닐 등을 포함한다.

[0058] 본원에 사용된, 용어 "알키닐"은 하나 이상의 탄소-탄소 삼중 결합을 갖는 직쇄 또는 측쇄 지방족 잔기로부터의 단일 수소원자의 제거에 의하여 유도된 1가 그룹을 말한다. 달리 명시되지 않는 한, 알키닐 그룹은 탄소수가 2 내지 12이다. 특정 양태에서, 알키닐 그룹은 탄소수가 2 내지 8이다. 특정 양태에서, 알키닐 그룹은 탄소수가 2 내지 6이다. 일부 양태에서, 알키닐 그룹은 탄소수가 2 내지 5이고, 일부 양태에서, 알키닐 그룹은 탄소수가 2 내지 4이고, 기타 양태에서, 알키닐 그룹은 탄소수가 2 내지 3이고, 기타 양태에서, 알키닐 그룹은 탄소수가

2이다. 대표적인 알키닐 그룹은 이들로 제한되지는 않지만, 에티닐, 2-프로피닐(프로파르길), 1-프로피닐 등을 포함한다.

[0059] 본원에서 사용된 용어 "카보사이클" 및 "카보사이클릭 환"은 환이 탄소원자만을 함유하는, 모노사이클릭 및 폴리사이클릭 잔기를 말한다. 달리 명시되지 않는 한, 카보사이클은 포화, 부분 불포화 또는 방향족일 수 있고, 탄소수가 3 내지 20이다. 대표적인 카보사이클은 몇 가지만 언급하자면, 사이클로프로판, 사이클로부탄, 사이클로펜탄, 사이클로헥산, 바이사이클로[2,2,1]헵탄, 노르보르넨, 페닐, 사이클로헥센, 나프탈렌 및 스피로[4.5]데칸을 포함한다.

[0060] 단독으로 또는 "아르알킬", "아르알콕시" 또는 "아릴옥시알킬"에서와 같이 보다 큰 잔기의 일부로서 사용된 용어 "아릴"은 총 6 내지 20개의 환 구성원을 갖는 모노사이클릭 및 폴리사이클릭 환 시스템(여기서, 상기 시스템 중의 하나 이상의 환은 방향족이고, 상기 시스템 중의 각각의 환은 3 내지 12개의 환 구성원을 함유한다)을 말한다. 용어 "아릴"은 용어 "아릴 환"과 상호 교환적으로 사용될 수 있다. 본 발명의 특정 양태에서, "아릴"은 이들로 제한되지는 않지만, 하나 이상의 치환기를 가질 수 있는, 페닐, 비페닐, 나프틸, 안트라실 등을 포함하는 방향족 환 시스템을 말한다. 방향족 환이 하나 이상의 추가의 환에 축합된 그룹, 예를 들면, 벤조푸라닐, 인다닐, 프탈리미딜, 나프티미딜, 페난트리이디닐 또는 테트라하이드로나프틸 등이 또한, 본원에서 사용된 용어 "아릴"의 영역 내에 포함된다.

[0061] 본원에서 사용된 용어 "헤테로지방족"은 하나 이상의 탄소원자가 산소, 황, 질소, 인 및 붕소로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 원자에 의하여 독립적으로 대체되는 지방족 그룹을 말한다. 특정 양태에서, 1 내지 6개의 탄소원자는 산소, 황, 질소 또는 인 중 하나 이상에 의하여 독립적으로 대체된다. 헤테로지방족 그룹은 치환되거나 치환되지 않고, 분지되거나 분지되지 않고, 환형 또는 비환형이고, 포화, 불포화 또는 부분 불포화 그룹일 수 있다.

[0062] 단독으로 또는 보다 큰 잔기, 예를 들면, "헤테로아르알킬" 또는 "헤테로아르알콕시"의 일부로서 사용되는, 용어 "헤테로아릴" 및 "헤테로아르-"는 5 내지 14개, 바람직하게는 5, 6 또는 9개의 환 원자를 갖고, 사이클릭 배열(array)에 공유된 6, 10 또는 14π 전자를 갖고, 탄소원자 외에 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 그룹을 말한다. 용어 "헤테로원자"는 질소, 산소 또는 황을 말하고, 질소 또는 황의 임의의 산화 형태 및 염기성 질소의 임의의 4급화 형태를 포함한다. 헤테로아릴 그룹은 제한 없이, 티에닐, 푸라닐, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 옥사졸릴, 이속사졸릴, 옥사디아졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 티아디아졸릴, 피리딜, 피리다지닐, 피리미디닐, 피라지닐, 인돌리지닐, 푸리닐, 나프티리디닐, 벤조푸라닐 및 프테리디닐을 포함한다. 본원에서 사용된 용어 "헤테로아릴" 및 "헤테로아르-"는 또한 헤테로방향족 환이 하나 이상의 아릴, 지환족 또는 헤테로사이클릴 환에 융합된 그룹(여기서, 상기 라디칼 또는 결합점은 헤테로방향족 환에 있다)을 포함한다. 비제한적인 예는 인돌릴, 이소인돌릴, 벤조티에닐, 벤조푸라닐, 디벤조푸라닐, 인다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤즈티아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 프탈라지닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 4H-퀴놀리지닐, 카바졸릴, 아크리디닐, 페나지닐, 페노티아지닐, 페녹사지닐, 테트라하이드로퀴놀리닐, 테트라하이드로이소퀴놀리닐 및 피리도[2,3-b]-1,4-옥사진-3(4H)-온을 포함한다. 헤테로아릴 그룹은 모노- 또는 폴리사이클릭일 수 있다. 용어 "헤테로아릴"은 용어 "헤테로아릴 환", "헤테로아릴 그룹" 또는 "헤테로방향족"과 상호 교환적으로 사용될 수 있으며, 상기 용어들 중 어느 것이라도 임의로 치환된 환을 포함한다. 용어 "헤테로아르알킬"은 헤테로아릴에 의하여 치환된 알킬 그룹(여기서, 상기 알킬 및 헤테로아릴 부분은 독립적으로 임의로 치환된다)을 말한다.

[0063] 본원에서 사용된 용어 "헤테로사이클", "헤테로사이클릴", "헤테로사이클릭 라디칼" 및 "헤테로사이클릭 환"은 상호 교환적으로 사용되며, 포화, 부분 불포화 또는 방향족이고, 위에서 정의한 바와 같이, 탄소원자 외에, 하나 이상, 바람직하게는 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는, 안정한 5원 내지 7원 모노사이클릭 또는 7원 내지 14원 바이사이클릭 헤테로사이클릭 잔기를 말한다. 용어 "질소"는 헤테로사이클의 환 원자에 대하여 사용되는 경우, 치환된 질소를 포함한다. 예로서, 산소, 황 또는 질소로부터 선택된 0 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 포화 또는 부분 불포화 환에서, 질소는 N(3,4-디하이드로-2H-피롤릴에서와 같이), NH(피롤리디닐에서와 같이) 또는 $^{+}$NR(N-치환된 피롤리디닐에서와 같이)일 수 있다.

[0064] 헤테로사이클릭 환은 안정한 구조를 발생시키는 어떠한 헤테로원자 또는 탄소원자에서라도 이의 펜던트 그룹에 결합될 수 있고, 환 원자들 중 어느 것이라도 임의로 치환될 수 있다. 이러한 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 라디칼의 예는, 제한 없이, 테트라하이드로푸라닐, 테트라하이드로티에닐, 피롤리디닐, 피롤리도닐, 피페리디닐, 피롤리닐, 테트라하이드로퀴놀리닐, 테트라하이드로이소퀴놀리닐, 데카하이드로퀴놀리닐, 옥사졸리디

닐, 피페라지닐, 디옥사닐, 디옥솔라닐, 디아제피닐, 옥사제피닐, 티아제피닐, 모르폴리닐 및 퀴누클리디닐을 포함한다. 용어 "헤테로사이클", "헤테로사이클릴", "헤테로사이클릴 환", "헤테로사이클릭 그룹", "헤테로사이클릭 잔기" 및 "헤테로사이클릭 라디칼"은 본원에서 상호 교환적으로 사용되고, 또한 헤테로사이클릴 환이 하나 이상의 아릴, 헤테로아릴 또는 지환족 환에 융합되는 그룹, 예를 들면, 인돌리닐, 3H-인돌릴, 크로마닐, 페난트리디닐 또는 테트라하이드로퀴놀리닐(여기서, 상기 라디칼 또는 결합점은 헤테로사이클릴 환에 있다)을 포함한다. 헤테로사이클릴 그룹은 모노- 또는 바이사이클릭일 수 있다. 용어 "헤테로사이클릴알킬"은 헤테로사이클릴에 의하여 치환된 알킬 그룹(여기서, 상기 알킬 및 헤테로사이클릴 부분은 독립적으로 임의로 치환된다)을 말한다.

[0065] 본원에서 사용된 용어 "아실"은 화학식 -C(O)R의 그룹(여기서, R은 수소 또는 임의로 치환된 지방족, 아릴 또는 헤테로사이클릭 그룹이다)을 말한다.

[0066] 본원에서 사용된 용어 "부분 불포화"는 하나 이상의 이중 또는 삼중 결합을 포함하는 환 잔기를 말한다. 용어 "부분 불포화"는 불포화의 다수의 부위들을 갖는 환을 포함하는 것을 의도하지만, 본원에서 정의한 바와 같은, 아릴 또는 헤테로아릴 잔기를 포함하는 것을 의도하지는 않는다.

[0067] 당업자는 본원에 기재된 바와 같은 합성 방법들이 다양한 보호 그룹들을 이용하는 것을 인식한다. 본원에서 사용된 용어 "보호 그룹"은, 특정 관능성 잔기, 예를 들면, O, S 또는 N이 차폐 또는 차단되어, 필요한 경우, 반응이 다관능성 화합물의 또 다른 반응성 부위에서 선택적으로 수행되도록 허용함을 의미한다. 바람직한 양태에서, 보호 그룹은 우수한 수율로 선택적으로 반응하여 보호 반응에 안정한 보호 기재를 제공하고; 상기 보호 그룹은 바람직하게는 용이하게 사용 가능한, 바람직하게는 다른 관능성 그룹들을 공격하지 않는 비독성 시약에 의하여 선택적으로 제거 가능하고; 상기 보호 그룹은 분리가능한 유도체를 형성하고(보다 바람직하게는 신규한 입체생성 중심의 발생 없이); 상기 보호 그룹은 바람직하게는 추가의 반응 부위를 피하는 최소의 추가의 관능성을 가질 것이다. 본원에서 상술한 바와 같이, 산소, 황, 질소 및 탄소 보호 그룹들이 이용될 수 있다. 비제한적인 예로는, 하이드록실 보호 그룹은 메틸, 메톡실메틸(MOM), 메틸티오메틸(MTM), t-부틸티오메틸, (페닐디메틸실릴)메톡시메틸(SMOM), 벤질옥시메틸(BOM), p-메톡시벤질옥시메틸(PMBM), (4-메톡시페녹시)메틸(p-AOM), 구아이아콜메틸(GUM), t-부톡시메틸, 4-펜테닐옥시메틸(POM), 실록시메틸, 2-메톡시에톡시메틸(MEM), 2,2,2-트리클로로에톡시메틸, 비스(2-클로로에톡시)메틸, 2-(트리메틸실릴)에톡시메틸(SEMOR), 테트라하이드로피라닐(THP), 3-브로모테트라하이드로피라닐, 테트라하이드로티오피라닐, 1-메톡시사이클로헥실, 4-메톡시테트라하이드로피라닐(MTHP), 4-메톡시테트라하이드로티오피라닐, 4-메톡시테트라하이드로티오피라닐 S,S-디옥사이드, 1-[(2-클로로-4-메틸)페닐]-4-메톡시피페리딘-4-일(CTMP), 1,4-디옥산-2-일, 테트라하이드로푸라닐, 테트라하이드로티오푸라닐, 2,3,3a,4,5,6,7,7a-옥타하이드로-7,8,8-트리메틸-4,7-메타노벤조푸란-2-일, 1-에톡시에틸, 1-(2-클로로에톡시)에틸, 1-메틸-1-메톡시에틸, 1-메틸-1-벤질옥시에틸, 1-메틸-1-벤질옥시-2-플루오로에틸, 2,2,2-트리클로로에틸, 2-트리메틸실릴에틸, 2-(페닐셀레닐)에틸, t-부틸, 알릴, p-클로로페닐, p-메톡시페닐, 2,4-디니트로페닐, 벤질, p-메톡시벤질, 3,4-디메톡시벤질, o-니트로벤질, p-니트로벤질, p-할로벤질, 2,6-디클로로벤질, p-시아노벤질, p-페닐벤질, 2-피콜릴, 4-피콜릴, 3-메틸-2-피콜릴 N-옥시도, 디페닐메틸, p,p'-디니트로벤즈하이드릴, 5-디벤조수베릴, 트리페닐메틸, α-나프틸디페닐메틸, p-메톡시페닐디페닐메틸, 디(p-메톡시페닐)페닐메틸, 트리(p-메톡시페닐)메틸, 4-(4'-브로모펜아실옥시페닐)디페닐메틸, 4,4',4"-트리스(4,5-디클로로프탈이미도페닐)메틸, 4,4',4"-트리스(레불리노일옥시페닐)메틸, 4,4',4"-트리스(벤조일옥시페닐)메틸, 3-(이미다졸-1-일)비스(4',4"-디메톡시페닐)메틸, 1,1-비스(4-메톡시페닐)-1'-피레닐메틸, 9-안트릴, 9-(9-페닐)크산테닐, 9-(9-페닐-10-옥소)안트릴, 1,3-벤조디티올란-2-일, 벤즈이소티아졸릴-S,S-디옥시도, 트리메틸실릴(TMS), 트리에틸실릴(TES), 트리이소프로필실릴(TIPS), 디메틸이소프로필실릴(IPDMS), 디에틸이소프로필실릴(DEIPS), 디메틸 t-헥실실릴, t-부틸디메틸실릴(TBDMS), t-부틸디페닐실릴(TBDPS), 트리벤질실릴, 트리-p-크실릴실릴, 트리페닐실릴, 디페닐메틸실릴(DPMS), t-부틸메톡시페닐실릴(TBMPS), 포르메이트, 벤조일포르메이트, 아세테이트, 클로로아세테이트, 디클로로아세테이트, 트리클로로아세테이트, 트리플루오로아세테이트, 메톡시아세테이트, 트리페닐메톡시아세테이트, 페녹시아세테이트, p-클로로페녹시아세테이트, 3-페닐프로피오네이트, 4-옥소페타노에이트(레불리네이트), 4,4-(에틸렌디티오)펜타노에이트(레불리노일디티오아세탈), 피발로에이트, 아다만토에이트, 크로토네이트, 4-메톡시크로토네이트, 벤조에이트, p-페닐벤조에이트, 2,4,6-트리메틸벤조에이트(메시토에이트), 알킬 메틸 카보네이트, 9-플루오레닐메틸 카보네이트(Fmoc), 알킬 에틸 카보네이트, 알킬 2,2,2-트리클로로에틸 카보네이트(Troc), 2-(트리메틸실릴)에틸 카보네이트(TMSEC), 2-(페닐설포닐) 에틸 카보네이트(Psec), 2-(트리페닐포스피노) 에틸 카보네이트(Peoc), 알킬 이소부틸 카보네이트, 알킬 비닐 카보네이트, 알킬 알릴 카보네이트, 알킬 p-니트로페닐 카보네이트, 알킬 벤질 카보네이트, 알킬 p-메톡시벤질 카보네이트, 알킬 3,4-디메톡시벤질 카보네이트, 알킬 o-니트로벤질 카보네이트, 알킬 p-니트로벤질 카보네이트, 알킬 S-벤질 티오카보네이트,

4-에톡시-1-나프틸 카보네이트, 메틸 디티오카보네이트, 2-요오도벤조에이트, 4-아지도부티레이트, 4-니트로-4-메틸펜타노에이트, o-(디브로모메틸)벤조에이트, 2-포르밀벤젠설포네이트, 2-(메틸티오메톡시)에틸, 4-(메틸티오메톡시)부티레이트, 2-(메틸티오메톡시메틸)벤조에이트, 2,6-디클로로-4-메틸페녹시아세테이트, 2,6-디클로로-4-(1,1,3,3-테트라메틸부틸)페녹시아세테이트, 2,4-비스(1,1-디메틸프로필)페녹시아세테이트, 클로로디페닐아세테이트, 이소부티레이트, 모노석시노에이트, (E)-2-메틸 2-부테노에이트, o-(메톡시카보닐)벤조에이트, α-나프토에이트, 니트레이트, 알킬 N,N,N',N'-테트라메틸포스포로디아미데이트, 알킬 N-페닐카바메이트, 보레이트, 디메틸포스피노티오닐, 알킬 2,4-디니트로페닐설페네이트, 설페이트, 메탄설포네이트(메실레이트), 벤질설포네이트 및 토실레이트(Ts)를 포함한다. 1,2- 또는 1,3-디올을 보호하기 위하여, 보호 그룹은 메틸렌 아세탈, 에틸리덴 아세탈, 1-t-부틸에틸리덴 케탈, 1-페닐에틸리덴 케탈, (4-메톡시페닐)에틸리덴 아세탈, 2,2,2-트리클로로에틸리덴 아세탈, 아세토나이드, 사이클로펜틸리덴 케탈, 사이클로헥실리덴 케탈, 사이클로헵틸리덴 케탈, 벤질리덴 아세탈, p-메톡시벤질리덴 아세탈, 2,4-디메톡시벤질리덴 케탈, 3,4-디메톡시벤질리덴 아세탈, 2-니트로벤질리덴 아세탈, 메톡시메틸렌 아세탈, 에톡시메틸렌 아세탈, 디메톡시메틸렌 오르토 에스테르, 1-메톡시에틸리덴 오르토 에스테르, 1-에톡시에틸리딘 오르토 에스테르, 1,2-디메톡시에틸리덴 오르토 에스테르, α-메톡시벤질리덴 오르토 에스테르, 1-(N,N-디메틸아미노)에틸리덴 유도체, α-(N,N'-디메틸아미노)벤질리덴 유도체, 2-옥사사이클로펜틸리덴 오르토 에스테르, 디-t-부틸실릴렌 그룹(DTBS), 1,3-(1,1,3,3-테트라이소프로필디실록사닐리덴) 유도체(TIPDS), 테트라-t-부톡시디실록산-1,3-디일리덴 유도체(TBDS), 사이클릭 카보네이트, 사이클릭 보로네이트, 에틸 보로네이트 및 페닐 보로네이트를 포함한다. 아미노 보호 그룹은 메틸 카바메이트, 에틸 카바메이트, 9-플루오레닐메틸 카바메이트(Fmoc), 9-(2-설포)플루오레닐메틸 카바메이트, 9-(2,7-디브로모)플루오로에닐메틸 카바메이트, 2,7-디-t-부틸 [9-(10,10-디옥소-10,10,10,10-테트라하이드로티옥산틸)]메틸 카바메이트(DBD Tmoc), 4-메톡시펜아실 카바메이트(Phenoc), 2,2,2-트리클로로에틸 카바메이트(Troc), 2-트리메틸실릴에틸 카바메이트(Teoc), 2-페닐에틸 카바메이트(hZ), 1-(1-아다만틸)-1-메틸에틸 카바메이트(Adpoc), 1,1-디메틸2-할로에틸 카바메이트, 1,1-디메틸-2,2-디브로모에틸 카바메이트(DB-t-BOC), 1,1-디메틸-2,2,2-트리클로로에틸 카바메이트(TCBOC), 1-메틸-1-(4-비페닐릴)에틸 카바메이트(Bpoc), 1-(3,5-디-t-부틸페닐)-1-메틸에틸 카바메이트(t-Bumeoc), 2-(2'- 및 4'-피리딜)에틸 카바메이트(Pyoc), 2-(N,N-디사이클로헥실카복스아미도)에틸 카바메이트, t-부틸 카바메이트(BOC), 1-아다만틸 카바메이트(Adoc), 비닐 카바메이트(Voc), 알릴 카바메이트(Alloc), 1-이소프로필알릴 카바메이트(Ipaoc), 신나밀 카바메이트(Coc), 4-니트로신나밀 카바메이트(Noc), 8-퀴놀릴 카바메이트, N-하이드록시피페리디닐 카바메이트, 알킬디티오 카바메이트, 벤질 카바메이트(Cbz), p-메톡시벤질 카바메이트(Moz), p-니트로벤질 카바메이트, p-브로모벤질 카바메이트, p-클로로벤질 카바메이트, 2,4-디클로로벤질 카바메이트, 4-메틸설피닐벤질 카바메이트(Msz), 9-안트릴메틸 카바메이트, 디페닐메틸 카바메이트, 2-메틸티오에틸 카바메이트, 2-메틸설포닐에틸 카바메이트, 2-(p-톨루엔설포닐)에틸 카바메이트, [2-(1,3-디티아닐)]메틸 카바메이트(Dmoc), 4-메틸티오페닐 카바메이트(Mtpc), 2,4-디메틸티오페닐 카바메이트(Bmpc), 2-포스포니오에틸 카바메이트(Peoc), 2-트리페닐포스포니오이소프로필 카바메이트(Ppoc), 1,1-디메틸 2-시아노에틸 카바메이트, m-클로로-p-아실옥시벤질 카바메이트, p-(디하이드록시보릴)벤질 카바메이트, 5-벤즈이속사졸릴메틸 카바메이트, 2-(트리플루오로메틸)-6-크로모닐메틸 카바메이트(Tcroc), m-니트로페닐 카바메이트, 3,5-디메톡시벤질 카바메이트, o-니트로벤질 카바메이트, 3,4-디메톡시 6-니트로벤질 카바메이트, 페닐(o-니트로페닐)메틸 카바메이트, 페노티아지닐-(10)-카보닐 유도체, N'-p-톨루엔설포닐아미노카보닐 유도체, N'-페닐아미노티오카보닐 유도체, t-아밀 카바메이트, S-벤질 티오카바메이트, p-시아노벤질 카바메이트, 사이클로부틸 카바메이트, 사이클로헥실 카바메이트, 사이클로펜틸 카바메이트, 사이클로프로필메틸 카바메이트, p-데실옥시벤질 카바메이트, 2,2-디메톡시카보닐비닐 카바메이트, o-(N,N-디메틸카복스아미도)벤질 카바메이트, 1,1-디메틸 3-(N,N-디메틸카복스아미도)프로필 카바메이트, 1,1-디메틸프로피닐 카바메이트, 디(2-피리딜)메틸 카바메이트, 2-푸라닐메틸 카바메이트, 2-요오도에틸 카바메이트, 이소보리닐 카바메이트, 이소부틸 카바메이트, 이소니코티닐 카바메이트, p-(p'-메톡시페닐아조)벤질 카바메이트, 1-메틸사이클로부틸 카바메이트, 1-메틸사이클로헥실 카바메이트, 1-메틸-1-사이클로프로필메틸 카바메이트, 1-메틸-1-(3,5-디메톡시페닐)에틸 카바메이트, 1-메틸-1-(p-페닐아조페닐)에틸 카바메이트, 1-메틸-1-페닐에틸 카바메이트, 1-메틸-1-(4-피리딜)에틸 카바메이트, 페닐 카바메이트, p-(페닐아조)벤질 카바메이트, 2,4,6-트리-t-부틸페닐 카바메이트, 4-(트리메틸암모늄)벤질 카바메이트, 2,4,6-트리메틸벤질 카바메이트, 포름아미드, 아세트아미드, 클로로아세트아미드, 트리클로로아세트아미드, 트리플루오로아세트아미드, 페닐아세트아미드, 3-페닐프로판아미드, 피콜린아미드, 3-피리딜카복스아미드, N-벤조일페닐알라닐 유도체, 벤즈아미드, p-페닐벤즈아미드, o-니트로페닐아세트아미드, o-니트로페녹시아세트아미드, 아세토아세트아미드, (N'-디티오벤질옥시카보닐아미노)아세트아미드, 3-(p-하이드록시페닐)프로판아미드, 3-(o-니트로페닐)프로판아미드, 2-메틸-2-(o-니트로페녹시)프로판아미드, 2-메틸-2-(o-페닐아조페녹시)프로판아미드, 4-클로로부탄아미드, 3-메틸-3-니트로부탄아미드, o-니트로신나미드, N-아세틸메티오닌 유도

체, o-니트로벤즈아미드, o-(벤조일옥시메틸)벤즈아미드, 4,5-디페닐-3-옥사졸린-2-온, N-프탈이미드, N-디티아석신이미드(Dts), N-2,3-디페닐말레이미드, N-2,5-디메틸피롤, N-1,1,4,4-테트라메틸디실릴아자사이클로펜탄 부가물(STABASE), 5-치환된 1,3-디메틸-1,3,5-트리아자사이클로헥산-2-온, 5-치환된 1,3-디벤질-1,3,5-트리아자사이클로헥산-2-온, 1-치환된 3,5-디니트로-4-피리돈, N-메틸아민, N-알릴아민, N-[2-(트리메틸실릴)에톡시]메틸아민(SEM), N-3-아세톡시프로필아민, N-(1-이소프로필-4-니트로-2-옥소-3-피롤린-3-일)아민, 4급 암모늄 염, N-벤질아민, N-디(4-메톡시페닐)메틸아민, N-5-디벤조수베릴아민, N-트리페닐메틸아민(Tr), N-[(4-메톡시페닐)디페닐메틸]아민(MMTr), N-9-페닐플루오레닐아민(PhF), N-2,7-디클로로-9-플루오레닐메틸렌아민, N-페로세닐메틸아미노(Fcm), N-2-피콜릴아미노-N'-옥사이드, N-1,1-디메틸티오메틸렌아민, N-벤질리덴아민, N-p-메톡시벤질리덴아민, N-디페닐메틸렌아민, N-[(2-피리딜)메시틸]메틸렌아민, N-(N',N'-디메틸아미노메틸렌)아민, N,N'-이소프로필리덴디아민, N-p-니트로벤질리덴아민, N-살리실리덴아민, N-5-클로로살리실리덴아민, N-(5-클로로-2-하이드록시페닐)페닐메틸렌아민, N-사이클로헥실리덴아민, N-(5,5-디메틸-3-옥소-1-사이클로헥세닐)아민, N-보란 유도체, N-디페닐보린산 유도체, N-[페닐(펜타카보닐크롬- 또는 텅스텐)카보닐]아민, N-구리 킬레이트, N-아연 킬레이트, N-니트로아민, N-니트로소아민, 아민 N-옥사이드, 디페닐포스핀아미드(Dpp), 디메틸티오포스핀아미드(Mpt), 디페닐티오포스핀아미드(Ppt), 디알킬 포스포르아미데이트, 디벤질 포스포르아미데이트, 디페닐 포스포르아미데이트, 벤젠설펜아미드, o-니트로벤젠설펜아미드(Nps), 2,4-디니트로벤젠설펜아미드, 펜타클로로벤젠설펜아미드, 2-니트로-4-메톡시벤젠설펜아미드, 트리페닐메틸설펜아미드, 3-니트로피리딘설펜아미드(Npys), p-톨루엔설폰아미드(Ts), 벤젠설폰아미드, 2,3,6-트리메틸-4-메톡시벤젠설폰아미드(Mtr), 2,4,6-트리메톡시벤젠설폰아미드(Mtb), 2,6-디메틸-4-메톡시벤젠설폰아미드(Pme), 2,3,5,6-테트라메틸-4-메톡시벤젠설폰아미드(Mte), 4-메톡시벤젠설폰아미드(Mbs), 2,4,6-트리메틸벤젠설폰아미드(Mts), 2,6-디메톡시-4-메틸벤젠설폰아미드(iMds), 2,2,5,7,8-펜타메틸크로만-6-설폰아미드(Pmc), 메탄설폰아미드(Ms), β-트리메틸실릴에탄설폰아미드(SES), 9-안트라센설폰아미드, 4-(4',8'-디메톡시나프틸메틸)벤젠설폰아미드(DNMBS), 벤질설폰아미드, 트리플루오로메틸설폰아미드 및 펜아실설폰아미드를 포함한다. 예시적인 보호 그룹을 본원에 상술하였지만, 이는 본 발명을 당해 보호 그룹으로 제한하려는 것이 인정되며; 그보다는 다양한 추가의 동등한 보호 그룹이 위의 기준을 사용하여 용이하게 확인되고 본 발명의 방법에 이용될 수 있다. 추가로, 다양한 보호 그룹은 문헌[참조: *Protecting Groups in Organic Synthesis*, T. W. Greene and P. G. M. Wuts, 3rd edition, John Wiley & Sons, 1999]에 기재되어 있으며, 이 전체는 본원에서 참조로 인용된다.

[0068] 치환기가 본원에 기재되는 경우, 용어 "라디칼" 또는 "임의로 치환된 라디칼"이 때때로 사용된다. 이와 관련하여, "라디칼"은 치환기가 결합된 구조에 대한 이용 가능한 결합 위치를 갖는 잔기 또는 관능성 그룹을 의미한다. 일반적으로 결합점은 치환기가 치환기보다 독립적인 중성 분자인 경우, 수소원자를 가질 것이다. 이와 관련하여 용어 "라디칼" 또는 "임의로 치환된 라디칼"은 "그룹" 또는 "임의로 치환된 그룹"과 상호 교환적이다.

[0069] 본원에 기재된 바와 같이, 본 발명의 화합물은 "임의로 치환된" 잔기를 함유할 수 있다. 일반적으로, 용어 "치환된"은, 용어 "임의로"가 선행되거나 선행되지 않거나의 여부에 관계 없이, 지정된 잔기의 하나 이상의 수소가 적합한 치환기로 대체됨을 의미한다. 달리 나타내지 않는 한, "임의로 치환된 그룹" 또는 "임의로 치환된 라디칼"은 그룹의 각각의 치환가능한 위치에서의 적합한 치환기를 가질 수 있고, 임의의 주어진 구조에서의 하나 이상의 위치가 명시된 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있는 경우, 치환기는 모든 위치에서 동일하거나 상이할 수 있다. 본 발명에 의하여 계획된 치환기들의 조합은 바람직하게는 안정하거나 화학적으로 실행 가능한 화합물의 형성을 발생시키는 것이다. 본원에서 사용된 용어 "안정한"은 이의 생성, 검출 및 특정 양태에서는, 이의 회수, 정제 및 본원에 기재된 하나 이상의 목적에 대한 용도를 고려한 조건으로 처리시 실질적으로 변경되지 않는 화합물들을 말한다.

[0070] 본원의 일부 화학적 구조에서는, 표시된 분자의 환의 결합을 교차하는 결합에 치환기들이 결합된 것으로 나타나 있다. 이러한 관계는 하나 이상의 치환기가 어떠한 이용 가능한 위치에서라도(통상적으로 모 구조의 수소원자 대신) 환에 결합될 수 있음을 나타낸다. 이렇게 치환된 환의 원자가 두 개의 치환가능한 위치를 갖는 경우, 두 그룹은 동일한 환 원자에 존재할 수 있다. 달리 나타내지 않는 한, 하나 이상의 치환기가 존재하는 경우, 각각은 서로 독립적으로 정의되고, 각각은 상이한 구조를 가질 수 있다. 환의 결합을 교차하는 것으로 나타낸 치환기가 -R인 경우, 이는 환이 선행 문단에서 기재된 바와 같이 "임의로 치환된" 것이라고 하는 것과 동일한 의미를 갖는다.

[0071] "임의로 치환된" 그룹의 치환가능한 탄소원자상 적합한 1가 치환기는 독립적으로 할로겐; $-(CH_2)_{0-4}R^{\circ}$; $-(CH_2)_{0-}$

$_4$OR° ; -O-$(CH_2)_{0-4}$C(O)OR° ; -$(CH_2)_{0-4}$CH(OR°)$_2$; -$(CH_2)_{0-4}$SR° ; R° 로 치환될 수 있는 -$(CH_2)_{0-4}$Ph; R° 로 치환될 수 있는 -$(CH_2)_{0-4}$O$(CH_2)_{0-1}$Ph; R° 로 치환될 수 있는 -CH=CHPh; -NO_2; -CN; -N_3; -$(CH_2)_{0-4}$N(R°)$_2$; -$(CH_2)_{0-4}$N(R°)C(O)R° ; -N(R°)C(S)R° ; -$(CH_2)_{0-4}$N(R°)C(O)NR° $_2$; -N(R°)C(S)NR° $_2$; -$(CH_2)_{0-4}$N(R°)C(O)OR° ; -N(R°)N(R°)C(O)R° ; -N(R°)N(R°)C(O)NR° $_2$; -N(R°)N(R°)C(O)OR° ; -$(CH_2)_{0-4}$C(O)R° ; -C(S)R° ; -$(CH_2)_{0-4}$C(O)OR° ; -$(CH_2)_{0-4}$C(O)N(R°)$_2$; -$(CH_2)_{0-4}$C(O)SR° ; -$(CH_2)_{0-4}$C(O)OSiR° $_3$; -$(CH_2)_{0-4}$OC(O)R° ; -OC(O)$(CH_2)_{0-4}$SR-, SC(S)SR° ; -$(CH_2)_{0-4}$SC(O)R° ; -$(CH_2)_{0-4}$C(O)NR° $_2$; -C(S)NR° $_2$; -C(S)SR° ; -SC(S)SR° , -$(CH_2)_{0-4}$OC(O)NR° $_2$; -C(O)N(OR°)R° ; -C(O)C(O)R° ; -C(O)CH_2C(O)R° ; -C(NOR°)R° ; -$(CH_2)_{0-4}$SSR° ; -$(CH_2)_{0-4}$S(O)$_2$R° ; -$(CH_2)_{0-4}$S(O)$_2$OR° ; -$(CH_2)_{0-4}$OS(O)$_2$R° ; -S(O)$_2$NR° $_2$; -$(CH_2)_{0-4}$S(O)R° ; -N(R°)S(O)$_2$NR° $_2$; -N(R°)S(O)$_2$R° ; -N(OR°)R° ; -C(NH)NR° $_2$; -P(O)$_2$R° ; -P(O)R° $_2$; -OP(O)R° $_2$; -OP(O)(OR°)$_2$; SiR° $_3$; -(C_{1-4} 선형 또는 분지형 알킬렌)O-N(R°)$_2$; 또는 -(C_{1-4} 선형 또는 분지형 알킬렌)C(O)O-N(R°)$_2$[여기서, 각각의 R° 은 아래에 정의한 바와 같이 치환될 수 있고, 독립적으로 수소, C_{1-8} 지방족, -CH_2Ph, -O$(CH_2)_{0-1}$Ph, 또는 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5 내지 6원 포화, 부분 불포화 또는 아릴 환이거나, 또는 위의 정의에도 불구하고 R° 의 두 개의 독립적인 존재는 개재 원자(들)와 함께, 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 3 내지 12원 포화, 부분 불포화 또는 아릴 모노- 또는 폴리사이클릭 환을 형성하며, 이는 아래에 정의한 바와 같이 치환될 수 있다]이다.

[0072] R° 상의 적합한 1가 치환기(또는 이의 개재 원자들과 함께, R° 2개의 독립적인 R° 에 의하여 형성된 환)는 독립적으로 할로겐, -$(CH_2)_{0-2}$R●, -(할로R●), -$(CH_2)_{0-2}$OH, -$(CH_2)_{0-2}$OR●, -$(CH_2)_{0-2}$CH(OR●)$_2$; -O(할로R●), -CN, -N_3, -$(CH_2)_{0-2}$C(O)R●, -$(CH_2)_{0-2}$C(O)OH, -$(CH_2)_{0-2}$C(O)OR●, -$(CH_2)_{0-4}$C(O)N(R°)$_2$; -$(CH_2)_{0-2}$SR●, -$(CH_2)_{0-2}$SH, -$(CH_2)_{0-2}$$NH_2$, -$(CH_2)_{0-2}$NHR●, -$(CH_2)_{0-2}$NR● $_2$, -NO_2, -SiR● $_3$, -OSiR● $_3$, -C(O)SR●, -(C_{1-4} 선형 또는 분지형 알킬렌)C(O)OR● 또는 -SSR●[여기서, 각각의 R●은 치환되지 않거나 "할로"에 의하여 선행되는 경우, 하나 이상의 할로겐으로 치환되고, 독립적으로 C_{1-4} 지방족, -CH_2Ph, -O$(CH_2)_{0-1}$Ph, 또는 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5 내지 6원 포화, 부분 불포화 또는 아릴 환으로부터 선택된다]이다. R° 의 포화 탄소원자 상의 적합한 2가 치환기는 =O 및 =S를 포함한다.

[0073] "임의로 치환된" 그룹의 포화 탄소원자 상의 적합한 2가 치환기는 다음을 포함한다: =O, =S, =NNR* $_2$, =NNHC(O)R*, =NNHC(O)OR*, =NNHS(O)$_2$R*, =NR*, =NOR*, -O(C(R* $_2$))$_{2-3}$O- 또는 -S(C(R* $_2$))$_{2-3}$S-(여기서, R*는 각각 독립적으로, 수소, 아래에 정의한 바와 같이 치환될 수 있는 C_{1-6} 지방족, 또는 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 치환되지 않은 5 내지 6원 포화, 부분 불포화 또는 아릴 환으로부터 선택된다). "임의로 치환된" 그룹의 인접한 치환가능한 탄소에 결합된 적합한 2가 치환기는 -O(CR* $_2$)$_{2-3}$O-(여기서, R*는 각각 독립적으로, 수소, 아래에 정의한 바와 같이 치환될 수 있는 C_{1-6} 지방족, 또는 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 치환되지 않은 5 내지 6원 포화, 부분 불포화 또는 아릴 환으로부터 선택된다)를 포함한다.

[0074] R*의 지방족 그룹 상의 적합한 치환기는 할로겐, -R●, -(할로R●), -OH, -OR●, -O(할로R●), -CN, -C(O)OH, -C(O)OR●, -NH_2, -NHR●, -NR● $_2$ 또는 -NO_2[여기서, 각각의 R●은 치환되지 않거나 "할로"에 의하여 선행되는 경우 하나 이상의 할로겐으로만 치환되고, 독립적으로 C_{1-4} 지방족, -CH_2Ph, -O$(CH_2)_{0-1}$Ph, 또는 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5 내지 6원 포화, 부분 불포화 또는 아릴 환이다]를 포함한다.

[0075] "임의로 치환된" 그룹의 치환가능한 질소 상의 적합한 치환기는 -R†, -NR† $_2$, -C(O)R†, -C(O)OR†, -C(O)C(O)R†,

$-C(O)CH_2C(O)R^{\dagger}$, $-S(O)_2R^{\dagger}$, $-S(O)_2NR^{\dagger}{}_2$, $-C(S)NR^{\dagger}{}_2$, $-C(NH)NR^{\dagger}{}_2$ 또는 $-N(R^{\dagger})S(O)_2R^{\dagger}$[여기서, $R^{\dagger}$은 각각 독립적으로, 수소, 아래에 정의된 바와 같이 치환될 수 있는 C_{1-6} 지방족, 치환되지 않은 -OPh, 또는 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 치환되지 않은 5 내지 6원 포화, 부분 불포화 또는 아릴 환이거나, 위의 정의에도 불구하고, 두 개의 독립적인 $R^{\dagger}$은 개재 원자(들)와 함께, 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 치환되지 않은 3 내지 12원 포화, 부분 불포화 또는 아릴 모노- 또는 바이사이클릭 환을 형성한다]을 포함한다. 치환가능한 질소는 3개의 $R^{\dagger}$ 치환기로 치환되어 하전된 암모늄 잔기 $-N^{+}(R^{\dagger})_3$(여기서, 암모늄 잔기는 적합한 대이온(counterion)으로 추가로 착화된다)을 제공할 수 있다.

[0076] $R^{\dagger}$의 지방족 그룹 상의 적합한 치환기는 독립적으로 할로겐, $-R^{\bullet}$, -(할로$R^{\bullet}$), -OH, $-OR^{\bullet}$, -O(할로$R^{\bullet}$), -CN, -C(O)OH, $-C(O)OR^{\bullet}$, $-NH_2$, $-NHR^{\bullet}$, $-NR^{\bullet}{}_2$ 또는 $-NO_2$[여기서, 각각의 $R^{\bullet}$은 치환되지 않거나 "할로"에 의하여 선행되는 경우 하나 이상의 할로겐으로만 치환되고, 독립적으로 C_{1-4} 지방족, $-CH_2Ph$, $-O(CH_2)_{0-1}Ph$, 또는 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5 내지 6원 포화, 부분 불포화 또는 아릴 환이다]이다.

[0077] 본원에서 사용된 용어 "촉매"는 이의 존재시 화학 반응의 속도 및/또는 범위를 증가시키지만, 그 자체가 소모되거나 영구적인 화학적 변화를 겪지 않는 물질을 말한다.

[0078] 본원에서 사용된 용어 "다좌배위자"는 단일 금속 중심에 배위 결합할 수 있는 다수의 부위들을 갖는 리간드를 말한다.

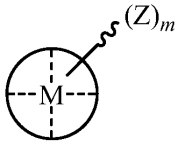
[0079] 본원에서 사용된 용어 "활성화 잔기"는 하나 이상의 활성화 관능성 그룹을 포함하는 잔기를 말한다. 특정 양태에서, 활성화 잔기는 금속 착체의 촉매 활성을 개선시킨다. 일부 양태에서, 이러한 개선된 촉매 활성은 활성화 잔기가 부족한 금속 착체와 비교하여 출발 물질의 보다 높은 전환율을 특징으로 한다. 일부 양태에서, 이러한 개선된 촉매 활성은 활성화 잔기가 부족한 금속 착체와 비교하여 출발 물질의 보다 높은 전환 속도를 특징으로 한다. 일부 양태에서, 이러한 개선된 촉매 활성은 활성화 잔기가 부족한 금속 착체와 비교하여 생성물의 보다 높은 수율을 특징으로 한다.

[0080] **특정 양태의 상세한 설명**

[0081] 본 발명은, 특히, 이산화탄소와 에폭사이드의 공중합용 일분자 금속 착체 및 이의 사용방법을 제공한다. 특정 양태에서, 제공된 금속 착체는 하나 이상의 활성화 잔기에 테터링된 금속-리간드 잔기를 함유한다. 일부 양태에서, 활성화 잔기는 링커 및 하나 이상의 활성화 관능성 그룹을 포함한다. 일부 양태에서, 제공된 금속 착체는 중합 촉매로서 작용한다. 특정 양태에서, 테터링된 잔기에 존재하는 하나 이상의 활성화 관능성 그룹은 중합 조촉매로서 작용하여 공중합 속도를 증가시킬 수 있다.

[0082] 특정 양태에서, 제공된 금속 착체는 다좌배위자 리간드에 배위 결합된 금속 원자 및 다좌배위자 리간드에 테터링된 하나 이상의 활성화 잔기를 포함한다. 특정 양태에서, 제공된 금속 착체는 화학식 1의 구조를 갖는다.

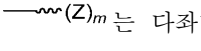
[0083] 화학식 1

[0084] 

[0085] 위의 화학식 1에서,

[0086] M은 금속 원자이고,

[0087]  는 다좌배위자 리간드를 포함하고,

[0088]  는 다좌배위자 리간드에 결합된 하나 이상의 활성화 잔기(여기서, 는 리간드에 공유 커플링된

링커 잔기이고, Z는 각각 활성화 관능성 그룹이고, m은 개별적인 링커 잔기에 존재하는 Z 그룹의 수를 나타낸다)이다.

[0089] 특정 양태에서, 제공된 금속 착체는 다좌배위자 리간드에 배위 결합된 금속 원자, 및 다좌배위자 리간드에 테터링된 하나 이상의 활성화 잔기를 포함한다. 일부 양태에서는, 1 내지 10개의 활성화 잔기 $\sim\!\!\sim(Z)_m$가 다좌배위자 리간드에 테터링된다. 특정 양태에서는, 1 내지 8개의 이러한 활성화 잔기가 다좌배위자 리간드에 테터링된다. 특정 양태에서는, 1 내지 4개의 이러한 활성화 잔기가 다좌배위자 리간드에 테터링된다.

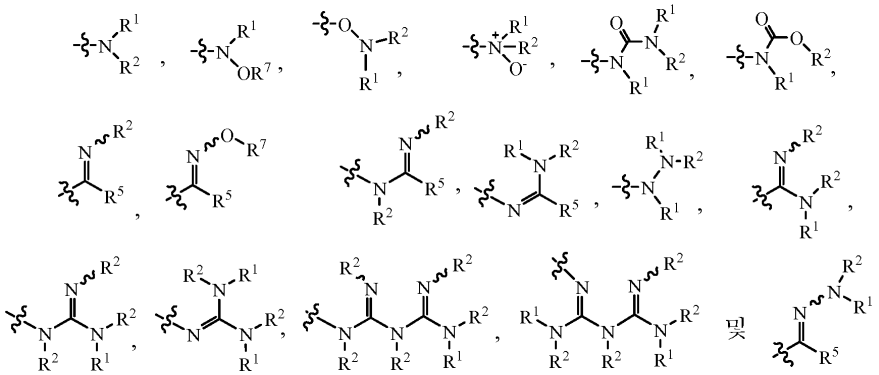
[0090] **I. 활성화 관능성 그룹**

[0091] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 중성 질소 함유 관능성 그룹, 양이온성 잔기, 인 함유 관능성 그룹 및 이들 중 2개 이상의 조합으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

[0092] **I.a. 중성 질소 함유 활성화 그룹**

[0093] 일부 양태에서, 제공된 금속 착체 상의 하나 이상의 테터링된 활성화 관능성 그룹은 중성 질소 함유 잔기이다. 일부 양태에서, 이러한 잔기는 표 Z-1의 구조를 하나 이상 포함한다:

[0094] 표 Z-1



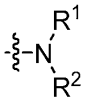
[0095] 또는 이들 중 2개 이상의 조합

[여기서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 수소이거나, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; 두 개 이상의 R^1 및 R^2 그룹은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성하고,

[0096] R^5는 각각 독립적으로 수소이거나, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; R^5 그룹은 R^1 또는 R^2 그룹과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고,

[0097] R^7은 각각 독립적으로, 수소, 또는 하이드록실 보호 그룹이거나, 또는 C_{1-20} 아실; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원

자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다].

[0098] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 N-연결된 아미노 그룹이다:  (여기서, R^1 및 R^2는 위에서 정의한 바와 같다).

[0099] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 수소이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2 중의 하나만 수소이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족, 5원 내지 14원 헤테로아릴, 페닐, 8원 내지 10원 아릴 및 3원 내지 7원 헤테로사이클릭으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다.

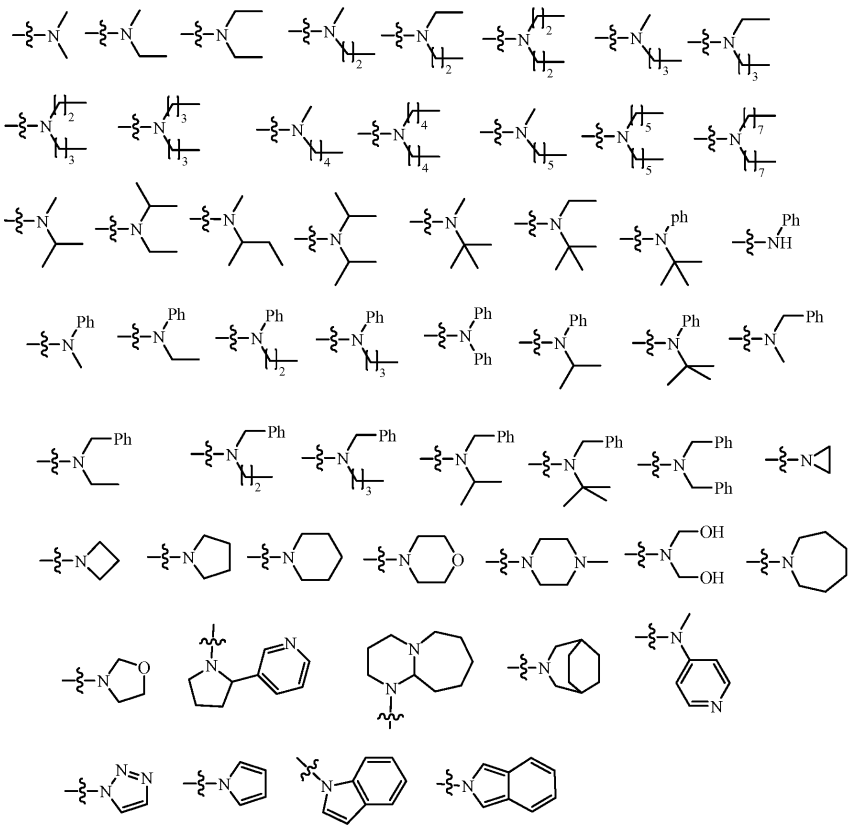
[0100] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-12} 지방족 및 C_{1-12} 헤테로지방족으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 페닐이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 페닐 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다.

[0101] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 임의로 치환된 페닐 또는 임의로 치환된 벤질이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 부틸이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 이소프로필이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 $-CF_2CF_3$이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 페닐이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 벤질이다.

[0102] 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2OC(R^y)_2-$ 및 $-C(R^y)_2NR^yC(R^y)_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-CH_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH_2OCH_2-$ 및 $-CH_2NR^yCH_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는

함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 불포화 링커 잔기를 형성한다. 일부 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 부분 불포화된다. 특정 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 융합된 폴리사이클릭 헤테로사이클을 포함한다.

[0103] 특정 양태에서, N-연결된 아민 활성화 관능성 그룹은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:



[0104]

[0105] 일부 양태에서, 하나 이상의 활성화 관능성 그룹은 N-연결된 하이드록실 아민 유도체이다:  (여기서, R^1 및 R^7은 위에서 정의한 바와 같다).

[0106] 특정 양태에서, R^7은 수소이다. 일부 양태에서, R^7은 C_{1-12} 지방족, 페닐, 8원 내지 10원 아릴 및 3원 내지 7원 헤테로사이클릭으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 특정 양태에서, R^7은 C_{1-12} 지방족이다. 특정 양태에서, R^7은 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^7은 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴 그룹이다. 특정 양태에서, R^7은 임의로 치환된 페닐이다. 일부 양태에서, R^7은 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질이다.

[0107] 특정 양태에서, R^1은 수소이다. 일부 양태에서, R^1은 C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족, 5원 내지 14원 헤테로아릴, 페닐, 8원 내지 10원 아릴 및 3원 내지 7원 헤테로사이클릭으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1은 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼

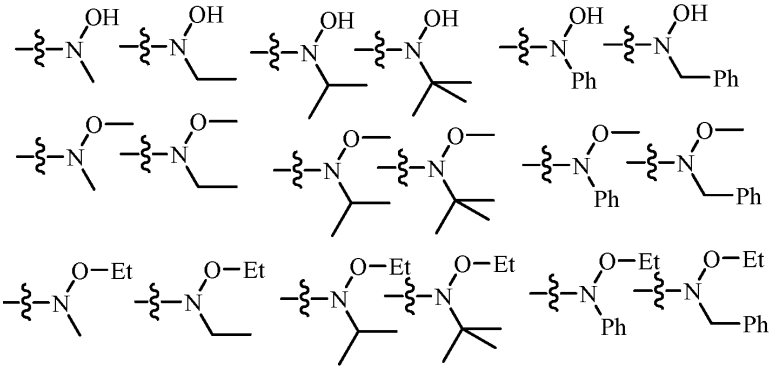
이다.

[0108] 일부 양태에서, R^1은 C_{1-12} 지방족 및 C_{1-12} 헤테로지방족으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1은 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 특정 양태에서, R^1은 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1은 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1은 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1은 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴이다. 특정 양태에서, R^1은 임의로 치환된 페닐이다. 일부 양태에서, R^1은 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴이다. 일부 양태에서, R^1은 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다.

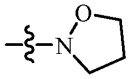
[0109] 특정 양태에서, R^1은 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질이다. 일부 양태에서, R^1은 부틸이다. 일부 양태에서, R^1은 이소프로필이다. 일부 양태에서, R^1은 페닐이다. 일부 양태에서, R^1은 벤질이다. 일부 양태에서, R^1은 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1은 $-CF_2CF_3$이다.

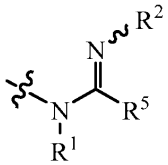
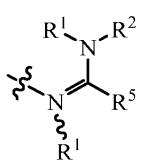
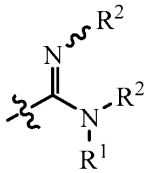
[0110] 특정 양태에서, R^1과 R^7은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다.

[0111] 특정 양태에서, 하나 이상의 N-연결된 하이드록실 아민 활성화 관능성 그룹은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:



[0112]



[0113] 일부 양태에서, 제공된 금속 착체의 활성화 관능성 그룹은 아미딘이다. 특정 양태에서, 이러한 아미딘 활성화 관능성 그룹은  ,  및  (여기서, R^1, R^2 및 R^5는 각각 위에서 정의한 바와 같다)로부터 선택된다.

[0114] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 수소이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2 중의 하나만 수소이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족, 5원 내지 14원 헤테로아릴, 페닐, 8원 내지 10원 아릴 및 3원 내지 7원 헤테로사이클릭으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭

포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다.

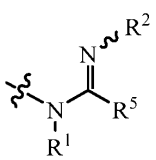
[0115] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-12} 지방족 및 C_{1-12} 헤테로지방족으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 페닐 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다.

[0116] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 임의로 치환된 페닐 또는 임의로 치환된 벤질이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 부틸이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 이소프로필이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 $-CF_2CF_3$이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 페닐이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 벤질이다.

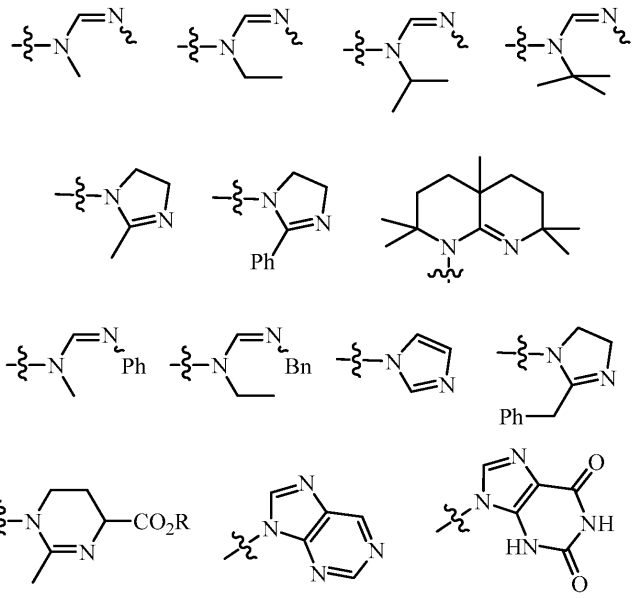
[0117] 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2OC(R^y)_2-$ 및 $-C(R^y)_2NR^yC(R^y)_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-CH_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH_2OCH_2-$ 및 $-CH_2NR^yCH_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 불포화 링커 잔기를 형성한다. 일부 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 부분 불포화된다. 특정 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 융합된 폴리사이클릭 헤테로사이클을 포함한다.

[0118] 특정 양태에서, R^5는 H이다. 특정 양태에서, R^5는 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^5는 임의로 치환된 6원 내지 14원 아릴이다. 특정 양태에서, R^5는 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^5는 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 특정 양태에서, R^5는 임의로 치환된 페닐이다.

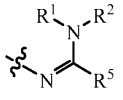
[0119] 일부 양태에서, 하나 이상의 R^1 또는 R^2 그룹은 R^5 및 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^5는 함께, 임의로 치환된 5원 또는 6원 환을 형성한다. 일부 양태에서, R^2와 R^5는 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 임의로 치환된 5원 또는 6원 환을 형성한다. 일부 양태에서, R^1, R^2 및 R^5는 함께, 임의로 치환된 융합 환 시스템을 형성한다. 일부 양태에서, R^1, R^2 및 R^5 중의 어떠한 조합에 의하여 형성된 이러한 환은 부분 불포화되거나 방향족이다.

[0120] 특정 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 N-연결된 아미딘이다:  . 특정 양태에서, N-연결된 아미딘

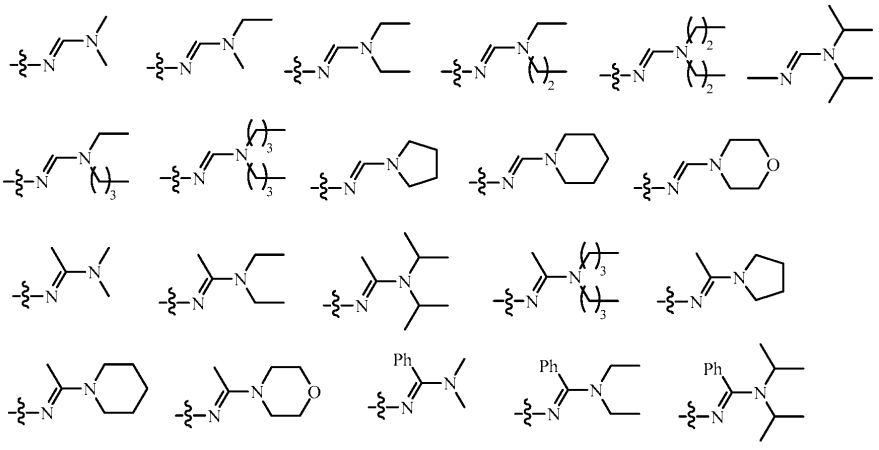
그룹은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:



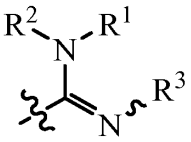
[0121]

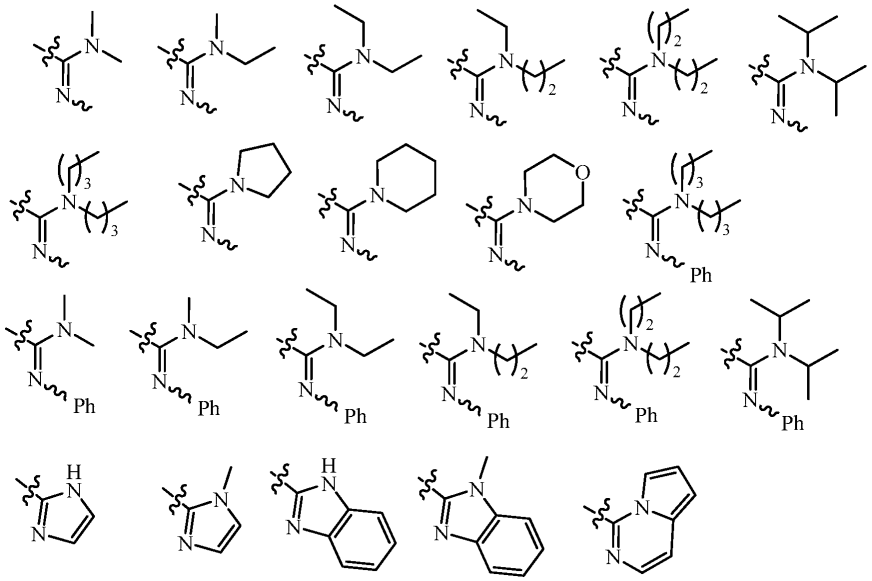
[0122] 특정 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 이민 질소를 통하여 연결된 아미딘 잔기이다: 

[0123] 특정 양태에서, 이민-연결된 아미딘 활성화 관능성 그룹은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:



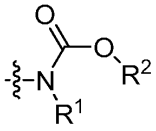
[0124]

[0125] 특정 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 탄소원자를 통하여 연결된 아미딘 잔기이다:  . 특정 양태에서, 탄소-연결된 아미딘 활성화 그룹은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:

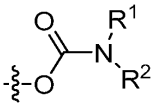


[0126]

[0127] 일부 양태에서, 하나 이상의 활성화 관능성 그룹은 카바메이트이다. 특정 양태에서, 카바메이트는 N-연결된다:



(여기서, R^1 및 R^2는 위에서 정의한 바와 같다). 일부 양태에서, 카바메이트는 O-연결된다:



(여기서, R^1 및 R^2는 위에서 정의한 바와 같다).

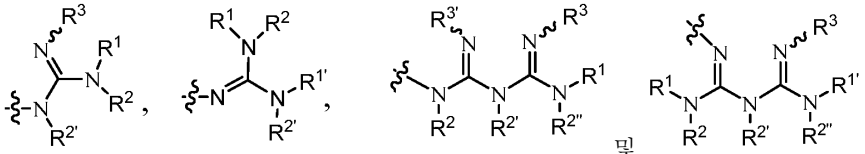
[0128] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 수소이다. 일부 양태에서는, R^1 및 R^2 중의 하나만 수소이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족, 5원 내지 14원 헤테로아릴, 페닐, 8원 내지 10원 아릴 및 3원 내지 7원 헤테로사이클릭으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다.

[0129] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-12} 지방족 및 C_{1-12} 헤테로지방족으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 페닐 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다.

[0130] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 임의로 치환된 페닐 또는 임의로 치환된 벤질이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 부틸이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 이소프로필이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 $-CF_2CF_3$이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 페닐이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 벤질이다.

[0131] 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2OC(R^y)_2-$ 및 $-C(R^y)_2NR^yC(R^y)_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-CH_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH_2OCH_2-$ 및 $-CH_2NR^yCH_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 불포화 링커 잔기를 형성한다. 일부 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 부분 불포화된다. 특정 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 융합된 폴리사이클릭 헤테로사이클을 포함한다. 일부 양태에서, R^2는 메틸, t-부틸, t-아밀, 벤질, 아다만틸, 알릴, 4-메톡시카보닐페닐, 2-(메틸설포닐)에틸, 2-(4-비페닐릴)-프로프-2-일, 2-(트리메틸실릴)에틸, 2-브로모에틸 및 9-플루오레닐메틸로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

[0132] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 구아니딘 또는 비스-구아니딘 그룹이다:

[0133] 
및

[0134] [여기서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 독립적으로 수소이거나, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; 임의의 2개 이상의 R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$ 그룹은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있다].

[0135] 특정 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 수소이다. 일부 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 수소이거나, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 3원 내지 7원 헤테로사이클릭, 페닐 및 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 수소이거나, 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 특정 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 독립적으로 수소이거나, C_{1-20} 지방족, 페닐 및 8원 내지 10원

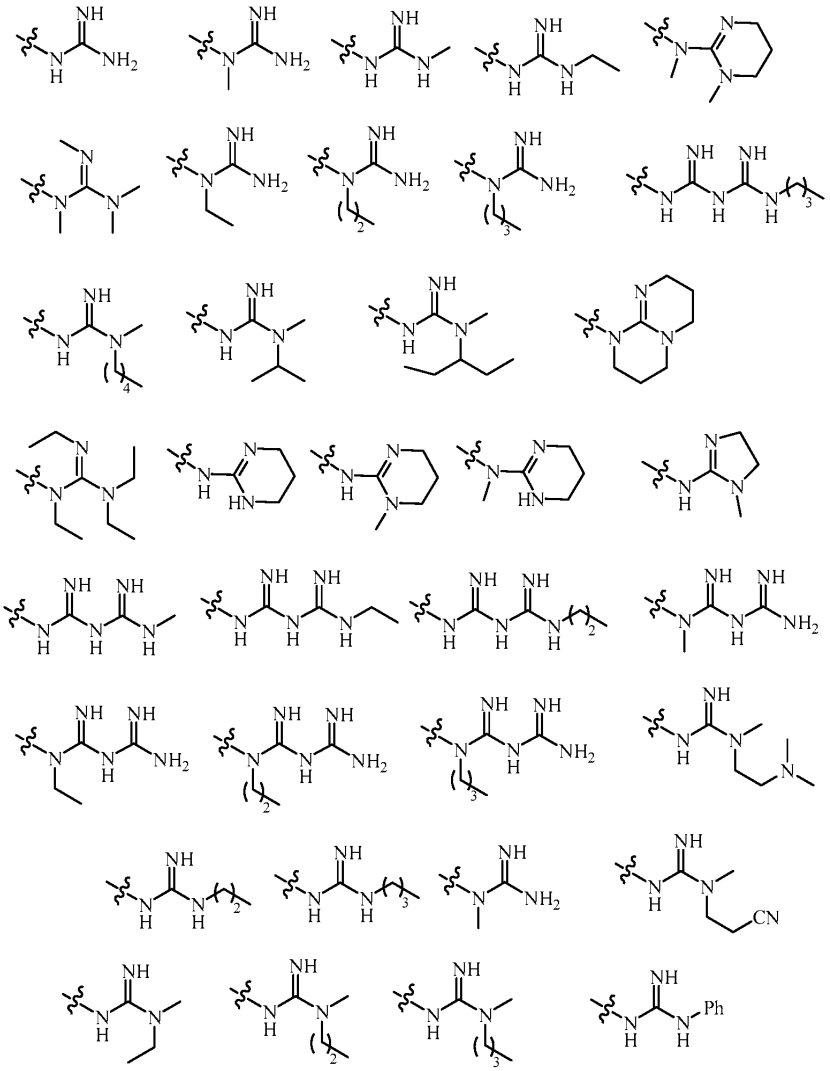
아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 수소이거나, 임의로 치환된 C_{1-8} 지방족, 페닐 또는 8원 내지 10원 아릴 그룹이다. 일부 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 수소, 임의로 치환된 아릴 그룹 또는 임의로 치환된 C_{1-8} 지방족 그룹이다. 일부 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족 그룹이다. 일부 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 C_{1-4} 지방족 그룹이다. 일부 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$ 중 하나 이상은 독립적으로 임의로 치환된 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$ 중 하나 이상은 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 페닐 또는 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$ 중 하나 이상은 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴이다.

[0136] 일부 양태에서, R^1은 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 특정 양태에서, $R^{1'}$는 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 특정 양태에서, R^2는 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 특정 양태에서, $R^{2'}$는 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 특정 양태에서, $R^{2''}$은 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 특정 양태에서, R^3은 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 특정 양태에서, $R^{3'}$는 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질이다. 특정 양태에서, R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 각각 메틸 또는 에틸이다. 일부 양태에서, 하나 이상의 R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$는 퍼플루오로이다.

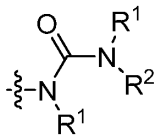
[0137] 일부 양태에서, 임의의 2개 이상의 R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$ 그룹은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다.

[0138] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 임의로 치환된 환을 형성한다. 일부 양태에서, R^2 및 $R^{2'}$는 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1 및 R^3은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 임의로 치환된 환을 형성한다. 일부 양태에서, [R^2와 $R^{2'}$] 및 [R^1과 R^3]은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 임의로 치환된 환이다. 일부 양태에서, 3개 이상의 R^1, $R^{1'}$, R^2, $R^{2'}$, $R^{2''}$, R^3 및 $R^{3'}$ 그룹은 어떠한 개재 원자들과도 함께, 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2 그룹은 함께, 임의로 치환된 5원 또는 6원 환을 형성한다. 일부 양태에서, 3개 이상의 R^1 및/또는 R^2 그룹은 함께, 임의로 치환된 융합 환 시스템을 형성한다.

[0139] 활성화 관능성 그룹이 구아니딘 또는 비스구아니딘 잔기인 특정 양태에서, 이는 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:



[0140] .



[0141] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 우레아이다: (여기서, R^1 및 R^2는 위에서 정의한 바와 같다).

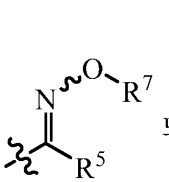
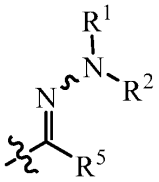
[0142] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 수소이다. 일부 양태에서는, R^1 및 R^2 중의 하나만 수소이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족, 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다.

[0143] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-12} 지방족 및 C_{1-12} 헤테로지방족으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각

독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 페닐 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다.

[0144] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 임의로 치환된 페닐 또는 임의로 치환된 벤질이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 부틸이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 이소프로필이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 $-CF_2CF_3$이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 페닐이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 벤질이다.

[0145] 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2OC(R^y)_2-$ 및 $-C(R^y)_2NR^yC(R^y)_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-CH_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH_2OCH_2-$ 및 $-CH_2NR^yCH_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 불포화 링커 잔기를 형성한다. 일부 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 부분 불포화된다. 특정 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 융합된 폴리사이클릭 헤테로사이클을 포함한다.

[0146] 특정 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 옥심 또는 하이드라존 그룹이다:  또는  (여기서, R^1, R^2, R^5 및 R^7은 위에서 정의한 바와 같다).

[0147] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 수소이다. 일부 양태에서는, R^1 및 R^2 중의 하나만 수소이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족, 5원 내지 14원 헤테로아릴, 8원 내지 10원 아릴 및 3원 내지 7원 헤테로사이클릭으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다.

[0148] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-12} 지방족 및 C_{1-12} 헤테로지방족으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각

독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 페닐 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다.

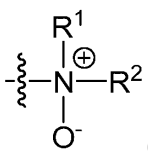
[0149] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 임의로 치환된 페닐 또는 임의로 치환된 벤질이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 부틸이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 이소프로필이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 $-CF_2CF_3$이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 페닐이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 벤질이다.

[0150] 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2OC(R^y)_2-$ 및 $-C(R^y)_2NR^yC(R^y)_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-CH_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH_2OCH_2-$ 및 $-CH_2NR^yCH_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 불포화 링커 잔기를 형성한다. 일부 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 부분 불포화된다. 특정 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 융합된 폴리사이클릭 헤테로사이클을 포함한다.

[0151] 특정 양태에서, R^5는 H이다. 특정 양태에서, R^5는 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이고, 일부 양태에서, R^5는 임의로 치환된 6원 내지 14원 아릴이다. 특정 양태에서, R^5는 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이고, 일부 양태에서, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 특정 양태에서, R^5는 임의로 치환된 페닐이다.

[0152] 일부 양태에서, 하나 이상의 R^1 또는 R^2 그룹은 R^5 및 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^5는 함께, 임의로 치환된 5원 또는 6원 환을 형성한다. 일부 양태에서, R^2와 R^5는 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 임의로 치환된 5원 또는 6원 환을 형성한다. 일부 양태에서, R^1, R^2 및 R^5는 함께, 임의로 치환된 융합 환 시스템을 형성한다. 일부 양태에서, R^1, R^2 및 R^5 중의 어떠한 조합에 의하여 형성된 이러한 환은 부분 불포화되거나 방향족이다.

[0153] 특정 양태에서, R^7은 -H이다. 특정 양태에서, R^7은 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족인 반면, 일부 양태에서, R^5는 임의로 치환된 6원 내지 14원 아릴이다. 특정 양태에서, R^7은 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이거나, 일부 양태에서는, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 특정 양태에서, R^7은 임의로 치환된 C_{1-12} 아실이거나, 일부 양태에서는, 임의로 치환된 C_{1-6} 아실이다. 특정 양태에서, R^7은 임의로 치환된 페닐이다. 일부 양태에서, R^7은 하이드록실 보호 그룹이다. 일부 양태에서, R^7은 실릴 보호 그룹이다.

[0154] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 N-옥사이드 유도체이다:  (여기서, R^1 및 R^2는 위에서 정의한

바와 같다).

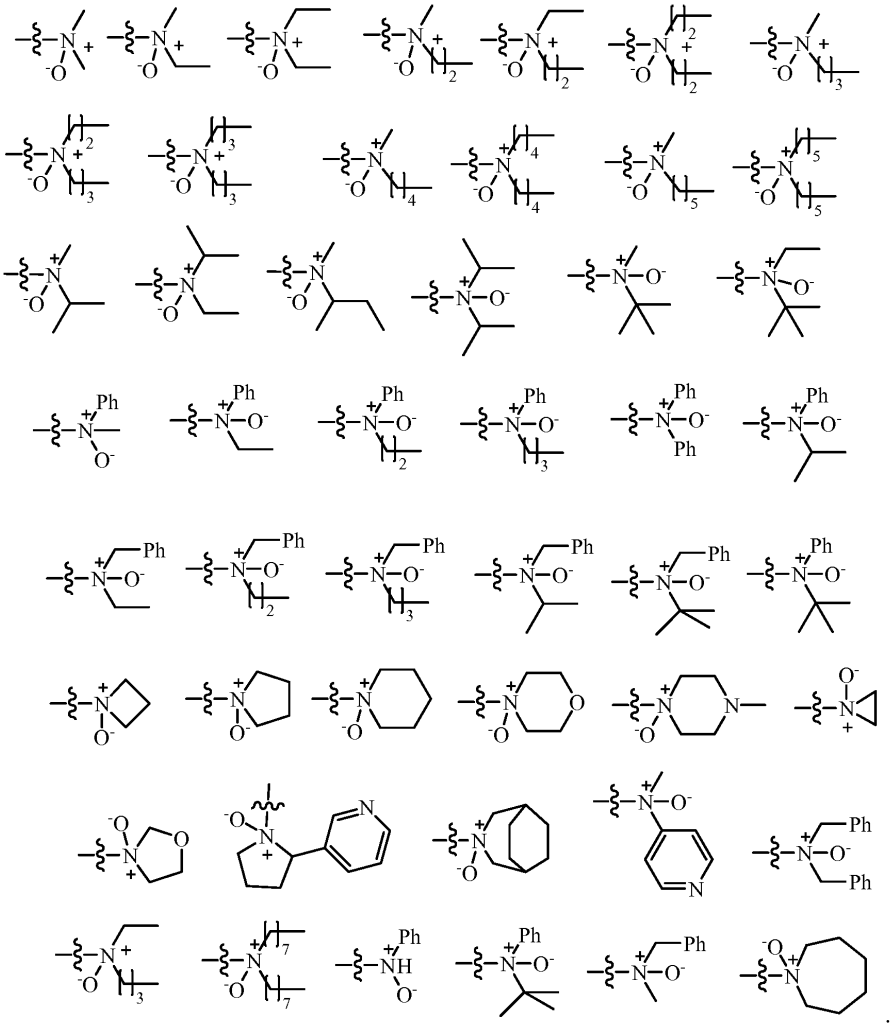
[0155] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 수소이다. 일부 양태에서는, R^1 및 R^2 중의 하나만 수소이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족, 5원 내지 14원 헤테로아릴, 페닐 또는 8원 내지 10원 아릴 및 3원 내지 7원 헤테로사이클릭으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다.

[0156] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-12} 지방족 및 C_{1-12} 헤테로지방족으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 페닐 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다.

[0157] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 임의로 치환된 페닐 또는 임의로 치환된 벤질이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 부틸이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 이소프로필이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 $-CF_2CF_3$이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 페닐이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 벤질이다.

[0158] 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2OC(R^y)_2-$ 및 $-C(R^y)_2NR^yC(R^y)_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-CH_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH_2OCH_2-$ 및 $-CH_2NR^yCH_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 불포화 링커 잔기를 형성한다. 일부 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 부분 불포화된다. 특정 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 융합된 폴리사이클릭 헤테로사이클을 포함한다.

[0159] 특정 양태에서, N-옥사이드 활성화 관능성 그룹은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:

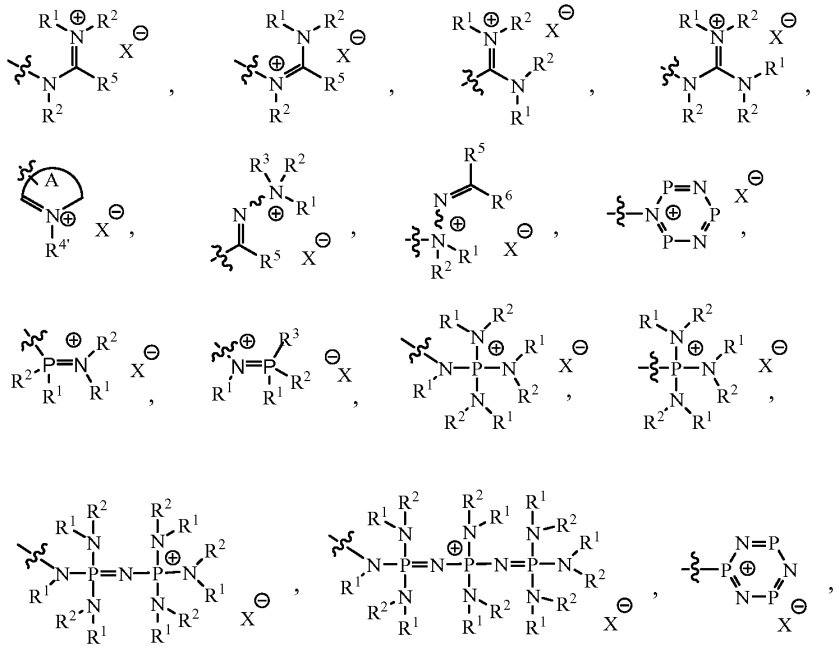


[0160]

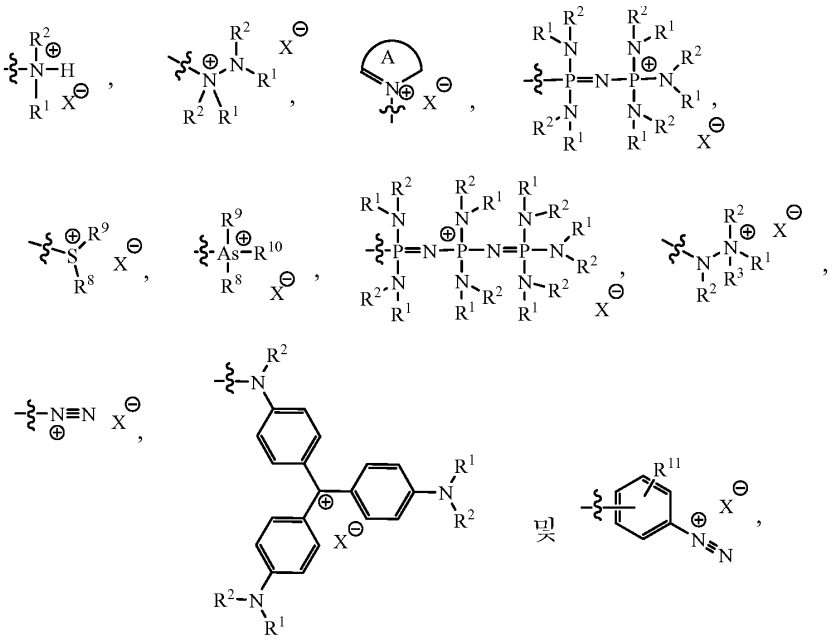
[0161] **I.b. 양이온성 활성화 그룹**

[0162] 일부 양태에서, 제공된 금속 착체 상의 하나 이상의 테터링된 활성화 관능성 그룹은 양이온성 잔기이다. 일부 양태에서, 이러한 잔기는 표 Z-2의 구조들을 하나 이상 포함한다:

[0163] 표 Z-2



[0164]



[0165] 또는 이들 중 2개 이상의 조합

[0166] [여기서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 위에서 정의한 바와 같고,

[0167] $R^{4'}$는 수소, 하이드록실, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이고,

[0168] R^5 및 R^6는 각각 독립적으로 수소이거나, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고; R^5와 R^6은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 헤테로원자를

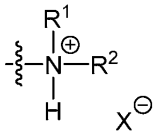
임의로 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고, R^5 또는 R^6 그룹은 R^1 또는 R^2 그룹과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고,

[0169] R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소이거나, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고, 여기서, 2개 이상의 R^8, R^9 및 R^{10}은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고,

[0170] R^{11}은 각각 독립적으로, 할로겐, $-NO_2$, -CN, $-SR^y$, $-S(O)R^y$, $-S(O)_2R^y$, $-NR^yC(O)R^y$, $-OC(O)R^y$, $-CO_2R^y$, -NCO, $-N_3$, $-OR^7$, $-OC(O)N(R^y)_2$, $-N(R^y)_2$, $-NR^yC(O)R^y$, $-NR^yC(O)OR^y$로 이루어진 그룹으로부터 선택되거나; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고, 여기서, R^y는 각각 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족 그룹이고, 2개 이상의 인접한 R^{11} 그룹은 함께, 0 내지 4개의 헤테로원자를 함유하는 임의로 치환된 포화, 부분 불포화 또는 방향족 5원 내지 12원 환을 형성할 수 있고,

[0171] X^-는 임의의 음이온이고,

[0172] 환 A는 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴 그룹이다].

[0173] 특정 양태에서, 양이온성 활성화 관능성 그룹은 양성자화된 아민이다:  (여기서, R^1 및 R^2는 위에서 정의한 바와 같다).

[0174] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 수소이다. 일부 양태에서는, R^1 및 R^2 중의 하나만 수소이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족, 5원 내지 14원 헤테로아릴, 페닐 또는 8원 내지 10원 아릴 및 3원 내지 7원 헤테로사이클릭으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다.

[0175] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-12} 지방족 및 C_{1-12} 헤테로지방족으로 이루어진 그룹으로부터 선택

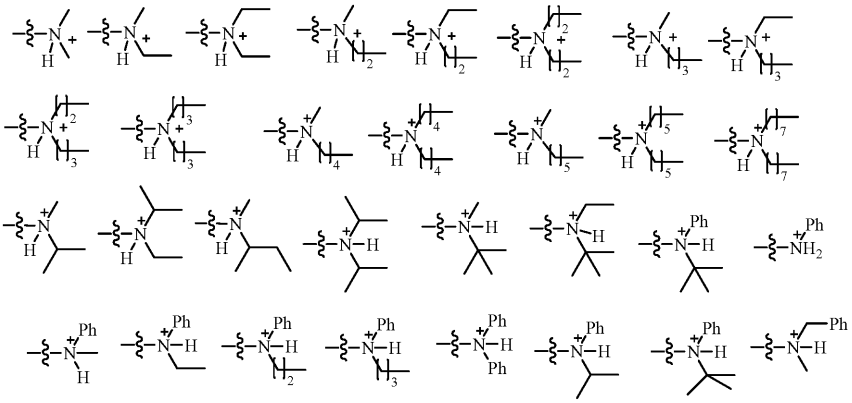
된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 페닐 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다.

[0176] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 임의로 치환된 페닐 또는 임의로 치환된 벤질이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 부틸이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 이소프로필이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 $-CF_2CF_3$이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 페닐이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 벤질이다.

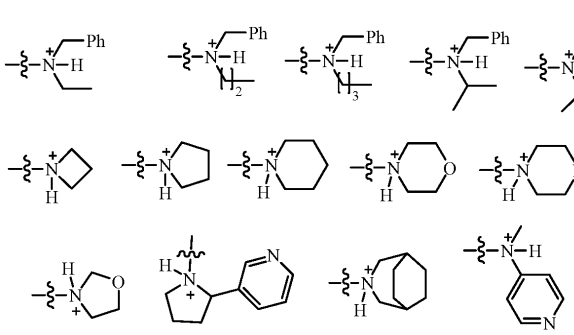
[0177] 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2OC(R^y)_2-$ 및 $-C(R^y)_2NR^yC(R^y)_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-CH_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH_2OCH_2-$ 및 $-CH_2NR^yCH_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 불포화 링커 잔기를 형성한다. 일부 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 부분 불포화된다. 특정 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 융합된 폴리사이클릭 헤테로사이클을 포함한다.

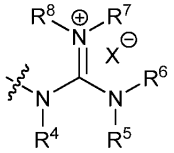
[0178] 특정 양태에서, 양성자화된 아민 활성화 관능성 그룹은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:

[0179]

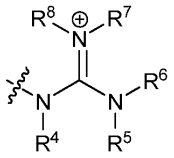
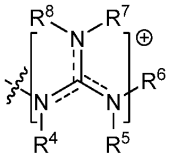
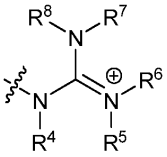
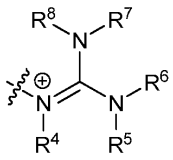


[0180]

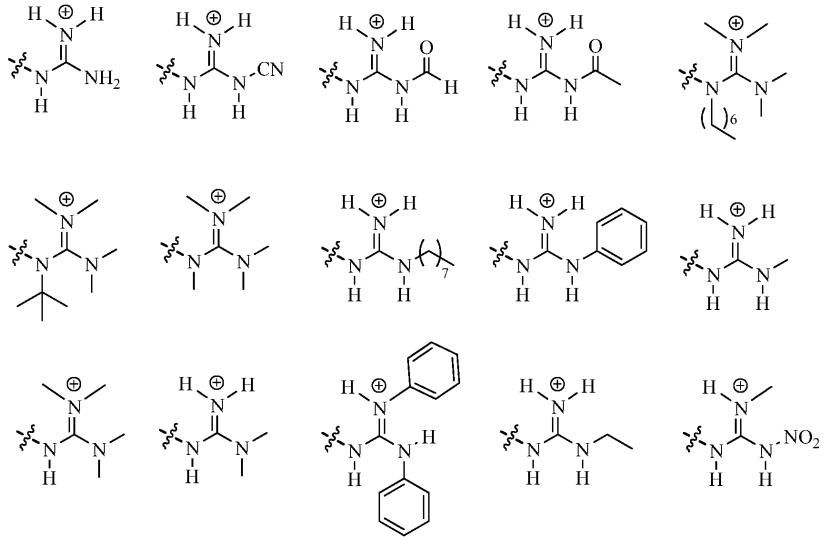




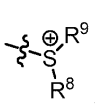
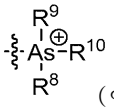
[0181] 특정 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 구아니디늄 그룹이다: . 일부 양태에서, R^4, R^5, R^6, R^7 및 R^8은 각각 수소이다. 일부 양태에서, R^4, R^5, R^6, R^7 및 R^8은 각각 독립적으로, 수소 또는 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^4, R^5, R^6, R^7 및 R^8은 각각 독립적으로, 수소 또는 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^4, R^5, R^6, R^7 및 R^8은 각각 독립적으로, 수소 또는 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^4, R^5, R^6, R^7 및 R^8은 각각 독립적으로, 수소 또는 페닐이다. 일부 양태에서, R^4, R^5, R^6, R^7 및 R^8은 각각 독립적으로, 수소 또는 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, R^4, R^5, R^6, R^7 및 R^8은 각각 독립적으로, 수소 또는 5원 내지 10원 헤테로아릴이다. 일부 양태에서, R^4, R^5, R^6, R^7 및 R^8은 각각 독립적으로, 수소 또는 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다. 일부 양태에서, R^4, R^5, R^6 및 R^7 중 하나 이상은 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 특정 양태에서, (R^4와 R^5), (R^5와 R^6), (R^6과 R^7), (R^7과 R^8) 및 (R^4와 R^7) 중의 어느 것이라도 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다. 일부 양태에서, (R^4와 R^5) 및 (R^6과 R^7)은 함께, 환을 형성한다.

[0182] 구아니디늄 양이온을  로 나타내는 경우, 모든 이러한 공명 형태는 당해 기재 내용에 의하여 예상되고 포함된다고 인지될 것이다. 예를 들면, 이러한 그룹은 또한  ,  또는  로 나타낼 수도 있다.

[0183] 특정 양태에서, 구아니디늄 활성화 관능성 그룹은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:



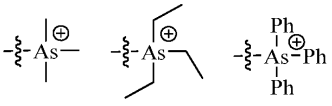
[0184]

[0185] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 설포늄 그룹 또는 아소늄 그룹이다:  또는  (여기서, R^8, R^9 및 R^{10}은 위에서 정의한 바와 같다).

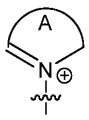
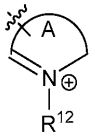
[0186] 특정 양태에서, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^9, R^{10} 및 R^{11}은 각각 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 페닐이다. 일부 양태에서, R^9, R^{10} 및 R^{11}은 각각 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴이다. 일부 양태에서, R^9, R^{10} 및 R^{11}은 각각 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다. 일부 양태에서, R^8과 R^9는 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 카보사이클, 임의로 치환된 3원 내지 14원 헤테로사이클, 임의로 치환된 C_6-C_{10} 아릴 및 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 환을 형성한다.

[0187] 특정 양태에서, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 메틸이다. 특정 양태에서, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 페닐이다.

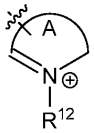
[0188] 특정 양태에서, 아소늄 활성화 관능성 그룹은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:



[0189] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 임의로 치환된 질소 함유 헤테로사이클이다. 특정 양태에서, 질소 함유 헤테로사이클은 방향족 헤테로사이클이다. 특정 양태에서, 임의로 치환된 질소 함유 헤테로사이클은 피리딘, 이미다졸, 피롤리딘, 피라졸, 퀴놀린, 티아졸, 디티아졸, 옥사졸, 트리아졸, 피라졸렘, 이속사졸, 이소티아졸, 테트라졸, 피라진, 티아진 및 트리아진으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

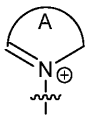
[0190] 일부 양태에서, 질소 함유 헤테로사이클은 4급화 질소원자를 포함한다. 특정 양태에서, 질소 함유 헤테로사이클은 이미늄 잔기, 예를 들면,  또는  를 포함한다. 특정 양태에서, 임의로 치환된 질소 함유 헤테로사이클은 피리디늄, 이미다졸륨, 피롤리디늄, 피라졸륨, 퀴놀리늄, 티아졸륨, 디티아졸륨, 옥사졸륨, 트리아졸륨, 이속사졸륨, 이소티아졸륨, 테트라졸륨, 피라지늄, 티아지늄 및 트리아지늄으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

[0191] 특정 양태에서, 질소 함유 헤테로사이클은 환 질소원자를 통하여 금속 착체에 연결된다. 일부 양태에서, 환 질소는 이에 대해 결합(attachment)이 형성되고, 이로써 4급화되며, 일부 양태에서, 금속 착체로의 연결(linkage)이 N-H 결합을 대신하며, 이에 따라 상기 질소원자가 중성으로 유지된다. 특정 양태에서, 임의로 치환된 N-연결된(linked) 질소 함유 헤테로사이클은 피리디늄 유도체이다. 특정 양태에서, 임의로 치환된 N-연결된 질소 함유 헤테로사이클은 이미다졸륨 유도체이다. 특정 양태에서, 임의로 치환된 N-연결된 질소 함유 헤테로사이클은 티아졸륨 유도체이다. 특정 양태에서, 임의로 치환된 N-연결된 질소 함유 헤테로사이클은 피리디늄 유도체이다.

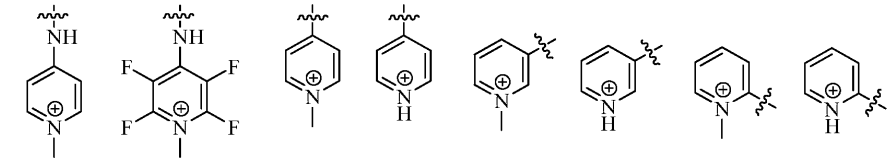


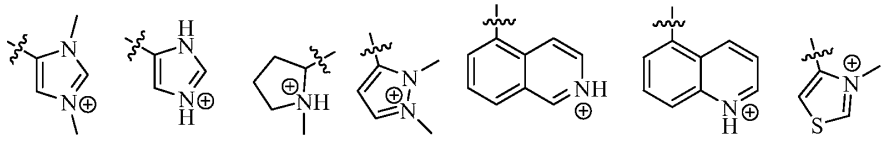
[0192] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 이다. 특정 양태에서, 환 A은 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴 그룹이다. 일부 양태에서, 환 A는 임의로 치환된 6원 헤테로아릴 그룹이다. 일부 양태에서, 환 A는 융합된 헤테로사이클의 환이다. 일부 양태에서, 환 A는 임의로 치환된 피리딜 그룹이다.

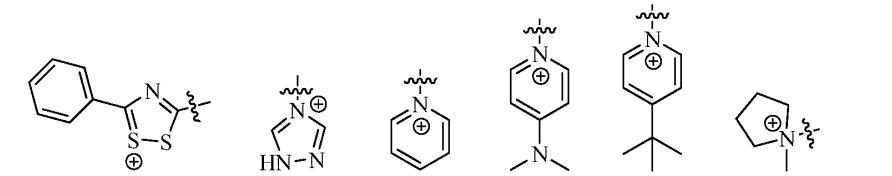
[0193] 일부 양태에서, R^{12}는 수소이다. 일부 양태에서, R^{12}는 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족 그룹이다. 일부 양태에서, R^{12}는 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^{12}는 임의로 치환된 페닐, 8원 내지 10원 아릴; 5원 내지 10원 헤테로아릴이다. 일부 양태에서, R^{12}는 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다. 일부 양태에서, R^{12}는 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족 그룹이다. 일부 양태에서, R^{12}는 네오펜틸이다. 일부 양태에서, R^{12}는 옥사이드 또는 하이드록실이다.

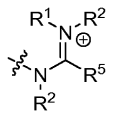
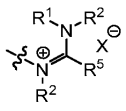
[0194] 일부 양태에서, Z가  인 경우, 환 A는 이미다졸, 옥사졸 또는 티아졸이 아니다.

[0195] 특정 양태에서, 질소 함유 헤테로사이클 활성화 관능성 그룹은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:

[0196] 

[0197] 

[0198] 

[0199] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은  또는  (여기서, R^1, R^2 및 R^5는 위에서 정의한 바와 같다)이다.

[0200] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 수소이다. 일부 양태에서는, R^1 및 R^2 중의 하나만 수소이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족, 5원 내지 14원 헤테로아릴, 페닐, 8원 내지 10원 아릴 및 3원 내지 7원 헤테로사이클릭으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로

부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다.

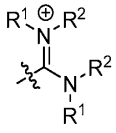
[0201] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-12} 지방족 및 C_{1-12} 헤테로지방족으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 페닐 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다.

[0202] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 임의로 치환된 페닐 또는 임의로 치환된 벤질이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 부틸이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 이소프로필이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 $-CF_2CF_3$이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 페닐이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 벤질이다.

[0203] 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2OC(R^y)_2-$ 및 $-C(R^y)_2NR^yC(R^y)_2-$으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-CH_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH_2OCH_2-$ 및 $-CH_2NR^yCH_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 불포화 링커 잔기를 형성한다. 일부 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 부분 불포화된다. 특정 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 융합된 폴리사이클릭 헤테로사이클을 포함한다.

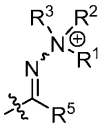
[0204] 특정 양태에서, R^5는 H이다. 특정 양태에서, R^5는 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이고, 일부 양태에서는 R^5는 임의로 치환된 6원 내지 14원 아릴이다. 특정 양태에서, R^5는 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이고, 일부 양태에서는, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 특정 양태에서, R^5는 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질이다. 일부 양태에서, R^5는 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^5는 $-CF_2CF_3$이다. 특정 양태에서, R^5는 임의로 치환된 페닐이다.

[0205] 일부 양태에서, 하나 이상의 R^1 또는 R^2 그룹은 R^5 및 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^5는 함께, 임의로 치환된 5원 또는 6원 환을 형성한다. 일부 양태에서, R^2와 R^5는 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 임의로 치환된 5원 또는 6원 환을 형성한다. 일부 양태에서, R^1, R^2 및 R^5는 함께, 임의로 치환된 융합 환 시스템을 형성한다. 일부 양태에서, R^1, R^2 및 R^5 중의 어떠한 조합에 의하여 형성된 이러한 환은 부분 불포화되거나 방향족이다.



[0206] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 (여기서, R^1 및 R^2는 위에서 정의한 바와 같다)이다.

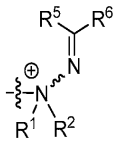
[0207] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 및 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 4원 내지 7원 헤테로사이클릭이다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 카보사이클, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 헤테로사이클, 임의로 치환된 C_6-C_{10} 아릴 및 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 환을 형성한다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸 또는 벤질로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 $-CF_2CF_3$이다.



[0208] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 (여기서, R^1, R^2, R^3 및 R^5는 위에서 정의한 바와 같다)이다.

[0209] 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 및 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 그룹이다. 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로, 임의로 치환된 4원 내지 7원 헤테로사이클릭이다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 카보사이클, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 헤테로사이클, 임의로 치환된 C_6-C_{10} 아릴 및 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸 또는 벤질로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로 $-CF_2CF_3$이다.

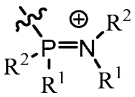
[0210] 특정 양태에서, R^5는 수소이다. 특정 양태에서, R^5는 C_{1-12} 지방족 및 C_{1-12} 헤테로지방족으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 그룹이다. 일부 양태에서, R^5는 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^5는 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다.



[0211] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 및 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 4원 내지 7원 헤테로사이클릭이다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 카보사이클, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 헤테로사이클, 임의로 치환된 C_6-C_{10} 아릴 및 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 환을 형성한다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸 또는 벤질로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 퍼플루오로이다.

일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 $-CF_2CF_3$이다.

[0212] 특정 양태에서, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐 및 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 그룹이다. 일부 양태에서, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로, 임의로 치환된 페닐 또는 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로, 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴이다. 일부 양태에서, R^3과 R^4는 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 카보사이클, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 헤테로사이클, 임의로 치환된 C_6-C_{10} 아릴 및 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 환을 형성한다. 일부 양태에서, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸 또는 벤질이다. 일부 양태에서, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 $-CF_2CF_3$이다.

[0213] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은  이다(여기서, R^1 및 R^2는 위에서 정의한 바와 같다).

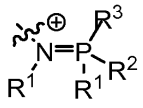
[0214] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 수소이다. 일부 양태에서는, R^1 및 R^2 중의 하나만 수소이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족, 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다.

[0215] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-12} 지방족 및 C_{1-12} 헤테로지방족으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 페닐 또는 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 페닐 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다.

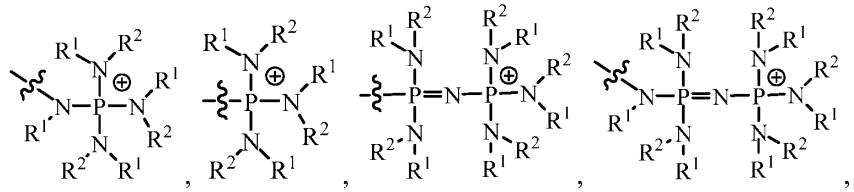
[0216] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 임의로 치환된 페닐 또는 임의로 치환된 벤질이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 부틸이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 이소프로필이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 $-CF_2CF_3$이다.

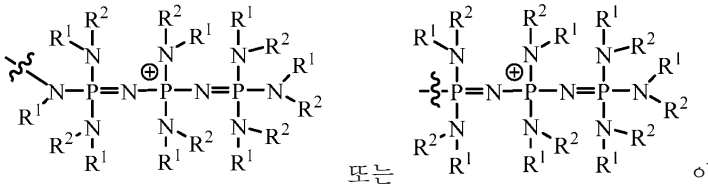
일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 페닐이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 벤질이다.

[0217] 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2OC(R^y)_2-$ 및 $-C(R^y)_2NR^yC(R^y)_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-CH_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH_2OCH_2-$ 및 $-CH_2NR^yCH_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 불포화 링커 잔기를 형성한다. 일부 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 부분 불포화된다. 특정 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 융합된 폴리사이클릭 헤테로사이클을 포함한다.

[0218] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은  이다. 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 및 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 그룹이다. 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로, 임의로 치환된 4원 내지 7원 헤테로사이클릭이다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 카보사이클, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 헤테로사이클, 임의로 치환된 C_6-C_{10} 아릴 및 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸 또는 벤질로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로 $-CF_2CF_3$이다.

[0219] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은

[0220] 

[0221]  또는 이다(여기서, R^1 및 R^2는 위에서 정의한 바와 같다).

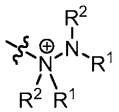
[0222] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 수소이다. 일부 양태에서는, R^1 및 R^2 중의 하나만 수소이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족, 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터

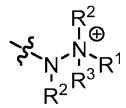
선택된 임의로 치환된 라디칼이다.

[0223] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-12} 지방족 및 C_{1-12} 헤테로지방족으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 페닐 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다.

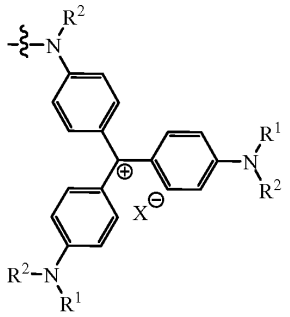
[0224] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 임의로 치환된 페닐 또는 임의로 치환된 벤질이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 둘 다 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 페닐 또는 벤질이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 부틸이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 이소프로필이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 $-CF_2CF_3$이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 페닐이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 벤질이다.

[0225] 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2C(R^y)_2C(R^y)_2-$, $-C(R^y)_2OC(R^y)_2-$ 및 $-C(R^y)_2NR^yC(R^y)_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 특정 양태에서, R^1과 R^2는 함께, $-CH_2-$, $-CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH_2OCH_2-$ 및 $-CH_2NR^yCH_2-$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 환 단편을 형성한다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 함께, 하나 이상의 추가의 헤테로원자를 임의로 함유하는 불포화 링커 잔기를 형성한다. 일부 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 부분 불포화된다. 특정 양태에서, 수득한 질소 함유 환은 융합된 폴리사이클릭 헤테로사이클을 포함한다.

[0226] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은  이다. 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 및 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 4원 내지 7원 헤테로사이클릭이다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 카보사이클, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 헤테로사이클, 임의로 치환된 C_6-C_{10} 아릴 및 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 환을 형성한다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸 또는 벤질로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 $-CF_2CF_3$이다.

[0227] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은  이다. 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 및 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 그룹

이다. 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로, 임의로 치환된 4원 내지 7원 헤테로사이클릭이다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 카보사이클, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 헤테로사이클, 임의로 치환된 C_6-C_{10} 아릴 및 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 환을 형성한다. 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-6} 지방족이다. 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸 또는 벤질로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로, 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1, R^2 및 R^3은 각각 독립적으로, $-CF_2CF_3$이다.

[0228] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은  이다(여기서, R^1 및 R^2는 위에서 정의한 바와 같다).

[0229] 특정 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 및 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 그룹이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 4원 내지 7원 헤테로사이클릭이다. 일부 양태에서, R^1과 R^2는 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 카보사이클, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 헤테로사이클, 임의로 치환된 C_6-C_{10} 아릴 및 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 환을 형성한다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸 또는 벤질로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 퍼플루오로이다. 일부 양태에서, R^1 및 R^2는 각각 독립적으로 $-CF_2CF_3$이다.

[0230] 특정 양태에서, X는 임의의 음이온이다. 특정 양태에서, X는 친핵체이다. 일부 양태에서, X는 에폭사이드를 개환시킬 수 있는 친핵체이다. 특정 양태에서, X는 부재한다. 특정 양태에서, X는 친핵성 리간드이다. 예시적인 친핵성 리간드는 이들로 제한하려는 것은 아니지만, $-OR^x$, $-SR^x$, $-O(C=O)R^x$, $-O(C=O)OR^x$, $-O(C=O)N(R^x)_2$, $-N(R^x)(C=O)R^x$, -NC, -CN, 할로(예: -Br, -I, -Cl), $-N_3$, $-O(SO_2)R^x$ 및 $-OPR^x_3$(여기서, R^x는 각각 독립적으로, 수소, 임의로 치환된 지방족, 임의로 치환된 헤테로지방족, 임의로 치환된 아릴 및 임의로 치환된 헤테로아릴로부터 선택된다)을 포함한다.

[0231] 특정 양태에서, X는 $-O(C=O)R^x$(여기서, R^x는 임의로 치환된 지방족, 불소화 지방족, 임의로 치환된 헤테로지방족, 임의로 치환된 아릴, 불소화 아릴 및 임의로 치환된 헤테로아릴로부터 선택된다)이다.

[0232] 예를 들면, 특정 양태에서, X는 $-O(C=O)R^x$(여기서, R^x는 임의로 치환된 지방족이다)이다. 특정 양태에서, X는 $-O(C=O)R^x$(여기서, R^x는 임의로 치환된 알킬 및 플루오로알킬이다)이다. 특정 양태에서, X는 $-O(C=O)CH_3$ 또는 $-O(C=O)CF_3$이다.

[0233] 추가로, 특정 양태에서, X는 $-O(C=O)R^x$(여기서, R^x는 임의로 치환된 아릴, 플루오로아릴 또는 헤테로아릴이다)이다. 특정 양태에서, X는 $-O(C=O)R^x$(여기서, R^x는 임의로 치환된 아릴이다)이다. 특정 양태에서, X는

$-O(C=O)R^x$(여기서, R^x는 임의로 치환된 페닐이다)이다. 특정 양태에서, X는 $-O(C=O)C_6H_5$ 또는 $-O(C=O)C_6F_5$이다.

[0234] 특정 양태에서, X는 $-OR^x$(여기서, R^x는 임의로 치환된 지방족, 임의로 치환된 헤테로지방족, 임의로 치환된 아릴 및 임의로 치환된 헤테로아릴로부터 선택된다)이다.

[0235] 예를 들면, 특정 양태에서, X는 $-OR^x$(여기서, R^x는 임의로 치환된 아릴이다)이다. 특정 양태에서, X는 $-OR^x$(여기서, R^x는 임의로 치환된 페닐이다)이다. 특정 양태에서, X는 $-OC_6H_5$ 또는 $-OC_6H_2(2,4-NO_2)$이다.

[0236] 특정 양태에서, X는 할로이다. 특정 양태에서, X는 -Br이다. 특정 양태에서, X는 -Cl이다. 특정 양태에서, X는 -I이다.

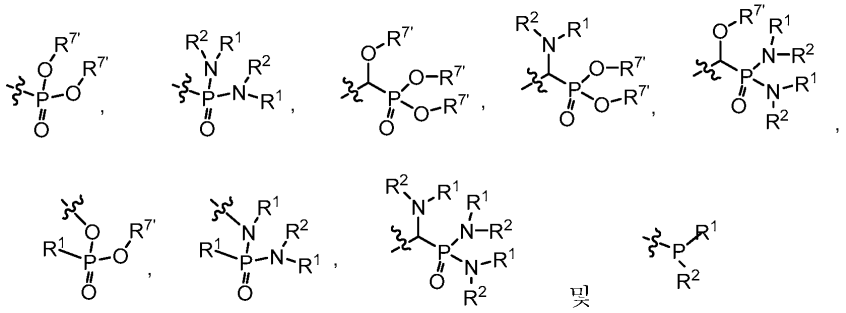
[0237] 특정 양태에서, X는 $-O(SO_2)R^x$이다. 특정 양태에서, X는 -OTs이다. 특정 양태에서, X는 $-OSO_2Me$이다. 특정 양태에서, X는 $-OSO_2CF_3$이다. 일부 양태에서, X는 2,4-디니트로페놀레이트 음이온이다.

[0238] **I.c. 인 함유 활성화 그룹**

[0239] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹 Z는 인 함유 그룹이다.

[0240] 특정 양태에서, 인 함유 관능성 그룹은 포스핀($-PR^y_2$); 포스핀 옥사이드 $-P(O)R^y_2$; 포스피나이트 $P(OR^7)R^y_2$; 포스포나이트 $P(OR^7)_2R^y$; 포스파이트 $P(OR^7)_3$; 포스피네이트 $OP(OR^7)R^y_2$; 포스포네이트; $OP(OR^7)_2R^y$; 포스페이트 $-OP(OR^7)_3$; 포스포늄 염($[-PR^y_3]^+$)[여기서, 인 함유 관능성 그룹은 어떠한 이용 가능한 위치를 통해서라도 금속 착체에 연결될 수 있다(예를 들면, 인원자를 통한 또는 일부 경우 산소원자를 통한 직접 연결)]으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

[0241] 특정 양태에서, 인 함유 관능성 그룹은



[0242] , 또는 이들 중 2개 이상의 조합으로 이루어진 그룹[여기서, R^1 및 R^2는 위에서 정의한 바와 같고,

[0243] $R^{7'}$는 각각 독립적으로, 수소, 또는 하이드록실 보호 그룹이거나, 또는 C_{1-20} 아실; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고, 여기서, 2개의 $R^{7'}$ 그룹은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 헤테로원자를 임의로 함유하는 임의로 치환된 환을 형성하고, R^7 그룹은 R^1 또는 R^2 그룹과 함께, 임의로 치환된 환을 형성한다]으로부터 선택된다.

[0244] 일부 양태에서, 인 함유 관능성 그룹은 문헌[참조: The Chemistry of Organophosphorus Compounds. Volume 4. Ter- and Quinquevalent Phosphorus Acids and their Derivatives. The Chemistry of Functional Group

Series Edited by Frank R. Hartley (Cranfield University, Cranfield, U.K.). Wiley: New York. 1996. ISBN 0-471-95706-2]에 기재된 것을 포함하며, 상기 문헌 전체는 본원에서 참조로 인용된다.

[0245] $*-(X)_b-[(R^6R^7R^8P)^+]_n\ Q^{n-}$

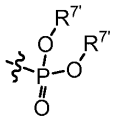
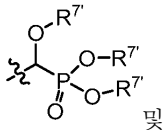
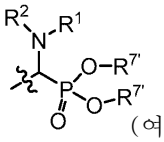
[0246] [여기서, X는 -O-, -N= 또는 $-NR^z$-이고,

[0247] b는 1 또는 0이고,

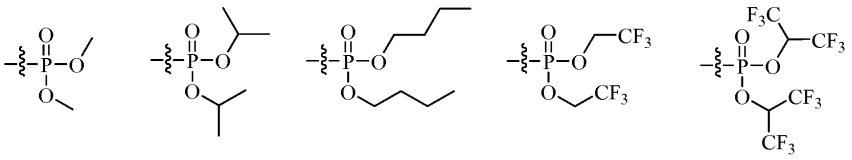
[0248] R^6, R^7 및 R^8은 각각 독립적으로 존재하거나 부재하며, 존재하는 경우, 임의로 치환된 C_1-C_{20} 지방족, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 C_8-C_{14} 아릴, 임의로 치환된 3원 내지 14원 헤테로사이클릭, 임의로 치환된 5원 내지 14원 헤테로아릴, 할로겐, =O, $-OR^z$, $=NR^z$ 및 $N(R^z)_2$(여기서, R^z는 수소이거나, 임의로 치환된 C_1-C_{20} 지방족, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 8원 내지 14원 아릴, 임의로 치환된 3원 내지 14원 헤테로사이클릭 또는 임의로 치환된 5원 내지 14원 헤테로아릴이다)로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택되고,

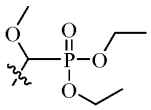
[0249] Q는 임의의 음이온이고,

[0250] n은 1 내지 4의 정수이다]

[0251] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 포스포네이트 그룹이다:  ,  및  (여기서, R^1, R^2 및 $R^{7'}$는 위에서 정의한 바와 같다).

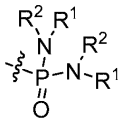
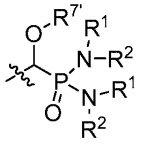
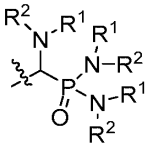
[0252] 특정 양태에서, 포스포네이트 활성화 관능성 그룹은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:





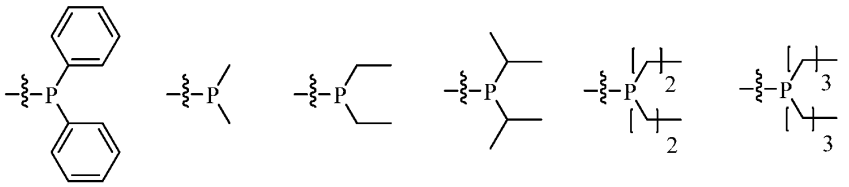
[0253]

[0254] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 포스폰 디아미드 그룹이다:

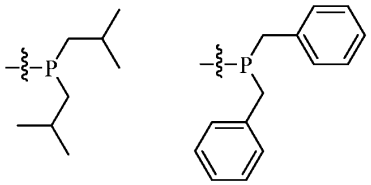
[0255]  ,  또는  (여기서, R^1, R^2 및 $R^{7'}$는 위에서 정의한 바와 같다). 특정 양태에서, 포스폰 디아미드 중의 각각의 R^1 및 R^2 그룹은 메틸이다.

[0256] 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹은 포스핀 그룹이다:  (여기서, R^1 및 R^2는 위에서 정의한 바와 같다).

[0257] 특정 양태에서, 포스핀 활성화 관능성 그룹은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:



[0258]



[0259] II. 링커 잔기

[0260] 위에서 기재한 바와 같이, 각각의 활성화 잔기 $\text{---}\!\!\sim\!\!\sim(Z)_m$은 위에서 기재한 바와 같은 하나 이상의 활성화 관능성 그룹 Z에 커플링되는 링커 "$\text{---}\!\!\sim\!\!\sim$"이며, m은 단일 링커 잔기에 존재하는 활성화 관능성 그룹의 수를 나타낸다.

[0261] 위에서 주목한 바와 같이, 제시된 금속 착체에 테터링된 하나 이상의 활성화 잔기 $\text{---}\!\!\sim\!\!\sim(Z)_m$이 존재할 수 있고, 유사하게, 각각의 활성화 잔기 자체는 하나 이상의 활성화 관능성 그룹 Z를 함유할 수 있다. 특정 양태에서, 각각의 활성화 잔기는 활성화 관능성 그룹만을 함유한다(즉, m = 1). 일부 양태에서, 각각의 활성화 잔기는 하나 초과의 활성화 관능성 그룹을 함유한다(즉, m > 1). 특정 양태에서, 활성화 잔기는 2개의 활성화 관능성 그룹을 함유한다(즉, m = 2). 특정 양태에서, 활성화 잔기는 3개의 활성화 관능성 그룹을 함유한다(즉, m = 3). 특정 양태에서, 활성화 잔기는 4개의 활성화 관능성 그룹을 함유한다(즉, m = 4). 하나 초과의 활성화 관능성 그룹이 활성화 잔기에 존재하는 특정 양태에서, 이들은 모두 동일한 관능성 그룹이다. 하나 초과의 활성화 관능성 그룹이 활성화 잔기에 존재하는 일부 양태에서, 활성화 관능성 그룹의 2개 이상은 상이하다.

[0262] 특정 양태에서, 각각의 링커 잔기 $\text{---}\!\!\sim\!\!\sim$는 하나 이상의 탄소원자 및 N, O, S, Si, B 및 P로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 원자를 임의로 포함하는 1 내지 30개의 원자를 함유한다.

[0263] 특정 양태에서, 링커는 임의로 치환된 C_{2-30} 지방족 그룹이고, 여기서, 하나 이상의 메틸렌 단위는 $-NR^y-$, $-N(R^y)C(O)-$, $-C(O)N(R^y)-$, $-O-$, $-C(O)-$, $-OC(O)-$, $-C(O)O-$, $-S-$, $-SO-$, $-SO_2-$, $-C(=S)-$, $-C(=NR^y)-$ 또는 $-N=N-$에 의하여 임의로 그리고 독립적으로 대체되고, 여기서, R^y는 각각 독립적으로 -H이거나, 또는 C_{1-6} 지방족 3원 내지 7원 헤테로사이클릭, 페닐, 및 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다. 특정 양태에서, 링커 잔기는 할로겐, $-NO_2$, -CN, $-SR^y$, $-S(O)R^y$, $-S(O)_2R^y$, $-NR^yC(O)R^y$, $-OC(O)R^y$, $-CO_2R^y$, -NCO, $-N_3$, $-OR^7$, $-OC(O)N(R^y)_2$, $-N(R^y)_2$, $-NR^yC(O)R^y$ 및 $-NR^yC(O)OR^y$로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 잔기로 치환된 C_4-C_{12} 지방족 그룹이고, 여기서, R^y는 -H이거나, 또는 C_{1-6} 지방족 3원 내지 7원 헤테로사이클릭, 페닐, 및 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이다.

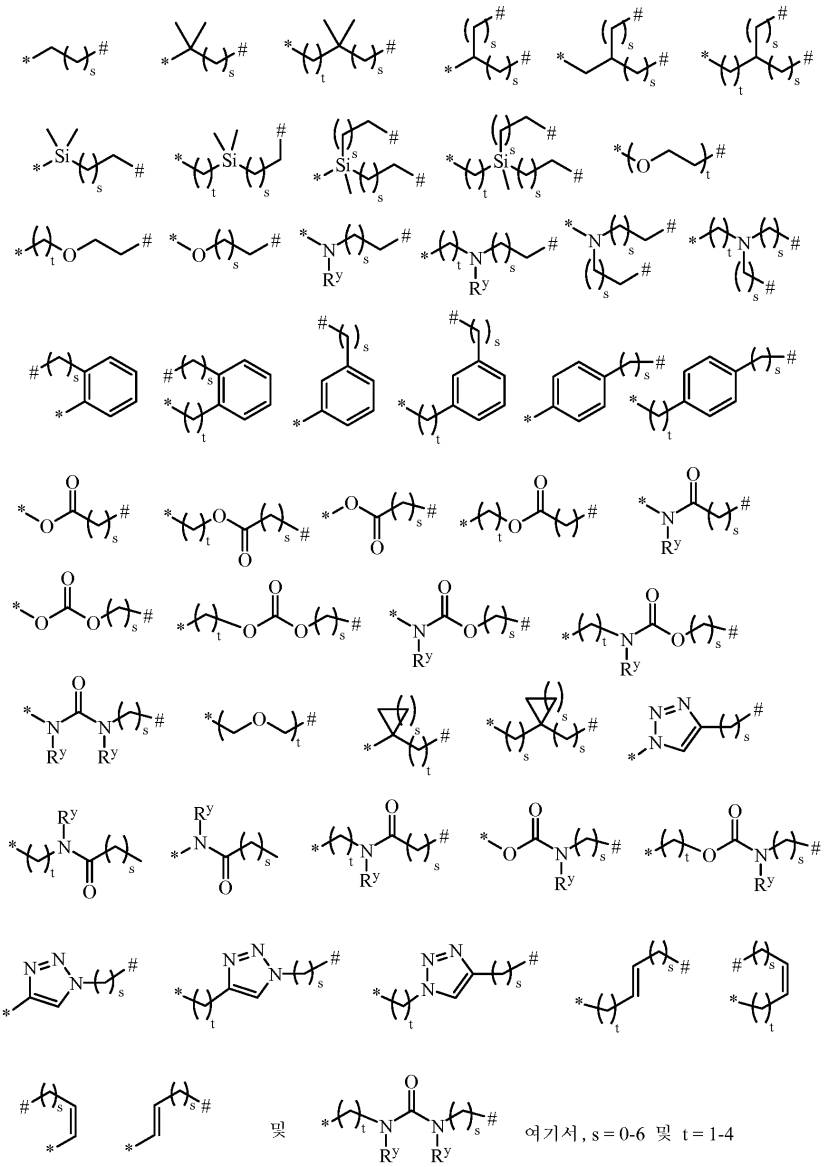
[0264] 특정 양태에서, 링커 잔기는 임의로 치환된 C_3-C_{30} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, 링커는 임의로 치환된 C_{4-24} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, 링커 잔기는 임의로 치환된 C_4-C_{20} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, 링커 잔기는 임의로 치환된 C_4-C_{12} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, 링커는 임의로 치환된 C_{4-10} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, 링커는 임의로 치환된 C_{4-8} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, 링커 잔기는 임의로 치환된 C_4-C_6 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, 링커 잔기는 임의로 치환된 C_6-C_{12} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, 링커

잔기는 임의로 치환된 C_8 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, 링커 잔기는 임의로 치환된 C_7 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, 링커 잔기는 임의로 치환된 C_6 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, 링커 잔기는 임의로 치환된 C_5 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, 링커 잔기는 임의로 치환된 C_4 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, 링커 잔기는 임의로 치환된 C_3 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, 링커 잔기 중의 지방족 그룹은 임의로 치환된 직쇄 알킬 쇄이다. 특정 양태에서, 지방족 그룹은 임의로 치환된 분지된 알킬 쇄이다. 일부 양태에서, 링커 잔기는 $-C(R^aR^b)$에 의하여 대체된 하나 이상의 메틸렌 그룹(여기서, R^a 및 R^b는 각각 독립적으로 C_1-C_4 알킬 그룹이다)을 갖는 C_4 내지 C_{20} 알킬 그룹이다. 특정 양태에서, 링커 잔기는 하나 이상의 gem-디메틸 치환된 탄소원자를 포함하는 탄소수 4 내지 30의 지방족 그룹으로 이루어진다.

[0265] 특정 양태에서, 링커 잔기는 포화 또는 부분 불포화 카보사이클릭, 아릴, 헤테로사이클릭 또는 헤테로아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 임의로 치환된 사이클릭 엘리먼트(element)를 포함한다. 특정 양태에서, 링커 잔기는 치환된 사이클릭 엘리먼트로 이루어지며, 일부 양태에서, 사이클릭 엘리먼트는 링커와, 링커 잔기의 다른 부분을 포함하는 하나 이상의 비-환 헤테로원자 또는 임의로 치환된 지방족 그룹의 일부이다.

[0266] 일부 양태에서, 링커 잔기는 하나 이상의 활성화 관능성 그룹이 금속 착체의 금속 원자 부근에 위치하도록 하기에 충분한 길이를 갖는다. 특정 양태에서, 링커 잔기에 구조적 제약이 따라서 금속 착체의 금속 중심 부근의 하나 이상의 활성화 관능성 그룹의 배치 및 배향을 조절한다. 특정 양태에서, 이러한 구조적 제약은 사이클릭 잔기, 바이사이클릭 잔기, 브릿징된 사이클릭 잔기 및 트리사이클릭 잔기로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 일부 양태에서, 이러한 구조적 제약은 비환식 입체 상호 작용의 결과이다. 특정 양태에서, 이러한 구조적 제약은 시스 이중 결합, 트랜스 이중 결합, 시스 알렌(allene), 트랜스 알렌 및 삼중 결합으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 일부 양태에서, 이러한 구조적 제약은 스피로사이클릭 환, gem 디메틸 그룹, gem 디에틸 그룹 및 gem 디페닐 그룹과 같은 동일 자리에 분포된 그룹을 포함하는 치환된 탄소로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 양태에서, 이러한 구조적 제약은 헤테로원자 함유 관능성 그룹, 예를 들면, 설폭사이드, 아미드 및 옥심으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

[0267] 특정 양태에서, 링커 잔기는 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:



[0268] 및 여기서, s = 0-6 및 t = 1-4

[0269] (여기서, *는 리간드의 결합 부위를 나타내고, 각각의 #은 활성화 관능성 그룹의 결합 부위를 나타낸다)

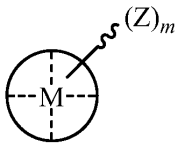
[0270] 일부 양태에서, s는 0이다. 일부 양태에서, s는 1이다. 일부 양태에서, s는 2이다. 일부 양태에서, s는 3이다. 일부 양태에서, s는 4이다. 일부 양태에서, s는 5이다. 일부 양태에서, s는 6이다.

[0271] 일부 양태에서, t는 1이다. 일부 양태에서, t는 2이다. 일부 양태에서, t는 3이다. 일부 양태에서, t는 4이다.

[0272] **III. 금속 착체**

[0273] 위에서 주목한 바와 같이, 본 발명은 다좌배위자 리간드에 배위 결합된 금속 원자 및 다좌배위자 리간드에 테터링된 하나 이상의 활성화 잔기를 포함하는 금속 착체를 포함한다. 특정 양태에서, 제공된 금속 착체는 화학식 1의 구조를 갖는다:

[0274] 화학식 1

[0275] 

[0276] 위의 화학식 1에서,

[0277]  은 다좌배위자 리간드에 배위 결합된 금속 원자이다.

[0278] **III.a. 금속 원자**

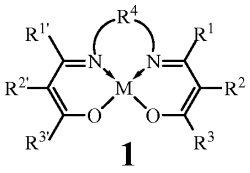
[0279] 특정 양태에서, M은 주기율표 3 내지 13족으로부터 선택된 금속 원자이다. 특정 양태에서, M은 주기율표 5 내지 12족으로부터 선택된 전이 금속이다. 특정 양태에서, M은 주기율표 4 내지 11족으로부터 선택된 전이 금속이다. 특정 양태에서, M은 주기율표 5 내지 10족으로부터 선택된 전이 금속이다. 특정 양태에서, M은 주기율표 7 내지 9족으로부터 선택된 전이 금속이다. 일부 양태에서, M은 Cr, Mn, V, Fe, Co, Mo, W, Ru, Al 및 Ni로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 일부 양태에서, M은 코발트, 크롬, 알루미늄, 티탄, 루테늄 및 망간으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 금속 원자이다. 일부 양태에서, M은 코발트이다. 일부 양태에서, M은 크롬이다. 일부 양태에서, M은 알루미늄이다.

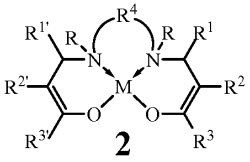
[0280] 특정 양태에서, 금속 착체는 아연, 코발트, 크롬, 알루미늄, 티탄, 루테늄 또는 망간 착체이다. 특정 양태에서, 금속 착체는 알루미늄 착체이다. 일부 양태에서, 금속 착체는 크롬 착체이다. 일부 양태에서, 금속 착체는 아연 착체이다. 특정 일부 양태에서, 금속 착체는 티탄 착체이다. 일부 양태에서, 금속 착체는 루테늄 착체이다. 특정 양태에서, 금속 착체는 망간 착체이다. 특정 양태에서, 금속 착체는 코발트 착체이다. 금속 착체가 코발트 착체인 특정 양태에서, 코발트 금속은 3+의 산화 상태를 갖는다(즉, Co(III)). 일부 양태에서, 코발트 금속은 2+의 산화 상태를 갖는다.

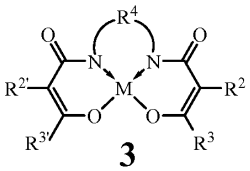
[0281] **III.b. 리간드**

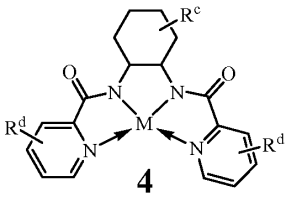
[0282] 일부 양태에서, 금속 착체  는 단일 사좌배위자 리간드에 배위 결합된 금속 원자를 포함하고, 일부 양태에서, 금속 착체는 복수의 개별적인 리간드를 함유하는 킬레이트를 포함한다. 특정 양태에서, 금속 착체는 2개의 이좌배위자 리간드를 함유한다. 일부 양태에서, 금속 착체는 삼좌배위자 리간드를 함유한다.

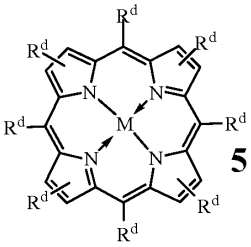
[0283] 다양한 양태에서, 본 발명의 금속 착체에 적합한 사자배위자 리간드는 이들로 제한되지는 않지만, 살렌 유도체(1), 살렌 리간드의 유도체(2), 비스-2-하이드록시벤즈아미도 유도체(3), 트로스트(Trost) 리간드의 유도체(4), 포르피린 유도체(5), 테트라벤조포르피린 리간드의 유도체(6), 코롤 리간드의 유도체(7), 프탈로시아네이트 유도체(8) 및 디벤조테트라메틸테트라아자[14]아눌렌(tmtaa) 유도체(9) 또는 (9')를 포함한다.

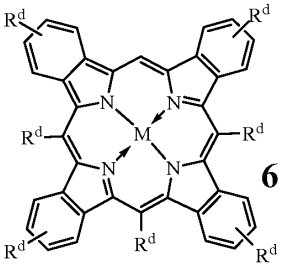

1

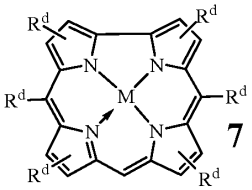

2

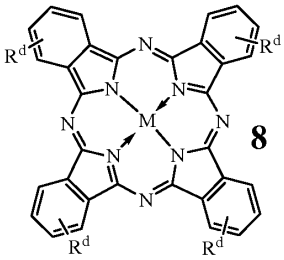

3

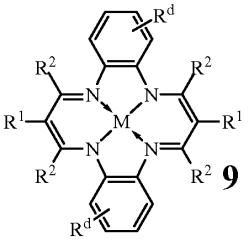

4

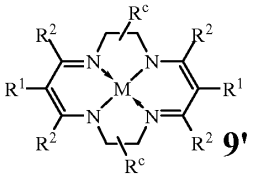

5


6

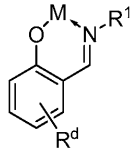

7


8

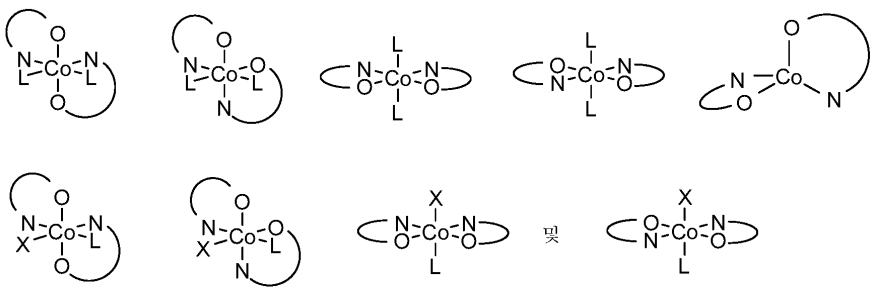

9


9'

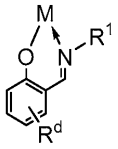
[0284]

[0285] 일부 양태에서, 금속 착체와 배위 결합된 금속 다좌배위자 리간드는 복수의 개별적인 리간드를 포함할 수 있다. 일부 양태에서, 금속 착체는 2개의 이좌배위자 리간드를 포함한다. 특정 양태에서, 이러한 이좌배위자 리간드는 화학식  의 구조(여기서, R^d 및 R^1은 위에서 정의한 바와 같다)를 가질 수 있다. 2개의 이러한 리간드를 갖는 금속 착체는 몇 개의 기하학적 구조 중의 하나를 채택할 수 있고, 당해 기재 내용은 이러한 변화를 포함한다.

[0286] 특정 양태에서, 2개의 이좌배위자 리간드를 포함하는 금속 착체는



[0287] 로 이루어진 그룹으로부터 선택

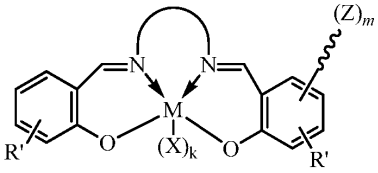
된 구조를 가질 수 있다(여기서, 각각의  는 리간드  를 나타낸다).

[0288] 특정 양태에서, 사좌배위자 리간드는 살렌 리간드이다. 특정 양태에서, 금속 착체는 메탈로살레네이트이다. 특정 양태에서, 금속 착체는 코발트 살렌 착체이다. 특정 양태에서, 금속 착체는 크롬 살렌 착체이다. 일부 양태에서, 금속 착체는 알루미늄 살렌 착체이다.

[0289] 특정 양태에서, 하나 이상의 활성화 잔기는 살렌 리간드의 살리실알데히드-유도된 부분의 페닐 환의 탄소원자에 테터링된다. 특정 양태에서, 하나 이상의 활성화 잔기는 포르피린 리간드의 탄소원자에 테터링된다. 특정 양태에서, 하나 이상의 활성화 잔기는 포르피린 리간드의 피롤-탄소원자에 테터링된다. 특정 양태에서, 하나 이상의 활성화 잔기는 포르피린 리간드의 피롤 환 사이의 브릿지를 형성하는 탄소원자에 테터링된다.

[0290] 특정 양태에서, 하나 이상의 활성화 잔기는 화학식 I에 나타낸 바와 같이, 살렌 리간드의 살리실알데히드-유도된 부분의 페닐 환 하나만의 하나 이상의 탄소원자에 테터링된다:

[0291] 화학식 I

[0292] 

[0293] 위의 화학식 I에서,

[0294] M은 금속 원자이고,

[0295] X는 에폭사이드를 개환시킬 수 있는 친핵체이고,

[0296] k는 0 내지 2를 포함하는 정수이고,

[0297] R'는 페닐 환에 임의로 존재하는 하나 이상의 치환기이고, 각각의 R'는 할로겐, $-NO_2$, -CN, $-SR^y$, $-S(O)R^y$, $-S(O)_2R^y$, $-NR^yC(O)R^y$, $-OC(O)R^y$, $-CO_2R^y$, -NCO, $-N_3$, $-OR^7$, $-OC(O)N(R^y)_2$, $-N(R^y)_2$, $-NR^yC(O)R^y$, $-NR^yC(O)OR^y$로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택되거나; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고, 여기서, 2개 이상의 인접한 R' 그룹은 함께, 0 내지 4개의 헤테로원자를 함유하는 임의로 치환된 포화, 부분 불포화 또는 방향족 5원 내지 12원 환을 형성할 수 있고,

[0298] R^y는 -H이거나, C_{1-6} 지방족, 3원 내지 7원 헤테로사이클릭, 페닐 및 8원 내지 10원 아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고,

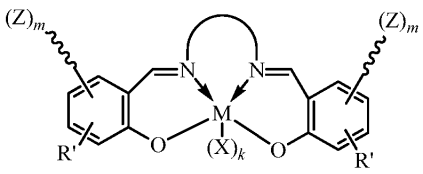
[0299]  는 살렌 리간드의 디아민 부분의 2개의 질소원자를 연결하는 임의의 치환된 잔기[여기서,  는 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으

로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환; 및 임의로 치환된 C_{2-20} 지방족 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 선택되고; 하나 이상의 메틸렌 단위는 $-NR^{y}-$, $-N(R^{y})C(O)-$, $-C(O)N(R^{y})-$, $-OC(O)N(R^{y})-$, $-N(R^{y})C(O)O-$, $-OC(O)O-$, $-O-$, $-C(O)-$, $-OC(O)-$, $-C(O)O-$, $-S-$, $-SO-$, $-SO_2-$, $-C(=S)-$, $-C(=NR^{y})-$, $-C(=NOR^{y})-$ 또는 $-N=N-$에 의하여 임의로 그리고 독립적으로 대체된다]이고,

[0300] $-\!\!\sim\!\!-(Z)_m$ 은 하나 이상의 활성화 잔기[여기서, "$-\!\!\sim\!\!-$"은 C, O, N, S 및 Si로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 원자를 함유하는 공유 링커이고; Z는 활성화 관능성 그룹이고; m은 각각의 활성화 잔기에 존재하는 개별적인 활성화 관능성 그룹의 수를 나타내는 1 내지 4의 정수이다]이다.

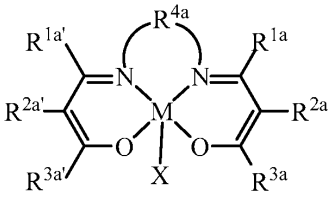
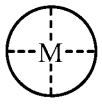
[0301] 특정 양태에서, 살렌 리간드의 살리실알데히드-유도된 부분 둘 다는 하나 이상의 화학식 II의 활성화 잔기를 갖는다:

[0302] 화학식 II

[0303] 

[0304] 위의 화학식 II에서,

[0305] M, X, k, R',  및 $-\!\!\sim\!\!-(Z)_m$ 은 위에서 정의한 바와 같다.

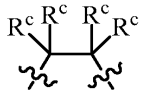
[0306] 일부 양태에서, 제공된 금속 착체는 화학식  의 구조를 갖는  잔기[여기서, M은 금속 원자이고,

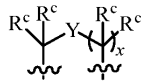
[0307] R^{1a}, $R^{1a'}$, R^{2a}, $R^{2a'}$, R^{3a} 및 $R^{3a'}$는 독립적으로 $-\!\!\sim\!\!-(Z)_m$ 그룹, 수소, 할로겐, $-OR$, $-NR_2$, $-SR$, $-CN$, $-NO_2$, $-SO_2R$, $-SOR$, $-SO_2NR_2$; $-CNO$, $-NRSO_2R$, $-NCO$, $-N_3$, $-SiR_3$이거나; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고,

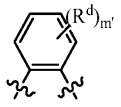
[0308] R은 각각 독립적으로, 수소, 아실; 카바모일; 아릴알킬; 페닐, 8원 내지 10원 아릴; C_{1-12} 지방족; C_{1-12} 헤테로지방족; 5원 내지 10원 헤테로아릴; 4원 내지 7원 헤테로사이클릴; 산소 보호 그룹 및 질소 보호 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이거나, 동일한 질소원자 상의 2개의 R은 질소와 함께, 3원 내지 7원 헤테로사이클릭 환을 형성하고,

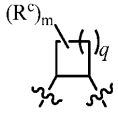
[0309] [$R^{2a'}$와 $R^{3a'}$], [R^{2a}와 R^{3a}], [R^{1a}와 R^{2a}] 및 [$R^{1a'}$와 $R^{2a'}$] 중의 어느 것이라도 이들이 결합된 탄소원자와 함께, 다시 하나 이상의 R^{20a} 그룹으로 치환될 수 있는 하나 이상의 환을 형성할 수 있고,

[0310] R^{4a}는

[0311] a)  ,

[0312] b)  ,

[0313] c)  및

[0314] d)  로 이루어진 그룹으로부터 선택되고,

[0315] R^c는 각각 독립적으로,  그룹, 수소, 할로겐, -OR, $-NR_2$, -SR, -CN, $-NO_2$, $-SO_2R$, -SOR, $-SO_2NR_2$; -CNO, $-NRSO_2R$, -NCO, $-N_3$, $-SiR_3$이거나; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고,

[0316] 2개 이상의 R^c 그룹은 이들이 결합된 탄소원자들 및 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 환을 형성하고,

[0317] 2개의 R^c 그룹이 동일한 탄소원자에 결합될 때, 이는 이들이 결합된 탄소원자와 함께, 3원 내지 8원 스피로사이클릭 환, 카보닐, 옥심, 하이드라존, 이민으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 잔기를 형성하고,

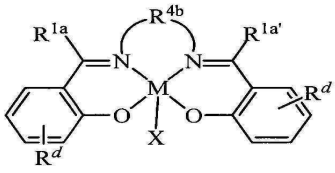
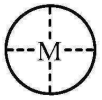
[0318] X는 에폭사이드를 개환시킬 수 있는 친핵체이고,

[0319] Y는 -NR-, -N(R)C(O)-, -C(O)NR-, -O-, -C(O)-, -OC(O)-, -C(O)O-, -S-, -SO-, $-SO_2-$, $-SiR_2-$, -C(=S)-, -C(=NR)- 또는 -N=N-; 폴리에테르; C_3 내지 C_8 치환되거나 치환되지 않은 카보사이클; 및 C_1 내지 C_8 치환되거나 치환되지 않은 헤테로사이클로 이루어진 그룹으로부터 선택된 2가 링커이고,

[0320] m'는 0 또는 1 내지 4의 정수이고,

[0321] q는 0 또는 1 내지 4의 정수이고,

[0322] x는 0, 1 또는 2이다]를 포함한다.

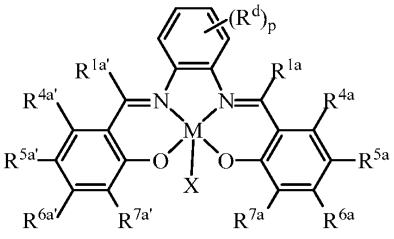
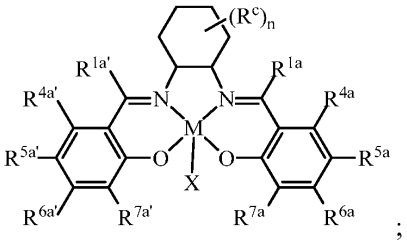
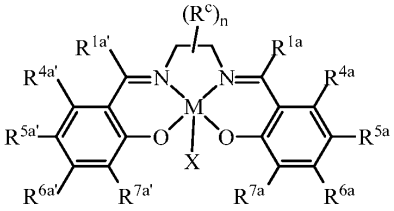
[0323] 일부 양태에서, 제공된 금속 착체는 화학식  의 구조를 갖는  잔기[여기서, M, R^{1a}, $R^{1a'}$, R^d, 및 X는 상기 정의한 바와 같고, R^{4b}는 상기 R^{4a}와 동일한 정의는 갖는다]를 포함한다.

[0324] 일부 양태에서, [R^{2a}와 R^{3a}] 및 [$R^{2a'}$와 $R^{3a'}$] 중의 하나 이상은 함께, 환을 형성한다. 일부 양태에서, [R^{2a}와 R^{3a}] 및 [$R^{2a'}$와 $R^{3a'}$]는 둘 다 함께, 환을 형성한다. 일부 양태에서, [R^{2a}와 R^{3a}] 및 [$R^{2a'}$와 $R^{3a'}$]에 의하여 형성된 환

은 치환된 페닐 환이다.

[0325] 특정 양태에서, R^{1a}, $R^{1a'}$, R^{2a}, $R^{2a'}$, R^{3a} 및 $R^{3a'}$ 중의 하나 이상은 독립적으로 ~~Z 그룹이다.

[0326] 제공된 금속 착체의 특정 양태에서,  잔기는


;

;


[0327] 및 로 이루어진 그룹{여기서, M은 금속 원자이고,

[0328] R^{4a}, $R^{4a'}$, R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{6a}, $R^{6a'}$, R^{7a} 및 $R^{7a'}$는 각각 독립적으로, ~~Z 그룹, 수소, 할로겐, -OR, $-NR_2$, -SR, -CN, $-NO_2$, $-SO_2R$, -SOR, $-SO_2NR_2$; -CNO, $-NRSO_2R$, -NCO, $-N_3$, $-SiR_3$이거나; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고,

[0329] [R^{1a}와 R^{4a}], [$R^{1a'}$와 $R^{4a'}$] 및 임의의 2개의 인접한 R^{4a}, $R^{4a'}$, R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{6a}, $R^{6a'}$, R^{7a} 및 $R^{7a'}$ 그룹은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성하고,

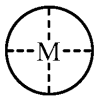
[0330] n은 0 또는 1 내지 8의 정수이고,

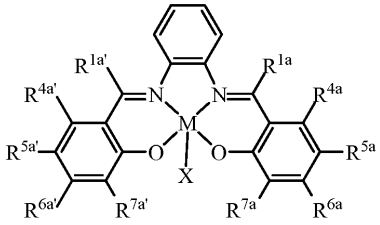
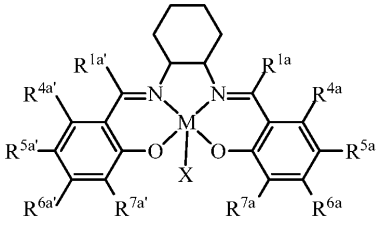
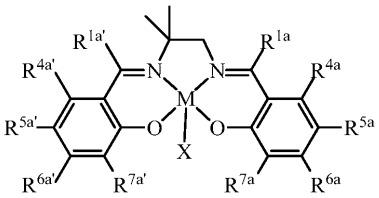
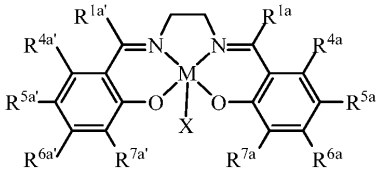
[0331] p는 0 또는 1 내지 4의 정수이다}으로부터 선택된 구조를 갖는다.

[0332] 일부 양태에서, M은 Co이다.

[0333] 일부 양태에서, R^{1a}, $R^{1a'}$, R^{4a}, $R^{4a'}$, R^{6a} 및 $R^{6a'}$는 각각 -H이다. 일부 양태에서, R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{7a} 및 $R^{7a'}$는 각각 임의로 치환된 C_1-C_{12} 지방족이다. 일부 양태에서, R^{4a}, $R^{4a'}$, R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{6a}, $R^{6a'}$, R^{7a} 및 $R^{7a'}$는 각각 독립적으로, -H, $-SiR_3$; 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, 2급-부틸, t-부틸, 이소아밀, t-아밀, t-헥실 및 트리틸로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 일부 양태에서, R^{1a}, $R^{1a'}$, R^{4a}, $R^{4a'}$, R^{6a} 및 $R^{6a'}$는 각각 -H이다. 일부 양태에서, R^{7a}는 -H; 메틸; 에틸; n-프로필; i-프로필; n-부틸; 2급-부틸; t-부틸; 이소아밀; t-아밀; t-헥실; 및 트리틸로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 일부 양태에서, R^{5a} 및 R^{7a}는 -H; 메틸; 에틸; n-프로필; i-프로필; n-부틸; 2급-부틸; t-부틸; 이소아밀; t-아밀; t-헥실; 및 트리틸로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택된다. 특정 양태에서, R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{7a} 및 $R^{7a'}$ 중의 하나 이상은 ~~Z 그룹이다. 일부 양태에서, R^{5a} 및 $R^{5a'}$는

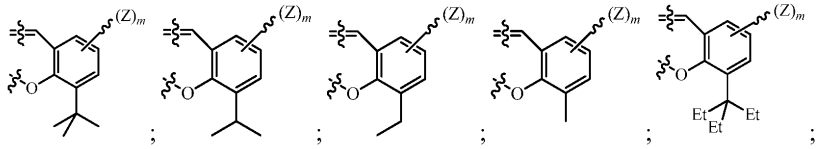
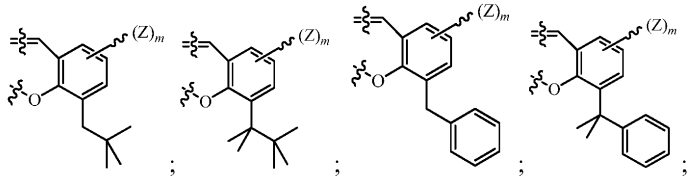
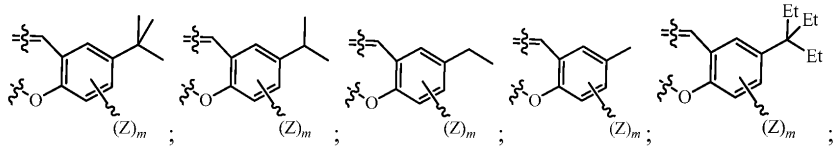
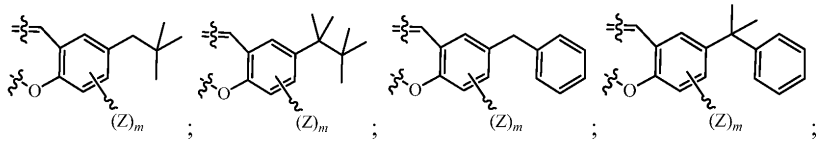
—〰 Z 그룹이다.

[0334] 제공된 금속 착체의 특정 양태에서,  잔기는

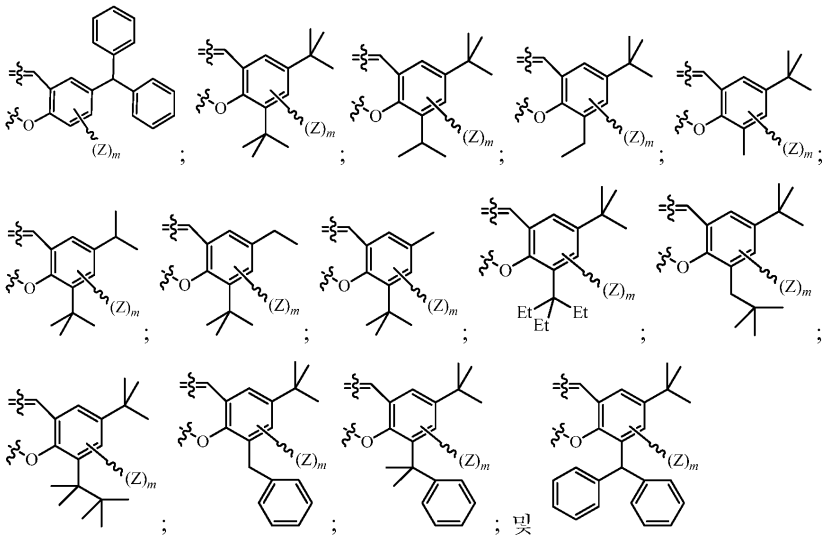

;

;


; 및

[0335] 로 이루어진 그룹으로부터 선택된 구조를 갖는다.

[0336] 위에 기재한 화학식을 갖는 착체의 특정 양태에서, 촉매의 살리실알데히드-유도된 부분을 포함하는 하나 이상의 페닐 환은

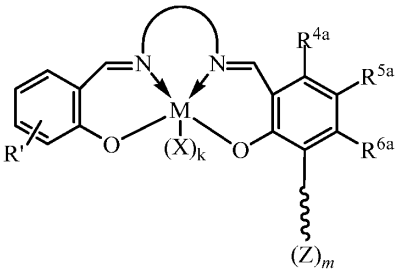

;

;

;


[0337]

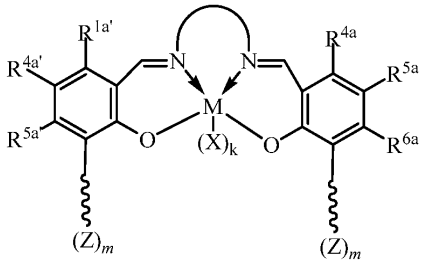
[0338] 
로 이루어진 그룹[여기서, $\sim\!\!\sim (Z)_m$ 은 살리실알데히드 유도된 페닐 환의 임의의 하나 이상의 치환되지 않은 부분에 결합될 수 있는 하나 이상의 독립적으로 정의된 활성화 잔기를 나타낸다]으로부터 독립적으로 선택된다.

[0339] 특정 양태에서, 화학식 IIIa 및 IIIb에서와 같이 살렌 리간드의 살리실알데히드 유도된 페닐 환 중의 하나 또는 둘 다의 금속 결합된 산소 치환기에 오르토 위치로 테터링된 활성화 잔기가 존재한다:

[0340] 화학식 IIIa

[0341] 

[0342] 화학식 IIIb

[0343] 

[0344] 위의 화학식 IIIa 및 IIIb에서,

[0345] M, X, k, R',  및 $\sim\!\!\sim (Z)_m$ 은 위에서 정의한 바와 같고,

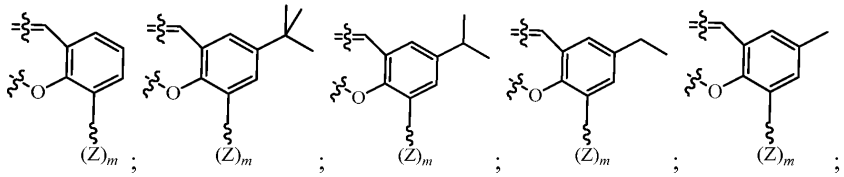
[0346] R^{4a}, $R^{4a'}$, R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{6a} 및 $R^{6a'}$는 각각 독립적으로, $\sim\!\!\sim Z$ 그룹, 수소, 할로겐, -OR, $-NR_2$, -SR, -CN, $-NO_2$, $-SO_2R$, -SOR, $-SO_2NR_2$; -CNO, $-NRSO_2R$, -NCO, $-N_3$, $-SiR_3$이거나; C_{1-20} 지방족; C_{1-20} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소,

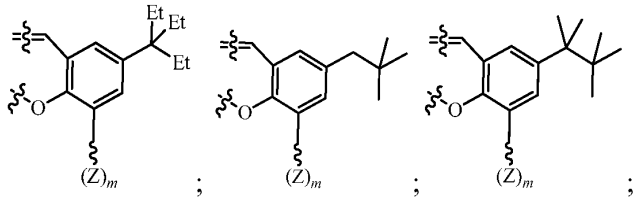
산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고,

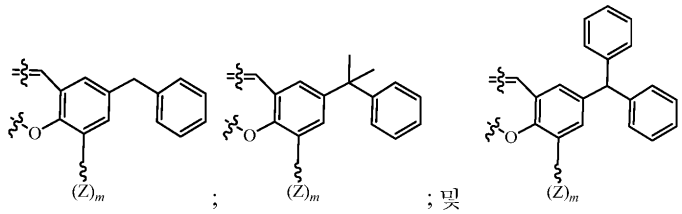
[0347] 임의의 2개의 인접한 R^{4a}, $R^{4a'}$, R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{6a} 및 $R^{6a'}$ 그룹은 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다.

[0348] 화학식 IIIa 또는 IIIb의 화합물의 특정 양태에서, R^{4a}, $R^{4a'}$, R^{6a} 및 $R^{6a'}$는 각각 수소이고, R^{5a}, $R^{5a'}$는 독립적으로, 임의로 치환된 C_1-C_{20} 지방족이다.

[0349] 착체 IIIa 및 IIIb의 특정 양태에서, 촉매의 살리실알데히드-유도된 부분을 포함하는 페닐 환 하나 이상은

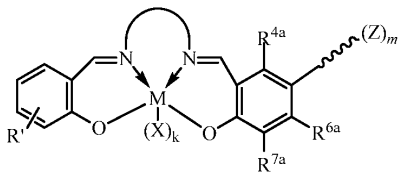
[0350] 

[0351] 

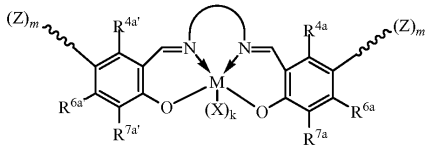
[0352]  로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택된다.

[0353] 특정 양태에서, 화학식 IVa 및 IVb의 구조에서와 같이 살렌 리간드의 살리실알데히드 유도된 페닐 환 중의 하나 또는 둘 다의 페놀성 산소에 파라 위치로 테터링된 활성화 잔기가 존재한다:

[0354] 화학식 IVa

[0355] 

[0356] 화학식 IVb

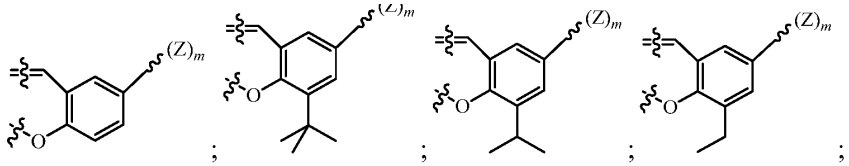
[0357] 

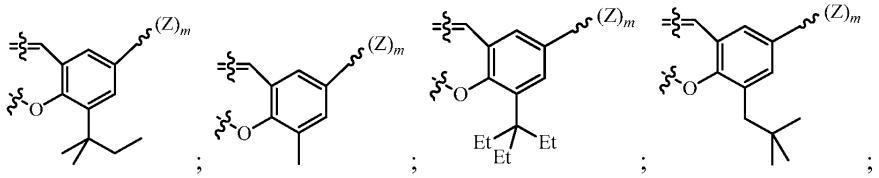
[0358] 위의 화학식 IVa 및 IVb에서,

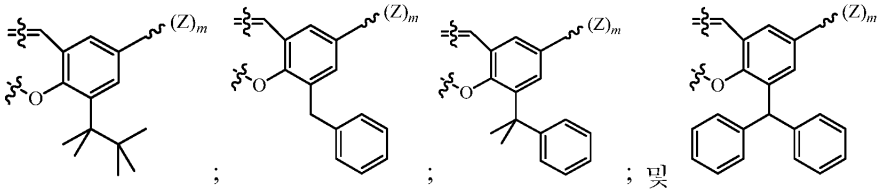
[0359] M, X, k, R', R^{4a}, $R^{4a'}$, R^{6a}, $R^{6a'}$, R^{7a}, $R^{7a'}$,  및 은 위에서 정의한 바와 같다.

[0360] 화학식 IVa 또는 IVb의 화합물의 특정 양태에서, R^{4a}, $R^{4a'}$, R^{6a} 및 $R^{6a'}$는 수소이고, R^{7a} 및 $R^{7a'}$는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_1-C_{20} 지방족이다.

[0361] 화학식 IVa 또는 IVb의 촉매의 특정 양태에서, 촉매의 살리실알데히드-유도된 부분을 포함하는 페닐 환 중의 하나 이상은

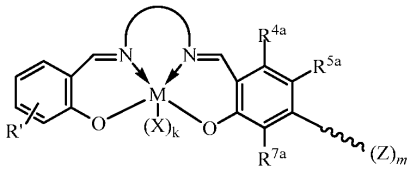
[0362] 

[0363] 

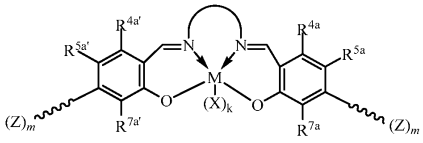
[0364]  로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택된다.

[0365] 일부 양태에서, 화학식 Va 또는 Vb에서와 같은 살렌 리간드의 살리실알데히드 유도된 페닐 환 중의 하나 또는 둘 다의 이민 치환기에 파라 위치로 테터링된 활성화 잔기가 존재한다:

[0366] 화학식 Va

[0367] 

[0368] 화학식 Vb

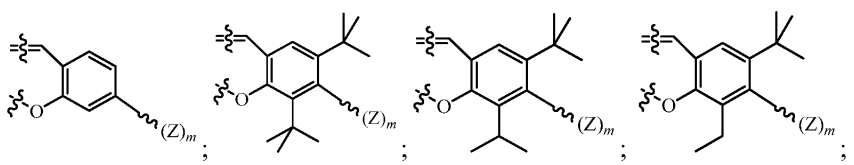
[0369] 

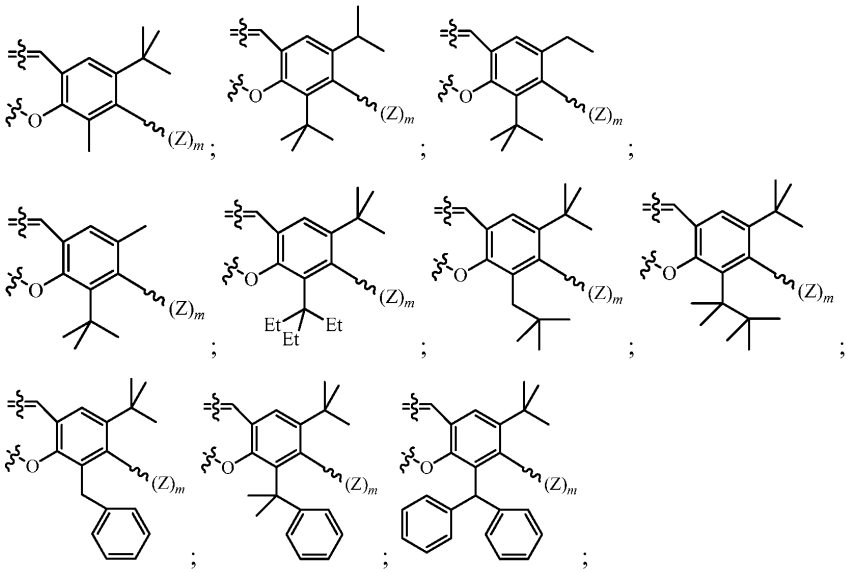
[0370] 위의 화학식 Va 또는 Vb에서,

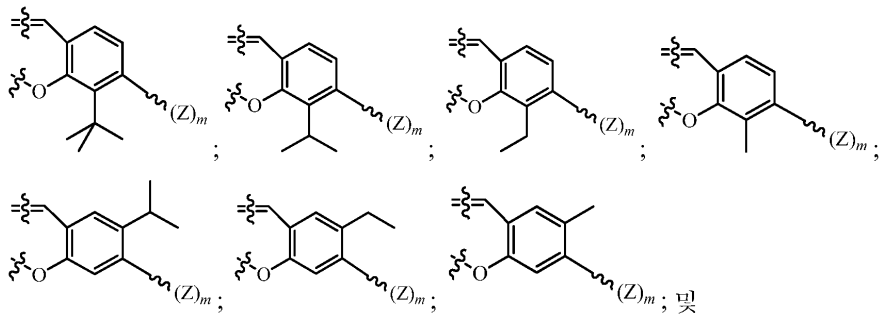
[0371] M, X, k, R', R^{4a}, $R^{4a'}$, R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{7a}, $R^{7a'}$,  및  은 위에서 정의한 바와 같다.

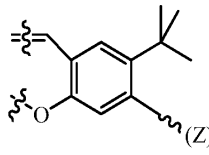
[0372] 화학식 Va 또는 Vb의 화합물의 특정 양태에서, 각각의 R^4 및 R^{4a}는 수소이고, R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{7a}, $R^{7a'}$는 각각 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 C_1-C_{20} 지방족이다.

[0373] 화학식 Va 및 Vb의 촉매의 특정 양태에서, 촉매의 살리실알데히드-유도된 부분을 포함하는 페닐 환 하나 이상은

[0374] 

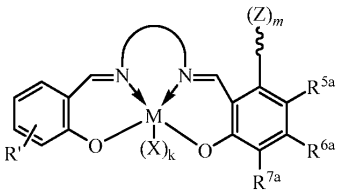
[0375] 

[0376] 

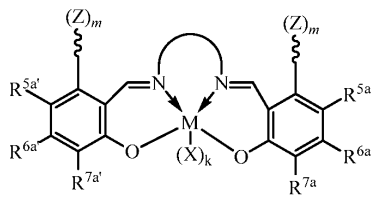
[0377] 
로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택된다.

[0378] 일부 양태에서, 화학식 VIa 및 VIb에서와 같은 살렌 리간드의 살리실알데히드 유도된 페닐 환 중의 하나 또는 둘 다의 이민 치환기에 오르토 위치로 테터링된 활성화 잔기가 존재한다:

[0379] 화학식 VIa

[0380] 

[0381] 화학식 VIb

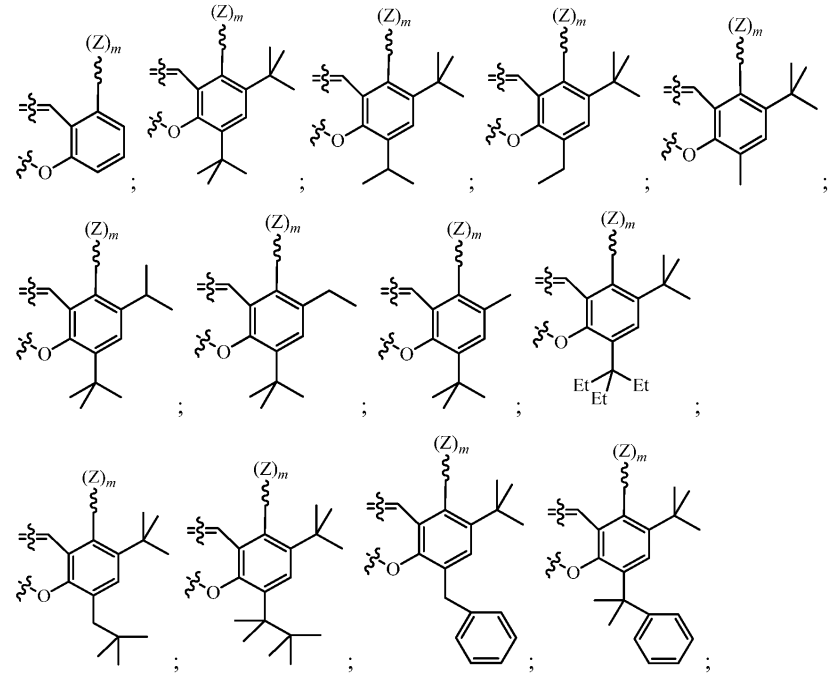
[0382] 

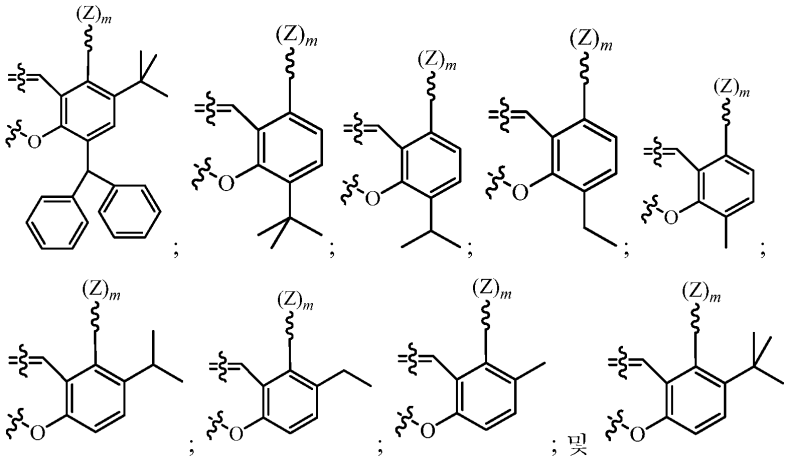
[0383] 위의 화학식 VIa 및 VIb에서,

[0384] X, k, M, R', R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{6a}, $R^{6a'}$, R^{7a}, $R^{7a'}$,  및  은 위에서 정의한 바와 같다.

[0385] 화학식 VIa 또는 VIb의 특정 양태에서, R^{6a} 및 $R^{6a'}$는 각각 수소이고, R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{7a} 및 $R^{7a'}$는 각각 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 C_1-C_{20} 지방족이다.

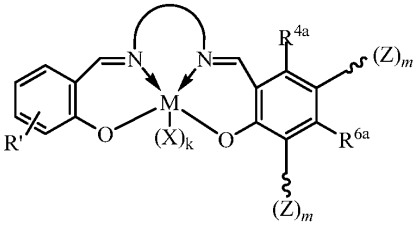
[0386] 화학식 VIa 및 VIb의 특정 양태에서, 촉매의 살리실알데히드-유도된 부분을 포함하는 페닐 환 하나 이상은

[0387] 

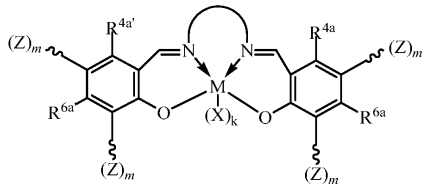
[0388]  로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택된다.

[0389] 일부 양태에서, 화학식 VIIa 및 VIIb에서와 같은 살렌 리간드의 살리실알데히드 유도된 페닐 환 중의 하나 또는 둘 다의 페놀성 산소에 오르토 및 파라 위치로 테터링된 활성화 잔기가 존재한다:

[0390] 화학식 VIIa

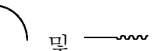
[0391] 

[0392] 화학식 VIIb



[0393]

[0394] 위의 화학식 VIIa 및 VIIb에서,

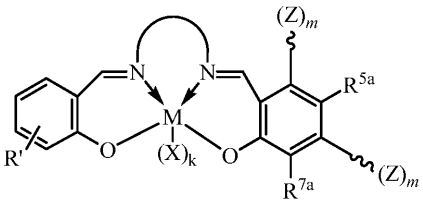
[0395] M, X, k, R', R^{4a}, $R^{4a'}$, R^{6a}, $R^{6a'}$,  및  은 위에서 정의한 바와 같다.

[0396] 화학식 VIa 또는 VIb의 화합물의 특정 양태에서, R^{6a}, $R^{6a'}$, R^{4a} 및 $R^{4a'}$는 각각 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 C_1-C_{20} 지방족이다.

[0397] 화학식 VIIa 또는 VIIb의 화합물의 특정 양태에서, R^{6a}, $R^{6a'}$, R^{4a} 및 $R^{4a'}$는 각각 수소이다.

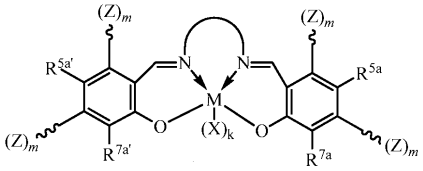
[0398] 일부 양태에서, 화학식 VIIIa 및 VIIIb에서와 같은 살렌 리간드의 살리실알데히드 유도된 페닐 환 중의 하나 또는 둘 다의 이민 치환기에 오르토 및 파라 위치로 테터링된 활성화 잔기가 존재한다:

[0399] 화학식 VIIIa



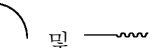
[0400]

[0401] 화학식 VIIIb



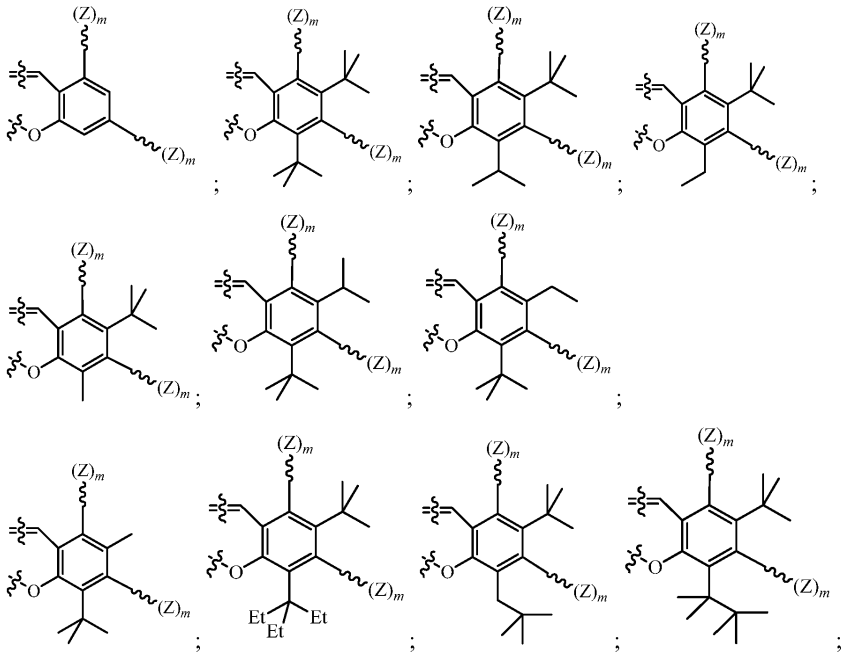
[0402]

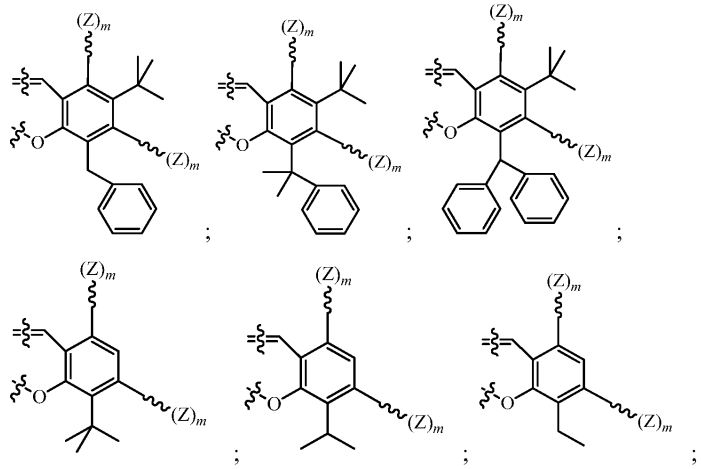
[0403] 위의 화학식 VIIIa 및 VIIIb에서,

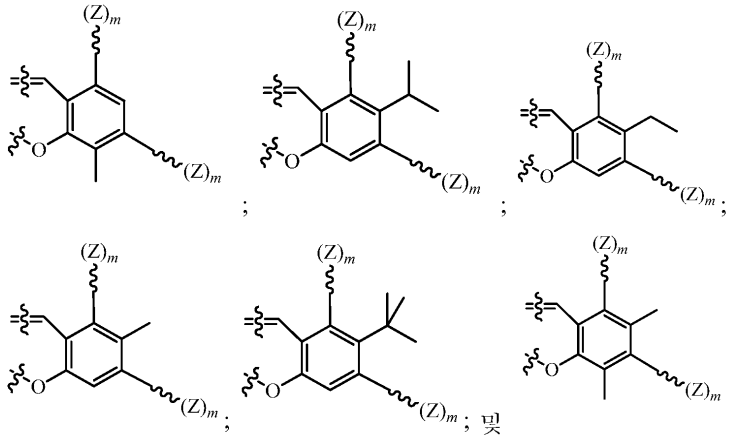
[0404] X, k, M, R', R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{7a}, $R^{7a'}$,  및  은 위에서 정의한 바와 같다.

[0405] 화학식 VIIIa 또는 VIIIb의 화합물의 특정 양태에서, R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{7a} 및 $R^{7a'}$는 각각 독립적으로, 임의로 수소 또는 치환된 C_1-C_{20} 지방족이다.

[0406] 본 발명의 특정 양태인, 위의 화학식 VIIIa 또는 VIIIb의 구조를 갖는 촉매에서, 촉매의 살리실알데히드-유도된 부분을 포함하는 페닐 환 하나 이상은

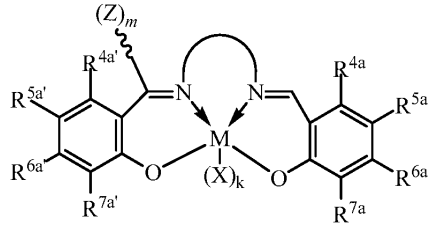
[0407] 

[0408] 

[0409] 
로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택된다.

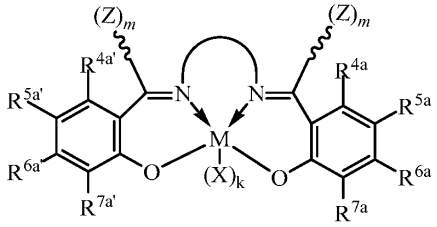
[0410] 일부 양태에서, 화학식 IXa 및 IXb에서와 같은 살렌 리간드의 이민 탄소에 테터링된 활성화 잔기가 존재한다:

[0411] 화학식 IXa



[0412]

[0413] 화학식 IXb



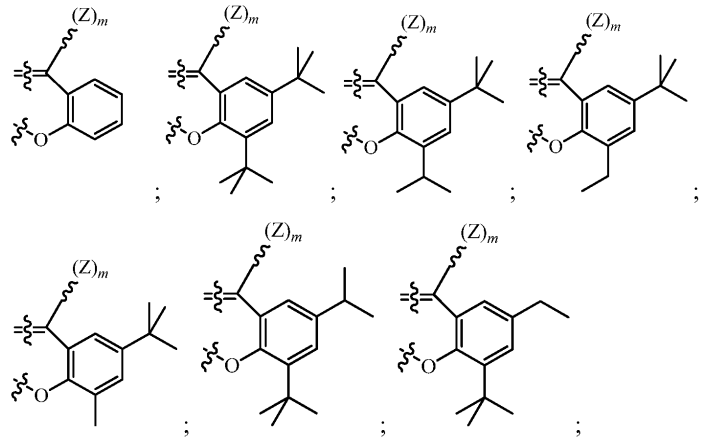
[0414]

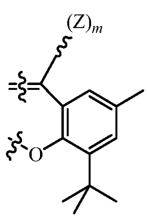
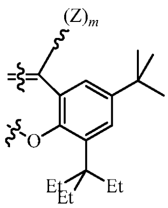
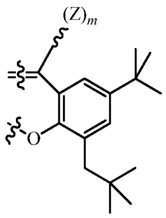
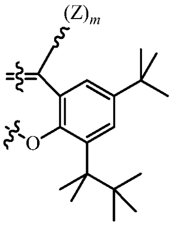
[0415] 위의 화학식 IXa 및 IXb에서,

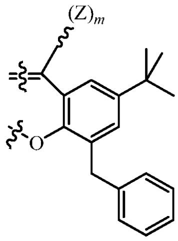
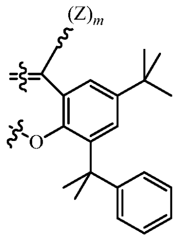
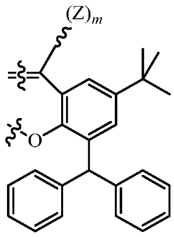
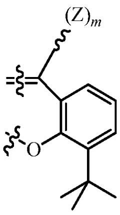
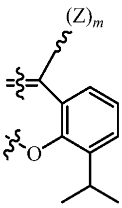
[0416] M, X, k, R^{4a}, $R4^{a'}$, R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{7a}, $R^{7a'}$,  및  은 위에서 정의한 바와 같으며, 단 살렌 리간드에 결합된 활성화 잔기의 원자는 탄소원자이다.

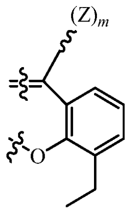
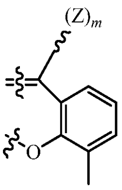
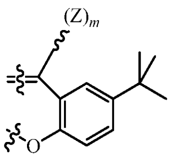
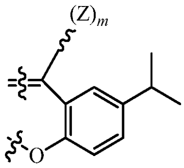
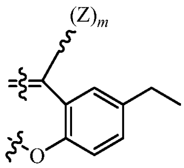
[0417] 화학식 IXa 또는 IXb의 화합물의 특정 양태에서, R^{4a}, $R^{4a'}$, R^{6a} 및 $R^{6a'}$는 각각 수소이고, R^{5a}, $R^{5a'}$, R^{7a} 및 $R^{7a'}$는 각각 독립적으로 수소이거나, 임의로 치환된 C_1-C_{20} 지방족이다.

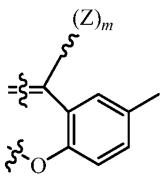
[0418] 본 발명의 특정 양태인, 위의 화학식 IXa 또는 IXb의 구조의 금속 착체에서, 촉매의 살리실알데히드-유도된 부분을 포함하는 페닐 환 하나 이상은

[0419] 

 ;  ;  ;  ;

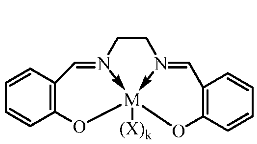
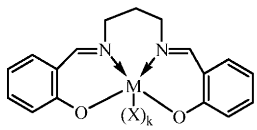
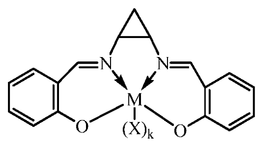
 ;  ;  ;  ;  ;

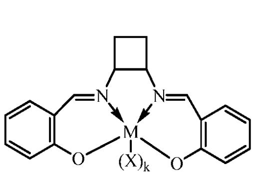
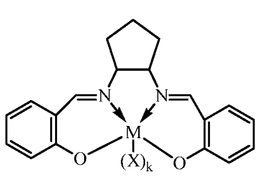
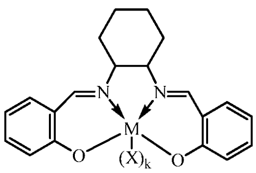
[0420]  ;  ;  ;  ;  ; 및

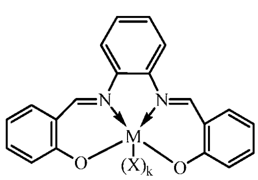
[0421]  로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택된다.

[0422] 위에서 나타낸 바와 같이, 코어 살렌 구조 내의 살리실알데히드로부터 유도된 2개의 페닐 환은 동일할 필요는 없다. 위의 화학식 Ia 내지 IXb에 명백하게 나타내지 않았지만, 촉매가 2개의 환 각각에서 상이한 위치에 결합된 활성화 잔기를 가질 수 있고, 이러한 화합물은 특히 본 발명의 영역 내에 포함됨을 이해하여야 한다. 추가로, 활성화 잔기는 리간드의 다수의 부분에 존재할 수 있으며, 예를 들면, 활성화 잔기는 디아민 브릿지에 그리고 동일한 촉매의 하나 또는 둘 다의 페닐 환에 존재할 수 있다.

[0423] 특정 양태에서, 위의 화학식 Ia 내지 IXb의 촉매의 살렌 리간드 코어는 어떠한 이용 가능한 위치라도 독립적으로 위에서 기재한 바와 같은 하나 이상의 R-그룹 또는 하나 이상의 활성화 잔기로 치환될 수 있는 아래에 나타낸 그룹으로부터 선택된다.

 ;  ;  ;

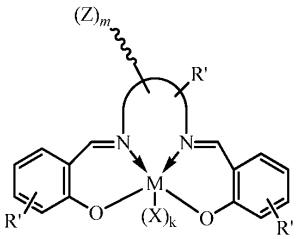
 ;  ;  ;

[0424] 및 

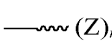
[0425] (여기서, M, X 및 k는 위에서 정의한 바와 같다).

[0426] 일부 양태에서, 하나 이상의 활성화 잔기는 화학식 X에 나타낸 바와 같이, 살렌 리간드의 디아민 유도된 부분에 테터링된다:

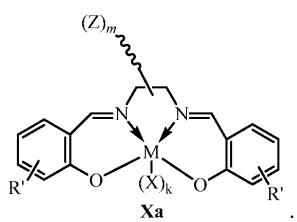
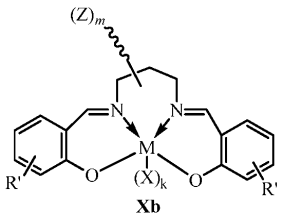
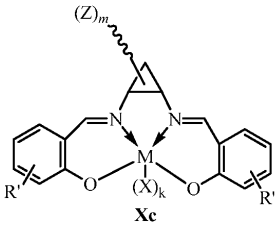
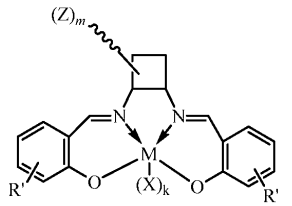
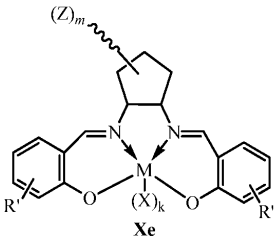
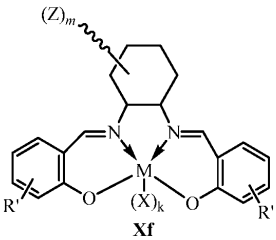
[0427] 화학식 X

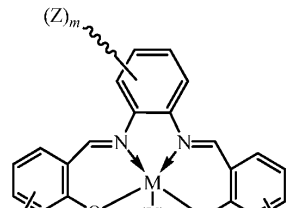
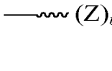
[0428] 

[0429] 위의 화학식 X에서,

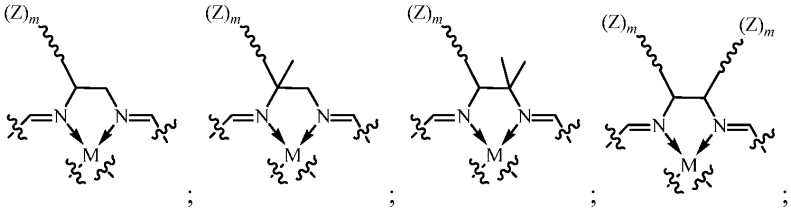
[0430] M, X, k, R',  및  은 위에서 정의한 바와 같다.

[0431] 특정 양태에서, 화학식 X의 살렌 리간드는

[0432]  Xa ;  Xb ;  Xc ;
 Xd ;  Xe ;  Xf ;

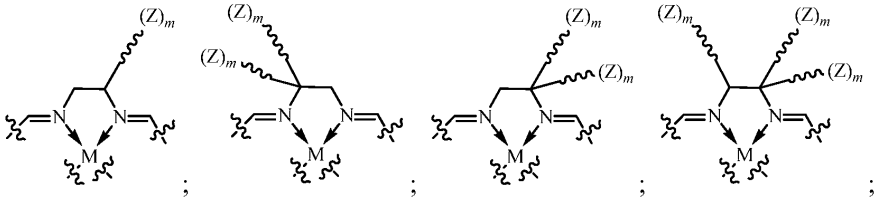
[0433]  Xg 로 이루어진 임의로 치환된 잔기(여기서, M, X, k, R' 및  은 위에서 정의한 바와 같다)로부터 선택된다.

[0434] 특정 양태에서, 화학식 Xa의 촉매의 디아민 브릿지는



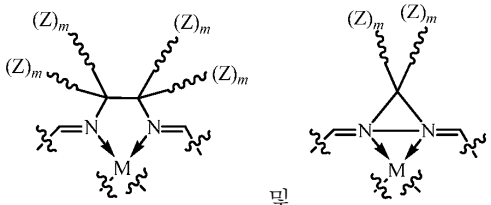
;

[0435]



;

[0436]



및

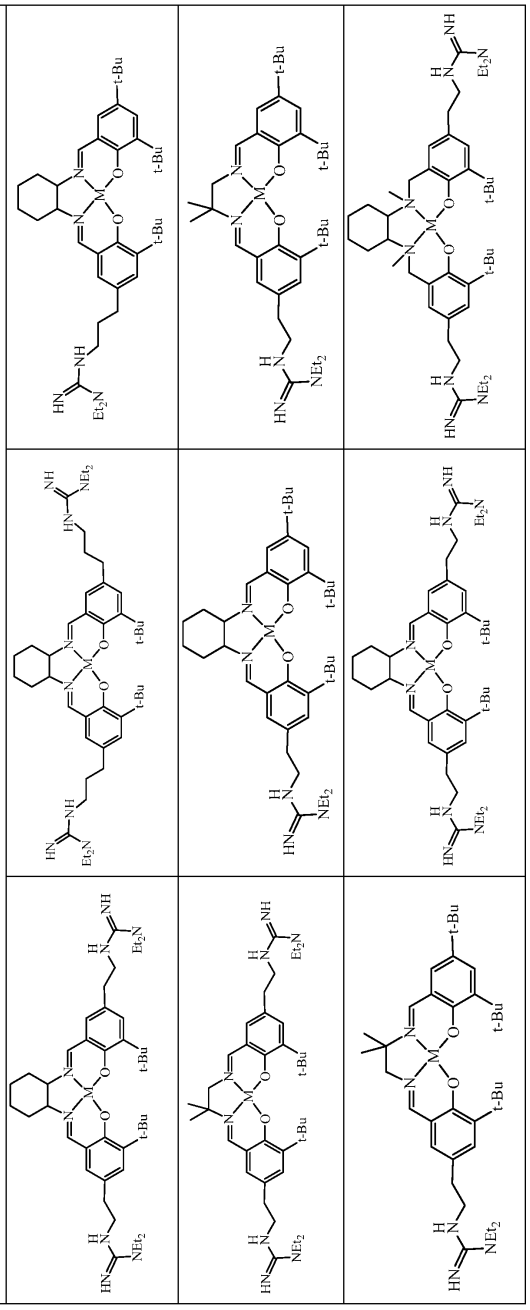
로 이루어진 그룹(여기서, M 및 $\sim\!\!\sim(Z)_m$은 위에서 정의한 바와 같다)으로부터 선택된 임의로 치환된 잔기이다.

[0437] 특정 양태에서, 본 발명의 메탈로살레네이트 착체는 이들로 제한되지는 않지만, 아래 표 1의 화합물을 포함한다:

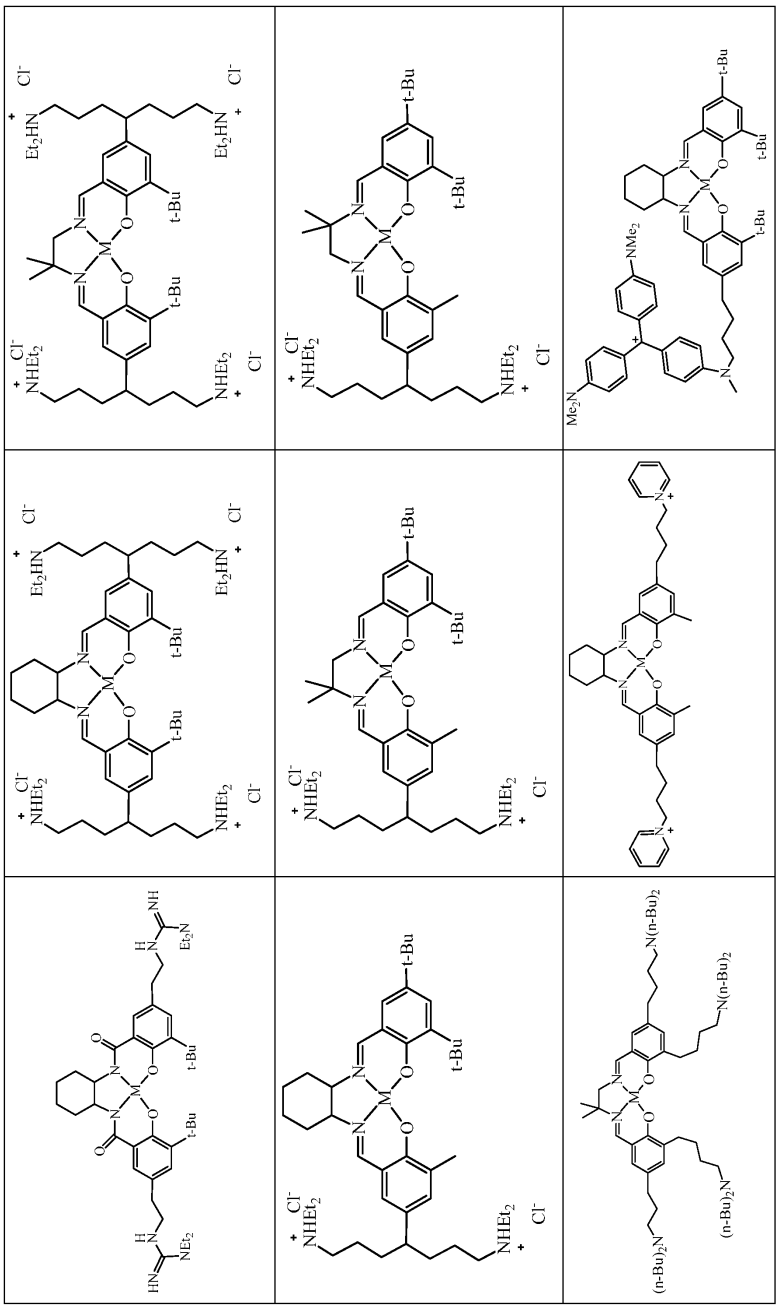
[0438] 표 1

[0439]

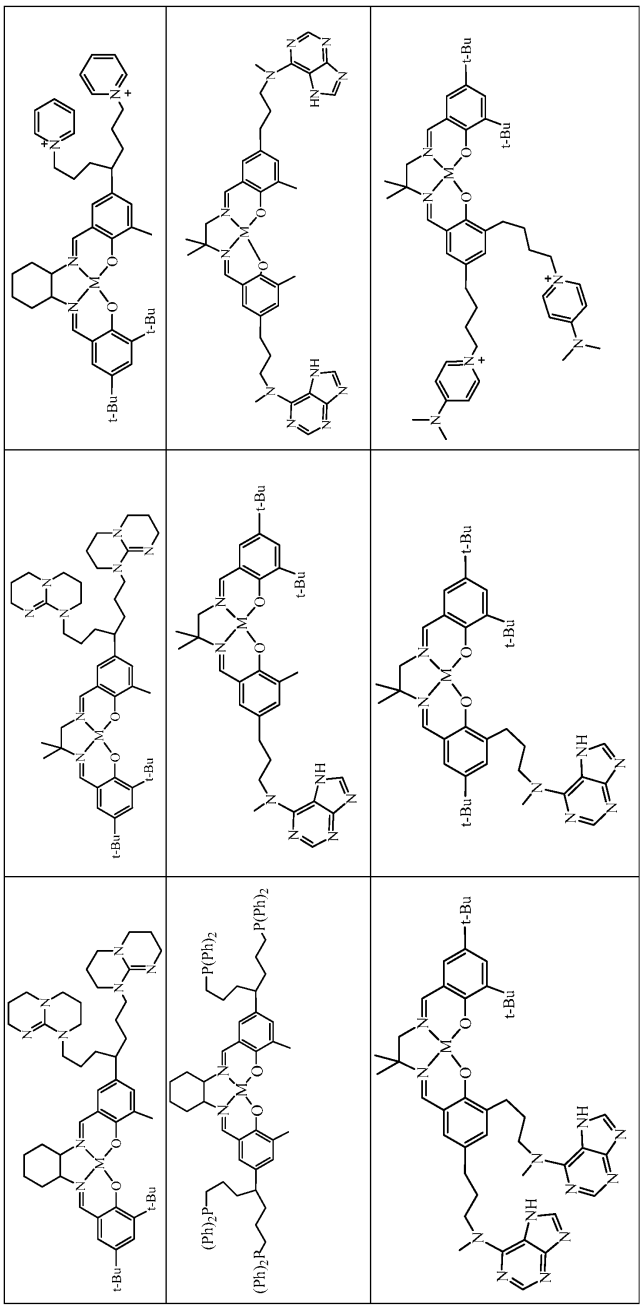
표 1



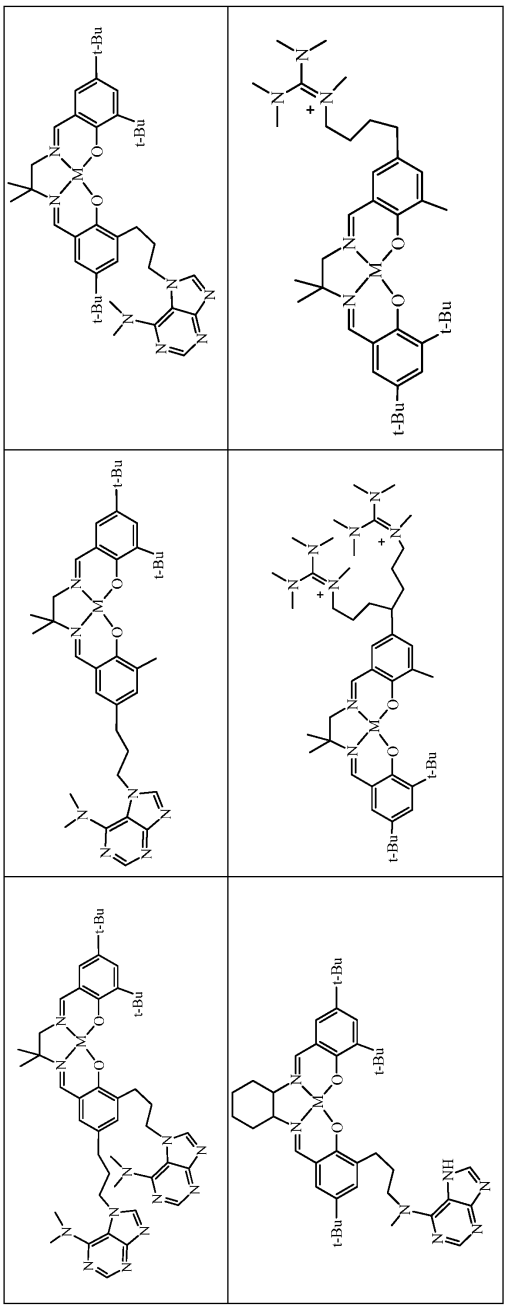
[0440]



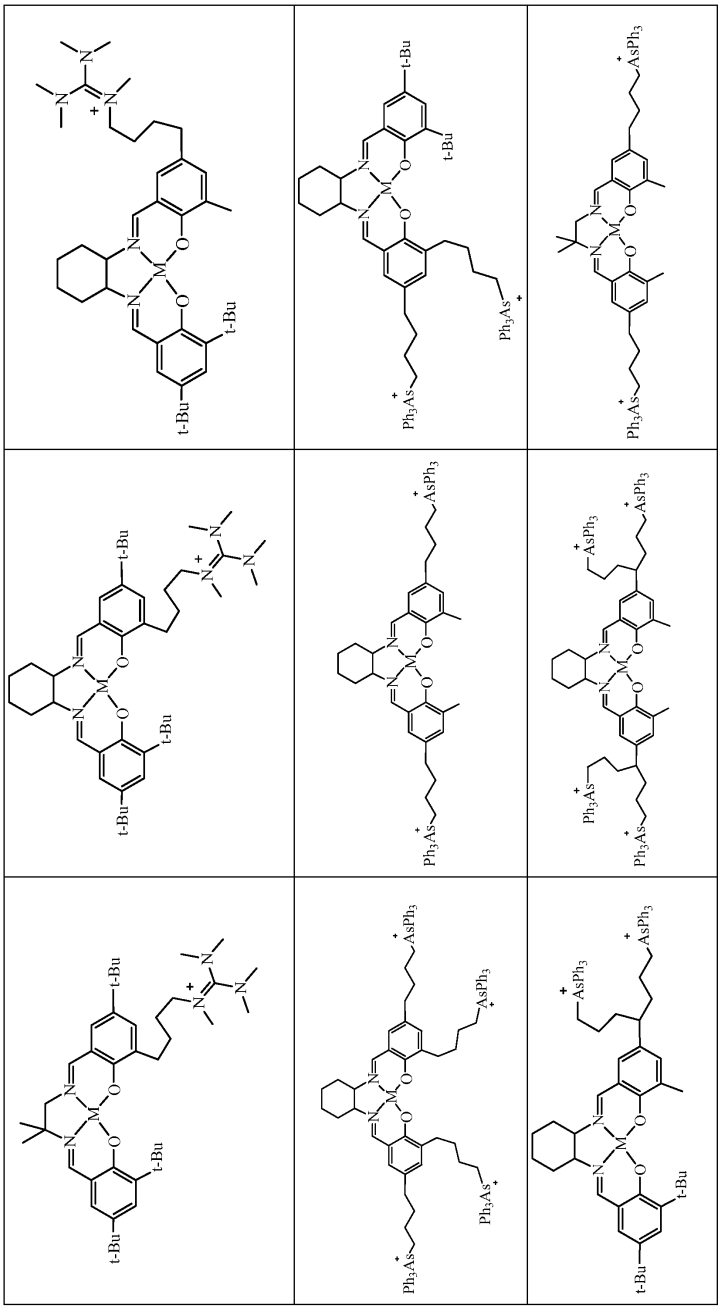
[0441]



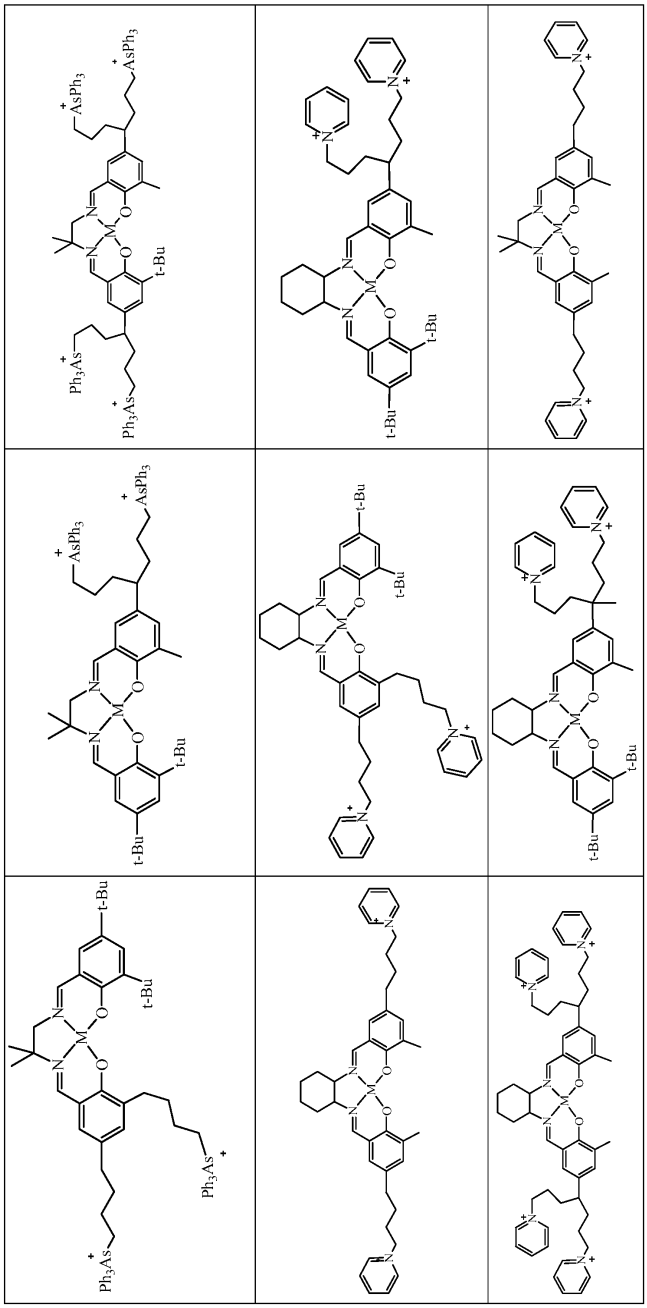
[0442]



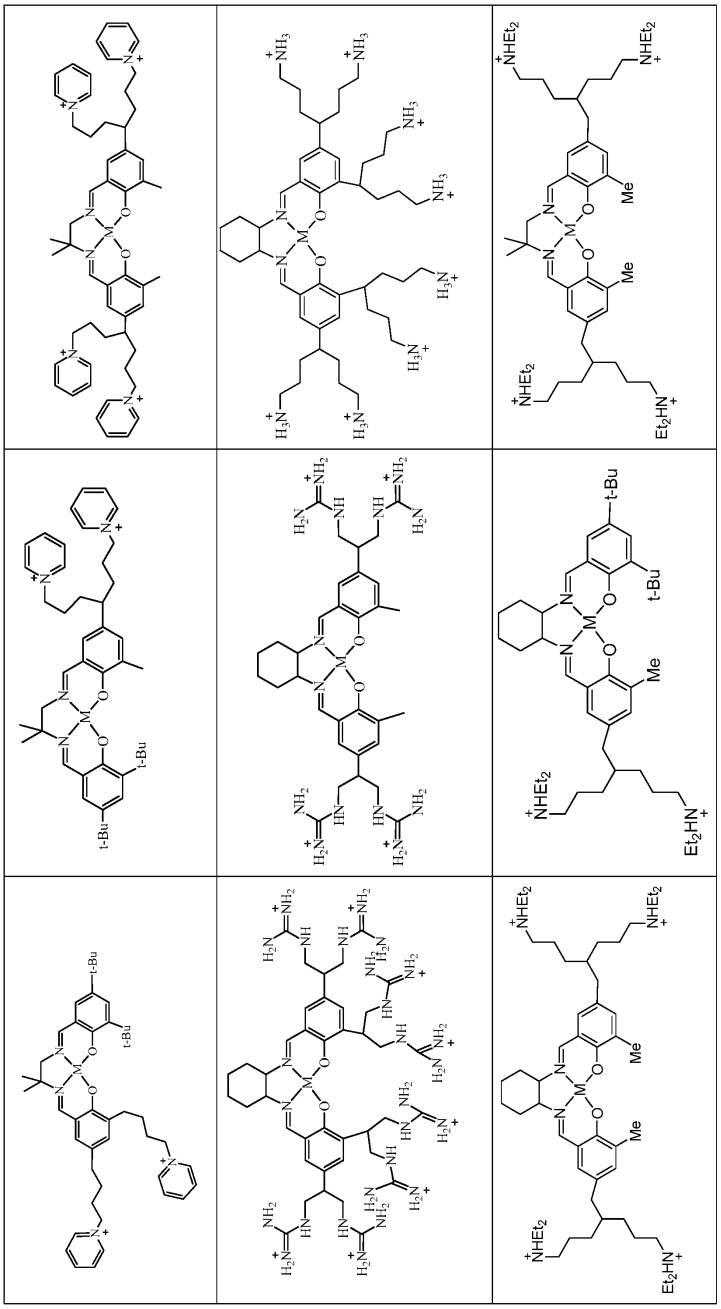
[0443]



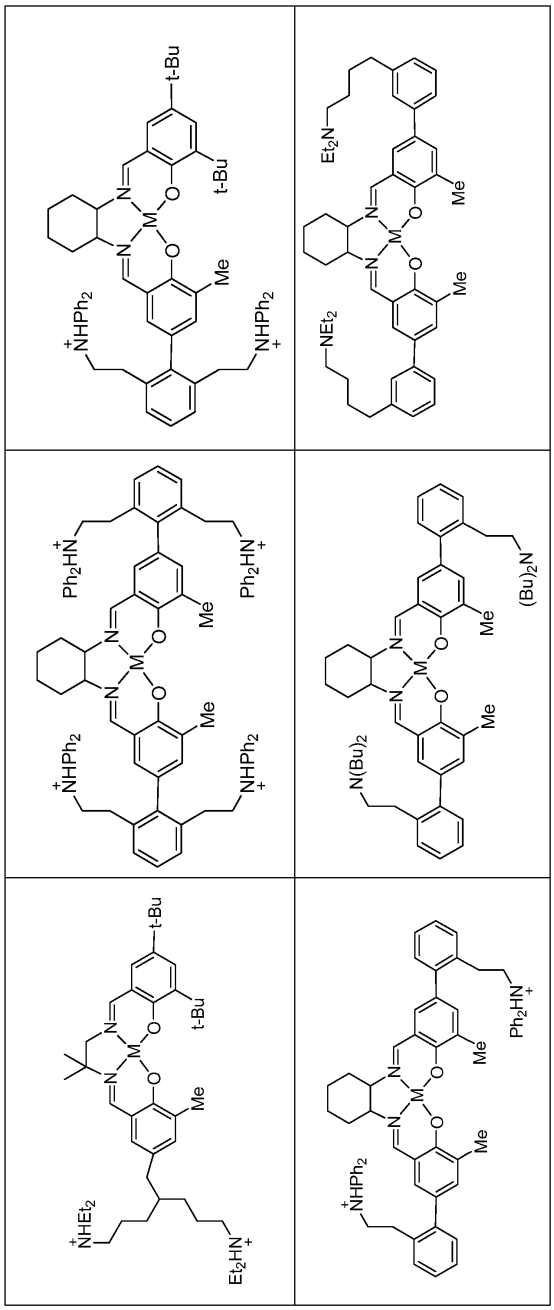
[0444]



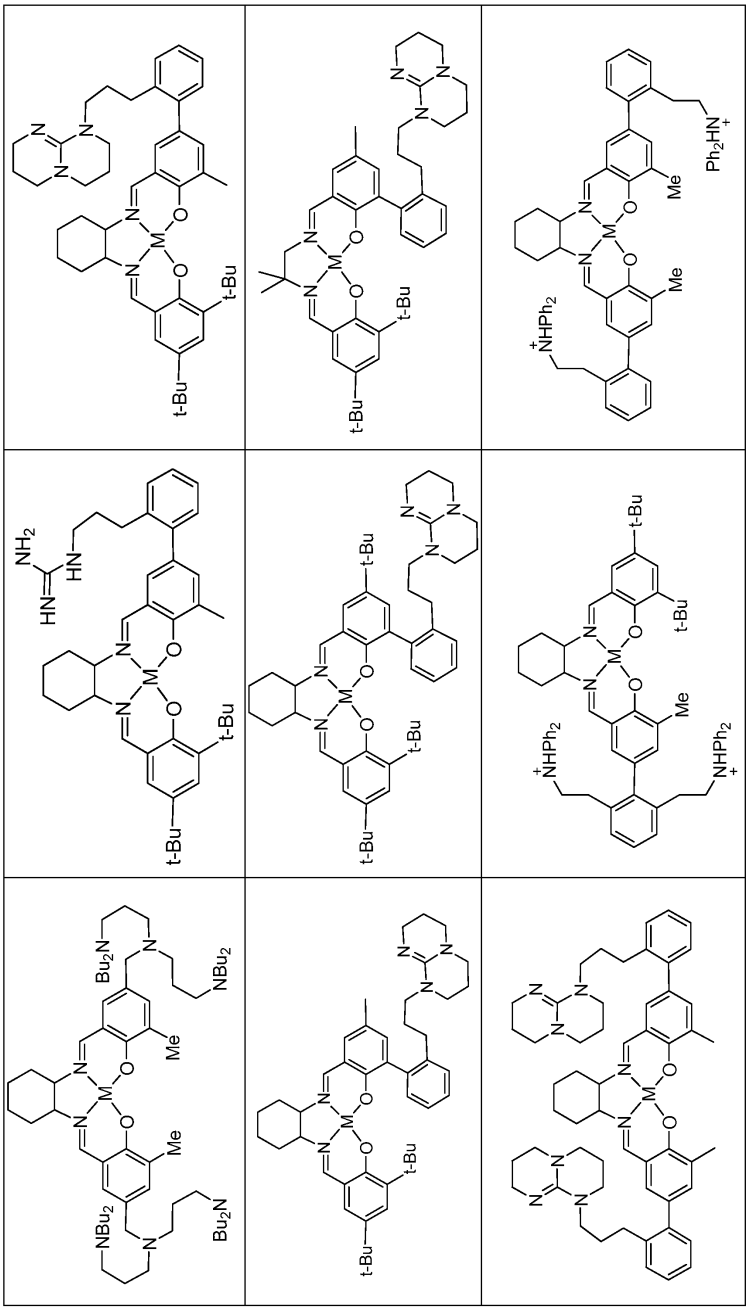
[0445]



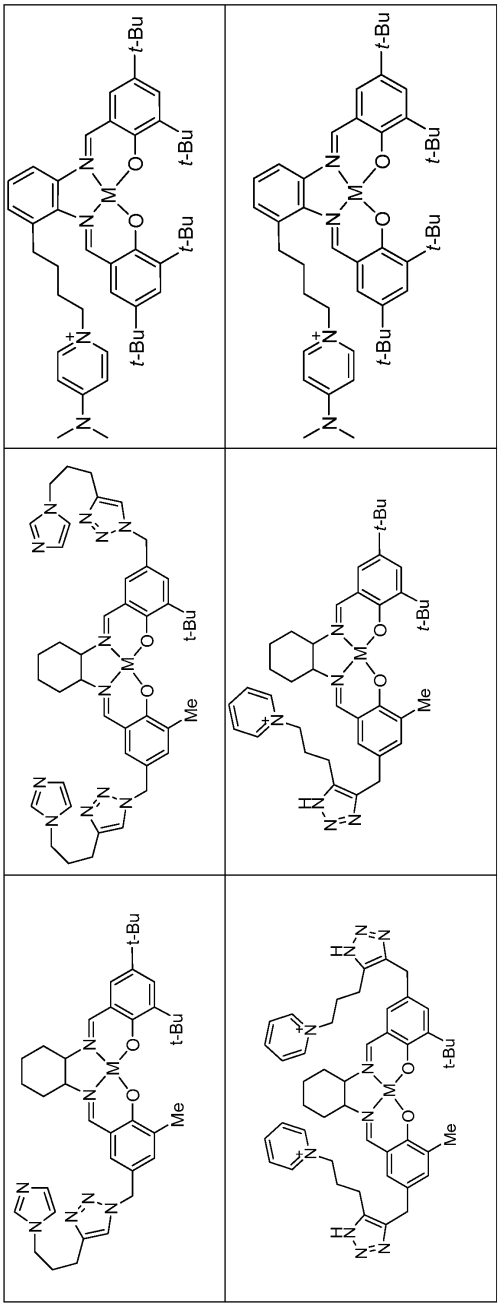
[0446]


t-Bu
t-Bu
Me
NHPh2
NHPh2
Et2N
Me
Me
NEt2
Ph2HN
Ph2HN
Me
Me
NHPh2
NHPh2
(Bu)2N
Me
Me
N(Bu)2
t-Bu
t-Bu
Me
NHEt2
Et2HN
Ph2HN
Me
Me
NHPh2

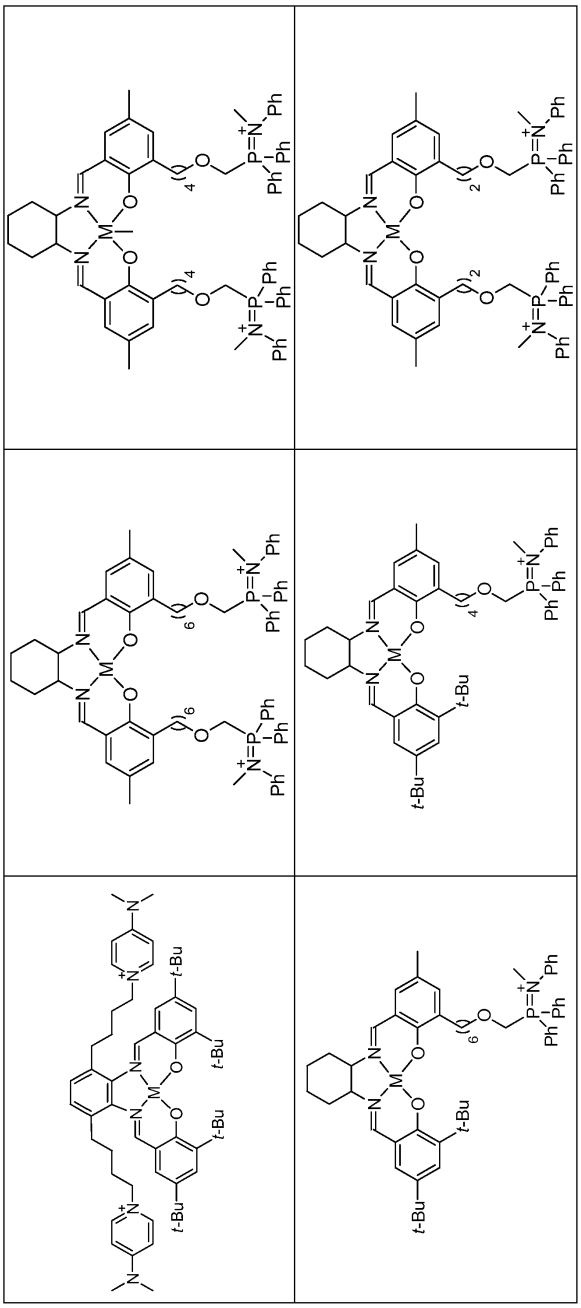
[0447]



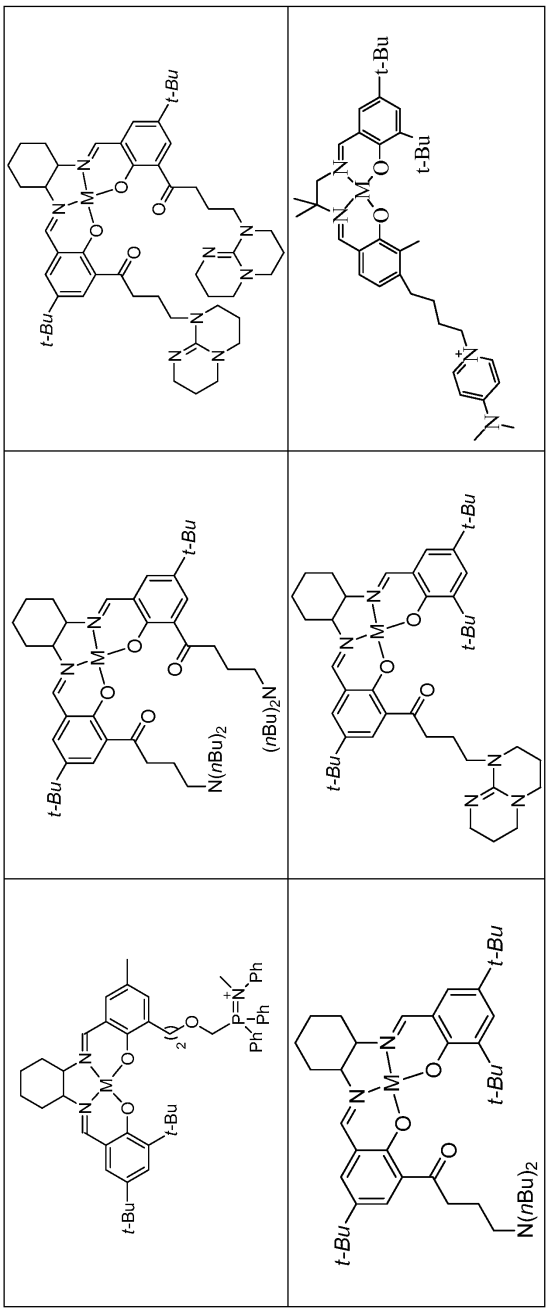
[0448]

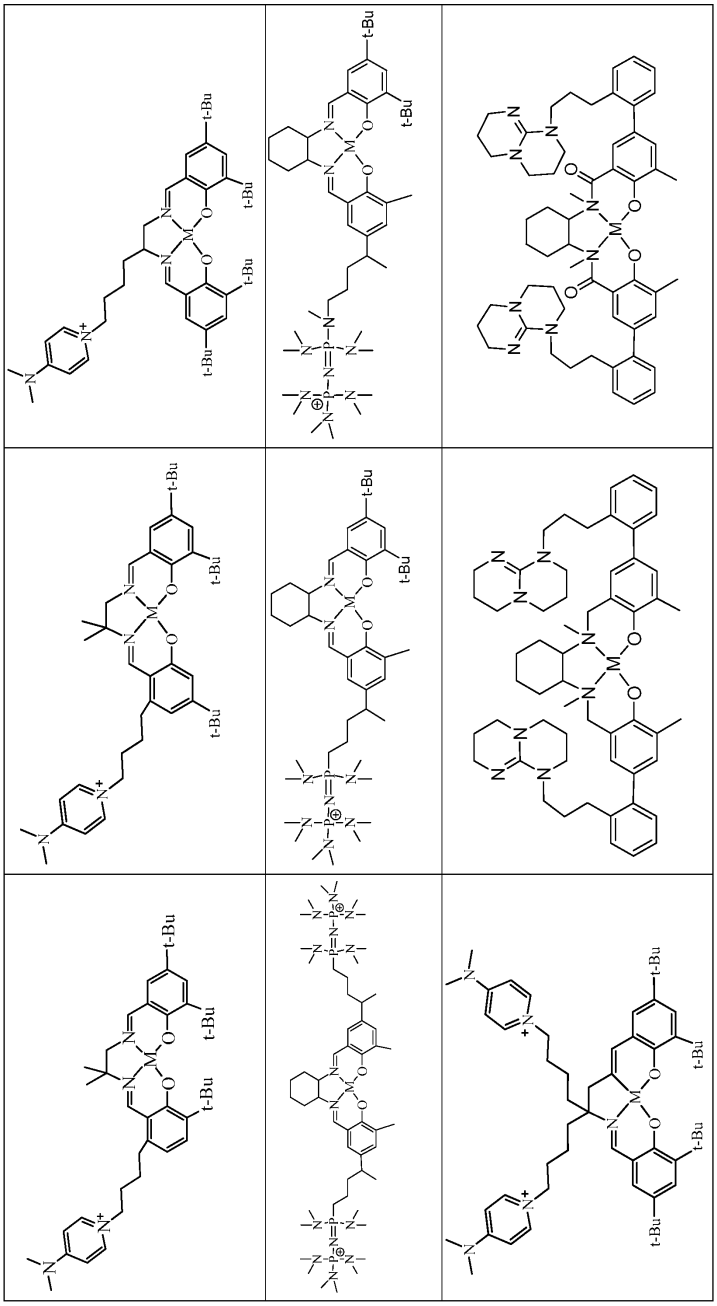


[0449]



[0450]





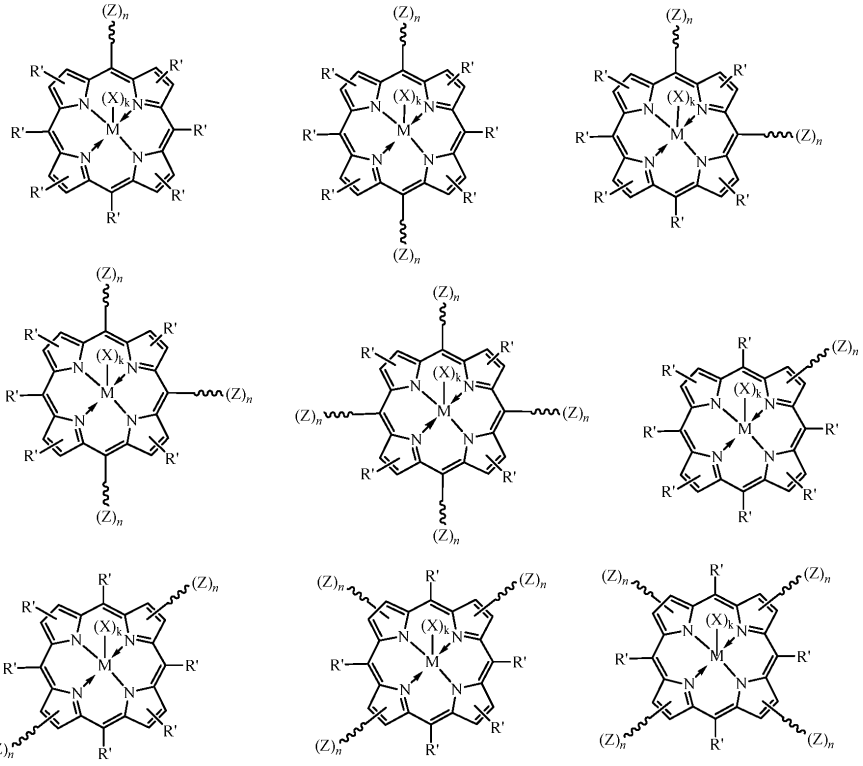
[0451]

[0452] 특정 양태에서, 표 1의 착체의 경우, M은 Co-X이고, X는 위에서 정의한 바와 같다. 특정 양태에서, 표 1의 착체의 경우, M은 Co-OC(O)CF_3이다. 특정 양태에서, 표 1의 착체의 경우, M은 Co-OAc이다. 특정 양태에서, 표 1의 착체의 경우, M은 Co-OC(O)C_6F_5이다. 특정 양태에서, 표 2의 착체의 경우, M은 Co-N_3이다. 특정 양태에서, 표 1의 착체의 경우, M은 Co-Cl이다. 특정 양태에서, 표 1의 착체의 경우, M은 Co-니트로페녹시이다. 특정 양태에서, 표 1의 착체의 경우, M은 Co-디니트로페녹시이다.

[0453] 일부 양태에서, 표 1의 착체의 경우, M은 Cr-X이다(여기서, X는 위에서 정의한 바와 같다).

[0454] 특정 양태에서, 사좌배위자 리간드는 포르피린 리간드이다. 일부 양태에서, 금속 착체는 코발트 포르피린 착체이다. 특정 양태에서, 금속 착체는 크롬 포르피린 착체이다. 일부 양태에서, 금속 착체는 알루미늄 포르피린 착체이다.

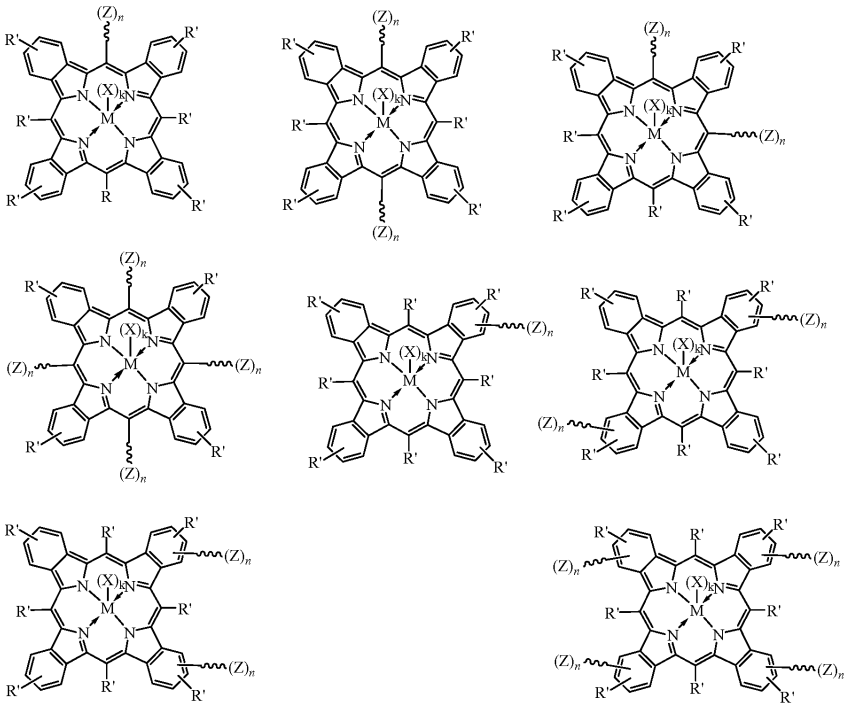
[0455] 본 발명의 금속 착체를 함유하는 포르피린의 예는, 이들로 제한되지는 않지만, 다음을 포함한다:



[0456]

[0457] [여기서, M, X, k, R' 및 $\sim\!\!\sim(Z)_m$ 각각은 위에서 정의한 바와 같다]

[0458] 특정 양태에서, 다좌배위자 리간드는 임의로 치환된 테트라벤조포르피린이다. 적합한 예는, 이들로 제한되지는 않지만, 다음을 포함한다:



[0459]

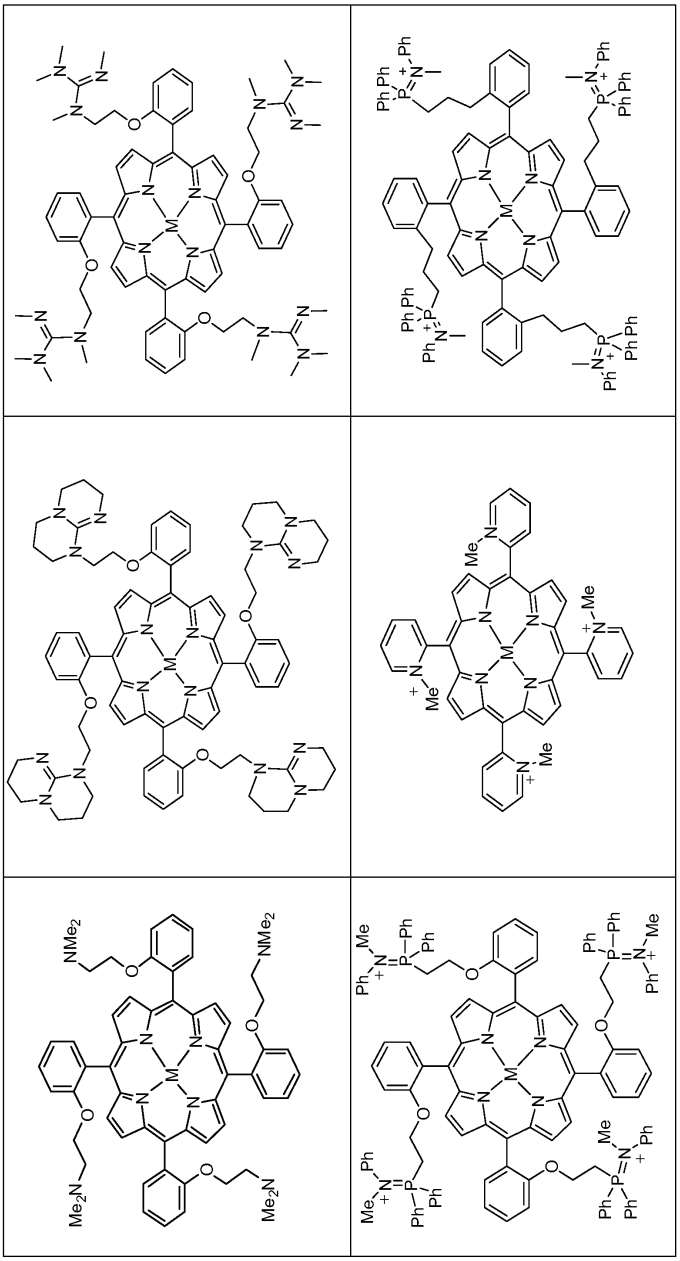
[0460] [여기서, M, R' 및 $\sim\!\!\sim(Z)_n$ 은 위에서 정의한 바와 같다]

[0461] 본원에 기재된 포르피린 및 프탈로시아닌계 착체의 특정 양태에서, M은 알루미늄이다. 본원에 기재된 포르피린 및 프탈로시아닌계 착체의 특정 양태에서, M은 코발트이다. 본원에 기재된 포르피린 및 프탈로시아닌계 착체의

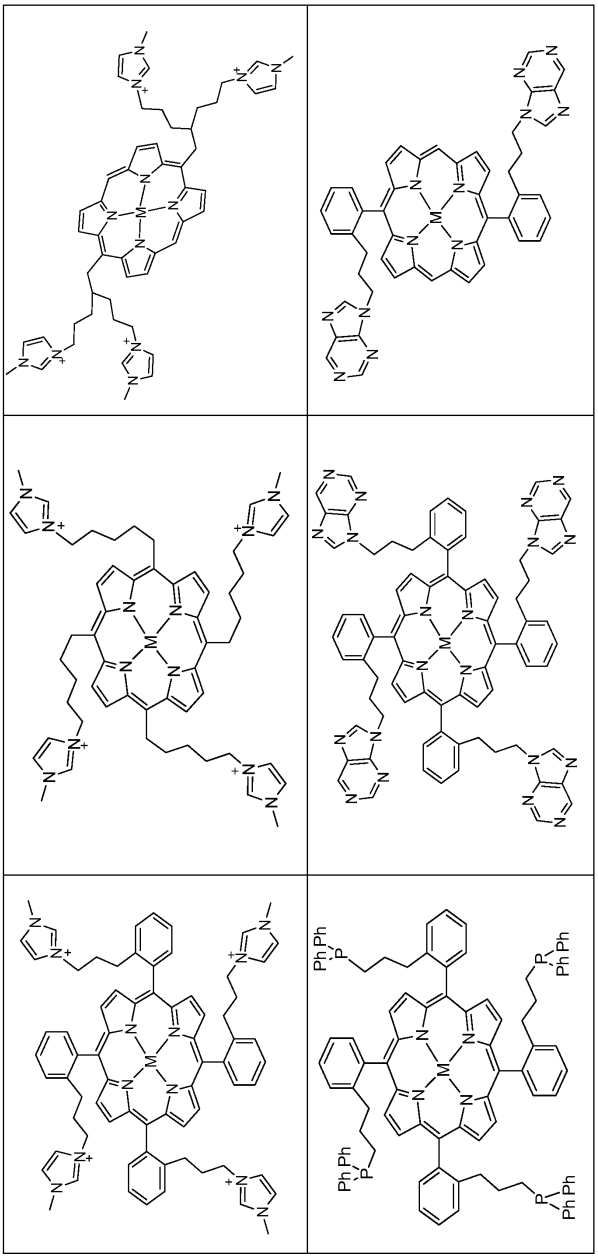
특정 양태에서, M은 망간이다.

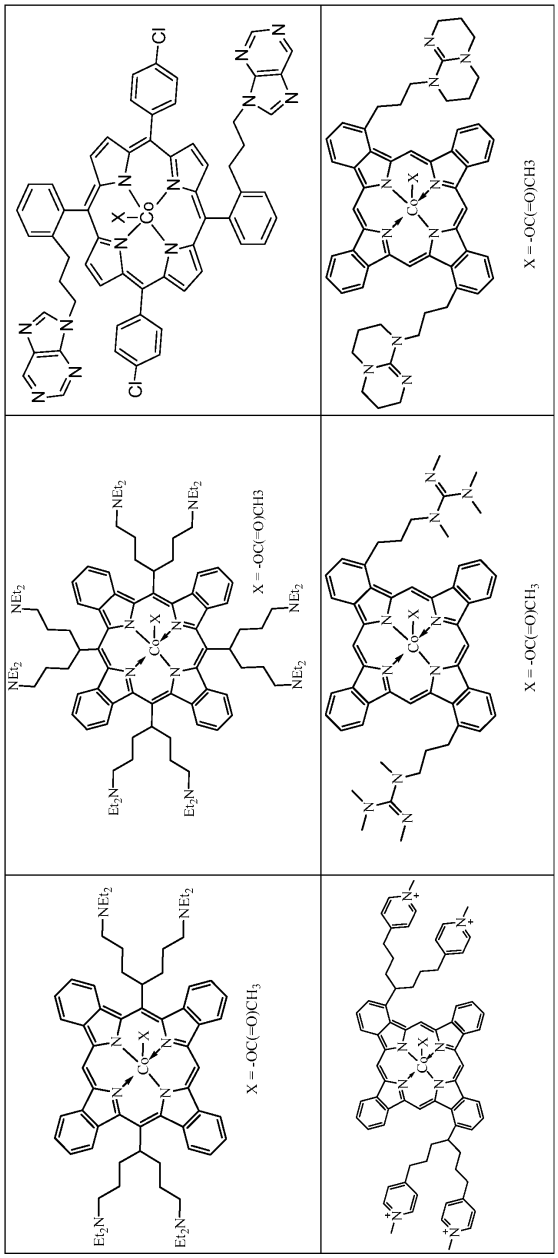
[0462] 특정 양태에서, 본 발명의 포르피린 착체는, 이들로 제한되지는 않지만, 아래 표 2의 화합물을 포함한다:

[0463] 표 2

[0464] 

[0465]



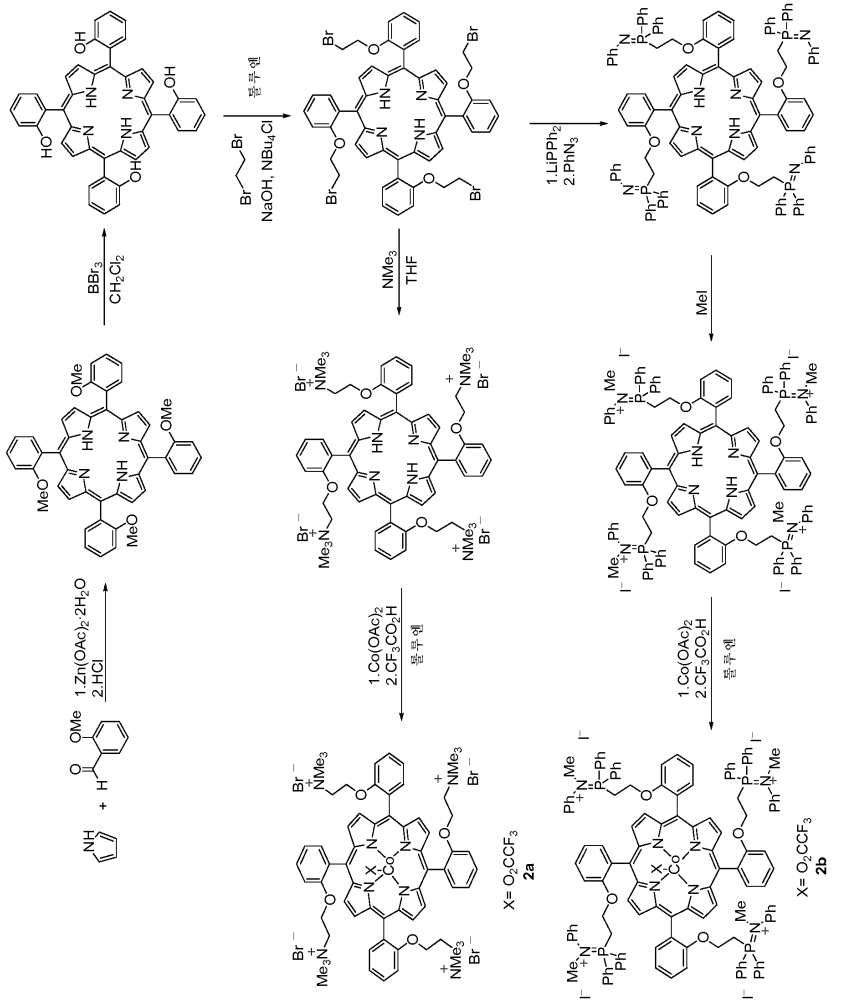


[0466]

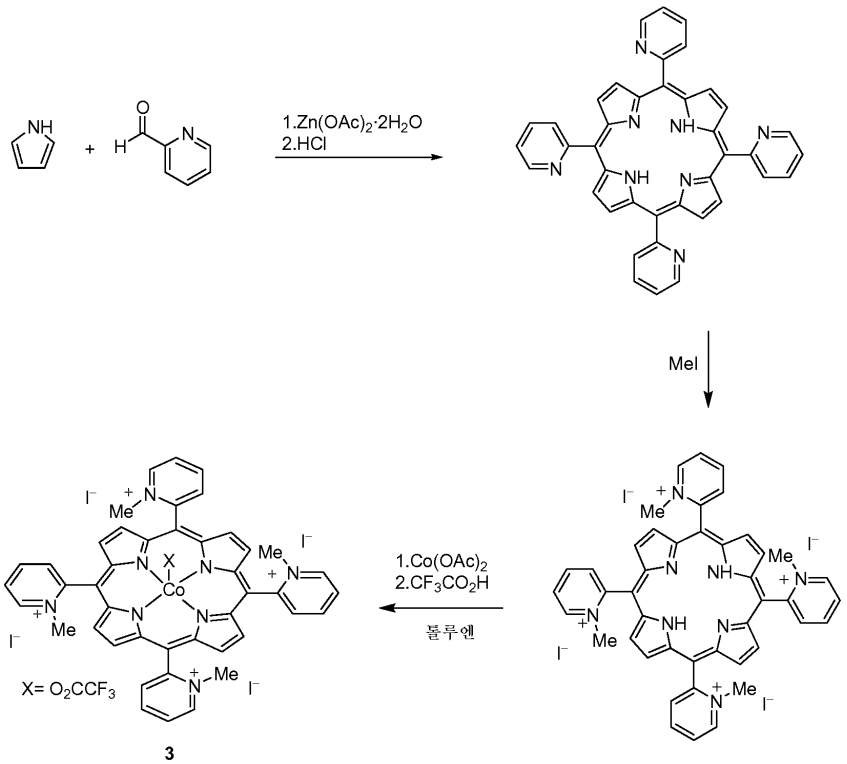
[0467] 특정 양태에서, 표 2의 착체의 경우, M은 Co-X(여기서, X는 위에서 정의한 바와 같다)이다. 특정 양태에서, 표 2의 착체의 경우, M은 Co-OC(O)CF_3이다. 특정 양태에서, 표 2의 착체의 경우, M은 Co-OAc이다. 특정 양태에서, 표 1의 착체의 경우, M은 Co-OC(O)C_6F_5이다. 특정 양태에서, 표 2의 착체의 경우, M은 Co-N_3이다. 특정 양태에서, 표 2의 착체의 경우, M은 Co-Cl이다. 특정 양태에서, 표 2의 착체의 경우, M은 Co-니트로페녹시이다. 특정 양태에서, 표 2의 착체에 대하여, M은 Co-디니트로페녹시이다.

[0468] 특정 양태에서, 표 2의 착체의 경우, M은 Al-X(여기서, X는 위에서 정의한 바와 같다)이다. 특정 양태에서, 표 2의 착체의 경우, M은 Cr-X(여기서, X는 위에서 정의한 바와 같다)이다.

[0469] 특정 양태에서, 본 발명의 포르피린 착체는 다음 도식에 나타낸 바와 같이 합성한다:

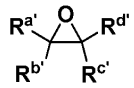


[0470]



[0471]

[0472] 일부 양태에서, 본원의 기재 내용은 에폭사이드를 제공된 금속 착체의 존재하에 이산화탄소와 접촉시켜 폴리카보네이트를 형성함을 포함하는 중합 방법을 제공한다. 일부 양태에서, 본 발명은

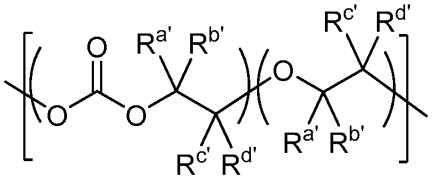


[0473] a) 화학식 의 에폭사이드[여기서, $R^{a'}$는 수소이거나, C_{1-30} 지방족; C_{1-30} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고,

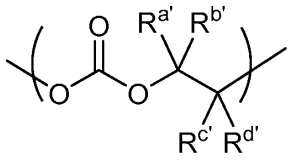
[0474] $R^{b'}$, $R^{c'}$ 및 $R^{d'}$는 각각 독립적으로 수소이거나, C_{1-12} 지방족; C_{1-12} 헤테로지방족; 페닐; 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 모노사이클릭 카보사이클, 탄소수 7 내지 14의 포화, 부분 불포화 또는 방향족 폴리사이클릭 카보사이클; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 모노사이클릭 헤테로아릴 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클릭 환; 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 6원 내지 12원 폴리사이클릭 포화 또는 부분 불포화 헤테로사이클; 및 질소, 산소 및 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 바이사이클릭 헤테로아릴 환으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 라디칼이고,

[0475] 여기서, ($R^{a'}$와 $R^{c'}$), ($R^{c'}$와 $R^{d'}$) 및 ($R^{a'}$와 $R^{b'}$) 중의 어느 것이라도 개재 원자들과 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있다]를 제공하고,

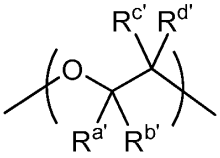
[0476] b) 상기 에폭사이드와 이산화탄소를 본원에 기재된 금속 착체의 존재하에 접촉시켜



,

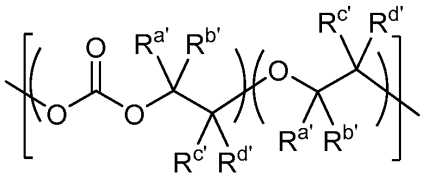


, 및

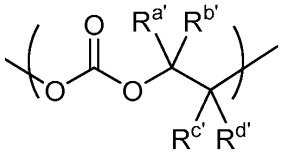


[0477] 로 이루어진 그룹으로부터 선택된 화학식을 갖는 중합체를 제공함을 포함하는 중합 방법을 제공한다.

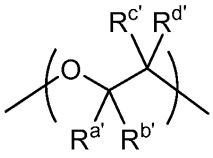
[0478] 일부 양태에서, 제공된 중합체는 화학식



을 갖는다. 일부 양태에서, 제공된 중합체는 화학식



을 갖는다. 일부 양태에서, 이산화탄소는 임의의 성분이고 제공

된 중합체는 화학식  을 갖는다.

[0479] 특정 양태에서, $R^{b'}$, $R^{c'}$ 및 $R^{d'}$는 각각 수소이다. 일부 양태에서, $R^{a'}$는 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, $R^{a'}$는 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, 에폭사이드는 에틸렌 옥사이드, 프로필렌 옥사이드 또는 사이클로헥센 옥사이드이다.

[0480] 특정 양태에서, $R^{a'}$, $R^{b'}$, $R^{c'}$ 및 $R^{d'}$ 중의 하나는 수소이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$, $R^{b'}$, $R^{c'}$ 및 $R^{d'}$ 중의 2개는 수소이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$, $R^{b'}$, $R^{c'}$ 및 $R^{d'}$ 중의 3개는 수소이다.

[0481] 특정 양태에서, $R^{a'}$는 수소이다. 특정 양태에서, $R^{b'}$는 수소이다. 특정 양태에서, $R^{c'}$는 수소이다. 특정 양태에서, $R^{d'}$는 수소이다.

[0482] 특정 양태에서, $R^{a'}$, $R^{b'}$, $R^{c'}$ 및 $R^{d'}$는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-30} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$, $R^{b'}$, $R^{c'}$ 및 $R^{d'}$는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$, $R^{b'}$, $R^{c'}$ 및 $R^{d'}$는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$, $R^{b'}$, $R^{c'}$ 및 $R^{d'}$는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{1-8} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$, $R^{b'}$, $R^{c'}$ 및 $R^{d'}$는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{3-8} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$, $R^{b'}$, $R^{c'}$ 및 $R^{d'}$는 각각 독립적으로, 임의로 치환된 C_{3-12} 지방족 그룹이다.

[0483] 특정 양태에서, $R^{a'}$는 임의로 치환된 C_{1-30} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, $R^{b'}$는 임의로 치환된 C_{1-30} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, $R^{c'}$는 임의로 치환된 C_{1-30} 지방족 그룹이다. 특정 양태에서, $R^{d'}$는 임의로 치환된 C_{1-30} 지방족 그룹이다.

[0484] 일부 양태에서, 동일한 탄소에 결합된 $R^{a'}$ 및 $R^{b'}$는 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 3원 내지 12원 카보사이클릭 환을 형성한다. 일부 양태에서, 동일한 탄소에 결합된 $R^{a'}$ 및 $R^{b'}$는 함께, 2개 이상의 임의로 치환된 3원 내지 8원 카보사이클릭 환을 포함하는 폴리사이클릭 카보사이클을 형성한다. 일부 양태에서, 동일한 탄소에 결합된 $R^{a'}$ 및 $R^{b'}$는 함께, 2개 이상의 임의로 치환된 5원 내지 7원 카보사이클릭 환을 포함하는 폴리사이클릭 카보사이클을 형성한다.

[0485] 일부 양태에서, 동일한 탄소에 결합된 $R^{a'}$와 $R^{b'}$는 함께, 2개의 임의로 치환된 3원 내지 12원 카보사이클릭 환을 포함하는 바이사이클릭 카보사이클을 형성한다. 일부 양태에서, 동일한 탄소에 결합된 $R^{a'}$와 $R^{b'}$는 함께, 2개의 임의로 치환된 3원 내지 8원 카보사이클릭 환을 포함하는 바이사이클릭 카보사이클을 형성한다. 일부 양태에서, 동일한 탄소에 결합된 $R^{a'}$와 $R^{b'}$는 함께, 2개의 임의로 치환된 5원 내지 7원 카보사이클릭 환을 포함하는 바이사이클릭 카보사이클을 형성한다.

[0486] 특정 양태에서, 동일한 탄소에 결합된 $R^{a'}$와 $R^{b'}$는 함께, 임의로 치환된 3원 내지 12원 카보사이클릭 환을 형성한다. 특정 양태에서, 동일한 탄소에 결합된 $R^{a'}$와 $R^{b'}$는 함께, 임의로 치환된 3원 내지 8원 카보사이클릭 환을 형성한다. 특정 양태에서, 동일한 탄소에 결합된 $R^{a'}$와 $R^{b'}$는 함께, 임의로 치환된 5원 내지 7원 카보사이클릭 환을 형성한다.

[0487] 일부 양태에서, 인접한 탄소들에 결합된 $R^{b'}$와 $R^{c'}$는 함께, 하나 이상의 임의로 치환된 3원 내지 12원 카보사이클

릭 환을 형성한다. 일부 양태에서, 인접한 탄소들에 결합된 $R^{b'}$와 $R^{c'}$는 함께, 2개 이상의 임의로 치환된 3원 내지 8원 카보사이클릭 환을 포함하는 폴리사이클릭 카보사이클을 형성한다. 일부 양태에서, 인접한 탄소들에 결합된 $R^{b'}$와 $R^{c'}$는 함께, 2개 이상의 임의로 치환된 5원 내지 7원 카보사이클릭 환을 포함하는 폴리사이클릭 카보사이클을 형성한다.

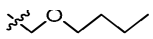
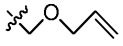
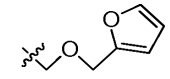
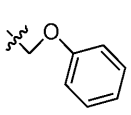
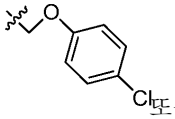
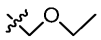
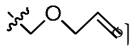
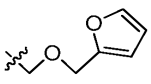
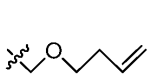
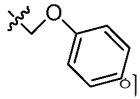
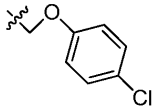
[0488] 일부 양태에서, 인접한 탄소들에 결합된 $R^{b'}$와 $R^{c'}$는 함께, 2개의 임의로 치환된 3원 내지 12원 카보사이클릭 환을 포함하는 바이사이클릭 카보사이클을 형성한다. 일부 양태에서, 인접한 탄소들에 결합된 $R^{b'}$와 $R^{c'}$는 함께, 2개의 임의로 치환된 3원 내지 8원 카보사이클릭 환을 포함하는 바이사이클릭 카보사이클을 형성한다. 일부 양태에서, 인접한 탄소들에 결합된 $R^{b'}$와 $R^{c'}$는 함께, 2개의 임의로 치환된 5원 내지 7원 카보사이클릭 환을 포함하는 바이사이클릭 카보사이클을 형성한다.

[0489] 특정 양태에서, 인접한 탄소들에 결합된 $R^{b'}$와 $R^{c'}$는 함께, 임의로 치환된 3원 내지 12원 카보사이클릭 환을 형성한다. 특정 양태에서, 인접한 탄소들에 결합된 $R^{b'}$와 $R^{c'}$는 함께, 임의로 치환된 3원 내지 8원 카보사이클릭 환을 형성한다. 특정 양태에서, 인접한 탄소들에 결합된 $R^{b'}$와 $R^{c'}$는 함께, 임의로 치환된 5원 내지 7원 카보사이클릭 환을 형성한다.

[0490] 특정 양태에서, 중합체는, 2개의 상이한 반복 단위의 $R^{a'}$, $R^{b'}$ 및 $R^{c'}$가 모두 동일하지는 않은, 2개의 상이한 반복 단위의 공중합체를 포함한다. 일부 양태에서, 중합체는, 상이한 반복 단위 각각의 $R^{a'}$, $R^{b'}$ 및 $R^{c'}$가 다른 상이한 반복 단위의 어느 하나의 $R^{a'}$, $R^{b'}$ 및 $R^{c'}$와 동일하지 않은, 3개 이상의 상이한 반복 단위의 공중합체를 포함한다. 일부 양태에서, 중합체는 랜덤 공중합체이다. 일부 양태에서, 중합체는 테이퍼링된 공중합체이다.

[0491] 일부 양태에서, 중합체는 본원에 기재된 바와 같은 금속 착체를 함유한다. 일부 양태에서, 중합체는 본원에 기재된 금속 착체의 잔사를 포함한다. 일부 양태에서, 중합체는 유기 양이온과 X의 염(여기서, X는 친핵체 또는 대이온이다)을 포함한다. 일부 양태에서, X는 2,4-디니트로페놀레이트 음이온이다.

[0492] 일부 양태에서, $R^{a'}$는 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, $R^{a'}$는 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, $R^{a'}$는 임의로 치환된 페닐이다. 일부 양태에서, $R^{a'}$는 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, $R^{a'}$는 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴이다. 일부 양태에서, $R^{a'}$는 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다.

[0493] 특정 양태에서, $R^{a'}$는 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 비닐, 알릴, 페닐, 트리플루오로메틸,  ,  ,  ,  ,  ,  ,  또는 위의 임의의 2개 이상으로부터 선택된다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는 메틸이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는 에틸이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는 프로필이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는 부틸이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는 비닐이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는 알릴이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는 페닐이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는 트리플루오로메틸이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는  이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는  이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는  이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는  이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는  이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는  이다. 특정 양태에서, $R^{a'}$는  이다.

[0494] 일부 양태에서, $R^{b'}$는 수소이다. 일부 양태에서, $R^{b'}$는 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, $R^{b'}$는 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, $R^{b'}$는 임의로 치환된 페닐이다. 일부 양태에서, $R^{b'}$는 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, $R^{b'}$는 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴이다. 일부 양태에서, $R^{b'}$는 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다.

[0495] 일부 양태에서, $R^{c'}$는 수소이다. 일부 양태에서, $R^{c'}$는 임의로 치환된 C_{1-12} 지방족이다. 일부 양태에서, $R^{c'}$는 임의로 치환된 C_{1-12} 헤테로지방족이다. 일부 양태에서, $R^{c'}$는 임의로 치환된 페닐이다. 일부 양태에서, $R^{c'}$는 임의로 치환된 8원 내지 10원 아릴이다. 일부 양태에서, $R^{c'}$는 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴이다. 일부 양태에서, $R^{c'}$는 임의로 치환된 3원 내지 7원 헤테로사이클릭이다.

[0496] 일부 양태에서, $R^{a'}$와 $R^{c'}$는 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 카보사이클, 임의로 치환된 3원 내지 14원 헤테로사이클, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 C_8-C_{10} 아릴 및 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 환을 형성한다.

[0497] 일부 양태에서, $R^{b'}$와 $R^{c'}$는 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 카보사이클, 임의로 치환된 3원 내지 14원 헤테로사이클, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 C_8-C_{10} 아릴 및 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 환을 형성한다.

[0498] 일부 양태에서, $R^{a'}$와 $R^{b'}$는 개재 원자들과 함께, 임의로 치환된 C_3-C_{14} 카보사이클, 임의로 치환된 3원 내지 14원 헤테로사이클, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 C_8-C_{10} 아릴 및 임의로 치환된 5원 내지 10원 헤테로아릴로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 환을 형성한다.

[0499] 일부 양태에서, 본 발명은 에폭사이드로부터 폴리에테르를 합성하는 방법을 포함한다. 이러한 반응을 수행하는 적합한 방법은 미국 특허 제7,399,822호에 기재되어 있으며, 이의 전체 내용은 본원에서 참조로 인용된다.

[0500] 일부 양태에서, 본 발명은 위에서 기재한 촉매를 사용하여 이산화탄소 및 에폭사이드로부터 사이클릭 카보네이트를 합성하는 방법을 포함하며, 당해 반응을 수행하는 적합한 방법들은 본원에서 참조로 인용된 미국 특허 제6,870,004호에 기재되어 있다.

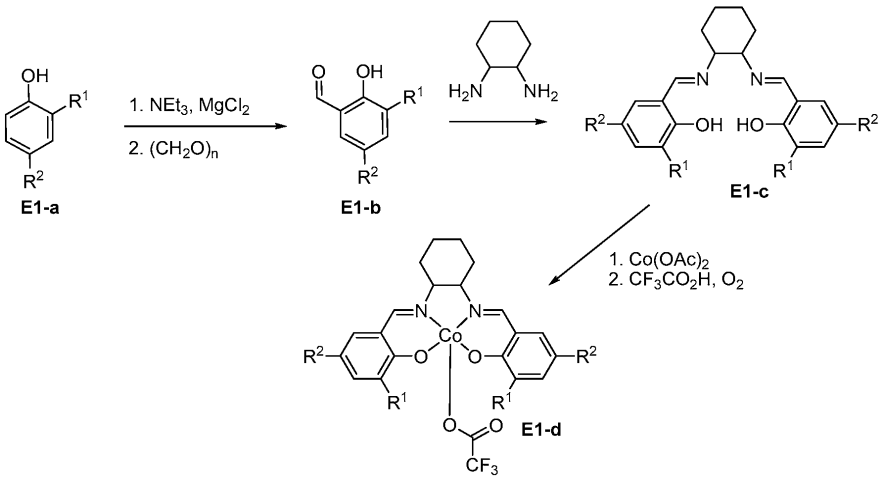
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0501] **실시예**

[0502] 실시예 1

[0503] 본 발명의 대칭 코발트(II) 살렌 리간드에 대한 일반적인 경로를 아래 반응식 E1 및 E2에 나타낸다:

[0504] 반응식 E1



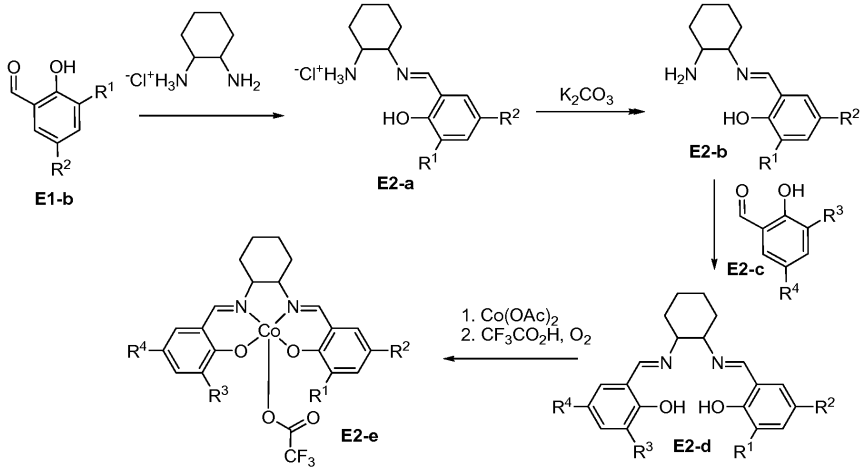
[0505]

[0506] 반응식 E1에 나타낸 바와 같이, 이치환된 페놀(E1-a)은 포름화되어 살리실알데히드 유도체(E1-b)를 제공한다. 이어서, 당해 알데히드 2당량을 디아민(이 경우, 1,2-디아미노 사이클로헥산)과 반응시켜 쉬프(Schiff) 염기(E1-c)를 수득한다. 이어서, 당해 화합물을 코발트(II) 아세테이트와 반응시켜 Co(II) 살렌 착체(나타내지 않음)를 수득하고 이를 트리플루오로아세트산의 존재하에 공기에 의하여 산화시켜 활성 코발트(III) 촉매를 수득한다. 유사한 화학을 적용하여 위에서 기재한 촉매를 합성할 수 있다. 유기 합성 분야의 숙련가라면 필요한 이러한 화학을 순응시켜 본원에 기재된 특정 촉매를 제공할 수 있다.

[0507] 실시예 2

[0508] 비대칭 코발트(III) 살렌 리간드에 대한 통상적인 경로를 반응식 E2에 나타낸다:

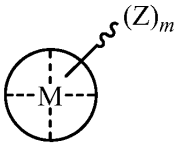
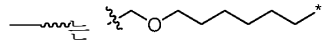
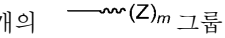
[0509] 반응식 E2



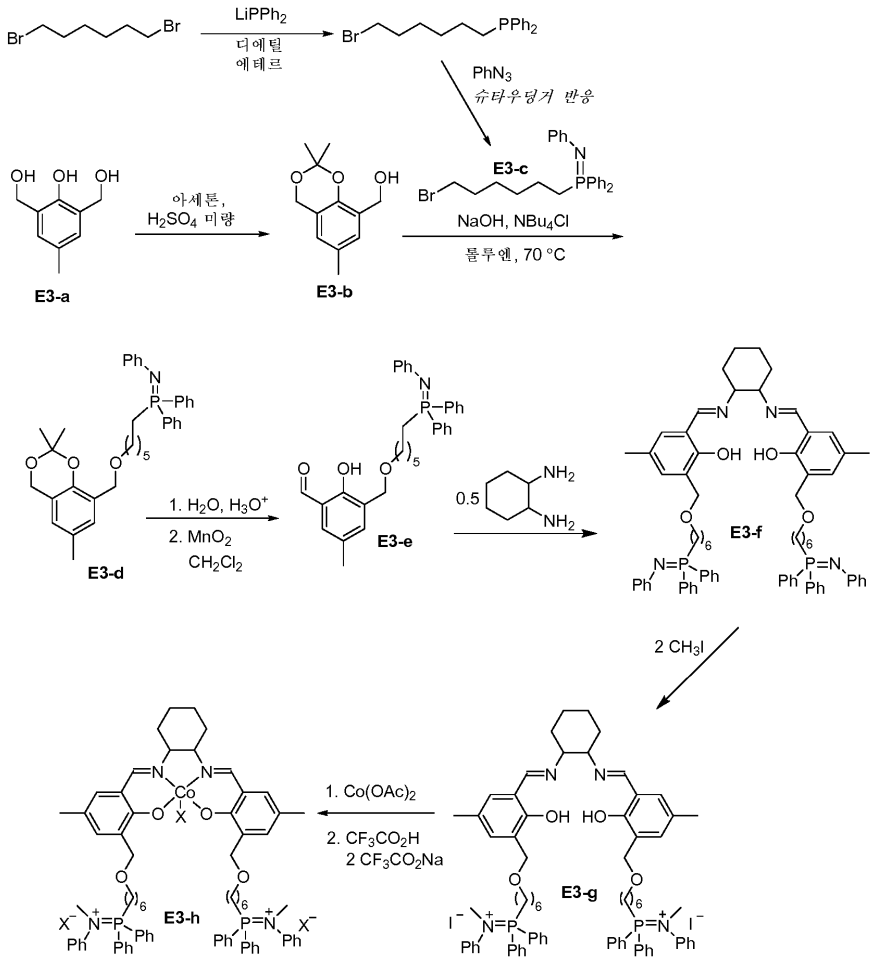
[0510]

[0511] 반응식 E2에 나타낸 바와 같이, 이치환된 살리실알데히드 유도체(E1-b)를 1,2-사이클로헥산디아민의 모노하이드로클로라이드 염 1당량으로 처리한다. 수득한 쉬프 염기(E2-a)를 이어서 중화시키고, 제2의 상이한 살리실알데히드 유도체를 가한다. 이어서, 당해 화합물을 코발트(II) 아세테이트와 반응시켜 Co(II) 살렌 착체를 수득하고 이를 트리플루오로아세트산의 존재하에 공기에 의하여 산화시켜 활성 코발트(III) 착체를 수득한다. 유사한 화학을 위에서 기재한 촉매의 합성에 적용할 수 있다. 유기 합성 분야의 숙련가라면 필요한 당해 화학을 순응시켜 본원에 기재한 특정 촉매를 제공할 수 있다.

[0512] 실시예 3

[0513] 실시예 3은 촉매  [여기서, M은 Co(III)이고,  는 살시이고,  이고, Z는 P-결합된 포스포르이민 잔기  이고, m은 1이다]의 합성[여기서, 1 또는 2개의  그룹이 존재한다(각각 반응식 E4 및 E3)]을 설명한다.

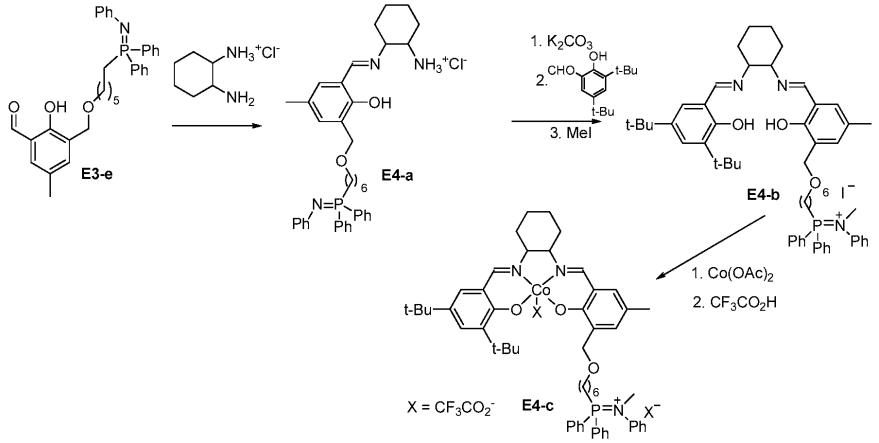
[0514] 반응식 E3



[0515]

[0516] 반응식 E3에 나타낸 바와 같이, 트리올(E3-a)은 케탈로서 보호되어 1가 알콜(E3-b)을 수득하고, 이어서, 당해 화합물을 브로마이드(E3-c)로 알킬화시켜 벤질 에테르(E3-d)를 수득한다. 기타 벤질성 알콜의 탈보호 및 산화로 살리실알데히드(E3-e)를 수득하고 이를 위에서 기재한 바와 같은 사이클로헥산디아민으로 축합시켜 리간드(E3-f)를 수득한다. 이어서, 포스포르이민 질소를 4급화시키고, 금속 착체를 이전과 같이 형성시켜 촉매(E3-h)를 제공한다. 본원에서 나타내지 않은 대체 경로에서는 먼저 금속을 삽입한 다음, 4급화를 수행한다.

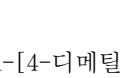
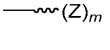
[0517] 반응식 E3b



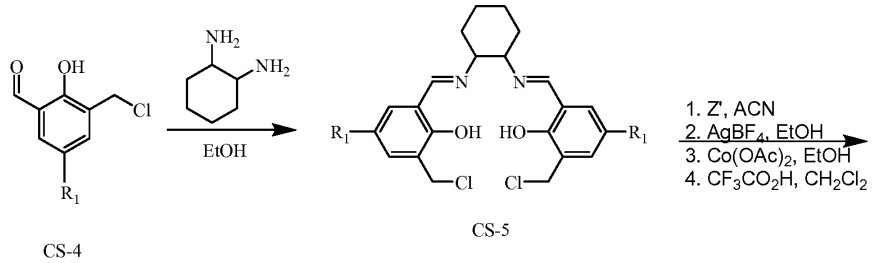
[0518]

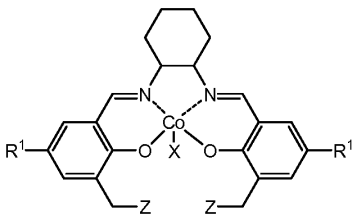
[0519] 반응식 E3b에 나타낸 바와 같이, 살리실알데히드(E3-e)(위에 기재됨)를 사이클로헥산디아민 모노하이드로클로라이드로 축합시켜 모노-쉬프 염기 하이드로클로라이드(E4-a)를 수득한다. 이어서, 당해 염을 중화시키고, 디-t-부틸 살리실알데히드로 축합시키고, 메틸화시켜 (E4-b)를 수득한다. 수득한 리간드를 반응식 E3에 대하여 위에서 기재한 바와 같이 금속화시키고 산화시켜 촉매(E4-c)를 수득한다.

[0520] 실시예 4

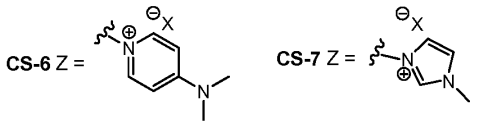
[0521] 실시예 4는 M이 Co(III)이고,  이 살시이고,  이  이고, Z가 1-[4-디메틸아미노-피리디늄]  또는 1-[N-메틸이미다졸륨]  이고, m이 1인 촉매의 합성[여기서, 1 또는 2개의  그룹이 존재한다 (각각 반응식 E5 및 E6)]을 설명한다.

[0522] 반응식 E4





R_1 = Me 또는 *t*-Bu
X = O_2CCF_3

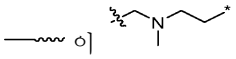
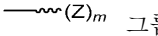


[0523]

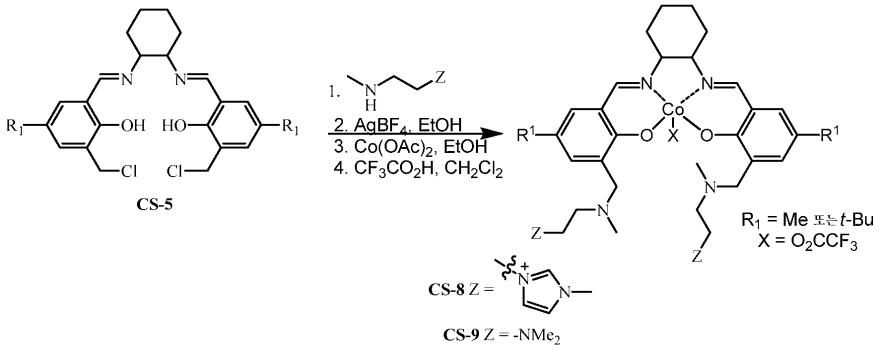
[0524] Z' = N,N-디메틸아미노 피리딘 또는 N-메틸 이미다졸

[0525] 반응식 E4는 화합물(CS-6) 및 (CS-7)의 합성을 나타낸다. 각각의 화합물의 경우, 트랜스-1,2-디아미노사이클로헥산(2.0mol)을 벤질 클로라이드(CS-4)(1.0mol)의 무수 에탄올 용액에 서서히 가한다. 반응물을 교반하고, 3시간 동안 가열 환류시킨 다음, 실온으로 냉각시키고 물로 희석한다. 당해 혼합물을 냉동고에서 밤새 냉각시키고, 고체를 여과시켜 회수하여 디클로라이드(CS-5)를 수득한다. 디클로라이드(CS-5)(1.0mol)를 아세토니트릴 중의 N,N-디메틸아미노 피리딘(2.0mol) 또는 N-메틸 이미다졸과 반응시킨다. 반응물을 80℃에서 18시간 동안 가열한 다음, 용매를 진공하에 제거하여 각각의 암모늄 염을 제공한다. 이들 염을 위에서 기재한 바와 같이 금속화시키고 산화시켜 촉매(CS-6) 및 (CS-7)를 수득한다.

[0526] 실시예 5

[0527] 실시예 5는 M이 Co(III)이고,  이 살시이고,  이고, Z가 1-[N-메틸이미다졸륨](CS-8) 또는 디메틸아미노(CS-9)이고, m이 1인 촉매의 합성[여기서, 2개의  그룹이 존재한다(각각 반응식 E5 및 E6)]을 설명한다.

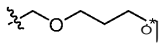
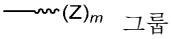
[0528] 반응식 E5



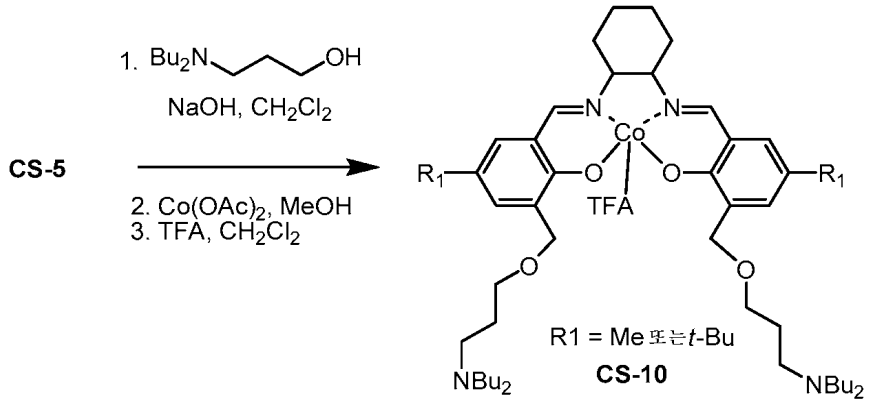
[0529]

[0530] 반응식 E5는 위에서 기재한 것과 유사한 조건을 사용한 화합물(CS-8) 및 (CS-9)의 합성을 나타낸다. CS-8의 합성: 공지된 화합물 1-(2-메틸아미노에틸)-3-메틸이미다졸(2.0mol)을 아세토니트릴 중의 CS-5(1.0mol)와 합한다. 반응물을 80℃에서 18시간 동안 가열한 다음, 용매를 진공하에 제거하고, $Co(OAc)_2$로 금속화시키고 TFA 중에서 산화시킨 다음, 위에서 기재한 바와 같이 수행하여 촉매(CS-8)를 수득한다. CS-9의 합성: N,N,N'-트리메틸-1,2-에탄디아민(4.0mol)을 아세토니트릴 중의 CS-5(1.0mol)와 합한다. 반응물을 80℃에서 18시간 동안 가열한 다음, 용매를 진공하에 제거한다. 조 생성물을 에테르로 희석하고, 여과시켜 아민 염을 제거하고, 진공하에 농축시킨다. 잔사를 탈기 메탄올에 용해시키고, $Co(OAc)_2$(1.0mol)와 합한다. 3시간 동안 교반한 후, 잔사를 여과하고, 메탄올로 세척한다. 트리플루오로아세트산(1.0mol)을 디클로로메탄 중의 고체 잔사의 교반 용액에 서서히 가한다. 교반 후, 3시간 동안 공기 중에 개방시키고, 고체를 여과하고, 진공하에 건조시켜 CS-9를 수득한다.

[0531] 실시예 6

[0532] 실시예 6 및 반응식 E6은 M이 Co(III)이고,  이 살시이고, 가  이고, Z가 디부틸아미노이고, m이 1인 촉매의 합성[여기서, 2개의  그룹이 존재한다]을 설명한다.

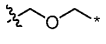
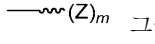
[0533] 반응식 E6



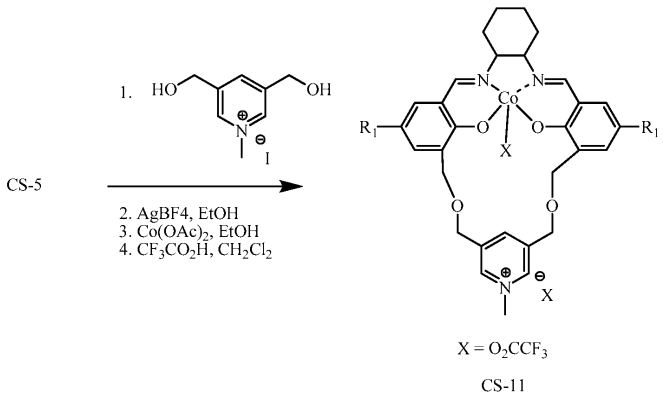
[0534]

[0535] CS-10의 합성: 리간드(CS-5)(1.0mol), 3-(디부틸아미노)-1-프로판올(2.0mol), 50% NaOH 용액(10mol), 테트라부틸암모늄 비설페이트(4mol%) 및 디클로로메탄을 합하고, 65℃에서 밤새 가열한다. 반응 혼합물을 진공하에 농축시켜 대량의 용매를 제거하고, 수성 층을 에틸 아세테이트로 추출한다. 유기 층을 분리하고, 황산마그네슘으로 건조시키고, 여과하고, 진공하에 농축시킨다. 실리카 겔을 사용하여 정제 후, 생성물을 탈기 메탄올에 용해시키고, $Co(OAc)_2$(1.0mol)와 합한다. 3시간 동안 교반 후, 잔사를 여과하고, 메탄올로 세척한다. 트리플루오로아세트산(1.0mol)을 고체 잔사의 디클로로메탄 용액에 서서히 가한다. 교반 후 3시간 동안 공기 중에 개방시키고, 고체를 여과하고, 진공하에 건조시켜 CS-10을 수득한다.

[0536] 실시예 7

[0537] 실시예 7 및 반응식 E7은 M이 Co(III)이고,  이 살시이고,  이 함께, Z 그룹을 포함하는 환을 형성하는 2개의  그룹을 포함하고, Z가 3-[N-메틸피리디늄]이고, m이 1인 촉매의 합성(여기서, 1개의  그룹이 존재한다)을 설명한다.

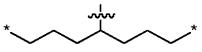
[0538] 반응식 E7



[0539]

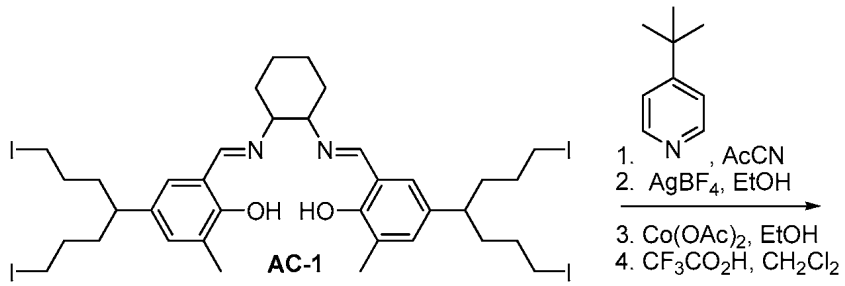
[0540] CS-11의 합성. 리간드(CS-5)(1.0mol), 3,5-비스(하이드록시메틸)-N-메틸피리디늄 요오다이드(2.0mol), 50% NaOH 용액(10mol), 테트라부틸암모늄 비설페이트(4mol%) 및 디클로로메탄을 합하고, 65℃에서 밤새 가열한다. 반응 혼합물을 진공하에 농축시켜 대량의 용매를 제거하고, 수성 층을 에틸 아세테이트로 추출한다. 유기 층을 분리하고, 황산마그네슘으로 건조시키고, 여과하고, 진공하에 농축시킨다. 금속화 및 산화에 대하여 위에서 상술한 공정을 후속하여 CS-11을 수득한다.

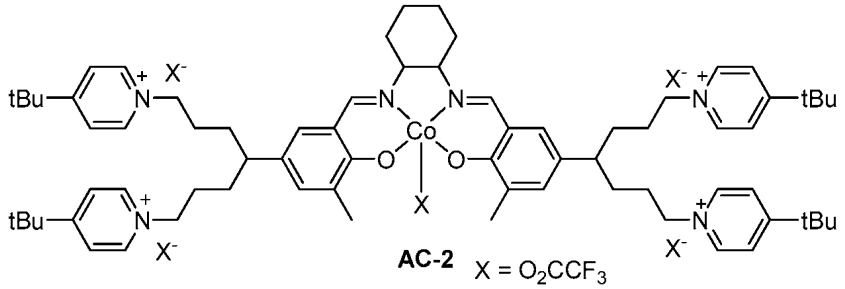
[0541] 실시예 8

[0542] 실시예 8 및 반응식 E8은 M이 Co(III)이고,  이 살시이고, 이  이고, Z가 1-[4-t-부

틸피리디늄]이고, m이 2인 촉매의 합성(여기서, 2개의 $\sim\!\!\sim(Z)_m$ 그룹이 존재한다)을 설명한다.

[0543] 반응식 E8





[0544]

[0545] AC-2의 합성. 중간체(AC-1)(0.37g, 0.35mmol), 4-t부틸피리딘(0.21mℓ, 1.41mmol) 및 AcCN(4mℓ)을 밀봉된 바이얼에서 합하고, 80℃로 18시간 동안 교반하면서 가열하였다. 용매를 진공하에 제거하여, 황색 잔사(0.61g, 수율 110%, AcCN 존재)를 남겼다.

[0546] ^{1}H NMR (400 MHz, $CDCl_3$, δ): 9.53 (t, 8H), 8.21 (s, 2H), 7.94 (t, 8H), 7.08 (s, 2H), 6.83 (s, 2H), 4.81 (m, 8H), 3.29 (m, 2H), 2.78 (m, 2H), 2.15 (s, 6H), 1.5-2.0 (m, 24 H), 1.36 (s, 36H);

[0547] IR (ATR, AcCN으로부터의 필름 캐스트): $\nu_{C=N}$ = 1637cm^{-1}. 무수 EtOH(5mℓ) 중의 잔사(0.30g, 0.19mmol)의 용액을 슐렌크 관(schlenk tube) 속의 $AgBF_4$(0.19g, 0.85mmol)에 가하고, 차광시켜 밤새 교반하였다. 용액을 셀라이트를 통하여 여과하고, 용매를 진공하에 제거하여, 고체 잔사를 수득하였다. 당해 잔사를 용출제로서 5:1 CH_2Cl_2:EtOH를 사용하여 실리카 겔의 작은 플러그를 통하여 플러쉬하였다. 용매를 제거하여 고체 잔사(0.18g, 수율 67%)를 수득하였다.

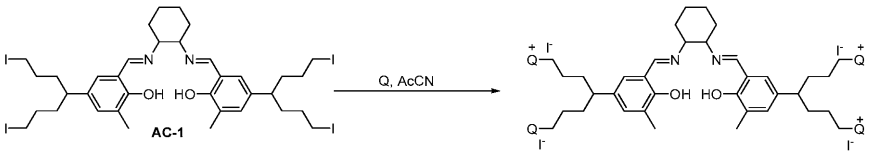
[0548] ^{1}H NMR (400 MHz, $CDCl_3$, δ): 8.75 (t, 8H), 7.98 (d, 2H), 7.92 (t, 8H), 7.1-7.3 (m, 4H), 4.52 (m, 8H), 3.6 (m, 2H), 2.7 (m, 2H), 2.19 (s, 6H), 1.5-2.0 (m, 24 H), 1.38 (s, 36H);

[0549] IR (ATR, CH_2Cl_2로부터의 필름 캐스트): $\nu_{C=N}$ = 1641cm^{-1}, ν_{BF4} = 1050cm^{-1}. 무수 EtOH(4mℓ) 중의 잔사(0.18g, 0.12mmol)의 용액을 N_2하에 슐렌크 관 속의 $Co(OAc)_2$(0.022g, 0.12mmol)에 가하였다. 용액을 실온에서 3시간 동안 교반하고, 용매를 진공하에 제거하였다. 잔사를 에테르로 분쇄하고, 진공하에 건조시키고, CH_2Cl_2에 재용해시켰다. CH_2Cl_2(80㎕) 중의 CF_3CO_2H(9㎕, 0.12mmol)의 용액을 가하고, 용액을 3시간 동안 공기 중에 개방한 상태로 교반하였다. 고체 NaO_2CCF_3(0.067g, 0.49mmol)을 가하고, 용액을 N_2하에 2일 동안 교반하였다. 용액을 셀라이트를 통하여 여과하고, 용매를 진공하에 제거하여 갈색 잔사(0.071g, 수율 37%)를 남겼다.

[0550] ^{1}H NMR (400 MHz, DMSO-d_6, δ): 8.86 (t, 8H), 8.08 (t, 8H), 8.07 (s, 2H), 7.30 (m, 4H), 4.44 (m, 8H), 3.54 (m, 2H), 2.9 (m, 2H), 2.47 (s, 6H), 1.5-2.0 (m, 24 H), 1.29(s, 36H); IR (ATR): $\nu_{C=O}$ = 1682 cm^{-1}, $\nu_{C=N}$ = 1641 cm^{-1}.

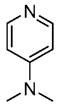
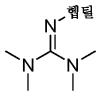
[0551] 추가의 리간드(AC-6) 내지 (AC-11)을 화합물(AC-2)에 대하여 기재된 조건을 사용하여 합성하였고, 반응식 E8b 및 표 E8에 요약한다:

[0552] 반응식 E8b



[0553]

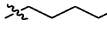
[0554] 표 E8

화합물	Q (반응식 E8b)	^{1}H NMR 스펙트럼[a] (δ, ppm)	IR[b] (cm^{-1})
AC-6[c]		9.0 (d, 8H), 8.6 (t, 4H), 8.5 (s, 2H), 8.1 (t, 8H), 6.9 (s, 2H), 6.8 (s, 2H), 4.5 (t, 8H), 3.4 (m, 2H), 2.1 (s, 6H), 1.4-2.9 (m, 24H).	$\nu_{C=N}$ = 1629
AC-7		8.61 (d, 8H), 8.29 (s, 2H), 6.99 (s, 2H), 6.92 (d, 8H), 6.85 (s, 2H), 4.30 (t, 8H), 3.34 (m, 2H), 3.23 (s, 24H), 2.65 (m, 2H), 2.18 (s, 6H), 1.4-2.9 (m, 16H).	$\nu_{C=N}$ = 1649
AC-8			$\nu_{C=N}$ = 1627
AC-9			$\nu_{C=N}$ = 1610
AC-10			$\nu_{C=N}$ = 1627
AC-11			$\nu_{C=N}$ = 1628

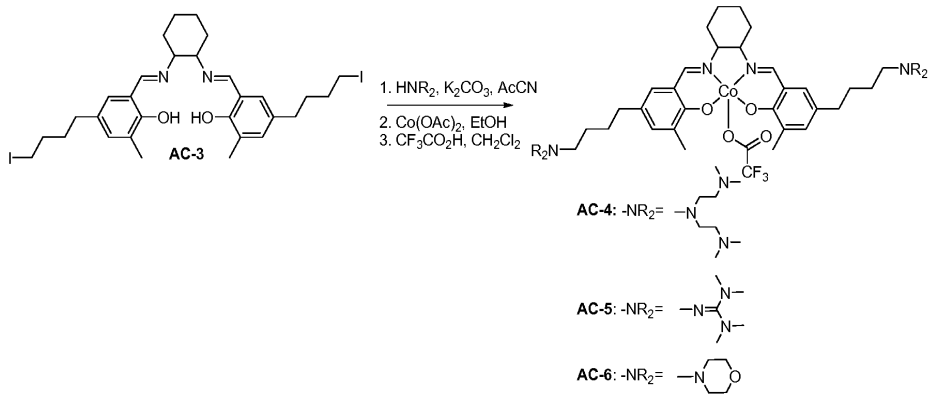
[0555]

[0556] [a] 400MHz, $CDCl_3$. [b] 모든 화합물들은 AC-1 중에서 CH_2I 그룹으로 인하여 1213cm^{-1}에서 피크의 손실을 나타내었다. [c] NMR 스펙트럼은 DMSO-d_6 중의 것이다.

[0557] 실시예 9

[0558] 실시예 9 및 반응식 E9는 M이 Co(III)이고,  이 살시이고,  이  이고, Z가 N,N-비스-(3-디메틸아미노프로필)아미노(AC-4), 테트라메틸 구아니디노(AC-5), N-연결된 모르폴리노(AC-6) 또는 N-연결된 피페리디노(AC-14)이고, m이 2인 촉매의 합성(여기서, 2개의  그룹이 존재한다)을 설명한다.

[0559] 반응식 E9



[0560]

[0561] AC-4의 합성. 중간체(AC-3)(0.45g, 0.63mmol), 3,3'-이미노비스(N,N'-디메틸프로필아민)(0.28㎖, 1.26mmol), K_2CO_3(0.35g, 2.52mmol) 및 AcCN(5㎖)을 밀봉된 바이얼 속에서 합하고, 18시간 동안 교반하면서 80℃로 가열하였다. 용액을 여과하고, 용매를 진공하에 제거하고, 에테르로 분쇄하고, 진공하에 건조시켜 황색 잔사(0.48g, 수율 91%)를 남겼다.

[0562] ^{1}H NMR (400 MHz, $CDCl_3$, δ): 8.21 (m, 2H), 6.8-7.2 (m, 4H), 3.75 (m, 2H), 3.0-3.4 (m, 20H), 2.0-2.8 (m, 28H), 2.18 (s, 6H), 1.4-2.0 (m, 24 H); IR (ATR): $\nu_{C=N}$ = 1600 cm^{-1}.

[0563] 무수 EtOH(10㎖) 중의 잔사(0.21g, 0.25mmol)의 용액을 N_2하에 슐렌크 관 속의 $Co(OAc)_2$(0.045g, 0.25mmol)에 가하였다. CH_2Cl_2(3㎖)를 가하여 용액을 완전히 용해시켰다. 용액을 실온에서 18시간 동안 교반하고, 용매를 진공하에 제거하였다. 잔사를 에테르로 분쇄시키고, 진공하에 건조시키고, CH_2Cl_2(10㎖)에 재용해시켰다. CF_3CO_2H(20㎕, 0.25mmol)를 가하고, 용액을 공기 중에 개방하여 3.5시간 동안 교반하였다. 용매를 진공하에 제거하고, 에테르로 분쇄시키고, 진공하에 건조시켜 갈색 잔사(0.28g, 수율 108%, 잔여 CH_2Cl_2)를 남겼다.

[0564] ^{1}H NMR (400 MHz, DMSO-d_6, δ): 7.92 (m, 2H), 7.1-7.4 (m, 4H), 3.58 (m, 2H), 3.0-3.4 (m, 20H), 2.0-2.8 (m, 28H), 2.3 (s, 6H), 1.4-2.0 (m, 24 H); IR (ATR): $\nu_{C=O}$ = 1688 cm^{-1}, $\nu_{C=N}$ = 1616 cm^{-1}.

[0565] AC-5의 합성. 중간체(AC-3)(0.20g, 0.29mmol), 1,1,3,3-테트라메틸구아니딘(0.21㎖, 1.71mmol), K_2CO_3(0.39g, 2.85mmol) 및 AcCN(2㎖)을 밀봉된 바이얼 속에서 합하고, 잔사를 헥산으로도 세척함을 제외하고는, AC-4에서와 같이 반응시켰다.

^{1}H NMR (400 MHz, $CDCl_3$, δ): 8.23 (d, 2H), 6.95 (s, 2H), 6.80 (s, 2H), 3.35 (m, 2H), 3.1 (m, 4H), 2.7-2.8 (m, 24H), 2.48 (m, 4H), 2.20 (s, 6H), 1.4-2.0 (m, 16 H); IR (ATR): $\nu_{C=N}$ = 1594 cm^{-1}. 잔사를 AC-4에서와 같이 반응시켰다. IR (ATR): $\nu_{C=O}$ = 1690 cm^{-1}, $\nu_{C=N}$ = 1610 cm^{-1}.

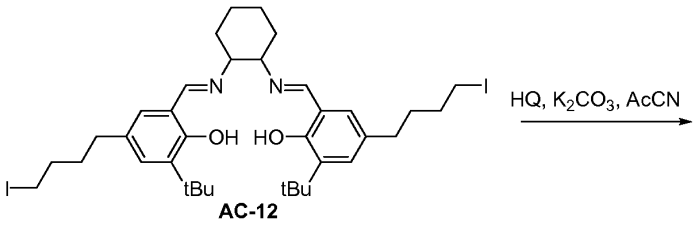
[0566] AC-6의 합성. 중간체(AC-3)(0.32g, 0.44mmol), 모르폴린(0.16㎖, 1.77mmol), K_2CO_3(0.61g, 4.4mmol) 및 AcCN(4㎖)을 밀봉된 바이얼 속에서 합하고, 잔사를 NaOAc 완충액(pH=4) 용액으로도 세척하여 잔사 모르폴린을 제거함을 제외하고는, AC-4에서와 같이 반응시켰다.

^{1}H NMR (400 MHz, $CDCl_3$, δ): 8.22 (s, 2H), 6.92 (s, 2H), 6.79 (s, 2H), 3.69 (m, 8H), 3.28 (m, 2H), 2.2-2.5 (m, 16H), 2.19 (s, 6H), 1.4-2.0 (m, 16 H). 잔사를 AC-4에서와 같이 반응시켰다. ^{1}H NMR (400 MHz, DMSO-d_6, δ): 7.91 (s, 2H), 7.23 (s, 2H), 7.14 (s, 2H), 3.6 (m, 2H), 3.52 (m, 8H), 2.99 (m, 2H), 2.57 (s, 6H), 2.47 (m, 4H), 2.2-2.5 (m, 12H), 1.4-2.0 (m, 16 H); IR (ATR): $\nu_{C=O}$ = 1671 cm^{-1}, $\nu_{C=N}$ = 1630 cm^{-1}.

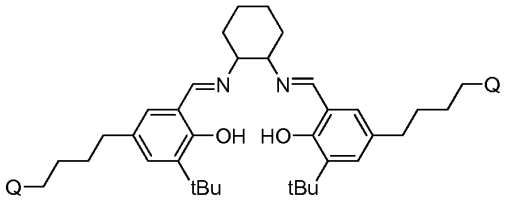
[0567]

[0568] 추가의 리간드(AC-13) 및 (AC-14)를 화합물(AC-4) 내지 (AC-6)에 대하여 기재한 조건을 사용하여 합성하고, 반응식 E9b 및 표 E9에 요약한다:

[0569] 반응식 E9b



AC-12



[0570]

[0571] 표 E9

화합물	Q (반응식 E9b)	^{1}H NMR 스펙트럼[a] (δ, ppm)	IR[b] (cm^{-1})
AC-13		8.25 (s, 2H), 7.02 (d, 2H), 6.77 (d, 2H), 3.7 (m, 8H), 3.3 (m, 2H), 2.2-2.6 (m, 12H), 1.3-2.0 (m, 20H), 1.37 (s, 18H)	$\nu_{C=N}$ = 1628
AC-14			$\nu_{C=N}$ = 1629

[0572]

[0573] [a] 400MHz, $CDCl_3$. [b] 모든 화합물들은 AC-1 중에서 CH_2I 그룹으로 인하여 1213cm^{-1}에서 피크의 손실을 나타내었다.

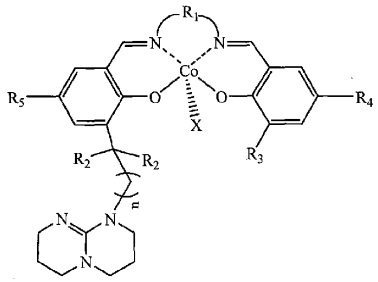
[0574] 실시예 10

[0575] 다른 방법들 중에서도 본건의 우선일 후의 기타에 의한 문헌을 통하여, 본원에 기재된 본 발명의 개념, 공정, 방법 및 조성물의 확인을 제공하였다. 예를 들면, 실시예 10 내지 27은 CN 101412809A로서 공개된, 중국 특허원 제200810229276.1호에 제시된 작업 실시예를 설명한다. 추가의 실험 및 확인 데이터는 문헌(참조: Lu and co-workers, J. Am. Chem. Soc., 2009, 131, 11509-11518)에 기재되어 있고, 이를 뒷받침하는 정보는 www.pubs.acs.org에서 이용 가능하며, 이들 각각은 전체적으로 본원에 참조로 인용된다.

[0576] 특정 양태에서, 제공된 촉매 및/또는 폴리카보네이트의 제조 방법은 다음 중의 하나 이상을 특징으로 한다: 낮은 촉매 농도에서 높은 촉매 활성 보유; 상대적으로 약한 반응 조건; 중합체 생성물에 대한 높은 선택도를 갖는 높은 촉매 활성; 상대적으로 협소한 분자량 분포를 갖는 97% 초과의 폴리카보네이트 생성물; 보다 높은 반응 온도(예를 들면, 50℃ 초과, 75℃ 초과 또는 100℃ 초과)에서 이산화탄소와 에폭사이드와의 공중합에 대한 높은 촉매 활성 보유; 및 폴리카보네이트 중합체의 합성을 위한 이산화탄소와 2종 이상의 알킬렌 옥사이드와의 중합

을 촉매시키는 데 사용될 수 있는 촉매.

[0577] 다음 물질을 주위 온도에서 200㎖의 유효 용적의 스테인레스 강 고압 반응기로 순차적으로 가하였다: 코발트 착체(I-a)(R_1은 사이클로헥실 디아민이고, X는 NO_3^{-1} 음이온이고; R_2 = H이고; R_3, R_4 및 R_5는 3급 부틸이고; 유기 염기 그룹을 함유하는 그룹은 리간드의 벤젠 환의 3위치이고, n은 2이다) 0.1mmol 및 프로필렌 옥사이드 1mol. 이어서, 반응기를 이산화탄소로 충전시키고, 압력을 2.0MPa에서 일정하게 유지시킨다. 온도를 25℃에서 조절하였다. 내용물을 자기 교반 바로 6시간 동안 교반하고, 잔여 이산화탄소를 서서히 방출시켰다. 잔여 알킬렌 옥사이드를 -20℃ 냉 트랩(cold trap)에서 회수하고, 특정량의 메탄올/클로로포름의 혼합물을 가하여 고분자 중합체를 용해시켰다. 이어서, 다량의 디에틸 에테르를 가하여 폴리카보네이트를 침전시켰다. 침전물을 여과시키고, 디에틸 에테르로 수회 세척하고, 진공하에 일정한 중량으로 건조시켜 백색 고체로서 폴리카보네이트 27g을 수득하였다. 중합체의 평균 분자량은 겔 투과 크로마토그래피에 의하여 측정하여 101,000g/mol이고 분자량 분포는 1.24였다. 배리언(Varian) INOVA-400MHz 핵 자기 공명 분광계를 사용하여 이의 ^{1}H-NMR을 측정하고, 결과는 다른 구조가 99%를 초과함을 나타내었다.



I-a

[0578]

[0579] 실시예 11

[0580] 촉매 대 프로필렌 옥사이드의 몰 비를 1:10000에서 1:50000으로 변화시킴(촉매 0.02mmol 및 프로필렌 옥사이드 1mol을 사용)을 제외하고는, 실시예 10에서와 동일한 촉매 및 동일한 조건으로 동일한 장치 및 반응 조건을 사용하였다. 반응을 25℃에서 24시간 동안 수행하여 분자량 223,000g/mol 및 분자량 분포 1.29를 갖는 폴리(프로필렌 카보네이트) 21g을 수득하였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0581] 실시예 12

[0582] 촉매 대 프로필렌 옥사이드의 몰 비를 1:10000에서 1:200000로 변화시킴(촉매 0.008mmol 및 프로필렌 옥사이드 1.6mol을 사용)을 제외하고는, 실시예 10에서와 동일한 촉매 및 동일한 조건으로 동일한 장치 및 반응 조건을 사용하였다. 반응을 50℃에서 10시간 동안 수행하여 분자량이 318,000g/mol이고 분자량 분포가 1.37인 폴리(프로필렌 카보네이트) 19g을 수득하였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0583] 실시예 13

[0584] 촉매 대 프로필렌 옥사이드의 몰 비를 1:10000에서 1:2000로 변화시킴(촉매 0.5mmol 및 프로필렌 옥사이드 1mol을 사용)을 제외하고는, 실시예 10에서와 동일한 촉매 및 동일한 조건으로 동일한 장치 및 반응 조건을 사용하였다. 반응을 25℃에서 3시간 동안 수행하여 분자량이 52,800g/mol이고 분자량 분포가 1.30인 폴리(프로필렌 카보네이트) 48g을 수득하였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0585] 실시예 14

[0586] 반응 온도를 25℃에서 100℃로 변화시킴을 제외하고는, 실시예 10에서와 동일한 촉매 및 동일한 조건으로 동일한 장치 및 반응 조건을 사용하고, 반응을 0.5시간 동안 수행하여 분자량이 112,400g/mol이고 분자량 분포가 1.38인 폴리(프로필렌 카보네이트) 34g을 수득하였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0587] 실시예 15

[0588] 반응 온도를 25℃에서 10℃로 변화시킴을 제외하고는, 실시예 10에서와 동일한 촉매 및 동일한 조건으로 동일한

장치 및 반응 조건을 사용하고, 반응을 10시간 동안 수행하여 분자량이 914,000g/mol이고 분자량 분포가 1.38인 폴리(프로필렌 카보네이트) 18g을 수득하였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0589] 실시예 16

[0590] 프로필렌 옥사이드를 1,2-부틸렌 옥사이드로 대체시킴을 제외하고는, 실시예 10에서와 동일한 촉매 및 동일한 조건으로 동일한 장치 및 반응 조건을 사용하였다. 반응을 25℃에서 6시간 동안 수행하여 분자량이 127,000g/mol이고 분자량 분포가 1.21인 폴리(프로필렌 카보네이트) 31g을 수득하였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0591] 실시예 17

[0592] 프로필렌 옥사이드를 1,2-부틸렌 옥사이드로 대체시킴을 제외하고는, 실시예 10에서와 동일한 촉매 및 동일한 조건으로 동일한 장치 및 반응 조건을 사용하였다. 반응을 25℃에서 10시간 동안 수행하여 분자량이 109,000g/mol이고 분자량 분포가 1.38인 폴리(프로필렌 카보네이트) 34g을 수득하였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0593] 실시예 18

[0594] 프로필렌 옥사이드를 프로필렌 옥사이드와 사이클로헥실렌 옥사이드의 혼합물로 대체시킴(촉매 대 프로필렌 옥사이드와 사이클로헥실렌 옥사이드의 몰 비는 1:5000:5000였음)을 제외하고는, 실시예 10에서와 동일한 촉매 및 동일한 조건으로 동일한 장치 및 반응 조건을 사용하였다. 반응을 50℃에서 6시간 동안 수행하여 분자량이 187,000g/mol이고 분자량 분포가 1.29인 폴리(프로필렌-코-사이클로헥센 카보네이트) 59g을 수득하였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0595] 실시예 19

[0596] 코발트 착체(I-a)의 축방향 음이온을 니트레이트 라디칼에서 아세테이트 잔기로 변화시킴을 제외하고는, 실시예 10에서와 동일한 촉매 및 동일한 조건으로 동일한 장치 및 반응 조건을 사용하였다. 반응을 25℃에서 6시간 동안 수행하여 분자량이 95,000g/mol이고 분자량 분포가 1.28인 폴리(프로필렌 카보네이트) 34g을 수득하였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0597] 실시예 20

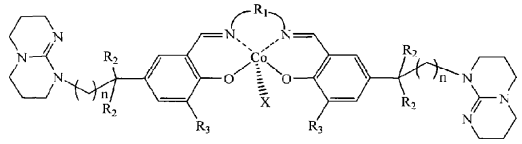
[0598] 코발트 착체(I-a)의 디아민 골격을 사이클로헥산 디아민에서 에틸렌 디아민으로 변화시킴을 제외하고는, 실시예 10에서와 동일한 촉매 및 동일한 조건으로 동일한 장치 및 반응 조건을 사용하였다. 반응을 25℃에서 6시간 동안 수행하여 분자량이 112,000g/mol이고 분자량 분포가 1.20인 폴리(프로필렌 카보네이트) 29g을 수득하였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0599] 실시예 21

[0600] 코발트 착체(I-a)의 디아민 골격을 사이클로헥산 디아민에서 o-페닐렌 디아민으로 변화시킴을 제외하고는, 실시예 10에서와 동일한 촉매 및 동일한 조건으로 동일한 장치 및 반응 조건을 사용하였다. 반응을 25℃에서 6시간 동안 수행하여 분자량이 92,000g/mol이고 분자량 분포가 1.15인 폴리(프로필렌 카보네이트) 25g을 수득하였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0601] 실시예 22

[0602] 다음 물질을 주위 온도에서 200㎖ 용적의 스테인레스 강 고압 반응기로 순차적으로 가하였다: 코발트 착체(I-b)(R_1은 1,2-프로필렌 디아민이고, X는 디니트로페닐 음이온이고; R_2=H이고; R_1은 3급 부틸이고; 리간드에 2개의 벤젠 환의 5위치에 유기 염기 그룹이 존재하고, n은 0이다) 0.1mmol 및 프로필렌 옥사이드 1mol. 이어서, 반응기를 이산화탄소로 충전시키고, 압력을 2.0MPa에서 일정하게 유지시켰다. 반응을 25℃에서 6시간 동안 수행하여 폴리카보네이21트 23g을 백색 고체로서 수득하였다. 중합체의 평균 분자량은 겔 투과 크로마토그래피에 의하여 81,000g/mol로 측정되고 분자량 분포는 1.34였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결(linkage)을 함유하였다.

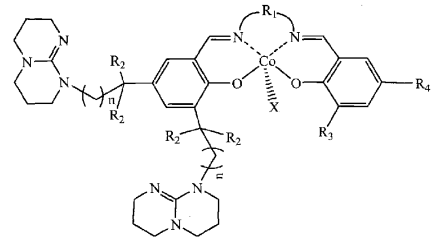


I-b

[0603]

[0604] 실시예 23

[0605] 다음 물질을 주위 온도에서 200㎖ 용적의 스테인레스 강 고압 반응기로 순차적으로 가하였다: 코발트 착체(I-c)(R_1은 에틸렌 디아민이고, X는 디니트로페닐 음이온이고; R_2=H이고; R_3은 3급 부틸이고; 리간드에 벤젠 환 중의 하나의 3위치 및 5위치에 유기 염기 그룹이 존재하고, n은 0이다) 0.1mmol 및 프로필렌 옥사이드 1mol. 이어서, 반응기를 이산화탄소로 충전시키고, 압력을 2.0MPa에서 일정하게 유지시켰다. 반응을 25℃에서 6시간 동안 수행하여 폴리카보네이트 23g을 백색 고체로서 수득하였다. 중합체의 평균 분자량은 겔 투과 크로마토그래피에 의하여 81,000g/mol로 측정되고 분자량 분포는 1.34였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.



I-c

[0606]

[0607] 실시예 24

[0608] 다음 물질을 주위 온도에서 200㎖ 용적의 스테인레스 강 고압 반응기로 순차적으로 가하였다: 코발트 착체(I-b)(R_1은 에틸렌 디아민이고, X는 디니트로페닐 음이온이고; R_2=H이고; R_3 및 R_4는 3급 부틸이고; 리간드에 2개의 벤젠 환의 5위치에 유기 염기 그룹이 존재하고, n은 0이다) 0.1mmol 및 프로필렌 옥사이드 1mol. 이어서, 반응기를 이산화탄소로 충전시키고, 압력을 2.0MPa에서 일정하게 유지시켰다. 반응을 25℃에서 6시간 동안 수행하여 폴리카보네이트 26g을 백색 고체로서 수득하였다. 중합체의 평균 분자량은 겔 투과 크로마토그래피에 의하여 83,000g/mol로 측정되고 분자량 분포는 1.19였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0609] 실시예 25

[0610] 다음 물질을 주위 온도에서 200㎖ 용적의 스테인레스 강 고압 반응기로 순차적으로 가하였다: 코발트 착체(I-a)(R_1은 2,3-부틸렌 디아민이고, X는 니트레이트 음이온이고; R_2=H이고; R_3 및 R_4는 메톡실 그룹이고; R_1은 3급 부틸이고; 리간드에 벤젠 환 중의 하나의 3위치에 유기 염기 그룹이 존재하고, n은 2이다) 0.1mmol 및 프로필렌 옥사이드 1mol. 이어서, 반응기를 이산화탄소로 충전시키고, 압력을 2.0MPa에서 일정하게 유지시켰다. 반응을 25℃에서 6시간 동안 수행하여 폴리카보네이트 22g을 백색 고체로서 수득하였다. 중합체의 평균 분자량은 겔 투과 크로마토그래피에 의하여 73,000g/mol로 측정되고 분자량 분포는 1.14였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0611] 실시예 26

[0612] 압력을 2.0MPa에서 0.1MPa로 변화시킴을 제외하고는, 실시예 10에서와 동일한 촉매 및 동일한 조건으로 동일한 장치 및 반응 조건을 사용하였다. 반응을 25℃에서 10시간 동안 수행하여 분자량이 100,400g/mol이고 분자량 분포가 1.17인 폴리(프로필렌 카보네이트) 25g을 수득하였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0613] 실시예 27

[0614] 압력을 2.0MPa에서 6.0MPa로 변화시킴을 제외하고는, 실시예 10에서와 동일한 촉매 및 동일한 조건으로 동일한 장치 및 반응 조건을 사용하였다. 반응을 25℃에서 6시간 동안 수행하여 분자량이 125,000g/mol이고 분자량 분포가 1.25인 폴리(프로필렌 카보네이트) 29g을 수득하였다. 형성된 중합체는 99% 초과의 카보네이트 연결을 함유하였다.

[0615] 표 E10

[0616] 실시예 10 내지 27의 요약

촉매											반응 조건						결과							
실시예	Cat.	R1	R2	R3	R4	R5	X	n		Cat.		에폭사이드		P		T	t	PPC		TON	TOF	MW	PDI	g PC/촉매 g	kg PC/촉매 mol
										(mmol)	(mg)	(mmol)	MPa	psi	(deg C)	(h)	수율 (g)	전환율 (%)		(h^{-1})	(kDa)			
10	Ia	Cy	H	tBu	tBu	tBu	NO_3	2	PO	0.1	70.5	1000	2	290	25	6	27	26.4	2644	441	101	1.2	383	270
11										0.02	14.1	1000	2	290	25	24	21	20.6	10284	429	233	1.3	1489	1050
12										0.008	5.64	1600	2	290	50	10	19	11.6	23262	2326	318	1.4	3369	2375
13										0.5	353	1000	2	290	25	3	48	47.0	940	313	53	1.3	136	96
14										0.1	70.5	1000	2	290	100	0.5	34	33	3330	6660	112	1.4	482	340
15										0.1	70.5	1000	2	290	10	10	18	17.6	1763	176	914	1.4	255	180
26										0.1	70.5	1000	0.1	15	25	10	25	24.5	2449	244.9	100	1.2	355	250
27										0.1	70.5	1000	6	870	25	6	29	28.4	2840	473.4	125	1.3	411	290
16									BO	0.1	70.5	1000	2	290	25	6	31	26.7	2669	444.9	127	1.2	440	310
17									OO	0.1	70.5	1000	2	290	25	10	34	19.7	1974	197.4	109	1.4	482	340
18									PO/CHO	0.1	70.5	1000	2	290	50	6	59						837	590
19		Cy	H	tBu	tBu	tBu	OAc	2	PO	0.1	70.2	1000	2	290	25	6	34	33.3	3330	555	95	1.3	484	340
20		Et	H	tBu	tBu	tBu	NO_3	2	PO	0.1	65.1	1000	2	290	25	6	29	28.4	2840	473	112	1.2	446	290
21		Ph	H	tBu	tBu	tBu	NO_3	2	PO	0.1	69.9	1000	2	290	25	6	25	24.5	2449	408	92	1.2	358	250
25		Bu	H	OMe	OMe	tBu	NO_3	2	PO	0.1	62.7	1000	2	290	25	6	22	21.5	2155	359.1	73	1.1	351	220
22	Ib	Pr		tBu			DNP	0	PO	0.1	89	1000	2	290	25	6	23	22.5	2253	375	81	1.3	258	230
24	Ib	Et	H	tBu			DNP	0	PO	0.1	87.7	1000	2	290	25	6	26	25.5	2547	424.4	83	1.2	296	260
23	Ic	Et	H	tBu	tBu		DNP	0	PO	0.1	88.2	1000	2	290	25	6	23	22.5	2253	375.4	81	1.3	261	230

[0617]

[0618] 본 발명자들은 본 발명의 다수의 양태를 설명하였지만, 본 발명의 기본 실시예는 변경시켜 본 발명의 화합물 및 방법을 이용하는 기타 양태들을 제공할 수 있음이 명백하다. 그러므로, 본 발명의 영역은 예로서 제시된 특정 양태에 의해서보다는 첨부한 특허청구범위에 의하여 정의됨이 명백하다.