

**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(51) . Int. Cl.<sup>7</sup>

C07C 335/26

C07C 335/24

(11) 공개번호

10-2005-0111306

(43) 공개일자

2005년11월24일

(21) 출원번호 10-2005-7009112

(22) 출원일자 2005년05월19일

번역문 제출일자 2005년05월19일

(86) 국제출원번호 PCT/US2003/036809

(87) 국제공개번호

WO 2004/046095

국제출원일자 2003년11월18일

국제공개일자

2004년06월03일

(30) 우선권주장 60/427,634 2002년11월19일 미국(US)

(71) 출원인  
아칠리온 파르마세우티칼스 인코포레이티드  
미합중국, 코네티컷, 뉴 하aven, 조지 스트리트 300 (우:06511)

(72) 발명자  
 첸 다웨이  
 미합중국 커넥티컷 06457, 미들타운, 타운 플레이스 4132  
 데쉬판데 밀린드  
 미합중국 커넥티컷 06443, 메디슨, 필드 브룩 로오드 44  
 뚜르코오프 앤드류  
 미합중국 커넥티컷 06877, 럭지필드, 키일러 드라이브163  
 파드캐 아비나쉬  
 미합중국 커넥티컷 06405, 브렌포드, 몬토야 드라이브 62  
 왕 시앙쥬  
 미합중국 커넥티컷 06405, 브렌포드, 브러쉬 플레이인로오드 4, 아파트  
 244호  
 쉐이핑  
 미합중국 커넥티컷 06405, 브랜드포드, 벨리지 레인 92  
 리우 쿠익시앙  
 미합중국 커넥티컷 06405, 브렌포드, 스토운릿지 레인 4  
 퀸 제스  
 미합중국 커넥티컷 06095, 윈저, 알렌 로오드 55  
 오칸다 준코  
 미합중국 커넥티컷 06511, 뉴헤이븐, 휘트니 애버뉴 572,아파트 E1호  
 리 쇼우밍  
 미합중국 커넥티컷 06410, 체셔, 브룩필드 코오트 6

(74) 대리인 박상수

**심사청구 : 없음****(54) 바이러스 복제 억제제로서의 치환된 아릴 티오우레아 및관련 화합물****요약**

본 발명은 변수 A<sub>1</sub>, A<sub>2</sub>, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, V, W, X, Y, 및 Z가 본원에서 규정되는 식 I의 화합물 및 그것의 약제학적으로 허용될 수 있는 염을 제공한다. 본원에 기재된 식 I의 특정 화합물은 강력한 항바이러스 활성을 나타낸다. 본 발명은 특히 C형 간염 바이러스 복제의 강력하고 및/또는 선택적인 억제제인 식 I의 화합물을 제공한다. 본 발명은 또한 하나 또는 그 이상의 식 I의 화합물, 또는 염, 용매 화합물, 또는 그러한 화합물의 아실화된 약물, 및 하나 또는 그 이상의 약제학적으로 허용될 수 있는 담체, 부형제, 또는 희석제를 함유하고 있는 약제학적 조성물을 제공한다. 본 발명은 또한 특정 감염성 질병으로 고생하는 환자를, 그러한 환자에게 질병 또는 질환의 증상 또는 신호를 감소시키기에 효과적인 양의 식 I의 화합물을 투여함으로써 치료하는 방법을 포함한다. 이들 감염성 질병은 바이러스 감염, 특히 HCV 감염이다. 본 발명은 특히 감염성 질병으로 고생하는 사람 환자를 치료하는 방법뿐만 아니라 감염성 질병으로 고생하는 가축, 반려 동물을 포함한 다른 동물의 치료 방법도 포함한다. 치료 방법은 단일 활성 성분으로서 식 I의 화합물을 투여하거나 또는 식 I의 화합물과 하나 또는 그 이상의 다른 치료제를 함께 투여하는 것으로 이루어진다.

## 대표도

도 1

## 색인어

HCV 감염, C형 간염 바이러스, C형 간염 바이러스 복제 억제제, 티오우레아

## 명세서

### 기술분야

본 발명은 항바이러스제로서 유용한 아릴티오우레아 유도체 및 관련 화합물에 관한 것이다. 본원에 개시되는 특정 아릴티오우레아 유도체 및 관련 화합물은 바이러스 복제, 특히 C형 간염 바이러스 복제의 강력하고 및/또는 선택적인 억제제이다. 본 발명은 또한 하나 또는 그 이상의 아릴티오우레아 유도체 또는 관련 화합물 및 하나 또는 그 이상의 약제학적으로 허용될 수 있는 담체, 부형제, 또는 희석제를 함유하는 약학 조성물을 제공한다. 그런 약학 조성물은 유일한 활성 제제로서 아릴티오우레아 유도체 또는 관련 화합물을 함유하거나, 아릴티오우레아 유도체 또는 관련 화합물과 하나 또는 그 이상의 다른 약제학적으로 허용될 수 있는 활성 제제와의 조합물을 함유할 수 있다. 본 발명은 또한 포유동물의 C형 간염 바이러스성 감염을 치료하는 방법도 제공한다.

### 배경기술

1940년대에 처음으로 바이러스성 간염으로 언급되었던 질병은 감염성 간염 (A형 간염, HAV)과 동종성 혈청 간염 (B형 간염, HBV)의 두 개의 별도의 질병으로 분류되었다. 혈액 제품의 수혈은 바이러스성 간염의 통상적인 감염 경로로 증명되었다. HBV는 원래 그 질병의 전염병학 및 임상적 특징이 HAV의 그것과는 맞지 않았기 때문에 수혈 후 감염된 간염의 병원체일 것으로 추정되었다.

B형 간염 표면 항원 (HBsAg)에 대한 방사선 면역 분석법이 HBV로 감염된 환자를 확인하기 위한 도구로서 활용 가능하게 되자 곧 이어서 수혈후 간염에 걸린 대부분의 환자들이 HBsAg에 대해 네가티브 반응을 보인 것으로 드러났다. 그러므로 수혈후에 발생하는 간염은 A형 또는 B형 간염에 의해 발생하는 것이 아니었고, 계속해서 비-A, 비-B형 간염이라 불리게 되었다.

비-A, 비-B형 간염의 병원체 (C형 간염 바이러스, HCV)는 1989년에 수혈 후 비-A, 비-B형 간염에 걸려 있는 환자로부터 취한 혈청으로 감염된 침팬지의 RNA 및 DNA로부터 만들어진 cDNA 발현 라이브러리의 스크리닝을 통하여 발견되었다. 바이러스 단백질을 코드화한 게놈 부분을 확인하기 위하여 라이브러리가 비-A, 비-B형 간염에 걸려 있는 환자들로부터 얻은 항체를 사용하여 스크린되었다. 이들 연구는 그들이 확인한 바이러스가 대부분의 비-A, 비-B형 간염의 원인인지지를 규명하기 위하여 계속되었다.

C형 간염 바이러스는 미국에서 가장 널리 퍼져있는 만성 간 질병의 병원체 중 하나이다. 그것은 급성 바이러스성 간염의 약 15 %, 만성 간염의 60 내지 70 %를 차지하고, 간경변, 말기 간질환, 및 간암의 약 50 %까지를 차지한다. 거의 4백만, 또는 미국 인구의 1.8 %가 HCV에 대한 항체 (항-HCV)를 가지고 있는데, 이것은 바이러스로 인한 감염이 진행중이거나 이

전에 감염되었던 것을 나타낸다. C형 간염은 미국에서 연간 8,000 내지 10,000명의 사망자를 발생시키는 것으로 추산된다. C형 간염 바이러스 (HCV) 감염은 전 세계적으로 발생하며, 그것의 확인 전에는 수혈과 관련된 간염의 대부분의 원인인 것으로 드러났었다. 전 세계적인 혈액 기증자의 항-HCV의 혈청학적 보급은 0.02 %에서 1.23 % 사이로 다양한 것으로 밝혀졌다. HCV는 또한 혈액 제품에 노출된 개인에게는 통상적인 간염 원인이다. 과거 10년 동안 미국에서는 매년 150,000건의 새로운 HCV 감염 사건이 일어난 것으로 추정되었다.

HCV 감염의 급성 단계는 보통 미약한 증상들과 관련된다. 그러나 감염된 사람들의 15 내지 20 % 만이 분명한 HCV를 보이는 것을 시사하는 증거가 있다. 만성적으로 감염된 사람들의 그룹 중에서 10 내지 20 %는 간경변으로 알려져 있는 생명을 위협하는 상태로 진행될 것이고, 다른 1 내지 5 %는 간세포 암종으로 불리는 간암으로 발전될 것이다. 불행하게도 감염된 전체 집단은 그 누구도 어떤 사람이 결국에는 이들 생명을 위협받는 상태 중 어느 하나로 발전될 것인지를 예측할 수 없기 때문에 모두 위험에 노출되어 있다.

HCV는 플라비비리다에 과(Flaviviridae family)에 속하는 작고, 껍질에 싸여 있는, 단일 가닥의 포지티브 RNA 바이러스이다. 이것의 계놈은 대략 10,000 뉴클레오티드이며 약 3,000 아미노산의 단일 당단백질을 코드화한다. 당단백질은 숙주 세포와 바이러스 프로테아제에 의해 바이러스 복제에 필요한 3개의 주요 구조적 단백질과 여러 개의 비-구조적 단백질로 프로세스된다. 지금까지 약간 상이한 계놈 서열을 가지는 HCV의 여러 개의 상이한 유전자형이 인터페론 알파를 이용한 처리에 대한 반응에서 차이와 상관관계가 있는 것으로 확인되었다.

HCV는 감염된 세포의 세포질에서, 소포체 망상 조직과 밀접한 관계하에 복제한다. 들어오는 포지티브 센스 RNA는 방출되고 전위가 내부 개시 메카니즘을 경유하여 개시된다. 내부 개시는 계놈의 5' 단부에서 시스-작용 RNA 엘레먼트에 의해 지시된다; 일부의 보고서는 이 내부 리보솜 유입 부위, 또는 IRES의 전체 활성이 5' 미번역 영역 (UTR)과 오픈 리딩 프레임 (ORF)의 처음 123 아미노산 주위를 회전하는 처음 700 뉴클레오티드에서 나타난다고 시사하였다. 모든 HCV 단백질 생성물은 3개의 프로테아제: 숙주 신호 웹티다제, 바이러스 자기-절단 메탈로프로테이나제, NS2, 또는 바이러스 세린 프로테아제 NS3/4A 중 하나에 의해 수행된, 큰 (대략 3000 아미노산) 다단백질의 단백질 가수분해적 절단에 의해 생성된다. 이들 효소의 작용의 조합으로 바이러스 계놈 RNA의 복제와 패키징에 필요한 구조적 단백질 (C, E1 및 E2)과 비-구조적 단백질 (NS2, NS3, NS4A, NS4B, NS5A, 및 NS5B)이 생성된다. NS5B는 유입 계놈 RNA의 네가티브 가닥 복사물 (상보하는 RNA, 또는 cRNA)로의 전환에 책임이 있는 바이러스 RNA-의존성 RNA 중합효소 (RDRP)이다; cRNA는 나중에 보다 포지티브한 센스 계놈/메신저 RNA의 NS5B에 의한 전사에 대한 주형으로서 작용한다.

효과적인 백신이 매우 필요하지만 아직은 i) 효과적인 세포 배양 시스템과 작은 동물 모델의 부족; ii) 약한 중화 체액성 및 보호성 세포 면역 반응; iii) 바이러스의 현저한 유전적 변이성 때문에 가까운 미래에 개발될 것 같지 않다.

여러 연구소 및 실험실에서는 항-HCV 약물을 확인하고 개발하기 위한 시도들이 이루어지고 있다. 현재 HCV에 대해 유일하게 효과적인 치료법은 알파-인터페론으로, 그것은 간과 혈액 (바이러스가 들어있는) 중에 바이러스의 양을 단지 적은 비율의 감염된 환자에게서만 감소시킨다. 알파 인터페론은 10여년 전보다 이전에 HCV 치료에 사용될 수 있는 것으로 처음 입증되었다. 그러나 이들 인터페론의 표준 형태는 현재 폐길화된 인터페론 (폐긴터페론)으로 대체되고 있다. 폐긴터페론은 폴리에틸렌 글리콜의 큰 비활성 분자를 첨가함으로써 화학적으로 변형된 알파 인터페론이다. 현재 최적 요법은 24- 또는 48-주 과정으로, 폐길화된 알파 인터페론과, 광범위한 바이러스에 대한 활성을 나타내는 경구용 항바이러스제인 뉴클레오시드 리바비린을 조합하여 사용하는 것으로 나타난다. 리바비린은 그 자체로서 HCV에 대해 미약한 효과를 나타내긴 하지만 그것을 인터페론에 첨가함으로써 실질적인 반응 속도를 2배 내지 3배 증가시킨다. 그럼에도 불구하고 인터페론/리바비린 조합 치료법에 대한 반응 속도는 50 내지 60 %인 중간 정도며, 그렇더라도, HCV의 선택된 유전자형 (주로 유전자형 2와 3)에 대한 반응 속도는 전형적으로 더 높다. 치료를 받는 동안 HCV RNA 네가티브가 되는 환자들 중에서 상당한 부분이 치료를 중단하면 원래 상태로 되돌아간다.

또한 각각의 이들 제제와 관련된 중요한 부작용이 있다. 인터페론을 투여받는 환자들은 때로 독감과 유사한 증상을 나타낸다. 폐길화된 인터페론은 골수 억압 효과와 관련되어 있다. 중요한 것은 알파 인터페론이 다중 신경정신의학적 효과를 가진다는 것이다. 치료기간의 연장은 뚜렷한 흥분, 불안, 성격 변화, 의기소침, 및 심지어 자살 또는 급성 정신 이상을 야기할 수 있다. 인터페론 치료법은 또한 약물 또는 알코올 남용의 이전 병력을 가지고 있는 사람들에게서 재발과 관련되어 있다.

리바비린 치료의 부작용으로는 히스타민-유사 부작용 (가려움 및 코막힘)과 적혈구의 용량 관련 용혈현상으로 인한 빈혈 및 히스타민 유사 부작용이 있다.

이런 것들을 고려하면 현재 진행되고 있는 사건들은 상기 언급된 결점들이 없는 C형 간염 바이러스 복제에 효과적인 작은 분자 억제제가 매우 필요하다는 것을 나타낸다.

### 도면의 간단한 설명

도 1은 HCV 래플리콘-함유 세포에서 네오마이신 전이효소 (NTP)의 검출을 사용하는, HCV에 대한 화합물 활성을 평가하기 위한 분석의 개략도이다.

도 2는 HCV 래플리콘-함유 세포에서 네오마이신 인함유 전이효소 II의 검출을 도시한다.

도 3은 헬리오크산틴으로 처리된 HCV 래플리콘-함유 세포에 의해 생성된 일부분의 검출을 도시한다.

도 4는 MTS 방법을 사용하여 HCV 래플리콘-함유 세포에 대한 헬리오크산틴 세포독성을 검출하는 것을 도시한다.

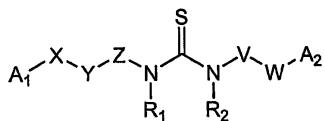
### 발명의 상세한 설명

본 발명은 하기 식 I의 화합물을 제공하고, 항바이러스 활성을 가지는 특정한 아릴 아실티오우레이 유도체 및 관련 화합물을 제공한다. 본 발명은 C형 간염 바이러스 복제의 강력하고 및/또는 선택적인 억제제인 식 I의 화합물을 제공한다. 본 발명은 또한 하나 또는 그 이상의 식 I의 화합물, 또는 그러한 화합물의 염, 용매 화합물, 또는 아실화된 선구 약물, 및 하나 또는 그 이상의 약제학적으로 허용될 수 있는 담체, 부형제, 또는 희석제를 함유하고 있는 약제학적 조성물을 제공한다.

본 발명은 나아가 특정 감염성 질병으로 고생하는 환자들을 그 질병 또는 장애의 신호 또는 증상을 완화시키기에 효과적인 식 I의 화합물이 양을 그런 환자에 투여함으로써 치료하는 방법을 포함한다. 이를 감염성 질병으로는 바이러스성 감염, 특히 HCV 감염이 있다. 본 발명은 특히 감염성 질병으로 고생하는 사람 환자를 치료하는 방법을 포함할 뿐만 아니라 감염성 질병으로 고생하는 다른 동물, 예컨대 가축 및 길들여진 반려 동물의 치료 방법도 포함한다.

치료 방법은 단일 활성제로서 식 I의 화합물을 투여하거나 하나 또는 그 이상의 다른 치료제와 조합된 식 I의 화합물을 투여하는 것으로 이루어진다.

그러므로 본 발명은 첫 번째 측면으로 하기 식 I의 화합물 또는 그것의 약제학적으로 허용될 수 있는 염을 제공한다.



상기 식에서 A<sub>1</sub> 및 A<sub>2</sub>는 독립적으로, 임의로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>알킬, 임의로 치환된 모노- 또는 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬)아미노, 임의로 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>12</sub>알케닐, 임의로 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, 부분적으로 불포화되거나 방향족의 카르복실기, 또는 임의로 치환된 포화되고, 부분적으로 불포화된, 또는 방향족의 헤테로고리기이고, 이 때 A<sub>1</sub>과 A<sub>2</sub> 중 최소한 하나는 임의로 치환된 방향족 카르복실기 또는 임의로 치환된 방향족 헤�테로고리기이며;

X와 W는 독립적으로 O, S, NR, 또는 없고; R은 수소, 임의로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, 또는 임의로 치환된 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)이며;

V는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬, 또는 없고; Y는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬, 또는 없으며; 이 때 V가 없는 경우 W도 없고; Z는 카르보닐, 티오카르보닐, 이미노, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬이미노이며;

$R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로 수소이거나 또는  $R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐, 또는  $C_2-C_6$ 알키닐이고, 이들 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알콕시,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환체로 치환되며, 또는  $R_1$ 과  $R_2$ 는 함께 N, S, 및 O로부터 선택된 하나의 추가의 해테로원자를 임의로 함유하는 5- 내지 7-원 포화 또는 모노-불포화 고리를 형성하고, 이 5- 내지 7-원 포화 또는 모노-불포화 고리는 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환체로 치환된다.

본원에 개시된 식 I의 특정 화합물은 아래에서 설명되는 실시예 5에서 설명된 HCV 레플리콘 분석과 같은 HCV 복제 분석에서 양호한 활성을 나타낸다. 식 I의 바람직한 화합물은 HCV 레플리콘 분석에서 약 10 마이크로몰 또는 그 이하의 EC<sub>50</sub>, 더 바람직하게는 약 1 마이크로몰 또는 그 이하의 EC<sub>50</sub>, 여전히 더욱 바람직하게는 약 500 나노몰 또는 그 이하의 EC<sub>50</sub>을 나타낸다.

본 발명을 상세하게 설명하기에 앞서 본원에서 사용되는 특정 용어에 대한 규정을 제시하는 것이 도움이 될 것이다. 본 발명의 화합물은 표준 명명법을 사용하여 설명된다. 다르게 규정되지 않는 한 본원에서 사용되는 모든 기술적 및 과학적 용어는 그것들이 본 발명이 속하는 기술분야의 숙련자에 의해 보편적으로 이해되는 것과 같은 의미를 갖는다.

식 I은 그것의 모든 하위 식을 포함한다. 예를 들어 식 I은 식 IA-VII 및 식 1-29의 화합물을 모두 포함한다.

어떤 상황에서 식 I의 화합물은 입체 중심, 입체 축 등과 같은 하나 또는 그 이상의 비대칭 엘레먼트, 예컨대 비대칭 탄소 원자를 함유할 수 있어서, 화합물은 상이한 입체이성질체 형태로 존재할 수 있다. 이들 화합물은 예를 들면 라세미 화합물 또는 광학 활성 형태일 수 있다. 둘 또는 그 이상의 비대칭 엘레먼트를 가지고 있는 화합물의 경우 이들 화합물은 추가로 부분입체 이성질체의 혼합물일 수 있다. 비대칭 중심을 가지고 있는 화합물에 대해 그것들의 모든 광학 이성질체 및 혼합물이 포함되는 것으로 인지되어야 한다. 또한 탄소-탄소 이중 결합을 가지고 있는 화합물은 Z-와 E-형태로 존재할 수 있으며, 그것들은 모두 본 발명에 포함되는 화합물의 이성질체 형태를 포함한다. 이런 상황에서 단일 경상 이성질체, 즉 광학 활성 형태는 광학적으로 순수한 전구체로부터의 합성인 비대칭 합성, 또는 라세미 화합물의 분해에 의해 얻어질 수 있다. 라세미 화합물의 분해는 또한 예를 들면 분해제의 존재하에 결정화와 같은 종래 방법, 또는 예컨대 키랄 HPLC 칼럼을 사용한 크로마토그래피에 의해 이루어질 수 있다.

화합물이 다양한 토토머 형태로 존재하는 경우 본 발명은 어느 하나의 특정한 토토머에 제한되지 않으며 오히려 모든 토토머 형태를 포함한다.

본 발명은 본 발명의 화합물에서 발생하는 원자들의 모든 동위원소를 포함하는 것으로 의도된다. 동위원소는 동일한 원자 번호를 가지지만 질량 번호가 상이한 원자들을 포함한다. 제한을 두지 않고 일반적으로 예를 들면 수소의 동위원소는 3 중 수소와 중수소를 포함하며, 탄소의 동위원소는 <sup>11</sup>C, <sup>13</sup>C, 및 <sup>14</sup>C이다.

특정 화합물은 예컨대 V, W, X, Y, Z, A<sub>1</sub>, A<sub>2</sub>, R<sub>1</sub>, 및 R<sub>2</sub>와 같은 변수를 포함하는 일반식을 사용하여 본원에서 설명된다. 다른 언급이 없는 한 그러한 식의 각각의 변수는 다른 변수들과는 무관하게 규정된다. 그러므로 만약 한 기가 예컨대 0 내지 2개의 R\*로 치환되었다고 한다면 상기 기는 2개까지의 R\*기로 치환될 수 있고, 각각의 R\*는 독립적으로 R\*의 정의로부터 선택된다. 또한 치환 및/또는 변수의 조합은 그런 조합이 안정한 화합물을 초래할 때에만 가능하다.

본원에서 사용되는 용어 "치환된"은 표시된 원자 또는 기상의 하나 또는 그 이상의 수소가 표시된 기로부터 선택된 것으로 대체되는 것을 의미하며, 단 이 때에 표시된 원자의 정상가는 초과하지 않는다. 치환기가 옥소인 경우 (=O), 방향족 고리는 상응하는 부분적으로 불포화된 고리에 의해 대체된다. 예를 들어 옥소에 의해 치환된 피리딜기는 피리돈이다. 치환기 및/또는 변수의 조합은 그런 조합이 안정한 화합물 또는 유용한 합성 중간체를 초래할 때에만 허용된다. 안정한 화합물 또는 안정한 구조는 반응 혼합물로부터의 분리와, 이어서 효과적인 치료제로의 제형시에 없어지지 않을 정도로 충분히 강한 화합물을 포함하는 것을 의미한다.

관용구 "임의로 치환된"은 그런 기들이 치환되지 않을 수도 있고 또는 하나 또는 그 이상의 활용가능한 위치 중 어느 한 위치에서 하나 또는 그 이상의 적당한 기, 예컨대 본원에 제시되는 것들로 치환될 수 있는 것을 나타낸다.

"치환된" 위치에 존재할 수 있는 적당한 기로는 그것들에 국한되는 것은 아니지만, 할로겐; 시아노; 히드록실; 니트로; 아지도; 알카노일 (예컨대  $C_2-C_6$ 알카노일기, 예컨대 아실 등); 카르복시아미도; 알킬 기 (1 내지 약 8개의 탄소 원자, 또는 1 내지 약 6개의 탄소 원자를 가지는 시클로알킬기를 포함함); 알케닐 및 알키닐기 (하나 또는 그 이상의 불포화 연쇄를 가지고 2 내지 약 8개, 또는 2 내지 약 6개의 탄소 원자를 가지는 기를 포함함); 하나 또는 그 이상의 산소 연쇄와 1 내지 약 8개, 또는 1 내지 약 6개의 탄소 원자를 가지는 알콕시기; 폐녹시와 같은 아릴옥시; 하나 또는 그 이상의 티오에테르 연쇄와 1 내지 약 8개의 탄소 원자, 또는 1 내지 약 6개의 탄소 원자를 가지는 것들을 포함하는 알킬티오기; 하나 또는 그 이상의 술피닐 연쇄와 1 내지 약 8개의 탄소 원자, 또는 1 내지 약 6개의 탄소 원자를 가지는 것들을 포함하는 알킬술포닐기; 하나 또는 그 이상의 N 원자와 1 내지 약 8개, 또는 1 내지 약 6개의 탄소 원자를 가지는 것들을 포함하는 아미노알킬기; 6 또는 그 이상의 탄소와 하나 또는 그 이상의 고리를 가지는 아릴 (예컨대 폐닐, 비페닐, 나프틸, 등, 각각의 고리는 치환되거나 치환되지 않은 방향족을 가진다); 1 내지 3개의 별도의 또는 융합된 고리 및 6 내지 약 18개의 고리 탄소 원자를 가지는 아릴알킬, 예컨대 벤질기; 1 내지 3개의 별도의 또는 융합된 고리 및 6 내지 약 18개의 고리 탄소 원자를 가지는 아릴알콕시, 예컨대 벤질옥시기; 또는 고리마다 3 내지 약 8개의 원자를 가지는 1 내지 3개의 별도의 또는 융합된 고리 및 하나 또는 그 이상의 N, O 또는 S 원자를 가지는 포화된, 불포화된, 또는 방향족의 헤테로고리기, 예컨대 쿠마리닐, 퀴놀리닐, 이소퀴놀리닐, 퀴나졸리닐, 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 푸라닐, 피롤릴, 티에닐, 티아졸릴, 트리아지닐, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 이미다졸릴, 인돌릴, 벤조푸라닐, 벤조티아졸릴, 테트라히드로푸라닐, 테트라히드로피라닐, 피페리디닐, 모르폴리닐, 피페라지닐, 및 피롤리디닐이 있다. 그런 헤테로고리기는 추가로 예컨대 히드록시, 알킬, 알콕시, 할로겐 및 아미노로 치환될 수 있다.

두 개의 문자 또는 기호 사이에 있지 않은 선("-")은 치환기가 부착되는 지점을 나타내기 위해 사용된다. 예를 들어 - $(CH_2)_C_3-C_8$ 시클로알킬은 메틸렌 ( $CH_2$ )기의 탄소를 통하여 부착된다.

직선과 점선의 조합에 의해 표시된 결합, 즉 은 단일 또는 이중 결합 중 어느 하나일 수 있다.

"펜던트 고리"는 하나의 공유 결합에 의하여 다른 기에 결합된 아릴 또는 헤테로아릴 고리와 같은 고리이다. 비페닐기는 상호간에 펜던트인 폐닐 고리의 실례이다. 고리가 기 또는 원자로부터 "펜던트"라고 불릴 때는 그것은 그 기의 원자 또는 원자가 하나의 단일 공유 결합을 경유하여 결합된다는 것이다.

"스피로"화합물은 하나 및 두 개의 고리에 공유된 단지 하나의 탄소를 가지는 이중고리 화합물이다.

본원에서 사용되는 "알킬"은 특정 수의 탄소 원자, 통상적으로는 1 내지 약 12개의 탄소 원자를 가지는 분지된 및 직쇄의 포화 지방족 탄화수소기를 포함한다. 본원에서 사용되는 용어  $C_1-C_6$ 알킬은 1 내지 약 6개의 탄소 원자를 가지는 알킬기를 나타낸다.  $C_0-C_n$ 알킬이 다른 기, 예를 들어 아릴 $C_0-C_4$ 알킬과 조합하여 본원에 사용될 때 표시된 기, 이 경우에는 아릴은 단일 공유 결합에 의해 ( $C_0$ ) 직접 결합되거나 또는 특정 수의 탄소 원자, 이 경우에는 1 내지 약 4개의 탄소 원자를 가지는 알킬 사슬에 의해 부착된다. 알킬의 실례로는, 그것들에 한정되지는 않지만, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 3-메틸부틸, t-부틸, n-펜틸, 및 sec-펜틸이 있다. 본원에서 설명되는 알킬기는 전형적으로 1 내지 약 12개의 탄소 원자를 갖는다. 바람직한 알킬기는 저급 알킬기, 예컨대 1 내지 약 8개의 탄소 원자, 또는 1 내지 약 6개의 탄소 원자, 또는 1 내지 약 4개의 탄소 원자를 가지는 알킬기, 예를 들면  $C_1-C_8$ ,  $C_1-C_6$ , 및  $C_1-C_4$ 알킬기이다.

본원에서 사용되는 "알케닐"은 사슬을 따라 모든 안정한 지점에서 일어날 수 있는 하나 또는 그 이상의 불포화 탄소-탄소 결합을 포함하고 있는 직쇄 또는 분지된 탄화수소 사슬을 나타낸다. 본원에 기재된 알케닐기는 전형적으로 2 내지 약 12개의 탄소 원자를 갖는다. 바람직한 알케닐기는 저급 알케닐기로, 2 내지 약 8개의 탄소 원자를 가지는 알케닐기, 예컨대  $C_2-C_8$ ,  $C_2-C_6$ , 및  $C_2-C_4$ 알케닐기이다. 알케닐기의 실례로는 에테닐, 프로페닐, 및 부테닐기가 있다.

본원에서 사용되는 "알키닐"은 사슬을 따라 모든 안정한 지점에서 일어날 수 있는 하나 또는 그 이상의 삼중 탄소-탄소 결합을 포함하고 있는 직쇄 또는 분지된 탄화수소 사슬, 예컨대 에티닐 및 프로피닐을 나타낸다. 본원에 기재된 알키닐기는 전형적으로 2 내지 약 12개의 탄소 원자를 갖는다. 바람직한 알키닐기는 저급 알케닐기로, 2 내지 약 8개의 탄소 원자를 가지는 알키닐기, 예컨대  $C_2-C_8$ ,  $C_2-C_6$ , 및  $C_2-C_4$ 알키닐기이다.

"알콕시"는 상기에서 규정된 바와 같이 산소 가교 (-O-)를 통하여 부착된 표시된 수의 탄소 원자를 가지는 알킬기를 가리킨다. 알콕시의 실례로는, 그것들에 한정되지는 않지만 메톡시, 에톡시, n-프로포록시, i-프로포록시, n-부톡시, 2-부톡시, t-부톡시, n-펜톡시, 2-펜 z시, 3-펜톡시, 이소펜톡시, 네오펜톡시, n-헥속시, 2-헥속시, 3-헥속시, 및 3-메틸펜톡시가 있다.

"알케닐옥시"는 상기에서 규정된 바와 같이 산소 가교 (-O-)를 통하여 부착된 표시된 수의 탄소 원자를 가지는 알케닐기를 가리킨다. 알케닐옥시의 실례로는 그것들에 한정되지는 않지만 프로프-1-에닐옥시, 부트-1-에닐옥시가 있다.

용어 "알콕시(알킬)"에서 알콕시와 알킬은 상기에서 규정된 바와 같으며 부착 지점은 알킬기상에 있다. 예를 들어  $C_1-C_6$  알콕시( $C_1-C_4$  알킬)은 1 내지 약 6개의 탄소 원자를 가지는 알콕시기가 1 내지 약 4개의 탄소 원자를 가지는 알킬기에 그 것의 산소 원자를 통하여 부착되고, 추가로  $C_1-C_4$  알킬 부분에 있는 탄소 원자를 통하여 중심 분자에 부착되는 것을 나타낸다.

"알카노일"은 케토 ( $-(C=O)-$ ) 가교를 통하여 부착된 상기에서 규정된 바와 같은 알킬기를 나타낸다. 알카노일기는 표시된 수의 탄소 원자를 번호가 매겨진 탄소 원자에 포함된 케토기의 탄소와 함께 포함한다. 예를 들어  $C_2$ 알카노일기는 식  $CH_3(C=O)-$ 을 가지는 아세틸기이다.

본원에서 사용되는 용어 "알카노일옥시"는 산소 (-O-) 가교를 통하여 부착된 표시된 수의 탄소 원자를 가지는 알카노일기를 나타낸다. 알카노일옥시기의 실례로는 식  $CH_3(CH_2)(C=O)-O-$  등의 기가 있다.

본원에서 사용되는 용어 "모노- 및/또는 디-알킬카르복시아미드"는 식  $(\text{알킬}_1)-NH-(C=O)-$  및  $(\text{알킬}_1)(\text{알킬}_2)-N-(C=O)-$ 의 기를 말하며, 이 때 알킬<sub>1</sub>과 알킬<sub>2</sub>기는 독립적으로 표시된 수의 탄소 원자를 가지는 상기에서 규정된 바와 같은 선택된 알킬기이다.

본원에서 사용되는 용어 "모노- 및/또는 디-알킬술폰아미드"는 식  $(\text{알킬}_1)-NH-(SO_2)-$  및  $(\text{알킬}_1)(\text{알킬}_2)-N-(SO_2)-$ 의 기를 말하며, 이 때 알킬<sub>1</sub>과 알킬<sub>2</sub>기는 독립적으로 표시된 수의 탄소 원자를 가지는 상기에서 규정된 바와 같은 선택된 알킬기이다.

본원에서 사용되는 "알킬술피닐"은 알킬-(SO)-를 의미하며, 이 때 알킬기는 규정된 수의 탄소 원자를 가지는 상기에서 규정된 것과 같은 알킬기이다. 예시적인 알킬술피닐기는 에틸술피닐이다.

본원에서 사용되는 "알킬술포닐"은 알킬-(SO<sub>2</sub>)-를 의미하며, 이 때 알킬기는 규정된 수의 탄소 원자를 가지는 상기에서 규정된 것과 같은 알킬기이다. 예시적인 알킬술포닐기는 메틸술포닐이다.

본원에서 사용되는 "알킬티오"는 알킬-S-를 의미하며, 이 때 알킬기는 규정된 수의 탄소 원자를 가지는 상기에서 규정된 것과 같은 알킬기이다. 예시적인 알킬티오기는 메틸티오이다.

본원에서 사용되는 용어 "알콕시카르보닐"은 표시된 수의 탄소 원자를 가지고, 케토 ( $-(C=O)-$ ) 가교를 통하여 부착된, 상기에서 규정된 것과 같은 알콕시기를 나타낸다. 알콕시카르보닐기의 알콕시 부분은 표시된 수의 탄소 원자를 가지는데, 케토 가교의 탄소는 이 번호 매김에 포함되지 않는다.  $C_3$ 알콕시카르보닐기는 예를 들면 식  $CH_3(CH_2)_2-O-(C=O)-$  또는  $(CH_3)_2(CH)-O-(C=O)-$ 의 기를 나타낸다.

본원에서 사용되는 "아미노알킬"은 표시된 수의 탄소 원자를 가지고, 최소한 하나의 아미노 치환기 (-NH<sub>2</sub>)로 치환된, 상기에서 규정된 것과 같은 알킬기이다. 아미노알킬기는 표시될 때 본원에 기재된 다른 기들과 같이 추가로 치환될 수 있다.

본원에서 사용되는 용어 "모노- 및/또는 디-알킬아미노"는 2차 또는 3차 알킬 아미노기를 나타내는데, 이 때 알킬기는 상기에서 규정된 바와 같고 표시된 수의 탄소 원자를 갖는다. 알킬아미노기의 부착 지점은 질소 위이다. 알킬기는 독립적으로 선택된다. 모노- 및 디-알킬아미노기로는 에틸아미노, 디메틸아미노, 및 메틸-프로필-아미노가 있다. "모노- 및/또

는 디알킬아미노알킬"기는 특정한 수의 탄소 원자를 가지는 알킬 링커를 통하여 부착된 모노- 및/또는 디-알킬아미노기, 예를 들면 디-메틸아미노에틸기이다. 3차 아미노 치환기는 식  $N-R-N-R'$ 의 명명법에 의해 표시될 수 있으며, 이 때 기 R과 R'은 둘 다 단일한 질소 원자에 부착된다.

본원에서 사용되는 용어 "아릴"은 방향족 고리 또는 고리들에 유일한 탄소를 함유하고 있는 방향족 기를 나타낸다. 그런 방향족 기는 추가로 탄소 또는 비-탄소 원자 또는 기로 치환될 수 있다. 전형적인 아릴기는 1 또는 2개의 별도의, 융합된, 또는 펜던트 고리 및 6 내지 약 12개의 고리 원자를 함유하며, 고리 구성원으로서 헤테로원자는 함유하지 않는다. 때에 따라 아릴기는 치환될 수 있다. 그런 치환은 임의로 N, O, 및 S로부터 독립적으로 선택된 1 또는 2개의 헤테로원자를 함유하는 5 내지 7-원 포화 고리형 기에 대해 융합되어 예컨대 3,4-메틸렌디옥시-페닐 기를 형성하는 융합을 포함한다. 아릴기로는 예를 들면 폐닐, 나프틸, 예컨대 1-나프틸과 2-나프틸, 및 비-페닐이 있다.

용어 "아릴(알킬)"에서 아릴과 알킬은 상기에서 규정된 바와 같으며, 부착 지점은 알킬 기위에 있다. "아릴( $C_0-C_4$ 알킬)"은 단일한 공유 결합을 경유하여 직접 부착되거나 (아릴( $C_0$ 알킬)) 또는 1 내지 약 4개의 탄소 원자를 가지고 있는 알킬기를 통하여 부착된 아릴기를 나타낸다. 용어 아릴(알킬)은 벤질, 폐닐에틸, 및 피페로닐을 포함하며, 이것들에만 한정되지 않는다.

용어 "카르보고리 기"는 3 내지 8-원의 포화된, 부분적으로 불포화된, 또는 유일한 탄소 고리 원자를 함유하고 있는 방향족 고리 또는 6 내지 11-원의 포화된, 부분적으로 불포화된, 또는 방향족의 이중고리형 카르보고리형 고리 시스템을 나타낸다. 다른 언급이 없는 한 카르보고리형 고리는 안정한 구조를 초래할 수 있는 모든 탄소 원자에서 그것의 펜던트기에 부착될 수 있다. 표시된다면 본원에 기재된 카르보고리형 고리는 그 결과의 화합물이 안정하다면 어떠한 활용 가능한 고리 탄소에서도 치환될 수 있다. 카르보고리형 고리로는 시클로알킬기, 예컨대 시클로프로필 및 시클로헥실; 시클로알케닐기, 예컨대 시클로헥세닐, 가교된 시클로알킬기; 및 아릴기, 예컨대 폐닐기가 있다.

본원에서 사용되는 "시클로알킬"은 특정한 수의 탄소 원자, 보통은 3 내지 약 10개의 고리 탄소 원자를 가지는, 단일고리형 또는 다중고리형 포화된 탄화수소 고리 기를 나타낸다. 단일고리형 시클로알킬기는 전형적으로 3 내지 약 8개의 탄소 고리 원자 또는 3 내지 약 7개의 탄소 고리 원자를 가진다. 다중고리형 시클로알킬기는 2 또는 3개의 융합된 시클로알킬 고리를 가지거나 가교된 또는 둘러싸인 시클로알킬기를 함유할 수 있다. 시클로알킬 치환기는 치환된 질소 또는 탄소 원자로부터의 펜던트이거나, 두 개의 치환기를 가질 수 있는 치환된 탄소 원자는 스파로 기로서 부착되는 시클로알킬기를 가질 수 있다. 시클로알킬기의 실례로는 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 또는 시클로헥실 뿐만 아니라 노르보르난 또는 아다만탄과 같은 가교되거나 둘러싸인 포화된 고리 기가 있다.

용어 "(시클로알킬)알킬"에서 시클로알킬과 알킬은 상기에서 규정된 것과 같고, 부착 지점은 알킬 기위에 있다. 이 용어는 시클로프로필메틸, 시클로헥실메틸, 및 시클로헥실메틸을 포함하며, 이것들에만 한정되지는 않는다.

본원에서 사용되는 용어 "시클로알킬카르복시아미드"는  $-NH-(C=O)-$  링커를 통하여 부착된 상기에서 규정된 것과 같은 시클로알킬기를 말하며, 이 때 시클로알킬기는 질소 원자에 공유 결합된다.

본원에서 사용되는 용어 "할로알킬"은 1 또는 그 이상의 할로겐 원자, 일반적으로는 최대 허용 가능한 수의 할로겐 원자로 치환된, 특정 수의 탄소 원자를 가지는 분자되거나 직쇄의 알킬기를 나타낸다. 할로알킬기의 실례로는 그것들에 한정되지는 않지만, 트리플루오로메틸, 디플루오로메틸, 2-플로우로에틸, 및 펜타-플루오로에틸이 있다.

"할로알콕시"는 산소 가교를 통해 부착된 상기에서 규정된 바와 같은 할로알킬기를 나타낸다.

"할로" 또는 "할로겐"은 본원에서 플루오로, 클로로, 브로모, 또는 요오도를 나타낸다.

본원에서 사용되는 "헤테로아릴"은 N, O, 및 S로부터 선택된 1 내지 3개, 바람직하게는 1 내지 2개의 헤테로원자를 함유하고, 그 나머지 고리 원자는 탄소인 안정한 5- 내지 7-원 단일고리형 방향족 고리, 또는 N, O, 및 S로부터 선택된 1 내지 3개, 바람직하게는 1 내지 2개의 헤테로원자를 함유하고, 그 나머지 고리 원자는 탄소인 5- 내지 7-원 방향족 고리를 최소한 하나 함유하고 있는 안정한 이중고리 또는 3중 고리 시스템을 나타낸다. 헤테로아릴기 중의 S와 O의 총 수가 1을 초과할 때는 이들 헤테로원자는 서로 간에 인접하지 않는다. 헤테로아릴기 중의 S와 O의 총 수는 2를 넘지 않는 것이 바람직하다. 특히 방향족 헤테로고리 중의 S와 O의 총 수가 1을 넘지 않는 것이 바람직하다. 헤테로아릴기의 실례로는, 그것들에

국한되는 것은 아니지만, 옥사졸릴, 피라닐, 피라지닐, 피라졸로피리미디닐, 피라졸릴, 피리디지닐, 피리딜, 피리미디닐, 피롤릴, 퀴놀리닐, 테트라졸릴, 티아졸릴, 티에닐피라졸릴, 티오페닐, 트리아졸릴, 벤조[*d*]옥사졸릴, 벤조푸라닐, 벤조티아졸릴, 벤조티오페닐, 벤조옥사디아졸릴, 디히드로벤조디옥시닐, 푸라닐, 이미다졸릴, 인돌릴, 및 이소옥사졸릴이 있다.

용어 "헤테로아릴알킬"에서 헤�테로아릴과 알킬은 상기에서 규정된 것과 같고, 부착 지점은 알킬 기위에 있다. 이 용어는 피리딜메틸, 티오페닐메틸, 및 피롤릴(1-에틸)을 포함하며, 이것들에만 한정되지는 않는다.

용어 "헤테로시클로알킬"은 N, O, 및 S로부터 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 함유하고, 그 나머지 고리 원자는 탄소인 포화된 단일 고리기, 또는 최소한 하나의 N, O, 또는 S를 함유하고 그 나머지 고리 원자는 탄소인 포화된 이중 고리형 고리 시스템을 나타낸다. 단일고리형 헤테로시클로알킬기는 4 내지 약 8개의 고리 원자, 보다 전형적으로는 5 내지 7개의 고리 원자를 갖는다. 이중 고리형 헤테로시클로알킬기는 전형적으로 약 5 내지 약 12개의 고리 원자를 가진다. 헤테로시클로알킬기의 크기는 그 기가 함유하는 고리 탄소 원자의 수에 의해 정해진다. 예를 들어 C<sub>2</sub>-C<sub>7</sub> 헤테로시클로알킬기는 2 내지 약 7개의 고리 탄소 원자를 함유하고 그 나머지 고리 원자, 고리 당 약 3개까지의 원자는 N, O, 및 S로부터 선택된다. 바람직한 헤�테로시클로알킬기는 C<sub>2</sub>-C<sub>7</sub> 단일고리형 헤�테로시클로알킬기와 C<sub>5</sub>-C<sub>10</sub> 이중고리형 헤�테로시클로알킬기이다. 헤테로시클로알킬기의 실례로는 모르폴리닐, 피페라지닐, 피페리디닐, 및 피롤리디닐 기가 있다.

용어 "헤테로고리기"는 N, O, 및 S로부터 선택된 1 내지 약 4개의 헤테로원자를 함유하고, 그 나머지 고리 원자는 탄소인 5 내지 8-원의 포화된, 부분적으로는 불포화된, 또는 방향족의 고리, 또는 N, O, 및 S로부터 선택된 최소한 하나의 헤테로원자를 다중 고리 시스템내에 함유하고 있고 N, O, 및 S로부터 독립적으로 선택된 약 4개까지의 헤테로원자를 다중 고리 시스템의 각 고리에 함유하고 있는 방향족의 헤테로고리형 고리 시스템 또는 10 내지 15-원의 3중 고리형 고리 시스템을 나타낸다. 다른 언급이 없는 한 헤�테로고리형 고리는 어떠한 헤�테로원자 또는 탄소에서 그것의 펜던트기에 부착되어 그 결과 안정한 구조를 형성할 수 있다. 때에 따라 본원에 기재된 헤�테로고리형 고리는 그 결과의 화합물이 안정하다면 탄소 또는 질소 원자 상에서 치환될 수 있다. 헤테로고리의 질소 원자는 임의로 \*\*\*\*\* 헤테로고리기 중의 헤�테로원자의 총 수는 4를 넘지 않고, 헤�테로고리기 중의 S와 O의 총 수는 2, 보다 바람직하게는 1을 넘지 않는 것이 바람직하다. 헤테로고리기의 실례로는 피리딜, 인돌릴, 피리미디닐, 피리디지닐, 피라지닐, 이미다졸릴, 옥사졸릴, 푸라닐, 티오페닐, 피아졸릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 이소옥사졸릴, 퀴놀리닐, 피롤릴, 피라졸릴, 벤조[*b*]티오페닐, 이소퀴놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴노옥살리닐, 티에닐, 이소인돌릴, 디히드로이소인돌릴, 5,6,7,8-테트라하드로이소퀴놀린, 피리디닐, 피리미디닐, 푸라닐, 티에닐, 피롤릴, 피라졸릴, 피롤리디닐, 모르폴리닐, 피페라지닐, 피페리디닐, 및 피롤리디닐이 있다.

헤테로고리기의 추가의 실례로는, 그것들에 국한되는 것은 아니지만, 1,1-디옥소-티에노-테트라하드로티오피라닐, 1,1-디옥소티오크로마닐, 1,4-디옥사닐, 5-프테리디닐, 테트라하드로인다졸릴, 아제티디닐, 벤즈이미다졸릴, 벤즈이소옥사지닐, 벤조디옥사닐, 벤조디옥솔릴, 벤조푸라자닐, 벤조이소옥솔릴, 벤조피라닐, 벤조파라졸릴, 벤조테트라하드로푸라닐, 벤조테트라하드로티에닐, 벤조티오피라닐, 벤조트리아졸릴, 벤조옥사지닐, 벤조옥사졸리노닐, 벤조옥사졸릴, 베타-카르볼리닐, 카르바졸릴, 카르볼리닐, 크로마노닐, 크로마닐, 신놀리닐, 쿠마리닐, 디히드로아제티디닐, 디히드로벤즈이소티아지닐, 디히드로벤즈이소옥사지닐, 디히드로벤조디옥시닐, 디히드로벤조푸라닐, 디히드로벤조이미다졸릴, 디히드로벤조티오페닐, 디히드로벤조옥사졸릴, 디히드로쿠마리닐, 디히드로인돌릴, 디히드로이소쿠마리닐, 디히드로이소옥사졸릴, 디히드로이소퀴놀리노닐, 디히드로이소티아졸릴, 디히드로옥사디아졸릴, 디히드로피라지닐, 디히드로피라졸릴, 디히드로피리디닐, 디히드로피리미디닐, 디히드로피롤릴, 디히드로퀴놀리노닐, 디히드로퀴놀리닐, 디히드로테트라졸릴, 디히드로티아디아졸릴, 디히드로티아졸릴, 디히드로티에닐, 디히드로트리아졸릴, 헥사히드로아제피닐, 이미다조피라지닐, 이미다조피리다지닐, 이미다조피리디닐, 이미다조피리미디닐, 이미다조피리딜, 이미다조피리미디닐, 이미다조티아디아졸릴, 이미다조티아졸릴, 이미다조티오페닐, 인돌리닐, 인돌리지닐, 이소벤조테트라하드로푸라닐, 이소벤조테트라하드로티에닐, 이소벤조티에닐, 이소크로마닐, 이소쿠마리닐, 이소인돌리노닐, 이소인돌리지닐, 이소퀴놀릴, 이소티아졸릴, 이소옥사졸릴, 메틸렌디옥시벤질, 나프티리디닐, 옥사디아졸릴, 옥사졸로피리디닐, 옥사졸릴, 옥세타닐, 옥소피페리디닐, 옥소피라졸릴, 옥소피리디닐, 폐노티아지닐, 폐녹사지닐, 프탈라지닐, 푸리닐, 피라지닐, 피라졸로피라지닐, 피라졸로피리다지닐, 피라졸로피리딜, 피라졸로피리미디닐, 피라졸로티오페닐, 피라졸로트리아지닐, 피리다지닐, 피리도피리디닐, 퀴나졸리닐, 퀴놀리닐, 퀴녹살리닐, 테트라하드로푸라닐, 테트라하드로이미다조피라지닐, 테트라하드로이미다조피리다지닐, 테트라하드로이미다조피리디닐, 테트라하드로이미다조피리미딜, 테트라하드로이소퀴놀리닐, 테트라하드로피라닐, 테트라하드로피라졸로피라지닐, 테트라하드로피라졸로피리미딜, 테트라하드로피라졸로피리미딜, 테트라하드로퀴놀리닐, 테트라하드로티에닐, 테트라하드로트리아졸로피리미딜, 테트라하드로트리아졸로피라지닐, 테트라하드로트리아졸로피리다지닐, 테트라하드로트리아조피리디닐, 테트라하드로피리딜, 테트라졸릴, 티아디아졸릴, 티에노-테트라하드로티오피라닐, 티에닐, 티오크로마닐, 트리아지닐, 트리아졸로피라지닐, 트리아졸로피리다지닐, 트리아졸로피리딜, 트리아졸로피리미디닐, 트리아졸로티오페닐, 및 가능한다면 그것들의 N-산화물이 있다.

본원에서 사용되는 "이미노"기는 식 C=N의 기로, 이 때 탄소 원자는 추가로 2개의 단일 결합을 함유한다. "알킬아미노"기는 이미노기의 질소 원자에 공유 결합된 상기에서 규정된 것과 같은 알킬기를 함유한다. 명시되는 경우 알킬이미노기의 알킬 부분은 임의로 치환될 수 있다.

본원에서 사용되는 "티오카르보닐"기는 식 C=S의 기로, 여기서 탄소 원자는 추가로 두 개의 단일 결합을 함유한다.

"약제학적으로 허용될 수 있는 염"은 본래의 화합물이 그것의 비-독성 산 또는 염기 염을 제조함으로써 변형되는 경우의 본원에 개시된 화합물의 유도체, 또는 나아가서는 그러한 화합물 및 그러한 염의 약제학적으로 허용될 수 있는 용매 화합물을 말한다. 약제학적으로 허용될 수 있는 염의 실례로는, 그것들에 국한되는 것은 아니지만, 염기성 잔기의 무기 또는 유기산 염, 예컨대 아민; 산성 잔기의 알칼리 또는 유기 염, 예컨대 카르복실산 등이 있다. 약제학적으로 허용될 수 있는 염은 종래의 비독성 염과 예를 들면 비독성 무기 또는 유기산으로부터 형성된 본래의 화합물의 4차 암모늄염을 포함한다. 예를 들면 종래의 비독성 산 염은 무기산, 예컨대 염산, 브롬화수소산, 황산, 술팜산, 인산, 질산 등으로부터 유도된 염; 유기산, 예컨대 아세트산, 프로피온산, 숙신산, 글리콜산, 스테아르산, 락트산, 말산, 타르타르산, 시트르산, 아스코르브산, 파모산, 말레산, 히드록시말레산, 페닐아세트산, 글루탐산, 벤조산, 살리실산, 메실산, 에실산, 베실산, 술파닐산, 2-아세톡시벤조산, 푸마르산, 툴로엔술폰산, 메탄술폰산, 에탄 디술폰산, 옥살산, 이세티온산, HOOC-(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-COOH (n은 0 내지 4이다) 등으로부터 제조된 염을 포함한다. 본 발명의 약제학적으로 허용될 수 있는 염은 본래 화합물인 염기성 또는 산성 부분으로부터 종래의 화학적 방법에 의해 합성될 수 있다. 일반적으로 그런 염은 이들 화합물의 유리산 형태를 화학양론적 양의 적절한 염기 (예컨대 Na, Ca, Mg, 또는 K 수산화물, 탄산염, 중탄산염, 등)와 반응시킴으로써, 또는 이들 화합물의 유리 염기 형태를 화학양론적 양의 적절한 산과 반응시킴으로써 제조될 수 있다. 그런 반응은 전형적으로 물 또는 유기 용매, 또는 그 두 가지의 혼합물 중에서 수행된다. 일반적으로 실용적이라면 에테르, 에틸 아세테이트, 에탄올, 이소프로판올, 또는 아세토니트릴과 같은 비-수성 매질이 바람직하다. 추가의 적당한 염의 목록은 문현에서 찾아볼 수 있다 (*Remington's Pharmaceutical Sciences*, 17th ed., Mack Publishing Company, Easton, Pa., p.1418(1985)).

용어 "선구 약물"은 포유류 환자에게 투여되었을 때, 예컨대 선구 약물이 대사 처리되는 동안 식 I의 화합물로 되는 모든 화합물을 포함한다. 선구 약물로의 실례로는, 그것들에 한정되지 않지만, 식 I의 화합물의 기능기 (예컨대 알코올 또는 아민기)의 아세테이트, 포름산염 및 벤조산염 등의 유도체가 있다.

본 발명의 화합물의 "치료적으로 효과적인 양"이라는 용어는 사람 또는 비-사람 환자에게 투여되었을 때 증상의 완화와 같은 치료적 유익을 제공하기에 효과적인 양, 예컨대 바이러스성 감염의 증상을 감소시키기에 효과적인 양, 및 바람직하게는 HCV 감염의 증상을 감소시키기에 충분한 양을 의미한다. 어떤 상황에서 바이러스성 감염으로 고생하는 환자는 감염되고 있다는 증상을 나타내지 않을 수 있다. 그러므로 화합물의 치료적으로 효과적인 양은 또한 환자의 혈액, 혈청 또는 조직 내의 바이러스 또는 바이러스 항체의 검출가능한 수준의 상당한 증가를 방지하거나 또는 상당히 감소시키기에 충분한 양이다. 바이러스 또는 바이러스 항체의 검출가능한 수준에서의 상당한 증가 또는 감소는 학생 T 시험과 같은 통계학적으로 중요한 표준 모수 시험에서 통계학적으로 유의할만한 검출가능한 변화이며, 그 때에 p는 0.05 미만이다.

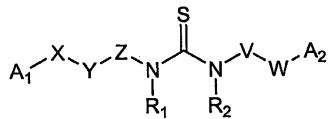
본원에 사용된 "레플리콘"은 그 자체의 조절하에 대량으로 복제할 수 있는 어떠한 유전적 엘레먼트, 예를 들어 플라스미드, 코스미드, 박미드, 파지 또는 바이러스를 포함한다. 레플리콘은 RNA거나 DNA일 수 있고 단일 또는 이중 가닥일 수 있다.

본원에서 "핵산" 또는 "핵산 분자"는 단일 또는 이중 가닥의 어떠한 DNA 또는 RNA 분자를 말하는 것으로, 만약 단일 가닥인 경우 그것의 상보하는 서열의 분자는 선형 또는 원형 형태이다. 핵산 분자를 논할 때 특정 핵산 분자의 서열 또는 구조가 5'에서 3' 방향으로 서열을 제공하는 표준 협약에 따라 본원에서 설명될 수 있다.

## 바이러스 억제제

상기에서 개시된 바와 같이 본 발명은 상기에서 규정된 것과 같은 식 I의 화합물 및 염을 제공한다.

추가로 본 발명은 하기에 도시된 식 I과 동일한 화학 구조를 가지는 식 I의 화합물 및 염을 포함하는데, 단 식에서 변수 A<sub>1</sub>, A<sub>2</sub>, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, X, Y, Z, V, 및 W는 다음과 같이 규정된다:



상기 식에서 A<sub>1</sub>과 A<sub>2</sub>는 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>12</sub>알케닐, C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, 또는 부분적으로 불포화된 또는 방향족의 카르보고리기, 또는 포화된, 부분적으로 불포화된, 또는 방향족의 헤테로고리기이고, 각각의 A<sub>1</sub>과 A<sub>2</sub>는 하기의 (a), (b) 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다:

(a)는 독립적으로 할로젠, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 선택되고,

(b)는 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알키닐, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)알킬, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>알카노일옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시카르보닐, -모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)카르복시아미드, (C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)술폰아미드, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬티오, 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)티오, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬술피닐, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬술포닐로부터 선택되며,

(c)는 -GR<sub>a</sub>로, G는 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알키닐, -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-, 및 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며; R<sub>a</sub>는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>7</sub> 단일 고리형 헤테로시클로알킬, C<sub>5</sub>-C<sub>10</sub>이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프탈, 테트라히드로이소퀴놀리닐, 테트라히드로파리딜, 아릴, 및 헤테로아릴로부터 선택된다.

상기 (b)와 (c)의 각각은 할로젠, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카노일, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시카르보닐, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되며, A<sub>1</sub>과 A<sub>2</sub> 중 최소한 하나는 (a), (b) 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된 카르보고리기 또는 헤�테로고리기이다.

X와 W는 독립적으로 O, S, NR, 또는 없으며, 이 때 R은 수소이거나 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬 또는 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)이고, 각각은 할로젠, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, 및 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

V는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬, 또는 없으며; Y는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬, 또는 없고; V가 없으면 W도 없다.

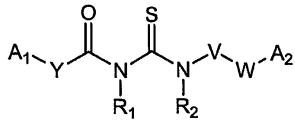
Z는 카르보닐, 티오카르보닐, 또는 이미노이다.

R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 수소 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알키닐이며, 각각은 할로젠, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되거나, 또는 R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 결합하여 임의로 N, S, 및 O로부터 선택된 하나의 추가의 헤테로원자를 함유하는 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로젠, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

그런 화합물은 이하 식 IA의 화합물로서 언급될 것이다.

본 발명은 또한 X가 없고, Y 또한 없는 식 I 및 식 IA의 화합물 및 염을 포함한다.

본 발명은 하기 식 IB의 화합물 및 약제학적으로 허용될 수 있는 그것의 염을 제공한다:



상기 식에서  $\text{A}_1$ 은 디-( $\text{C}_1-\text{C}_8$ 알킬)아미노,  $\text{N}-(\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬)-N-페닐-아미노기,  $\text{N}-(\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬)-N-피리딜 아미노기, 식 IB의 부착 지점에 질소 원자를 경유하여 공유 결합된 5- 내지 7-원의 단일 고리형 혜테로시클로알킬기, 식 IB의 부착 지점에 질소 원자를 경유하여 공유 결합된 5- 내지 7-원의 부분적으로 불포화된 단일 고리형 혜테로고리 기, 식 IB의 부착 지점에 질소 원자에 인접해 있는 탄소 원자를 경유하여 공유 결합된 5- 내지 7-원의 혜테로시클로알킬기, 또는 고리가 식 IB의 부착 지점에 질소 원자를 경유하여 융합되거나 스피로 공유 결합된 8- 내지 11-원의 이중 고리형 혜테로시클로알킬이다.

$\text{A}_2$ 는  $\text{C}_3-\text{C}_8$ 시클로알킬, 부분적으로 불포화된 또는 방향족의 카르보고리기, 또는 포화된, 부분적으로 불포화된, 또는 방향족의 혜테로고리기이다.

$\text{A}_1$ 과  $\text{A}_2$ 의 각각은 하기의 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다:

(a)는 독립적으로 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-\text{COOH}$ ,  $-\text{CONH}_2$ ,  $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ ,  $-\text{SH}$ ,  $\text{C}_1-\text{C}_2$ 할로알킬, 및  $\text{C}_1-\text{C}_2$ 할로알콕시로부터 선택되고,

(b)는 독립적으로  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬,  $\text{C}_2-\text{C}_6$ 알케닐,  $\text{C}_2-\text{C}_6$ 알키닐,  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알콕시,  $\text{C}_2-\text{C}_6$ 알케닐옥시,  $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알콕시( $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알킬), 아미노( $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬), 모노- 및 디-( $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디-( $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알킬)아미노 $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알킬,  $\text{C}_2-\text{C}_6$ 알카노일,  $\text{C}_2-\text{C}_8$ 알카노일옥시,  $\text{C}_1-\text{C}_8$ 알콕시카르보닐, -모노- 및 디-( $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬)카르복시아미드, ( $\text{C}_3-\text{C}_7$ 시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-( $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬)술폰아미드,  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬티오, 아릴( $\text{C}_0-\text{C}_4$ 알킬)티오,  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬술피닐, 및  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬술포닐로부터 선택되며,

(c)는  $-\text{GR}_a$ 로, G는  $-(\text{CH}_2)_n-$ ,  $\text{C}_2-\text{C}_4$ 알케닐,  $\text{C}_2-\text{C}_4$ 알키닐,  $-(\text{CH}_2)_n\text{O}(\text{CH}_2)_m-$ , 및  $-(\text{CH}_2)_n\text{N}(\text{CH}_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $\text{R}_a$ 는  $\text{C}_3-\text{C}_8$ 시클로알킬,  $\text{C}_2-\text{C}_7$ 단일 고리형 혜테로시클로알킬,  $\text{C}_5-\text{C}_{10}$ 이중 고리형 혜테로시클로알킬, 인다닐, 테트라하이드로나프탈, 아릴, 및 혜테로아릴로부터 선택되고,

상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알킬,  $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알킬)아미노,  $\text{C}_2-\text{C}_4$ 알카노일,  $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알콕시카르보닐,  $\text{C}_1-\text{C}_2$ 할로알킬,  $\text{C}_1-\text{C}_2$ 할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

W는 독립적으로 O, S, NR이거나, 또는 없으며, 이 때 R은 수소이거나  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬 또는 아릴( $\text{C}_0-\text{C}_4$ 알킬)이고, 각각은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $\text{C}_1-\text{C}_2$ 할로알킬,  $\text{C}_1-\text{C}_2$ 할로알콕시,  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬,  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알콕시, 및 모노- 및 디-( $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬)아미노로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

V는  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬,  $\text{C}_2-\text{C}_6$ 알케닐,  $\text{C}_3-\text{C}_7$ 시클로알킬이거나, 또는 없으며; V가 없으면 W도 없다.

Y는 0 또는 1개의 C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, 5- 내지 7-원의 단일고리형 헤테로시클로알킬, 또는 고리가 융합되거나 스피로인 8- 내지 11-원의 이중 고리형 헤�테로시클로알킬이고; 각각의 치환기는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되며; 또는 Y는 없다.

R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 수소 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알키닐이며, 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되거나, 또는 R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 결합하여 임의로 N, S, 및 O로부터 선택된 하나의 추가의 헤테로원자를 함유하는 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

본 발명은 V와 W가 없는 식 IB의 화합물 및 염을 제공한다.

본 발명은 Y가 없거나, 또는 Y가 -CH<sub>2</sub>-이거나 또는 Y가 C<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>시클로알킬, 피롤리디닐, 또는 피페리디닐로 치환된 -CH<sub>2</sub>-인 식 IB의 화합물 및 염을 제공한다.

본 발명은 또한 R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>가 독립적으로 수소 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬인 식 IB의 화합물 및 염을 제공하고, 식 IB의 다른 구체예는 R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>가 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

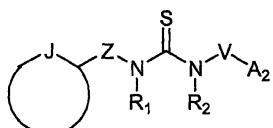
본 발명은 A<sub>2</sub>가 C<sub>5</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬, 폐닐, 폴리딜, 나프틸, 폴리미디닐, 폴라지닐, 벤조티아졸릴, 벤조디옥실, 퀴놀리닐, 또는 이소퀴놀리닐이고, 각각은 하기의 (a), (b) 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되는 식 IB의 화합물 및 염을 제공한다:

(a)는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 선택되고,

(b)는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알키닐, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시카르보닐로부터 선택되며,

(c)는 -GR<sub>a</sub>로, G는 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알키닐, -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-, 및 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며; R<sub>a</sub>는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>7</sub>단일 고리형 헤테로시클로알킬, C<sub>5</sub>-C<sub>10</sub>이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 아릴, 및 헤테로아릴로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카노일, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시카르보닐, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

본 발명은 또한 다음 식 II의 화합물 또는 그것의 약제학적으로 허용될 수 있는 염을 제공한다:



상기 식 II에서 변수 A<sup>2</sup>, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, J, V, 및 Z는 다음의 정의를 갖는다:

$A_2$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬, 또는 부분적으로 불포화된 또는 방향족의 탄소고리기, 또는 포화된, 부분적으로 불포화된, 또는 방향족의 헤테로고리기이고; 이것들은 각각 다음의 것들로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다:

(a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-COOH$ ,  $-CONH_2$ ,  $-SO_2NH_2$ ,  $-SH$ ,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시,

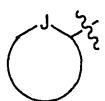
(b)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알케닐옥시,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 아미노( $C_1-C_6$ )알킬, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노 $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_2-C_8$ 알카노일옥시,  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐, -모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)카르복시아미드, ( $C_3-C_7$ 시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)술폰아미드,  $C_1-C_6$ 알킬티오, 아릴( $C_0-C_4$ 알킬)티오,  $C_1-C_6$ 알킬술피닐, 및  $C_1-C_8$ 알킬술포닐, 및

(c)  $-GR_a$ , G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬,  $C_2-C_7$  단일 고리형 헤테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$  이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 아릴, 및 헤테로아릴로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_2-C_4$ 알카노일,  $C_1-C_4$ 알콕시카르보닐,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

V는  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐이거나, 또는 없다.

Z는 카르보닐, 티오카르보닐, 또는 이미노이다.

$R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로 수소 또는  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐, 또는  $C_2-C_6$ 알키닐이며, 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알콕시,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되거나, 또는  $R_1$ 과  $R_2$ 는 결합하여 임의로 N, S, 및 O로부터 선택된 하나의 추가의 헤테로원자를 함유하는 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.



다음 기: 는 J가 상기 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된 O, S, 또는  $NR_3$ 인 포화된, 부분적으로 포화된, 또는 방향족의 헤테로고리기이다.

$R_3$ 은 (d) 수소,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시이거나;

(e)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 또는 아미노( $C_1-C_6$ )알킬이거나,

(f)  $-LR_b$ 이고, 이 때 L은  $-(CH_2)_r-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_rO(CH_2)_s-$ , 및  $-(CH_2)_rN(CH_2)_s-$ 로부터 선택되고, r 및 s는 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_b$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬,  $C_2-C_7$  단일 고리형 헤�테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$  이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 아릴, 및 헤�테로아릴로부터 선택되고; (e)와 (f)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

본 발명의 어떤 구체예는 Z가 카르보닐인 식 II의 화합물 및 염과 관련된다.

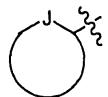
추가의 구체예는 V가 없거나 또는 V가  $C_1-C_4$ 알킬인 식 Ia의 화합물 및 염과 관련된다.

본 발명은  $R_1$  및  $R_2$ 가 독립적으로 수소 또는 메틸인 식 II의 화합물 및 염을 포함한다.

본 발명은 추가로  $A_2$ 가  $C_5-C_7$ 시클로알킬, 페닐, 피리딜, 피리미디닐, 피라지닐, 나프틸, 벤조티아졸릴, 벤조디옥실, 퀴놀리닐, 또는 이소퀴놀리닐인 식 II의 화합물 및 염을 제공하며, 이 때 치환기들 각각은 상기 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되며, (a), (b), 및 (c)는 식 II에서 이들 변수에 대해 상기 설명된 규정을 따른다.

어떤 구체예에서 본 발명은  $A_2$ 가  $C_5-C_7$ 시클로알킬, 페닐, 피리딜, 나프틸, 피리미디닐, 피라지닐, 벤조티아졸릴, 벤조디옥실, 퀴놀리닐, 또는 이소퀴놀리닐인 식 II의 화합물 및 염을 제공하며, 상기 치환기들 각각은 상기 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되고, (a)는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-COOH$ ,  $-CONH_2$ ,  $-SO_2NH_2$ ,  $-SH$ ,  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 선택되고, (b)는  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알카노일, 및  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐로부터 선택되며, (c)는  $-GR_a$ 로, G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, 여기서 n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬, 피페리디닐, 피페라지닐, 모르폴리닐, 테트라히드로이소퀴놀리닐, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 페닐, 피리딜, 벤조티오페닐, 및 벤조푸라닐로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_2-C_4$ 알카노일,  $C_1-C_4$ 알콕시카르보닐,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

본 발명은 다음 식이 식 (i)의 기인 식 II의 화합물 및 염과 관련된다:



상기에서 식 (i)는 혜테로원자인 J가 식 II에서 식 (i)의 기의 부착 지점에 인접하도록 (하나의 단일, 이중 또는 방향족 공유 결합에 의해 분리되도록) 배향된 혜테로아릴기, 즉 피리딜, 피리미디닐, 티에닐, 피롤릴, 푸라닐, 피라졸릴, 이미다졸릴, 티아졸릴, 트리아졸릴, 티아디아졸릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 벤조푸라닐, 벤조티아졸릴, 벤조티오페닐, 벤조옥사디아졸릴, 벤조[*d*]옥사졸릴, 디히드로벤조디옥시닐, 인돌릴, 피라졸로피리미디닐, 또는 티에닐피라졸릴기이고, 식 (i)의 기는 상기 식 II에서 규정된 바와 같은 의미를 가지는 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

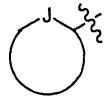
상기에서 J는 S, O 또는  $NR_3$ 이고,  $R_3$ 은

(d) 수소,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 또는  $C_1-C_2$ 할로알콕시이거나;

(e)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 또는 아미노( $C_1-C_6$ )알킬이거나,

(f)  $-LR_b$ 이고, 이 때 L은  $-(CH_2)_r-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_rO(CH_2)_s-$ , 및  $-(CH_2)_rN(CH_2)_s-$ 로부터 선택되고, r 및 s는 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_b$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬,  $C_2-C_7$  단일 고리형 혜테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$  이중 고리형 혜테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 아릴, 및 혜테로아릴로부터 선택되고; (e)와 (f)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

본 발명의 어떤 구체예는 다음 식이 식 (i)의 기인 식 II의 화합물 및 염과 관련된다:

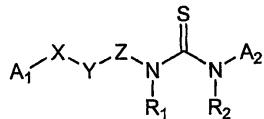


상기 식에서 식 (i)는 헤테로원자인 J가 식 II에서 식 (i)의 기의 부착 지점에 인접하도록 (하나의 단일, 이중 또는 방향족 공유 결합에 의해 분리되도록) 배향된 헤테로아릴기, 즉 피리딜, 피리미디닐, 티에닐, 피롤릴, 푸라닐, 피라졸릴, 이미다졸릴, 티아졸릴, 트리아졸릴, 티아디아졸릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 벤조푸라닐, 벤조티아졸릴, 벤조티오페닐, 벤조옥사디아졸릴, 벤조[*d*]옥사졸릴, 디히드로벤조디옥시닐, 인돌릴, 피라졸로피리미디닐, 또는 티에닐피라졸릴기이다. 식 (i)의 기는 다음으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다: (a) 할로젠, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, (b) C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알키닐, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시카르보닐, 및 (c) -GR<sub>a</sub>, 이 때 G는 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알키닐, -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-, 및 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며; R<sub>a</sub>는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, 피페리디닐, 피페라지닐, 모르폴리닐, 테트라히드로이소퀴놀리닐, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 폐닐, 피리딜, 벤조티오페닐, 및 벤조푸라닐로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로젠, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카노일, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시카르보닐, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

상기에서 J는 S, O 또는 NR<sub>3</sub>이고, R<sub>3</sub>은

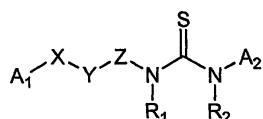
(d) 수소, (e) C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, 또는 (f) -LR<sub>b</sub>이고, 이 때 L은 -(CH<sub>2</sub>)<sub>r</sub>-, -(CH<sub>2</sub>)<sub>r</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>s</sub>-, 및 -(CH<sub>2</sub>)<sub>r</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>s</sub>-로부터 선택되고, r 및 s는 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며; R<sub>b</sub>는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, 피페리디닐, 피페라지닐, 모르폴리닐, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 폐닐 및 피리딜로부터 선택되고; (e)와 (f)의 각각은 할로젠, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

본 발명은 V와 W가 없는 경우의 식 III의 화합물 및 염을 포함한다:



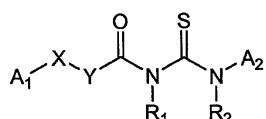
상기 식 III에서 변수 A<sub>1</sub>, X, Y, Z, R<sub>1</sub>, 및 R<sub>2</sub>는 상기 식 I 또는 달리 식 IA에서 설명된 정의와 같다. 식 III의 특정 화합물 및 염에서 R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 둘 다 수소이다.

본 발명은 V와 W가 둘 다 없는 경우의 식 IV의 화합물 및 염을 포함한다:



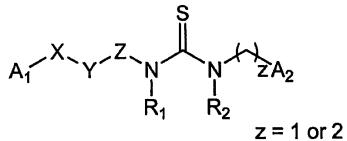
상기 식 IV에서 변수 A<sub>1</sub>, X, Y, Z, R<sub>1</sub>, 및 R<sub>2</sub>는 상기 식 I 또는 달리 식 IA에서 설명된 정의와 같다. 식 IV의 특정 화합물 및 염에서 R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 둘 다 수소이다.

본 발명은 또한 V와 W가 둘 다 없고, Z가 카르보닐인 경우의 식 V의 화합물 및 염을 포함한다:



상기 식 V에서 변수  $A_1$ ,  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$ ,  $R_1$ , 및  $R_2$ 는 상기 식 I 또는 달리 식 IA에서 설명된 정의와 같다. 식 V의 특정 화합물 및 염에서  $R_1$ 과  $R_2$ 는 둘 다 수소이다.

본 발명은 V가  $C_1-C_2$ 알킬이고 W가 없는 경우의 식 VI의 화합물 및 염을 포함한다:



상기 식 VI에서 변수  $A_1$ ,  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$ ,  $R_1$ , 및  $R_2$ 는 상기 식 I 또는 달리 식 IA에서 설명된 정의와 같다. 식 VI의 특정 화합물 및 염에서  $R_1$ 과  $R_2$ 는 둘 다 수소이다.

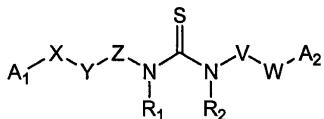
본 발명은 또한 X와 Y가 없고, Z가 카르보닐인 경우의 식 VI의 화합물 및 염을 포함한다. 본 발명은 또한 X가 산소이고, Y가  $C_1-C_2$ 알킬이며, Z가 카르보닐인 경우의 식 VI의 화합물 및 염을 포함한다.

본 발명은 상기 식들 중 어느 하나의 화합물 및 염을 포함하는데, 그 때에  $R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로 수소 또는  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_4$ 알케닐, 또는  $C_2-C_4$ 알키닐이고, 이들 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알콕시,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환된다. 상기 식들의 어떤 화합물 및 염에서  $R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로 수소, 메틸, 또는 에틸이다. 본 발명은 또한  $R_1$ 과  $R_2$ 가 둘 다 수소인 상기 식들의 화합물 및 염을 포함한다.

본 발명은  $R_1$  및  $R_2$ 가 결합하여 임의로 N, S, 및 O로부터 선택된 하나의 추가의 혼테로원자를 함유하는 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 상기 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 상기 식들 중 어느 하나의 화합물 및 염을 포함한다.

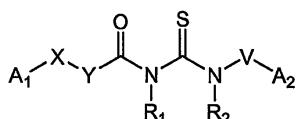
본 발명은 또한  $R_1$  및  $R_2$ 가 결합하여 추가의 혼테로원자를 함유하지 않는 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 상기 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_2$ 알킬, 및  $C_1-C_2$ 알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 상기 식들 중 어느 하나의 화합물 및 염을 포함한다.

예를 들어 본 발명은 다음 식 VII의 화합물 및 염을 포함한다:



상기 식에서  $R_4$ 는 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 2개의 치환기를 나타낸다. 변수  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $V$ ,  $W$ ,  $X$ ,  $Y$ , 및  $Z$ 는 상기 식 I 또는 달리 식 IA에서 설명된 정의와 같다. 식 VII의 특정 화합물에서 Z는 카르보닐이다.

본 발명은 또한 다음 식 VIII의 화합물 및 염을 포함한다:



상기 식에서 V와 Y는  $C_1-C_4$ 알킬이다. 변수  $A_1$ ,  $A_2$ , V, 및 X는 상기 식 I 또는 달리 식 IA에서 설명된 정의와 같다. 식 VIII의 화합물에 대해  $R_1$ 과  $R_2$ 가 둘 다 수소인 것이 바람직하다.

본 발명은 Z가 티오카르보닐인 식 I, IA, III, IV, VI, 및 VII의 화합물 및 염을 포함한다.

본 발명은 Z가 이미노 또는  $C_1-C_6$ 알킬이미노인 식 I, IA, III, IV, VI, 및 VII의 화합물 및 염을 포함한다. 다른 구체예에서 본 발명은 Z가 이미노 또는 메틸이미노인 식 I, IA, III, IV, 1-4, 및 1-5의 화합물 및 염을 포함한다.

본 발명은 Z가 카르보닐인 식 I, IA, III, IV, VI, 및 VII의 화합물 및 염을 포함한다.

본 발명은 X가 산소이고 Y가  $-CH_2-$ 인 상기 식들 중 어느 하나의 화합물 및 염을 포함한다.

본 발명은 X와 Y가 없는 경우의 상기 식들 중 어느 하나의 화합물 및 염을 포함한다.

본 발명은  $A_1$ 이  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_3-C_8$ 시클로알킬, 부분적으로 불포화된 또는 방향족의 카르보고리기, 또는 포화된, 부분적으로 불포화된, 또는 방향족의 헤테로고리기이고,  $A_2$ 가 페닐, 나프틸, 피리딜, 피라지닐, 또는 피리미디닐인 경우의 상기 식들 중 어느 하나의 화합물 및 염을 포함한다.

상기  $A_1$ 과  $A_2$ 의 각각은 다음으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다:

(a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-COOH$ ,  $-CONH_2$ ,  $-SO_2NH_2$ ,  $-SH$ ,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시,

(b)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_2-C_6$ 알케닐옥시,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 아미노( $C_1-C_6$ 알킬), 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노 $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_2-C_8$ 알카노일옥시,  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐, -모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)카르복시아미드, ( $C_3-C_7$ 시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)술폰아미드,  $C_1-C_6$ 알킬티오, 아릴( $C_0-C_4$ 알킬)티오,  $C_1-C_6$ 알킬술피닐, 및  $C_1-C_8$ 알킬술포닐, 및

(c)  $-GR_a$ , G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬,  $C_2-C_7$ 단일 고리형 헤테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$ 이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라하드로나프틸, 아릴, 및 헤테로아릴로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_2-C_4$ 알카노일,  $C_1-C_4$ 알콕시카르보닐,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

본 발명은  $A_1$ 이  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_3-C_8$ 시클로알킬, 부분적으로 불포화된 또는 방향족의 카르보고리기, 또는 포화된, 부분적으로 불포화된, 또는 방향족의 헤�테로고리기이고,  $A_2$ 가 페닐, 나프틸, 피리딜, 피라지닐, 또는 N, O, 및 S로부터 선택된 1 또는 2개의 헤테로원자를 함유하는 5- 내지 7-원 헤�테로시클로알킬 고리에 융합된 폐닐인 경우의 상기 식들 중 어느 하나의 화합물 및 염을 포함한다.

상기  $A_2$ 는 다음으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다:

(i) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시,

(ii)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알케닐옥시,  $C_1-C_6$ 알콕시카르보닐,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 아미노( $C_1-C_6$ 알킬), 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노 $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알카노일, 및

(iii)  $-GR_a$ , G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬, 피페리디닐, 피페라지닐, 모르폴리닐, 티오모르폴리닐, 테트라하드로푸라닐, 피롤리디닐, 데카하드로퀴놀리닐, 데카하드로이소퀴놀리닐, 인다닐, 테트라하드로나프틸, 폐닐, 피리딜, 피리미디닐, 및 티에닐로부터 선택되고, 상기 (ii)와 (iii)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3 개의 치환기로 치환된다.

본 발명은  $A_1$ 이 아릴, 부분적으로 불포화된 헤테로고리기, 또는 헤테로아릴기인 경우의 상기 식들 중 어느 하나의 화합물 및 염을 포함한다.

상기에서  $A_1$ 은 다음으로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 5개의 치환기로 치환된다:

(a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-COOH$ ,  $-CONH_2$ ,  $-SO_2NH_2$ ,  $-SH$ ,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시,

(b)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알케닐옥시,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 아미노( $C_1-C_6$ 알킬), 모노- 및 디- $(C_1-C_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노 $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_2-C_8$ 알카노일옥시,  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐, -모노- 및 디- $(C_1-C_6$ 알킬)카르복시아미드, ( $C_3-C_7$ 시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디- $(C_1-C_6$ 알킬)술폰아미드,  $C_1-C_6$ 알킬티오, 아릴( $C_0-C_4$ 알킬)티오,  $C_1-C_6$ 알킬술피닐, 및  $C_1-C_8$ 알킬술포닐, 및

(c)  $-GR_a$ , G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬,  $C_2-C_7$ 단일 고리형 헤테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$ 이중고리형 헤테로시클로알킬, 인다닐, 테트라하드로나프틸, 아릴, 및 헤�테로아릴로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_2-C_4$ 알카노일,  $C_1-C_4$ 알콕시카르보닐,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

본 발명은  $A_1$ 이 폐닐, 나프틸, 피리딜, 피리미디닐, 티에닐, 피롤릴, 푸라닐, 피라졸릴, 이미다졸릴, 티아졸릴, 트리아졸릴, 티아디아졸릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 벤조푸라닐, 벤조티아졸릴, 벤조티오페닐, 벤조옥사디아졸릴, 벤조[d]옥사졸릴, 디히드로벤조디옥시닐, 인돌릴, 피라졸로피리미디닐, 티에닐피라졸릴, 벤조피라닐, 또는 4H-크로메틸인 경우의 상기 식들 중 어느 하나의 화합물 및 염을 포함하며, 상기  $A_1$ 은 다음으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다:

(a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-COOH$ ,  $-CONH_2$ ,  $-SO_2NH_2$ ,  $-SH$ ,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시,

(b)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알케닐옥시,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 아미노( $C_1-C_6$ 알킬), 모노- 및 디- $(C_1-C_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노 $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_2-C_8$ 알카노일옥시,  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐, -모노- 및 디- $(C_1-C_6$ 알킬)카르복시아미드, ( $C_3-C_7$ 시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디- $(C_1-C_6$ 알킬)술폰아미드,  $C_1-C_6$ 알킬티오, 아릴( $C_0-C_4$ 알킬)티오,  $C_1-C_6$ 알킬술피닐, 및  $C_1-C_8$ 알킬술포닐, 및

(c)  $-GR_a$ , G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬,  $C_2-C_7$ 단일 고리형 헤�테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$ 이중고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라하드로나프틸, 아릴, 및 헤�테로아릴로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

본 발명은 또한 A<sub>1</sub>이 다음의 것들인 경우의 상기 식들 중 어느 하나의 화합물 및 염을 포함한다: 페닐, 나프틸, 피리딘-2-일, 피리딘-3-일, 피리딘-4-일, 피리미딘-2-일, 피리미딘-4-일, 피리미딘-5-일, 티엔-2-일, 티엔-3-일, 티아졸-4-일, 피롤-1-일, 피롤-2-일, 피롤-3-일, 푸란-2-일, 푸란-3-일, 피라졸-1-일, 피라졸-2-일, 피라졸-4-일, 피라졸-5-일, 이미다졸-1-일, 이미다졸-2-일, 이미다졸-4-일, 이미다졸-5-일, 티아졸-2-일, 티아졸-3-일, 티아졸-5-일, 1,2,3-트리아졸-4-일, 1,2,3-티아디아졸-4-일, 1,2,3-티아디아졸-5-일, 옥사졸-2-일, 이소옥사졸-4-일, 이소옥사졸-5-일, 이소옥사졸-3-일, 이소옥사졸-4-일, 이소옥사졸-5-일, 벤조푸란-2-일, 벤조푸란-3-일, 벤조피란-2-일, 벤조피란-3-일, 벤조피란-4-일, 벤조[d]옥사졸-2-일, 벤조[d]티아졸-2-일, 벤조[b]티오펜-2-일, 4H-크로멘-2-일, 벤조[c][1,2,5]옥사디아졸릴, 2,3-디히드로벤조[b][1,4]디옥신-2-일, 피라졸로[1,5-a]피리미딘-6-일, 디히드로벤조[b][1,4]디옥신-3-일, 인돌-2-일, 피라졸로[1,5-a]피리미딘-5-일, 1H-티에노[2,3-c]피라졸-4-일, 또는 1H-티에노[2,3-c]피라졸-5-일.

이 구체예에서 A<sub>1</sub>은 다음으로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 5개의 치환기로 치환된다:

(a) 할로젠, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시,

(b) C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알키닐, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)알킬, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>알카노일옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시카르보닐, -모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)카르복시아미드, (C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)술폰아미드, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬티오, 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)티오, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬술피닐, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬술포닐, 및

(c) -GR<sub>a</sub>, G는 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알키닐, -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-, 및 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며; R<sub>a</sub>는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>7</sub> 단일 고리형 헤테로시클로알킬, C<sub>5</sub>-C<sub>10</sub> 이중고리형 헤테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 아릴, 및 헤�테로아릴로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로젠, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

또는 달리 A1상의 가능한 치환기는 다음으로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 5개의 치환기일 수 있다:

(a) 할로젠, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시,

(b) C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)알킬, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, 및

(c) -GR<sub>a</sub>, G는 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-, -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-, 및 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-으로부터 선택되고; R<sub>a</sub>는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, O, S, 및 N으로부터 독립적으로 선택된 1 또는 2개의 헤테로원자를 함유하는 5 또는 6-원 헤�테로시클로알킬 또는 O, S, 및 N으로부터 독립적으로 선택되는 1, 2 또는 3개의 헤�테로원자를 함유하는 5- 또는 6-원 헤�테로아릴, 인다닐, 및 페닐이며; 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로젠, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

본 발명은 또한 A<sub>1</sub>이 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬, 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>7</sub> 단일고리형 헤�테로시클로알킬인 경우의 상기 식들 중 어느 하나의 화합물 및 염을 포함한다:

상기 구체예에서 A<sub>1</sub>은 다음의 것들로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다:

(a) 할로젠, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시,

(b)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알케닐옥시,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 아미노( $C_1-C_6$ )알킬, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노 $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_2-C_8$ 알카노일옥시,  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐, -모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)카르복시아미드, ( $C_3-C_7$ 시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)술폰아미드,  $C_1-C_6$ 알킬티오, 아릴( $C_0-C_4$ 알킬)티오,  $C_1-C_6$ 알킬술피닐, 및  $C_1-C_8$ 알킬술포닐, 및

(c)  $-GR_a$ , G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬,  $C_2-C_7$  단일 고리형 헤테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$  이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 아릴, 및 헤테로아릴로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_2-C_4$ 알카노일,  $C_1-C_4$ 알콕시카르보닐,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

본 발명은 또한 A1이  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_3-C_7$ 시클로알킬, 피롤리디닐, 피페리디닐, 피페라지닐, 또는 모르폴리닐인 경우의 상기 식들 중 어느 하나의 화합물 및 염을 포함한다.

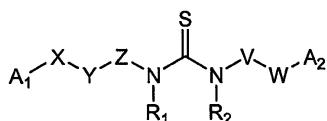
상기 A<sub>1</sub>은 다음의 것들로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 5개의 치환기로 치환된다:

(a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-COOH$ ,  $-CONH_2$ ,  $-SO_2NH_2$ ,  $-SH$ ,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시,

(b)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알케닐옥시,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 아미노( $C_1-C_6$ )알킬, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노 $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_2-C_8$ 알카노일옥시,  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐, -모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)카르복시아미드, ( $C_3-C_7$ 시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)술폰아미드,  $C_1-C_6$ 알킬티오, 아릴( $C_0-C_4$ 알킬)티오,  $C_1-C_6$ 알킬술피닐, 및  $C_1-C_8$ 알킬술포닐, 및

(c)  $-GR_a$ , G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬, 및 폐닐로부터 선택된다.

본 발명은 다음 식 1의 화합물 및 그것의 약제학적으로 허용될 수 있는 염을 포함한다:

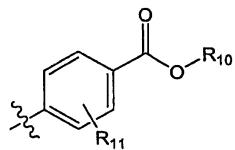


상기 식 1에서 변수 A<sub>1</sub>, V, W, X, Y, Z, R<sub>1</sub>, 및 R<sub>2</sub>는 다음과 같이 규정된다:

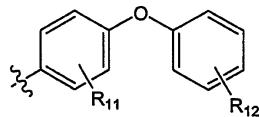
A<sub>1</sub>은 임의로 치환된 디-알킬아미노, 임의로 치환된 아릴기, 임의로 치환된 5- 또는 6-원 헤테로아릴기, 폐닐 고리에 5-원 헤�테로아릴 고리가 융합되어 있는 임의로 치환된 이중고리 헤�테로아릴기, 두 개의 6-원 고리를 가지는 임의로 치환된 부분적으로 불포화된 또는 방향족의 헤테로고리기, 최소한 하나의 질소 원자와 0 또는 1개의 추가의 헤테로원자를 함유하는 임의로 치환된 5- 내지 7-원 헤테로시클로알킬기, 최소한 하나의 질소 원자와 0 또는 1개의 추가의 헤테로원자를 함유하는 임의로 치환된 부분적으로 불포화된 5- 내지 7-원 헤�테로시클로알킬기, 또는 최소한 하나의 질소 원자와 0 내지 3개의 추가의 헤테로원자를 함유하는 융합된 또는 스피로 8- 내지 11-원 이중고리 헤�테로시클로알킬기이다.

A<sub>2</sub>는 다음과 같다:

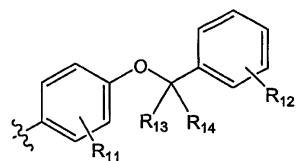
(i)



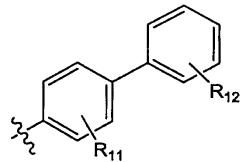
(ii)



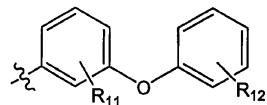
(iii)



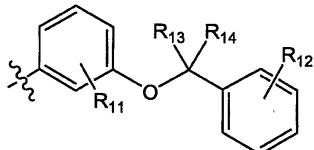
(iv)



(v)

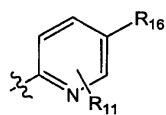


(vi)

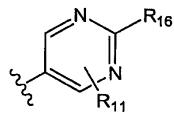


(vii)

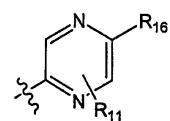
(viii)



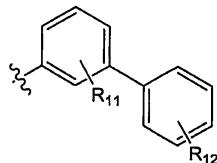
(ix)



(x)



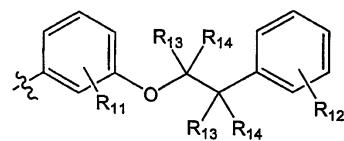
(x i)



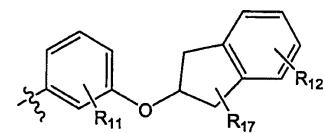
(x ii)



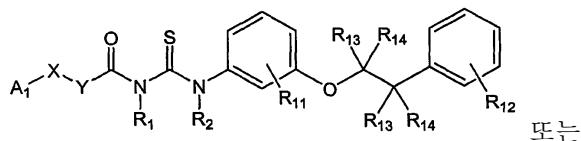
(x iii)



(x iv)

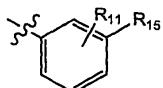


(x v)



또는

(x vi)



상기 식에서 X와 W는 독립적으로 O, S, NR이거나 또는 없으며, 여기서 R은 수소, 임의로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, 또는 임의로 치환된 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)이다.

V는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬이거나 또는 없다.

Y는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬이거나, 또는 없으며, V가 없을 때 W도 없다.

Z는 카르보닐, 티오카르보닐, 아미노, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬아미노이다.

변수 t는 0 또는 1이다.

R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 수소이거나, 또는 R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알키닐이고, 이들은 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되거나, 또는 R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 결합하여 임의로 N, S, 및 O로부터 선택된 하나의 혼테로원자를 추가로 함유하는 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 그 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

R<sub>10</sub>은 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬이다.

R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 할로겐, 히드록시, 시아노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다.

R<sub>13</sub>과 R<sub>14</sub>는 수소와 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬로부터 각각의 발생시에 독립적으로 선택된다.

R<sub>15</sub>는 C<sub>4</sub>-C<sub>6</sub>알콕시 또는 C<sub>4</sub>-C<sub>6</sub>알킬이다.

R<sub>16</sub>은 C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알콕시 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알킬이다.

R<sub>17</sub>은 독립적으로 할로겐, 메틸, 및 메톡시로부터 선택되는 0 내지 2개의 치환기를 나타낸다.

본 발명은 또한 변수 A<sub>2</sub> 및 R<sub>10</sub> 내지 R<sub>17</sub>은 상기 식 1의 화합물 및 염에 대한 상기의 규정과 같지만 변수 A<sub>1</sub>, V, W, X, Y, Z, R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 다음과 같이 규정되는 식 1A의 화합물로서 언급될 상기 식 1의 특정 화합물 및 염을 포함한다:

$A_1$ 은 디-( $C_1-C_6$ 알킬)아미노, 아릴기, 5- 또는 6-원 헤테로아릴기, 페닐 고리에 융합된 5-원 헤테로아릴 고리를 가지는 이중고리 헤�테로아릴기, 두 개의 6-원 고리를 가지는 부분적으로 불포화된 또는 방향족의 헤테로고리기, 최소한 하나의 질소 원자와 0 또는 1개의 추가의 헤테로원자를 함유하는 5- 내지 7-원 헤테로시클로알킬기, 최소한 하나의 질소 원자와 0 또는 1개의 추가의 헤�테로원자를 함유하는 부분적으로 불포화된 5- 내지 7-원 헤�테로시클로알킬기, 또는 최소한 하나의 질소 원자와 0 내지 3개의 추가의 헤�테로원자를 함유하는 융합된 또는 스파로 8- 내지 11-원 이중고리 헤테로시클로알킬기이며;  $A_1$ 의 각각은 다음의 것들로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 5개의 치환기로 치환된다:

(a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-COOH$ ,  $-CONH_2$ ,  $-SO_2NH_2$ ,  $-SH$ ,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시,

(b)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알케닐옥시,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 아미노( $C_1-C_6$ 알킬, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노 $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_2-C_8$ 알카노일옥시,  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐, -모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)카르복시아미드, ( $C_3-C_7$ 시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)술폰아미드,  $C_1-C_6$ 알킬티오, 아릴( $C_0-C_4$ 알킬)티오,  $C_1-C_6$ 알킬술피닐, 및  $C_1-C_8$ 알킬술포닐, 및

(c)  $-GR_a$ , G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬,  $C_2-C_7$  단일 고리형 헤테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$  이중고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 아릴, 및 헤�테로아릴로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_2-C_4$ 알카노일,  $C_1-C_4$ 알콕시카르보닐,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

X와 W는 독립적으로 O, S, NR이거나 또는 없으며, 여기서 R은 수소 또는  $C_1-C_6$ 알킬 또는 아릴( $C_0-C_4$ 알킬)이고, 이들 각각은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시,  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_1-C_6$ 알콕시, 및 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)아미노로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

V는 독립적으로  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_3-C_7$ 시클로알킬이거나 또는 없다.

Y는  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_3-C_7$ 시클로알킬로 치환된  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_3-C_7$ 시클로알킬이거나, 또는 없으며, V가 없을 때 W도 없다.

Z는 카르보닐, 티오카르보닐, 또는 이미노이다.

$R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로 수소이거나, 또는  $R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐, 또는  $C_2-C_6$ 알키닐이고, 이들 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알콕시,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되거나, 또는  $R_1$ 과  $R_2$ 는 결합하여 임의로 N, S, 및 O로부터 선택된 하나의 헤테로원자를 추가로 함유하는 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 그 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

어떤 구체예에서 본 발명은 Z가 티오카르보닐이거나, 또는 이미노 또는  $C_1-C_6$ 알킬이미노이거나, 또는 이미노 또는 메틸이미노이거나, 또는 카르보닐인 경우의 식 1 및 식 1A의 화합물 및 염을 제공한다.

본 발명은 X가 산소이고 Y가  $-CH_2-$ 인 경우의 식 1 및 식 1A의 화합물 및 염을 제공하며; 또한 X가 산소이고 Y가  $-CH_2CH_2-$ 인 경우의 식 1 및 식 1A의 화합물 및 염을 제공하고; 또한 X와 Y가 모두 없는 경우의 식 1 및 식 1A의 화합물 및 염을 제공한다.

본 발명은 V와 W가 없거나, 또는 다른 구체예에서는 V가 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>알킬이고 W가 없는 경우의 식 1 및 식 1A의 화합물 및 염을 제공한다.

본 발명은 R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>가 독립적으로 수소이거나, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알케닐, 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카릴이고, 이들 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 경우의 식 1 및 식 1A의 화합물 및 염을 제공한다. 어떤 구체예에서 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 독립적으로 수소, 메틸, 또는 에틸이다. 다른 구체예에서 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 둘 다 수소이다.

본 발명은 R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>가 결합하여 임의로 N, S, 및 O로부터 선택된 하나의 헤테로원자를 추가로 함유하는 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 그 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 경우의 식 1 및 식 1A의 화합물 및 염을 제공한다. 어떤 구체예에서 R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 결합하여 추가의 헤테로원자를 함유하지 않는 5- 내지 7-원 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 그 5- 내지 7-원 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

본 발명은 A<sub>1</sub>이 아릴, 부분적으로 불포화된 헤테로고리기, 또는 헤테로아릴기이고, 다음의 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 5개의 치환기로 치환되는 경우의 식 1 및 식 1A의 화합물 및 염을 포함한다:

상기에서 (a)는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시이고,

(b)는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카릴, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)알킬, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>알카노일옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시카르보닐, -모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)카르복시아미드, (C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)술폰아미드, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬티오, 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)티오, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬술피닐, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬술포닐이며, 그리고

(c)는 -GR<sub>a</sub>로, G는 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카릴, -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-, 및 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며; R<sub>a</sub>는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>7</sub> 단일 고리형 헤테로시클로알킬, C<sub>5</sub>-C<sub>10</sub> 이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프탈, 아릴, 및 헤�테로아릴로부터 선택된다. 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카노일, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시카르보닐, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

어떤 구체예에서 식 1 또는 식 1A에서 A<sub>1</sub>은 폐닐, 나프틸, 피리딜, 피리미디닐, 티에닐, 피롤릴, 푸라닐, 피라졸릴, 이미다졸릴, 티아졸릴, 트리아졸릴, 티아디아졸릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 벤조푸라닐, 벤조티아졸릴, 벤조티오페닐, 벤조옥사디아졸릴, 벤조[d]옥사졸릴, 디히드로벤조디옥시닐, 인돌릴, 피라졸로피리미디닐, 티에닐피라졸릴, 또는 4H-크로메닐이고, 이들 각각은 다음의 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

상기에서 (a)는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시이고,

(b)는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카릴, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)알킬, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>알카노일옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시카르보닐, -모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)카르복시아미드, (C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)술폰아미드, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬티오, 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)티오, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬술피닐, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬술포닐이며, 그리고

(c)는  $-GR_a$ 로, G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알카닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬,  $C_2-C_7$  단일 고리형 헤테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$  이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라하이드로나프탈, 아릴, 및 헤테로아릴로부터 선택된다. 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_2-C_4$ 알카노일,  $C_1-C_4$ 알콕시 카르보닐,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

본 발명은  $A_1$ 이 폐닐, 나프틸, 피리딘-2-일, 피리딘-3-일, 피리딘-4-일, 피리미딘-2-일, 피리미딘-5-일, 티엔-2-일, 티엔-3-일, 티아졸-4-일, 피롤-1-일, 피롤-2-일, 피롤-3-일, 푸란-2-일, 푸란-3-일, 피라졸-1-일, 피라졸-2-일, 피라졸-4-일, 피라졸-5-일, 이미다졸-1-일, 이미다졸-2-일, 이미다졸-4-일, 이미다졸-5-일, 티아졸-2-일, 티아졸-3-일, 티아졸-5-일, 1,2,3-트리아졸-4-일, 1,2,3-티아디아졸-4-일, 1,2,3-티아디아졸-5-일, 옥사졸-2-일, 이소옥사졸-4-일, 이소옥사졸-5-일, 이소옥사졸-3-일, 이소옥사졸-4-일, 이소옥사졸-5-일, 벤조푸란-2-일, 벤조푸란-3-일, 벤조피란-2-일, 벤조피란-3-일, 벤조피란-4-일, 벤조[d]옥사졸-2-일, 벤조[d]티아졸-2-일, 벤조[b]티오펜-2-일, 4H-크로멘-2-일, 벤조[c][1,2,5]옥사디아졸릴, 2,3-디히드로벤조[b][1,4]디옥신-2-일, 피라졸로[1,5-a]피리미딘-6-일, 디히드로벤조[b][1,4]디옥신-3-일, 인돌-2-일, 피라졸로[1,5-a]피리미딘-5-일, 1H-티에노[2,3-c]피라졸-4-일, 또는 1H-티에노[2,3-c]피라졸-5-일인 경우의 식 1 및 식 1A의 화합물 및 염을 포함한다.

상기  $A_1$ 의 각각은 다음의 것들로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다:

(a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-COOH$ ,  $-CONH_2$ ,  $-SO_2NH_2$ ,  $-SH$ ,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시,

(b)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알카닐,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알케닐옥시,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 아미노( $C_1-C_6$ 알킬), 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노 $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_2-C_8$ 알카노일 옥시,  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐, -모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)카르복시아미드, ( $C_3-C_7$ 시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)술폰아미드,  $C_1-C_6$ 알킬티오, 아릴( $C_6-C_4$ 알킬)티오,  $C_1-C_6$ 알킬술피닐, 및  $C_1-C_8$ 알킬술포닐, 그리고

(c)  $-GR_a$ , G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알카닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬,  $C_2-C_7$  단일 고리형 헤�테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$  이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라하이드로나프탈, 아릴, 및 헤�테로아릴로부터 선택된다. 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_2-C_4$ 알카노일,  $C_1-C_4$ 알콕시카르보닐,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

어떤 구체예에서 (a), (b), 및 (c)는 다음과 같이 규정된다:

(a)는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시이고,

(b)는  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알케닐옥시,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 아미노( $C_1-C_6$ 알킬), 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노 $C_1-C_4$ 알킬이며, 그리고

(c)는  $-GR_a$ 로, G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고,  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬, O, S, 및 N으로부터 독립적으로 선택된 1 또는 2개의 헤테로원자를 함유하는 5 또는 6-원 헤테로시클로알킬, 또는 O, S, 및 N으로부터 독립적으로 선택되는 1, 2 또는 3개의 헤테로원자를 함유하는 5- 또는 6-원 헤테로아릴, 인다닐, 및 폐닐이다. 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

또는 달리 식 1 또는 식 1A에서 A<sub>1</sub>은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)알킬, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, 및 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

본 발명은 A<sub>1</sub>이 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬, 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>7</sub> 단일 고리 헤테로시클로알킬이고, 이들 각각은 다음의 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 5개의 치환기로 치환되는 경우의 식 1 및 식 1A의 화합물 및 염을 포함한다.

상기에서 (a)는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시이고,

(b)는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)알킬, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>알카노일옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시카르보닐, -모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)카르복시아미드, (C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)술폰아미드, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬티오, 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)티오, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬술피닐, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬술포닐이며, 그리고

(c)는 -GR<sub>a</sub>로, G는 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카닐, -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-, 및 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며; R<sub>a</sub>는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>7</sub> 단일 고리형 헤�테로시클로알킬, C<sub>5</sub>-C<sub>10</sub>이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라하이드로나프탈, 아릴, 및 헤테로아릴로부터 선택된다. 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카노일, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시카르보닐, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

어떤 구체예에서 본 발명은 A<sub>1</sub>이 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬, 피롤리디닐, 피페리디닐, 피페라지닐, 또는 모르폴리닐이고, 이들 각각은 다음의 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 경우의 식 1 및 식 1A의 화합물 및 염을 제공한다.

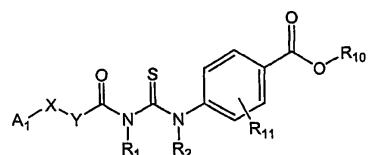
상기에서 (a)는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시이고,

(b)는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카닐, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)알킬, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>알카노일옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시카르보닐, -모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)카르복시아미드, (C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)술폰아미드, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬티오, 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)티오, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬술피닐, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬술포닐이며,

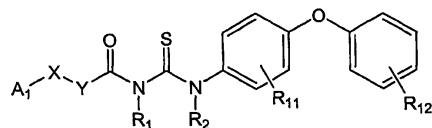
(c)는 -GR<sub>a</sub>로, G는 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카닐, -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-, 및 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며; R<sub>a</sub>는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, 및 폐닐로부터 선택된다.

본 발명은 추가로 하기 식 2 내지 식 16의 화합물 및 염에 관한 것이다.

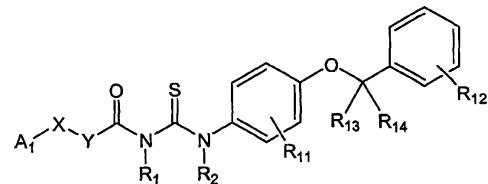
## [식 2]



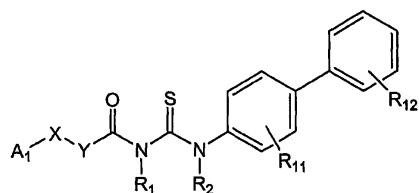
[식 3]



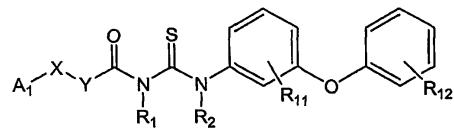
[식 4]



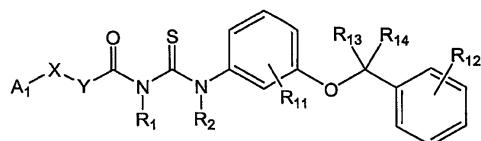
[식 5]



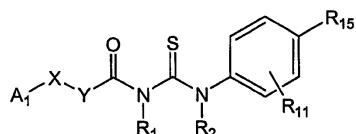
[식 6]



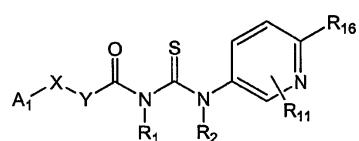
[식 7]



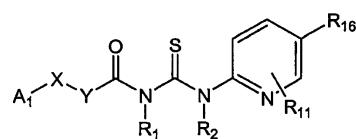
[식 8]



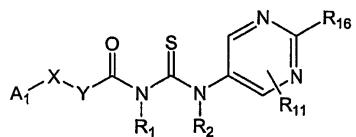
[식 9]



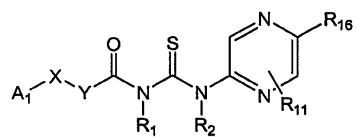
[식 10]



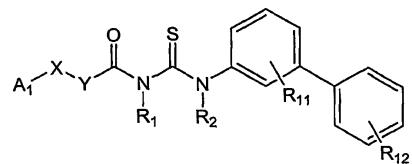
[식 11]



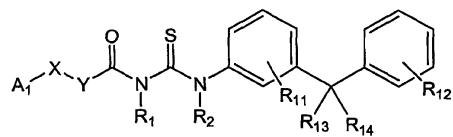
[식 12]



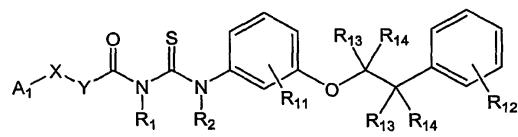
[식 13]



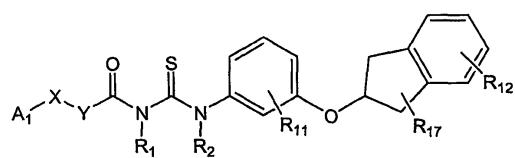
[식 14]



[식 15]



[식 16]



상기 식 2 내지 16에서, 변수  $A_1$ ,  $X$ , 및  $Y$ 는 상기 식 I, IA, 또는 1에서 설명한 것과 동일한 의미를 갖는다.

$R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

$R_{10}$ 은  $C_1-C_6$ 알킬이다.

$R_{11}$ 과  $R_{12}$ 는 각각 할로겐, 히드록시, 시아노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다.

$R_{13}$ 과  $R_{14}$ 는 수소 또는 메틸로부터 각각의 발생시에 독립적으로 선택된다.

$R_{15}$ 는  $C_4-C_6$ 알콕시 또는  $C_4-C_6$ 알킬을 나타낸다.

$R_{16}$ 은  $C_2-C_6$ 알콕시 또는  $C_2-C_6$ 알킬이다.

$R_{17}$ 은 할로겐, 메틸, 및 메톡시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 2개의 치환기를 나타낸다.

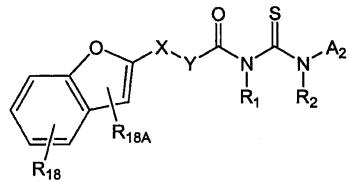
다른 구체예에서 본 발명은 X가 NR이고 (식 1에 대해 설명한 것과 같은 정의를 갖는다) Y가  $-CH_2-$  또는  $-CH_2CH_2-$ 인 경우의 식 2 내지 16의 화합물 및 염을 제공한다. 또 다른 구체예에서 본 발명은 X가 O이고 Y가  $-CH_2-$  또는  $-CH_2CH_2-$ 인 경우, 또는 X와 Y가 없는 경우의 식 2 내지 16의 화합물 및 염을 제공한다.

### $A_1$ 변수

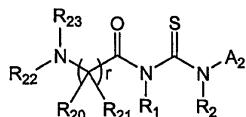
본 발명은  $A_1$ 이 피라지닐, 피리딜, 또는 퀴낙솔리닐이고, 그것들의 각각이 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 경우의 식 1 내지 16의 화합물 및 염을 제공한다.

본 발명은 하기 식 17 내지 29의 화합물 및 그것들의 약제학적으로 허용될 수 있는 염을 제공한다.

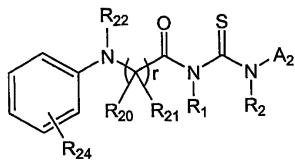
### [식 17]



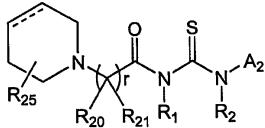
### [식 18]



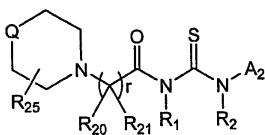
### [식 19]



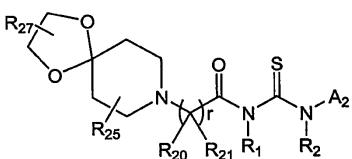
[식 20]



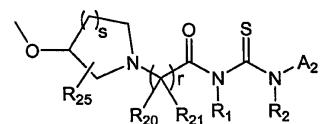
[식 21]



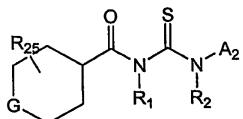
[식 22]



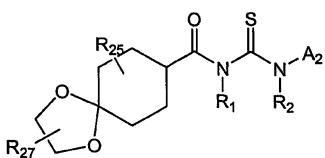
[식 23]



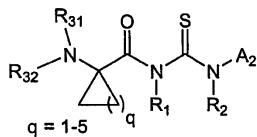
[식 24]



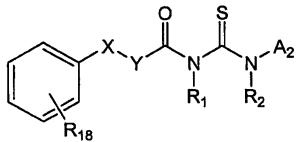
[식 25]



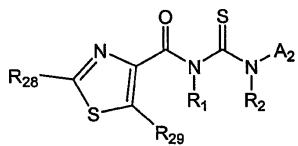
[식 26]



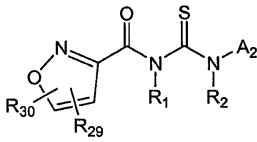
[식 27]



[식 28]



[식 29]



상기 식 17 내지 29에서, 변수  $A_1$ ,  $R_1$ , 및  $R_2$ 는 식 I 및 식 IA의 화합물에 대해 설명된 정의를 포함한다. 특정 구체예에서 변수  $A_1$ ,  $R_1$ , 및  $R_2$ 는 식 1의 화합물 및 염에 대해 설명된 정의를 포함한다. 어떤 구체예에서 이들 변수는 식 17 내지 29의 화합물에 대해 하기에서 설명되는 정의를 포함한다.

그러므로 식 17 내지 29에서 변수  $r$ ,  $s$ ,  $Q$ ,  $X$ ,  $Y$ ,  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $R_{18A}$ ,  $R_{18}$ ,  $R_{20}$ ,  $R_{21}$ ,  $R_{23}$ ,  $R_{24}$ ,  $R_{25}$ ,  $R_{27}$ ,  $R_{28}$ ,  $R_{29}$ , 및  $R_{30}$ 은 다음과 같이 정의된다.

$q$ 는 1 내지 5의 정수이다;

$r$ 은 1, 2, 또는 3이다.

$s$ 는 1, 2, 또는 3이다.

$X$ 와  $Y$ 는 없고;  $R_1$  및  $R_2$ 는 독립적으로 수소 또는 메틸이며, 다른 구체예에서  $X$ 는 산소이고  $Y$ 는  $-CH_2-$ 이다.

$R_{18A}$ 는 수소, 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시이다.

$R_{18}$ 은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다.

$R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 수소 및  $C_1-C_4$ 알킬로부터 독립적으로 선택되거나; 또는  $R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 결합하여  $C_3-C_7$ 시클로알킬기를 형성한다.

$R_{22}$  및  $R_{23}$ 은 독립적으로 선택된  $C_1-C_6$ 알킬기이고; 이것들의 각각은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

$R_{24}$ 는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시,  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알케닐옥시,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 아미노( $C_1-C_6$ )알킬, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노 $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_2-C_8$ 알카노일옥시,  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐, -모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)카르복시아미드, ( $C_3-C_7$ 시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)술폰아미드,  $C_1-C_6$ 알킬티오, 아릴( $C_0-C_4$ 알킬)티오,  $C_1-C_6$ 알킬술피닐, 및  $C_1-C_8$ 알킬술포닐로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다. 어떤 구체예에서  $R_{24}$ 는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다.

$R_{25}$ 와  $R_{27}$ 은 각각 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개, 어떤 구체예에서는 0 내지 2개의 치환기를 나타낸다. 어떤 구체예에서 본 발명은  $R_{25}$ 가 디-( $C_1-C_6$ 알킬)아미노 치환기와 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 2개의 치환기를 나타내는 경우의 식 24 및 25의 화합물 및 염을 포함한다.

$R_{28}$ 은 폐닐 또는 피리딜이고, 이것들은 각각 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

$R_{29}$ 는 수소, 메틸 또는 에틸이다.

$R_{30}$ 은 하나의 질소 원자와 N, O, 또는 S로부터 선택된 하나의 혜테로원자를 추가로 함유하는 5-원 혜테로아릴 치환기이고, 그것은 할로겐,  $C_1-C_2$ 알킬, 및  $C_1-C_2$ 알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 2개의 치환기로 치환된다.

$R_{31}$  및  $R_{32}$ 는 독립적으로  $C_1-C_6$ 알킬 및 폐닐로부터 선택되며; 그것들은 각각 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

G는 O, S, SO<sub>2</sub>, 또는 NR<sub>26</sub>으로, R<sub>26</sub>이 수소이거나 또는 R<sub>26</sub>이  $C_1-C_6$ 알킬, 폐닐, 피리딜, 또는 피리미디닐인 경우 각각은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

Q는 O, S, 또는 NR<sub>26</sub>으로, R<sub>26</sub>이 수소이거나 또는 R<sub>26</sub>이  $C_1-C_6$ 알킬, 폐닐, 피리딜, 또는 피리미디닐인 경우 각각은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

본 발명은 A<sub>2</sub>가 상기 식들 중 어느 하나의 화합물 및 염에 대해 설명된 정의, 예컨대 식 I, IA, 1에 대해 설명되고 식 2 내지 16에서 발생하는 A<sub>2</sub>의 정의를 포함하는 식 17 내지 29의 화합물 및 염을 포함한다. 변수 A<sub>2</sub>는 식 2 내지 16에서는 나

타나지 않는데, 이들 구조는 각각 A<sub>2</sub> 대신에 규정된 기를 가지고 있기 때문이다. 예를 들어 식 3은 A<sub>2</sub> 위치에 4-페녹시-페닐기를 가지고 있다. 그러므로 본 발명은 A<sub>2</sub>가 식 2 내지 16에서 A<sub>2</sub> 위치에 나타나는 기들 중 어느 하나인 경우의 식 17 내지 29의 화합물 및 염을 포함한다.

본 발명은 A<sub>1</sub>이 푸란-2-일, 푸란-3-일, 이소옥사졸-3-일, 이소옥사졸-4-일, 티오펜-2-일, 티오펜-3-일, 피롤-2-일, 피롤-3-일, 및 피라졸릴로부터 선택되는 5-원 헤테로아릴기이고, 이것들의 각각은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알케닐, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 경우의 식 I, IA, 및 1 내지 16의 화합물 및 염을 포함한다. 그런 화합물에서 X는 산소이고 Y는 -CH<sub>2</sub>-이거나, 또는 X와 Y가 둘 다 없을 수 있다.

본 발명은 A<sub>1</sub>이 푸란-2-일, 푸란-3-일, 이소옥사졸-3-일, 이소옥사졸-4-일, 티오펜-2-일, 티오펜-3-일, 피롤-2-일, 피롤-3-일, 및 피라졸릴로부터 선택되는 5-원 헤�테로아릴기이고, 이것들의 각각은 할로겐, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 2개의 치환기로 치환되며, 하나의 질소 원자와 N, O, 및 S로부터 선택된 추가의 하나의 헤�테로원자를 함유하는 5-원 헤�테로아릴 치환기로 치환되고, 이 5-원 헤테로아릴 치환기는 할로겐, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 2개의 치환기로 치환되는 식 I, IA, 및 1 내지 16의 화합물 및 염을 포함한다. 그런 화합물에서 X는 -CH<sub>2</sub>-이거나, 또는 X와 Y가 없을 수 있다.

본 발명은 또한 A<sub>1</sub>이 피리딘-2-일 또는 피리딘-3-일이고, 이것들이 각각 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 식 I, IA, 및 1 내지 16의 화합물 및 염을 포함한다. 그런 화합물에서 X는 산소일 수 있고, Y는 -XH<sub>2</sub>-이거나, 또는 X와 Y가 없을 수도 있다.

추가로 다음의 전제조건이 V, W, X, 및 Y가 없고 Z가 카르보닐이고, R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>가 둘 다 수소일 때 식 I, IA, II, 및 식 1 및 그것들의 하위형태의 바람직한 특정 화합물에 적용된다:

A<sub>1</sub> Ⓛ 4-클로로페닐일 때 A<sub>2</sub>는 4-페닐옥시페닐이 아니다;

A<sub>1</sub> Ⓛ 3,4,5-트리메톡시페닐일 때 A<sub>2</sub>는 4-클로로페닐이 아니다;

A<sub>1</sub> Ⓛ 3-메틸페닐일 때 A<sub>2</sub>는 4-페닐옥시페닐이 아니다;

A<sub>1</sub> Ⓛ 4-메톡시페닐일 때 A<sub>2</sub>는 4-페닐옥시페닐이 아니다;

A<sub>1</sub> Ⓛ 2,4-디클로로페닐일 때 A<sub>2</sub>는 4-페닐옥시페닐이 아니다;

A<sub>1</sub> Ⓛ 2-니트로페닐일 때 A<sub>2</sub>는 4-페닐옥시페닐이 아니다;

A<sub>1</sub> Ⓛ 시클로프로필일 때 A<sub>2</sub>는 4-페닐옥시페닐이 아니다;

A<sub>1</sub> Ⓛ 4-tert-부틸-페닐일 때 A<sub>2</sub>는 4-페닐옥시페닐이 아니다;

A<sub>1</sub> Ⓛ 페닐 또는 할로겐, 니트로, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환된 페닐일 때 A<sub>2</sub>는 4-(4-클로로페닐옥시)페닐이 아니다;

A<sub>1</sub> Ⓛ 벤조푸란-2-일 또는 메틸로 치환된 벤조푸란-2-일일 때 A<sub>2</sub>는 4-(4-클로로페닐옥시)페닐이 아니다;

A<sub>1</sub>이 나프틸 또는 티에닐일 때 A<sub>2</sub>는 4-(4-크롤로페닐옥시)페닐이 아니다;

A<sub>1</sub>이 페닐일 때 A<sub>2</sub>는 4-(3,5-디-트리플루오로메틸-페닐옥시)페닐이 아니다;

A<sub>1</sub>이 1,5-디메틸-2-클로로-피롤-3-일일 때 A<sub>2</sub>는 4-(4-니트로페닐옥시)-(3,5-디클로로페닐)-이 아니다; 그리고

A<sub>1</sub>이 2-할로-페닐, 2,6-디 할로-페닐, 또는 2-메틸페닐일 때 A<sub>2</sub>는 할로겐, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, 메톡시, 트리플루오로메틸, 트리플루오로메톡시, 및 트리플루오로메틸티오로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된 4-페닐옥시-페닐이 아니다.

어떠한 특정 이론에 구속되는 것을 바라지 않지만 식 I의 화합물의 항-HCV 활성은 HCV 레플리콘의 복제를 억제하는 때 문인 것으로 여겨진다. 식 I의 바람직한 화합물은 HCV 레플리콘 분석시 약 10 마이크로몰 또는 그 이하, 보다 바람직하게는 약 1 마이크로몰 또는 그 이하의 EC<sub>50</sub>을 나타내거나, 또는 약 500 나노몰 또는 그 이하의 EC<sub>50</sub>을 나타낸다.

식 I의 바람직한 화합물은 특정한 약리학적 성질을 가질 것이다. 그런 성질로는, 한정하는 것은 아니지만, 경구 생체내 활용성, 낮은 독성, 낮은 혈청 단백질 결합 및 바람직한 시험관내 및 생체내 수명이 있다.

본 발명은 패키지된 약제학적 제형을 포함한다. 그런 패키지된 제형은 용기에 담겨 있는 식 I의 하나 또는 그 이상의 화합물 또는 염을 함유하고 있는 약제학적 조성물과 C형 간염 감염(HCV 감염)으로 고생하는 환자를 치료하기 위하여 그 조성물을 사용하는 지시사항을 포함한다.

### 약제학적 제제

식 I의 화합물 및 염은 순수한 화합물로서 투여될 수도 있지만 바람직하게는 약제학적 조성물 또는 제형으로서 투여된다. 따라서 본 발명은 식 I의 화합물 또는 그것의 약제학적으로 허용될 수 있는 염을, 하나 또는 그 이상의 약제학적으로 허용될 수 있는 담체, 부형제, 보조제, 희석제, 또는 다른 성분들과 함께 포함하는 약제학적 제형을 제공한다.

일반식 I의 화합물은 경구로, 국소적으로, 비경구로, 흡입 또는 분무, 혀밀, 경피에 의하여, 구강 투여를 통하여, 직장으로, 점안 용액으로서, 또는 다른 수단에 의하여, 종래의 비독성의 약제학적으로 허용될 수 있는 담체, 부형제, 보조제, 및 비히클을 함유하는 투여용량 단위 제형으로 투여될 수 있다.

중심 화합물 외에 본 발명의 조성물은 동물에 투여하기에 적당한 약제학적으로 허용될 수 있는 담체, 하나 또는 그 이상의 부합가능한 고체 또는 액체 충전제 희석물 또는 캡슐화 물질을 함유할 수 있다. 담체는 순도가 상당히 높아야 하고 독성은 상당히 낮아서 치료하고자 하는 동물에 투여하기에 적당해야 한다. 담체는 비활성이거나 약제학적인 유익을 나타낼 수 있다. 화합물과 결합하여 사용되는 담체의 양은 화합물의 단위 용량 당 투여하기 위한 물질의 실제 양을 제공하기에 충분하다.

약제학적으로 허용될 수 있는 담체 또는 성분의 예로는 당, 예컨대 릭토스, 글루코스 및 수크로스; 전분, 예컨대 옥수수 전분 및 감자 전분; 셀룰로스 및 그것의 유도체, 예컨대 나트륨 카르복시메틸 셀룰로스, 에틸 셀룰로스, 및 메틸 셀룰로스; 분말화된 트라가칸트; 말트; 젤라틴; 탈크; 고체 윤활제, 예컨대 스테라스산 및 스테아르산 마그네슘; 황상 칼슘; 식물유, 예컨대 땅콩 기름, 면실유, 참기름, 올리브유, 및 옥수수 기름; 폴리올, 예컨대 프로필렌 글리콜, 글리세린, 소르비톨, 만니톨, 및 폴리에틸렌 글리콜; 알긴산; 유화제, 예컨대 TWEENS; 생체내 활용성 증강제, 예컨대 라우로일 마크로글리세리드, GELUCIRE, 습윤제, 예컨대 라우릴 황산 나트륨; 착색제; 풍미제; 정제화제; 안정제; 항산화제; 보존제; 발열원 유리수; 등 장성 식염수; 및 인산염 완충 용액이 있다.

특히 전신 투여를 위한 약제학적으로 허용될 수 있는 담체로는 당, 전분, 셀룰로스 및 그것의 유도체, 말트, 젤라틴, 탈크, 황산 칼슘, 식물유, 합성유, 폴리올, 알긴산, 인산염 완충 용액, 유화제, 등장성 식염수, 및 발열원 유리수가 있다. 비경구 투여에 바람직한 담체는 프로필렌 글리콜, 에틸 올레이트, 피롤리돈, 에탄올, 및 참기름이다.

본 발명의 화합물의 활성을 실질적으로 간섭하지 않는 임의의 활성 제제가 약제학적 조성물에 포함될 수 있다.

약제학적으로 허용될 수 있는 염, 에스테르 또는 다른 유도체를 포함하여, 본 발명의 효과적인 농도의 하나 또는 그 이상의 화합물은 적당한 약제학적 담체, 부형제, 보조제, 또는 비히클과 혼합된다. 화합물이 불충분한 용해도를 나타내는 경우에는 화합물을 용해시키는 방법이 사용될 수 있다. 그런 방법은 당업자들에게 공지이며, 예를 들면 그것들에 한정되지는 않지만, 보조용매, 예컨대 디메틸су포시드 (DMSO)를 사용하는 방법, 계면활성제, 예컨대 Tewwn을 사용하는 방법, 또는 중탄산 나트륨 수용액에 분해시키는 방법이 있다. 화합물의 유도체, 예컨대 화합물의 염 또는 선구 약물 또한 효과적인 약제학적 조성물의 제형에 사용될 수 있다.

식 I의 화합물(들)을 혼합 또는 첨가할 때 그 결과의 혼합물은 용액, 혼탁액, 에멀션 등일 수 있다. 그 결과의 혼합물의 형태는 많은 인자, 이를테면 의도된 투여 방식 및 선택된 담체 또는 비히클중의 화합물의 용해도 등에 달려 있다. 질병, 장애 또는 상태의 증상을 치료하고 완화시키기에 충분한 효과적인 농도는 실험적으로 결정될 수 있다.

일반식 I의 화합물을 함유하는 약제학적 조성물은 경구 용도에 적당한 형태로, 예컨대 정제, 트로키, 마름모꼴 정제, 수성 또는 유성 혼탁액, 분산용 분말 또는 과립, 에멀션, 경질 또는 연질 캡슐, 또는 시럽 또는 엘릭서르의 형태일 수 있다. 경구로 사용하기 위한 조성물은 약제학적 조성물의 제조를 위해 당해 기술 분야에 공지되어 있는 모든 방법을 따라 제조될 수 있으며, 그러한 조성물은 하나 또는 그 이상의 제제, 예컨대 감미제, 풍미제, 착색제, 및 보존제를 약제학적으로 보기 좋고 먹기에도 좋은 제제를 제공하기 위해 함유할 수 있다. 경구 제형은 본 발명의 화합물을 0.1 내지 99 %로, 통상적으로는 최소한 약 5 % (중량 %)로 본 발명의 화합물을 함유한다. 어떤 구체예에서는 본 발명의 화합물을 약 25 % 내지 약 50 %, 또는 5 % 내지 75 %로 함유하기도 한다.

### 액체 제형

본 발명의 화합물은 예를 들면 수성 또는 유성 혼탁액, 용액, 에멀션, 시럽, 또는 엘릭서르와 같은 경구용 액체 제제 중에 혼입될 수 있다. 더우기 이들 화합물을 함유하고 있는 제형은 사용 전에 물 또는 다른 적당한 비히클로 구성되는 건조 제품으로서 제공될 수 있다. 그러한 액체 제제는 종래의 첨가제, 예컨대 혼탁제 (예컨대 소르비톨 시럽, 메틸 셀룰로스, 글루코스/당, 시럽, 젤라틴, 히드록시에틸 셀룰로스, 카르복시메틸 셀룰로스, 알루미늄 스테아르산염 젤, 및 수소화된 식용 지방), 유화제 (예컨대 레시틴, 소르비탄 몬솔레에이트, 또는 아카시아), 식용유 (예컨대 아몬드유, 분획화된 코코넛유, 실릴 에스테르, 프로필렌 글리콜 및 에틸 알코올)를 포함할 수 있는 비-수성 비히클, 및 보존제 (예컨대 메틸 또는 프로필 p-히드록시벤조에이트 및 소르빈산)를 함유할 수 있다.

경구 투여되는 조성물은 또한 액체 용액, 에멀션, 혼탁액, 분말, 과립, 연금약액, 텅크제, 시럽 등을 포함할 수 있다. 그런 조성물의 제조에 적당한 약제학적으로 허용될 수 있는 담체는 당해 기술 분야에 잘 알려져 있다. 경구용 제형은 보존제, 풍미제, 감미제, 예컨대 수크로스 또는 사카린, 맛-차단제, 및 착색제를 함유할 수 있다.

시럽, 엘릭서르, 에멀션 및 혼탁액에 대한 담체의 전형적인 성분은 에탄올, 글리세롤, 프로필렌 글리콜, 폴리에틸렌 글리콜, 액체 수크로스, 소르비톨 및 물을 포함한다. 시럽 및 엘릭서르는 감미제, 예컨대 글리세롤, 프로필렌 글리콜, 소르비톨 또는 수크로스와 함께 제형될 수 있다. 그런 제형은 또한 진통제를 함유하기도 한다.

### 혼탁액

혼탁액에 대해서는 전형적인 혼탁제로는 메틸셀룰로스, 나트륨 카르복시메틸 셀룰로스, AVICEL RC-591, 트라가칸트 및 알긴산 나트륨이 있고; 전형적인 습윤제로는 레시틴과 폴리소르베이트 80이 있으며; 전형적인 보존제로는 메틸 파라벤 및 벤조산 나트륨이 있다.

수성 혼탁액은 수성 혼탁액의 제조에 적당한 부형제와의 혼합 형태로 활성 물질(들)을 함유한다. 그런 부형제로는 혼탁제, 예컨대 나트륨 카르복시메틸셀룰로스, 메틸셀룰로스, 히드로프로필메틸셀룰로스, 알긴산 나트륨, 폴리비닐파리돈, 트라가칸트 검 및 아카시아 검; 분산 또는 습윤제; 자연 발생 포스파티드, 예컨대 스테아레이트 폴리옥시에틸렌, 또는 에틸렌 옥사이드와 긴 사슬 지방족 알코올과의 축합 생성물, 예컨대 햅타데카에틸렌옥시세탄올, 또는 지방산과 헥시톨 무수물로부터 유도된 부분 에스테르와 에틸렌 옥사이드와의 축합 생성물, 예컨대 폴리에틸렌 소르비탄 치환기가 있다. 수성 혼탁액은 또한 하나 또는 그 이상의 보존제, 예를 들면 에틸, 또는 n-프로필 p-히드록시벤조에이트를 함유할 수 있다.

오일성 혼탁액은 활성 성분들을 식물유, 예컨대 땅콩 기름, 올리브유, 참기름 또는 코코넛 기름에, 또는 광물성 오일, 예컨대 액체 파라핀 중에 혼탁시킴으로써 제형될 수 있다. 오일성 혼탁액은 증후제, 예를 들면 벌꿀, 경질 파라핀 또는 세틸 알코올을 함유할 수 있다. 상기에서 설명된 것과 같은 감미제, 및 풍미제가 먹기에 좋은 경구용 제제를 제공하기 위해 첨가될 수 있다. 이들 조성물은 아스코르브산과 같은 항산화제의 첨가에 의해 보존될 수 있다.

### 에멀션

본 발명의 약제학적 조성물은 또한 유중수 에멀션의 형태일 수 있다. 오일상은 식물유, 예컨대 올리브유나 땅콩 기름, 또는 광물성 오일, 예컨대 액체 파라핀 또는 이것들의 혼합물일 수 있다. 적당한 유화제는 자연 발생 검, 예를 들면 아카시아검 또는 트라가칸트 검, 자연 발생 포스파티드, 예를 들면 소이빈, 레시틴, 및 지방산과 헥시톨 무수물로부터 유도된 에스테르 또는 부분 에스테르, 예를 들면 소르비탄 모노올레이트, 및 상기 부분 에스테르와 에틸렌 옥사이드와의 축합 생성물, 예를 들면 폴리옥시에틸렌 소르비탄 모노올레이트일 수 있다.

### 분산용 분말

물의 첨가에 의해 수성 혼탁액을 제조하기에 적당한 분산용 분말 및 과립은 분산 또는 습윤제, 혼탁제 및 하나 또는 그 이상의 보존제와의 혼합물 형태로 활성 성분을 제공한다. 적당한 분산 또는 습윤제 및 혼탁제는 앞에서 언급된 것들을 예로 들 수 있다.

### 정제 및 캡슐

정제는 전형적으로 비활성 희석제, 예를 들면 탄산 칼슘, 탄산 나트륨, 만니톨, 락토스 및 셀룰로스; 결합제, 예를 들면 전분, 젤라틴 및 수크로스; 봉괴제, 예를 들면 전분, 알긴산, 및 크로스카르멜로스; 유후제, 예를 들면 스테아르산 마그네슘, 스테아르산 및 탈크와 같은, 종래의 약제학적으로 부합하는 보조제를 포함한다. 이산화 규소와 같은 글리단트는 분말 혼합물의 흐름 특성을 개선시키기 위해 사용될 수 있다. FD&C 염료와 같은 착색제가 외관을 위해 첨가될 수 있다. 감미제와 풍미제, 예컨대 아스파탐, 사카린, 멘톨, 페퍼민트, 및 과일 향은 씹을 수 있는 정제에 대해 유용한 보조제이다. 캡슐(시간 방출 및 지속된 방출 제형을 포함하여)은 전형적으로 상기에서 언급된 하나 또는 그 이상의 고체 희석제를 포함한다. 담체 성분의 선택은 때로 맛, 비용, 및 보관 안정성과 같은 이차적인 고려사항에 좌우되기도 한다.

그러한 조성물은 또한 종래의 방법에 의해, 전형적으로 pH 또는 시간-의존성 코팅으로 코팅될 수 있어서, 활성 화합물이 원하는 국소 적용 부위 근처의 위장관에서, 또는 원하는 작용을 연장할 수 있도록 다양한 시간 대에 방출될 수 있다. 그러한 단위 용량 형태는 전형적으로, 그것들에 국한되는 것은 아니지만, 하나 또는 그 이상의 셀룰로스 아세테이트 프탈레이트, 폴리비닐아세테이트 프탈레이트, 하드록시프로필 메틸셀룰로스 프탈레이트, 에틸 셀룰로스, 유드라지트 코팅, 왁스 및 웰락을 포함한다.

경구적으로 사용하기 위한 제형은 또한 경질 젤라틴 캡슐로서 제공될 수 있는데, 캡슐에서 활성 성분은 비활성 고체 희석제, 예를 들면 탄산 칼슘, 인산 칼슘 또는 카울린과 혼합되며, 또한 제형은 연질 캡슐로서 제공될 수 있고, 이 때에 활성 성분은 물 또는 오일 매질, 예를 들면 땅콩 기름, 액체 파라핀 또는 올리브유와 혼합된다.

### 주사용 및 비경구용 제형

약제학적 조성물은 멸균 주사용 수성 또는 유성 혼탁액의 형태일 수 있다. 이 혼탁액은 공지 기술에 따라 상기에서 언급된 적당한 분산 또는 습윤제 및 혼탁제를 사용하여 제형될 수 있다. 멸균 주사용 제제는 또한 비독성의 비경구적으로 적용할 수 있는 희석제 또는 용매 중에 멸균 주사용 용액 또는 혼탁액, 예를 들면 1,3-부탄디올 중의 용액일 수 있다. 사용될 수 있는 허용되는 비히클 및 용매 중에는 물, 림거 용액, 및 등장성 염화 나트륨 용액이 있다. 또한 멸균되고 고정된 오일이 용매 또는 혼탁 매질로서 관례적으로 사용된다. 이 목적에 대해 어떠한 독성이 없는 고정된 오일, 이를테면 합성 모노- 또는 디글리세리드와 같은 오일이 사용될 수 있다. 또한 올레산과 같은 지방산이 주사용 제제에 유용하다.

식 I의 화합물은 멸균 매질중으로 비경구 투여될 수 있다. 비경구 투여는 피하 주사, 정맥내, 근육내, 포막내 주사 또는 주입 기법을 포함한다. 사용되는 비히클과 농도에 좌우되는 약물은 비히클에 혼탁되거나 용해될 수 있다. 유익하게도 국소용 마취제, 보존제 및 완충제와 같은 보조제가 비히클에 용해될 수 있다. 비경구 투여를 위한 조성물에서 담체는 총 조성물의 최소한 약 90 중량%를 차지한다.

## 좌제

식 I의 화합물은 또한 약물의 직장 투여를 위한 좌제의 형태로 투여될 수 있다. 이들 조성물은 약물을 보통 온도에서는 고체이지만 직장 온도에서는 액체이고, 따라서 직장에서 약물을 방출하도록 용융될 적당한 비-염증성 부형제와 혼합함으로써 제조될 수 있다.

## 국소용 제형

본 발명의 화합물은 국소용 또는 국부용 적용을 위해, 예컨대 피부와 점막, 예를 들면 눈과 같은 곳에 국소 적용하기 위해 젤, 크림 및 로션의 형태로, 그리고 눈에 적용하기 위해 또는 분비액 저장기내 또는 척수내 적용을 위해 제형될 수 있다. 본 발명의 국소용 조성물은 예를 들면 용액, 크림, 연고, 젤, 로션, 밀크, 클린저, 가습제, 스프레이, 피부 패치, 등을 포함하여 어떠한 형태든지 될 수 있다.

그런 용액은 적절한 염을 사용하여 pH가 약 5 내지 7이고, 0.01 % 내지 10 %의 등장성 용액으로서 제형될 수 있다. 본 발명의 화합물은 또한 경피용 패치로서 경피 투여를 위해 제형될 수 있다.

활성 화합물을 함유하는 국소용 조성물은 당해 기술분야에 잘 알려져 있는 다양한 담체 물질, 예를 들면 물, 알코올, 알로에 베라 젤, 알란토인, 글리세린, 비타민 A 및 E 오일, 광물성 기름, 프로필렌 글리콜, PPG-2 미리스틸 프로피오네이트, 등과 혼합될 수 있다.

국소용 담체에 사용하기에 적당한 다른 물질로는 예를 들면 연화제, 용매, 보습제, 증후제 및 분말이 있다. 이들 유형의 물질의 각각의 실례는 다음과 같으며, 그것들은 단독으로 또는 하나 또는 그 이상의 물질의 혼합물로서 사용될 수 있다:

연화제, 예를 들면 스테아릴 알코올, 글리세릴 모노리시놀레이트, 글리세릴 모노스테아레이트, 프로판-1,2-디올, 부탄-1,3-디올, 링크 오일, 세틸 알코올, 이소-프로필 이소스테아레이트, 스테아르산, 이소-부틸 팔미테이트, 이소세틸 스테아레이트, 올레일 알코올, 이소프로필 라우레이트, 헥실 라우레이트, 데실 올레이트, 옥타데칸-2-올, 이소세틸 알코올, 세틸 팔미테이트, 디메틸폴리실록산, 디-n-부틸 세바세이트, 이소-프로필 미리스테이트, 이소-프로필 팔미테이트, 이소-프로필 스테아레이트, 부틸 스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜, 트리에틸렌 글리콜, 라놀린, 참기름, 코코넛 오일, 아라키스 오일, 캐스터 오일, 아세틸화된 라놀린 알코올, 석유, 광물성 오일, 부틸 미리스테이트, 이소스테아르산, 팔미트산, 이소프로필 리놀레이트, 라우릴 아세테이트, 미리스틸 락테이트, 데실 올레이트, 및 미리스틸 미리스테이트; 분무용 추진제, 예컨대 프로판, 부탄, 이소-부탄, 디메틸 에테르, 이산화탄소, 및 산화 질소; 용매, 예를 들면 에틸 알코올, 염화 메틸렌, 이소-프로판, 캐스터 오일, 에틸렌 글리콜 모노에틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 모노에틸 에테르, 디메틸 술폭시드, 디메틸 포름아이드, 테트라히드로푸란; 보습제, 예를 들면 글리세린, 소르비톨, 나트륨 2-피롤리돈-5-카르복실레이트, 가용성 콜라겐, 디부틸 프탈레이트, 및 젤라틴; 및 분말, 예를 들면 초크, 탈크, 백토, 카올린, 전분, 검, 콜로이드성 이산화규소, 폴리아크릴산 나트륨, 테트라 알킬 암모늄 스멕틱, 트리알킬 아릴 암모늄 스멕틱, 화학적으로 변형된 마그네슘 알루미늄 실리케이트, 유기적으로 변형된 몬트모릴로나이트 클레이, 수화된 알루미늄 실리케이트, 암모니아 처리된 실리카, 카르복시비닐 중합체, 나트륨 카르복시메틸 셀룰로스, 및 에틸렌 글리콜 모노스테아레이트.

본 발명의 화합물은 또한 리포솜 전달 시스템의 형태, 예컨대 작은 단일 라벨라 소포, 큰 단일 라벨라 소포, 및 다중 라벨라 소포의 형태로 국소적으로 투여될 수 있다. 리포솜은 다양한 포스포리피드, 예컨대 콜레스테롤, 스테아릴아민 또는 포스파티딜콜린으로부터 형성될 수 있다.

## 다른 제형

활성 화합물의 전신성 전달을 이루기 위해 유용한 다른 조성물은 혀밑, 볼 및 비간 단위 용량 형태를 포함한다. 그러한 조성물은 전형적으로 하나 또는 그 이상의 가용성 충전제 물질, 예컨대 수크로스, 소르비톨 및 만니톨, 및 결합제, 예컨대 아카시아, 미정질 셀룰로스, 카르복시메틸 셀룰로스, 및 히드록시프로필 메틸셀룰로스를 포함한다. 상기에서 언급된 글리단트, 유후제, 감미제, 착색제, 항산화제 및 풍미제도 또한 포함될 수 있다.

흡입을 위한 조성물은 전형적으로 건조 분말로서 또는 에어로솔의 형태로 투여될 수 있는 용액, 혼탁액 또는 애벌선의 형태로 종래의 추진제 (예컨대 디클로로디플루오로메탄 또는 트리클로로플루오로메탄)를 사용하여 제공될 수 있다.

## 추가의 성분

본 발명의 조성물은 또한 임의로 활성 증강제를 포함할 수 있다. 활성 증강제는 본 발명의 화합물의 항미생물 효과를 증강시키기 위해 상이한 방식들로 기능하는 광범위한 분자들로부터 선택될 수 있다. 특정 부류의 활성 증강제로는 피부 침투 증강제와 흡수 증강제가 있다.

본 발명의 약제학적 조성물은 또한 광범위한 분자들로부터 선택된 추가의 활성 제제를 함유할 수 있는데, 그들은 본 발명의 화합물의 항미생물 또는 치료 효과를 증강시키기 위하여 상이한 방식들로 기능한다. 이들 임의의 다른 활성 제제들은 존재하는 경우 전형적으로 본 발명의 조성물에서 약 0.01 % 내지 약 15 % 범위의 수준으로 사용된다. 어떤 구체예는 조성물의 약 0.1 % 내지 약 10 중량%로 함유한다. 다른 구체예는 조성물의 약 0.5 % 내지 약 5 중량%로 함유한다.

### 패키지된 제형

본 발명은 패키지된 약제학적 제형을 포함한다. 그러한 패키지된 제형은 식 I의 하나 또는 그 이상의 화합물 또는 염을 용기중에 함유하고 있는 약제학적 조성물과 그 조성물을 미생물 감염으로 고생하는 동물(전형적으로 사람 환자)을 치료하거나 동물에서 미생물 감염을 방지하기 위해 사용하기 위한 지시사항을 포함한다.

전술한 모든 설명에서 본 발명의 화합물은 단독으로 또는 혼합물로서 투여될 수 있으며, 조성물은 추가로 표시를 위해 필요에 따라 추가의 약물 또는 부형제를 포함할 수 있다.

### 치료 방법

본 발명은 바이러스성 감염, 특히 HCV 감염을 치료하는 방법을 포함하는데, 그 방법은 식 I의 하나 또는 그 이상의 화합물의 효과적인 양을 바이러스성 감염으로 고생하는 환자에게 투여하는 것으로 이루어진다. 식 I의 화합물의 효과적인 양은 바이러스성 감염의 증상을 감소시키기에 충분한 양일 것이다. 또는 달리 식 I의 화합물의 효과적인 양은 환자의 조직 또는 체액에서 검출가능한 바이러스 또는 바이러스 항체의 양을 상당히 감소시키기에 충분한 양일 것이다.

치료 방법은 HCV 감염과 관련된 황달, 피로, 진한색 소변, 복부 통증, 식욕 상실, 및 메스꺼움을 감소 또는 완화시키기에 충분한 식 I의 화합물의 양을 투여하는 것으로 이루어진다.

본 발명은 또한 HCV 감염 이외의 바이러스성 감염, 예컨대 단순 포진(HSV) 감염, B형 간염 감염, HIV-AIDS를 포함하는 레트로바이러스 감염, 사이토메갈로바이러스(CMV) 감염, 홍역, 유행성 이하선염, 라사열, 인플루엔자 A 및 B 감염, 및 폐코르나 바이러스 감염을 치료하는 방법에 관련된다.

식 I의 화합물은 C형 간염 바이러스의 복제를 억제함으로써 HCV 질병 진전을 개선시키는 것으로 여겨진다. 본원에서 제공되는 화합물은 그것들이 독립적으로 바이러스 복제를 억제하는 것 외에 실제로 활성 바이러스를 죽인다는 점에서 바이러스 박멸제일 것이다. 또한 본원에 제공되는 화합물은 바이러스 박멸 활성과 복제 억제의 조합을 포함하는 메카니즘을 통해서 기능할 것이다.

본 발명에 의해 포함되는 치료 방법은 바이러스로 감염된 또는 바이러스성 감염의 위험이 있는 환자에게, 식 I의 화합물의 효과적인 양을 단독의 활성 성분으로서 투여하고, 식 I의 화합물을 하나 또는 그 이상의 다른 활성 제제, 예컨대 다른 항바이러스제, 특히 HCV 감염에 대해 효과적인 항바이러스제와 함께 투여하는 것을 포함한다. 본 발명은 식 I의 하나 또는 그 이상의 화합물을 HCV에 대하여 효과적인 화합물, 예를 들면 그것들에 국한되는 것은 아니지만 Peg-인터페론, Peg-인터페론 알파 2b, 리바비린, 천연 인터페론, 알부페론, 인터페론 베타-1a, IL-10, 인터페론 감마-1b, AMANTADINE, 또는 ZADAXIM과 함께 투여하는 것을 포함한다.

치료 및 질병 예방 방법은 또한 식 I의 화합물의 효과적인 양을 효과적인 양의 누클레오시드 유사체인 하나 또는 그 이상의 항바이러스제, 예를 들면 그것들에 국한되는 것은 아니지만, 비다라빈(Vidarabine), 아시클로비어(Acyclovir), 간시클로비어(Gancyclovir), VALCYTE(발간시클로비어), 펜시클로비어(Penciclovir), 팜시클로비어(Famciclovir), BVDU, 브로아비어(Broavir), FIAC, FIAU, (S)-HPMPA, (S)-HPMPC, 네비라핀(Nevirapine), 델라비르딘(Delavirdine), 및 누클레오시드-유사체 역 전사효소 억제제, 예컨대 AZT(Zidovudine), ddI(Didanosine), ddC(Zalcitabine), d4T(Stavudine), 3TC(Lamivudine)와 함께 바이러스로 감염되었거나 바이러스성 감염의 위험이 있는 환자에게 투여하는 것을 포함한다.

치료 및 질병 예방 방법은 추가로 효과적인 양의 식 I의 화합물을 효과적인 양의 비-누클레오시드 유사체 항바이러스 화합물인 하나 또는 그 이상의 항바이러스제, 예를 들면 그것들에 국한되는 것은 아니지만 아만타딘(Amantadine), 리만타딘

(Rimantadine), 렐렌자(Releenza), 타미플루(Tamiflu), 플레코나릴(Pleconaril), 및 프로테아제 억제제, 예컨대 사퀴나비어(Saquinavir), 리토나비어(Ritonavir), 인디나비어(Indinavir), 및 넬피나비어(Nelfinavir)와 함께 바이러스로 감염되었거나 바이러스성 감염의 위험이 있는 환자에게 투여하는 것을 포함한다.

치료 방법은 또한 시험관내에서 HCV 래플리콘 복제를 억제하기에 충분한 농도의 식 I의 화합물을 투여함으로써, HCV로 감염된 환자에게서 HCV 복제를 생체내에서 억제하는 것을 포함한다. 환자에게 투여되는 화합물의 "충분한 농도"라 함은 감염에 대항하여 싸우기 위해 환자의 시스템에서 활용될 수 있는 화합물의 농도를 의미한다. 그러한 농도는 실험적으로, 예를 들면 화합물의 혈액내 농도를 분석함으로써, 또는 이론적으로, 예컨대 생체내 활용성을 계산함으로써 확실해진다.

하루에 체중 kg당 약 0.1 mg 내지 약 140 mg 정도의 단위 용량 수준 (약 0.5 mg 내지 약 7 g/환자/1일)이 상기 표시된 질환들의 치료에 유용하다. 단일한 단위 용량 형태를 생성하기 위해 담체 물질과 조합될 수 있는 활성 성분의 양은 치료될 숙주와 특정한 투여 방식에 따라 달라질 것이다. 단위 용량 형태는 일반적으로 약 1 mg 내지 약 500 mg의 활성 성분을 함유할 것이다.

단위 용량의 투여 빈도 또한 사용되는 화합물 및 치료되는 특정 질병에 따라 달라질 수 있다. 그러나 대부분의 감염성 질병의 치료를 위해서는 하루에 4회 또는 그 이하의 단위 용량 투여 요법이 바람직하며, 하루에 1회 또는 2회의 단위 용량 투여 요법이 특히 바람직하다.

그러나 어떠한 특정한 환자에 대한 구체적인 용량 수준은 사용되는 구체적인 화합물의 활성, 연령, 체중, 일반적인 건강 상태, 성별, 다이어트, 투여 시간, 투여 경로, 및 배설 속도, 약물 조합 및 치료법이 진행되고 있는 특정 질병의 심각성을 포함한 다양한 요인들에 따라 좌우될 것이라는 것이 인지될 것이다.

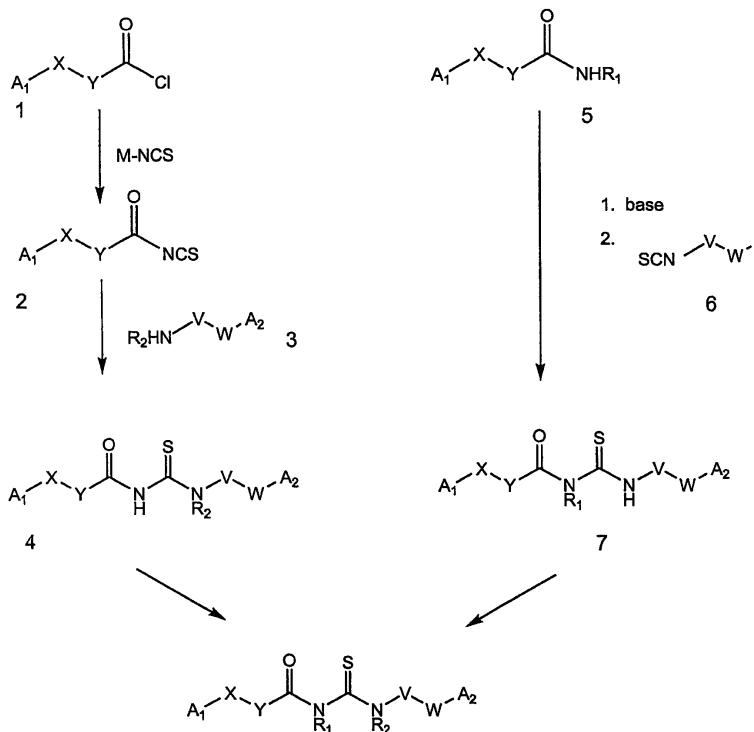
### **화합물의 합성**

본 발명의 화합물의 제조예를 아래의 실시예 1 및 2에 제시한다. 당업자들은 출발 물질이 다양할 것이고 화합물을 제조하기 위해 사용된 추가의 단계들이 본 발명에 포함된다는 것을 인지할 것이다.

#### **실시예**

##### **개략도**

##### **개략도 I**



일반식 I, Z는 카르보닐이다.

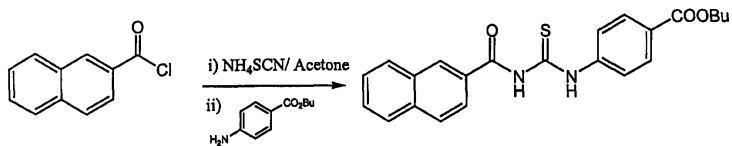
본 발명의 화합물을 제조하는 일반적인 방법은 개략도 I에 도시되고 추가로 다음의 합성 실례에 의해 예시된다. 도시된 바와 같이 산 염화물 1(또는 브롬화물)이 적절한 용매 중에서 금속 또는 암모늄 티오시아네이트와 반응하여 상응하는 아실티오시아네이트 2가 제조된다. 2와 적절한 일차( $R_2 = H$ ) 또는 이차 아민 3과 반응함으로써 아실티오우레아 4가 제조된다. 필요하다면 추가의 알킬화는 4에서 수행되어 일반식 I의 화합물이 제조될 수 있다. 이 개략도에서 식 I의 기 Z는 카르보닐을 나타낸다. 또는 달리 일반식 I의 화합물은 일차( $R_1 = H$ ) 또는 이차 아미드 5를 염기로 처리한 후 그 결과 생성된 음이온을 적절하게 치환된 이소티오시아네이트 6과 반응시켜 아실티오우레아 7을 제조함으로써 제조된다. 필요하다면 추가의 알킬화는 7에서 수행되어 일반식 I의 화합물이 제조될 수 있다.

산 염화물을 형성하기 위한 반응은 일반적으로 용매 중에서 수행된다. 이 경우 적당한 용매는 반응 조건 하에서 변화하지 않는 비활성 유기 용매이다. 그러한 것으로는 바람직하게는 에테르, 예컨대 디에틸 에테르 또는 테트라히드로푸라닐, 또는 3차 부틸 메틸 에테르; 할로게노탄화수소, 예컨대 디클로로메탄, 트리클로로메탄, 테트라클로로메탄, 1,2-디클로로에탄, 트리클로로에탄, 테트라클로로에탄, 1,2-디클로로에탄 또는 트리클로로에틸렌, 탄화수소, 예컨대 벤젠, 크릴렌, 톨루엔, 헥산, 헵탄, 시클로헥산 또는 광물성 오일 분획, 니트로메탄, 또는 아세토니트릴이 있다. 또한 이들 용매의 혼합물을 사용하는 것도 가능하다.

산 염화물과 암모늄 또는 칼륨 티오시아네이트와의 반응은 전형적으로 무기 티오시아네이트가 적절하게 녹을 수 있는 용매 중에서 수행된다. 어떤 경우에 물이 용해도를 증가시키기 위하여 첨가될 수 있다. 첨가되는 물의 %는 1 %에서 90%로 다양할 것이며, 전형적으로는 50 % (v/v)가 가장 바람직하다.

다른 알칼리성 티오시아네이트가 사용될 수 있다. 예를 들면 리튬 티오시아네이트가 테트라히드로푸란 중에서의 용해도를 증가시키므로, 소량의 수성 성분의 사용이 가능하게 될 것이다. 세슘, 류비듐, 스트론튬, 및 바륨이 당업자에게 잘 알려져 있는 것처럼 티오시아네이트에 대한 카운터 이온으로서 사용될 수 있다.

실시예 1. 4-[3-(나프탈렌-2-카르보닐)-티오우레이도]-벤조산 부틸 에스테르(화합물 1)의 제조

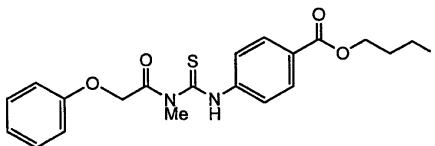


2-나프토일 클로라이드 (190 mg, 1 mmol)를 아세톤 (5 ml)중의 암모늄 티오시아네이트 용액 (200 mg, 약 3 mmol)에 첨가하고 실온에서 1시간 동안 교반한다. 그 반응 혼합물에 부틸 4-아미노벤조에이트 (180 mg, 0.93 mmol)를 첨가한다. 실온에서 밤새 교반을 계속한다. 형성된 고체를 여과하고, 물로 세척한 후 ( $2\times 5$  ml) 아세톤/헥산 (3:1)으로 세척하고 ( $2\times 10$  ml) 건조시킨다.

생성물 (140 mg)을 NMR (Bruker, 300 MHz) 및 MS에 의해 특성을 확인하였다.

NMR ( $^1\text{H}$ ,  $\text{CDCl}_3$ ): 0.99 (t,  $J = 7.5$  Hz, 3H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}$ ), 1.49 (m,  $J = 7.5$  Hz, 2H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}$ ), 1.77 (m,  $J = 7.5$  Hz, 2H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}$ ), 4.34 (t,  $J = 7.5$  Hz, 2H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}$ ), 7.65 (m, 2H, 나프탈), 7.92 (m, 4H, 나프탈), 7.99 (d, 2H,  $J = 8.4$  Hz, 1H, 나프탈), 8.10 (d, 2H,  $J = 8.4$  Hz), 8.43 (d, 1H,  $J = 1.2$  Hz), 9.27 (s, 1H, NH), 12.9 (s, 1H, NH); MS: 계산치: 406.14, LC-MS: 407( $\text{M}^{+1}$ ).

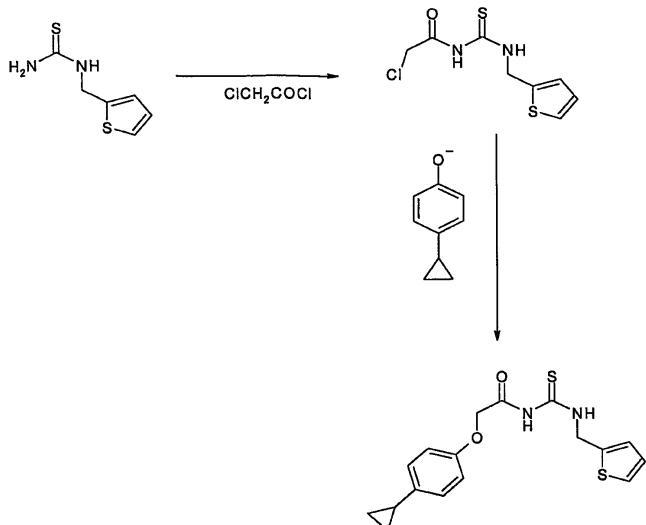
실시예 2. 4-[3-메틸-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레이도]벤조산 부틸 에스테르 (화합물 2)의 제조



THF 중의 t-BuOK (1.0 N 용액 중의 0.55ml)를 THF (5 ml)중의 페녹시-N-메틸아세트아미드 (83 mg, 0.5 mmol) 용액에 첨가한다. 5분 후에 부틸-4-이소티오시아나토벤조에이트 (118 mg, 0.5 mmol)를 일부분씩 첨가하고 그 결과의 혼합물을 밤새 교반한다. 미정제 혼합물을 실리카 패드를 통하여 여과한다. 그것을 헥산 중의 25 % EtOAc를 사용하여 용출하면서 실리카 상에서 정제한 후에 원하는 아실티오우레이아를 노란색 오일로서 얻었다 (20 mg).

NMR ( $^1\text{H}$ ,  $\text{CDCl}_3$ ): 1.05 (t,  $J = 7$  Hz, 3H), 1.5 (m, 2H), 1.75 (m, 2H), 3.78 (s, 3H, NMe), 4.35 (t,  $J = 7$  Hz, 2H), 4.96 (s, 2H), 7.0–8.05 (m, 9H), 13.2 (bs, 1H).

실시예 3. 아릴 티오우레이아의 대체 합성, 1-(2-(4-시클로프로필페녹시)아세틸)-3-((티오펜-2-일)메틸)티오우레이아 (화합물 3)의 합성



식 I의 아릴 티오우레아는 또한 아릴 알콕시드 이온을 할로산 클로라이드와 원하는 아민과의 반응의 생성물과 반응시킴으로써 원하는 아릴 티오우레아를 제조할 수 있다. 다양한 산 할라이드 유도체가 이 목적에 사용될 수 있는데, 예를 들면 클로로아세틸 클로라이드, 3-클로로프로피오닐 클로라이드, 3-브로모프로피오닐 클로라이드, 2-브로모프로피오닐 클로라이드, 4-브로모부티닐 클로라이드, 3-브로모부티릴 클로라이드, 2-브로모부티릴 클로라이드 등이 있다. 할라이드 외에 다른 이탈기가, 전형적으로 히드록시산 또는 보호된 히드록시산으로부터 제조될 수 있다. 그러한 기의 실례로는 메탄술포네이트(메실레이트), 트리플루오로메탄술포네이트(트리플레이트)와, 반응성이 적은 p-톨루엔술포네이트(토실레이트) 및 p-브로모벤젠술포네이트 히드록시이 있다.

그런 반응에서 아릴 알콕시드는 아릴알킬 또는 헤테로고리일 수 있는데, 단 헤�테로고리의 알콕시드 이온은 반응을 실제화하기에 충분히 안정해야 한다. 아릴 알콕시드의 벤젠 고리 상에서 많은 치환기들이 알콕시드를 안정화시키며, 바람직하게는 예컨대 m-니트로, m-CF<sub>3</sub>, 및 p-할로가 있다.

#### 실시예 4. 추가의 아릴 티오우레아

다음의 화합물들을 실시예 1, 2 및 3에서 설명한 방법에 의하여 제조하였다. 당업자들은 시약 및 반응 조건이 본 발명의 화합물들을 제조하기 위하여 변형될 필요가 있다는 것을 인지할 것이다.

[표 1]

화합물 번호	구조	명칭
4		4-[3-메틸-3-(2-o-톨릴옥시-아세틸)-티오우레이도]-벤조산 부틸 에스테르
5		4-[3-메틸-3-(2-m-톨릴옥시-아세틸)-티오우레이도]-벤조산 부틸 에스테르
6		4-[3-(2-p-톨릴옥시-아세틸)티오우레이도]-벤조산 부틸 에스테르

7		4-[3-[2-(4-플루오로-테녹시)아세틸]-티오우레이도]-벤조산 부틸 에스테르
8		4-[3-[2-(4-메톡시-페녹시)-아세틸]-티오우레이도]-벤조산 부틸 에스테르
9		1-(4-플루오로-페닐)-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레이아
10		1-(3-메톡시-페닐)-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레이아
11		1-(4-메톡시-페닐)-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레이아
12		1-(2-페녹시아세틸)-3-(4-페녹시페닐)티오우레이아
13		1-(4-벤질옥시-페닐)-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레이아
14		1-비페닐-4-일-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레이아
15		1-(4-시클로헥실-페닐)-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레이아
16		1-[(4-피페리딘-1-일)-페닐]-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레이아
17		1-(4-디에틸아미노)-페닐-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레이아
18		1-(2-페녹시-아세틸)-3-(페녹시-페닐)-티오우레이아
19		1-(3-벤질옥시-페닐)-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레이아
20		1-(2-아세틸-페닐)-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레이아

21		1-(6-플루오로-나프탈렌-2-일)-3-(2-페녹시-아세틸)-티우오레아
22		1-벤조티아졸로-6-일-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레아
23		1-(2-페녹시-아세틸)-3-퀴놀린-3-일-티오우레아
24		1-(2-(3,4-디클로로-페녹시)아세틸)-3-(4-시아노페닐)티오우레아
25		1-(2-하이드록시-벤조일)-3-(3-페녹시-페닐)-티우오레아
26		1-(벤조푸란-2-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)-티오우레아
27		1-(벤조푸란-2-카르보닐)-3-(3-벤질옥시-페닐)-티오우레아
28		1-(벤조[b]티오펜-2-카르보닐)-3-(3-벤질옥시-페닐)-티오우레아
29		1-(3-벤질옥시-페닐)-3-(5-플루오로-1H-인돌-2-카르보닐)-티오우레아
30		1-(5-플루오로-벤조푸란-2-카르보닐)-3-(4-페녹시-페닐)-티오우레아
31		1-(5-플루오로-벤조푸란-2-카르보티오일)-3-(4-페녹시-페닐)-티오우레아
32		1-[3-(4-플루오로-페닐)-프로프리오닐]-3-(4-페녹시-페닐)-티오우레아
33		1-(2-페녹시-아세틸)-3-(4-페녹시-시클로헥실)-티오우레아
34		1-페네틸-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레아
35		1-메틸-1-페네틸-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레아

36		4-[3-(2-(페닐솔파닐)-아세틸)-티오우레이도]-벤조산 부틸 에스테르
37		1-벤조[1,3]디옥솔-5-일-3-(2-페녹시-아세틸)-티오우레이아
38		1-[3-(3-(벤질옥시-페닐)-2-티오옥소-이미다졸리딘-1-일]-2-페녹시-에탄온
39		1-(3-벤질옥시-페닐)-3-(2,3-디하이드로-벤조푸란-2-카르보닐)-티우레이아
40		1-(3-벤질옥시-페닐)-3-(2,3-디하이드로-벤조[1,4]디옥신-2-카르보닐)-티오우레이아
41		1-(3-벤질옥시-페닐)-3-(크로만-2-카르보닐)-티오우레이아
42		1-(3-벤질옥시-페닐)-3-(퀴놀린-2-카르보닐)-티오우레이아

본 발명의 추가의 화합물들을 표 II에 개시한다.

표 II는 많은 화합물에 대한 분석 데이터를 포함한다. 보유 시간 (tR)은 3.00 분의 시간으로 30 내지 100 %의 B의 구배로 측정하는데, 이 때 완충액 A는 물 중의 0.1 % 트리플루오로아세트산이고, 완충액 B는 아세토니트릴 중의 0.1 % 트리플루오로아세트산이다. 분석용 페노메넥스 루나 (Phenomenex Luna) C8 컬럼을 2.5 ml/분의 유속으로 사용하였다. 모든 HPLC/MS 분석 데이터는 길슨(Gilson) 151UV/VIS 검출기를 사용하여 220 nm의 파장에서, 그런 다음 ThermoFinnigan Surveyor MSQ를 사용하여 관찰하였다.

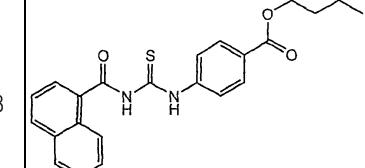
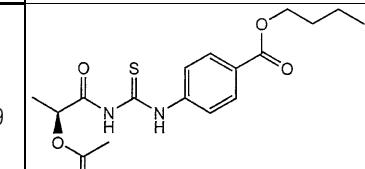
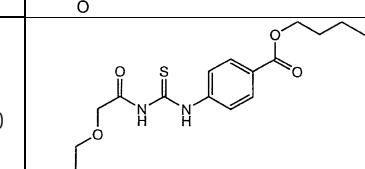
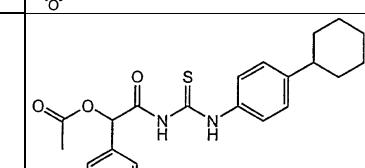
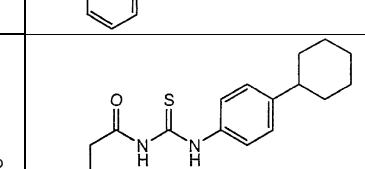
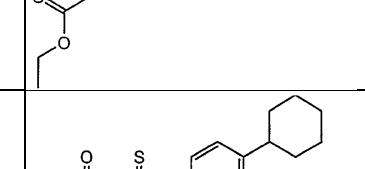
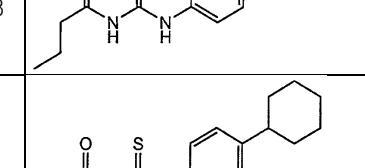
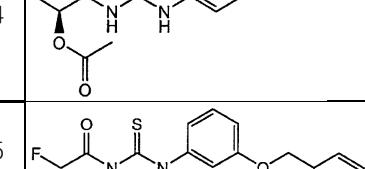
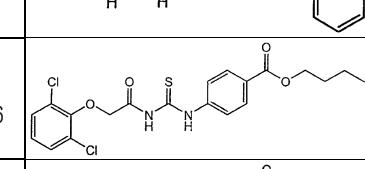
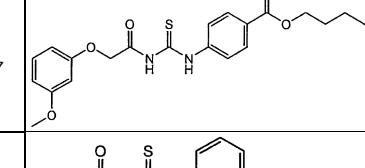
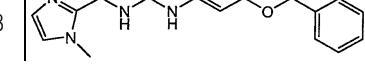
[표 2]

화합물 번호	구조	화합물 명칭	스펙트라 데이터
43		1-(푸란-2-카르보닐)-3-(4-벤조[d]티아졸-2-일-페닐)-티오우레이아	
44		1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-[5-(벤조[d]옥사졸-2-일)-2-메틸]페닐티오우레이아	

45		1-(3-(벤조[d]티아졸-2-일)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레아	
46		1-(4-(벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)-3-프로피오닐티오우레아	
47		1-(피리딘-3-카르보닐)-3-(4-벤조[d]티아졸-2-일-페닐)-티오우레아	
48		1-[3-(2-클로로페닐-5-메틸-이소옥사졸-4-일)-카르보닐]-3-(4-이소프로필페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.47 분 MS (APCI) <i>m/z</i> 414.1 [M+H] <sup>+</sup>
49		부틸 4-(3-(2-페녹시아세틸)티오우레이드)벤조에이트	HPLC(tR)=2.37 분 MS (APCI) <i>m/z</i> 387.1 [M+H] <sup>+</sup>
50		부틸 4-(3-아세틸티오우레이드)벤조에이트	HPLC(tR)=1.90 분 MS (APCI) <i>m/z</i> 295.2 [M+H] <sup>+</sup> <sup>1</sup> H NMR(300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) <i>δ</i> (ppm): 0.8 (t, 3H, J =), 1.47 (m, 2H), 1.75 (m, 2H), 2.22 (s, 3H), 4.32 (t, 2H), 7.82 (d, 2H), 8.08 (d, 2H), 8.74 (s, 1H), 12.55 (s, 1H).
51		부틸 4-(3-(2-(3-클로로페녹시)아세틸)티오우레이드)벤조에이트	HPLC(tR)=2.52 분 MS (APCI) <i>m/z</i> 421.1 [M+H] <sup>+</sup>
52		부틸 4-(3-(3-페녹시프로파노일)티오우레이드)벤조에이트	HPLC(tR)=2.39 분 MS (APCI) <i>m/z</i> 401.2 [M+H] <sup>+</sup>
53		부틸 4-(3-(2-(타프탈렌-3-일옥시)아세틸)티오우레이드)벤조에이트	HPLC(tR)=2.65 분 MS (APCI) <i>m/z</i> 437.2 [M+H] <sup>+</sup>
54		부틸 4-(3-(벤조푸란-2-일-카르보닐)티오우레이드)벤조에이트	HPLC(tR)=2.72 분 MS (APCI) <i>m/z</i> 397.1 [M+H] <sup>+</sup> <sup>1</sup> H NMR(300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) <i>δ</i> (ppm): 0.99 (t, 3H), 1.49 (m, 2H), 1.77 (m, 2H), 4.34 (t, 2H), 7.39 (t, 1H), 7.58 (m, 2H), 7.75 (d, 1H), 7.76 (s, 1H), 7.90 (d, 2H), 8.11 (d, 2H), 9.47 (s, 1H), 12.6 (s, 1H). MS
55		에틸 2-(4-(2-페녹시아세틸)티오우레이드)페닐)아세테이트	

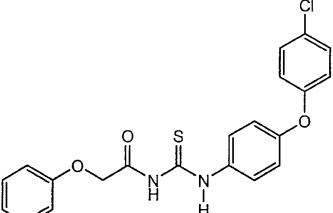
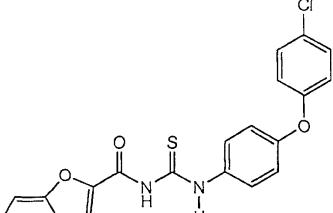
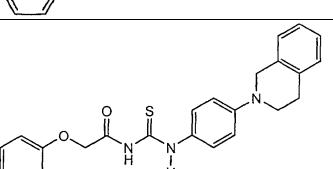
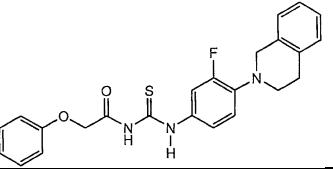
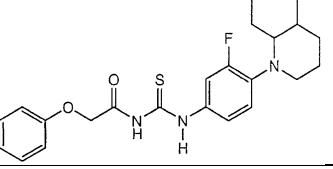
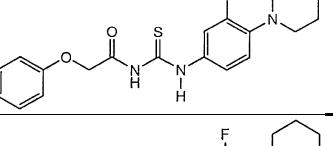
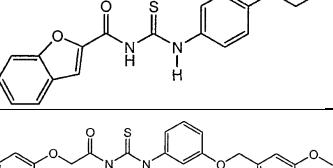
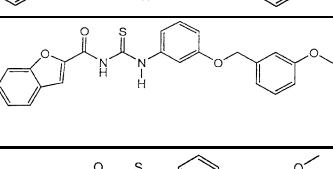
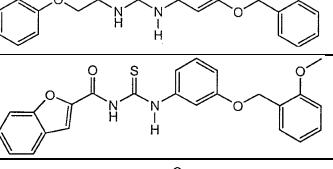
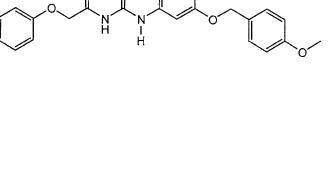
56		에틸 4-(3-(2-페녹시아세틸)티오우레이도)벤조에이트	
57		부틸 4-(3-(2-메톡시아세틸)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.08 분 MS (APCI) m/z 325.1 [M+H] <sup>+</sup>
58		부틸 4-(3-(2-(2,4-디클로로페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.83 분 MS (APCI) m/z 455.1 [M+H] <sup>+</sup>
59		부틸 4-(3-(2-(4-tert-부틸페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트	
60		부틸 4-(3-(2-(4-(벤질옥시)페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.73 분 MS (APCI) m/z 493.2 [M+H] <sup>+</sup>
61		부틸 4-(3-(2-메톡시페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.48 분 MS (APCI) m/z 417.2 [M+H] <sup>+</sup>
62		부틸 4-(3-(2-(o-톨릴옥시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.63 분 MS (APCI) m/z 401.2 [M+H] <sup>+</sup>
63		부틸 4-(3-(2-(2,4,6-트리클로로페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.98 분 MS (APCI) m/z 491.0 [M+H] <sup>+</sup>
64		부틸 4-(3-(3,4-디클로로페닐)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.86 분 MS (APCI) m/z 427.1 [M+H] <sup>+</sup>
65		1-(3,4-디클로로페닐-카르보닐)-3-(3-트리플루오로메틸페닐)티오우레이아	HPLC(tR)=2.51 분 MS (APCI) m/z 395.0 [M+H] <sup>+</sup>
66		1-(3,4-디클로로페닐-카르보닐)-3-(3-벤조옥시페닐)티오우레이아	HPLC(tR)=2.77 분 MS (APCI) m/z 433.1 [M+H] <sup>+</sup>
67		1-(3,4-디클로로페닐-카르보닐)-3-(3-페녹시페닐)티오우레이아	HPLC(tR)=2.78 분 MS (APCI) m/z 419.0 [M+H] <sup>+</sup>

68		1-(3,4-디플루오로페닐-카르보닐)-3-(3-(5-메틸푸란-2-일)-페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.30 분 MS (APCI) $m/z$ 413.1 [M+H] <sup>+</sup>
69		부틸 4-(3-(나프트-2-일)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.80 분 MS (APCI) $m/z$ 407.2 [M+H] <sup>+</sup> <sup>1</sup> H NMR(300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) $\delta$ (ppm): 0.99 (t, 3H), 1.49 (m, 2H), 1.77 (m, 2H), 4.34 (t, 2H), 7.65 (m, 2H), 7.91 (m, 4H), 7.99 (d, 2H), 8.11 (d, 2H), 8.43 (d, 1H), 9.27 (1H), 12.9 (s, 1H).
70		부틸 4-(3-(4-시아노페닐)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.26 분 MS (APCI) $m/z$ 382.2 [M+H] <sup>+</sup> <sup>1</sup> H NMR(300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) $\delta$ (ppm): 0.99 (t, 3H), 1.49 (m, 2H), 1.77 (m, 2H), 4.34 (t, 2H), 7.87 (d, 4H), 8.02 (d, 2H), 8.11 (d, 2H), 9.06 (s, 1H), 12.6 (s, 1H).
71		부틸 4-(3-(메틸아세테이트)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=1.91 분 MS (APCI) $m/z$ 353.1 [M+H] <sup>+</sup>
72		1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-페녹시)-페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.58 분 MS (APCI) $m/z$ 388.9 [M+H] <sup>+</sup>
73		부틸 4-(3-(2-(3,4-디클로로페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.67 분 MS (APCI) $m/z$ 457.1 [M+H] <sup>+</sup>
74		1-(4-부틸페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레아	HPLC(tR)=2.54 분 MS (APCI) $m/z$ 343.1 [M+H] <sup>+</sup>
75		(아미노-(3-(벤질옥시)페닐)메탄티오카바모일)메틸아세테이트	HPLC(tR)=1.85 분 MS (APCI) $m/z$ 359.1 [M+H] <sup>+</sup>
화합물번호	구조	화합물 명칭	스펙트라 데이터
76		1-(3-(메틸티오)프로파노일)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.09 분 MS (APCI) $m/z$ 361.1 [M+H] <sup>+</sup> <sup>1</sup> H NMR(300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) $\delta$ (ppm): 2.17 (s, 3H), 2.69 (t, 2H), 2.85 (t, 2H), 5.07 (s, 2H), 6.88 (dd, 1H), 7.14 (d, 1H), 7.22-7.48 (m, 6H), 7.53 (t, 1H), 8.91 (s, 1H), 12.6 (s, 1H).
77		1-(2-(2-클로로페녹시)아세틸)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.41 분 MS (APCI) $m/z$ 427.1 [M+H] <sup>+</sup> <sup>1</sup> H NMR(300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) $\delta$ (ppm): 4.66 (s, 2H), 5.09 (s, 2H), 6.89 (dd, 1H), 6.95 (dd, 1H), 7.06 (dt, 1H), 7.26-7.48 (m, 8H), 7.58 (t, 1H), 9.71 (s, 1H), 12.6 (s, 1H).

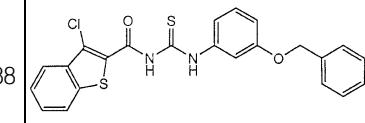
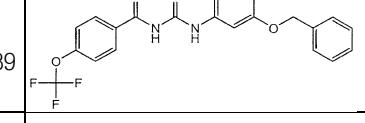
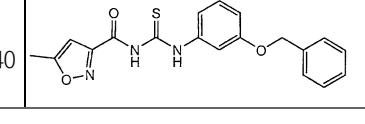
78		부틸 4-(3-(나프트-1-일)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.65 분 MS (APCI) m/z 407.2 [M+H] <sup>+</sup>
79		(S)-1-(아미노-N-p-(부틸아세테이트)메탄티오카바모일)에틸아세테이트	HPLC(tR)=2.05 분 MS (APCI) m/z 367.1 [M+H] <sup>+</sup>
80		부틸 4-(3-(2-(2-메톡시에톡시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.13 분 MS (APCI) m/z 369.2 [M+H] <sup>+</sup>
81		(아미노N-(4-시클로헥실페닐)메탄티오카바모일)(페닐)메틸아세테이트	HPLC(tR)=2.66 분 MS (APCI) m/z 411.1 [M+H] <sup>+</sup>
82		에틸 3-(아미노N-(4-시클로헥실페닐)메탄티오카바모일)프로파노에이트	HPLC(tR)=2.45 분 MS (APCI) m/z 363.2 [M+H] <sup>+</sup>
83		1-부틸-3-(4-시클로헥실페닐)티오우레이아	HPLC(tR)=2.67 분 MS (APCI) m/z 305.2 [M+H] <sup>+</sup>
84		(S)-1-(아미노N-(4-시클로헥실페닐)케탄티오카바모일)에틸 아세테이트	HPLC(tR)=2.36 분 MS (APCI) m/z 349.2 [M+H] <sup>+</sup>
85		1-(3-(벤질옥시)페닐)-3-(2-하يد록시시아세틸)티오우레이아	HPLC(tR)=1.68 분 MS (APCI) m/z 317.1 [M+H] <sup>+</sup>
86		부틸 4-(3-(2-(2,6-디클로로페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.86 분 MS (APCI) m/z 457.1 [M+H] <sup>+</sup>
87		부틸 4-(3-(2-(3-메톡시페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.37 분 MS (APCI) m/z 417.2 [M+H] <sup>+</sup>
88		1-[(1-메틸이미다졸-2-일)-카르보닐]-3-(3-벤조옥시-페닐)티오우레이아	HPLC(tR)=2.16 분 MS (APCI) m/z 367.1 [M+H] <sup>+</sup>

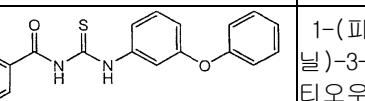
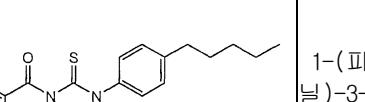
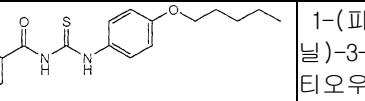
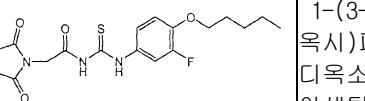
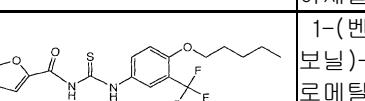
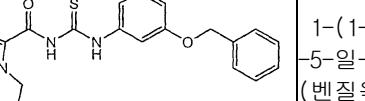
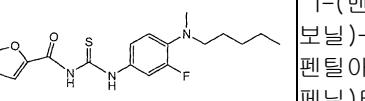
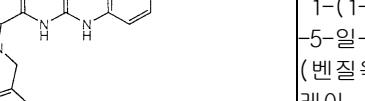
89		tert-부틸 2-(아미노N-(3(벤질옥시)페닐)메탄디오카바모일)피롤리돈-1-카르복실레이트	HPLC(tR)=2.27 분 MS (APCI) $m/z$ 456.2 [M+H] <sup>+</sup>
90			HPLC(tR)=2.32분 MS (APCI) $m/z$ 421.1 [M+H] <sup>+</sup>
91		부틸 4-(3-(피롤리딘-1-일)카르보닐)티오우레이도벤조에이트	HPLC(tR)=1.05 분 MS (APCI) $m/z$ 350.2 [M+H] <sup>+</sup>
92			HPLC(tR)=2.33 분 MS (APCI) $m/z$ 421.1 [M+H] <sup>+</sup>
93		부틸 4-(3-(1-메틸-벤조푸란-2-일)카르보닐)티오우레이도벤조에이트	HPLC(tR)=3.23 분 MS (APCI) $m/z$ 411.0 [M+H] <sup>+</sup>
94		1-(4-헥실패닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아	HPLC(tR)=3.02 분 MS (APCI) $m/z$ 371.2 [M+H] <sup>+</sup>
95		1-(4-(펜틸옥시)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아	HPLC(tR)=2.56분 MS (APCI) $m/z$ 373.2 [M+H] <sup>+</sup>
96		1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-펜틸옥시)-페닐)티오우레이아	HPLC(tR)=2.91분 MS (APCI) $m/z$ 357.2 [M+H] <sup>+</sup>
97		1-(4-펜틸페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아	HPLC(tR)=2.79분 MS (APCI) $m/z$ 357.2 [M+H] <sup>+</sup>
98		1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-펜틸)-페닐)티오우레이아	HPLC(tR)=3.17분 MS (APCI) $m/z$ 367.1 [M+H] <sup>+</sup>
99		1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-펜틸옥시)-페닐)티오우레이아	HPLC(tR)=2.71분 MS (APCI) $m/z$ 369.2 [M+H] <sup>+</sup>
100		1-(4-부록시페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아	HPLC(tR)=2.37분 MS (APCI) $m/z$ 359.2 [M+H] <sup>+</sup>
101		1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-페닐)-페닐)티오우레이아	HPLC(tR)=2.63분 MS (APCI) $m/z$ 373.1 [M+H] <sup>+</sup>
102		1-(2-페녹시아세틸)-3-(3-페닐)-페닐티오우레이아	HPLC(tR)=2.31분 MS (APCI) $m/z$ 363.1 [M+H] <sup>+</sup>
103		이소프로필 4-(3-(벤조푸란-2-일)카르보닐)티오우레이도벤조에이트	HPLC(tR)=2.55분 MS (APCI) $m/z$ 383.1 [M+H] <sup>+</sup>

104		1-(2-(페녹시아세틸)-3-94-플루오로-페닐)-페닐 티오우레아	HPLC(tR)=2.35분 MS (APCI) <i>m/z</i> 381.1 [M+H] <sup>+</sup>
105		1-(3-벤질페닐)-3-(2-페 녹시아세틸)티오우레아	HPLC(tR)=2.32분 MS (APCI) <i>m/z</i> 377.2 [M+H] <sup>+</sup>
106		1-((벤조푸란-2-일-카르 보닐)-3-(3-벤질)-페닐) 티오우레아	HPLC(tR)=2.62분 MS (APCI) <i>m/z</i> 387.0 [M+H] <sup>+</sup>
107		1-((벤조푸란-2-일-카르 보닐)-3-(4-벤질)-페닐) 티오우레아	HPLC(tR)=2.67분 MS (APCI) <i>m/z</i> 387.0 [M+H] <sup>+</sup>
108		1-(4-(p-톨릴옥시)페 닐)-3-(2-페녹시아세틸) 티오우레아	HPLC(tR)=2.46분 MS (APCI) <i>m/z</i> 393.1 [M+H] <sup>+</sup>
109		이소부틸 4-(3-(벤조푸 란-2-일)카르보닐)티오우 레이도)벤조에이트	HPLC(tR)=2.79분 MS (APCI) <i>m/z</i> 397.2 [M+H] <sup>+</sup>
110		이소부틸 4-(3-(2-페녹 시아세틸)티오우레이도) 벤조에이트	HPLC(tR)=2.39분 MS (APCI) <i>m/z</i> 387.1 [M+H] <sup>+</sup>
111		1-(2-(페닐메탄온)페 닐)-3-(2-페녹시아세틸) 티오우레아	HPLC(tR)=2.09분 MS (APCI) <i>m/z</i> 391.1 [M+H] <sup>+</sup>
112		1-(3-(페닐카바모일)페 닐)-3-(2-페녹시아세틸) 티오우레아	HPLC(tR)=1.91분 MS (APCI) <i>m/z</i> 406.1 [M+H] <sup>+</sup>
113		1-(3-(2-메틸피리미딘- 4-일)페닐)-3-(2-페녹시 아세틸)티오우레아	HPLC(tR)=1.53분 MS (APCI) <i>m/z</i> 379.1 [M+H] <sup>+</sup>

114		1-(4-(4-클로로페녹시)-페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레아	HPLC(tR)=2.51분 MS (APCI) <i>m/z</i> 413.1 [M+H] <sup>+</sup>
115		1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-클로로페녹시)-페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.86분 MS (APCI) <i>m/z</i> 423.1 [M+H] <sup>+</sup>
116		1-(4-(3,4-디하드로이소퀴놀린-2(1H)-일)-페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레아	HPLC(tR)=2.07분 MS (APCI) <i>m/z</i> 418.1 [M+H] <sup>+</sup>
117		1-(3-플루오로-4-(옥타히드로퀴놀린-1(2H)-일)-페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레아	HPLC(tR)=2.49분 MS (APCI) <i>m/z</i> 436.2 [M+H] <sup>+</sup>
118		1-(3-플루오로-4-(옥타히드로퀴놀린-1(2H)-일)-페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레아	HPLC(tR)=2.72분 MS (APCI) <i>m/z</i> 442.2 [M+H] <sup>+</sup>
119		1-(3-플루오로-4-(피페리딘-1-일)-페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레아	HPLC(tR)=1.79분 MS (APCI) <i>m/z</i> 389.0 [M+H] <sup>+</sup>
120		1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-o-(3-플루오로-4-(피페리딘-1-일)-페닐)-페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.05분 MS (APCI) <i>m/z</i> 398.1 [M+H] <sup>+</sup>
121		1-(3-(3-메톡시벤질옥시)-페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레아	HPLC(tR)=2.27분 MS (APCI) <i>m/z</i> 423.2 [M+H] <sup>+</sup>
122		1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(3-메톡시벤질옥시))페닐)-페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.54분 MS (APCI) <i>m/z</i> 433.2 [M+H] <sup>+</sup>
123		1-(3-(2-메톡시벤질옥시)-페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레아	HPLC(tR)=2.30분 MS (APCI) <i>m/z</i> 423.1 [M+H] <sup>+</sup>
124		1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(2-메톡시벤질옥시))페닐)-티오우레아	HPLC(tR)=2.60분 MS (APCI) <i>m/z</i> 433.1 [M+H] <sup>+</sup>
125		1-(3-(4-메톡시벤질옥시)-페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레아	HPLC(tR)=2.25분 MS (APCI) <i>m/z</i> 423.1 [M+H] <sup>+</sup>

126		1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(시클로헥실메톡시)페닐)-티오우레아	
127		1-(3-(시클로헥실메톡시)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레아	HPLC(tR)=2.92분 MS (APCI) $m/z$ 399.2 [M+H] <sup>+</sup> <sup>1</sup> H NMR(300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ (ppm): 12.15 (s, 1H), 9.40 (s, 1H), 7.41 (m, 4H), 7.17 (m, 2H), 7.10 (d, 2H), 6.83 (d, 1H), 4.63 (s, 2H), 3.77 (t, 2H), 1.76 (m, 5H), 1.27 (m, 4H) 1.09 (d 2H).
128		1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-(5,6-디하이드로피리딘-1-(2H)-일))페닐)-티오우레아	HPLC(tR)=1.53분 MS (APCI) $m/z$ 378.2 [M+H] <sup>+</sup>
129		1-((5-메톡시-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-벤질옥시-페닐)-티오우레아	HPLC(tR)=2.6분 MS (APCI) $m/z$ 433.1 [M+H] <sup>+</sup>
130		부틸 4-(3-(5-클로로-벤조푸란-2-일)카르보닐)티오우레이도-벤조에이트	HPLC(tR)=3.06분 MS (APCI) $m/z$ 431.1 [M+H] <sup>+</sup>
131		1-(7-메톡시-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-메톡시벤질옥시)페닐)-페닐)-티오우레아	HPLC(tR)=2.56분 MS (APCI) $m/z$ 433.1 [M+H] <sup>+</sup>
132		1-(2,3,4-테트라하이드로나프탈렌-2-일-카르보닐)-3-(3-(3-메톡시벤질옥시))페닐)-페닐)-티오우레아	HPLC(tR)=2.60분 MS (APCI) $m/z$ 417.2 [M+H] <sup>+</sup> <sup>1</sup> H NMR(300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ (ppm): 1.05 (m, 1H), 2.02 (m, 1H), 2.42 (m, 1H), 2.76- 2.93 (m, 4H), 4.86 (s, 2H), 6.78 (m, 1H), 6.87-6.99 (m, SH), 7.04-7.24 (m, 6H), 7.33 (s, 1H), 8.34 (s, 1H), 12.23 (s, 1H).
133		1-(2-(4-(트리플루오로메톡시)페녹시)아세틸)-3-(3-(벤질옥시))페닐)-티오우레아	HPLC(tR)=2.45분 MS (APCI) $m/z$ 477.1 [M+H] <sup>+</sup> <sup>1</sup> H NMR(300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ (ppm): 4.43 (s, 2H), 4.88 (s, 2H), 6.72 (m, 1H), 6.81 (m, 2H), 6.87-7.27 (m, 9H), 7.34 (s, 1H), 9.14 (s, 1H), 11.91 (s, 1H).
134		1-(3-(벤질옥시)페닐)-30(2-(피리дин-3-일옥시)아세틸)페닐)-티오우레아	HPLC(tR)=1.23분 MS (APCI) $m/z$ 378.2 [M+H] <sup>+</sup>
135		1-(4-옥소-4H-크로멘-2-일-카르보닐)-3-(3-메톡시벤질옥시)페닐)-페닐)-티오우레아	HPLC(tR)=1.94분 MS (APCI) $m/z$ 430.5 [M+H] <sup>+</sup>
136		1-(3-(벤질옥시)페닐)-3-(2-(피리딘-2-일옥시)아세틸)페닐)-티오우레아	HPLC(tR)=1.58분 MS (APCI) $m/z$ 378.2 [M+H] <sup>+</sup>
137		1-(피리딘-2-일-카르보닐)-3-(3-메톡시벤질옥시)페닐)-페닐)-티오우레아	HPLC(tR)=2.28분 MS (APCI) $m/z$ 363.1 [M+H] <sup>+</sup>

138		1-(3-클로로-벤조[b]티오우레아)-3-(3-에톡시벤질옥시)페닐)-페닐)티오우레아	HPLC(tR)=3.21분 MS (APCI) <i>m/z</i> 453.0 [M+H] <sup>+</sup>
139		1-(4-트리플루오로메톡시-페닐)-3-(3-에톡시벤질옥시)페닐)-페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.60분 MS (APCI) <i>m/z</i> 447.1 [M+H] <sup>+</sup>
140		1-(5-메틸이소옥사졸-3-일-카르보닐)-3-(3-에톡시벤질옥시)페닐)-페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.25분 MS (APCI) <i>m/z</i> 368.1 [M+H] <sup>+</sup>

화합물 번호	구조	화합물 명칭	스펙트라 데이터
297		1-(피라진-2-일-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.12분 MS (APCI) <i>m/z</i> 379.1 [M+H] <sup>+</sup>
298		1-(피라진-2-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.59분 MS (APCI) <i>m/z</i> 329.1 [M+H] <sup>+</sup> <sup>1</sup> H NMR (300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ (ppm): 0.92 (t, 3H), 1.35 (m, 4H), 1.6134 (m, 2H), 2.64 (t, 2H), 7.26 (d, 2H), 7.64 (d, 2H), 8.68 (dd, 1H), 8.91 (d, 1H), 9.49 (d, 1H), 10.59 (s, 1H), 12.20 (s, 1H)
299		1-(피라진-2-일-카르보닐)-3-(4-펜톡시-페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.38분 MS (APCI) <i>m/z</i> 345.1 [M+H] <sup>+</sup>
300		1-(3-플루오로-4-(펜토록시)페닐)-3-(2-(1,3-디옥소이소인돌린-2-일)아세틸)티오우레아	HPLC(tR)=2.22분 MS (APCI) <i>m/z</i> 444.1 [M+H] <sup>+</sup>
301		1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-트리플루오로메틸-4-펜톡시-페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.97분 MS (APCI) <i>m/z</i> 451.1 [M+H] <sup>+</sup>
302		1-(1-벤질-1H-테트라졸-5-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)-페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.29분 MS (APCI) <i>m/z</i> 445.1 [M+H] <sup>+</sup>
303		1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-(N-메틸-N-펜틸아미노)-3-플루오로페닐)티오우레아	HPLC(tR)=2.30분 MS (APCI) <i>m/z</i> 414.1 [M+H] <sup>+</sup>
304		1-(1-벤질-1H-테트라졸-5-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)-페닐)티오우레아	<sup>1</sup> H NMR (300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ (ppm): 11.87 (s, 1H), 9.79 (s, 1H), 7.53 (d, 2H), 7.46-7.38 (m, SH), 6.93 (d, 2H), 5.87 (s, 2H), 3.97 (t, 2H), 1.79 (m, 2H), 1.47-1.34 (m, 4H), 0.93 (t, 3H). MS (APCI) <i>m/z</i> 425 [M+H] <sup>+</sup> .

305		1-(6-트리플루오로메틸-피리드-3-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.64분 MS (APCI) m/z 396.1 [M+H] <sup>+</sup>
306		1-(6-트리플루오로메틸-피리드-3-일-카르보닐)-3-(4-펜톡시-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.46분 MS (APCI) m/z 412.1 [M+H] <sup>+</sup>
307		1-(3-트리플루오로메틸-페닐-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.47분 MS (APCI) m/z 417.1 [M+H] <sup>+</sup>
308		1-(3-트리플루오로메틸-페닐-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.99분 MS (APCI) m/z 395.0 [M+H] <sup>+</sup>
309		1-(3-트리플루오로메틸-페닐-카르보닐)-3-(4-펜톡시-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.76분 MS (APCI) m/z 411.1 [M+H] <sup>+</sup>
310		1-(3-트리플루오로메톡시-페닐-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=3.07분 MS (APCI) m/z 411.1 [M+H] <sup>+</sup>
311		1-(3-트리플루오로메톡시-페닐-카르보닐)-3-(4-펜톡시-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.84분 MS (APCI) m/z 427.0 [M+H] <sup>+</sup>
312		1-(2-클로로-5-트리플루오로메톡시-페닐-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.95분 MS (APCI) m/z 429.1 [M+H] <sup>+</sup>
313		1-(3-디플루오로메틸-페닐-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.32분 MS (APCI) m/z 415.1 [M+H] <sup>+</sup>
314		1-(3-디플루오로메틸-페닐-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.76분 MS (APCI) m/z 393.3 [M+H] <sup>+</sup>
315		1-(5-(트리플루오로메틸)-2-페닐옥사졸-4-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.97분 MS (APCI) m/z 498.1 [M+H] <sup>+</sup>
316		1-(5-(트리플루오로메틸)-2-페닐옥사졸-4-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.98분 MS (APCI) m/z 484.0 [M+H] <sup>+</sup>
317		1-(5-(2-클로로-5-트리플루오로메틸페닐)-2-일-카르보닐)-3-(4-(펜톡시)-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=3.39분 MS (APCI) m/z 511.1 [M+H] <sup>+</sup>

318		1-(3-트리플루오로메틸-4-메톡시-페닐-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.48분 MS (APCI) m/z 447.1 [M+H] <sup>+</sup>	
319		1-(3-트리플루오로메틸-4-클로로-페닐-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=3.20분 MS (APCI) m/z 429.1 [M+H] <sup>+</sup>	
320		1-(3-트리플루오로메틸-4-클로로-페닐-카르보닐)-3-(4-펜토시-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.95분 MS (APCI) m/z 445.1 [M+H] <sup>+</sup>	
321		1-(3-트리플루오로메틸-4-메틸-페닐-카르보닐)-3-(3-벤질옥시-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.63분 MS (APCI) m/z 445.1 [M+H] <sup>+</sup>	
322		1-(3-트리플루오로메틸-4-메틸-페닐-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.65분 MS (APCI) m/z 431.0 [M+H] <sup>+</sup>	
323		1-(3-트리플루오로메틸-4-메틸-페닐-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아	
324		1-((5-아세트아미도벤조푸란-2-일)카르보닐)-3-(3-페녹시페닐)티오우레아 HPLC(tR)=2.03분 MS (APCI) m/z 446.1 [M+H] <sup>+</sup>	
325		1-아세틸-3-(3-페녹시페닐)티오우레아	
326		1-아세틸-3-(4-펜틸옥시)티오우레아	
327		1-아세틸-3-(4-펜틸페닐)티오우레아 <sup>1</sup> H NMR (300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ (ppm): 12.28 (s, 1H), 9.24 (s, 1H), 7.53 (d, 2H), 7.24 (d, 2H), 2.63 (t, 2H), 1.68-1.58 (m, 2H), 1.39-1.30 (m, 4H), 0.91 (t, 3H). MS (APCI) m/z 265 [M+H] <sup>+</sup>	
화합물번호	구조	화합물 명칭	스펙트라 데이터
328		1-(디메틸아미노-아세틸)-3-(3-페녹시페닐)티오우레아	

329		1-(디메틸아미노-아세틸)-3-(3-벤질옥시페닐)티오우레아	
330		1-(3,5-디메틸이소옥사졸-4-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아	
331		1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-((2,3,4,5,6-펜타-플루오로페녹시)-페닐)티오우레아	
332		1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(9-메틸-9H-플루오렌-7-일)티오우레아	
333		펜틸 2-페닐-4-(3-(벤조푸란-2-일)티오우레이도)벤조에이트	<sup>1</sup> H NMR (300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ (ppm): 12.57 (s, 1H), 9.47 (s, 1H), 7.92 (s, 2H), 7.75-7.73 (m, 3H), 7.59-7.54 (m, 2H), 7.43-7.33 (m, 6H), 4.04 (t, 2H), 1.36 (m, 2H), 1.20 (m, 2H), 1.07 (m, 2H), 0.84 (t, 3H). MS (APCI) m/z 487 [M+H] <sup>+</sup> .
334		1-(3-피리드-3-일-카르보닐)-3-(3-벤질옥시-페닐)티오우레아	
335		1-(3-피리드-3-일-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아	
336		1-(3-피리드-3-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아	
337		1-(3-피리드-3-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아	
338		1-(4-페닐부타노일)-3-(3-페녹시페닐)티오우레아	
339		1-(4-페닐부타노일)-3-(3-벤질옥시페닐)티오우레아	
340		1-(2-모르폴리노아세틸)-3-(3-페녹시페닐)티오우레아	<sup>1</sup> H NMR (300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ (ppm): 12.16 (s, 1H), 10.07 (s, 1H), 7.47-7.45 (m, 1H), 7.34-7.31 (m, 4H), 7.13 (t, 1H), 7.08-7.05 (m, 2H), 6.91 dt, 1H, 3.78 (t, 4H), 3.12 (s, 2H), 2.59 (t, 4H). MS (APCI) m/z 372 [M+H] <sup>+</sup> .
341		1-(2-모르풀리노아세틸)-3-(4-펜틸옥시)페닐)티오우레아	
342		1-(2-모르풀리노아세틸)-3-(4-펜틸)페닐)티오우레아	

343		1-(4-(펜틸옥시)페닐)-3-(2-피페리딘-1-일)아세틸티오우레아	<sup>1</sup> H NMR (300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ (ppm): 12.00 (s, 1H), 10.26 (s, 1H), 7.51 (d, 2H), 6.92 (d, 2H), 3.97 (t, 2H), 3.10 (s, 2H), 2.56-2.53 (m, 4H), 1.84-1.75 (m, 2H), 1.73-1.65 (m, 4H), 1.52-1.33 (m, 6H), 0.95 (t, 3H). MS (APCI) m/z 364 [M+H] <sup>+</sup> .
344		1-(N-메틸-N-페닐아미노-아세틸)-3-(3-벤질옥시페닐)티오우레아	
345		1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(6-펜톡시-피리드-3-일)티오우레아	<sup>1</sup> H NMR (300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ (ppm): 12.00 (s, 1H), 11.58 (s, 1H), 8.21 (m, 2H), 7.86 (m, 2H), 7.73 (d, J=8.5Hz, 1H), 7.54 (t, J=6.0Hz, 1H), 7.38 (t, J=6.0Hz, 1H), 6.82 (d, J=8.8Hz, 1H), 4.22 (t, J=6.6Hz, 2H), 1.69 (m, 2H), 1.33 (m, 4H), 0.87 (t, J=6.9Hz, 3H) ppm. MS (APCI) m/z 384 (M+)
346		1-(3-피리드-3-일-카르보닐)-3-(3-벤질옥시-페닐)티오우레아 염산염	
347		1-(3-피리드-3-일-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아 염산염	
348		1-(3-피리드-3-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아 염산염	
349		1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(트리플루오로메틸티오-페닐)티오우레아	
350		1-(3-(피페리딘-1-일)프로파노일)-3-(4-펜틸페닐)티오우레아	
351		1-(3-(피페리딘-1-일)프로파노일)-3-(4-(펜틸옥시)페닐)티오우레아	
352		1-(3-(피페리딘-1-일)프로파노일)-3-(3-페녹시페닐)티오우레아	
353		1-(3-모르폴리노프로파노일)-3-(4-(펜틸옥시)페닐)티오우레아	
354		1-(1-메틸피페리딘-3-일-카르보닐)-3-(4-(펜틸옥시)페닐)티오우레아	<sup>1</sup> H NMR (300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ (ppm): 12.24 (s, 1H), 8.85 (s, 1H), 7.45 (d, 2H), 7.13 (d, 2H), 2.87 (m, 2H), 2.53 (t, 2H), 2.23 (s, 3H), 2.18 (m, 1H), 1.85 (m, 6H), 1.52 (m, 2H), 1.25 (m, 4H), 0.94 (t, 3H). MS (APCI) m/z 348 [M+H] <sup>+</sup> .
355		1-(1-메틸피페리딘-3-일-카르보닐)-3-(4-9펜틸옥시)페닐)티오우레아	
356		1-(2-(2-메틸피페리딘-1-일)아세틸)-3-(4-(펜틸옥시)페닐)티오우레아	<sup>1</sup> H NMR (300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ (ppm): 12.03 (s, 1H), 10.38 (s, 1H), 6.92 (m, 2H), 3.98 (t, 2H), 3.39 (d, 1H), 2.98 (d, 1H), 2.85 (m, 1H), 2.47 (m, 2H), 1.75 (m, 6H), 1.40 (m, 6H), 1.12 (d, 3H), 0.94 (t, 3H). MS (APCI) m/z 378 [M+H] <sup>+</sup> .

357		1-(2-옥소-4-페닐-피페리딘-1-일카르보닐)-3-(3-벤질옥시-페닐)티오우레아	<sup>1</sup> H NMR (300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ (ppm): 12.50 (s, 1H), 7.45 (m, 12H), 7.14 (d, 1H), 6.86 NH (dd, 1H), 5.07 (s, 2H), 4.78 (dd, 1H), 4.17 (dd, 1H), 3.59 (m, 1H), 3.12 (dd, 1H), 2.97 (dd, 1H). MS (APCI) m/z 402 [M] <sup>+</sup> .
358		1-(5-트리플루오로메톡시-벤조푸란-2-일카르보닐)-3-(벤질옥시-페닐)티오우레아	<sup>1</sup> H NMR (300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ (ppm): 12.30 (1H, s), 9.45 (1H, s), 7.73 (1H, d), 7.61 (3H, m), 7.40 (7H, m), 7.22 (1H, m), 6.92 (1H, m), 5.10 (2H, s). MS (APCI) m/z 486 [M] <sup>+</sup> .

### 실시예 5. HCV 복제를 억제하는 조성물의 확인을 위한 분석

본원에서 청구하는 화합물들을 HCV 레플리콘 구성물이 통합되는 배양된 세포에서 C형 간염 레플리콘의 바이러스 복제를 억제하는 능력에 대하여 시험하였다. HCV 레플리콘 시스템은 바르텐슬레이거 등에 의해 설명되었다 (Bartenschlager, et al., Science, 285, pp.110-113). 레플리콘 시스템은 생체내 항-HCV 활성을 예전해주며, 사람에게서 활성을 화합물들은 레플리콘 분석에서 한결같이 활성이 있음을 증명한다.

이 분석에서 HCV 레플리콘을 함유하고 있는 세포를 상이한 농도의 시험 화합물로 처리하여 시험 화합물이 HCV 레플리콘의 복제를 억제하는 능력을 확실하게 하였다. 포지티브 대조표준으로서 HCV 레플리콘-함유 세포를 공지된 HCV 복제의 억제제인 인터페론 알파를 상이한 농도로 사용하여 처리하였다. 레플리콘 분석 시스템은 숙주 세포에서 레플리콘 유전자 생성물의 전사를 검출하기 위하여 레플리콘 자체의 성분으로서 네오마이신 포스포트란스페라제 (NTP)를 포함한다. HCV 레플리콘이 활발하게 복제되고 있는 세포는 높은 수준의 NTP를 가지고 있으며; NTP의 수준은 HCV 감염에 비례한다. HCV 레플리콘이 복제되고 있지 않은 세포는 또한 낮은 수준의 NTP를 가지므로 네오마이신으로 처리했을 때 살아남지 못한다. 각 샘플의 NTP 수준을 집중 ELISA에 의하여 측정한다. 이 분석의 개략적인 관점은 도 1에 도시되어 있다.

레플리콘이 통합되어 있는 배양된 세포에서 C형 간염 레플리콘의 바이러스 복제를 억제하는 능력에 대해 화합물을 시험하는 프로토콜은 다음과 같다.

#### 5A. HCV 레플리콘 및 레플리콘 발현

HCV 계놈은 3000개의 아미노산으로 된 폴리단백질을 코드화하는 단일 ORF를 구성한다. ORF는 내부 리보솜 유입 부위 (IRES)로서 작용하는 미번역 영역이 5' 쪽에 있고 3' 쪽에는 바이러스 복제에 필요한 보존도가 높은 서열 (3'-NTR)이 있다. 바이러스 감염에 필요한 구조 단백질은 ORF의 5' 단부 가까이에 위치해 있다. NS2에서 NS5B로 표시되는 비-구조 단백질은 ORF의 나머지 부분을 포함한다.

HCV 레플리콘은 5'-3', HCV-IRES, 네오마이신 포스포트란스페라제 (neo) 유전자, HCV 바이러스 서열 NS3 내지 NS5B의 번역을 지시하는 엔캐팔로미오카르디티스 바이러스의 IRES, 및 3'-NTR을 함유한다. HCV 레플리콘의 서열은 GenBank에 기탁되어 있다 (승인 번호 AJ242652).

레플리콘은 일렉트로포레이션과 같은 표준 방법을 사용하여 Huh-7 세포에 형질전환된다.

#### 5B. 세포 유지

세포 유지를 위한 장비 및 물질로는, 그것들에 국한되는 것은 아니지만, Huh-7 HCV 레플리콘-함유 세포, 유지 배지 (10 % FBS, L-글루타민, 비-필수 아미노산, 페니실린 (100 유니트/ml), 스트렙토마이신 (100 µg/ml), 및 500 µg/ml의 제네티신 G418이 첨가되어 있는 DMEM (둘베코 변형 이글 배지)), 스크리닝 배지 (10 % FBS, L-글루타민, 비-필수 아미노산, 페니실린 (100 유니트/ml), 및 스트렙토마이신 (100 µg/ml)이 첨가되어 있는 DMEM), 96 웰 조직 배양 플레이트 (평평한 바닥), 96 웰 플레이트 (약물 희석용 U자형 바닥), 포지티브 대조표준용 인터페론 알파, 고정 시약 (예컨대 메탄올:아세톤), 일차 항체 (토끼 항-NPTII), 이차 항체: Eu-N1 1, 및 증강 용액을 포함한다.

HCV 레플리콘-함유 세포는 그것의 밀도가 적당할 때 바이러스 RNA 레플리콘 복제의 높은 수준을 지지한다. 과잉 집밀도는 바이러스 RNA 복제의 감소를 초래할 것이다. 그러므로 세포는 500  $\mu\text{g}/\text{ml}$ 의 G418의 존재하에 로그 단계에서 성장이 유지되어야 한다. 일반적으로 세포는 1:4 내지 6배 희석률로 1주일에 2회 계대되어야 한다. 세포 유지는 다음과 같이 수행한다:

HCV 레플리콘-함유 세포를 현미경하에서 조사하여 세포가 잘 자라고 있는지 확인한다. 세포를 PBS로 일단 세정하고 2 ml의 트립신을 첨가한다. 세포/트립신 혼합물을 37 °C에서 CO<sub>2</sub> 인큐베이터에서 3 내지 5분 동안 인큐베이션한다. 인큐베이션 후에 10 ml의 완전 배지를 첨가하여 트립신화 반응을 중지시킨다. 세포를 부드럽게 분 다음 15 ml 퓨브에 넣고 1200 rpm에서 4분 동안 회전시킨다. 트립신/배지 용액을 제거한다. 배지 (5 ml)를 첨가하고 세포를 조심스럽게 혼합한다. 그런 다음 세포를 계수한다.

다음 단계로 세포를 96-웰 플레이트에 6000 내지 7500 세포/100  $\mu\text{l}$ /웰의 밀도 ( $6-7.5 \times 10^5$  세포/10 ml/플레이트)로 시팅한다. 그 플레이트를 37 °C에서 5 % CO<sub>2</sub> 인큐베이터에서 인큐베이션한다.

#### API-0002

세포를 시딩 후 대략 24시간 후에, 그리고 약물을 첨가하기 전에 현미경으로 조사한다. 만약 계수와 희석이 정확하게 수행되었다면 세포는 60 내지 70 % 집밀도를 나타내고 거의 모든 세포가 웰 전체에 부착되고 골고루 퍼져있어야 한다.

#### 5C. 시험 화합물을 이용한 HCV-레플리콘 함유 세포의 처리

HCV 레플리콘-함유 세포를 PBS로 일단 세정한다; 2 ml의 트립신을 첨가한다. 세포를 37 °C에서 5 % CO<sub>2</sub> 인큐베이터에서 3 내지 5분 동안 인큐베이션한다. 10 ml의 완전 배지를 첨가하여 반응을 중지시킨다. 세포를 부드럽게 분 후 15 ml 퓨브에 넣고 1200 rpm에서 4분 동안 회전시킨다. 트립신/배지 용액을 제거한 다음 BRL 카탈로그 #12430-054로부터의 배지 (500 ml DMEM (고농도의 글루코스)) 5 ml; 50 ml의 10 % PBS, 5 % 제네티신 G418 (50 mg/ml, BRL 10131-035), 5 ml의 MEM 비필수 아미노산 (100× BRL #11140-050) 및 5 ml의 pen-strep (BRL #15140-148)을 첨가한다. 세포와 배지를 조심스럽게 혼합한다.

세포를 스크리닝 배지 (500 ml의 DMED (BRL #21063-029), 50 ml의 PBS (BRL #10082-147) 및 5 ml의 MEM 비필수 아미노산 (BRL #11140-050))를 사용하여 96-웰 플레이트에 6000 내지 7500 세포/100  $\mu\text{l}$ /웰의 밀도 ( $6-7.5 \times 10^5$  세포/10 ml/플레이트)로 시팅한다. 그 플레이트를 37 °C에서 5 % CO<sub>2</sub> 인큐베이터에서 인큐베이션한다.

#### 5D. 분석

다음날 아침 약물 (시험 화합물 또는 인터페론 알파)을 96 웰 U자형 바닥 플레이트에 배지 또는 DMSO/배지를 사용하여 스크리닝을 위해 선택한 최종 농도에 따라 희석한다. 보통 각각의 시험 화합물의 6 가지 농도에 대해 10  $\mu\text{l}$  내지 0.03  $\mu\text{l}$  범위가 적용된다. 100  $\mu\text{l}$ 의 시험 화합물 희석액을 HCV 레플리콘 세포를 함유하고 있는 96 웰 플레이트의 웰에 놓는다. 약물이 없는 배지를 일부 웰에 네가티브 대조표준으로서 첨가한다. DMSO는 세포 성장에 영향을 미치는 것으로 알려져 있다. 그러므로 DMSO중에 희석된 약물을 사용한다면 네가티브 대조표준 (배지만 있음)과 포지티브 대조표준 (인터페론 알파)을 포함한 모든 웰은 단일한 용량 스크리닝에 대해 동일한 농도의 DMSO를 함유하여야 한다. 플레이트를 37 °C에서 5 % CO<sub>2</sub> 인큐베이터에서 인큐베이션한다.

4일 째에 NTP II 분석을 정량화한다. 배지를 플레이트로부터 따라 버리고 플레이트를 일단 200  $\mu\text{l}$ 의 PBS로 세척한다. 그런 다음 PBS를 따라 버리고 플레이트를 종이 수건으로 가볍게 두드려서 남아있는 모든 PBS를 제거한다. 세포를 그 자리에서 100  $\mu\text{l}$ /웰의 사전-냉각된 (-20 °C) 메탄올:아세톤(1:1)으로 고정시킨 다음 플레이트를 -20 °C에서 30분 동안 놓아둔다

고정 용액을 플레이트로부터 따라 버린 후 플레이트를 완전히 공기-건조시킨다 (대략 1시간 소요). 건조된 세포층의 외관을 기록하고 독성 웰 중의 세포의 밀도를 육안으로 기록한다. 또는 달리 세포의 생존 능력은 아래에서 설명되는 MTS 분석을 사용하여 분석할 수 있다.

웰을 200  $\mu\text{l}$ 의 차단 용액 (10 % PBS; PBS 중의 3 % NGS)으로 30분 동안 실온에서 차단한다. 차단 용액을 제거하고 차단 용액중에 1:1000으로 희석된 100  $\mu\text{l}$ 의 토끼 항-NPTII를 각 웰에 첨가한다. 그런 다음 플레이트를 45 내지 60분 동안 실온에서 인큐베이션한다. 인큐베이션한 후 웰을 PBS-0.05 %의 Tween-20 ○ 용액으로 6회 세척한다. 차단 용액 중에 1:15,000으로 희석된 100  $\mu\text{l}$ 의 유로피움 (EU)-포합된 염소 항-토끼 항체를 각 웰에 첨가하고 그것을 실온에서 30 내지 45분 동안 인큐베이션한다. 플레이트를 다시 체척하고 100  $\mu\text{l}$ 의 증강 용액 (Perkin Elmer #4001-0010)을 각 웰에 첨가한다. 각 플레이트를 플레이트 진동기에서 3분 동안 진동시킨다 (대략 30 rpm). 각 웰로부터 95  $\mu\text{l}$ 씩을 블랙 플레이트에 옮기고; EU 신호를 Perkin-Elmer VICTOR 플레이트 판독기 (EU-Lance)로 정량한다.

#### 시험 결과:

화합물 1 내지 42를 상기 분석에서 시험하였는데, 30  $\mu\text{m}$  이하의 EC<sub>50</sub> 값으로 HCV 레플리콘의 복제를 억제하는 것으로 나타났다. 식 I의 선택된 화합물의 생물학적 활성을 하기 표 III에 나타낸다. 표 I의 화합물도 이 분석법으로 시험하였고, 그 결과 6  $\mu\text{m}$  이하의 EC<sub>50</sub> 값을 나타내는 것으로 밝혀졌다.

[표 3]

화합물 번호	Huh9-13 세포에서 바이러스 RNA 레플리콘 복제의 억제를 위한 EC <sub>50</sub> ( $\mu\text{m}$ )
4	4.3
7	3.4
24	12.1
36	2.3

#### 실시예 6.

##### 세포독성 분석

레플리콘 복제의 감소를 확실하게 하는 것은 비특이적 독성 분석이 화합물 세포독성을 정량하기 위해 사용되기 보다는 오히려 HCV 레플리콘에 대한 화합물 활성을 때문이다.

##### 실시예 6A. 세포독성에 대한 세포 단백질 일부민 분석

세포 단백질 일부민 측정을 세포독성의 하나의 마커를 제공한다. 세포 일부민 분석으로부터 얻어진 단백질 수준은 또한 화합물의 항바이러스 활성을 대한 표준화 참조를 제공하는데 사용될 수 있다. (이 문장의 의미를 주의하여야 한다.) 단백질 일부민 분석에서 HCV 레플리콘-함유 세포는 3일 동안 상이한 농도의 헬리오크산틴으로 처리된다; 이 화합물은 고농도에서 세포독성인 것으로 알려져 있다. 세포를 용해시키고 세포 용해물을 사용하여 플레이트에 결합되어 있는 염소 항-알부민 항체에 실온에서 (25 °C 내지 28 °C)에서 3시간 동안 결합시킨다. 그런 다음 플레이트를 1×PBS로 6회 세척한다. 결합되지 않은 단백질을 세척한 후 마우스 단클론성 항-사람 혈청 일부민을 첨가하여 플레이트 상의 일부민에 결합시킨다. 그런 다음 그 복합체를 포스파타제-표지된 항-마우스 IgG를 이차 항체로서 사용하여 검출한다.

HCV 레플리콘-함유 세포를 증가하는 농도의 헬리오크산틴을 사용하여 처리한 결과는 도 3에 도시한다. 우태아 혈청 (FBS) 3.1 %를 대조표준으로서 사용하여 항-사람 일부민 항체가 HCV 레플리콘-함유 세포에 대한 배지의 성분인 FBS와 유의할만한 교차 반응을 하지 않는다는 것을 확인하였다. 기질로서 pNPP를 사용하였다. 그 반응은 OD 405 nm에서 판독하였다.

##### 실시예 6B. 세포독성에 대한 MTS 분석

세포 생존 능력을 또한 생존 가능한 세포의 수를 측정하기 위한 비색 분석법인 CELLTITER 96 AQUEOUS ONE 용액 세포 증식 분석 (Promega, Madison WI)에 의해 측정할 수 있다. 이 방법에서 세포를 고정시키기 전에 10 내지 20  $\mu\text{l}$ 의

MTSM 시약을 제조업체의 지시에 따라 각 웰에 첨가하고, 플레이트를 37 °C에서 인큐베이션한 후 OD 490 nm에서 판독하였다. 인큐베이션 기간 중에 살아있는 세포를 MTS 시약을 490 nm에서 흡수하는 포르마잔 생성물로 전환시킨다. 그러므로 490 nm 흡광도는 배양물 중의 살아있는 세포 수에 직접 비례한다.

도 4는 MTS 방법을 사용하여 정량한, 3일 동안 헬리오크산틴으로 HCV 레플리콘-함유 세포를 처리한 결과를 도시한다.

세포독성을 측정하기 위한 세포 알부민과 MTS 방법을 직접적으로 비교한 것은 다음과 같이 얻을 수 있다: 세포를 상이한 농도의 시험 화합물 또는 헬리오크산틴으로 3일 주기 동안 처리한다. 상술한 바와 같이 알부민을 검출하기 위한 용해 전에 MTS 시약을 제조업체의 지시에 따라 각 웰에 첨가하고 그것을 37 °C에서 인큐베이션하고 OD 490 nm에서 판독한다. 그런 다음 세포 알부민 정량을 위에서 설명하는 바와 같이 수행한다.

#### 실시예 7. 약제학적 제형

실시예 7A 내지 7G는 식 I의 화합물을 함유하는 약제학적 조성물의 실례이다. 약어 "V.I."는 본 발명의 식 I의 바이러스 억제 화합물을 나타낸다.

#### 실시예 7A. 경구용 드롭

5 g의 V.I.를 5 ml의 2-히드록시프로판산 및 15 ml의 폴리에틸렌 글리콜에 약 60 °C 내지 약 80 °C에서 녹인다. 그것을 약 30 내지 40 °C로 냉각한 후 350 ml의 폴리에틸렌 글리콜을 첨가하고 그 혼합물을 잘 교반한다. 그런 다음 25 ml의 정제 수 중의 17.5 g의 나트륨 사카린 용액을 첨가한다. 풍미제와 500 ml의 부피가 되기에 충분한 양의 폴리에틸렌 글리콜을 첨가하고, 첨가하면서 교반하여 10 mg/ml의 V.I.를 함유하는 경구용 드롭 용액을 제조한다.

#### 실시예 7B. 캡슐

20 mg의 V.I., 6 g의 라우릴 황산 나트륨, 56 g의 전분, 56 g의 락토스, 0.8 g의 콜로이드상 이산화 규소, 및 1.2 g의 스테아르산 마그네슘을 함께 격렬하게 교반한다. 그 결과의 혼합물을 계속해서 각각 20 mg의 활성 성분이 포함되어 있는 1000개의 적당한 경질 젤라틴 캡슐에 채운다.

#### 실시예 7C. 필름-코팅된 정제

정제 코아의 제조: 10 mg의 V.I., 57 g의 락토스 및 20 g의 전분의 혼합물을 잘 섞은 후, 약 20 ml의 물 중의 0.5 g의 도데실 황산 나트륨, 및 1.0 g의 폴리비닐피롤리돈 (KOLLIDON-K 90)의 용액으로 수분을 보충한다. 젖은 분말 혼합물을 체에 거르고, 건조시킨 후 다시 체에 거른다. 그런 다음 100 g의 미정질 셀룰로스 (AVICEL)와 15 mg의 수소화된 식물유 (STEROTEX)를 첨가한다. 전체를 잘 섞은 후 정제로 압착하여 1000개의 정제를 얻었는데, 각각은 10 mg의 활성 성분을 함유하였다.

코팅: 15 ml중의 에틸 셀룰로스 (0.5 g, EHTOCEL 22 CPS)를 7.5 ml의 변성 에탄올 중의 1.0 g의 메틸 셀룰로스 (Methocel 60 HG.RTM.) 용액에 첨가한다. 그런 다음 7.5 ml의 디클로로메탄과 0.25 ml의 1,2,3-프로판트리올을 첨가한다. 폴리에틸렌 글리콜 (1.0 g)을 용융시키고, 7.5 ml의 디클로로메탄에 녹인 후 셀룰로스-함유 용액에 첨가한다. 옥타데칸산 마그네슘 (.25 g), 0.5 g의 폴리비닐필롤리돈, 및 3.0 ml의 농축된 착색 혼탁액 (OPASPRAY K-1-2109)을 첨가하고, 전체 혼합물을 균등화한다. 정제 코아를 코팅 장치에서 이 혼합물로 코팅한다.

#### 실시예 7D. 주사용 용액

(i) 1.8 g의 메틸 4-히드록시벤조에이트와 0.2 g의 프로필 4-히드록시벤조에이트를 약 0.5 L의 끓는 물에 녹인다. 그것을 약 50 °C로 냉각시킨 후 4 g의 락트산, 0.05 g의 프로필렌 글리콜, 및 4 g의 A.M을 교반하면서 첨가한다. 그 용액을 실온으로 냉각한 다음 충분한 양의 주사용 물을 첨가하여 4 mg/ml의 V.I.를 함유하는 용액을 제조한다. 용액을 여과에 의해 멀균하고 멀균 용기에 채워 넣는다.

(ii) 본 발명의 V.I.의 산 염 100.0 g을 끓는 물에 녹인다. 그것을 약 50 °C로 냉각한 후 37.5 g의 락트산 (90 중량 %)을 교반하면서 첨가한다. 그 용액을 실온으로 냉각하고 물을 1 L 되게 첨가한다. 용액을 여과에 의해 멀균하고 멀균 용기에 채워 넣는다.

(iii) 본 발명의 V.I.의 산 염 5.00 g을 끓는 물에 녹인다. 그것을 약 50 °C로 냉각한 후 2.20 g의 락트산 (90 중량 %)을 교반하면서 첨가한다. 그 용액을 실온으로 냉각하고 물을 100 ml 되게 첨가한다.

#### 실시예 7E. 젤

본 발명의 화합물 또는 염은 국소 적용을 위해 젤로서 형성될 수 있다.

젤을 실온에서 벤질 알코올 중에 A.M. (0.2 g - 5.0 g)을 혼탁시킴으로써 제조한다. 그 혼탁액에 히드록시프로필 셀룰로스 (2.5 g)와 탈이온수 (100 g을 만들 수 있는 양)의 혼합물을 교반하면서 첨가한다.

#### 실시예 7F. 크림

단계 I은 소르비탄 모노스테아레이트 (2.0 g), 폴리옥시에틸렌 (20) 소르비탄 모노스테아레이트 (1.5 g), 합성 경뇌 (spermaceti) (3.0 g), 세틸 스테아릴 알코올 (10.0 g) 및 2-옥틸도데칸올 (13.5 g)을 함유한다. 단계 I 혼합물을 75 °C로 가열한 후, 교반하고 혼합한다.

단계 II는 V.I.(1.0 g)를 함유한다. 단계 II를 단계 I에 첨가한 후, 교반하고 혼탁시킨다.

단계 III은 벤질 알코올 (1.0 g) 및 탈이온수 (100 g이 되기에 충분한 양)를 함유한다. 단계 III을 75 °C로 가열한 후 단계 II에 첨가한다. 크림을 집중적으로 혼합하고, 추가로 교반하면서 서서히 실온으로 냉각한다. 실온으로 냉각한 후에 크림을 균등화한다.

#### 실시예 7G. 스프레이

실시예 6D에 따라 제조한 활성 화합물 용액 또는 혼탁액은 또 분무용으로 가공처리할 수 있다. 이 목적을 위해서는 예를 들어 60 내지 90 % 활성 화합물 용액을 20 내지 40 %의 통상적인 추진제, 예를 들면 N<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, 프로판, 부탄, 할로케노탄화수소 등과 혼합한다.

### 산업상 이용 가능성

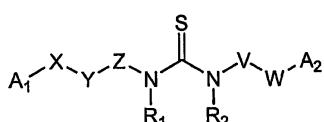
본 발명은 항바이러스 활성을 가지는 특정한 아릴 아실티오우레아 유도체 및 관련 화합물로써 C형 간염 바이러스 복제의 효과적인 작은 분자 억제제를 제공할 수 있다. 그로써 본 발명은 나아가 특정 감염성 질병으로 고생하는 환자들을 그 질병 또는 장애의 신호 또는 증상을 완화시킬 수 있는 방법을 제공한다. 또한 감염성 질병으로 고생하는 다른 동물, 예컨대 가축 및 길들여진 반려 동물의 치료 방법도 제공한다.

### (57) 청구의 범위

#### 청구항 1.

하기 식 1의 화합물 또는 약제학적으로 허용될 수 있는 그것의 염:

[식 1]

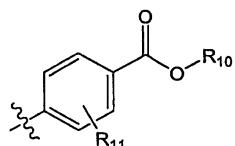


상기 식에서,

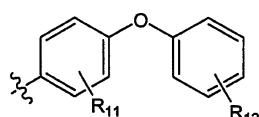
$A_1$ 은 임의로 치환된 디-알킬아미노, 임의로 치환된 아릴기, 임의로 치환된 5- 또는 6-원 헤테로아릴기, 페닐 고리에 5-원 헤�테로아릴 고리가 융합되어 있는 임의로 치환된 이중고리 헤�테로아릴기, 두 개의 6-원 고리를 가지는 임의로 치환된 부분적으로 불포화된 또는 방향족의 헤테로고리기, 최소한 하나의 질소 원자와 0 또는 1개의 추가의 헤테로원자를 함유하는 임의로 치환된 5- 내지 7-원 헤테로시클로알킬기, 최소한 하나의 질소 원자와 0 또는 1개의 추가의 헤�테로원자를 함유하는 임의로 치환된 부분적으로 불포화된 5- 내지 7-원 헤�테로시클로알킬기, 페닐 또는 헤�테로아릴기에 융합된 5- 또는 6-원 헤�테로시클로알킬기, 또는 최소한 하나의 질소 원자와 0 내지 3개의 추가의 헤�테로원자를 함유하는 융합된 또는 스피로 8- 내지 11-원 이중고리 헤�테로시클로알킬기이고;

$A_2$ 는

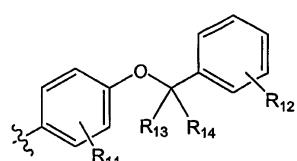
(i)



(ii)



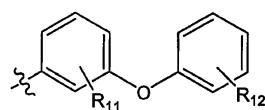
(iii)



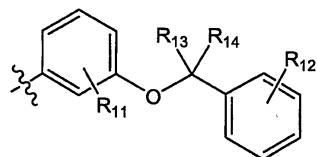
(iv)



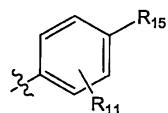
(v)



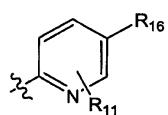
(vi)



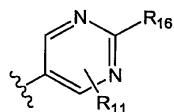
(vii)



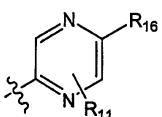
(viii)



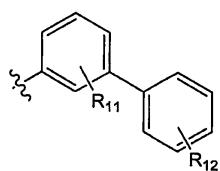
(ix)



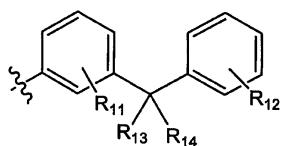
(x)



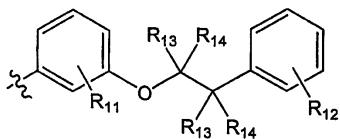
(xi)



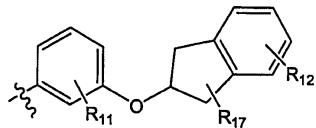
(x ii)



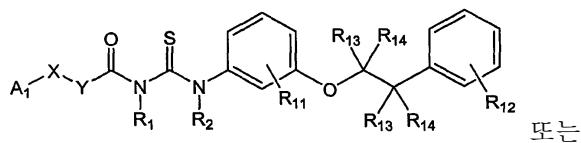
(x iii)



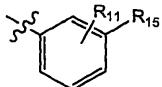
(x iv)



(x v)



(x vi)



이며;

t는 0 또는 1이고;

X와 W는 독립적으로 O, S, NR이거나 또는 없으며, 여기서 R은 수소, 임의로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, 또는 임의로 치환된 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)이고;

V는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬이거나 또는 없으며;

Y는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬이거나, 또는 없으며, V가 없을 때 W도 없고;

Z는 카르보닐, 티오카르보닐, 아미노, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬아미노이며;R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 수소이거나, 또는

R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카닐이고, 이를 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되거나, 또는

R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 결합하여 임의로 N, S, 및 O로부터 선택된 하나의 혼테로원자를 추가로 함유하는 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 그 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되며;

R<sub>10</sub>은 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬이고;

R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 할로겐, 히드록시, 시아노, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타내고;

R<sub>13</sub>과 R<sub>14</sub>는 수소와 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬로부터 각각의 발생시에 독립적으로 선택되며;

R<sub>15</sub>는 C<sub>4</sub>-C<sub>6</sub>알콕시 또는 C<sub>4</sub>-C<sub>6</sub>알킬이고;

R<sub>16</sub>은 C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알콕시 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알킬이며;

R<sub>17</sub>은 독립적으로 할로겐, 메틸, 및 메톡시로부터 선택되는 0 내지 2개의 치환기를 나타낸다.

## 청구항 2.

제 1항에 있어서,

상기 A<sub>1</sub>이 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, 아릴기, 5- 또는 6-원 헤테로아릴기, 폐닐 고리에 융합된 5-원 헤테로아릴 고리를 가지는 이중고리 헤�테로아릴기, 두 개의 6-원 고리를 가지는 부분적으로 불포화된 또는 방향족의 헤테로고리기, 최소한 하나의 질소 원자와 0 또는 1개의 추가의 헤테로원자를 함유하는 5- 내지 7-원 헤테로시클로알킬기, 최소한 하나의 질소 원자와 0 또는 1개의 추가의 헤테로원자를 함유하는 부분적으로 불포화된 5- 내지 7-원 헤테로시클로알킬기, 폐닐 또는 헤테로아릴기에 융합된 5- 또는 6-원 헤테로시클로알킬기, 또는 최소한 하나의 질소 원자와 0 내지 3개의 추가의 헤테로원자를 함유하는 융합된 또는 스피로 8- 내지 11-원 이중고리 헤�테로시클로알킬기이며; A<sub>1</sub>의 각각은 다음의 것들로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 5개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

(a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시,

(b) C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알키닐, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)알킬, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>알카노일옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시카르보닐, -모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)카르복시아미드, (C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)술폰아미드, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬티오, 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)티오, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬술피닐, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬술포닐, 및

(c) -GR<sub>a</sub>, G는 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알키닐, -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-, 및 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며; R<sub>a</sub>는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>7</sub> 단일 고리형 헤테로시클로알킬, C<sub>5</sub>-C<sub>10</sub> 이중고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 아릴, 및 헤테로아릴로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카노일, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시카르보닐, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되고;

X와 W는 독립적으로 O, S, NR이거나 또는 없으며, 여기서 R은 수소 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬 또는 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)이고, 이들 각각은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, 및 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 5개의 치환기로 치환되고;

V는 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬이거나 또는 없으며;

Y는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬이거나, 또는 없으며, V가 없을 때 W도 없고;

Z는 카르보닐, 티오카르보닐, 또는 이미노이며;

R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 수소이거나, 또는

R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알키닐이고, 이들 각각은 할로젠, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되거나, 또는

R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 결합하여 임의로 N, S, 및 O로부터 선택된 하나의 혼테로원자를 추가로 함유하는 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 그 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로젠, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

### 청구항 3.

제 1항 또는 2항에 있어서, 상기 Z가 티오카르보닐인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 4.

제 1항 또는 2항에 있어서, 상기 Z가 이미노 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬이미노인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 5.

제 4항에 있어서, 상기 Z가 이미노 또는 메틸이미노인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 6.

제 1항 또는 2항에 있어서, 상기 Z가 카르보닐인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 7.

제 1항 내지 6항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 X가 산소이고 Y가 -CH<sub>2</sub>-인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 8.

제 1항 내지 6항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 X가 산소이고 Y가 -CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 9.

제 1항 내지 6항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 X 및 Y가 없는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 10.

제 1항 내지 9항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 V 및 W가 없는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 11.

제 1항 내지 9항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 V가  $C_1-C_2$ 알킬이고 W는 없는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 12.

제 1항 내지 11항 중 어느 한 항에 있어서, 상기  $R_1$  및  $R_2$ 가 독립적으로 수소이거나, 또는  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_4$ 알케닐, 또는  $C_2-C_4$ 알키닐이고, 이들 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알콕시,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 13.

제 12항에 있어서, 상기  $R_1$  및  $R_2$ 가 독립적으로 수소, 메틸, 또는 에틸인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 14.

제 13항에 있어서, 상기  $R_1$  및  $R_2$ 가 둘 다 수소인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 15.

제 1항 내지 11항 중 어느 한 항에 있어서, 상기  $R_1$ 과  $R_2$ 가 결합하여 임의로 N, S, 및 O로부터 선택된 하나의 혼테로원자를 추가로 함유하는 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 그 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 16.

제 15항에 있어서, 상기  $R_1$ 과  $R_2$ 가 결합하여 추가로 혼테로원자를 함유하지 않는 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 그 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_2$ 알킬, 및  $C_1-C_2$ 알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 17.

제 2항 내지 16항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 A<sub>1</sub>이 다음의 것들로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되는 아릴, 부분적으로 불포화된 헤테로고리기, 또는 헤�테로아릴기인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

(a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시,

(b) C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카닐, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)알킬, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>알카노일옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시카르보닐, -모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)카르복시아미드, (C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)술폰아미드, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬티오, 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)티오, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬술피닐, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬술포닐, 및

(c) -GR<sub>a</sub>, G는 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카닐, -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-, 및 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며; R<sub>a</sub>는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>7</sub> 단일 고리형 헤테로시클로알킬, C<sub>5</sub>-C<sub>10</sub> 이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 아릴, 및 헤�테로아릴로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카노일, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시카르보닐, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

## 청구항 18.

제 17항에 있어서, 상기 A<sub>1</sub>이 폐닐, 나프틸, 피리딜, 피리미디닐, 티에닐, 피롤릴, 푸라닐, 피라졸릴, 이미다졸릴, 티아졸릴, 트리아졸릴, 티아디아졸릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 벤조푸라닐, 벤조티아졸릴, 벤조티오페닐, 벤조옥사디아졸릴, 벤조[d]옥사졸릴, 디히드로벤조디옥시닐, 인돌릴, 피라졸로피리미디닐, 티에닐피라졸릴, 또는 4H-크로메닐이고, 이들 각각은 다음의 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

(a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시,

(b) C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카닐, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)알킬, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>알카노일옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시카르보닐, -모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)카르복시아미드, (C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)술폰아미드, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬티오, 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)티오, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬술피닐, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬술포닐, 그리고

(c) -GR<sub>a</sub>, G는 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카닐, -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-, 및 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며; R<sub>a</sub>는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>7</sub> 단일 고리형 헤�테로시클로알킬, C<sub>5</sub>-C<sub>10</sub> 이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 아릴, 및 헤�테로아릴로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카노일, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시카르보닐, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

## 청구항 19.

제 18항에 있어서, 상기 A<sub>1</sub>이 폐닐, 나프틸, 피리딘-2-일, 피리딘-3-일, 피리딘-4-일, 피리미딘-2-일, 피리미딘-4-일, 피리미딘-5-일, 티엔-2-일, 티엔-3-일, 티아졸-4-일, 피롤-1-일, 피롤-2-일, 피롤-3-일, 푸란-2-일, 푸란-3-일, 피라졸-1-일, 피라졸-2-일, 피라졸-4-일, 피라졸-5-일, 이미다졸-1-일, 이미다졸-2-일, 이미다졸-4-일, 이미다졸-5-일, 티아졸-2-일, 티아졸-3-일, 티아졸-5-일, 1,2,3-트리아졸-4-일, 1,2,3-티아디아졸-4-일, 1,2,3-티아디아졸-5-

일, 옥사졸-2-일, 이소옥사졸-4-일, 이소옥사졸-5-일, 이소옥사졸-3-일, 이소옥사졸-4-일, 이소옥사졸-5-일, 벤조푸란-2-일, 벤조푸란-3-일, 벤조피란-2-일, 벤조피란-3-일, 벤조피란-4-일, 벤조[d]옥사졸-2-일, 벤조[d]티아졸-2-일, 벤조[b]티오펜-2-일, 4H-크로멘-2-일, 벤조[c][1,2,5]옥사디아졸릴, 2,3-디히드로벤조[b][1,4]디옥신-2-일, 페라졸로[1,5-a]페리미딘-6-일, 디히드로벤조[b][1,4]디옥신-3-일, 인돌-2-일, 페라졸로[1,5-a]페리미딘-5-일, 1H-티에노[2,3-c]페라졸-4-일, 또는 1H-티에노[2,3-c]페라졸-5-일이고, 이들 각각은 다음의 것들로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

(a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시,

(b) C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알키닐, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬), 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>알카노일옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시카르보닐, -모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)카르복시아미드, (C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)솔폰아미드, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬티오, 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)티오, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬솔피닐, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬솔포닐, 그리고

(c) -GR<sub>a</sub>, G는 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알키닐, -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-, 및 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며; R<sub>a</sub>는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>7</sub> 단일 고리형 헤테로시클로알킬, C<sub>5</sub>-C<sub>10</sub> 이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프탈, 아릴, 및 헤테로아릴로부터 선택되고,

상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>알카노일, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시카르보닐, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

## 청구항 20.

제 19항에 있어서, 상기 A<sub>1</sub>이 다음의 것들로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

(a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시,

(b) C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, 및 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, 그리고

(c) -GR<sub>a</sub>, G는 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-, -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-, 및 -(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>-으로부터 선택되고, R<sub>a</sub>는 C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>시클로알킬, O, S, 및 N으로부터 독립적으로 선택된 1 또는 2개의 헤테로원자를 함유하는 5 또는 6-원 헤�테로시클로알킬, 또는 O, S, 및 N으로부터 독립적으로 선택되는 1, 2 또는 3개의 헤�테로원자를 함유하는 5- 또는 6-원 헤�테로아릴, 인다닐, 및 폐닐이며,

상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

## 청구항 21.

제 20항에 있어서, 상기 A<sub>1</sub>이 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, 및 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

## 청구항 22.

제 3항 내지 16항 중 어느 한 항에 있어서, 상기  $A_1$ 이  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_3-C_7$ 시클로알킬, 또는  $C_2-C_7$  단일 고리 헤테로시클로알킬이고, 이들 각각은 다음의 것들로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 5개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

(a) 할로젠, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-COOH$ ,  $-CONH_2$ ,  $-SO_2NH_2$ ,  $-SH$ ,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시,

(b)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알케닐옥시,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 아미노( $C_1-C_6$ )알킬, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노 $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_2-C_8$ 알카노일옥시,  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐, -모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)카르복시아미드, ( $C_3-C_7$ 시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)술폰아미드,  $C_1-C_6$ 알킬티오, 아릴( $C_0-C_4$ 알킬)티오,  $C_1-C_6$ 알킬술피닐, 및  $C_1-C_8$ 알킬술포닐, 그리고

(c)  $-GR_a$ , G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알카노일,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬,  $C_2-C_7$  단일 고리형 헤테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$  이중고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프탈, 아릴, 및 헤테로아릴로부터 선택되고,

상기 (b)와 (c)의 각각은 할로젠, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_2-C_4$ 알카노일,  $C_1-C_4$ 알콕시카르보닐,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

## 청구항 23.

제 22항에 있어서, 상기  $A_1$ 이  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_3-C_7$ 시클로알킬, 피롤리디닐, 피페리디닐, 피페라지닐, 또는 모르폴리닐이고, 이들 각각은 다음의 것들로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

(a) 할로젠, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-COOH$ ,  $-CONH_2$ ,  $-SO_2NH_2$ ,  $-SH$ ,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시,

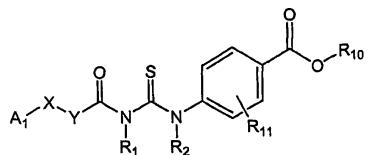
(b)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알케닐옥시,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 아미노( $C_1-C_6$ )알킬, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노 $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_2-C_8$ 알카노일옥시,  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐, -모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)카르복시아미드, ( $C_3-C_7$ 시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-( $C_1-C_6$ 알킬)술폰아미드,  $C_1-C_6$ 알킬티오, 아릴( $C_0-C_4$ 알킬)티오,  $C_1-C_6$ 알킬술피닐, 및  $C_1-C_8$ 알킬술포닐,

(c)  $-GR_a$ , G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알카노일,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬, 및 폐닐로부터 선택된다.

## 청구항 24.

제 1항 또는 2항에 있어서 다음 식 2의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[수식 2]



상기 식에서,  $\text{R}_1$ 과  $\text{R}_2$ 는 수소 또는 메틸이고;

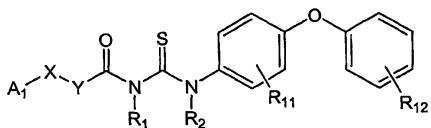
$\text{R}_{10}$ 은  $\text{C}_1\text{-C}_6$  알킬이며;

$\text{R}_{11}$ 은 할로겐, 히드록시, 시아노,  $\text{C}_1\text{-C}_4$  알킬,  $\text{C}_1\text{-C}_4$  알콕시, 모노- 및 디-( $\text{C}_1\text{-C}_4$  알킬)아미노,  $\text{C}_1\text{-C}_2$  할로알킬, 및  $\text{C}_1\text{-C}_2$  할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다.

### 청구항 25.

제 1항 또는 2항에 있어서, 다음 식 3의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 3]



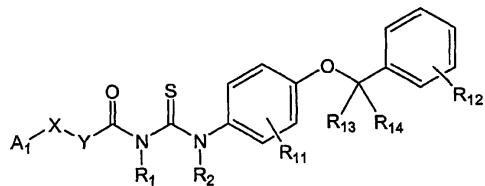
상기 식에서,  $\text{R}_1$ 과  $\text{R}_2$ 는 수소 또는 메틸이고;

$\text{R}_{11}$ 과  $\text{R}_{12}$ 는 각각 할로겐, 히드록시, 시아노,  $\text{C}_1\text{-C}_4$  알킬,  $\text{C}_1\text{-C}_4$  알콕시, 모노- 및 디-( $\text{C}_1\text{-C}_4$  알킬)아미노,  $\text{C}_1\text{-C}_2$  할로알킬, 및  $\text{C}_1\text{-C}_2$  할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다.

### 청구항 26.

제 1항 또는 2항에 있어서, 다음 식 4의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 4]



상기 식에서,  $\text{R}_1$ 과  $\text{R}_2$ 는 독립적으로 수소 또는 메틸이고;

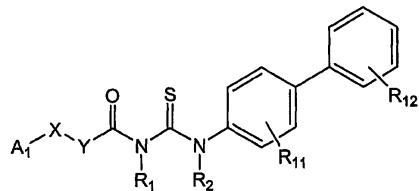
$\text{R}_{11}$ 과  $\text{R}_{12}$ 는 각각 할로겐, 히드록시, 시아노,  $\text{C}_1\text{-C}_4$  알킬,  $\text{C}_1\text{-C}_4$  알콕시, 모노- 및 디-( $\text{C}_1\text{-C}_4$  알킬)아미노,  $\text{C}_1\text{-C}_2$  할로알킬, 및  $\text{C}_1\text{-C}_2$  할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타내며;

$\text{R}_{13}$ 과  $\text{R}_{14}$ 는 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

### 청구항 27.

제 1항 또는 2항에 있어서, 다음 식 5의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 5]



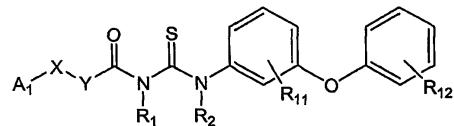
상기 식에서, R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 수소 또는 메틸이고;

R<sub>11</sub>과 R<sub>12</sub>는 각각 할로겐, 히드록시, 시아노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다.

### 청구항 28.

제 1항 또는 2항에 있어서, 다음 식 6의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 6]



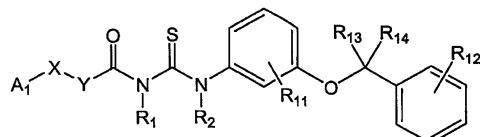
상기 식에서, R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 수소 또는 메틸이고;

R<sub>11</sub>과 R<sub>12</sub>는 각각 할로겐, 히드록시, 시아노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다.

### 청구항 29.

제 1항 또는 2항에 있어서, 다음 식 7의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 7]



상기 식에서, R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 수소 또는 메틸이고;

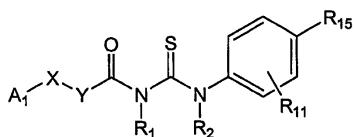
$R_{11}$ 과  $R_{12}$ 는 각각 할로겐, 히드록시, 시아노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타내며;

$R_{13}$ 과  $R_{14}$ 는 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

### 청구항 30.

제 1항 또는 2항에 있어서, 다음 식 8의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 8]



상기 식에서,  $R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로 수소 또는 메틸이고;

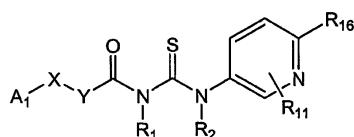
$R_{11}$ 은 할로겐, 히드록시, 시아노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타내며;

$R_{15}$ 는  $C_4-C_6$ 알콕시 또는  $C_4-C_6$ 알킬이다.

### 청구항 31.

제 1항 또는 2항에 있어서, 다음 식 9의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 9]



상기 식에서,  $R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로 수소 또는 메틸이고;

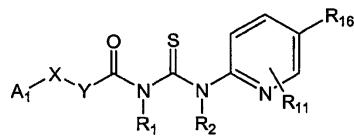
$R_{11}$ 은 할로겐, 히드록시, 시아노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타내며;

$R_{16}$ 은  $C_2-C_6$ 알콕시 또는  $C_2-C_6$ 알킬이다.

### 청구항 32.

제 1항 또는 2항에 있어서, 다음 식 10의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 10]



상기 식에서, R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 수소 또는 메틸이고;

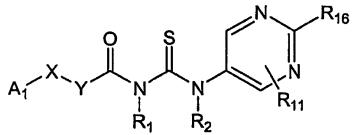
R<sub>11</sub>은 할로겐, 히드록시, 시아노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타내며;

R<sub>16</sub>은 C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알콕시 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알킬이다.

**청구항 33.**

제 1항 또는 2항에 있어서, 다음 식 11의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 11]



상기 식에서, R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 수소 또는 메틸이고;

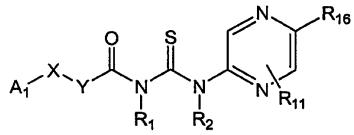
R<sub>11</sub>은 할로겐, 히드록시, 시아노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타내며;

R<sub>16</sub>은 C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알콕시 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알킬이다.

**청구항 34.**

제 1항 또는 2항에 있어서, 다음 식 12의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 12]



상기 식에서, R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 수소 또는 메틸이고;

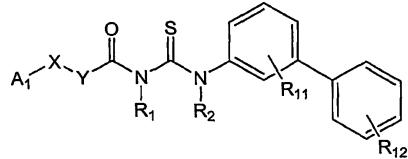
R<sub>11</sub>은 할로겐, 히드록시, 시아노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타내며;

$R_{16}$ 은  $C_2-C_6$ 알콕시 또는  $C_2-C_6$ 알킬이다.

### 청구항 35.

제 1항 또는 2항에 있어서, 다음 식 13의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 13]



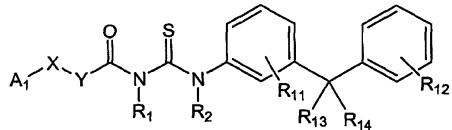
상기 식에서,  $R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로 수소 또는 메틸이고;

$R_{11}$ 과  $R_{12}$ 는 각각 할로겐, 히드록시, 시아노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다.

### 청구항 36.

제 1항 또는 2항에 있어서, 다음 식 14의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 14]



상기 식에서,  $R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로 수소 또는 메틸이고;

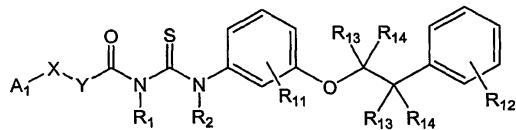
$R_{11}$ 과  $R_{12}$ 는 각각 할로겐, 히드록시, 시아노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타내며;

$R_{13}$ 과  $R_{14}$ 는 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

### 청구항 37.

제 1항 또는 2항에 있어서, 다음 식 15의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 15]



상기 식에서,  $R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로 수소 또는 메틸이고;

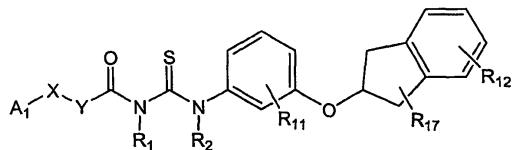
$R_{11}$ 과  $R_{12}$ 는 각각 할로겐, 히드록시, 시아노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타내며;

$R_{13}$ 과  $R_{14}$ 는 수소 또는 메틸로부터 각각의 발생시에 독립적으로 선택된다.

### 청구항 38.

제 1항 또는 2항에 있어서, 다음 식 16의 것임을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 16]



상기 식에서,  $R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로 수소 또는 메틸이고;

$R_{11}$ 과  $R_{12}$ 는 각각 할로겐, 히드록시, 시아노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타내며;

$R_{17}$ 은 할로겐, 메틸, 및 메톡시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 2개의 치환기를 나타낸다.

### 청구항 39.

제 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 X가 NR이고 Y는  $-CH_2-$  또는  $-CH_2CH_2-$ 이거나; 또는 X가 O이고 Y는  $-CH_2-$  또는  $-CH_2CH_2-$ 이거나; 또는 X와 Y가 없는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

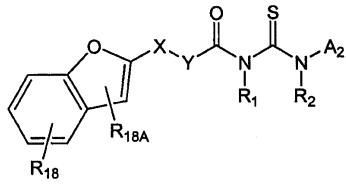
### 청구항 40.

제 1항, 2항, 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 상기  $A_1$ 이 피라지닐, 피리딜, 또는 퀴낙솔리닐이고, 이것들의 각각은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타내는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 41.

제 1항, 2항 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 다음 식 17인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 17]



상기 식에서  $R_{18A}$ 는 수소, 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 또는  $C_1-C_2$ 할로알콕시이고;

$R_{18}$ 은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다.

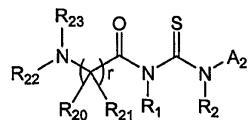
#### 청구항 42.

제 41항에 있어서, 상기 X 및 Y가 없고;  $R_1$  및  $R_2$ 가 독립적으로 수소 또는 메틸인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

#### 청구항 43.

제 1항, 2항 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 다음 식 18인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 18]



상기 식에서

$r$ 은 1, 2, 또는 3이고;

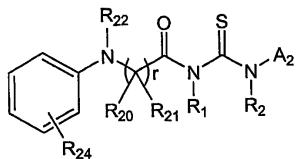
$R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 독립적으로 수소 및  $C_1-C_4$ 알킬로부터 선택되거나, 또는  $R_{20}$ 과  $R_{21}$ 이 결합하여  $C_3-C_7$ 시클로알킬기를 형성하며;

$R_{22}$  및  $R_{23}$ 은 독립적으로  $C_1-C_6$ 알킬기로부터 선택되고; 그것들의 각각은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

#### 청구항 44.

제 1항, 2항 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 다음 식 19인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 19]



상기 식에서

r은 1, 2, 또는 3이고;

R<sub>20</sub> 및 R<sub>21</sub>은 수소 및 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬로부터 독립적으로 선택되거나; 또는 R<sub>20</sub> 및 R<sub>21</sub>은 결합하여 C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬기를 형성하며;

R<sub>22</sub>는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬기이고;

R<sub>24</sub>는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, -COOH, -CONH<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>, -SH, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카닐, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬), 아미노(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>)알킬, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알카노일, C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>알카노일옥시, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시카르보닐, -모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)카르복시아미드, (C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)술폰아미드, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬티오, 아릴(C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>알킬)티오, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬술피닐, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬술포닐로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다.

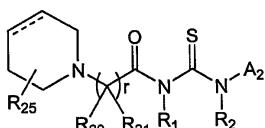
#### 청구항 45.

제 44항에 있어서, 상기 R<sub>24</sub>가 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기를 나타내는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

#### 청구항 46.

제 1항, 2항 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 다음 식 20인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 20]



상기 식에서

r은 1, 2, 또는 3이고;

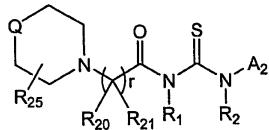
$R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 독립적으로 수소 및  $C_1-C_4$ 알킬로부터 선택되거나, 또는  $R_{20}$ 과  $R_{21}$ 이 결합하여  $C_3-C_7$ 시클로알킬기를 형성하며;

$R_{25}$ 는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다.

### 청구항 47.

제 1항, 2항 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 다음 식 21인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 21]



상기 식에서

$r$ 은 1, 2, 또는 3이고;

$R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 독립적으로 수소 및  $C_1-C_4$ 알킬로부터 선택되거나, 또는  $R_{20}$ 과  $R_{21}$ 이 결합하여  $C_3-C_7$ 시클로알킬기를 형성하며;

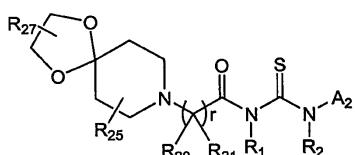
$R_{25}$ 는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기를 나타내고;

$Q$ 는 O, S, 또는  $NR_{26}$ 으로,  $R_{26}$ 은 수소이거나 또는  $R_{26}$ 은  $C_1-C_6$ 알킬, 페닐, 피리딜, 또는 피리미디닐인 경우 각각은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

### 청구항 48.

제 1항, 2항 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 다음 식 22인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 22]



상기 식에서

$r$ 은 1, 2, 또는 3이고;

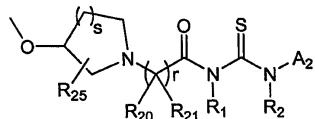
$R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 독립적으로 수소 및  $C_1-C_4$ 알킬로부터 선택되거나, 또는  $R_{20}$ 과  $R_{21}$ 이 결합하여  $C_3-C_7$ 시클로알킬기를 형성하며;

$R_{25}$ 와  $R_{27}$ 은 각각 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 2개의 치환기를 나타낸다.

### 청구항 49.

제 1항, 2항 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 다음 식 23인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 23]



상기 식에서

$r$ 은 1, 2, 또는 3이고;

$s$ 는 1, 2, 또는 3이며;

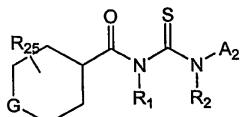
$R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 독립적으로 수소 및  $C_1-C_4$ 알킬로부터 선택되거나, 또는  $R_{20}$ 과  $R_{21}$ 이 결합하여  $C_3-C_7$ 시클로알킬기를 형성하고;

$R_{25}$ 는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다.

### 청구항 50.

제 1항, 2항 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 다음 식 24인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 24]



상기 식에서,

$R_{25}$ 는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기를 나타내고;

G는 O, S, SO<sub>2</sub>, 또는 NR<sub>26</sub>으로, R<sub>26</sub>이 수소이거나 또는 R<sub>26</sub>이 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, 페닐, 피리딜, 또는 피리미디닐인 경우 각각은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

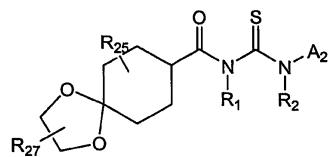
### 청구항 51.

제 50항에 있어서, 상기 R<sub>25</sub>가 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노 치환기 및 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 2개의 추가의 치환기를 나타내는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 52.

제 1항, 2항 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 다음 식 25인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 25]



상기 식에서,

R<sub>25</sub>는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기를 나타내고;

R<sub>27</sub>은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 2개의 치환기를 나타낸다.

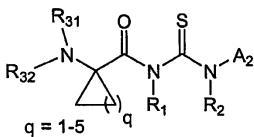
### 청구항 53.

제 52항에 있어서, 상기 R<sub>25</sub>가 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노 치환기 및 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 2개의 추가되는 치환기를 나타내는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 54.

제 1항, 2항 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 다음 식 26인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 26]



상기 식에서,

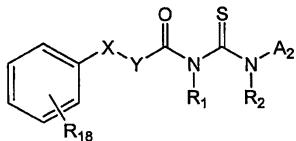
$q$ 는 1 내지 5의 정수이고;

$R_{31}$  및  $R_{32}$ 는 독립적으로  $C_1-C_6$ 알킬 및 페닐로부터 선택되며; 그들은 각각 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

### 청구항 55.

제 1항, 2항 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 다음 식 27인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 27]



상기 식에서,

$R_{18}$ 은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기를 나타낸다.

### 청구항 56.

제 55항에 있어서, 상기 X는 산소이고 Y는  $-CH_2-$  인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 57.

제 55항에 있어서, 상기 X와 Y가 없는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 58.

제 1항, 2항 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 상기  $A_1$ 이 푸란-2-일, 푸란-3-일, 이소옥사졸-3-일, 이소옥사졸-4-일, 티오펜-2-일, 티오펜-3-일, 피롤-2-일, 피롤-3-일, 및 피라졸릴로부터 선택되는 5-원 헤테로아릴기이고, 이것들의 각각은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

**청구항 59.**

제 58항에 있어서, 상기 X는 산소이고 Y는  $-\text{CH}_2-$  인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

**청구항 60.**

제 58에 있어서, 상기 X와 Y가 없는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

**청구항 61.**

제 1항, 2항 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 상기  $\text{A}_1$ 이 피리딘-2-일 또는 피리딘-3-일이고, 이것들이 각각 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로,  $\text{C}_1\text{-}\text{C}_4$ 알킬,  $\text{C}_1\text{-}\text{C}_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $\text{C}_1\text{-}\text{C}_4$ 알킬)아미노,  $\text{C}_1\text{-}\text{C}_2$ 할로알킬,  $\text{C}_1\text{-}\text{C}_2$ 할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

**청구항 62.**

제 61항에 있어서, 상기 X는 산소이고 Y는  $-\text{CH}_2-$  인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

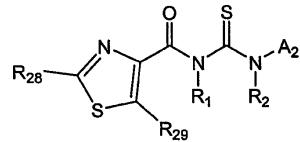
**청구항 63.**

제 61항에 있어서, 상기 X와 Y가 없는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

**청구항 64.**

제 1항, 2항 또는 24항 내지 38항 중 어느 한 항에 있어서, 다음 식 28인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

[식 28]



상기 식에서,

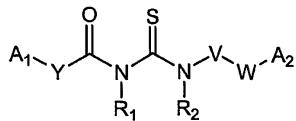
$\text{R}_{28}$ 은 폐닐 또는 피리딜이고, 이것들의 각각은 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로,  $\text{C}_1\text{-}\text{C}_4$ 알킬,  $\text{C}_1\text{-}\text{C}_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $\text{C}_1\text{-}\text{C}_4$ 알킬)아미노,  $\text{C}_1\text{-}\text{C}_2$ 할로알킬, 및  $\text{C}_1\text{-}\text{C}_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 3개의 치환기로 치환되고;

$\text{R}_{29}$ 은 수소, 메틸 또는 에틸이다.

## 청구항 65.

다음 식 IB의 화합물 또는 약제학적으로 허용될 수 있는 그것의 염:

[식 IB]



상기 식에서,

$\text{A}_1$ 은 디-( $\text{C}_1-\text{C}_8$ 알킬)아미노,  $\text{N}-(\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬)- $\text{N}$ -페닐-아미노기,  $\text{N}-(\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬)- $\text{N}$ -페리딜 아미노기, 식 IB의 부착지점에 질소 원자를 경유하여 공유 결합된 5- 내지 7-원의 단일 고리형 헤테로시클로알킬기, 식 IB의 부착지점에 질소 원자를 경유하여 공유 결합된 5- 내지 7-원의 부분적으로 불포화된 단일 고리형 헤�테로고리기, 식 IB의 부착지점에 질소 원자에 인접해 있는 탄소 원자를 경유하여 공유 결합된 5- 내지 7-원의 헤�테로시클로알킬기, 또는 고리가 식 IB의 부착지점에 질소 원자를 경유하여 융합되거나 스피로 공유 결합된 8- 내지 11-원의 이중 고리형 헤�테로시클로알킬이고;

$\text{A}_2$ 는  $\text{C}_3-\text{C}_8$ 시클로알킬, 부분적으로 불포화된 또는 방향족의 카르보고리기, 또는 포화된, 부분적으로 불포화된, 또는 방향족의 헤�테로고리기이며;

상기  $\text{A}_1$ 과  $\text{A}_2$ 의 각각은 하기의 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되는데:

(a)는 독립적으로 할로젠, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-\text{COOH}$ ,  $-\text{CONH}_2$ ,  $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ ,  $-\text{SH}$ ,  $\text{C}_1-\text{C}_2$ 할로알킬, 및  $\text{C}_1-\text{C}_2$ 할로알콕시로부터 선택되고,

(b)는 독립적으로  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬,  $\text{C}_2-\text{C}_6$ 알케닐,  $\text{C}_2-\text{C}_6$ 알카닐,  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알콕시,  $\text{C}_2-\text{C}_6$ 알케닐옥시,  $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알콕시( $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알킬), 아미노( $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬), 모노- 및 디-( $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디-( $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알킬)아미노 $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알킬,  $\text{C}_2-\text{C}_6$ 알카노일,  $\text{C}_2-\text{C}_8$ 알카노일옥시,  $\text{C}_1-\text{C}_8$ 알콕시카르보닐, -모노- 및 디-( $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬)카르복시아미드, ( $\text{C}_3-\text{C}_7$ 시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디-( $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬)술폰아미드,  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬티오, 아릴( $\text{C}_0-\text{C}_4$ 알킬)티오,  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬술피닐, 및  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬술포닐로부터 선택되며,

(c)는  $-\text{GR}_a$ 로, G는  $-(\text{CH}_2)_n-$ ,  $\text{C}_2-\text{C}_4$ 알케닐,  $\text{C}_2-\text{C}_4$ 알카닐,  $-(\text{CH}_2)_n\text{O}(\text{CH}_2)_m-$ , 및  $-(\text{CH}_2)_n\text{N}(\text{CH}_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $\text{R}_a$ 는  $\text{C}_3-\text{C}_8$ 시클로알킬,  $\text{C}_2-\text{C}_7$ 단일 고리형 헤�테로시클로알킬,  $\text{C}_5-\text{C}_{10}$ 이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프탈, 아릴, 및 헤테로아릴로부터 선택되고,

상기 (b)와 (c)의 각각은 할로젠, 히드록시, 아미노,  $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알킬,  $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알킬)아미노,  $\text{C}_2-\text{C}_4$ 알카노일,  $\text{C}_1-\text{C}_4$ 알콕시카르보닐,  $\text{C}_1-\text{C}_2$ 할로알킬,  $\text{C}_1-\text{C}_2$ 할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되며;

W는 O, S, NR이거나, 또는 없으며, 이 때 R은 수소이거나  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬 또는 아릴( $\text{C}_0-\text{C}_4$ 알킬)이고, 각각은 할로젠, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $\text{C}_1-\text{C}_2$ 할로알킬,  $\text{C}_1-\text{C}_2$ 할로알콕시,  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬,  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알콕시, 및 모노- 및 디-( $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬)아미노로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되고;

V는  $\text{C}_1-\text{C}_6$ 알킬,  $\text{C}_2-\text{C}_6$ 알케닐,  $\text{C}_3-\text{C}_7$ 시클로알킬이거나, 또는 없으며; V가 없으면 W도 없고;

Y는 0 또는 1개의 C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>시클로알킬로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, 5- 내지 7-원의 단일고리형 헤테로시클로알킬, 또는 고리가 융합되거나 스피로인 8- 내지 11-원의 이중 고리형 헤�테로시클로알킬이고; 각각의 치환기는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되며; 또는 Y는 없고;

R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 독립적으로 수소 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬, C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알케닐, 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>알키닐이며, 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되거나, 또는 R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 결합하여 임의로 N, S, 및 O로부터 선택된 하나의 추가의 헤테로원자를 함유하는 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로겐, 히드록시, 아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시, 모노- 및 디-(C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬)아미노, C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알킬, 및 C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환된다.

#### 청구항 66.

제 65항에 있어서, 상기 V와 W가 없는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

#### 청구항 67.

제 65항에 있어서, 상기 Y가 없는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

#### 청구항 68.

제 65항에 있어서, 상기 Y가 -CH<sub>2</sub>- 인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

#### 청구항 69.

제 65항에 있어서, 상기 Y가 C<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>시클로알킬, 피롤리디닐, 또는 피페리디닐로 치환된 -CH<sub>2</sub>- 인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

#### 청구항 70.

제 65항 내지 69항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>가 독립적으로 수소이거나 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

#### 청구항 71.

제 70항에 있어서, 상기 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>가 독립적으로 수소이거나 메틸인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

#### 청구항 72.

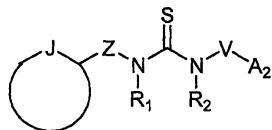
제 65항 내지 71항 중 어느 한 항에 있어서, 상기  $A_2$ 가  $C_5-C_7$ 시클로알킬, 페닐, 피리딜, 나프틸, 피리미디닐, 피라지닐, 벤조티아졸릴, 벤조디옥실, 퀴놀리닐, 또는 이소퀴놀리닐이고, 이것들은 각각 다음의 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되는데, 상기 (a)는 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-COOH$ ,  $-CONH_2$ ,  $-SO_2NH_2$ ,  $-SH$ ,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 선택되고, (b)는  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알카노일, 및  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐로부터 선택되며, (c)는  $-GR_a$ 로, G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, 여기서 n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬, 피페리디닐, 피페라지닐, 모르폴리닐, 테트라히드로이소퀴놀리닐, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 페닐, 피리딜, 벤조티오페닐, 및 벤조푸라닐로부터 선택되고,

상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_2-C_4$ 알카노일,  $C_1-C_4$ 알콕시카르보닐,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

### 청구항 73.

다음 식 II의 화합물 또는 그것의 약제학적으로 허용될 수 있는 염:

[식 II]



상기 식에서,  $A_2$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬, 부분적으로 불포화된 또는 방향족의 탄소고리기, 포화된, 부분적으로 불포화된, 또는 방향족의 혜테로고리기이고; 이것들은 각각 다음의 것들로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되며:

(a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-COOH$ ,  $-CONH_2$ ,  $-SO_2NH_2$ ,  $-SH$ ,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시,

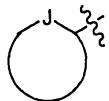
(b)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알케닐옥시,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 아미노( $C_1-C_6$ 알킬), 모노- 및 디- $(C_1-C_6$ 알킬)아미노, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노 $C_1-C_4$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알카노일,  $C_2-C_8$ 알카노일옥시,  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐, -모노- 및 디- $(C_1-C_6$ 알킬)카르복시아미드, ( $C_3-C_7$ 시클로알킬)카르복시아미드, 모노- 및 디- $(C_1-C_6$ 알킬)술폰아미드,  $C_1-C_6$ 알킬티오, 아릴( $C_0-C_4$ 알킬)티오,  $C_1-C_6$ 알킬술피닐, 및  $C_1-C_8$ 알킬술포닐, 및

(c)  $-GR_a$ , G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬,  $C_2-C_7$ 단일 고리형 혜테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$ 이중 고리형 혜테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 아릴, 및 혜테로아릴로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_2-C_4$ 알카노일,  $C_1-C_4$ 알콕시카르보닐,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되고;

V는  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐이거나, 또는 없고;

Z는 카르보닐, 티오카르보닐, 또는 이미노이며;

$R_1$ 과  $R_2$ 는 독립적으로 수소 또는  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐, 또는  $C_2-C_6$ 알키닐이며, 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알콕시,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되거나, 또는  $R_1$ 과  $R_2$ 는 결합하여 임의로 N, S, 및 O로부터 선택된 하나의 추가의 헤테로원자를 함유하는 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리를 형성하고, 5- 내지 7-원의 포화된 또는 단일-불포화된 고리는 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시로부터 독립적으로 선택된 0 내지 3개의 치환기로 치환되고;



기: 는 식 (i)의 기로서, J가 상기 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된 O, S, 또는  $NR_3$ 인 포화된, 부분적으로 포화된, 또는 방향족의 헤�테로고리기이며;

$R_3$ 은 (d) 수소,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시이거나;

(e)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 또는 아미노( $C_1-C_6$ )알킬이거나,

(f)  $-LR_b$ 이고, 이 때 L은  $-(CH_2)_r-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_rO(CH_2)_s-$ , 및  $-(CH_2)_rN(CH_2)_s-$ 로부터 선택되고, r 및 s는 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_b$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬,  $C_2-C_7$  단일 고리형 헤테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$  이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 아릴, 및 헤테로아릴로부터 선택되고; (e)와 (f)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디-( $C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 폐닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

#### 청구항 74.

제 73항에 있어서, 상기 Z가 카르보닐인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

#### 청구항 75.

제 73항 또는 74항에 있어서, 상기 V가 없거나 또는  $C_1-C_4$ 알킬인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

#### 청구항 76.

제 73항 내지 75항 중 어느 한 항에 있어서, 상기  $R_1$  및  $R_2$ 가 독립적으로 수소이거나 메틸인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

#### 청구항 77.

제 73항 내지 76항 중 어느 한 항에 있어서, 상기  $A_2$ 는  $C_5-C_7$ 시클로알킬, 폐닐, 피리딜, 나프틸, 피리미디닐, 피라지닐, 벤조티아졸릴, 벤조디옥실, 퀴놀리닐, 또는 이소퀴놀리닐이고, 이것들은 각각 상기 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염.

#### 청구항 78.

제 73항 내지 77항 중 어느 한 항에 있어서, 상기  $A_2$ 가  $C_5$ - $C_7$ 시클로알킬, 페닐, 피리딜, 나프틸, 벤조티아졸릴, 벤조디옥실, 퀴놀리닐, 또는 이소퀴놀리닐이고, 이것들은 각각 다음의 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

(a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-COOH$ ,  $-CONH_2$ ,  $-SO_2NH_2$ ,  $-SH$ ,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 및  $C_1-C_2$ 할로알콕시,

(b)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_6$ 알콕시,  $C_2-C_6$ 알카노일, 및  $C_1-C_8$ 알콕시카르보닐,

(c)  $-GR_a$ , G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬, 피페리디닐, 피페라지닐, 모르폴리닐, 테트라히드로이소퀴놀리닐, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 페닐, 피리딜, 벤조티오페닐, 및 벤조푸라닐로부터 선택되고,

상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_2-C_4$ 알카노일,  $C_1-C_4$ 알콕시카르보닐,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

## 청구항 79.



제 73항 내지 78항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 식

이 식 (i)의 기인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

상기 식 (i)은 헤테로원자인 J가 식 II에서 식 (i)의 기의 부착 지점에 인접하도록 배향된 헤테로아릴기, 즉 피리딜, 피리미디닐, 티에닐, 피롤릴, 푸라닐, 피라졸릴, 이미다졸릴, 티아졸릴, 트리아졸릴, 티아디아졸릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 벤조푸라닐, 벤조티아졸릴, 벤조티오페닐, 벤조옥사디아졸릴, 벤조[*d*]옥사졸릴, 디히드로벤조디옥시닐, 인돌릴, 피라졸로피리미디닐, 또는 티에닐피라졸릴기이고, 식 (i)의 기는 상기 (a), (b), 및 (c)로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되며; J는 S, O 또는  $NR_3$ 이고,  $R_3$ 은

(d) 수소,  $C_1-C_2$ 할로알킬, 또는  $C_1-C_2$ 할로알콕시이거나;

(e)  $C_1-C_6$ 알킬,  $C_2-C_6$ 알케닐,  $C_2-C_6$ 알키닐,  $C_1-C_4$ 알콕시( $C_1-C_4$ 알킬), 또는 아미노( $C_1-C_6$ )알킬이거나,

(f)  $-LR_b$ 이고, 이 때 L은  $-(CH_2)_r-$ ,  $C_2-C_4$ 알케닐,  $C_2-C_4$ 알키닐,  $-(CH_2)_rO(CH_2)_s-$ , 및  $-(CH_2)_rN(CH_2)_s-$ 로부터 선택되고, r 및 s는 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_b$ 는  $C_3-C_8$ 시클로알킬,  $C_2-C_7$ 단일 고리형 헤테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$ 이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 아릴, 및 헤�테로아릴로부터 선택되고; (e)와 (f)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$ 알킬,  $C_1-C_4$ 알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$ 알킬)아미노,  $C_1-C_2$ 할로알킬,  $C_1-C_2$ 할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

## 청구항 80.



제 79항에 있어서, 상기 식

이 식 (i)의 기인 것을 특징으로 하는 화합물 또는 염:

헤테로원자인 J가 식 II에서 식 (i)의 기의 부착 지점에 인접하도록 배향된 헤테로아릴기, 즉 피리딜, 피리미디닐, 티에닐, 피롤릴, 푸라닐, 피라졸릴, 이미다졸릴, 티아졸릴, 트리아졸릴, 티아디아졸릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 벤조푸라닐, 벤조티아졸릴, 벤조티오페닐, 벤조옥사디아졸릴, 벤조[d]옥사졸릴, 디히드로벤조디옥시닐, 인돌릴, 피라졸로피리미디닐, 또는 티에닐피라졸릴기이고, 식 (i)의 기는 다음: (a) 할로겐, 히드록시, 시아노, 아미노, 니트로, 옥소,  $-COOH$ ,  $-CONH_2$ ,  $-SO_2NH_2$ ,  $-SH$ ,  $C_1-C_2$  할로알킬, 및  $C_1-C_2$  할로알콕시, (b)  $C_1-C_6$  알킬,  $C_2-C_6$  알케닐,  $C_2-C_6$  알카닐,  $C_1-C_6$  알콕시,  $C_2-C_6$  알카노일, 및  $C_1-C_8$  알콕시카르보닐, 및 (c)  $-GR_a$ 로부터 독립적으로 선택되는 0 내지 5개의 치환기로 치환되는데, 이 때 G는  $-(CH_2)_n-$ ,  $C_2-C_4$  알케닐,  $C_2-C_4$  알카닐,  $-(CH_2)_nO(CH_2)_m-$ , 및  $-(CH_2)_nN(CH_2)_m-$ 으로부터 선택되고, n 및 m은 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_a$ 는  $C_3-C_8$  시클로알킬, 피페리디닐, 피페라지닐, 모르폴리닐, 테트라히드로이소퀴놀리닐, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 페닐, 피리딜, 벤조티오페닐, 및 벤조푸라닐로부터 선택되고, 상기 (b)와 (c)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$  알킬,  $C_1-C_4$  알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$  알킬)아미노,  $C_2-C_4$  알카노일,  $C_1-C_4$  알콕시카르보닐,  $C_1-C_2$  할로알킬,  $C_1-C_2$  할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환되며;

J는 S, O 또는  $NR_3$ 이고,  $R_3$ 은

(d) 수소,

(e)  $C_1-C_6$  알킬, 또는

(f)  $-LR_b$ 이고, 이 때 L은  $-(CH_2)_r-$ ,  $C_2-C_4$  알케닐,  $C_2-C_4$  알카닐,  $-(CH_2)_rO(CH_2)_s-$ , 및  $-(CH_2)_rN(CH_2)_s-$ 로부터 선택되고, r 및 s는 독립적으로 0, 1, 2, 3, 또는 4이며;  $R_b$ 는  $C_3-C_8$  시클로알킬,  $C_2-C_7$  단일 고리형 헤테로시클로알킬,  $C_5-C_{10}$  이중 고리형 헤�테로시클로알킬, 인다닐, 테트라히드로나프틸, 아릴, 및 헤�테로아릴로부터 선택되고; (e)와 (f)의 각각은 할로겐, 히드록시, 아미노,  $C_1-C_4$  알킬,  $C_1-C_4$  알콕시, 모노- 및 디- $(C_1-C_4$  알킬)아미노,  $C_1-C_2$  할로알킬,  $C_1-C_2$  할로알콕시, 및 페닐로부터 독립적으로 선택된 0 내지 5개의 치환기로 치환된다.

## 청구항 81.

다음의 화합물로부터 선택되는 화합물 또는 그것의 약제학적으로 허용될 수 있는 염:

1-(푸란-2-카르보닐)-3-(4-벤조[d]티아졸-2-일-페닐)-티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-[5-(벤조[d]옥사졸-2-일)-2-메틸]페닐티오우레아;

1-(3-(벤조[d]티아졸-2-일)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레아;

1-(4-(벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)-3-프로피오닐티오우레아;

1-(피리딘-3-카르보닐)-3-(4-벤조[d]티아졸-2-일-페닐)-티오우레아;

1-[3-(2-클로로페닐-5-메틸-이소옥사졸-4-일)-카르보닐]-3-(4-이소프로필페닐)티오우레아;

부틸 4-(3-(2-페녹시아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-아세틸티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(2-(3-클로로페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(3-페녹시프로파노일)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(2-(나프탈렌-3-일옥시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(벤조푸란-2-일-카르보닐)티오우레이도)벤조에이트;

에틸 2-(4-(3-(2-페녹시아세틸)티오우레이도)페닐)벤조에이트;

에틸 4-(3-(2-페녹시아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(2-메톡시아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(2-(2,4-디클로로페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(2-(4-(벤질옥시)페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(2-(2-메톡시페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(o-톨릴옥시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(2-(2,4,6-트리클로로페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(3,4-디클로로페닐)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트;

1-(3,4-디클로로페닐-카르보닐)-3-(3-트리플루오로메틸페닐)티오우레이아;

1-(3,4-디클로로페닐-카르보닐)-3-(3-벤즈옥시-페닐)티오우레이아;

1-(3,4-디클로로페닐-카르보닐)-3-(3-(5-메틸푸란-2-일)-페닐)티오우레이아;

부틸 4-(3-(나프타-2-일)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(4-시아노페닐)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(메틸아세테이트)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트;

1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-(페녹시)-페닐)티오우레이아;

부틸 4-(3-(2-(3,4-디클로페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

1-(4-부틸페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

(아미노-(3-(벤질옥시)페닐)메탄티오카바모일)메틸 아세테이트;

1-(3-(메틸티오)프로파노일)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레이아;

1-(2-(2-클로로페녹시)아세틸)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레이아;

부틸 4-(3-(나프트-1-일)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트;

(S)-1-(아미노-N-p-(부틸아세테이트)메탄티오카바모일)에틸 아세테이트;

부틸 4-(3-(2-(2-메톡시에톡시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

(아미노N-(4-시클로헥실페닐)메탄티오카바모일)(페닐)메틸 아세테이트;

에틸 3-(아미노-N-(4-시클로헥실페닐)메탄티오카바모일)프로파노에이트;

1-부티릴-3-(4-시클로헥실페닐)티오우레이아;

(S)-1-(아미노-N-(4-시클로헥실페닐)메탄티오카바모일)에틸 아세테이트;

1-(3-(벤질옥시)페닐)-3-(2-히드록시아세틸)티오우레이아;

부틸 4-(3-(2-(2,6-디클로로페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(2-(3-메톡시페녹시)아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

1-[(1-메틸이미다졸-2-일)-카르보닐]-3-(3-벤즈옥시-페닐)티오우레이아;

tert-부틸 2-(아미노N-(3-(벤질옥시)페닐)메탄티오카바모일)피롤리돈-1-카르복실레이트;

부틸 4-(3-(피롤리딘-1-일)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트;

부틸 4-(3-(1-메틸-벤조푸란-2-일)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트;

1-(4-헥실페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-(4-(펜틸옥시)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-펜틸옥시)-페닐)티오우레이아;

1-(4-펜틸페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-펜틸)-페닐)티오우레이아;

1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-펜틸옥시)-페닐)티오우레이아;

1-(4-부톡시페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-페닐)-페닐)티오우레이아;

1-(2-페녹시아세틸)-3-(3-페닐)-페닐티오우레이아;

이소프로필 4-(3-(벤조푸란-2-일)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트;

1-(2-페녹시아세틸)-3-(4-플루오로-페닐)-페닐티오우레이아;

1-(3-벤질페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-벤질)-페닐)티오우레이아;

1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-벤질)-페닐)티오우레이아;

1-(4-(p-톨릴옥시)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

이소부틸 4-(3-(벤조푸란-2-일)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트;

이소부틸 4-(3-(2-페녹시아세틸)티오우레이도)벤조에이트;

1-(2-(페닐메타논)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-(3-(페닐카바모일)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-(3-(2-메틸파리미딘-4-일)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-(4-(4-클로로페녹시)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(2-클로로페녹시)-페닐)티오우레이아;

1-(4-(3,4-디히드로이소퀴놀린-2-(1H)-일)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-(3-플루오로-4-(옥타히드로퀴놀린-1(2H)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-(3-플루오로-4-(피페리딘-1-일)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-플루오로-4-(피페리딘-1-일)페닐)-페닐)티오우레이아;

1-(3-(3-메톡시벤질옥시)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(3-메톡시벤질옥시))페닐)-페닐)티오우레이아;

1-(3-(2-메톡시벤질옥시)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(2-메톡시벤질옥시))페닐)-페닐)티오우레이아;

1-(3-(4-메톡시벤질옥시)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-시클로헥실메톡시)페닐)-티오우레이아;

1-(3-(시클로헥실메톡시)페닐)-3-(2-페녹시아세틸)티오우레이아;

1-((벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-(5,6-디히드로피리딘-1(2H)-일))페닐)-티오우레이아;

1-((5-메톡시-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-벤질옥시-페닐)-티오우레이아;

부틸 4-(3-(5-클로로-벤조푸란-2-일)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트;

1-(7-메톡시-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-메톡시벤질옥시)페닐)-페닐)티오우레이아;

1-(2,3,4-테트라히드로나프탈렌-2-일-카르보닐)-3-(3-메톡시벤질옥시)페닐)-페닐)티오우레이아;

1-(2-(4-(트리플루오로메톡시)페녹시)아세틸)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레이아;

1-(3-(벤질옥시)페닐)-3-(2-(피리딘-3-일옥시)아세틸)티오우레이아;

1-(4-옥소-4-H-크로멘-2-일-카르보닐)-3-(3-메톡시벤질옥시)페닐)-페닐)티오우레이아;

1-(3-(벤질옥시)페닐)-3-(2-(피리딘-2-일옥시)아세틸)티오우레이아;

1-(피리딘-2-일-카르보닐)-3-(3-메톡시벤질옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

1-(3-클로로-벤조[b]티오펜-2-일-카르보닐)-3-(3-에톡시벤질옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

1-(4-트리플루오로메톡시-페닐-카르보닐)-3-(3-에톡시벤질옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

1-(5-메틸이소옥사졸-3-일-카르보닐)-3-(3-에톡시벤질옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

1-(2-메틸-5-페닐-푸란-3-일-카르보닐)-3-(3-에톡시벤질옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

1-(4-트리플루오로메틸-페닐-카르보닐)-3-(3-에톡시벤질옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

1-(3-클로로-벤조[b]티오펜-2-일-카르보닐)-3-(3-페닐옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

1-(4-트리플루오로메톡시페닐-카르보닐)-3-(3-페닐옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

1-(3,5-디메틸이소옥사졸-4-일-카르보닐)-3-(3-페닐옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

1-(5-메틸이소옥사졸-3-일-카르보닐)-3-(3-페닐옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

1-(4-트리플루오로메틸페닐-카르보닐)-3-(3-페닐옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

(S)-1-(아미노-N-(3-(벤질옥시)페닐)메탄티오카바모일)에틸 아세테이트;

(S)-1-(아미노-N-(3-(페녹시페닐)메탄티오카바모일)에틸 아세테이트;

(S)-1-(아미노-N-(3-(벤질-페닐)메탄티오카바모일)에틸 아세테이트;

에틸 1-(2-플루오로-4-(3-(벤조푸란-2-일-카르보닐)티오우레이도)페닐)-4-페닐피페리딘-4-카르복실레이트;

1-(4-트리플루오로메틸페닐-카르보닐)-3-(2-페닐벤조[d][1,3]디옥솔-6-일)페닐)티오우레아;

1-(3-클로로-메틸벤조[b]티오펜-2-일-카르보닐)-3-(3-페닐벤조[d][1,3]디옥솔-6-일)페닐)티오우레아;

1-(4-트리플루오로메톡시페닐-카르보닐)-3-(2-페닐벤조[d][1,3]디옥솔-6-일)페닐)티오우레아;

1-(5-메틸이소옥사졸-3-일-카르보닐)-3-(2-페닐벤조[d][1,3]디옥솔-6-일)페닐)티오우레아;

1-(3-((R)-1-페닐에톡시)페닐)-3-(4-트리플루오로메틸페닐-카르보닐)티오우레아;

1-(3-((R)-1-페닐에톡시)페닐)-3-(3-클로로-메틸벤조[b]티오펜-2-일-카르보닐)티오우레아;

1-(3-((R)-1-페닐에톡시)페닐)-3-(4-트리플루오로메톡시-페닐-카르보닐)티오우레아;

1-(3-((R)-1-페닐에톡시)페닐)-3-(5-메틸이소옥사졸-3-일-카르보닐)티오우레아;

1-(3-((S)-1-페닐에톡시)페닐)-3-(4-트리플루오로메틸페닐-카르보닐)티오우레아;

1-(3-((S)-1-페닐에톡시)페닐)-3-(4-트리플루오로메톡시페닐-카르보닐)티오우레아;

1-(3-((S)-1-페닐에톡시)페닐)-3-(5-메틸이소옥사졸-3-일-카르보닐)티오우레아;

1-(3-(페네틸옥시)페닐)-3-(4-트리플루오로메틸페닐-카르보닐)티오우레아;

1-(3-(페네틸옥시)페닐)-3-(3-클로로-메틸벤조[b]티오펜-2-일-카르보닐)티오우레아;

1-(3-(페네틸옥시)페닐)-3-(4-트리플루오로메톡시페닐-카르보닐)티오우레아;

1-(3-(페네틸옥시)페닐)-3-(5-디메틸이소옥사졸-4-일-카르보닐)티오우레아;

1-(3-(2,3-디히드로-1H-인덴-2-일옥시)페닐)-3-(4-트리플루오로메틸페닐-카르보닐)티오우레아;

1-(3-(2,3-디히드로-1H-인덴-2-일옥시)페닐)-3-(4-트리플루오로메톡시페닐-카르보닐)티오우레아;

1-(3-(2,3-디히드로-1H-인덴-2-일옥시)페닐)-3-(5-디메틸이소옥사졸-4-일-카르보닐)티오우레아;

1-(3-(2,3-디히드로-1H-인덴-2-일옥시)페닐)-3-(5-메틸이소옥사졸-3-일-카르보닐)티오우레아;

1-(2-페닐벤조[d][1,3]디옥솔-6-일)-3-(벤조푸란-2-일-카르보닐)티오우레아;

1-(3-((S)-1-페닐에톡시)페닐)-3-(벤조푸란-2-일-카르보닐)티오우레아;

1-(3-(페네틸옥시)페닐)-3-(벤조푸란-2-일-카르보닐)티오우레아;

1-(3-(2,3-디히드로-1H-인덴-2-일옥시)페닐)-3-(벤조푸란-2-일-카르보닐)티오우레아;

1-(3-((R)-1-페닐에톡시)페닐)-3-(벤조푸란-2-일-카르보닐)티오우레아;

1-(2,4-디메틸티아졸-5-일-카르보닐)-3-(페닐옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

1-(1-메틸-피롤-2-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(3-(페네틸옥시)페닐)-3-((2,7-디메틸피라졸로[1,5-a]피리미딘-6-일)-카르보닐)-티오우레아;

1-(3-(페네틸옥시)페닐)-3-(1-에틸-3-메틸-1H-피라졸-5-일-카르보닐)-티오우레아;

1-(3-(2,3-디히드로-1H-인덴-2-일옥시)페닐)-3-(2,4-디메틸티아졸-5-일-카르보닐)티오우레아;

1-(3-(2,3-디히드로-1H-인덴-2-일옥시)페닐)-3-((2,7-디메틸티아졸로[1,5-a]피리미딘-6-일)-카르보닐)티오우레아;

1-(3-(2,3-디히드로-1H-인덴-2-일옥시)페닐)-3-(1-에틸-3-메틸-1H-피라졸-5-일)-카르보닐)티오우레아;

1-(4-메틸-1,2,3-티아디아졸-5-일-카르보닐)-3-(3-페닐옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

1-(벤조[d]티아졸-2-일-카르보닐)-3-(3-페닐옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

1-(4-메틸-1,2,3-티아디아졸-5-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(벤조[d]티아졸-2-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-플루오로-5-펜톡시-페닐)티오우레아;

1-(2-메틸-피리딘-3-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(1-페닐-1H-피라졸-5-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(1-페닐-1H-피라졸-5-일)-3-((3-페닐옥시)페닐)-페닐)티오우레아;

1-(2-페닐벤조[d][1,3]디옥솔-6-일)-3-(1-페닐-1H-피라졸-5-일-카르보닐)티오우레아;

1-(1-페닐-1H-피라졸-5-일)-3-(4-펜톡시-페닐)-페닐)티오우레아;

1-(1-페닐-1H-피라졸-5-일)-3-((3-페닐옥시-페닐)-페닐)티오우레아;

1-(메틸벤조[b]티오펜-2-일-카르보닐)-3-((4-펜톡시-페닐)-페닐)티오우레아;

1-(이소옥사졸-5-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(이소옥사졸-5-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)페닐)티오우레아;

1-(이소옥사졸-5-일-카르보닐)-3-(4-(펜틸)페닐)티오우레아;

1-(이소옥사졸-5-일-카르보닐)-3-(4-(펜톡시)페닐)티오우레아;

1-(이소옥사졸-5-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)페닐)티오우레아;

1-(이소옥사졸-5-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)페닐)티오우레아;

1-((3-(트리플루오로메틸)페닐)푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-((3-(트리플루오로메틸)페닐)푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)페닐)티오우레아;

1-(5-브로모-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(5-브로모-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)페닐)티오우레아;

1-(5-니트로-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(5-니트로-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)페닐)티오우레아;

1-(5-브로모-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-(펜틸페닐)티오우레아;

1-(5-브로모-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-(펜톡시페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-(헥스-1-이닐)페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(2-(피리딘-3-일)에티닐)페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(2-(피리딘-3-일)에틸)페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(피리딘-2-일)페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(피리딘-2-일-옥시)-페닐)티오우레아;

1-(3,5-디메틸이소옥사졸-4-일-카르보닐)-3-(4-(헥스-1-이닐)페닐)티오우레아;

1-(3,5-디메틸이소옥사졸-4-일-카르보닐)-3-(3-(2-(피리딘-3-일)에티닐)페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-((3-(트리플루오로메틸)벤질옥시)-페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-((1-메틸피페리딘-4-일)메톡시)-3-플루오로페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(트리플루오로메틸)-4-(피페리딘-1-일)페닐)티오우레아;

1-(1,3-디메틸-1H-티에노[2,3-c]피라졸-5-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)페닐)티오우레아;

1-(5-(2-메틸티아졸로-4-일)이소옥사졸-3-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(5-(2-메틸티아졸로-4-일)이소옥사졸-3-일-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아;

1-(5-(2-메틸티아졸로-4-일)이소옥사졸-3-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-(5-(2-메틸티아졸로-4-일)이소옥사졸-3-일-카르보닐)-3-(4-펜톡시-페닐)티오우레아;

1-(1,5-디메틸-1H-피라졸-3-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(1,5-디메틸-1H-피라졸-3-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)페닐)티오우레아;

1-(1,5-디메틸-1H-피라졸-3-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-(1-메틸-3-tert-부틸-1H-피라졸-3-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(1-메틸-3-tert-부틸-1H-피라졸-3-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)페닐)티오우레아;

1-(1-메틸-3-tert-부틸-1H-피라졸-3-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-(2-트리플루오로메틸-5-메틸-푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(2-트리플루오로메틸-5-메틸-푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)페닐)티오우레아;

1-(2-트리플루오로메틸-5-메틸-푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-(벤조[c][1,2,5]옥사디아졸-5-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(벤조[c][1,2,5]옥사디아졸-5-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)페닐)티오우레아;

1-(벤조[c][1,2,5]옥사디아졸-5-일-카르보닐)-3-(4-(펜틸)페닐)티오우레아;

1-(벤조[c][1,2,5]옥사디아졸-5-일-카르보닐)-3-(4-(펜톡시)페닐)티오우레아;

1-(2,7-디메틸피라졸로[1,5-a]피리미딘-6-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)-페닐)티오우레아;

1-(2,7-디메틸피라졸로[1,5-a]피리미딘-6-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)-페닐)티오우레아;

1-(3-메틸이소옥사졸-4-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)-페닐)티오우레아;

1-(3-메틸이소옥사졸-4-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)-페닐)티오우레아;

1-(3-메틸이소옥사졸-4-일-카르보닐)-3-(4-(펜틸)-페닐)티오우레아;

1-(3-메틸이소옥사졸-4-일-카르보닐)-3-(4-(펜톡시)-페닐)티오우레아;

1-(5-메틸-2-페닐-2H-1,2,3-트리아졸-4-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)-페닐)티오우레아;

1-(5-메틸-2-페닐-2H-1,2,3-트리아졸-4-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)-페닐)티오우레아;

1-(5-클로로-3-메틸벤조[b]티오펜-2-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)-페닐)티오우레아;

1-(5-클로로-3-메틸벤조[b]티오펜-2-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)-페닐)티오우레아;

1-(1,3-디메틸-1H-피라졸-3-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(1,3-디메틸-1H-피라졸-3-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)페닐)티오우레아;

1-(1,3-디메틸-1H-피라졸-3-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-(2-(파리딘-3-일)티아졸-4-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(2-(파리딘-3-일)티아졸-4-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)페닐)티오우레아;

1-(2-(파리딘-3-일)티아졸-4-일-카르보닐)-3-(4-(펜틸)페닐)티오우레아;

1-(2-(파리딘-3-일)티아졸-4-일-카르보닐)-3-(4-(펜톡시)페닐)티오우레아;

1-(4-메톡시-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-(벤질옥시)-페닐)티오우레아;

1-(4-메톡시-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-플루오로-4-펜톡시-페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(파리딘-3-일)메틸)페닐)티오우레아;

1-(5-요오도-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(5-페닐-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(5-(2-파리딜)벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)페닐)티오우레아;

1-(3-프로폭시-파리딘-2-일-카르보닐)-3-(4-(펜틸)페닐)티오우레아;

1-(2,5-디클로로티오펜-3-일-카르보닐)-3-(4-(펜톡시)-페닐)티오우레아;

1-(3-메틸-5-(메틸티오)-4-비닐티오펜-2-일-카르보닐)-3-(4-(펜톡시)-페닐)티오우레아;

1-(3-메틸-5-(메틸티오)-4-비닐티오펜-2-일-카르보닐)-3-(4-(벤질옥시)-페닐)티오우레아;

1-(5-(메틸티오)-티오펜-2-일-카르보닐)-3-(4-(벤질옥시)-페닐)티오우레아;

1-(5,7-디메틸피라졸로[1,5-a]파리미딘-2-일-카르보닐)-3-(4-(벤질옥시)-페닐)티오우레아;

1-(2,5-디클로로티오펜-3-일-카르보닐)-3-(4-(페녹시)-페닐)티오우레아;

1-(3-메틸-5-(메틸티오)-4-비틸티오펜-2-일-카르보닐)-3-(4-(페녹시)-페닐)티오우레아;

1-(5-(메틸티오)-티오펜-2-일-카르보닐)-3-(4-(페녹시)-페닐)티오우레아;

1-(7-플루오로-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-(펜톡시)-페닐)티오우레아;

1-(7-플루오로-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)-페닐)티오우레아;

1-(2-(1,3-디옥소이소인돌린-2-일-카르보닐)-3-(3-페녹시페닐)티오우레아;

1-(2-(1,3-디옥소이소인돌린-2-일-카르보닐)-3-(3-벤질옥시페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)메틸-페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-(페닐아미노)메틸-페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-(N-벤질-N-메틸아미노)3-플루오로페닐)티오우레아;

페닐 3-(3-((벤조푸란-2-일)-카르보닐)티오우레이도)벤조에이트;

1-(4-시아노페닐-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)티오우레아;

1-(4-시아노페닐-카르보닐)-3-(4-(펜틸옥시)티오우레아;

1-(4-시아노페닐-카르보닐)-3-(3-(페녹시-페닐)티오우레아;

1-(퀴녹살린-2-일-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아;

1-(퀴녹살린-2-일-카르보닐)-3-(4-(펜톡시-페닐)티오우레아;

1-(4-트리플루오로메톡시페닐-카르보닐)-3-(4-(펜틸-페닐)티오우레아;

1-(4-트리플루오로메톡시페닐-카르보닐)-3-(4-(펜톡시-페닐)티오우레아;

1-(4-트리플루오로메틸페닐-카르보닐)-3-(4-(펜틸-페닐)티오우레아;

1-(4-트리플루오로메틸페닐-카르보닐)-3-(4-(펜틸-페닐)티오우레아;

1-(5-시아노-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아;

1-(5-시아노-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-(펜틸-페닐)티오우레아;

1-(4-메틸-1,2,3-티아디아졸-5-일-카르보닐)-3-(4-(펜톡시-페닐)티오우레아;

1-(4-메틸-1,2,3-티아디아졸-5-일-카르보닐)-3-(4-(펜톡시-페닐)티오우레아;

부틸 4-(3-(4-메틸-1,2,3-티아디아졸-5-일-)카르보닐)티오우레이도)벤조에이트;

1-(파라진-2-일-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아;

1-(피라진-2-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-(피라진-2-일-카르보닐)-3-(4-펜톡시-페닐)티오우레아;

1-(3-플루오로-4-(펜틸옥시)페닐)-3-(2-(1,3-디옥소이소인돌린-2-일)아세틸)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-트리플루오로메틸-4-펜톡시-페닐)티오우레아;

1-(1-벤질-1H-테트라졸-5-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)-페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-(N-메틸-N-펜틸아미노)-3-플루오로페닐)티오우레아;

1-(1-벤질-1H-테트라졸-5-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)-페닐)티오우레아;

1-(6-트리플루오로메틸-피리드-3-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-(6-트리플루오로메틸-피리드-3-일-카르보닐)-3-(4-펜톡시-페닐)티오우레아;

1-(3-트리플루오로메틸-페닐-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아;

1-(3-트리플루오로메틸-페닐-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-(3-트리플루오로메틸-페닐-카르보닐)-3-(4-펜톡시-페닐)티오우레아;

1-(3-트리플루오로메톡시-페닐-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-(3-트리플루오로메톡시-페닐-카르보닐)-3-(4-펜톡시-페닐)티오우레아;

1-(2-클로로-5-트리플루오로메톡시-페닐-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-(3-디플루오로메틸-페닐-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아;

1-(3-디플루오로메틸-페닐-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아;

1-(5-(트리플루오로메틸)-2-페닐옥사졸-4-일-카르보닐)-3-(3-(벤질옥시)-페닐)티오우레아;

1-(5-(트리플루오로메틸)-2-페닐옥사졸-4-일-카르보닐)-3-(3-(페녹시)-페닐)티오우레아;

1-(5-(2-클로로-5-트리플루오로메틸페닐)-푸란-2-일-카르보닐)-3-(4-(펜톡시)-페닐)티오우레아;

1-(3-트리플루오로메틸-4-메톡시-페닐-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아;

1-(3-트리플루오로메틸-4-클로로-페닐-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-(3-트리플루오로메틸-4-클로로-페닐-카르보닐)-3-(4-펜톡시-페닐)티오우레아;

1-(3-트리플루오로메틸-4-메틸-페닐-카르보닐)-3-(3-벤질옥시-페닐)티오우레아;

1-(3-트리플루오로메틸-4-메틸-페닐-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아;

1-(3-트리플루오로메틸-4-메틸-페닐-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-((5-아세트아미도벤조푸란-2-일)카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-아세틸-3-(3-페녹시페닐)티오우레아;

1-아세틸-3-(4-(펜틸옥시)페닐)티오우레아;

1-아세틸-3-(4-펜틸페닐)티오우레아;

1-(디메틸아미노-아세틸)-3-(3-페녹시페닐)티오우레아;

1-(디메틸아미노-아세틸)-3-(3-벤질옥시페닐)티오우레아;

1-(3,5-디메틸이소옥사졸-4-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-((2,3,4,6-펜타-플루오로페녹시)-페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(9-메틸-9H-플루오렌-7-일)티오우레아;

펜틸 2-페닐-4-(3-(벤조푸란-2-일)티오우레이도)벤조에이트;

1-(3-파리드-3-일-카르보닐)-3-(3-벤질옥시-페닐)티오우레아;

1-(3-파리드-3-일-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아;

1-(3-파리드-3-일-카르보닐)-3-(4-펜톡시-페닐)티오우레아;

1-(3-파리드-3-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아;

1-(4-페닐부타노일)-3-(3-페녹시페닐)티오우레아;

1-(4-페닐부타노일)-3-(3-벤조일옥시페닐)티오우레아;

1-(2-모르폴리노아세틸)-3-(3-페녹시페닐)티오우레아;

1-(2-모르폴리노아세틸)-3-(4-(펜틸옥시)페닐)티오우레아;

1-(2-모르폴리노아세틸)-3-(4-(펜틸)페닐)티오우레아;

1-(4-(펜틸옥시)페닐)-3-(2-(파페리딘-1-일)아세틸)티오우레아;

1-(N-메틸-N-페닐아미노-아세틸)-3-(3-벤질옥시페닐)티오우레아;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(6-펜톡시-파리드-3-일)티오우레아;

1-(3-파리드-3-일-카르보닐)-3-(3-벤질옥시-페닐)티오우레아 염산염;

1-(3-파리드-3-일-카르보닐)-3-(3-페녹시-페닐)티오우레아 염산염;

1-(3-파리드-3-일-카르보닐)-3-(4-펜틸-페닐)티오우레아 염산염;

1-(벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(트리플루오로메틸티오-페닐)티오우레아;

1-(3-(파페리딘-1-일)프로파노일)-3-(4-펜틸페닐)티오우레아;

1-(3-(파페리딘-1-일)프로파노일)-3-(4-(펜틸옥시)페닐)티오우레아;

1-(3-(피페리딘-1-일)프로파노일)-3-(3-페녹시페닐)티오우레아;

1-(3-모르폴리노프로파노일)-3-(4-(펜틸옥시)페닐)티오우레아;

1-(1-메틸피페리딘-3-일-카르보닐)-3-(4-(펜틸옥시)페닐)티오우레아;

1-(1-메틸피페리딘-3-일-카르보닐)-3-(4-(펜틸옥시)페닐)티오우레아;

1-(2-(2-메틸피페리딘-1-일)아세틸)-3-(4-(펜틸옥시)페닐)티오우레아;

1-(2-옥소-4-페닐-피롤리딘-1-일카르보닐)-3-(3-벤질옥시-페닐)티오우레아; 및

1-(5-트리플루오로메톡시-벤조푸란-2-일-카르보닐)-3-(3-벤질옥시-페닐)티오우레아.

#### 청구항 82.

제 1항 내지 81항 중 어느 한 항에 따르는 화합물 또는 염을 약제학적으로 허용될 수 있는 담체, 희석제, 또는 부형제와 함께 포함하는 약제학적 조성물.

#### 청구항 83.

제 82항에 있어서, 상기 조성물이 주사용 유체, 에어로솔, 크림, 젤, 환, 캡슐, 시럽, 정제, 점안 용액, 또는 경피용 패치로서 제형되는 것을 특징으로 하는 약제학적 조성물.

#### 청구항 84.

용기 안에 담겨 있고, 추가로 C형 간염 감염으로 고생하는 환자를 치료하기 위한 조성물을 사용하기 위한 지시사항을 포함하고 있는 제 82항의 약제학적 조성물을 포함하는 패키지.

#### 청구항 85.

HCV 복제의 레플리콘 분석에서  $10 \mu\text{m}$  이하의 EC<sub>50</sub>을 나타내는 제 1항의 화합물 또는 염.

#### 청구항 86.

HCV 복제의 레플리콘 분석에서  $1 \mu\text{m}$  이하의 EC<sub>50</sub>을 나타내는 제 1항의 화합물 또는 염.

#### 청구항 87.

치료가 필요한 환자에게 제 1항의 화합물 또는 염의 치료적으로 효과적인 양을 투여하는 것으로 이루어지는 C형 간염 감염의 치료 방법.

#### 청구항 88.

제 87항에 있어서, 상기 환자가 사람인 것을 특징으로 하는 방법.

### 청구항 89.

제 88항에 있어서, 상기 치료적으로 효과적인 양은 환자의 혈액 또는 혈청에서 HCV 항체의 수를 상당히 감소시키기에 충분한 양인 것을 특징으로 하는 방법.

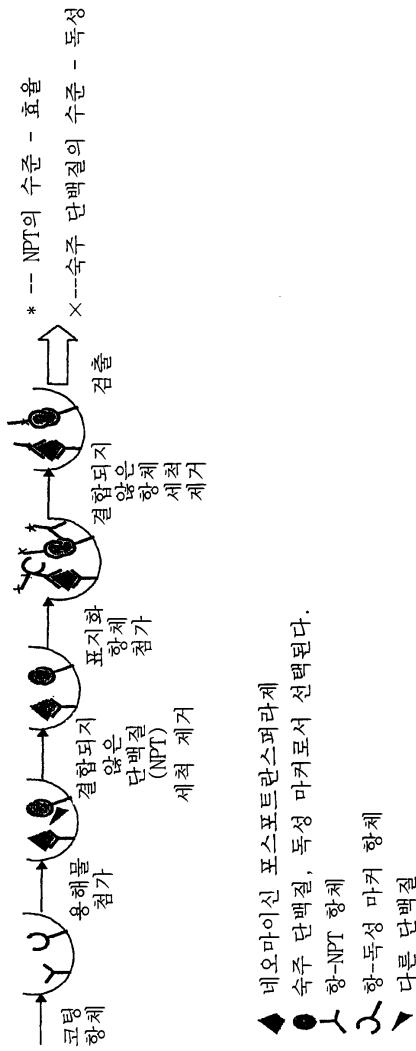
### 청구항 90.

HCV 레플리콘 복제를 생체내에서 억제하기에 충분한 농도의 제 1항의 화합물 또는 염을 HCV로 감염된 환자에게 투여하는 것으로 이루어지는, 생체내에서 HCV 복제를 억제하는 방법.

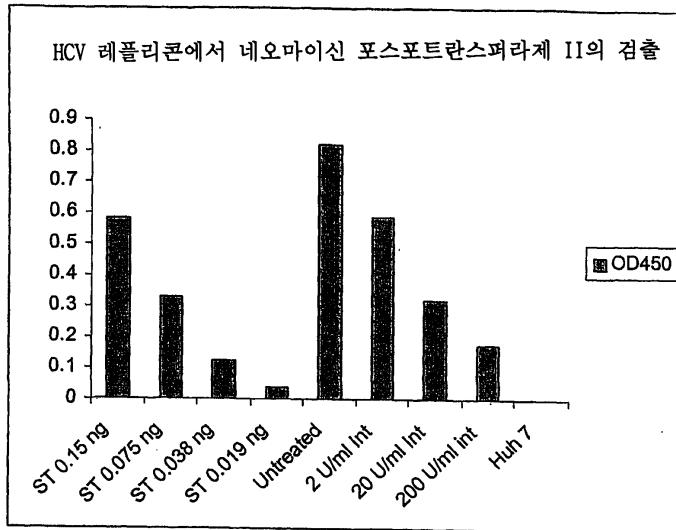
**도면**

도면1

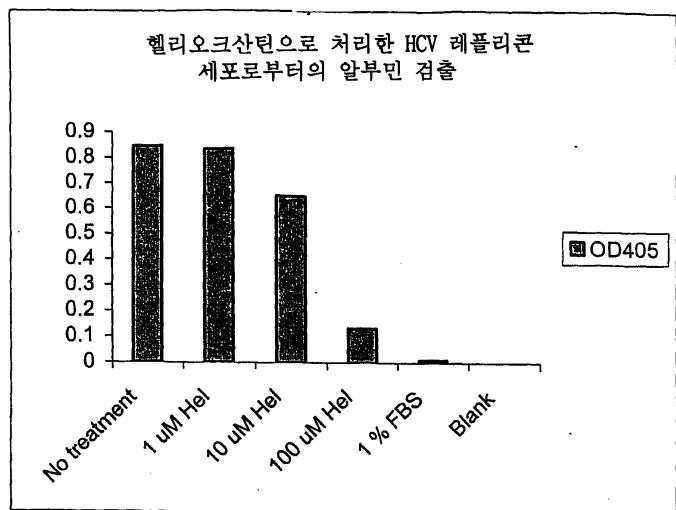
HCV 레플리콘을 사용한 HCV에 대한 화합물의 활성의 평가에 대한 분석



## 도면2



## 도면3



## 도면4

