

【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】令和3年5月13日(2021.5.13)

【公表番号】特表2020-512981(P2020-512981A)

【公表日】令和2年4月30日(2020.4.30)

【年通号数】公開・登録公報2020-017

【出願番号】特願2019-553461(P2019-553461)

【国際特許分類】

A 6 1 K 31/4168 (2006.01)

A 6 1 K 31/4439 (2006.01)

A 6 1 P 35/00 (2006.01)

C 0 7 D 487/04 (2006.01)

C 0 7 D 405/04 (2006.01)

C 0 7 D 401/04 (2006.01)

【F I】

A 6 1 K 31/4168

A 6 1 K 31/4439

A 6 1 P 35/00

C 0 7 D 487/04 1 3 7

C 0 7 D 405/04

C 0 7 D 401/04

【手続補正書】

【提出日】令和3年3月31日(2021.3.31)

【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

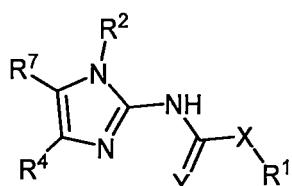
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

治療用途の組成物であって、構造I：

【化1】



I

【式中、

R<sup>1</sup>は、アルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、アリールアルキル、ヘテロアリール、及びヘテロアリールアルキルからなる群から選択されるメンバーであり；ここで、R<sup>1</sup>がアリール、アリールアルキル、ヘテロアリール、又はヘテロアリールアルキルである場合、R<sup>1</sup>は置換されていないか、又はアルキル、シアノ、アシル、ハロ、ヒドロキシ、アルコキシ、アミノ、アルキルアミノ、アシルアミノ、チオ、及びアルキルチオからなる群から独立して選択される1～5個の置換基で任意選択的に置換され；

Xは、結合、O、及びNR<sup>5a</sup>からなる群から選択されるメンバーであり；Yは、O、S、又はNR<sup>5b</sup>からなる群から選択されるメンバーであり；又は、XがO又は結合である場合、YはOであり；

R<sup>2</sup>は、アルキル、アルケニル、アルキニル、及びアリールアルキルからなる群から独立して選択されるメンバーであり；又は、R<sup>2</sup>とR<sup>7</sup>は結合して追加のヘテロシクリル縮合環を形成し；

R<sup>4</sup>は、アリール及びヘテロアリールからなる群から独立して選択されるメンバーであり、ここでR<sup>4</sup>は置換されていないか、又は1～5個のR<sup>6n</sup>置換基を有し；

R<sup>5a</sup>及びR<sup>5b</sup>はそれぞれ、水素、アルキル、フルオロアルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、シクロアルキルアルキル、アリールアルキル、及びヘテロアリールアルキルからなる群から独立して選択されるメンバーであり；

R<sup>6n</sup>メンバーのそれぞれは、アルキル、ヒドロキシ、アルコキシ、アミノアルコキシ、アルキルアミノ、アルキルアミノアルコキシ、アルケニル、アルキニル、アリール、アリールオキシ、アリールアミノ、シクロアルキル、シクロアルキルアルキル、シクロアルコキシ、シクロアルキルアルコキシ、シクロアルキルアミノ、シクロアルキルアルキルアミノ、ヘテロシクリル、ヘテロシクリルオキシ(heterocyclyoxy)、ヘテロシクリルアルキルオキシ(heterocycylalkyloxy)、ヘテロシクリルアミノ(heterocycylamino)、ヘテロシクリルアルキルアミノ(heterocycylalkylamino)、ハロ、ハロアルキル、フルオロアルキルオキシ、アリールアルキル、アリールアルキルオキシ、アリールアルキルアミノ、ヘテロアリール、ヘテロアリールオキシ、ヘテロアリールアミノ、ヘテロアリールアルキル、ヘテロアリールアルキルオキシ、及びヘテロアリールアルキルアミノから成る群から独立して選択され；又は、あるいは、一対の隣接するR<sup>6n</sup>メンバーが結合して、シクロアルキル、アリール、ヘテロシクリル、及びヘテロシクロアリールからなる群から選択される追加の縮合環を形成し；そして

R<sup>7</sup>は、水素、ハロ、トリフルオロメチル、及びアルキルからなる群から独立して選択されるメンバーであり；又は、あるいは、R<sup>2</sup>とR<sup>7</sup>は結合して、追加のヘテロシクリル縮合環を形成する；】

の2-(アシルアミノ)イミダゾール化合物、又はその塩を含有し、

ここで、

前記組成物が2% (w/w)未満のN<sup>2</sup>, N<sup>2</sup>-ジアシル化を有し、かつ

前記組成物が2% (w/w)未満のアシル位置異性体を有する、組成物。

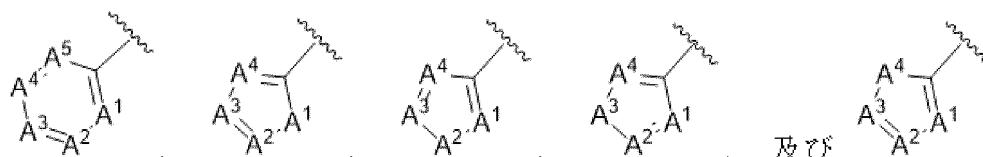
### 【請求項2】

R<sup>4</sup>がヘテロアリールであり、前記R<sup>4</sup>ヘテロアリール環が、N、O、及びSからなる群から選択される少なくとも1つの水素結合受容体を組み込む、請求項1に記載の組成物。

### 【請求項3】

R<sup>4</sup>が、以下：

### 【化2】



[式中、

A<sup>1</sup>、A<sup>2</sup>、A<sup>3</sup>、A<sup>4</sup>、及びA<sup>5</sup>が、それぞれ独立して選択されるCH又はCR<sup>6n</sup>であり、ここで、A<sup>1</sup>、A<sup>2</sup>、A<sup>3</sup>、A<sup>4</sup>、及びA<sup>5</sup>の1つ、2つ又は3つが、任意にNである】

からなる群から選択され、

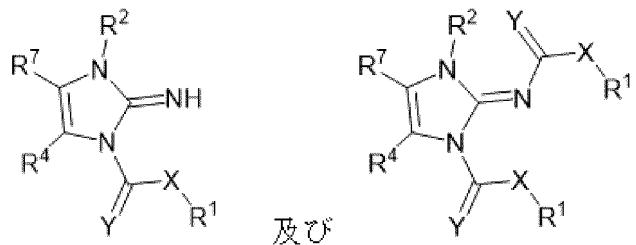
ただし、R<sup>4</sup>は形式電荷(formal charge)を持たない、請求項1又は2に記載の組成

物。

【請求項 4】

前記 2 - アミノイミダゾール化合物が、

【化 3】



又はその塩から成る群から選択される不純物を実質的に含まない、請求項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 5】

$R^1$  が、アルキル、アリール、アリールアルキル、及びヘテロアリールからなる群から選択されるメンバーである、請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 6】

$R^1$  が、イソプロピル、sec - ブチル、フェニル、2 - ブロモフェニル、2 - クロロフェニル、3 - クロロフェニル、4 - クロロフェニル、2, 4 - ジクロロフェニル、2, 5 - ジクロロフェニル、2 - フルオロフェニル、3 - フルオロフェニル、4 - フルオロフェニル、4 - メトキシフェニル、3, 4 - メチレンジオキシフェニル、3 - トリフルオロメチルフェニル、及び 2 - チアゾリルからなる群から選択されるメンバーである、請求項 1 ~ 5 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 7】

$R^2$  が、アルキル、アルケニル、及びアリールアルキルからなる群から選択されるメンバーである、請求項 1 ~ 6 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 8】

$R^2$  がアルキルである、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 9】

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、及び  $A^5$  の 1 つのみが N である、請求項 3 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 10】

$R^4$  は、ピリジル、ピラジニル、イミダゾリル、及び オキサゾイルからなる群から選択され；

$R^4$  は置換されていないか、1 ~ 4 個の  $R^{6, n}$  置換基を有する、請求項 3 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 11】

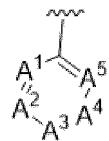
前記  $R^{6, n}$  メンバーのそれぞれが、アルキル、ヒドロキシ、アルコキシ、シクロアルキルアルコキシ、ハロ、フルオロアルキル、フルオロアルキルオキシ、及びアリールアルキルオキシからなる群から独立して選択される、請求項 1 ~ 10 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 12】

前記  $R^{6, n}$  メンバーのそれぞれが、アルキル、ヒドロキシ、及びアルコキシからなる群から独立して選択される、請求項 1 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 13】

【化4】



が、1～3個のヒドロキシリ又はアルコキシ置換基を有する、請求項3～12のいずれか1項に記載の組成物。

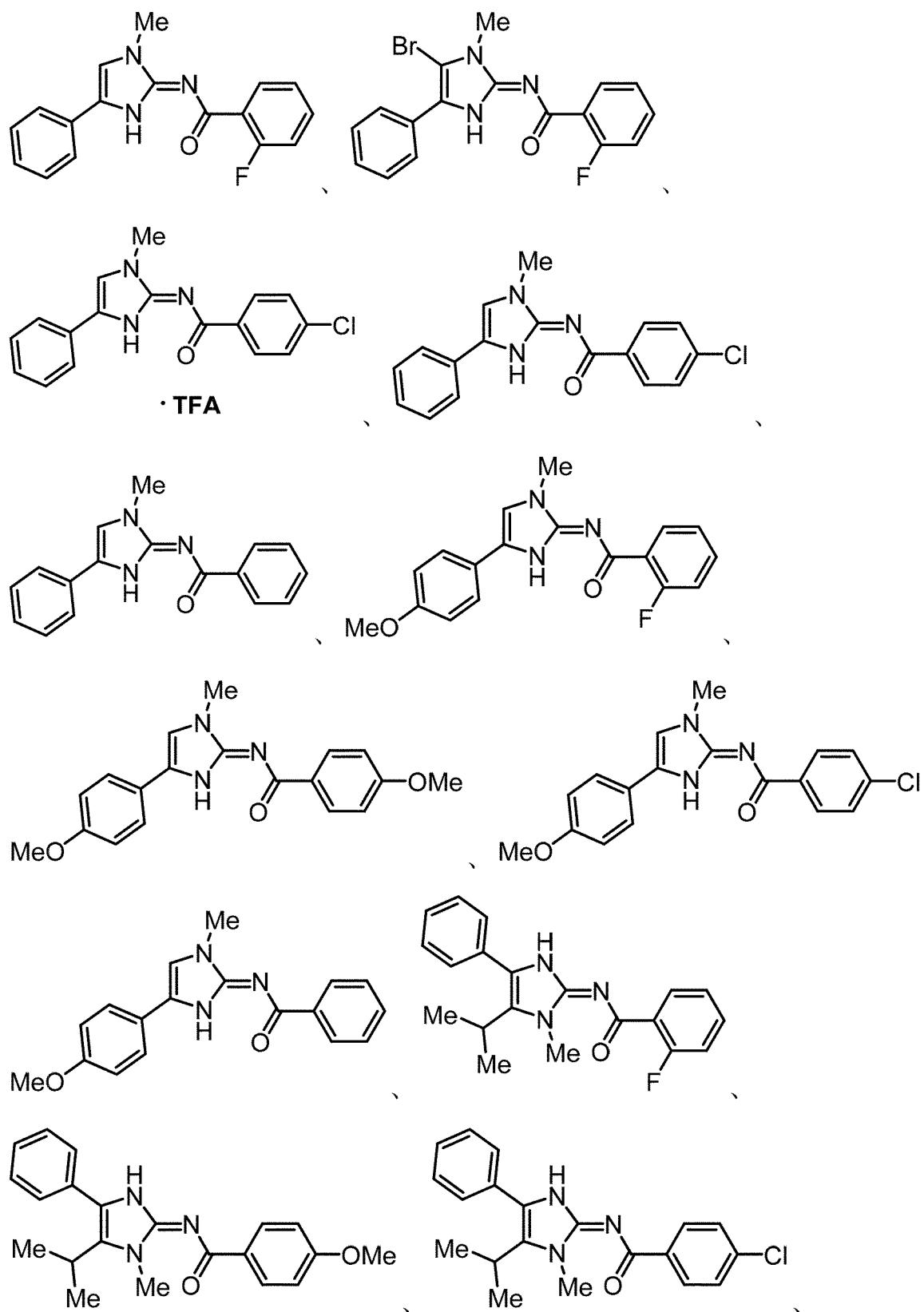
【請求項14】

$R^7$ がメチル、イソプロピル、又は水素である、請求項1～13のいずれか1項に記載の組成物。

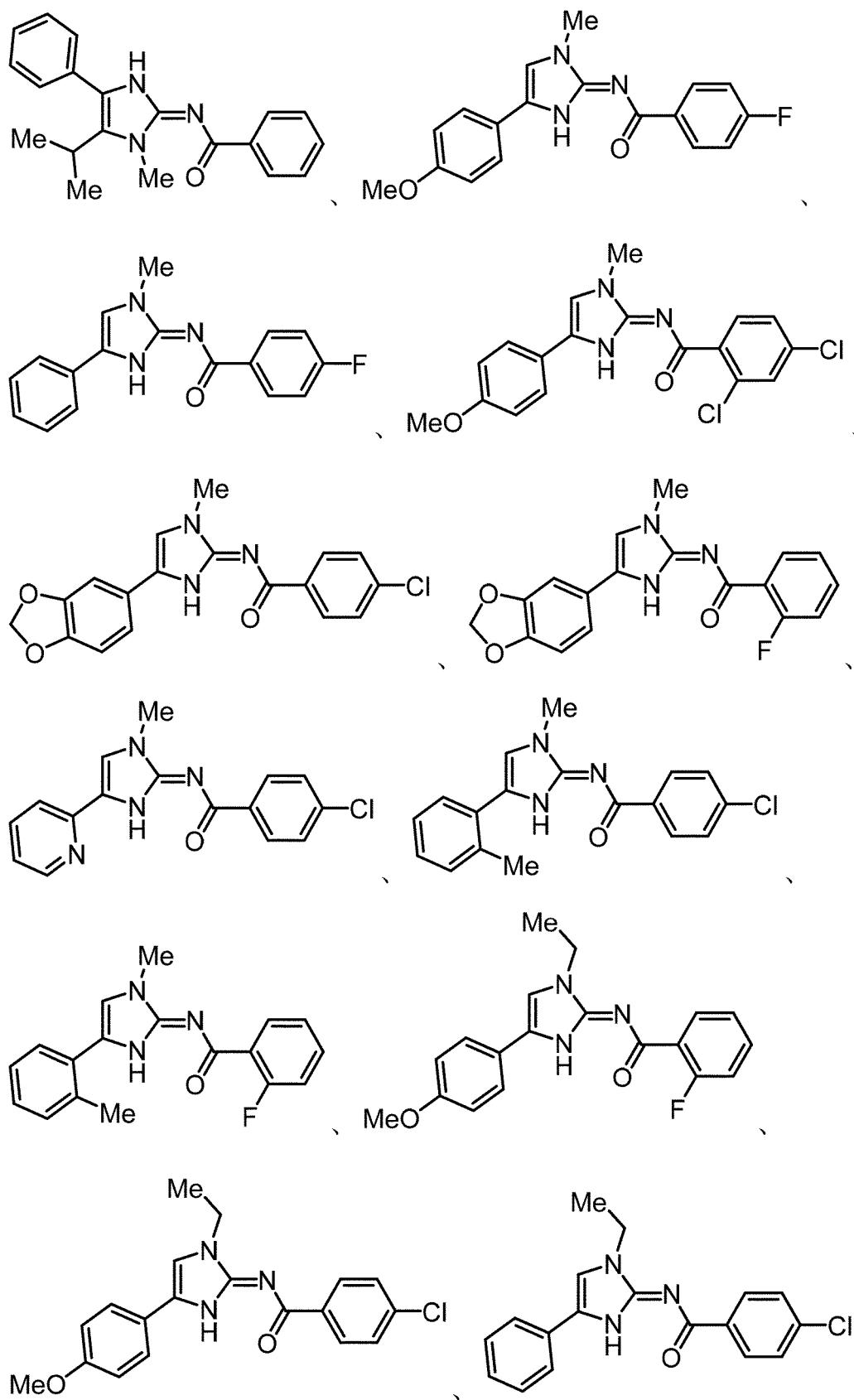
【請求項15】

以下：

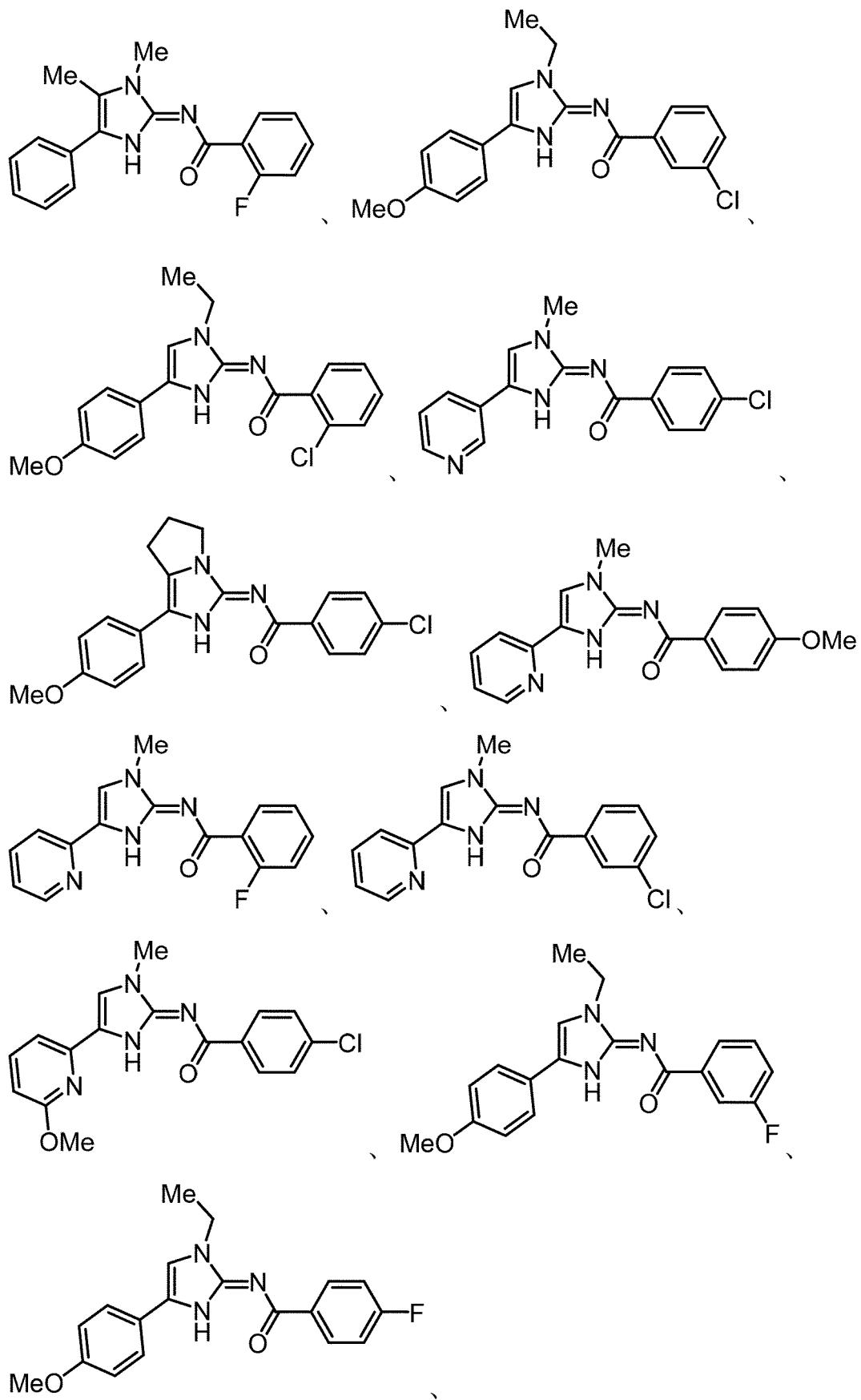
【表 1 - 1】



【表 1 - 2】



【表 1 - 3】

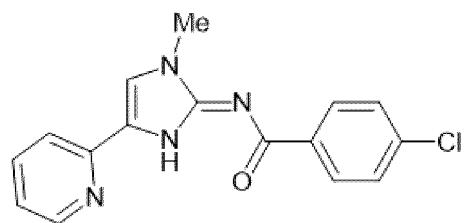


からなる群から選択される化合物又はその塩を含む、請求項 1 に記載の組成物。

【請求項 1 6】

前記組成物が以下の化合物

【化5】



又はその塩を含有する、請求項1に記載の組成物。

【請求項17】

癌の治療方法に使用するための請求項1～16のいずれか1項に記載の組成物であって  
、前記方法が、治療有効量の前記組成物を癌患者に投与することを含む、組成物。

【請求項18】

前記癌が乳癌である、請求項17に記載の使用のための組成物。