

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 3 部門第 2 区分

【発行日】平成24年9月6日 (2012.9.6)

【公表番号】特表2011-500801 (P2011-500801A)

【公表日】平成23年1月6日 (2011.1.6)

【年通号数】公開・登録公報2011-001

【出願番号】特願2010-530989 (P2010-530989)

【国際特許分類】

C 07 D 401/14 (2006.01)

A 61 P 43/00 (2006.01)

A 61 P 29/00 (2006.01)

A 61 P 9/00 (2006.01)

A 61 P 17/06 (2006.01)

A 61 P 27/02 (2006.01)

A 61 P 13/12 (2006.01)

A 61 P 19/10 (2006.01)

A 61 P 19/02 (2006.01)

A 61 P 27/12 (2006.01)

A 61 P 35/00 (2006.01)

A 61 P 15/00 (2006.01)

A 61 P 5/00 (2006.01)

A 61 P 11/00 (2006.01)

A 61 P 17/00 (2006.01)

A 61 P 13/08 (2006.01)

A 61 P 1/04 (2006.01)

A 61 P 35/02 (2006.01)

A 61 K 31/502 (2006.01)

C 07 D 403/14 (2006.01)

C 07 D 403/12 (2006.01)

C 07 D 471/18 (2006.01)

A 61 K 31/439 (2006.01)

C 07 D 405/14 (2006.01)

【F I】

C 07 D 401/14 C S P

A 61 P 43/00 1 1 1

A 61 P 29/00 1 0 1

A 61 P 9/00

A 61 P 17/06

A 61 P 27/02

A 61 P 13/12

A 61 P 19/10

A 61 P 19/02

A 61 P 27/12

A 61 P 35/00

A 61 P 15/00

A 61 P 5/00

A 61 P 11/00

A 61 P 17/00

A 61 P 13/08

A 6 1 P 1/04
 A 6 1 P 35/02
 A 6 1 K 31/502
 C 0 7 D 403/14
 C 0 7 D 403/12
 C 0 7 D 471/18
 A 6 1 K 31/439
 C 0 7 D 405/14

【手続補正書】

【提出日】平成24年7月17日(2012.7.17)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

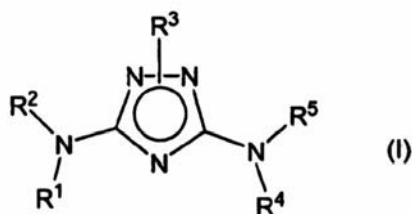
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記式 (I) で表される化合物であって：

【化 1】

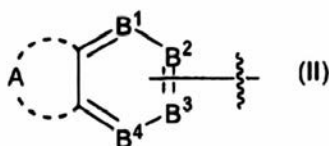


(式中：R¹、R⁴及びR⁵は独立に、水素、アルキル、アリール、アラルキル、-C(O)R⁹及び-C(O)N(R⁶)R⁷から選択され；

R²及びR³の一方は以下の1つから選択され、他方は以下の他の2つから選択され：

a) 下記式 (II) の二環アリール又は下記式 (II) の二環ヘテロアリール：

【化 2】



ここで、Aは6～10の炭素を含むアルキレン鎖、6～10の炭素を含むアルケニレン鎖、又は6～10の炭素を含むアルキニレン鎖であり、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の1又は2の炭素は任意に-NR⁹-, =N-, -O-, -S(O)_p- (ここで、pは0, 1又は2)又は-P(O)_p- (ここで、pは0, 1又は2)で置換されていてもよく、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の各炭素は独立に、任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキルシクロアルキル、シクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、=N-O-R⁶, -R¹⁰-OR⁹, -R¹⁰-O-R¹¹-OR⁹, -R¹⁰-O-R¹¹-O-R¹¹-OR⁹, -R¹⁰-O-R¹¹-CN, -R¹⁰-O-R¹¹-C(O)OR⁹, -R¹⁰-O-R¹¹-C(O)N(R⁶)R⁷, -R¹⁰-O-R¹¹-S(O)_pR⁹ (ここで、pは0, 1又は2), -R¹⁰-O-R¹¹-N(R⁶)R⁷, -R¹⁰-O-R¹¹-

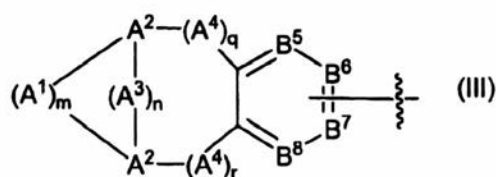
$C(NR^{12})N(R^{12})H$, $-R^{10}-OC(O)-R^9$, $-R^{10}-N(R^6)R^7$, $-R^{10}-C(O)R^9$, $-R^{10}-C(O)OR^9$, $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^8$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$, $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2), $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2), $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2), 及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択される 1 又は 2 の置換基で置換されていてもよく; そして、

B^1 , B^2 , B^3 及び B^4 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^1 , B^2 , B^3 及び B^4 の 1 つは対応する R^2 又は R^3 が結合した窒素に直接結合する炭素である;

b) 14 環原子を含む多環ヘテロアリールであって、前記環原子は任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、 $-R^{10}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-CN$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$, $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (個々で、 p は 0, 1 又は 2), $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$, $-R^{10}-OC(O)-R^9$, $-R^{10}-N(R^6)R^7$, $-R^{10}-C(O)R^9$, $-R^{10}-C(O)OR^9$, $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$, $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2), $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2), $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2), 及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択される 1 又は複数の置換基で置換されていてもよい多環ヘテロアリール; 又は

c) 下記式 (III) の架橋二環アリール又は下記式 (III) の架橋二環ヘテロアリール:

【化 3】



ここで、

m 及び n は独立に 1 ~ 4 であり;

q 及び r は独立に 0 ~ 3 であり;

A^1 , A^3 及び A^4 は各々独立に、 $C(R^8)_2$, O , $S(O)_p$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2), $P(O)_p$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2) 及び $N(R^9)$ からなる群から選択され;

各 A^2 は独立に $C(R^8)$ 及び N からなる群から選択され;

B^5 , B^6 , B^7 及び B^8 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^5 , B^6 , B^7 及び B^8 の 1 つは対応する R^2 又は R^3 が結合した窒素に直接結合する炭素であり;

R^6 及び R^7 は各々独立に、ハロゲン、アルキル、アルケニル、アルキニルハロアルキル、ハロアルケニル、ハロアルキニル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいアラルケニル、任意に置換されていてもよいアラルキニル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル

アルケニル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキニル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルケニル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルケニル、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキニル、 $-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{11}-CN$ 、 $-R^{11}-NO_2$ 、 $-R^{11}-N(R^9)_2$ 、 $-R^{11}-C(O)OR^9$ 及び $-R^{11}-C(O)N(R^9)_2$ からなる群から選択され、あるいは R^6 及び R^7 はそれらが結合する共通の窒素とともに、任意に置換されていてもよい N -ヘテロアリール又は任意に置換されていてもよい N -ヘテロシクリルを形成してもよく；

各 R^8 は独立に、水素、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $-R^{10}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2)、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2)、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2)、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2)、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択され、あるいは、隣接する炭素上の 2 つの R^8 が結合して二重結合を形成してもよく；

各 R^9 は独立に、水素、アルキル、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、ハロアルケニル、ハロアルキニル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいアラルケニル、任意に置換されていてもよいアラルキニル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルケニル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキニル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルケニル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキニル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルケニル、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキニルからなる群から選択され；

各 R^{10} は独立に、直接結合、任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルキレン鎖、任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルケニレン鎖、及び任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルキニレン鎖からなる群から選択され；

各 R^{11} は独立に、任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルキレン鎖、任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルケニレン鎖、及び任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルキニレン鎖からなる群から選択され；

各 R^{12} は、水素、アルキル、シアノ、ニトロ、又は $-OR^9$ であり；そして

各 R^{13} は独立に、水素、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $-R^{10}-OR^9$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N$ (

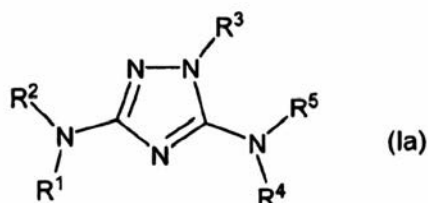
R^6) R^7 , $-R^{10}-C(O)R^9$, $-R^{10}-C(O)OR^9$, $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$, $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2), $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2), $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2), 及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択される)

単離された立体異性体又はそれらの混合物、あるいは製薬的に許容される塩の形態である化合物。

【請求項 2】

下記式 (I a) で表され：

【化 4】

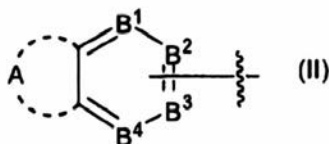


(式中： R^1 、 R^4 及び R^5 は独立に、水素、アルキル、アリール、アラルキル、 $-C(O)R^9$ 及び $-C(O)N(R^6)R^7$ から選択され；

R^2 及び R^3 の一方は以下の 1 つから選択され、他方は以下の他の 2 つから選択され；

a) 下記式 (II) の二環アリール又は下記式 (II) の二環ヘテロアリール；

【化 5】



ここで、A は 6 ~ 10 の炭素を含むアルキレン鎖、6 ~ 10 の炭素を含むアルケニレン鎖、又は 6 ~ 10 の炭素を含むアルキニレン鎖であり、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の 1 又は 2 の炭素は任意に $-NR^9-$, $=N-$, $-O-$, $-S(O)_p-$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2) 又は $-P(O)_p-$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2) で置換されていてもよく、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の各炭素は独立に、任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキルシクロアルキル、シクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $=N-OR^6$, $-R^{10}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-CN$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$, $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2), $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$, $-R^{10}-OC(O)-R^9$, $-R^{10}-N(R^6)R^7$, $-R^{10}-C(O)R^9$, $-R^{10}-C(O)OR^9$, $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^8$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$, $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2), $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2), $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2), 及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択される 1 又は 2 の置換基で置換されていてもよく；そして、

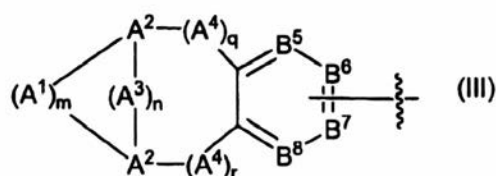
B^1 , B^2 , B^3 及び B^4 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^1 , B^2 , B^3 及び B^4 の 1 つは対応する R^2 又は R^3 が結合した窒

素に直接結合する炭素である；

b) 14環原子を含む多環ヘテロアリールであって、前記環原子は任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、 $-R^{10}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ （個々で、 p は0, 1又は2）、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ （ここで、 t は1又は2）、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ （ここで、 t は1又は2）、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ （ここで、 p は0, 1又は2）、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ （ここで、 t は1又は2）からなる群から選択される1又は複数の置換基で置換されていてもよい多環ヘテロアリール；又は

c) 下記式 (III) の架橋二環アリール又は下記式 (III) の架橋二環ヘテロアリール；

【化6】



ここで、

m 及び n は独立に1～4であり；

q 及び r は独立に0～3であり；

A^1 、 A^3 及び A^4 は各々独立に、 $C(R^8)_2$ 、 O 、 $S(O)_p$ （ここで、 p は0、1又は2）、 $P(O)_p$ （ここで、 p は0、1又は2）及び $N(R^9)$ からなる群から選択され；

各 A^2 は独立に $C(R^8)$ 及び N からなる群から選択され；

B^5 、 B^6 、 B^7 及び B^8 は各々独立に、 $=C(R^{13})$ 及び $=N$ からなる群から選択され、但し、 B^5 、 B^6 、 B^7 及び B^8 の1つは対応する R^2 又は R^3 が結合した窒素に直接結合する炭素であり；

R^6 及び R^7 は各々独立に、ハロゲン、アルキル、アルケニル、アルキニルハロアルキル、ハロアルケニル、ハロアルキニル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいアラルケニル、任意に置換されていてもよいアラルキニル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルケニル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキニル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルケニル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキニル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルケニル、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキニル、 $-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{11}-CN$ 、 $-R^{11}-NO_2$ 、 $-R^{11}-N(R^9)_2$ 、 $-R^{11}-C(O)OR^9$ 及び $-R^{11}-C(O)N(R^9)_2$ からなる群から選択され、あるいは R^6 及び R^7 はそれらが結合する共通の窒素とともに、任意に置換されていてもよい N -ヘテロアリール又

は任意に置換されていてもよいN-ヘテロシクリルを形成してもよく；

各 R^8 は独立に、水素、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $-R^{10}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ （ここで、 p は0、1又は2）、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ （ここで、 t は1又は2）、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ （ここで、 t は1又は2）、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ （ここで、 p は0、1又は2）、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ （ここで、 t は1又は2）からなる群から選択され、あるいは、隣接する炭素上の2つの R^8 が結合して二重結合を形成してもよく；

各 R^9 は独立に、水素、アルキル、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、ハロアルケニル、ハロアルキニル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいアラルケニル、任意に置換されていてもよいアラルキニル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルケニル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキニル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルケニル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキニル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルケニル、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキニルからなる群から選択され；

各 R^{10} は独立に、直接結合、任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルキレン鎖、任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルケニレン鎖、及び任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルキニレン鎖からなる群から選択され；

各 R^{11} は独立に、任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルキレン鎖、任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルケニレン鎖、及び任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルキニレン鎖からなる群から選択され；

各 R^{12} は、水素、アルキル、シアノ、ニトロ、又は $-OR^9$ であり；そして

各 R^{13} は独立に、水素、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $-R^{10}-OR^9$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ （ここで、 t は1又は2）、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ （ここで、 t は1又は2）、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ （ここで、 p は0、1又は2）、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ （ここで、 t は1又は2）からなる群から選択される）

単離された立体異性体又はそれらの混合物、あるいは製薬的に許容される塩の形態である、請求項1に記載の化合物。

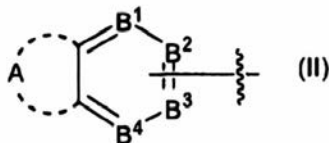
【請求項3】

前記式 (I a) において、

R^1 、 R^4 及び R^5 は各々水素であり；

R^2 は以下の下記式 (II) の二環アリール又は下記式 (II) の二環ヘテロアリールであり；

【化 7】



ここで、A は 6 ~ 10 の炭素を含むアルキレン鎖、6 ~ 10 の炭素を含むアルケニレン鎖、又は 6 ~ 10 の炭素を含むアルキニレン鎖であり、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の 1 又は 2 の炭素は任意に $-NR^9-$ 、 $=N-$ 、 $-O-$ 、 $-S(O)_p-$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2) 又は $-P(O)_p-$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2) で置換されていてもよく、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の各炭素は独立に、任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキルシクロアルキル、シクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $=N-O-R^6$ 、 $-R^{10}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2)、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^8$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2)、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2)、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2)、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択される 1 又は 2 の置換基で置換されていてもよく；そして、

B^1 、 B^2 、 B^3 及び B^4 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^1 、 B^2 、 B^3 及び B^4 の 1 つは対応する R^2 又は R^3 が結合した窒素に直接結合する炭素である；

R^3 は 14 環原子を含む多環ヘテロアリールであって、前記環原子は任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、 $-R^{10}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (個々で、 p は 0, 1 又は 2)、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2)、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2)、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2)、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択される 1 又は複数の置換基で置換されていてもよい多環ヘテロアリールである、請求項 2 に記載の化合物。

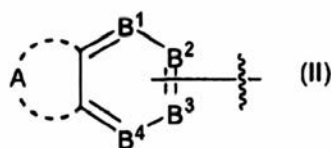
【請求項 4】

前記式 (I a) において、

R^1 、 R^4 及び R^5 は水素であり、

R^2 は下記式 (II) の二環ヘテロアリールであり：

【化 8】

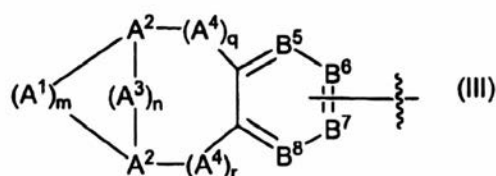


ここで、A は 6 ～ 10 の炭素を含むアルキレン鎖、6 ～ 10 の炭素を含むアルケニレン鎖、又は 6 ～ 10 の炭素を含むアルキニレン鎖であり、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の 1 又は 2 の炭素は任意に $-NR^9-$ 、 $=N-$ 、 $-O-$ 、 $-S(O)_p-$ (ここで、p は 0, 1 又は 2) 又は $-P(O)_p-$ (ここで、p は 0, 1 又は 2) で置換されていてもよく、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の各炭素は独立に、任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキルシクロアルキル、シクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $=N-O-R^6$ 、 $-R^{10}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (ここで、p は 0, 1 又は 2)、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^8$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、t は 1 又は 2)、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (ここで、t は 1 又は 2)、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、p は 0, 1 又は 2)、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、t は 1 又は 2) からなる群から選択される 1 又は 2 の置換基で置換されていてもよく；そして、

B^1 、 B^2 、 B^3 及び B^4 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^1 、 B^2 、 B^3 及び B^4 の 1 つは対応する R^2 が結合した窒素に直接結合する炭素であり；

R^3 は、下記式 (III) の架橋二環アリール又は下記式 (III) の架橋二環ヘテロアリールであり：

【化 9】



ここで、

m 及び n は独立に 1 ～ 4 であり；

q 及び r は独立に 0 ～ 3 であり；

A^1 、 A^3 及び A^4 は各々独立に、 $C(R^8)_2$ 、 O 、 $S(O)_p$ (ここで、p は 0、1 又は 2)、 $P(O)_p$ (ここで、p は 0, 1 又は 2) 及び $N(R^9)$ からなる群から選択され；

各 A^2 は独立に $C(R^8)$ 及び N からなる群から選択され；

B^5 、 B^6 、 B^7 及び B^8 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選

択され、但し、 B^5 、 B^6 、 B^7 及び B^8 の 1 つは対応する R^3 が結合した窒素に直接結合する炭素である、請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 5】

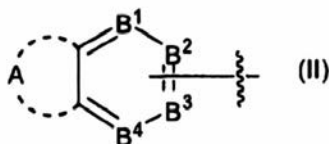
前記式 (I a) において、

R^1 、 R^4 及び R^5 は各々水素であり；

R^2 は 14 環原子を含む多環ヘテロアリールであって、前記環原子は任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、シクロアルキル、シクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、 $-R^{10}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (個々で、 p は 0, 1 又は 2)、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2)、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2)、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2)、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択される 1 又は複数の置換基で置換されていてもよい多環ヘテロアリールであり；そして

R^3 は下記式 (I I) の二環ヘテロアリールであり：

【化 10】



ここで、 A は 6 ~ 10 の炭素を含むアルキレン鎖、6 ~ 10 の炭素を含むアルケニレン鎖、又は 6 ~ 10 の炭素を含むアルキニレン鎖であり、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の 1 又は 2 の炭素は任意に $-NR^9-$ 、 $=N-$ 、 $-O-$ 、 $-S(O)_p-$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2) 又は $-P(O)_p-$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2) で置換されていてもよく、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の各炭素は独立に、任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキルシクロアルキル、シクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $=N-OR^6$ 、 $-R^{10}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2)、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^8$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2)、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2)、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2)、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択される 1 又は 2 の置換基で置換されていてもよく；そして、

B^1 、 B^2 、 B^3 及び B^4 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^1 、 B^2 、 B^3 及び B^4 の 1 つは対応する R^3 が結合した窒素に直接

結合する炭素である、請求項 2 に記載の化合物。

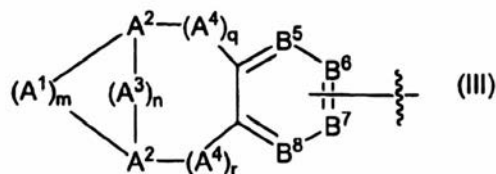
【請求項 6】

前記式 (I a) において、

R^1 、 R^4 及び R^5 は各々水素であり、

R^2 は、1 4 環原子を含む多環ヘテロアリールであって、前記環原子は任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、シクロアルキル、シクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、 $-R^{10}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (個々で、 p は 0, 1 又は 2)、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2)、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2)、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2)、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択される 1 又は複数の置換基で置換されていてもよく；そして R^3 は、下記式 (III) の架橋二環アリール又は下記式 (III) の架橋二環ヘテロアリールであり：

【化 1 1】



ここで、

m 及び n は独立に 1 ~ 4 であり；

q 及び r は独立に 0 ~ 3 であり；

A^1 、 A^3 及び A^4 は各々独立に、 $C(R^8)_2$ 、 O 、 $S(O)_p$ (ここで、 p は 0、1 又は 2)、 $P(O)_p$ (ここで、 p は 0、1 又は 2) 及び $N(R^9)$ からなる群から選択され；

各 A^2 は独立に $C(R^8)$ 及び N からなる群から選択され；

B^5 、 B^6 、 B^7 及び B^8 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^5 、 B^6 、 B^7 及び B^8 の 1 つは対応する R^3 が結合した窒素に直接結合する炭素である、請求項 2 に記載の化合物。

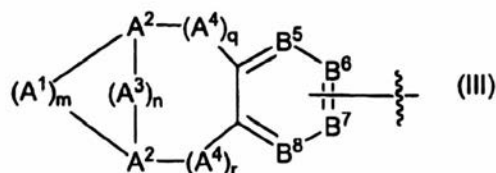
【請求項 7】

前記式 (I a) において、

R^1 、 R^4 及び R^5 は各々水素である；

R^2 は、下記式 (III) の架橋二環アリール又は下記式 (III) の架橋二環ヘテロアリールであり：

【化 1 2】



ここで、

m 及び n は独立に 1 ~ 2 であり；

q 及び r は独立に 0 ~ 3 であり；

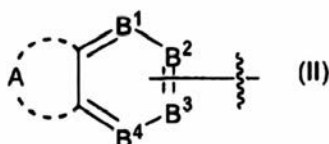
A^1 , A^3 及び A^4 は各々独立に、 $C(R^8)_2$, O , $S(O)_p$ (ここで、 p は 0、1 又は 2) , $P(O)_p$ (ここで、 p は 0、1 又は 2) 及び $N(R^9)$ からなる群から選択され；

各 A^2 は独立に $C(R^8)$ 及び N からなる群から選択され；

B^5 , B^6 , B^7 及び B^8 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^5 , B^6 , B^7 及び B^8 の 1 つは対応する R^2 が結合した窒素に直接結合する炭素であり；そして

R^3 は、下記式 (II) の二環アリール又は下記式 (II) の二環ヘテロアリールであり；

【化 13】



ここで、 A は 6 ~ 10 の炭素を含むアルキレン鎖、6 ~ 10 の炭素を含むアルケニレン鎖、又は 6 ~ 10 の炭素を含むアルキニレン鎖であり、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の 1 又は 2 の炭素は任意に $-NR^9-$, $=N-$, $-O-$, $-S(O)_p-$ (ここで、 p は 0、1 又は 2) 又は $-P(O)_p-$ (ここで、 p は 0、1 又は 2) で置換されていてもよく、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の各炭素は独立に、任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキルシクロアルキル、シクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $=N-O-R^6$, $-R^{10}$, $-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-CN$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$, $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0、1 又は 2) , $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$, $-R^{10}-OC(O)-R^9$, $-R^{10}-N(R^6)R^7$, $-R^{10}-C(O)R^9$, $-R^{10}-C(O)OR^9$, $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^8$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$, $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2) , $-R^{10}-S(O)_tO$, $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0、1 又は 2) , 及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択される 1 又は 2 の置換基で置換されていてもよく；そして、

B^1 , B^2 , B^3 及び B^4 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^1 , B^2 , B^3 及び B^4 の 1 つは対応する R^3 が結合した窒素に直接結合する炭素である、請求項 2 に記載の化合物。

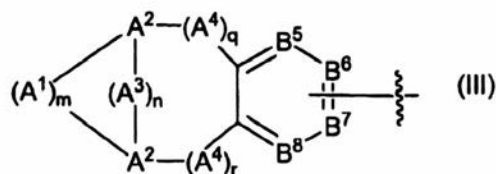
【請求項 8】

前記式 (Ia) において、

R^1 , R^4 及び R^5 は各々水素であり；

R^2 は、下記式 (III) の架橋二環アリール又は下記式 (III) の架橋二環ヘテロアリールであり；

【化 1 4】



ここで、

m 及び n は独立に 1 ~ 2 であり；

q 及び r は独立に 0 ~ 3 であり；

A^1 , A^3 及び A^4 は各々独立に、 $C(R^8)_2$, O , $S(O)_p$ (ここで、 p は 0、1 又は 2), $P(O)_p$ (ここで、 p は 0、1 又は 2) 及び $N(R^9)$ からなる群から選択され；

各 A^2 は独立に $C(R^8)$ 及び N からなる群から選択され；

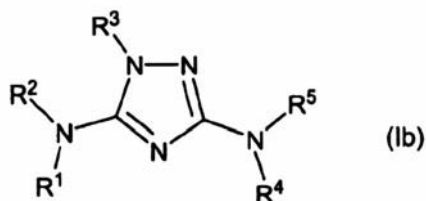
B^5 , B^6 , B^7 及び B^8 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^5 , B^6 , B^7 及び B^8 の 1 つは対応する R^2 が結合した窒素に直接結合する炭素であり；そして

R^3 は、14 環原子を含む多環ヘテロアリールであって、前記環原子は任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、 $-R^{10}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-CN$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$, $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (個々で、 p は 0、1 又は 2), $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$, $-R^{10}-OC(O)-R^9$, $-R^{10}-N(R^6)R^7$, $-R^{10}-C(O)R^9$, $-R^{10}-C(O)OR^9$, $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$, $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2), $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2), $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0、1 又は 2), 及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択される 1 又は複数の置換基で置換されていてもよい多環ヘテロアリールである、請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 9】

下記式 (I b) で表され：

【化 1 5】

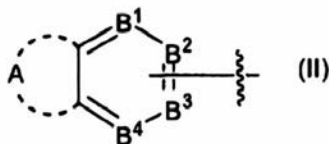


(式中： R^1 , R^4 及び R^5 は独立に、水素、アルキル、アリール、アラルキル、 $-C(O)R^9$ 及び $-C(O)N(R^6)R^7$ から選択され；

R^2 及び R^3 の一方は以下の 1 つから選択され、他方は以下の他の 2 つから選択され：

a) 下記式 (II) の二環アリール又は下記式 (II) の二環ヘテロアリール；

【化 16】



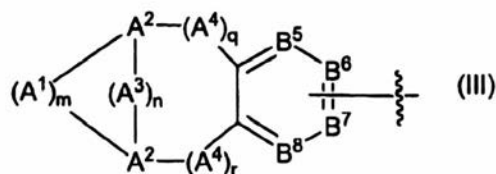
ここで、Aは6～10の炭素を含むアルキレン鎖、6～10の炭素を含むアルケニレン鎖、又は6～10の炭素を含むアルキニレン鎖であり、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の1又は2の炭素は任意に $-NR^9-$ 、 $=N-$ 、 $-O-$ 、 $-S(O)_p-$ （ここで、pは0、1又は2）又は $-P(O)_p-$ （ここで、pは0、1又は2）で置換されていてもよく、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の各炭素は独立に、任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキルシクロアルキル、シクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $=N-OR^6$ 、 $-R^{10}$ 、 $-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ （ここで、pは0、1又は2）、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^8$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ （ここで、tは1又は2）、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ （ここで、tは1又は2）、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ （ここで、pは0、1又は2）、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ （ここで、tは1又は2）からなる群から選択される1又は2の置換基で置換されていてもよく；そして、

B^1 、 B^2 、 B^3 及び B^4 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^1 、 B^2 、 B^3 及び B^4 の1つは対応する R^2 又は R^3 が結合した窒素に直接結合する炭素である；

b) 14環原子を含む多環ヘテロアリールであって、前記環原子は任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、 $-R^{10}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ （個々で、pは0、1又は2）、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ （ここで、tは1又は2）、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ （ここで、tは1又は2）、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ （ここで、pは0、1又は2）、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ （ここで、tは1又は2）からなる群から選択される1又は複数の置換基で置換されていてもよい多環ヘテロアリール；又は

c) 下記式 (III) の架橋二環アリール又は下記式 (III) の架橋二環ヘテロアリール：

【化 17】



ここで、

m 及び n は独立に 1 ~ 4 であり；

q 及び r は独立に 0 ~ 3 であり；

A^1 、 A^3 及び A^4 は各々独立に、 $C(R^8)_2$ 、 O 、 $S(O)_p$ （ここで、 p は 0、1 又は 2）、 $P(O)_p$ （ここで、 p は 0、1 又は 2）及び $N(R^9)$ からなる群から選択され；

各 A^2 は独立に $C(R^8)$ 及び N からなる群から選択され；

B^5 、 B^6 、 B^7 及び B^8 は各々独立に、 $=C(R^{1-3})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^5 、 B^6 、 B^7 及び B^8 の 1 つは対応する R^2 又は R^3 が結合した窒素に直接結合する炭素であり；

R^6 及び R^7 は各々独立に、ハロゲン、アルキル、アルケニル、アルキニルハロアルキル、ハロアルケニル、ハロアルキニル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいアラルケニル、任意に置換されていてもよいアラルキニル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルケニル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキニル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルケニル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルケニル、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキニル、 $-R^{1-1}-OR^9$ 、 $-R^{1-1}-CN$ 、 $-R^{1-1}-NO_2$ 、 $-R^{1-1}-N(R^9)_2$ 、 $-R^{1-1}-C(O)OR^9$ 及び $-R^{1-1}-C(O)N(R^9)_2$ からなる群から選択され、あるいは R^6 及び R^7 はそれらが結合する共通の窒素とともに、任意に置換されていてもよい N -ヘテロアリール又は任意に置換されていてもよい N -ヘテロシクリルを形成してもよく；

各 R^8 は独立に、水素、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $-R^{1-0}-OR^9$ 、 $-R^{1-0}-O-R^{1-1}-OR^9$ 、 $-R^{1-0}-O-R^{1-1}-O-R^{1-1}-OR^9$ 、 $-R^{1-0}-O-R^{1-1}-CN$ 、 $-R^{1-0}-O-R^{1-1}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{1-0}-O-R^{1-1}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{1-0}-O-R^{1-1}-S(O)_pR^9$ （ここで、 p は 0、1 又は 2）、 $-R^{1-0}-O-R^{1-1}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{1-0}-O-R^{1-1}-C(NR^{1-2})N(R^{1-2})H$ 、 $-R^{1-0}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{1-0}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{1-0}-C(O)R^9$ 、 $-R^{1-0}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{1-0}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{1-0}-N(R^6)C(O)OR^9$ 、 $-R^{1-0}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{1-0}-N(R^6)S(O)_tR^9$ （ここで、 t は 1 又は 2）、 $-R^{1-0}-S(O)_tOR^9$ （ここで、 t は 1 又は 2）、 $-R^{1-0}-S(O)_pR^9$ （ここで、 p は 0、1 又は 2）、及び $-R^{1-0}-S(O)_tN(R^6)R^7$ （ここで、 t は 1 又は 2）からなる群から選択され、あるいは、隣接する炭素上の 2 つの R^8 が結合して二重結合を形成してもよく；

各 R^9 は独立に、水素、アルキル、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、ハロアルケニル、ハロアルキニル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていても

よいアラルキル、任意に置換されていてもよいアラルケニル、任意に置換されていてもよいアラルキニル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルケニル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキニル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルケニル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキニル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルケニル、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキニルからなる群から選択され；

各 R^{10} は独立に、直接結合、任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルキレン鎖、任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルケニレン鎖、及び任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルキニレン鎖からなる群から選択され；

各 R^{11} は独立に、任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルキレン鎖、任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルケニレン鎖、及び任意に置換されていてもよい直鎖又は分岐のアルキニレン鎖からなる群から選択され；

各 R^{12} は、水素、アルキル、シアノ、ニトロ、又は $-OR^9$ であり；そして

各 R^{13} は独立に、水素、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $-R^{10}-OR^9$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ （ここで、 t は 1 又は 2）、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ （ここで、 t は 1 又は 2）、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ （ここで、 p は 0、1 又は 2）、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ （ここで、 t は 1 又は 2）からなる群から選択される）

単離された立体異性体又はそれらの混合物、あるいは製薬的に許容される塩の形態である、請求項 1 に記載の化合物。

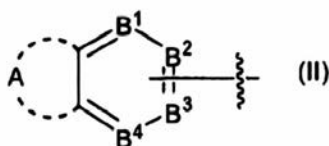
【請求項 10】

前記式 (I b) において、

R^1 、 R^4 及び R^5 は各々水素であり；

R^2 は、下記式 (II) の二環アリール又は下記式 (II) の二環ヘテロアリールであり；

【化 18】



ここで、 A は 6 ~ 10 の炭素を含むアルキレン鎖、6 ~ 10 の炭素を含むアルケニレン鎖、又は 6 ~ 10 の炭素を含むアルキニレン鎖であり、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の 1 又は 2 の炭素は任意に $-NR^9-$ 、 $=N-$ 、 $-O-$ 、 $-S(O)_p-$ （ここで、 p は 0、1 又は 2）又は $-P(O)_p-$ （ここで、 p は 0、1 又は 2）で置換されていてもよく、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の各炭素は独立に、任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキルシクロアルキル、シクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $=N-O-R^6$ 、 $-R^{10}$

-OR⁹, -R¹⁰-O-R¹¹-OR⁹, -R¹⁰-O-R¹¹-O-R¹¹-OR⁹,
 , -R¹⁰-O-R¹¹-CN, -R¹⁰-O-R¹¹-C(O)OR⁹, -R¹⁰-O-
 -R¹¹-C(O)N(R⁶)R⁷, -R¹⁰-O-R¹¹-S(O)_pR⁹ (ここで、
 pは0, 1又は2), -R¹⁰-O-R¹¹-N(R⁶)R⁷, -R¹⁰-O-R¹¹-
 C(NR¹²)N(R¹²)H, -R¹⁰-OC(O)-R⁹, -R¹⁰-N(R⁶)R⁷,
 -R¹⁰-C(O)R⁹, -R¹⁰-C(O)OR⁹, -R¹⁰-C(O)N(R⁶)
)R⁷, -R¹⁰-N(R⁶)C(O)OR⁸, -R¹⁰-N(R⁶)C(O)R⁹, -
 R¹⁰-N(R⁶)S(O)_tR⁹ (ここで、tは1又は2), -R¹⁰-S(O)_tO
 R⁹ (ここで、tは1又は2), -R¹⁰-S(O)_pR⁹ (ここで、pは0, 1又は2
), 及び -R¹⁰-S(O)_tN(R⁶)R⁷ (ここで、tは1又は2) からなる群から
 選択される1又は2の置換基で置換されていてもよく;そして、

B¹, B², B³ 及び B⁴ は各々独立に、=C(R¹³)-及び=N-からなる群から
 選択され、但し、B¹, B², B³ 及び B⁴ の1つは対応するR²が結合した窒素に直接
 結合する炭素である;

R³ は、14環原子を含む多環ヘテロアリールであって、前記環原子は任意にオキソ、チ
 オキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよい
 シクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換され
 ていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されてい
 てもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、-R¹⁰-OR⁹
 , -R¹⁰-O-R¹¹-OR⁹, -R¹⁰-O-R¹¹-O-R¹¹-OR⁹, -R¹⁰-O-R¹¹-
 -C(O)N(R⁶)R⁷, -R¹⁰-O-R¹¹-S(O)_pR⁹ (個々で、pは0,
 1又は2), -R¹⁰-O-R¹¹-N(R⁶)R⁷, -R¹⁰-O-R¹¹-C(NR¹²)
)N(R¹²)H, -R¹⁰-OC(O)-R⁹, -R¹⁰-N(R⁶)R⁷, -R¹⁰-
 -C(O)R⁹, -R¹⁰-C(O)OR⁹, -R¹⁰-C(O)N(R⁶)R⁷,
 -R¹⁰-N(R⁶)C(O)OR⁹, -R¹⁰-N(R⁶)C(O)R⁹, -R¹⁰-
 N(R⁶)S(O)_tR⁹ (ここで、tは1又は2), -R¹⁰-S(O)_tOR⁹ (こ
 こで、tは1又は2), -R¹⁰-S(O)_pR⁹ (ここで、pは0, 1又は2), 及び
 -R¹⁰-S(O)_tN(R⁶)R⁷ (ここで、tは1又は2) からなる群から選択され
 る1又は複数の置換基で置換されていてもよい多環ヘテロアリールである、請求項9に記
 載の化合物。

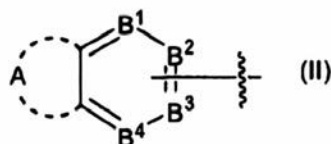
【請求項11】

前記式(Ib)において、

R¹、R⁴及びR⁵は各々水素であり;

R²は、下記式(II)の二環アリール又は下記式(II)の二環ヘテロアリールであり
 :

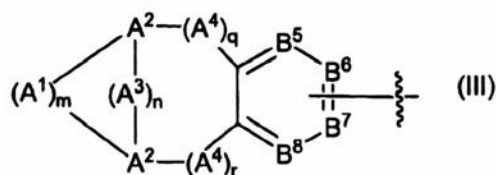
【化19】



ここで、Aは6~10の炭素を含むアルキレン鎖、6~10の炭素を含むアルケニレン鎖
 、又は6~10の炭素を含むアルキニレン鎖であり、前記アルキレン、アルケニレン又は
 アルキニレン鎖の1又は2の炭素は任意に-NR⁹-, =N-, -O-, -S(O)_p-
 (ここで、pは0, 1又は2)又は-P(O)_p- (ここで、pは0, 1又は2)で置換
 されていてもよく、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の各炭素は独立に
 、任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキルシクロアル
 キル、シクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置
 換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシク

リル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $=N-O-R^6$ 、 $-R^{10}$
 $-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$
 $,-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O$
 $-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (ここで、
 p は 0, 1 又は 2) 、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-$
 $C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)$
 $)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^8$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-$
 $R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2) 、 $-R^{10}-S(O)_tO$
 R^9 (ここで、 t は 1 又は 2) 、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2)
 $)$ 、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から
 選択される 1 又は 2 の置換基で置換されていてもよく；そして、
 B^1 、 B^2 、 B^3 及び B^4 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から
 選択され、但し、 B^1 、 B^2 、 B^3 及び B^4 の 1 つは対応する R^2 又は R^3 が結合した窒
 素に直接結合する炭素であり；そして
 R^3 は、下記式 (III) の架橋二環アリール又は下記式 (III) の架橋二環ヘテロア
 リールであり：

【化 20】



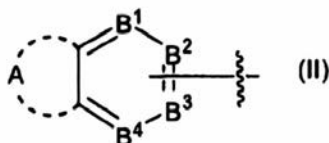
ここで、
 m 及び n は独立に 1 ~ 2 であり；
 q 及び r は独立に 0 ~ 3 であり；
 A^1 、 A^3 及び A^4 は各々独立に、 $C(R^8)_2$ 、 O 、 $S(O)_p$ (ここで、 p は 0
 、1 又は 2) 、 $P(O)_p$ (ここで、 p は 0, 1 又は 2) 及び $N(R^9)$ からなる群から
 選択され；
 各 A^2 は独立に $C(R^8)$ 及び N からなる群から選択され；
 B^5 、 B^6 、 B^7 及び B^8 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選
 択され、但し、 B^5 、 B^6 、 B^7 及び B^8 の 1 つは対応する R^2 又は R^3 が結合した窒
 素に直接結合する炭素である、請求項 9 に記載の化合物。

【請求項 12】

前記式 (Ib) において、
 R^1 、 R^4 及び R^5 は各々水素であり；
 R^2 は、14 環原子を含む多環ヘテロアリールであって、前記環原子は任意にオキソ、チ
 オキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよい
 シクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換され
 ていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されてい
 ていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、 $-R^{10}-OR^9$
 $,-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-$
 $-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (個々で、 p は 0, 1 又は 2) 、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2) 、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (こ

ここで、 t は 1 又は 2) , $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0 , 1 又は 2) , 及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択される 1 又は複数の置換基で置換されていてもよい多環ヘテロアリールであり ; そして R^3 は、下記式 (I I) の二環アリール又は下記式 (I I) の二環ヘテロアリールであり ;

【化 2 1】



ここで、 A は 6 ~ 10 の炭素を含むアルキレン鎖、6 ~ 10 の炭素を含むアルケニレン鎖、又は 6 ~ 10 の炭素を含むアルキニレン鎖であり、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の 1 又は 2 の炭素は任意に $-NR^9-$, $=N-$, $-O-$, $-S(O)_p-$ (ここで、 p は 0 , 1 又は 2) 又は $-P(O)_p-$ (ここで、 p は 0 , 1 又は 2) で置換されていてもよく、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の各炭素は独立に、任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキルシクロアルキル、シクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $=N-O-R^6$, $-R^{10}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-CN$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$, $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0 , 1 又は 2) , $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$, $-R^{10}-OC(O)-R^9$, $-R^{10}-N(R^6)R^7$, $-R^{10}-C(O)R^9$, $-R^{10}-C(O)OR^9$, $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^8$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$, $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2) , $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2) , $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0 , 1 又は 2) , 及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択される 1 又は 2 の置換基で置換されていてもよく ; そして、 B^1 , B^2 , B^3 及び B^4 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^1 , B^2 , B^3 及び B^4 の 1 つは対応する R^3 が結合した窒素に直接結合する炭素である、請求項 9 に記載の化合物。

【請求項 13】

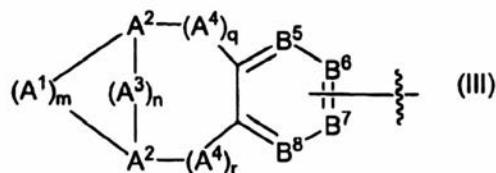
前記式 (I b) において、

R^1 , R^4 及び R^5 は各々水素であり ;

R^2 は、14 環原子を含む多環ヘテロアリールであって、前記環原子は任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいアリール、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、 $-R^{10}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-CN$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$, $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ (個々で、 p は 0 , 1 又は 2) , $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$, $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$, $-R^{10}-OC(O)-R^9$, $-R^{10}-N(R^6)R^7$, $-R^{10}-C(O)R^9$, $-R^{10}-C(O)OR^9$, $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$, $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$, $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ (ここで、 t は 1 又は 2) , $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ (こ

ここで、 t は 1 又は 2) , $-R^{10}-S(O)_pR^9$ (ここで、 p は 0 , 1 又は 2) , 及び
 $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ (ここで、 t は 1 又は 2) からなる群から選択され
 R^3 は、下記式 (III) の架橋二環アリール又は下記式 (III) の架橋二環ヘテロア
 リールであり：

【化 2 2】



ここで、

m 及び n は独立に 1 ~ 4 であり；

q 及び r は独立に 0 ~ 3 であり；

A^1 , A^3 及び A^4 は各々独立に、 $C(R^8)_2$, O , $S(O)_p$ (ここで、 p は 0
 、 1 又は 2) , $P(O)_p$ (ここで、 p は 0 , 1 又は 2) 及び $N(R^9)$ からなる群から
 選択され；

各 A^2 は独立に $C(R^8)$ 及び N からなる群から選択され；

B^5 , B^6 , B^7 及び B^8 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選
 択され、但し、 B^5 , B^6 , B^7 及び B^8 の 1 つは対応する R^3 が結合した窒素に直接結
 合する炭素である、請求項 9 に記載の化合物。

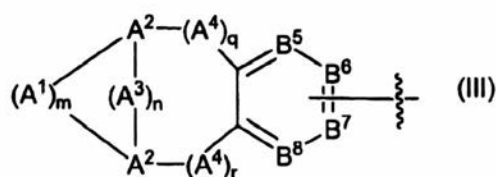
【請求項 1 4】

前記式 (I b) において、

R^1 、 R^4 及び R^5 は各々水素であり；

R^2 は、下記式 (III) の架橋二環アリール又は下記式 (III) の架橋二環ヘテロア
 リール：

【化 2 3】



ここで、

m 及び n は独立に 1 ~ 4 であり；

q 及び r は独立に 0 ~ 3 であり；

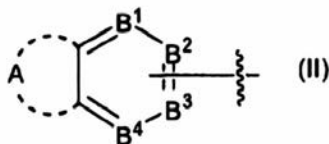
A^1 , A^3 及び A^4 は各々独立に、 $C(R^8)_2$, O , $S(O)_p$ (ここで、 p は 0
 、 1 又は 2) , $P(O)_p$ (ここで、 p は 0 , 1 又は 2) 及び $N(R^9)$ からなる群から
 選択され；

各 A^2 は独立に $C(R^8)$ 及び N からなる群から選択され；

B^5 , B^6 , B^7 及び B^8 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選
 択され、但し、 B^5 , B^6 , B^7 及び B^8 の 1 つは対応する R^2 が結合した窒素に直接結
 合する炭素であり；

R^3 は、下記式 (II) の二環アリール又は下記式 (II) の二環ヘテロアリールであり
 ：

【化 2 4】



ここで、Aは6～10の炭素を含むアルキレン鎖、6～10の炭素を含むアルケニレン鎖、又は6～10の炭素を含むアルキニレン鎖であり、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の1又は2の炭素は任意に $-NR^9-$ 、 $=N-$ 、 $-O-$ 、 $-S(O)_p-$ （ここで、pは0、1又は2）又は $-P(O)_p-$ （ここで、pは0、1又は2）で置換されていてもよく、前記アルキレン、アルケニレン又はアルキニレン鎖の各炭素は独立に、任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキルシクロアルキル、シクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリール、任意に置換されていてもよいヘテロアリールアルキル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリルアルキル、 $=N-O-R^6$ 、 $-R^{10}$ 、 $-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ （ここで、pは0、1又は2）、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^8$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ （ここで、tは1又は2）、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ （ここで、tは1又は2）、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ （ここで、pは0、1又は2）、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ （ここで、tは1又は2）からなる群から選択される1又は2の置換基で置換されていてもよく；そして、 B^1 、 B^2 、 B^3 及び B^4 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^1 、 B^2 、 B^3 及び B^4 の1つは対応する R^3 が結合した窒素に直接結合する炭素である、請求項9に記載の化合物。

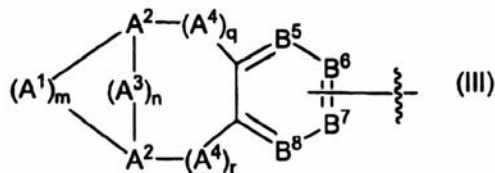
【請求項15】

前記式(Ib)において、

R^1 、 R^4 及び R^5 は各々水素であり；

R^2 は、下記式(III)の架橋二環アリール又は下記式(III)の架橋二環ヘテロアリールであり；

【化 2 4】



ここで、

m及びnは独立に1～2であり；

q及びrは独立に0～3であり；

A^1 、 A^3 及び A^4 は各々独立に、 $C(R^8)_2$ 、 O 、 $S(O)_p$ （ここで、pは0、1又は2）、 $P(O)_p$ （ここで、pは0、1又は2）及び $N(R^9)$ からなる群から選択され；

各 A^2 は独立に $C(R^8)$ 及び N からなる群から選択され；

B^5 、 B^6 、 B^7 及び B^8 は各々独立に、 $=C(R^{13})-$ 及び $=N-$ からなる群から選択され、但し、 B^5 、 B^6 、 B^7 及び B^8 の1つは対応する R^2 又は R^3 が結合した窒素

に直接結合する炭素であり；そして

R^3 は、14環原子を含む多環ヘテロアリアルであって、前記環原子は任意にオキソ、チオキソ、シアノ、ニトロ、ハロ、ハロアルキル、アルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキル、任意に置換されていてもよいシクロアルキルアルキル、任意に置換されていてもよいアリアル、任意に置換されていてもよいアラルキル、任意に置換されていてもよいヘテロアリアル、任意に置換されていてもよいヘテロシクリル、 $-R^{10}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-O-R^{11}-OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-CN$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-S(O)_pR^9$ （個々で、 p は0、1又は2）、 $-R^{10}-O-R^{11}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-O-R^{11}-C(NR^{12})N(R^{12})H$ 、 $-R^{10}-OC(O)-R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-C(O)N(R^6)R^7$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)OR^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)C(O)R^9$ 、 $-R^{10}-N(R^6)S(O)_tR^9$ （ここで、 t は1又は2）、 $-R^{10}-S(O)_tOR^9$ （ここで、 t は1又は2）、 $-R^{10}-S(O)_pR^9$ （ここで、 p は0、1又は2）、及び $-R^{10}-S(O)_tN(R^6)R^7$ （ここで、 t は1又は2）からなる群から選択される1又は複数の置換基で置換されていてもよい多環ヘテロアリアルである、請求項9に記載の化合物。

【請求項16】

1 - (6, 7 - ジヒドロ - 5H - ベンゾ [6, 7] シクロヘプタ [1, 2 - c] ピリダジン - 3 - イル) - N^3 - (6 - ピロリジン - 1 - イル - 5, 6, 7, 8, 9, 10 - ヘキサヒドロベンゾ [8] アンヌレン - 3 - イル) - 1H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3, 5 - ジアミン；

1 - (6, 7 - ジヒドロ - 5H - ベンゾ [6, 7] シクロヘプタ [1, 2 - c] ピリダジン - 3 - イル) - N^3 - (4 (1H) - オキソ - 2, 3, 5, 6 - テトラヒドロベンゾ [d] アゾシン - 8 - イル) - 1H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3, 5 - ジアミン；

1 - (6, 7 - ジヒドロ - 5H - ベンゾ [6, 7] シクロヘプタ [1, 2 - c] ピリダジン - 3 - イル) - N^3 - (3 - シクロペンチル - 1, 2, 3, 4, 5, 6 - ヘキサヒドロベンゾ [d] アゾシン - 8 - イル) - 1H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3, 5 - ジアミン；

1 - (6, 7 - ジヒドロ - 5H - ベンゾ [6, 7] シクロヘプタ [1, 2 - c] ピリダジン - 3 - イル) - N^3 - (3 - シクロペンチル - 1, 2, 3, 4, 5, 6 - ヘキサヒドロベンゾ [d] アゾシン - 9 - イル) - 1H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3, 5 - ジアミン；

1 - (6, 7 - ジヒドロ - 5H - ベンゾ [6, 7] シクロヘプタ [1, 2 - c] ピリダジン - 3 - イル) - N^3 - (1 (2H) - オキソ - 3, 4, 5, 6 - テトラヒドロベンゾ [c] アゾシン - 9 - イル) - 1H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3, 5 - ジアミン；

1 - (6, 7 - ジヒドロ - 5H - ベンゾ [6, 7] シクロヘプタ [1, 2 - c] ピリダジン - 3 - イル) - N^3 - (1 (2H) - オキソ - 3, 4, 5, 6 - テトラヒドロベンゾ [c] アゾシン - 9 - イル) - 1H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3, 5 - ジアミン；

1 - (6, 7 - ジヒドロ - 5H - ベンゾ [6, 7] シクロヘプタ [1, 2 - c] ピリダジン - 3 - イル) - N^3 - (1, 2, 3, 4, 5, 6 - ヘキサヒドロベンゾ [c] アゾシン - 9 - イル) - 1H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3, 5 - ジアミン；

1 - (6, 7 - ジヒドロ - 5H - ベンゾ [6, 7] シクロヘプタ [1, 2 - c] ピリダジン - 3 - イル) - N^3 - (7 - オキソ - 5, 6, 8, 9, 10 - ペンタヒドロシクロオクタ [b] ピリジン - 3 - イル) - 1H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3, 5 - ジアミン；

1 - (6, 7 - ジヒドロ - 5H - ベンゾ [6, 7] シクロヘプタ [1, 2 - c] ピリダジン - 3 - イル) - N^3 - (7 - (ピロリジン - 1 - イル) - 5, 6, 7, 8, 9, 10 - ヘキサヒドロシクロオクタ [b] ピリジン - 3 - イル) - 1H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3, 5 - ジアミン；

1 - (6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - ベンゾ [6 , 7] シクロヘプタ [1 , 2 - c] ピリダジン - 3 - イル) - N³ - (7 - (メトキシイミノ) - 5 , 6 , 7 , 8 , 9 , 10 - ヘキサヒドロシクロオクタ [b] ピリジン - 3 - イル) - 1 H - 1 , 2 , 4 - トリアゾール - 3 , 5 - ジアミン ;

1 - (6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - ベンゾ [6 , 7] シクロヘプタ [1 , 2 - c] ピリダジン - 3 - イル) - N³ - (7 - ヒドロキシ - 5 , 6 , 7 , 8 , 9 , 10 - ヘキサヒドロシクロオクタ [b] ピリジン - 3 - イル) - 1 H - 1 , 2 , 4 - トリアゾール - 3 , 5 - ジアミン ;

1 - (1 , 4 - エタノ - 8 - ピリジン - 4 - イル - 1 , 2 , 3 , 4 - テトラヒドロ - 1 , 5 - ナフチリジン - 6 - イル) - N³ - (7 - オキソ - 5 , 6 , 7 , 8 , 9 , 10 - ヘキサヒドロシクロオクタ [b] ピリジン - 3 - イル) - 1 H - 1 , 2 , 4 - トリアゾール - 3 , 5 - ジアミン ;

1 - (5 , 6 , 7 , 8 , 9 , 10 - ヘキサヒドロシクロオクタ [d] ピリミジン - 4 - イル) - N³ - (5 , 6 , 8 , 9 - テトラヒドロスピロ [ベンゾ [7] アンヌレン - 7 , 2 ' - [1 , 3] ジオキソラン - 3 - イル) - 1 H - 1 , 2 , 4 - トリアゾール - 3 , 5 - ジアミン ;

1 - (6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - ベンゾ [6 , 7] シクロヘプタ [1 , 2 - c] ピリダジン - 3 - イル) - N³ - (7 - ピロリジン - 1 - 1 イル - 6 , 8 - エタノ - 6 , 7 , 8 , 9 - テトラヒドロ - 5 H - ベンゾ [7] アンヌレン - 3 - イル) - 1 H - 1 , 2 , 4 - トリアゾール - 3 , 5 - ジアミン ; 及び、

1 - (6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - ベンゾ [6 , 7] シクロヘプタ [1 , 2 - c] ピリダジン - 3 - イル) - N³ - (1 (2 H) - オキソ - 3 , 4 , 5 , 6 - テトラヒドロベンゾ [c] アゾシン - 9 - イル) - 1 H - 1 , 2 , 4 - トリアゾール - 3 , 5 - ジアミン、

からなる群から選択される、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 17】

薬学的に受容可能な賦形剤および請求項 1 から 16 のいずれか一項に記載の化合物を、単離された立体異性体もしくはその混合物として、またはその薬学的に受容可能な塩として含有する、薬学的組成物。

【請求項 18】

哺乳動物において、A x 1 触媒活性に関連する疾患または状態を処置する方法であって、該方法は、該哺乳動物に、治療有効量の請求項 1 から 16 のいずれか一項に記載の化合物を、単離された立体異性体もしくはその混合物として、またはその薬学的に受容可能な塩として、投与する工程を包含する、方法。