

【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2年11月12日(2020.11.12)

【公表番号】特表2018-524333(P2018-524333A)

【公表日】平成30年8月30日(2018.8.30)

【年通号数】公開・登録公報2018-033

【出願番号】特願2017-567064(P2017-567064)

【国際特許分類】

C 07 D 291/08 (2006.01)

C 07 D 513/04 (2006.01)

C 07 D 515/04 (2006.01)

C 07 D 515/20 (2006.01)

A 61 P 43/00 (2006.01)

A 61 P 31/20 (2006.01)

A 61 K 31/395 (2006.01)

A 61 K 31/542 (2006.01)

A 61 K 45/00 (2006.01)

C 07 D 515/10 (2006.01)

【F I】

C 07 D 291/08 C S P

C 07 D 513/04 3 9 1

C 07 D 513/04 3 7 5

C 07 D 515/04

C 07 D 515/20

A 61 P 43/00 1 2 1

A 61 P 31/20

A 61 K 31/395

A 61 K 31/542

A 61 K 45/00

C 07 D 515/10

【誤訳訂正書】

【提出日】令和2年9月17日(2020.9.17)

【誤訳訂正1】

【訂正対象書類名】特許請求の範囲

【訂正対象項目名】全文

【訂正方法】変更

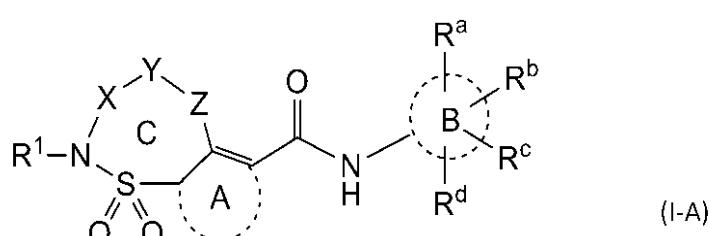
【訂正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

式(I-A)：

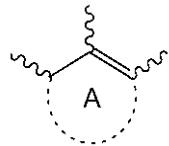
【化1】



の化合物、またはその立体異性体もしくは互変異性体、

[式中：

【化2】



は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環の5または6員アリールを示し、該アリールは、任意選択により、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、-CNおよびハロゲンからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換され；

【化3】



は、フェニルまたはピリジルを示し、

Xは-CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>-を示し；

Yは、それぞれ任意選択により、C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキル、フルオロおよび-OHからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>7</sub>アルカンジイルまたはC<sub>2</sub>～C<sub>7</sub>アルケンジイルを示し；

Zは、NH、酸素、または単結合を示し；

R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>、およびR<sup>d</sup>は、水素、ハロゲン、-CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub>-メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、および-C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択され、

R<sup>1</sup>は、水素、または、任意選択により-OH、フルオロ、およびオキソからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>10</sub>アルキルであり；

R<sup>2</sup>は、水素；任意選択により、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、および-C(=O)OC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>10</sub>アルキル；C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>；C<sub>2</sub>～C<sub>4</sub>アルキニル；任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環；ならびに、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリールからなる群から選択され；ここで、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、3～7員飽和環、または単環アリールは、それぞれ任意選択により、1つ以上のR<sup>8</sup>置換基で置換され；

R<sup>3</sup>は、水素、または、任意選択により、-OHで置換されるC<sub>1</sub>～<sub>6</sub>アルキルであり；

あるいは、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有し、かつ、任意選択により、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキル、ベンジル、ならびに、任意選択によりフルオロおよび/または-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アル

キルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換される3～7員飽和環を形成し；

$R^7$ は、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有し、かつ、任意選択により、ハロおよび $C_1$ ～ $C_3$ アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つまたは2つの置換基で置換される单環アリール；任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれ各自立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環；または $-NR^9R^{10}$ を示し；

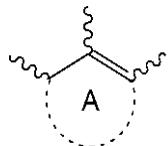
ここで、 $R^9$ および $R^{10}$ は、水素、および、任意選択により1つ以上のフルオロ置換基で置換される $C_1$ ～ $C_3$ アルキルからそれぞれ独立して選択され；

各 $R^8$ は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルオキシC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルオキシ、ならびに、任意選択により、フルオロおよび/または-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群から独立して選択される]、

またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

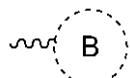
【請求項2】

【化4】



は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する单環の5または6員アリールを示し、該アリールは、任意選択により、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキルからなる群からそれ各自立して選択される1つ以上の置換基で置換され；

【化5】



は、フェニルまたはピリジルを示し；

Xは- $CR^2R^3$ -を示し；

Yは、それぞれ任意選択により、C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルおよび-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>7</sub>アルカンジイルまたはC<sub>2</sub>～C<sub>7</sub>アルケンジイルを示し；

Zは、酸素、または単結合を示し；

$R^a$ 、 $R^b$ 、 $R^c$ 、および $R^d$ は、水素、ハロゲン、-CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub>-メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、および-C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれ各自立して選択され、

$R^1$ は、水素、またはC<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルであり、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルは、任意選択により、-OH、フルオロ、オキソ、ならびに任意選択により1つ以上のフルオロおよび/もしくは-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれ各自立して選択される1つ以上の置換基で置換され；

$R^2$ は、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれ各自立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環、ならびに、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有する单環アリールからなる群から選択され、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>

、3～7員飽和環、または単環アリールは、任意選択により1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；R<sup>3</sup>は、水素、またはC<sub>1</sub>～<sub>6</sub>アルキルであり；

あるいは、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環を形成し、該3～7員飽和環は、任意選択により、1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

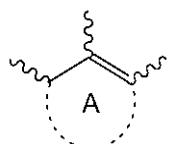
R<sup>7</sup>は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリール；任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環；または-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>を示し；

ここで、R<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>は、水素、および、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキルからそれぞれ独立して選択され；

各R<sup>8</sup>は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキル、ならびに、任意選択により、フルオロおよび/または-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群から独立して選択される、請求項1に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

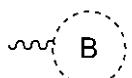
【請求項3】

【化6】



は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環の5または6員アリールを示し、該アリールは、任意選択により、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、-CNおよびハロゲンからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換され；

【化7】



は、フェニルまたはピリジルを示し；

Xは-CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>-を示し；

Yは、それぞれ任意選択により、C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルおよび-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>7</sub>アルカンジイルまたはC<sub>2</sub>～C<sub>7</sub>アルケンジイルを示し；

Zは、酸素、または単結合を示し；

R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>、およびR<sup>d</sup>は、水素、ハロゲン、-CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub>-メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、および-C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択され、

R<sup>1</sup>は、水素、またはC<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルであり、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルは、任意選択により、-OH、フルオロ、オキソ、ならびに任意選択により1つ以上のフルオロおよび/もしくは-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換され；

R<sup>2</sup>は、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、任意選択により、O

、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環、ならびに、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有する單環アリールからなる群から選択され、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、3～7員飽和環、または單環アリールは、任意選択により1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；R<sup>3</sup>は水素であり；

あるいは、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環を形成し、該3～7員飽和環は、任意選択により、1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

R<sup>7</sup>は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する單環アリール；任意選択によりO、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環；または-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>を示し；

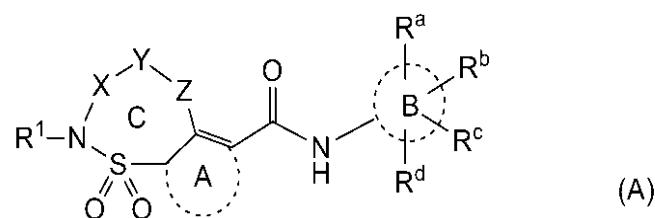
ここで、R<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>は、水素、および、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキルからそれぞれ独立して選択され；

各R<sup>8</sup>は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキル、ならびに、任意選択により、フルオロおよび/または-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群から独立して選択される、請求項1または2に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

【請求項4】

式(A)：

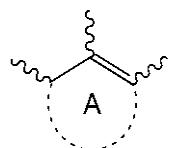
【化8】



で表される請求項1～3のいずれか1項に記載の化合物、またはその立体異性体もしくは互変異性体

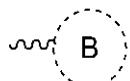
[式中：

【化9】



は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する單環の5または6員アリールを示し、該アリールは、任意選択により1つ以上のメチル、-CNまたはハロゲンで置換され；

【化10】



は、フェニルまたはピリジルを示し；

Xは-CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>-を示し；

Yは、それぞれ任意選択により、1つ以上のC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルまたは-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>7</sub>アルカンジイルまたはC<sub>2</sub>～C<sub>7</sub>アルケンジイルを示し；

Zは、酸素、または単結合を示し；

R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>、およびR<sup>d</sup>は、水素、ハロゲン、-CHF<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub>-メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、および-C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群から独立して選択され、

R<sup>1</sup>は、水素、またはC<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルであり、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルは、任意選択により、-OH、フルオロ、オキソ、ならびに任意選択により1つ以上のフルオロおよび/もしくは-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換され；

R<sup>2</sup>は、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環、ならびに、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリールからなる群から選択され、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、3～7員飽和環、または単環アリールは、任意選択により1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

R<sup>3</sup>は水素であり；

あるいは、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環を形成し、該3～7員飽和環は、任意選択により、1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

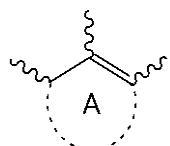
R<sup>7</sup>は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリールを示し；

各R<sup>8</sup>は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキル、ならびに、任意選択により1つ以上のフルオロおよび/または-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群から独立して選択される]、

あるいは、その薬学的に許容される塩または溶媒和物。

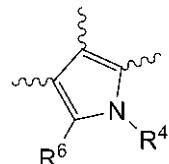
【請求項5】

【化11】



は、

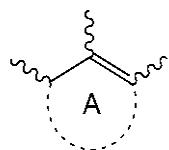
【化12】



(式中、R<sup>4</sup>は、水素、-C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル、またはC<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキルであり；かつR<sup>6</sup>は、水素、メチル、-CNおよびハロゲンから選択される)を示す請求項1～3のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

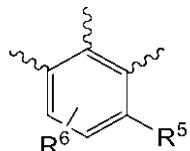
## 【請求項 6】

## 【化 1 3】



は、

## 【化 1 4】



(式中、R<sup>5</sup>は、水素またはハロゲンであり；かつR<sup>6</sup>は、水素、メチル、-CNおよびハロゲンから選択される)を示す請求項1～4のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 7】

環Cは、6～8個の原子からなる請求項1～6のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 8】

R<sup>4</sup>はメチルである請求項5または7に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 9】

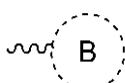
R<sup>6</sup>は水素である請求項5～8のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 10】

R<sup>2</sup>は、任意選択により、-OH、フルオロおよびメトキシからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルである請求項1～9のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 11】

## 【化 1 5】



はフェニルを示し、R<sup>a</sup>は水素およびハロゲンから選択され、R<sup>b</sup>は水素またはハロゲンであり、R<sup>c</sup>はハロゲン、CH<sub>3</sub>、CH<sub>2</sub>F、CF<sub>3</sub>、および-CNから選択され、かつR<sup>d</sup>は水素およびハロゲンから選択される請求項1～10のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 12】

R<sup>2</sup>は、任意選択により1個以上のフルオロで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルである請求項1～11のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、

またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

【請求項 1 3】

$R^2$  は、任意選択により 1 つ以上の -OH 置換基で置換される  $C_1 \sim C_6$  アルキルである請求項 1 ~ 11 のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

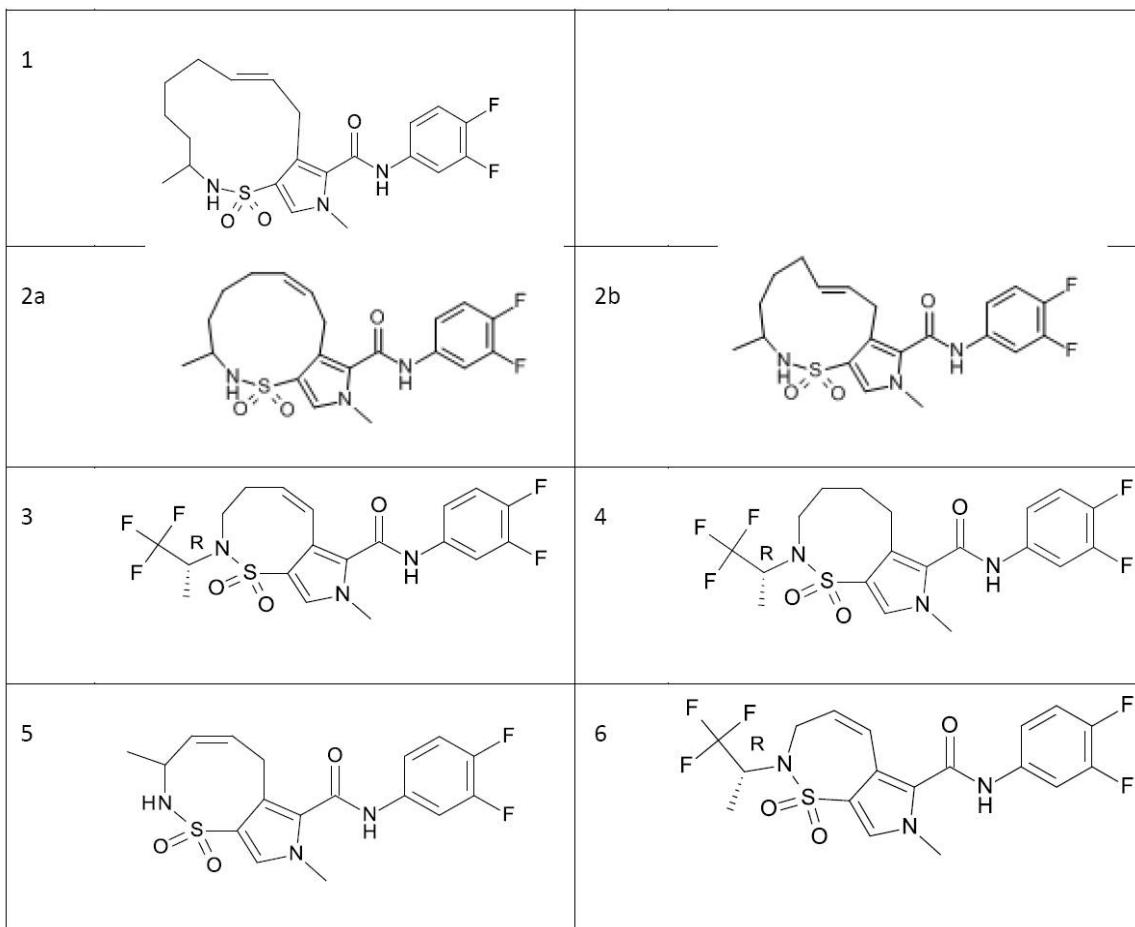
【請求項 1 4】

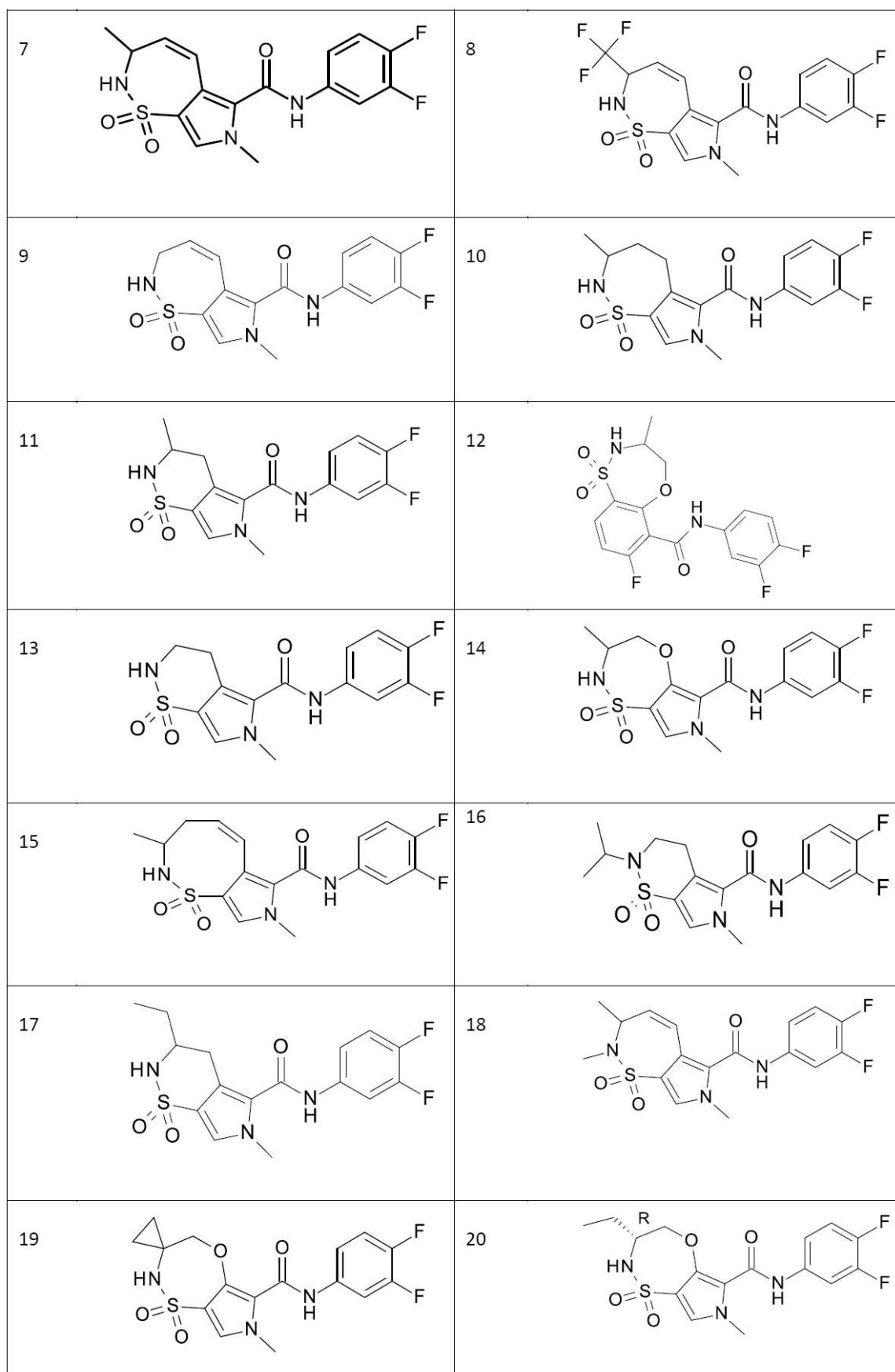
$R^1$  は水素である請求項 1 ~ 13 のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

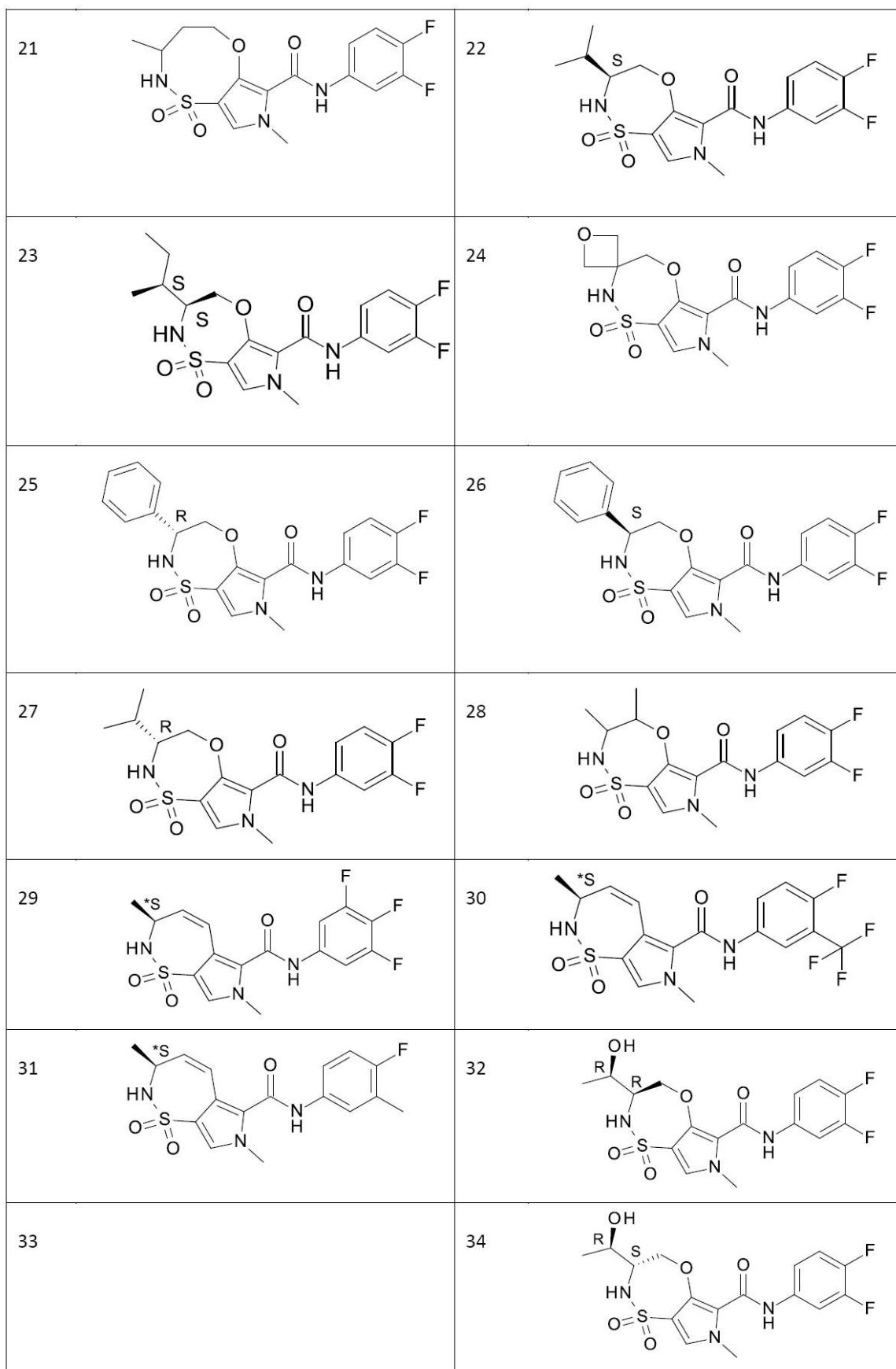
【請求項 1 5】

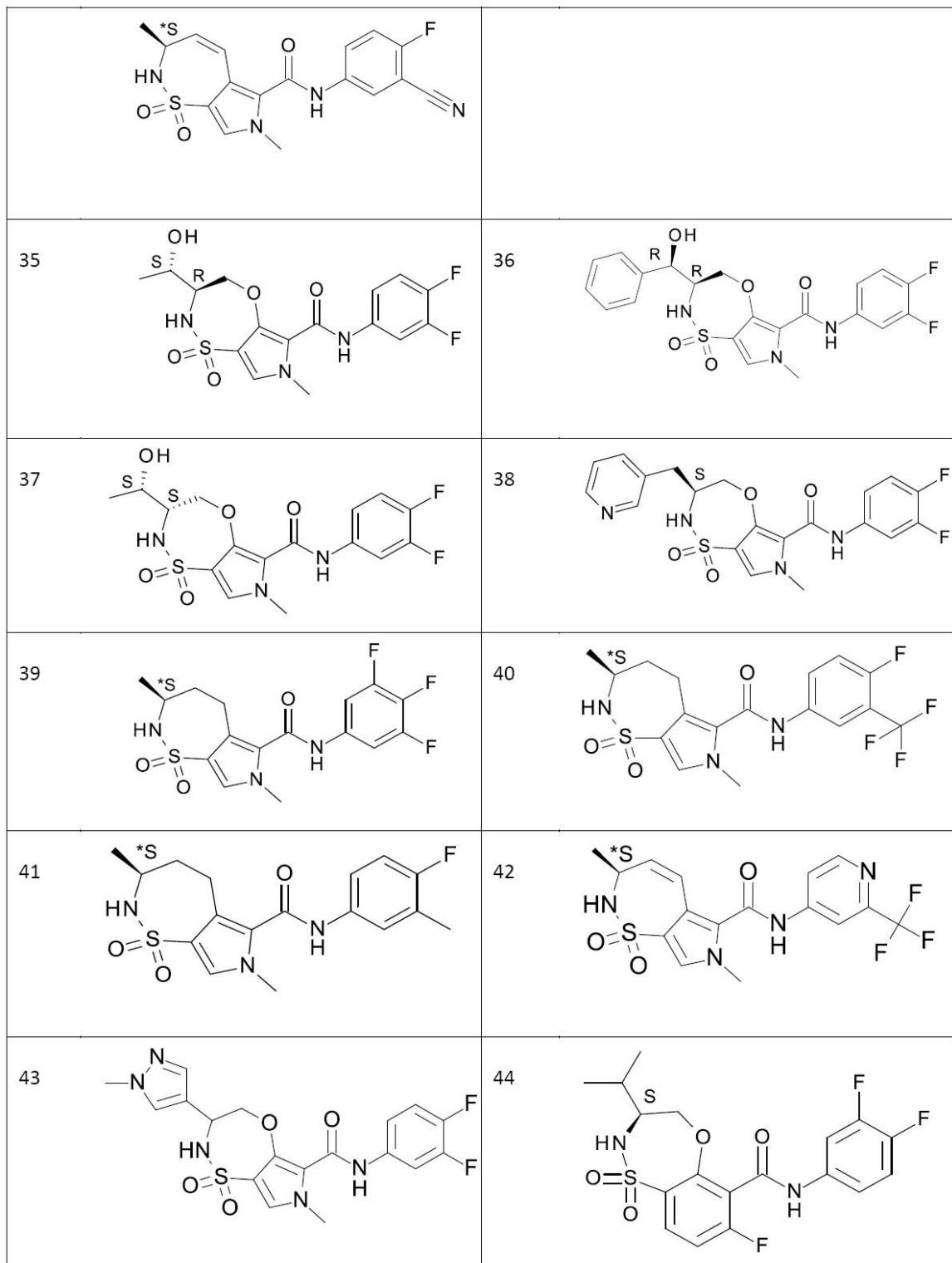
以下の 1、2a、2b、3 ~ 244 および 246 ~ 250 と番号付けられた化合物からなる群から選択される化合物：

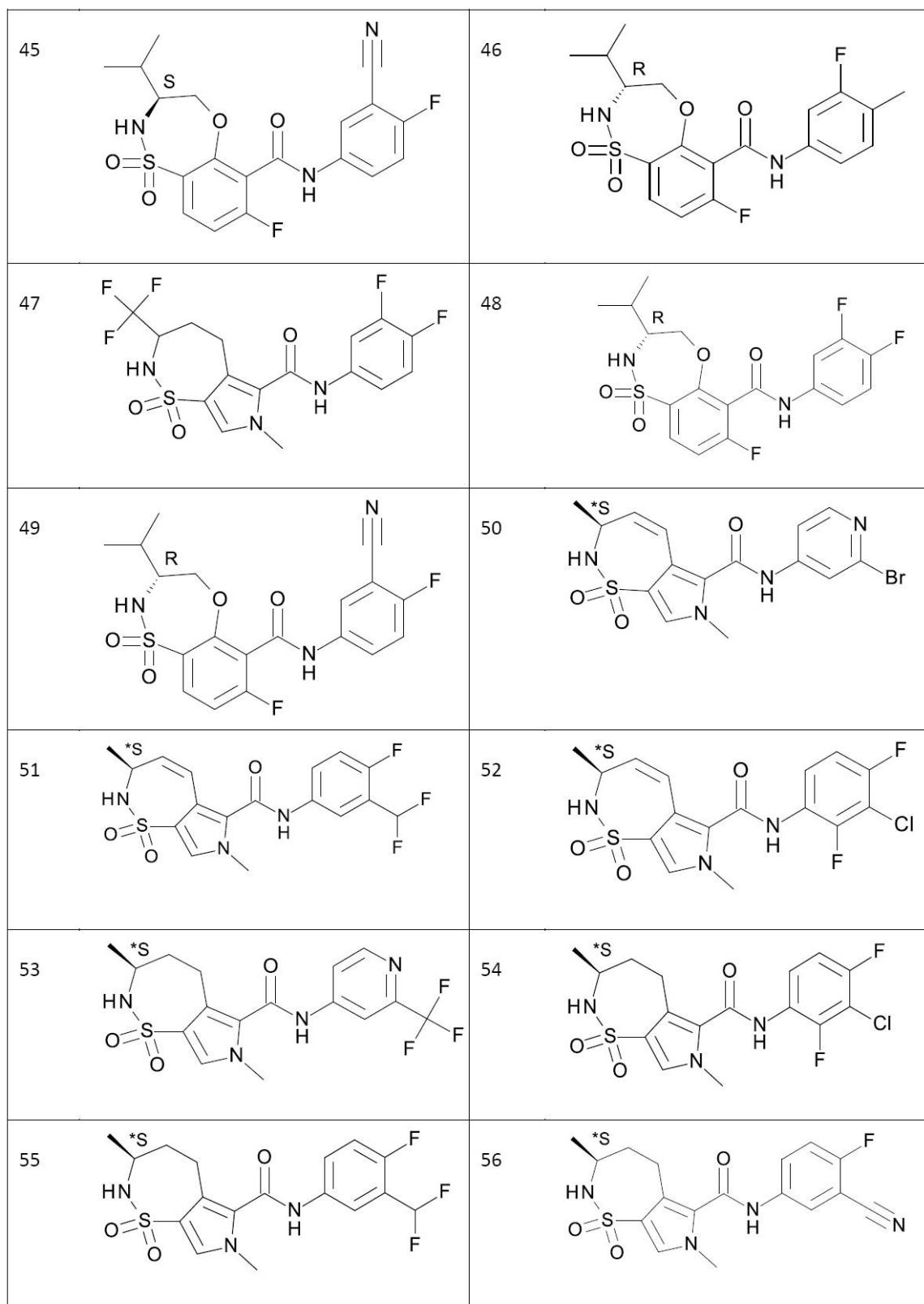
【化 1 6】

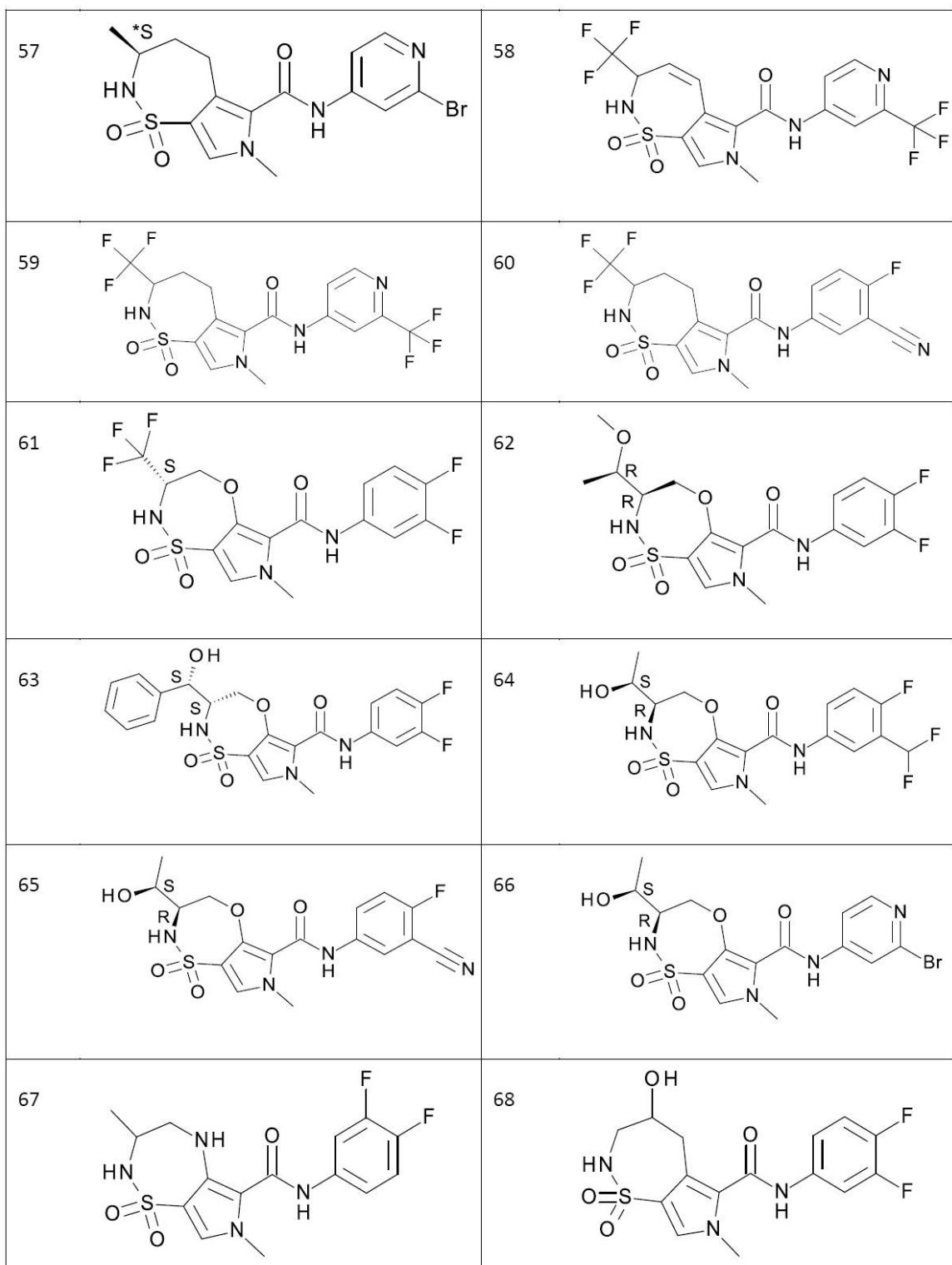


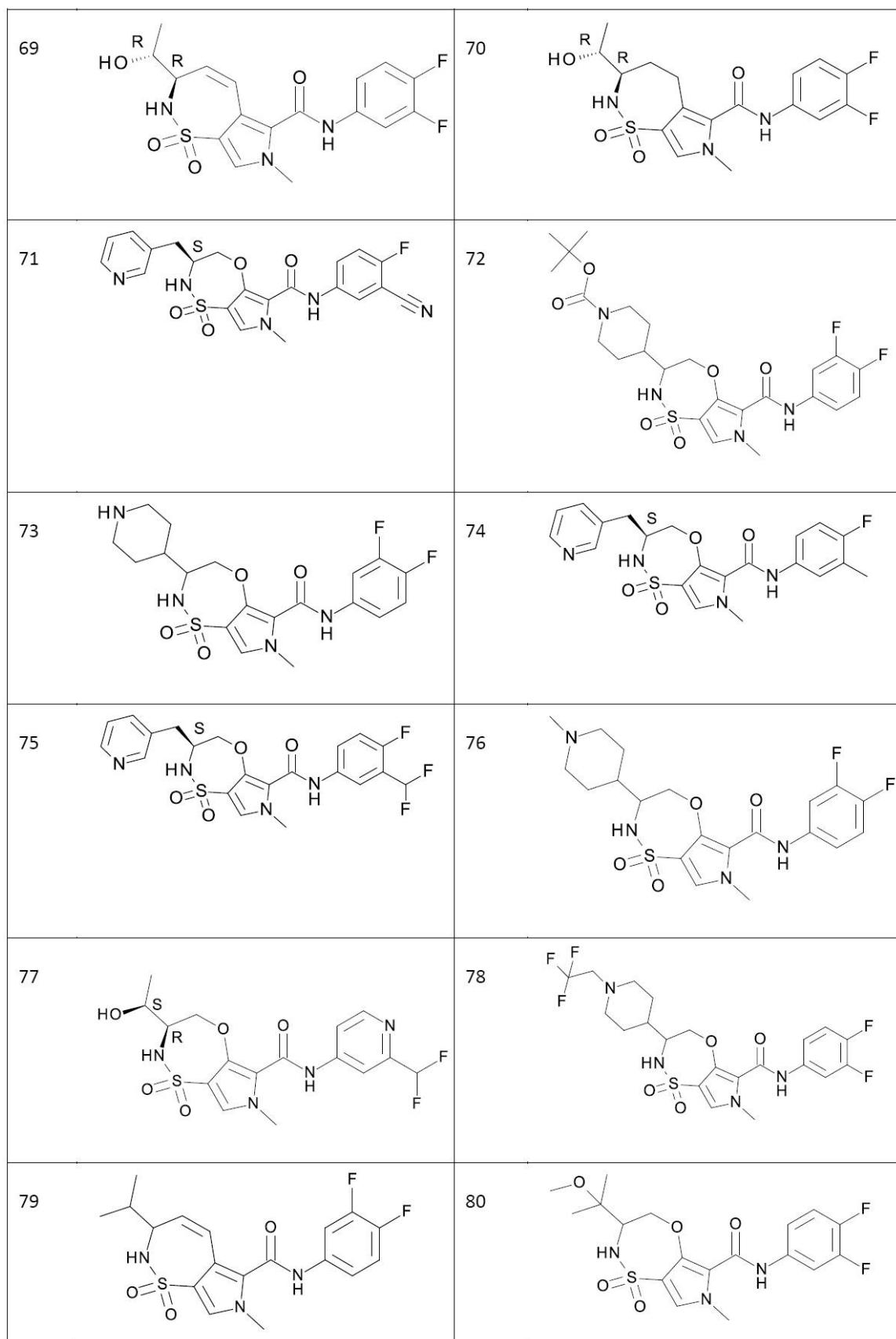


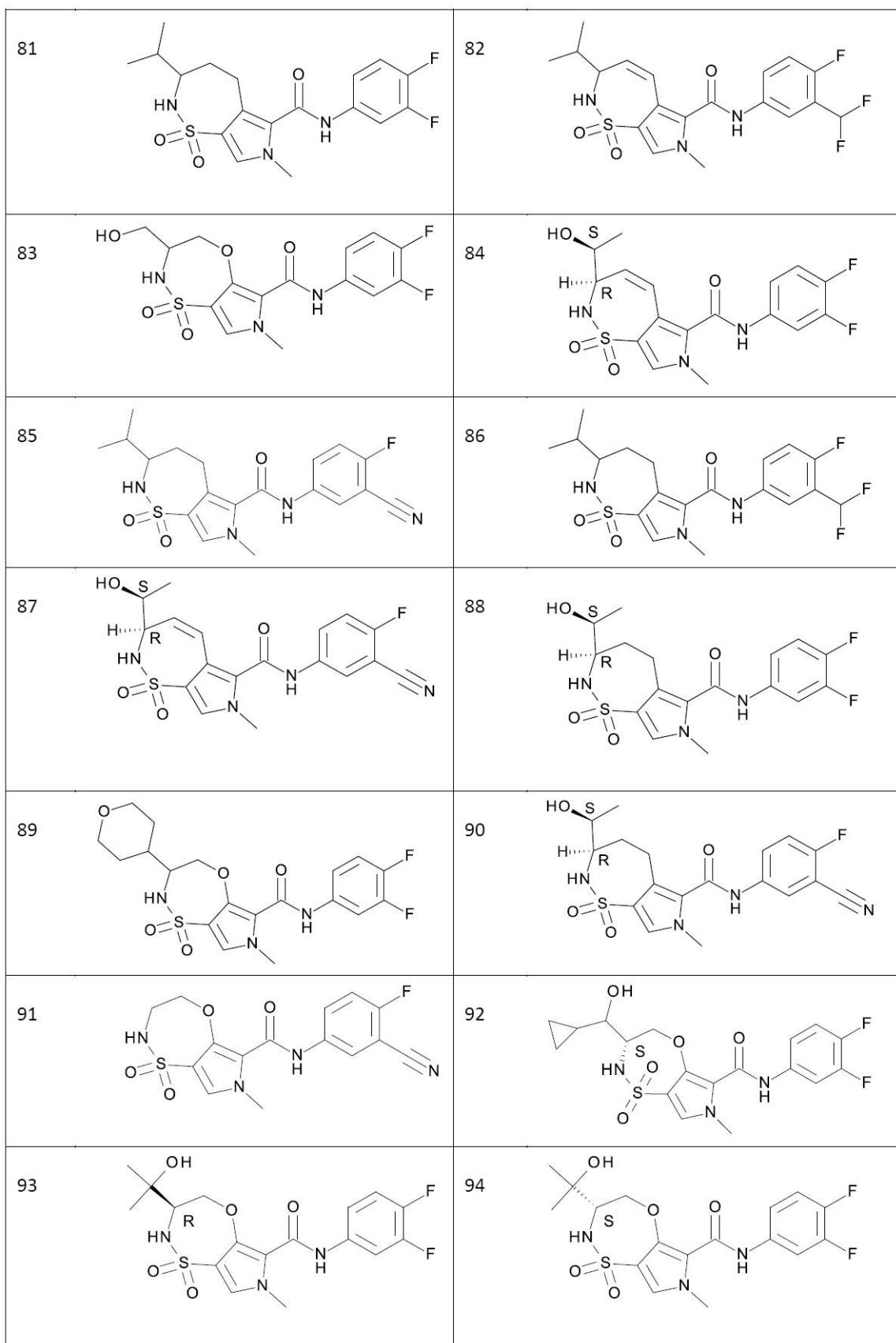


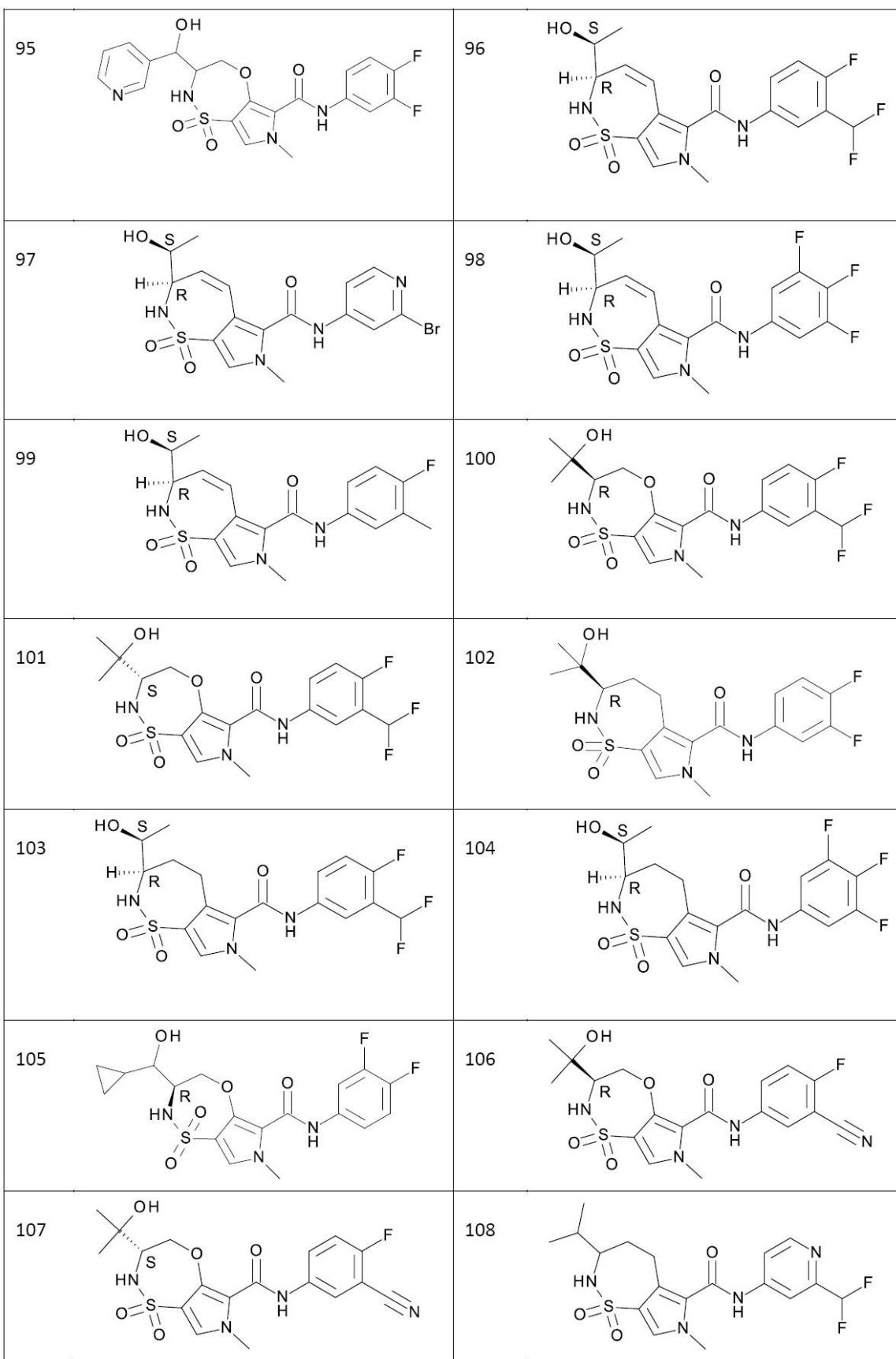


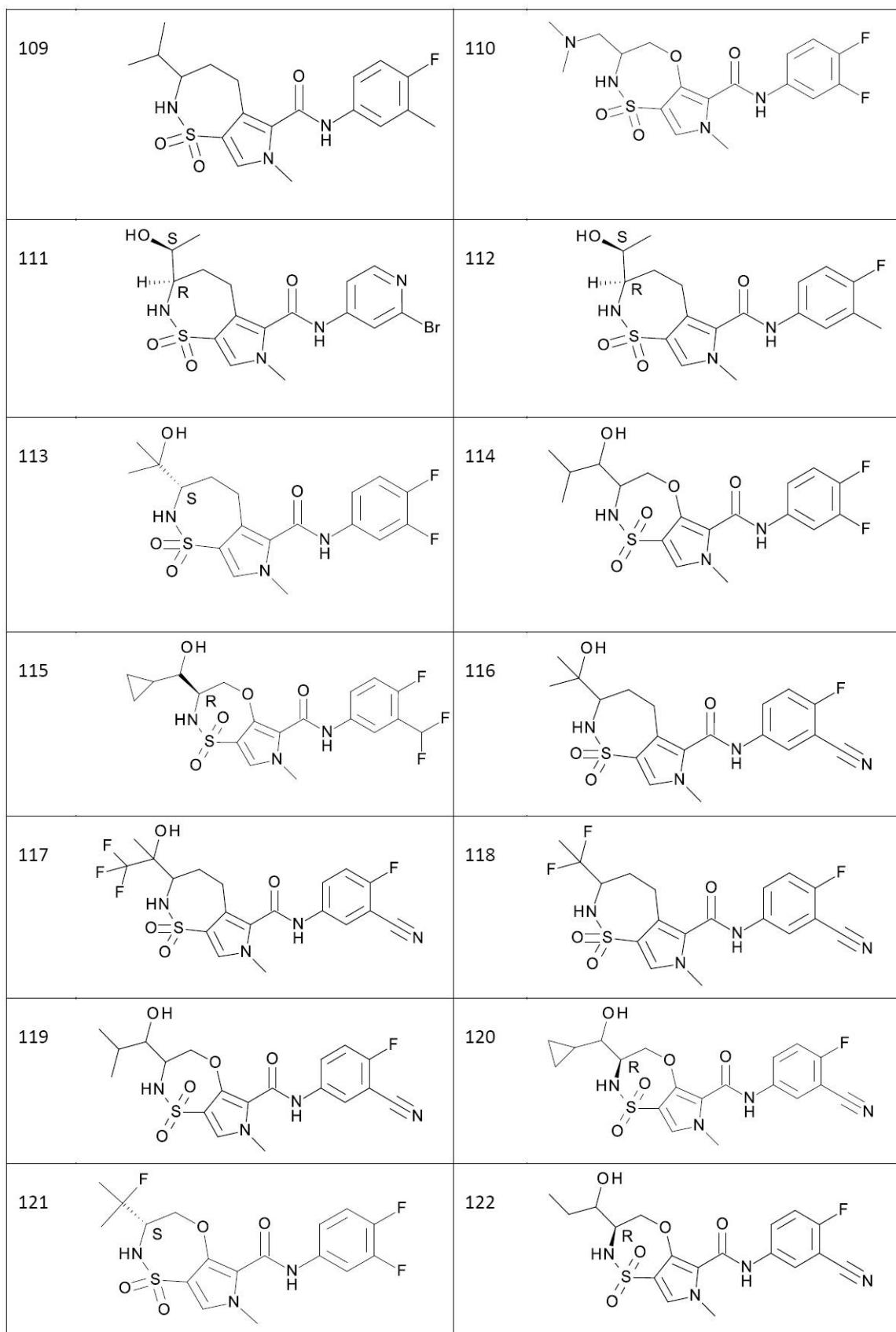


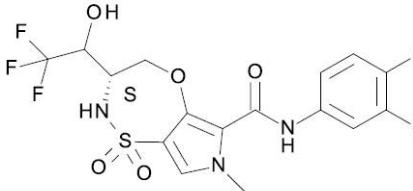
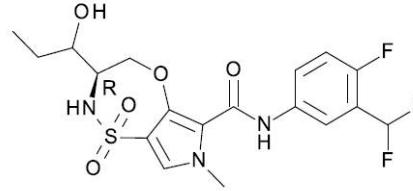
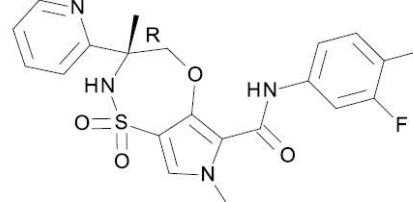
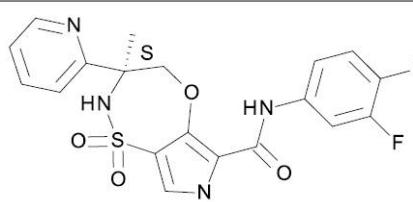
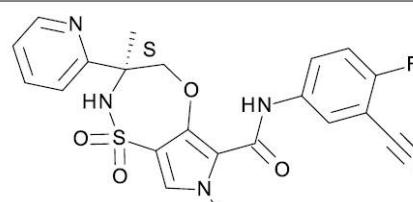
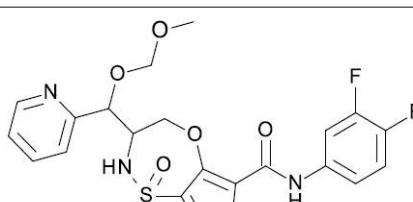
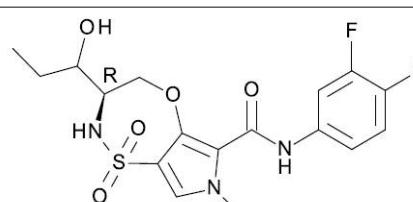
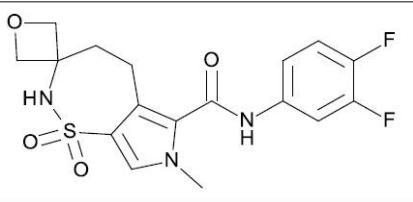
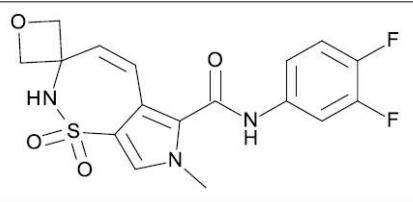
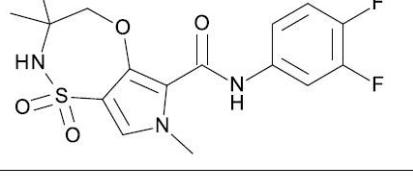
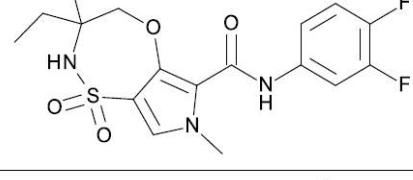
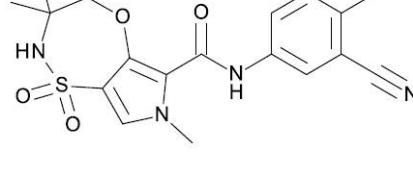
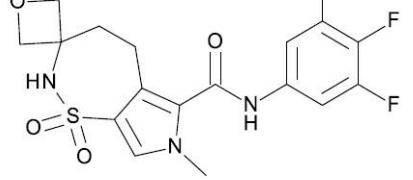


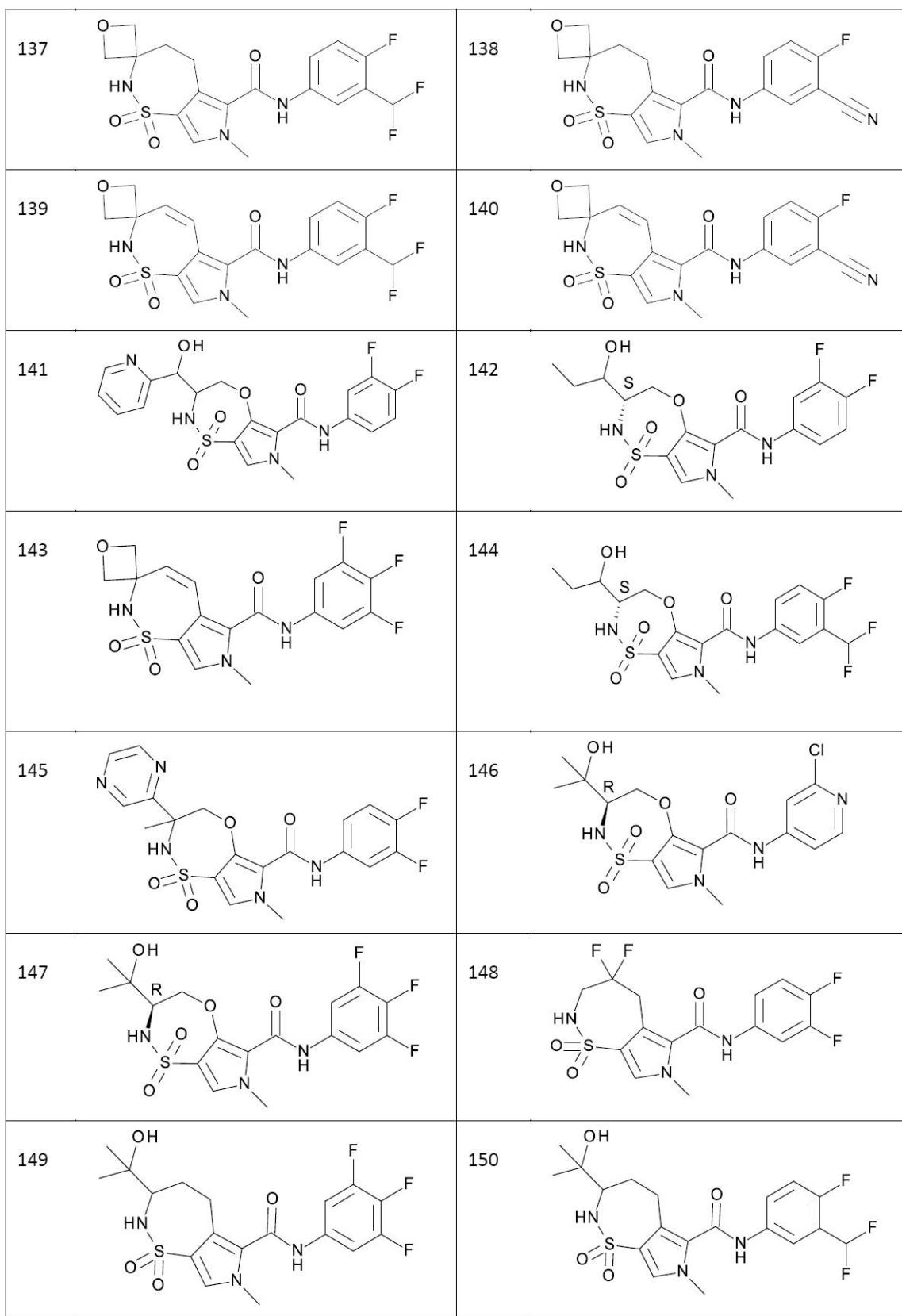


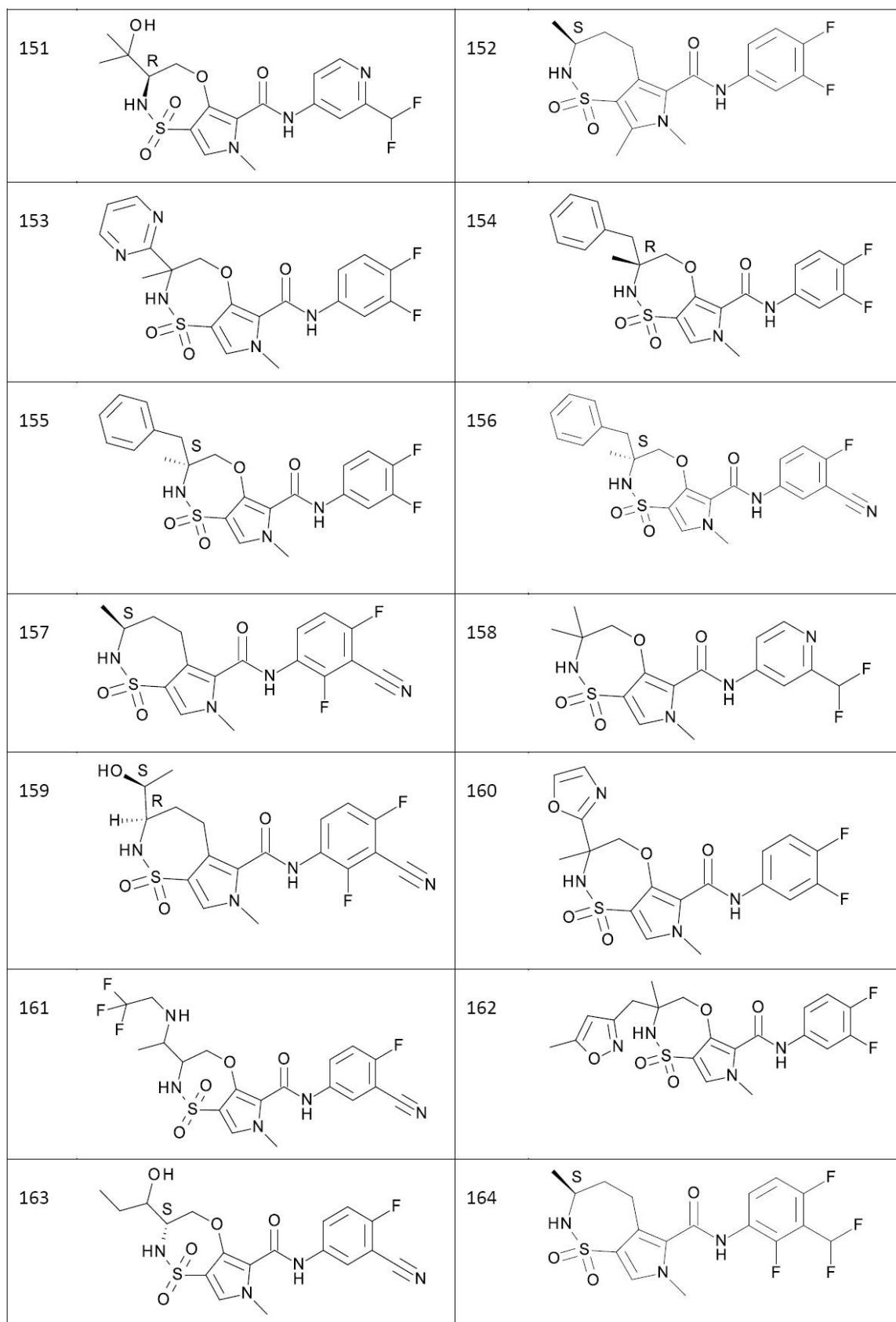


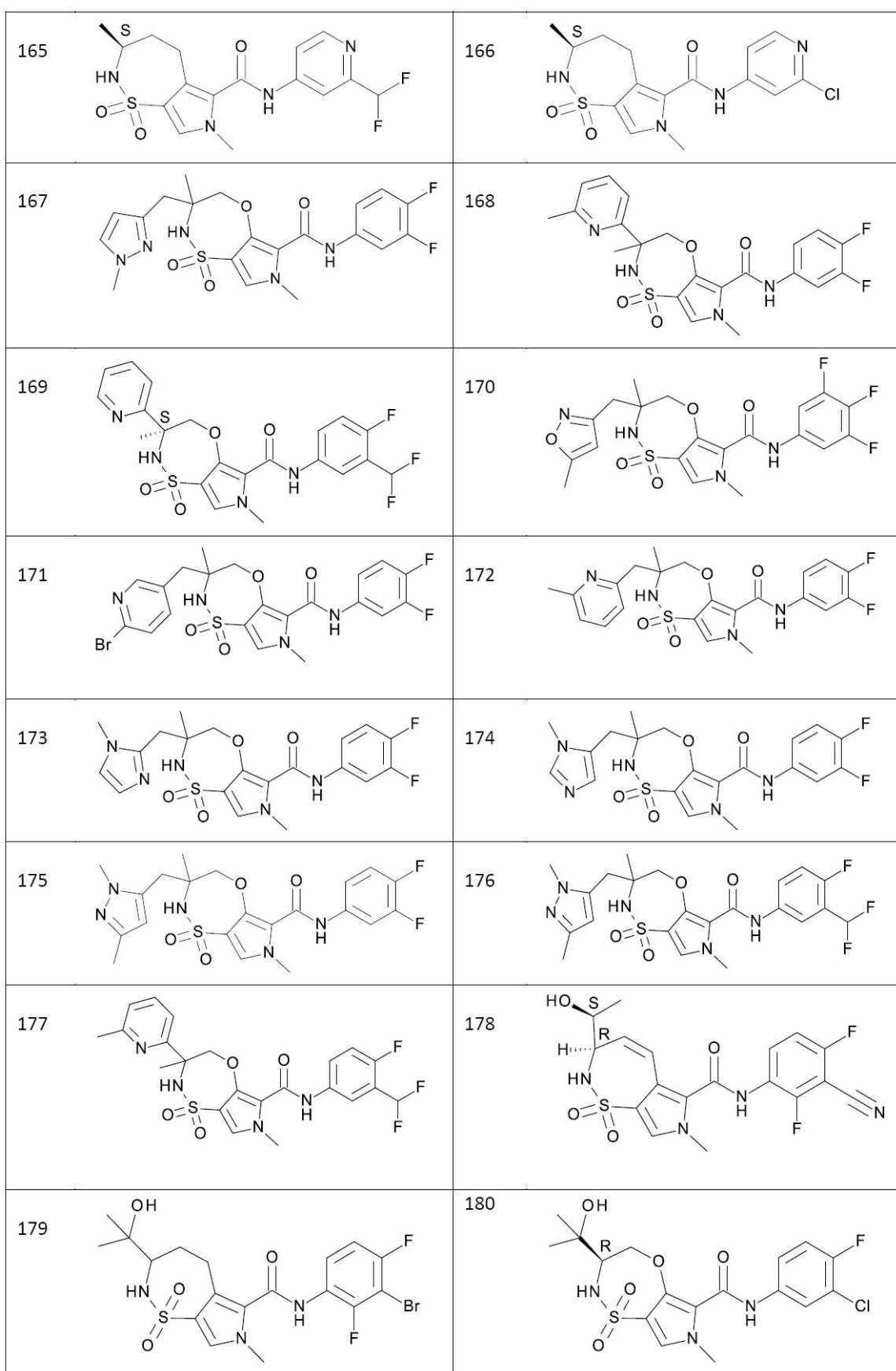


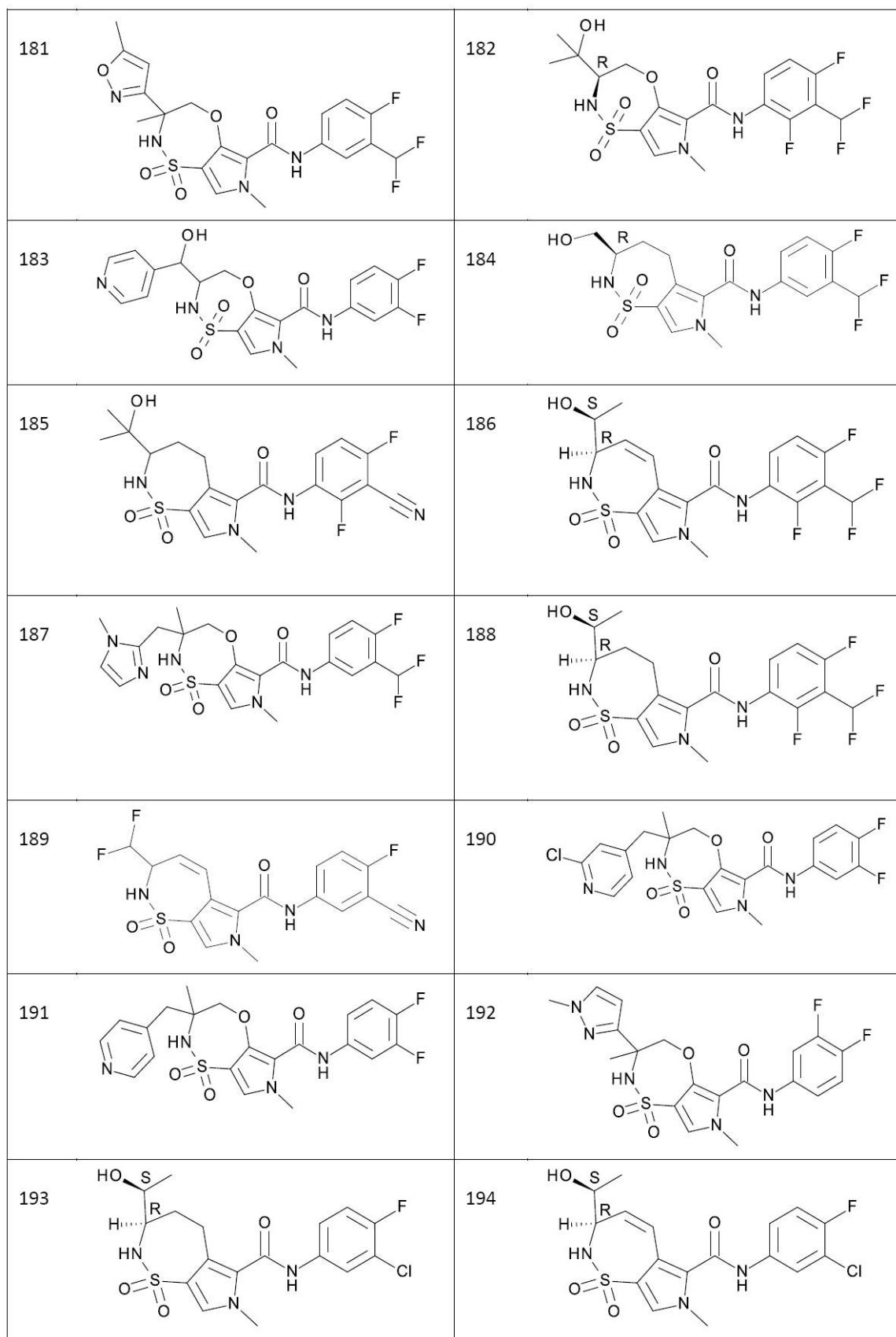


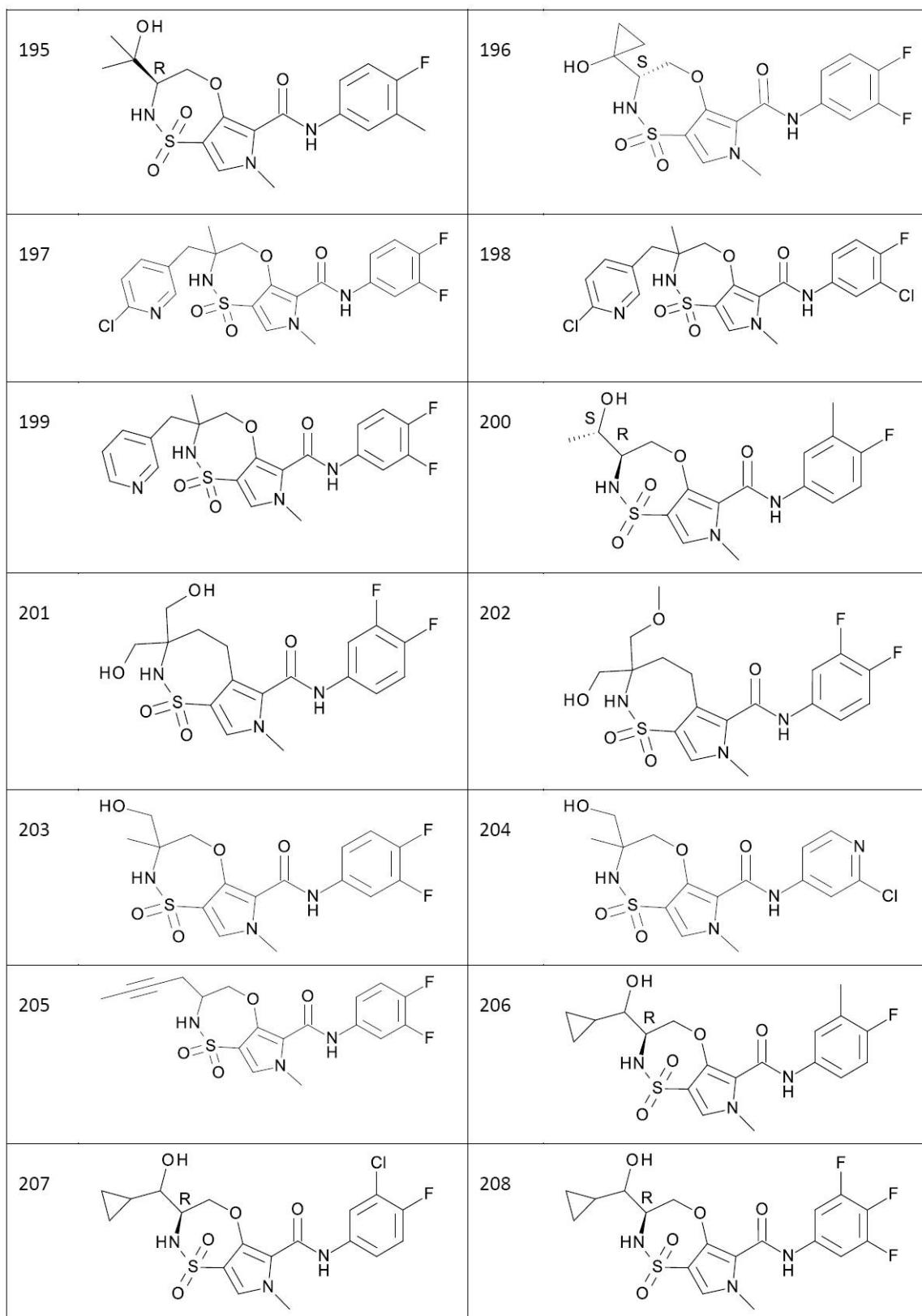
123		124	
125		126	
127		128	
129		130	
131		132	
133		134	
135		136	

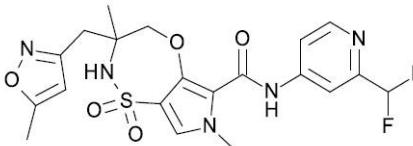
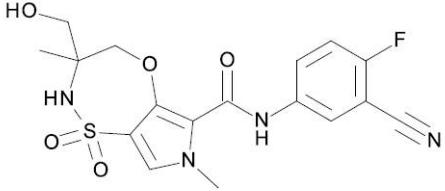
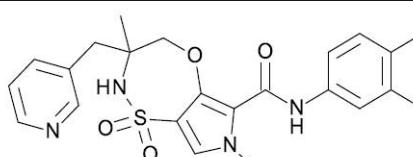
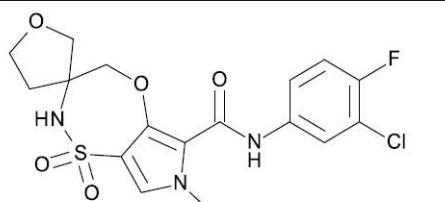
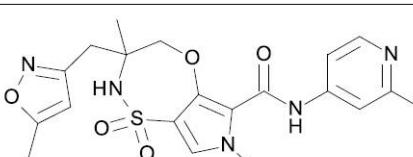
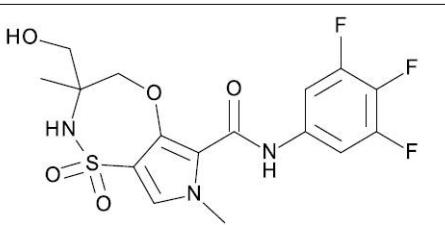
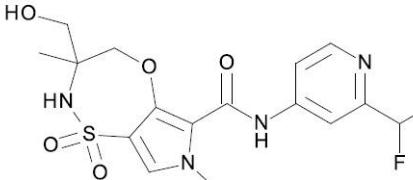
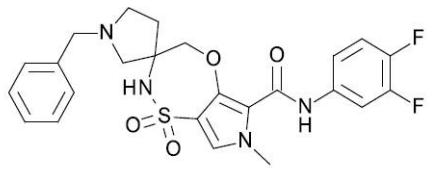
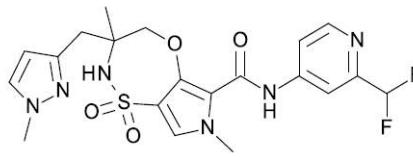
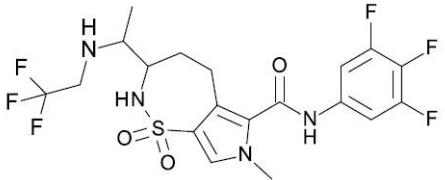
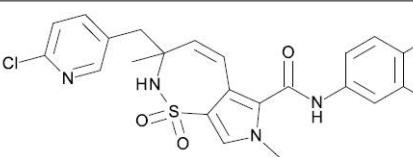
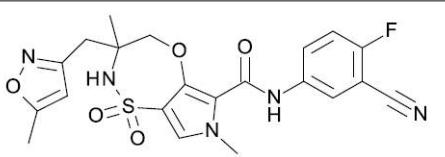
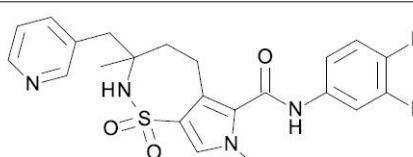
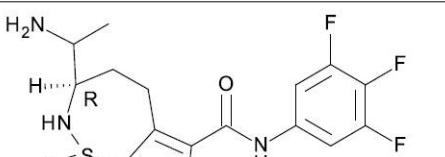


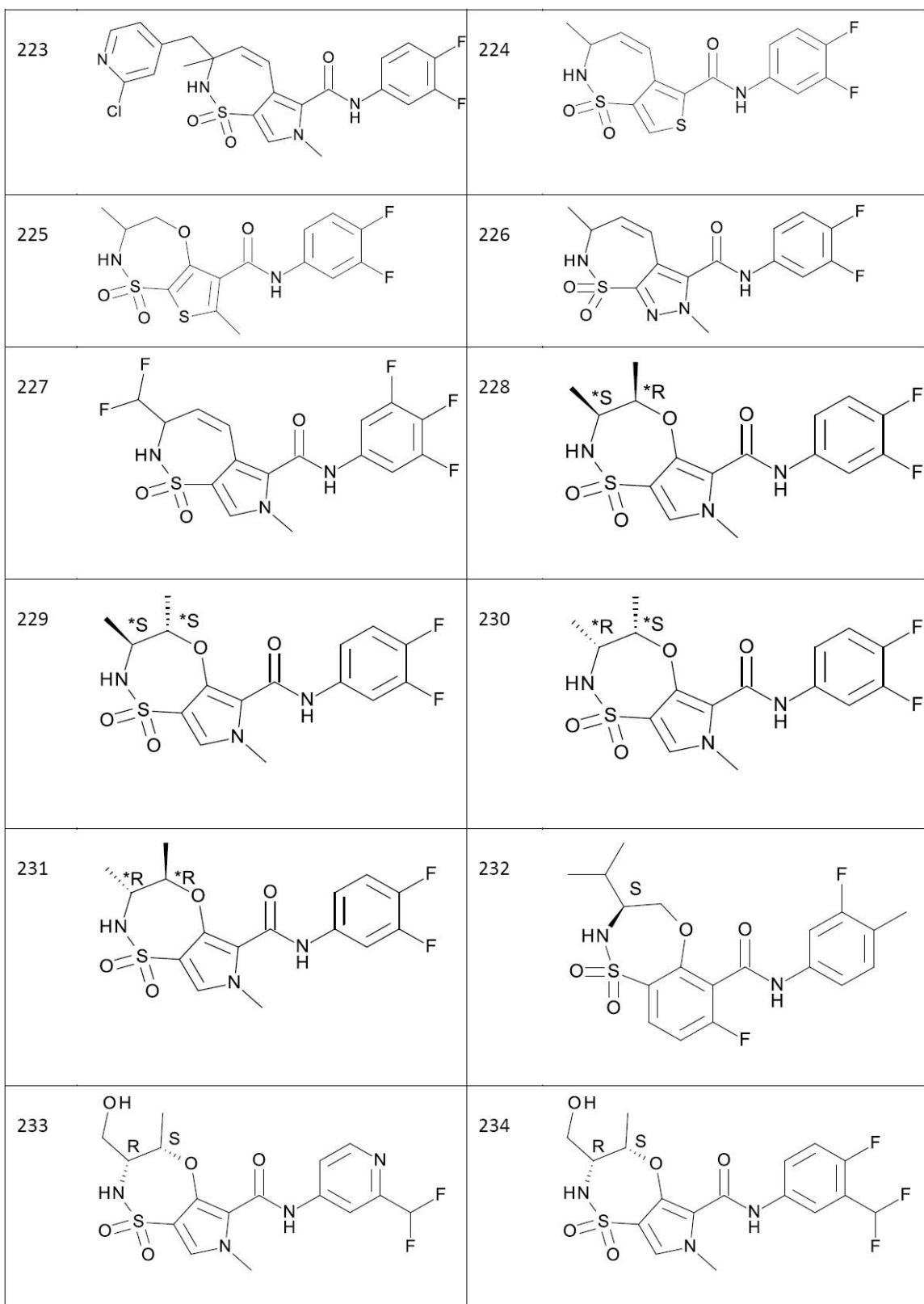


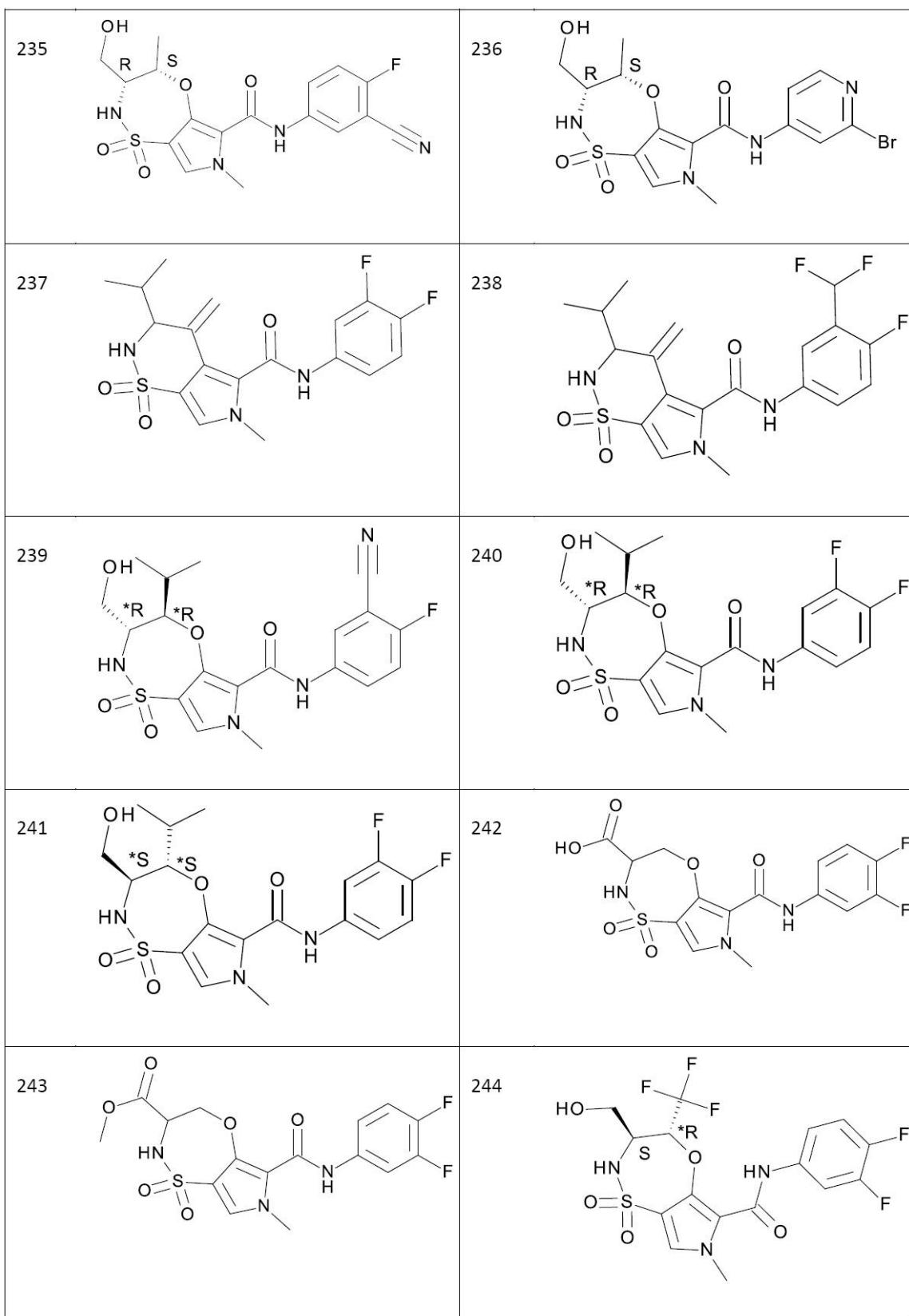






209		210	
211		212	
213		214	
215		216	
217		218	
219		220	
221		222	





	246	
247	248	
249	250	

またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

【請求項 16】

以下：

(3S)-N-(3-シアノ-4-フルオロ-フェニル)-7-メチル-1,1-ジオキソ-3-(3-ピリジルメチル)-3,4-ジヒドロ-2H-ピロロ[3,4-b][1,4,5]オキサチアゼピン-6-カルボキサミド；

(3R)-3-[(1S)-1-ヒドロキシエチル]-7-メチル-1,1-ジオキソ-N-(3,4,5-トリフルオロフェニル)-2,3-ジヒドロピロロ[3,4-f]チアゼピン-6-カルボキサミド；

(3R)-N-[3-(ジフルオロメチル)-4-フルオロ-フェニル]-3-(1-ヒドロキシ-1-メチル-エチル)-7-メチル-1,1-ジオキソ-3,4-ジヒドロ-2H-ピロロ[3,4-b][1,4,5]オキサチアゼピン-6-カルボキサミド；

(3R)-N-(3-シアノ-4-フルオロ-フェニル)-3-(1-ヒドロキシ-1-メチル-エチル)-7-メチル-1,1-ジオキソ-3,4-ジヒドロ-2H-ピロロ[3,4-b][1,4,5]オキサチアゼピン-6-カルボキサミド；

(3S)-N-(3-シアノ-4-フルオロ-フェニル)-3,7-ジメチル-1,1-ジオキソ-2,3,4,5-テトラヒドロピロロ[3,4-f]チアゼピン-6-カルボキサミド；

N-[3-(ジフルオロメチル)-4-フルオロ-フェニル]-3-(1-ヒドロキシ-1-メチル-エチル)-7-メチル-1,1-ジオキソ-2,3,4,5-テトラヒドロピロロ[3,4-f]チアゼピン-6-カルボキサミド；

N-[3-(ジフルオロメチル)-4-フルオロ-フェニル]-3-[[(2,5-ジメチルピラゾール-3-イル)メチル]-3,7-ジメチル-1,1-ジオキソ-2,4-ジヒドロピロロ[3,4-b][1,4,5]オキサチアゼピン-6-カルボキサミド；

および

N-[3-(ジフルオロメチル)-4-フルオロ-フェニル]-3,7-ジメチル-3-[(1-メチルイミダゾール-2-イル)メチル]-1,1-ジオキソ-2,4-ジヒドロピロロ[3,4-b][1,4,5]オキサチアゼピン-6-カルボキサミド

からなる群から選択される化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、

またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 17】

化合物 (3S)-N-(3-シアノ-4-フルオロ-フェニル)-7-メチル-1,1-ジオキソ-3-(3-ピリジルメチル)-3,4-ジヒドロ-2H-ピロ口 [3,4-b] [1,4,5] オキサチアゼピン-6-カルボキサミドまたはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 18】

化合物 (3R)-3-[ (1S)-1-ヒドロキシエチル]-7-メチル-1,1-ジオキソ-N-(3,4,5-トリフルオロフェニル)-2,3-ジヒドロピロ口 [3,4-f] チアゼピン-6-カルボキサミドまたはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 19】

化合物 (3R)-N-[3-(ジフルオロメチル)-4-フルオロ-フェニル]-3-(1-ヒドロキシ-1-メチル-エチル)-7-メチル-1,1-ジオキソ-3,4-ジヒドロ-2H-ピロ口 [3,4-b] [1,4,5] オキサチアゼピン-6-カルボキサミドまたはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 20】

化合物 (3R)-N-(3-シアノ-4-フルオロ-フェニル)-3-(1-ヒドロキシ-1-メチル-エチル)-7-メチル-1,1-ジオキソ-3,4-ジヒドロ-2H-ピロ口 [3,4-b] [1,4,5] オキサチアゼピン-6-カルボキサミドまたはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 21】

化合物 (3S)-N-(3-シアノ-4-フルオロ-フェニル)-3,7-ジメチル-1,1-ジオキソ-2,3,4,5-テトラヒドロピロ口 [3,4-f] チアゼピン-6-カルボキサミドまたはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 22】

化合物 (3\*S)-N-[3-(ジフルオロメチル)-4-フルオロ-フェニル]-3-(1-ヒドロキシ-1-メチル-エチル)-7-メチル-1,1-ジオキソ-2,3,4,5-テトラヒドロピロ口 [3,4-f] チアゼピン-6-カルボキサミドまたはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 23】

化合物 (3\*S)-N-[3-(ジフルオロメチル)-4-フルオロ-フェニル]-3-[ (2,5-ジメチルピラゾール-3-イル)メチル]-3,7-ジメチル-1,1-ジオキソ-2,4-ジヒドロピロ口 [3,4-b] [1,4,5] オキサチアゼピン-6-カルボキサミドまたはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 24】

化合物 N-[3-(ジフルオロメチル)-4-フルオロ-フェニル]-3,7-ジメチル-3-[ (1-メチルイミダゾール-2-イル)メチル]-1,1-ジオキソ-2,4-ジヒドロピロ口 [3,4-b] [1,4,5] オキサチアゼピン-6-カルボキサミドまたはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 25】

医薬品として使用するための請求項 1 ~ 24 のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 26】

哺乳動物におけるHBV感染の予防または治療に使用するための請求項 1 ~ 24 のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

## 【請求項 27】

請求項 1 ~ 24 のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物、および薬学的に許容される担体を含む医薬組成物。

## 【請求項 28】

H B V 感染の治療において同時に、別々に、または順次使用する組み合わせ製剤として、(a) 請求項 1 ~ 24 のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物、または請求項 27 に記載の医薬組成物、および (b) 他の H B V 阻害剤を含有する製品。

## 【請求項 29】

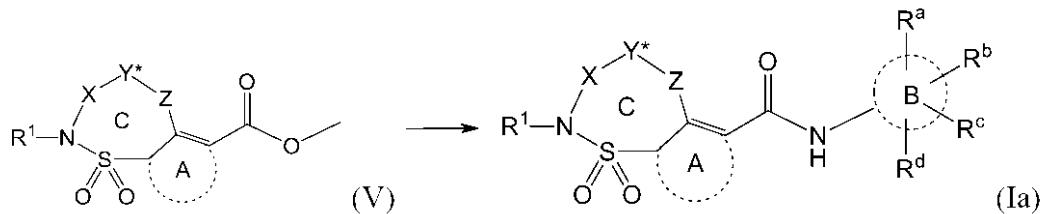
H B V に感染するか、または H B V に感染するリスクのある温血動物を治療するための医薬組成物であって、請求項 1 ~ 24 のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物を含む、医薬組成物。

## 【請求項 30】

請求項 1 ~ 24 のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物の製造方法であって、

(a) 溶媒中で、塩基の存在下に、式 (V) の化合物を式 (VI) のアミンと反応させて、式 (Ia) の化合物を生成する工程、

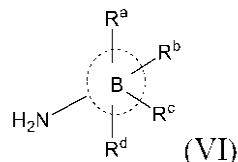
## 【化 17】



を含み、

前記式 (VI) のアミンは、

## 【化 18】



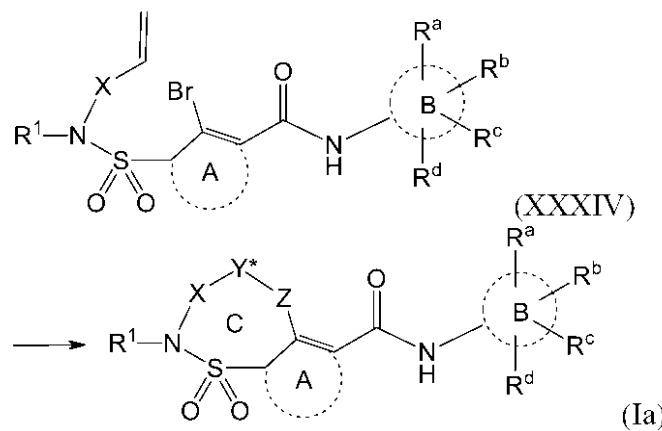
であり、Y\* は、C<sub>2</sub> ~ C<sub>7</sub> アルケンジイルであり、かつ他の可変符号は全て請求項 1 ~ 24 のいずれか一項に定義された通りである、方法。

## 【請求項 31】

請求項 1 ~ 24 のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物の製造方法であって、

(b) 式 (XXXIV) の化合物を、ヘック反応の条件下に置いて、式 (Ia) の化合物を生成する工程、

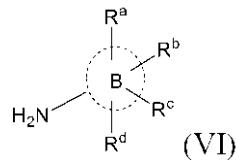
## 【化19】



を含み、

前記式 (V I) のアミンは、

## 【化20】



であり、Y\*は、-CH=CH-であり、Y\*\*は、C<sub>1</sub>～C<sub>7</sub>アルカンジイルであり、Zは、単結合であり、かつ他の可変符号は全て請求項1～24のいずれか一項に定義された通りである、方法。

## 【請求項32】

前記式 (V I) の化合物を水素化する工程をさらに含む、請求項30または31に記載の方法。

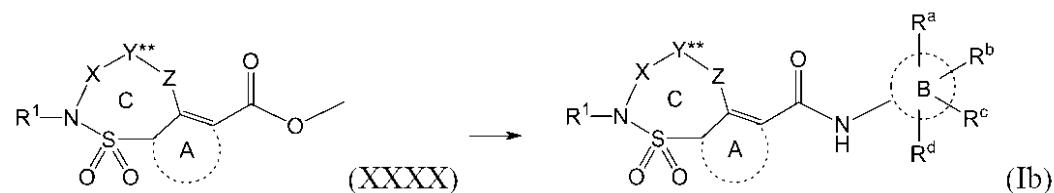
## 【請求項33】

請求項1～24のいずれか一項に記載の化合物またはその立体異性体もしくは互変異性体、またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物の製造方法であって、

(c) 溶媒中で、塩基の存在下に、式(XXXX)の化合物を式(V I)のアミンと反応させる工程

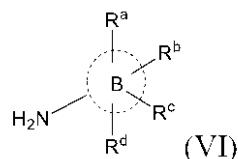
を含み、

## 【化21】



前記式 (V I) のアミンは、

## 【化22】

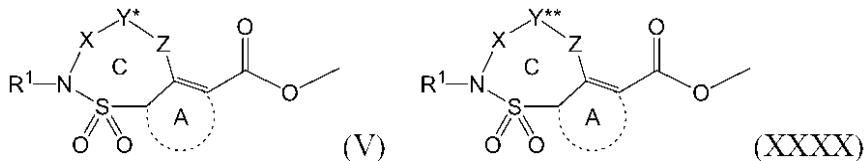


であり、 $Y^*$  は、 $C_2$  ~  $C_7$  アルケンジイルであり、かつ他の可変符号は全て請求項 1 ~ 2 4 のいずれか一項に定義された通りである、方法。

【請求項 3 4】

式 (V) または式 (XXXX) の化合物：

【化 2 3】



(式中、

$Y^*$  は、 $C_2$  ~  $C_7$  アルケンジイルであり、 $Y^{**}$  は  $C_1$  ~  $C_7$  アルカンジイルであり、かつ他の可変符号は全て請求項 1 ~ 2 4 のいずれか一項に定義された通りである)。

【誤訳訂正 2】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0 0 1 2

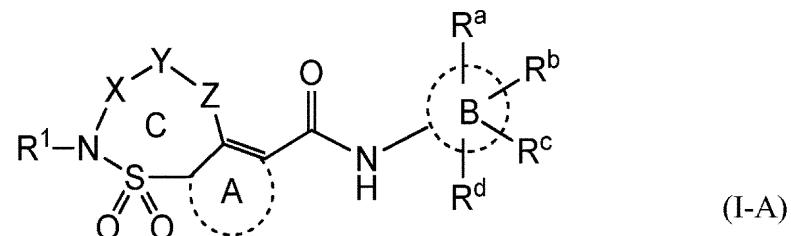
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0 0 1 2】

本発明は、式 (I-A) :

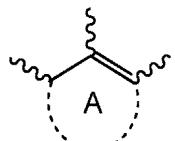
【化 1】



の化合物、またはその立体異性体もしくは互変異性体

[式中、

【化 2】



は、任意選択により 1 または 2 個のヘテロ原子を含有する单環の 5 または 6 員アリールを示し、該アリールは、任意選択により、 $C_1$  ~  $C_3$  アルキル、特にメチル、 $C_3$  ~  $C_4$  シクロアルキル、-CN およびハロゲンからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換され；

【化3】



は、任意選択により1個の窒素原子を含有する6員アリールを示し；

Xは- $\text{C R}^2\text{R}^3$ -を示し；

Yは、それぞれ任意選択により、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル、フルオロおよび- $\text{OH}$ からなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換される $\text{C}_1 \sim \text{C}_7$ アルカンジイルまたは $\text{C}_2 \sim \text{C}_7$ アルケンジイルを示し；

Zは、ヘテロ原子、好ましくは $\text{NH}$ もしくは酸素、より好ましくは酸素、または単結合を示し；

$\text{R}^a$ 、 $\text{R}^b$ 、 $\text{R}^c$ 、および $\text{R}^d$ は、水素、ハロゲン、- $\text{CHF}_2$ 、- $\text{CF}_2$ -メチル、- $\text{CH}_2\text{F}$ 、- $\text{CF}_3$ 、- $\text{OCF}_3$ 、- $\text{CN}$ 、 $\text{C}_3 \sim \text{C}_4$ シクロアルキル、および- $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択され；

$\text{R}^1$ は、水素、または、任意選択により- $\text{OH}$ 、フルオロ、およびオキソからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換される $\text{C}_1 \sim \text{C}_{10}$ アルキルであり；

$\text{R}^2$ は、水素；任意選択により、- $\text{OH}$ 、フルオロ、メトキシ、オキソ、および- $\text{C}(\text{=O})\text{OC}_1 \sim \text{C}_4$ アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換される $\text{C}_1 \sim \text{C}_{10}$ アルキル； $\text{C}_1 \sim \text{C}_3$ アルキル- $\text{R}^7$ ； $\text{C}_2 \sim \text{C}_4$ アルキニル；任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環；ならびに、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有する单環アリールからなる群から選択され；ここで、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_3$ アルキニル- $\text{R}^7$ 、3～7員飽和環、または单環アリールは、それぞれ任意選択により、1つ以上の $\text{R}^8$ 置換基で置換され；

$\text{R}^3$ は、水素、または、任意選択により、- $\text{OH}$ で置換される $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキル；特に、水素、またはメチルであり；

あるいは、 $\text{R}^2$ および $\text{R}^3$ は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有し、かつ、任意選択により、- $\text{OH}$ 、フルオロ、メトキシ、オキソ、- $\text{C}(\text{=O})\text{OC}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル、ベンジル、ならびに、任意選択によりフルオロおよび/または- $\text{OH}$ からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換される $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換される3～7員飽和環を形成し；

$\text{R}^7$ は、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有し、かつ、任意選択により、ハロおよび $\text{C}_1 \sim \text{C}_3$ アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つまたは2つの置換基で置換される单環アリール；任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環；または- $\text{NR}^9\text{R}^{10}$ を示し；

ここで、 $\text{R}^9$ および $\text{R}^{10}$ は、水素、および、任意選択により1つ以上のフルオロ置換基で置換される $\text{C}_1 \sim \text{C}_3$ アルキルからそれぞれ独立して選択され；

各 $\text{R}^8$ は、- $\text{OH}$ 、フルオロ、メトキシ、オキソ、- $\text{C}(\text{=O})\text{OC}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキルオキシ $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキルオキシ、ならびに、任意選択により、フルオロおよび/または- $\text{OH}$ からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換される $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキルからなる群から独立して選択される]、

あるいは、その薬学的に許容される塩または溶媒和物に関する。

## 【誤訳訂正3】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0017

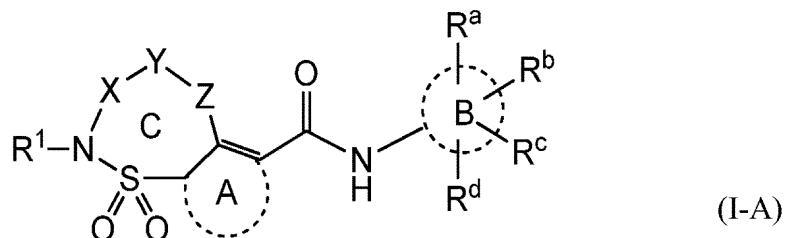
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0017】

より具体的には、本発明は、式(I-A)：

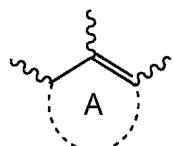
【化4】



の化合物、またはその立体異性体もしくは互変異性体

[式中、

【化5】



は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環の5または6員アリールを示し、該アリールは、任意選択により、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル、特にメチル、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、-CNおよびハロゲンからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換され；

【化6】



は、任意選択により1個の窒素原子を含有する6員アリールを示し；

Xは-CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>-を示し；Yは、それぞれ任意選択により、C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルおよび-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>7</sub>アルカンジイルまたはC<sub>2</sub>～C<sub>7</sub>アルケンジイルを示し；

Zは、ヘテロ原子、好ましくは酸素、または単結合を示し；

R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>、およびR<sup>d</sup>は、水素、ハロゲン、-CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub>-メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、および-C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択され、R<sup>1</sup>は、水素、またはC<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルであり、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルは、任意選択により、-OH、フルオロ、オキソ、ならびに任意選択により1つ以上のフルオロおよび

/ もしくは - OH で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換され；

R<sup>2</sup> は、水素、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル - R<sup>7</sup>、任意選択により、O、S および N からなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上のヘテロ原子を含有する 3 ~ 7 員飽和環、ならびに、任意選択により、1 または 2 個のヘテロ原子を含有する単環アリールからなる群から選択され、該 C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル - R<sup>7</sup>、3 ~ 7 員飽和環、または単環アリールは、任意選択により 1 つ以上の R<sup>8</sup> で置換され；

R<sup>3</sup> は、水素、または C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル；特に、水素、またはメチルであり；

あるいは、R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、S および N からなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上のヘテロ原子を含有する 3 ~ 7 員飽和環を形成し、該 3 ~ 7 員飽和環は、任意選択により、1 つ以上の R<sup>8</sup> で置換され；

R<sup>7</sup> は、任意選択により、1 または 2 個のヘテロ原子を含有する単環アリール；任意選択により、O、S および N からなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上のヘテロ原子を含有する 3 ~ 7 員飽和環；または - N R<sup>9</sup> R<sup>10</sup> を示し；

ここで、R<sup>9</sup> および R<sup>10</sup> は、水素、および、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキルからそれぞれ独立して選択され；

各 R<sup>8</sup> は、- OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、- C ( = O ) OC<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキル、ならびに、任意選択により、フルオロおよび / または - OH からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群から独立して選択される]、

あるいは、その薬学的に許容される塩または溶媒和物に関する。

#### 【誤訳訂正 4】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0018

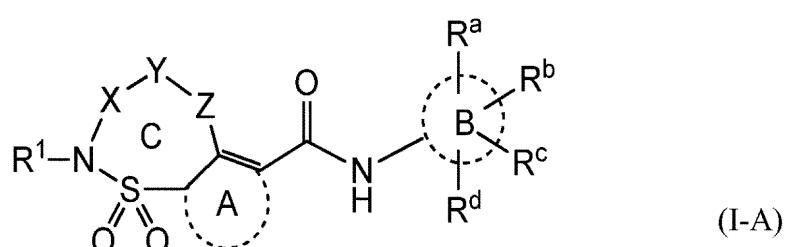
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0018】

特定の実施形態において、本発明は、式 (I-A) :

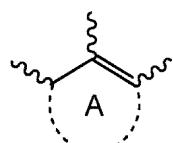
【化7】



の化合物、またはその立体異性体もしくは互変異性体

【式中、

【化8】



は、任意選択により 1 または 2 個のヘテロ原子を含有する単環の 5 または 6 員アリールを示し、該アリールは、任意選択により、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル、特にメチル、C<sub>3</sub> ~ C<sub>4</sub> シクロアルキル、-CN およびハロゲンからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換され；

【化 9】



は、任意選択により 1 個の窒素原子を含有する 6 員アリールを示し；

X は -CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup> - を示し；

Y は、それぞれ任意選択により、C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルおよび-OH からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>7</sub> アルカンジイルまたは C<sub>2</sub> ~ C<sub>7</sub> アルケンジイルを示し；

Z は、ヘテロ原子、好ましくは酸素、または単結合を示し；

R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>、および R<sup>d</sup> は、水素、ハロゲン、-CHF<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub> - メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub> ~ C<sub>4</sub> シクロアルキル、および -C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択され、

R<sup>1</sup> は、水素、または C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキルであり、該 C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキルは、任意選択により、-OH、フルオロ、オキソ、ならびに任意選択により 1 つ以上のフルオロおよび/もしくは -OH で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換され；

R<sup>2</sup> は、水素、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル - R<sup>7</sup>、任意選択により、O、S および N からなる群からそれぞれ独立して選択される 1 個以上のヘテロ原子を含有する 3 ~ 7 員飽和環、ならびに、任意選択により、1 または 2 個のヘテロ原子を含有する単環アリールからなる群から選択され、該 C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル - R<sup>7</sup>、3 ~ 7 員飽和環、または単環アリールは、任意選択により 1 つ以上の R<sup>8</sup> で置換され；

R<sup>3</sup> は水素であり；

あるいは、R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、S および N からなる群からそれぞれ独立して選択される 1 個以上のヘテロ原子を含有する 3 ~ 7 員飽和環を形成し、該 3 ~ 7 員飽和環は、任意選択により、1 つ以上の R<sup>8</sup> で置換され；

R<sup>7</sup> は、任意選択により 1 または 2 個のヘテロ原子を含有する単環アリール；任意選択により O、S および N からなる群からそれぞれ独立して選択される 1 個以上のヘテロ原子を含有する 3 ~ 7 員飽和環；または -NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup> を示し；

ここで、R<sup>9</sup> および R<sup>10</sup> は、水素、および、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキルからそれぞれ独立して選択され；

各 R<sup>8</sup> は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキル、ならびに、任意選択により、フルオロおよび/または -OH からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群から独立して選択される]、

あるいは、その薬学的に許容される塩または溶媒和物に関する。

【誤訳訂正 5】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0019

【訂正方法】変更

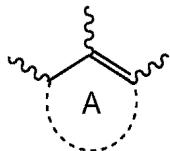
【訂正の内容】

## 【0019】

さらに特定の実施形態において、本発明は、本明細書で定義される式(I-A)の化合物、またはその立体異性体もしくは互変異性体

[式中、

## 【化10】



は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環の5または6員アリールを示し、該アリールは、任意選択により、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル、特にメチル、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、-CNおよびハロゲンからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換され；

## 【化11】



は、任意選択により1個の窒素原子を含有する6員アリールを示し；

Xは-CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>-を示し；

Yは、それぞれ任意選択により、1つ以上のC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキル、または-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>7</sub>アルカンジイルまたはC<sub>2</sub>～C<sub>7</sub>アルケンジイルを示し；

Zは、ヘテロ原子、好ましくは酸素、または単結合を示し；

R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>、およびR<sup>d</sup>は、水素、ハロゲン、-CHF<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub>-メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、および-C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群から独立して選択され、

R<sup>1</sup>は、水素、またはC<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルであり、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルは、任意選択により、-OH、フルオロ、オキソ、ならびに任意選択により1つ以上のフルオロおよび/もしくは-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換され；

—R<sup>2</sup>は、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環、ならびに、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリールからなる群から選択され、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、3～7員飽和環、または単環アリールは、任意選択により1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

R<sup>3</sup>は水素であり；

あるいは、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環を形成し、該3～7員飽和環は、任意選択により、1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

R<sup>7</sup>は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリールを示し；

各R<sup>8</sup>は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキル、ならびに、任意選択により、1つ以上のフルオロおよび/または-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される]、

あるいは、その薬学的に許容される塩または溶媒和物に関する。

## 【誤訳訂正 6】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0020

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0020】

さらなる実施形態において、本発明は、本明細書で定義される式(I-A)の化合物、またはその立体異性体もしくは互変異性体

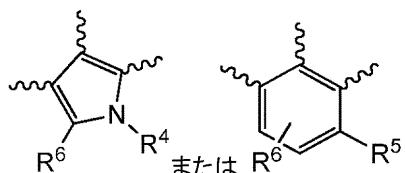
[式中、

【化12】



が、

【化13】



を示し；ここで、

R<sup>4</sup>は、水素、-C<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキル、またはC<sub>3</sub>~C<sub>4</sub>シクロアルキル、特にメチルであり；

R<sup>5</sup>は、水素またはハロゲン、特にフルオロであり；

R<sup>6</sup>は、水素、メチル、-CNおよびハロゲン、特に水素またはメチル、特に水素またはフルオロ、特に水素から選択され；かつ

その他の可変符号は全て、式(I-A)で定義した通りである】、

あるいは、その薬学的に許容される塩または溶媒和物に関する。

## 【誤訳訂正 7】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0021

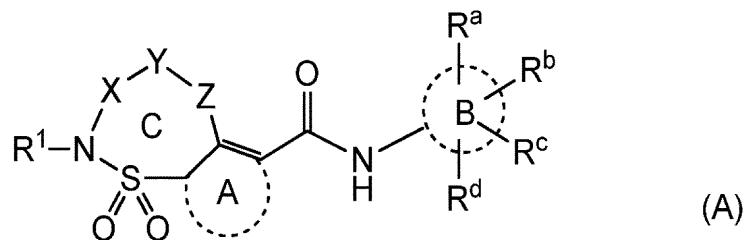
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0021】

本発明はさらに、特に、式(A)：

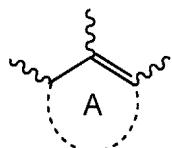
【化14】



の化合物、またはその立体異性体もしくは互変異性体

[式中、

【化15】



は、任意選択により 1 または 2 個のヘテロ原子を含有する单環の 5 または 6 員アリールを示し、該アリールは、任意選択により、1つ以上のメチル、-CN またはハロゲンで置換され；

【化16】



は、任意選択により 1 個の窒素原子を含有する 6 員アリールを示し；

X は -CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>- を示し；Y は、それぞれ任意選択により 1 つ以上の C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルまたは -OH で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>7</sub> アルカンジイルまたは C<sub>2</sub> ~ C<sub>7</sub> アルケンジイルを示し；

Z は、ヘテロ原子、好ましくは酸素、または単結合を示し；

R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>、および R<sup>d</sup> は、水素、ハロゲン、-CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub>-メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub> ~ C<sub>4</sub> シクロアルキル、および C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群から独立して選択され、R<sup>1</sup> は、水素、または C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキルであり、該 C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキルは、任意選択により、-OH、フルオロ、オキソ、ならびに任意選択により 1 つ以上のフルオロおよびもしくは -OH で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換され；R<sup>2</sup> は、水素、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル - R<sup>7</sup>、任意選択により、O、S および N からなる群からそれぞれ独立して選択される 1 個以上のヘテロ原子を含有する 3 ~ 7 員飽和環、ならびに、任意選択により、1 または 2 個のヘテロ原子を含有する单環アリールからなる群から選択され、該 C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル - R<sup>7</sup>、3 ~ 7 員飽和環、または单環アリールは、任意選択により 1 つ以上の R<sup>8</sup> で置換され；R<sup>3</sup> は、水素であり；あるいは、R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、S および N からなる群からそれぞれ独立して選択される 1 個以上のヘテロ

原子を含有する 3 ~ 7 員飽和環を形成し、該 3 ~ 7 員飽和環は、任意選択により、1 つ以上の R<sup>8</sup> で置換され；

R<sup>7</sup> は、任意選択により 1 または 2 個のヘテロ原子を含有する単環アリールを示し；各 R<sup>8</sup> は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキル、ならびに、任意選択により、1 つ以上のフルオロおよび / または -OH で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群から独立して選択される]、あるいは、その薬学的に許容される塩または溶媒和物に関する。

【誤訳訂正 8】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0023

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0023】

本発明はまた、医薬として使用される、好ましくは哺乳動物の HBV 感染の予防または治療に使用される、式(A)の化合物に関する。

【誤訳訂正 9】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0026

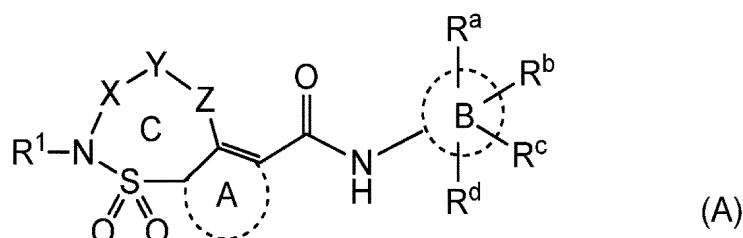
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0026】

本発明は、特に、式(A)：

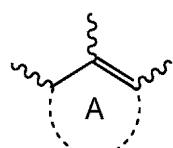
【化18】



の化合物、またはその立体異性体もしくは互変異性体

[式中、

【化19】



は、任意選択により 1 または 2 個のヘテロ原子を含有する単環の 5 または 6 員アリールを示し、該アリールは、任意選択により 1 つ以上のメチル、-CN またはハロゲンで置換され；

## 【化 2 0】



は、任意選択により 1 個の窒素原子を含有する 6 員アリールを示し；

X は - C R <sup>2</sup> R <sup>3</sup> - を示し；

Y は、それぞれ任意選択により、1 つ以上の C <sub>1</sub> ~ C <sub>4</sub> アルキルまたは - O H で置換される C <sub>1</sub> ~ C <sub>7</sub> アルカンジイルまたは C <sub>2</sub> ~ C <sub>7</sub> アルケンジイルを示し；

Z は、ヘテロ原子、好ましくは酸素、または単結合を示し；

R <sup>a</sup>、R <sup>b</sup>、R <sup>c</sup>、および R <sup>d</sup> は、水素、ハロゲン、- C H F <sub>2</sub>、- C F <sub>2</sub> - メチル、- C H <sub>2</sub> F、- C F <sub>3</sub>、- O C F <sub>3</sub>、- C N、C <sub>3</sub> ~ C <sub>4</sub> シクロアルキル、および - C <sub>1</sub> ~ C <sub>4</sub> アルキルからなる群から独立して選択され、

R <sup>1</sup> は、水素、または C <sub>1</sub> ~ C <sub>6</sub> アルキルであり、該 C <sub>1</sub> ~ C <sub>6</sub> アルキルは、任意選択により、- O H、フルオロ、オキソ、ならびに任意選択により1 つ以上のフルオロおよび／もしくは - O H で置換される C <sub>1</sub> ~ C <sub>4</sub> アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1 つ以上の置換基で置換され；

R <sup>2</sup> は、水素、C <sub>1</sub> ~ C <sub>6</sub> アルキル、C <sub>1</sub> ~ C <sub>3</sub> アルキル - R <sup>7</sup>、任意選択により、O、S および N からなる群からそれぞれ独立して選択される1 つ以上のヘテロ原子を含有する3 ~ 7 員飽和環、ならびに、任意選択により、1 または2 個のヘテロ原子を含有する単環アリールからなる群から選択され、該 C <sub>1</sub> ~ C <sub>6</sub> アルキル、C <sub>1</sub> ~ C <sub>3</sub> アルキル - R <sup>7</sup>、3 ~ 7 員飽和環、または単環アリールは、任意選択により1 つ以上の R <sup>8</sup> で置換され；

R <sup>3</sup> は水素であり；

あるいは、R <sup>2</sup> および R <sup>3</sup> は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、S および N からなる群からそれぞれ独立して選択される1 つ以上のヘテロ原子を含有する3 ~ 7 員飽和環を形成し、該3 ~ 7 員飽和環は、任意選択により、1 つ以上の R <sup>8</sup> で置換され；

R <sup>7</sup> は、任意選択により1 または2 個のヘテロ原子を含有する単環アリールを示し；

各 R <sup>8</sup> は、- O H、フルオロ、メトキシ、オキソ、- C ( = O ) O C <sub>1</sub> ~ C <sub>4</sub> アルキル、ならびに、任意選択により1 つ以上のフルオロおよび／または - O H で置換される C <sub>1</sub> ~ C <sub>4</sub> アルキルからなる群から独立して選択される]、

あるいは、その薬学的に許容される塩または溶媒和物に関する。

## 【誤訳訂正 1 0】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0 0 2 7

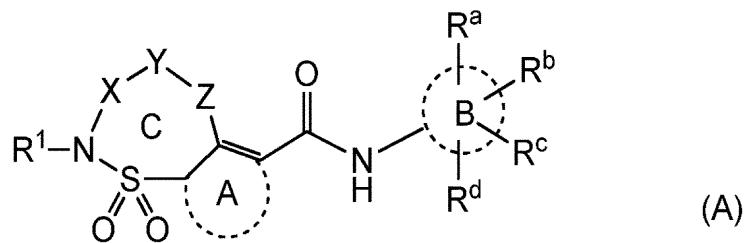
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0 0 2 7】

一態様において、本発明は、式 ( A ) :

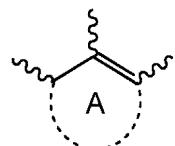
【化21】



の化合物、またはその立体異性体もしくは互変異性体

[式中、

【化22】



は、任意選択により 1 または 2 個のヘテロ原子を含有する单環の 5 または 6 員アリールを示し、該アリールは、任意選択により、1 つ以上のメチル、-CN またはハロゲンで置換され；

【化23】



は、任意選択により 1 個の窒素原子を含有する 6 員アリールを示し；

X は -CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>- を示し；

Y は、それぞれ任意選択により、1 つ以上のC<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルで置換されるC<sub>1</sub> ~ C<sub>7</sub> アルカンジイルまたはC<sub>2</sub> ~ C<sub>7</sub> アルケンジイルを示し；

Z は、ヘテロ原子、好ましくは酸素、または単結合を示し；

R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>、およびR<sup>d</sup> は、水素、ハロゲン、-CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub>-メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub> ~ C<sub>4</sub> シクロアルキル、およびC<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群から独立して選択され、

R<sup>1</sup> は、水素、またはC<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキルであり、該C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキルは、任意選択により、-OH、フルオロ、オキソ、ならびに任意選択により 1 つ以上のフルオロおよびもしくは-OH で置換されるC<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換され；

R<sup>2</sup> は、水素、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル-R<sup>7</sup>、ならびに、任意選択により、1 または 2 個のヘテロ原子を含有する单環アリールからなる群から選択され、該C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル-R<sup>7</sup>、または单環アリールは、任意選択により 1 つ以上のR<sup>8</sup> で置換され；

R<sup>3</sup> は水素であり；

あるいは、R<sup>2</sup> およびR<sup>3</sup> は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、S およびN からなる群からそれぞれ独立して選択される 1 個以上のヘテロ

原子を含有する 3 ~ 7 員飽和環を形成し、該 3 ~ 7 員飽和環は、任意選択により、1 つ以上のフルオロおよび / もしくは - OH、または任意選択により 1 つ以上のフルオロおよび / もしくは - OH で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルで置換され；

R<sup>7</sup> は、任意選択により 1 または 2 個のヘテロ原子を含有する単環アリールを示し；各 R<sup>8</sup> は、- OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、ならびに、任意選択により、1 つ以上のフルオロおよび / または - OH で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群から独立して選択される]

あるいは、その薬学的に許容される塩または溶媒和物に関する。

【誤訳訂正 11】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0028

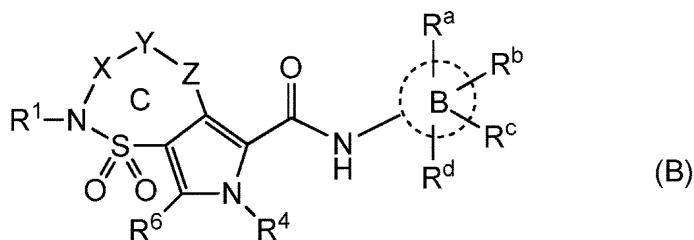
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0028】

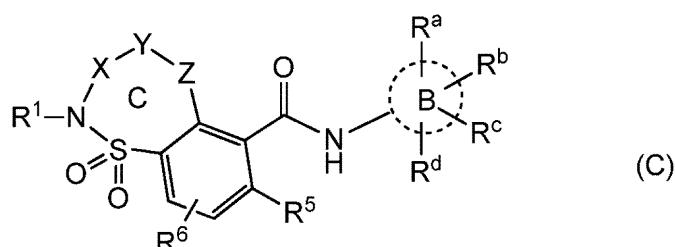
一実施形態において、本発明は、式 (B) :

【化 24】



または式 (C) :

【化 25】



の化合物

[式中、R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>、およびR<sup>d</sup>は、水素、ハロゲン、-CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub> - メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub> ~ C<sub>4</sub> シクロアルキル、および -C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群から独立して選択され、

R<sup>1</sup> は、水素、またはC<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキルであり、該 C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキルは、任意選択により、-OH、フルオロ、オキソ、ならびに任意選択により 1 つ以上のフルオロおよび / もしくは - OH で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換され；

R<sup>2</sup> は、水素、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル - R<sup>7</sup>、ならびに、任意選択により、1 または 2 個のヘテロ原子を含有する単環アリールからなる群から選択され、該 C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル - R<sup>7</sup>、または単環アリールは、任意選択により 1 つ以上の R<sup>8</sup> で置換され；

R<sup>3</sup> は水素であり；

あるいは、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環を形成し、該3～7員飽和環は、任意選択により、1つ以上のフルオロ口および/もしくは-OH、または任意選択により1つ以上のフルオロ口および/もしくは-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルで置換され；

R<sup>4</sup>は、水素、-C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル、またはC<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、好ましくはメチルであり；

R<sup>5</sup>は、水素またはハロゲン、好ましくはフルオロであり；

R<sup>6</sup>は、水素、メチル、-CNおよびハロゲンから選択され；

R<sup>7</sup>は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリールを示し；かつ各R<sup>8</sup>は、-OH、フルオロ口、メトキシ、オキソ、ならびに、任意選択により、1つ以上のフルオロ口および/または-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群から独立して選択される]、

または、その薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物に関する。

【誤訳訂正12】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0030

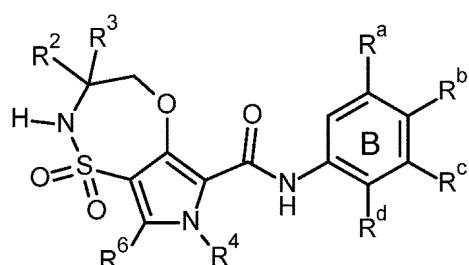
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

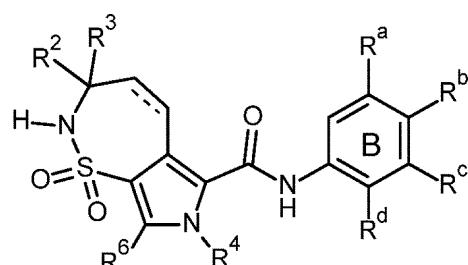
【0030】

本発明のさらなる実施形態は、式(I-A)の化合物、特に、式(I-AA1)または式(I-AA2)：

【化26】



(I-AA1), または



(I-AA2)

で表される化合物

[式中、

環Bはフェニルまたは4-ピリジルを示し；

ここで、式(I-AA2)においては、単結合または二重結合を示し；

R<sup>2</sup>は、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環、ならびに、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリールからなる群から選択され、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、3～7員飽和環、または単環アリールは、任意選択により1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

R<sup>3</sup>は、水素またはC<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、特に水素またはメチルであり；

R<sup>4</sup>は、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル、特にメチルであり；

R<sup>6</sup>は、水素またはメチルであり；

R<sup>7</sup>は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリール；任意選択

によりO、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環；または-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>からなる群から選択され；

ここで、R<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>は、水素、およびC<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキルからそれぞれ独立して選択され；

各R<sup>8</sup>は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキル、ならびに、任意選択により、フルオロおよび/または-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群から独立して選択され；

R<sup>a</sup>は、水素およびハロゲン、特に水素から選択され；

R<sup>b</sup>は、環Bがピリジルのときは存在せず、環Bがフェニルのときは水素またはハロゲン、特にハロゲンであり；

R<sup>c</sup>は、ハロゲン、CH<sub>3</sub>、CHF<sub>2</sub>、CF<sub>3</sub>および-CNから選択され；

R<sup>d</sup>は、水素およびハロゲン、特に水素から選択される]、

または、その薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物に関する。

【誤訳訂正13】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0031

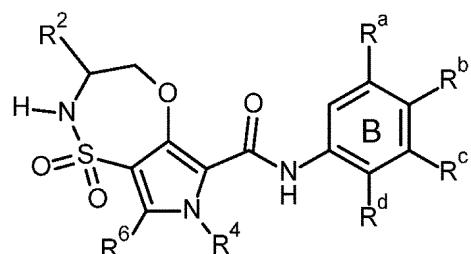
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

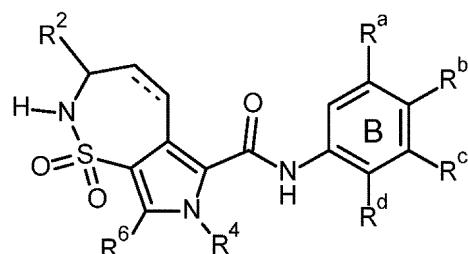
【0031】

本発明のさらなる実施形態は、式(I-A)の化合物、特に、式(I-A1)または式(I-A2)：

【化27】



(I-A1), または



(I-A2)

で表される化合物

[式中、

環Bはフェニルまたは4-ピリジルを示し；

ここで、式(I-A2)においては、単結合または二重結合を示し；

R<sup>2</sup>は、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環、ならびに、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリールからなる群から選択され、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、3～7員飽和環、または単環アリールは、任意選択により1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

R<sup>4</sup>は、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル、特にメチルであり；

R<sup>6</sup>は、水素またはメチルであり；

R<sup>7</sup>は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリール；任意選択によりO、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環；または-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>からなる群から選択され；

ここで、R<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>は、水素、およびC<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキルからそれぞれ独立して

選択され；

各  $R^8$  は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキル、ならびに、任意選択により、フルオロおよび/または-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキルからなる群から独立して選択され；

R<sup>a</sup>は、水素およびハロゲン、特に水素から選択され；

R<sup>b</sup>は、環Bがピリジルのときは存在せず、環Bがフェニルのときは水素またはハロゲン、特にハロゲンであり；

R<sup>c</sup>は、ハロゲン、CH<sub>3</sub>、CHF<sub>2</sub>、CF<sub>3</sub>および-CNから選択され；

R<sup>d</sup>は、水素およびハロゲン、特に水素から選択される]、

または、その薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物に関する。

【誤訳訂正14】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0032

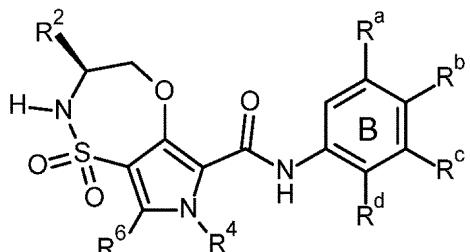
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

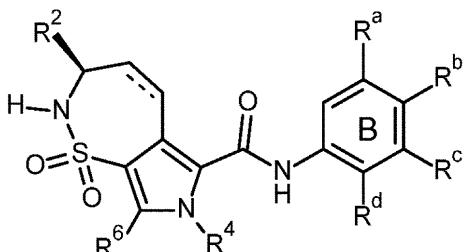
【0032】

さらなる実施形態において、本発明は、式(I-A)の化合物、特に、式(I-A1')または式(I-A2')；

【化28】



(I-A1'),または



(I-A2')

で表される化合物

[式中、

環Bはフェニルまたは4-ピリジルを示し；

ここで、式(I-A2)においては、単結合または二重結合を示し；

R<sup>2</sup>は、C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3~7員飽和環、ならびに、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリールからなる群から選択され、該C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、3~7員飽和環、または単環アリールは、任意選択により1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

R<sup>4</sup>は、C<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキル、特にメチルであり；

R<sup>6</sup>は、水素またはメチルであり；

R<sup>7</sup>は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリール；任意選択によりO、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3~7員飽和環；または-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>からなる群から選択され；

ここで、R<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>は、水素、およびC<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキルからそれぞれ独立して選択され；

各R<sup>8</sup>は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキル、ならびに、任意選択により、フルオロおよび/または-OHからそれぞれ独立して選択

される 1 つ以上の置換基で置換される  $C_1 \sim C_4$  アルキルからなる群から独立して選択され；

R<sup>a</sup> は、水素およびハロゲン、特に水素から選択され；

R<sup>b</sup> は、環 B がピリジルのときは存在せず、環 B がフェニルのときは水素またはハロゲン、特にハロゲンであり；

R<sup>c</sup> は、ハロゲン、 $CH_3$ 、 $CHF_2$ 、 $CF_3$  および -CN から選択され；

R<sup>d</sup> は、水素およびハロゲン、特に水素から選択される]、

または、その薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物に関する。

【誤訳訂正 15】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0034

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0034】

本発明の他の実施形態は、式 (I-A)、式 (I-AA1)、式 (I-AA2)、式 (I-A1)、式 (I-A2)、式 (I-A1')、式 (I-A2')、式 (A)、式 (B) もしくは式 (C)、またはその他の実施形態のいずれかで記載したそれらのいずれかのサブグループの化合物であって、以下の限定の 1 つ以上が該当する化合物に関する。

(a) 環 C は、6 ~ 8 個の原子、好ましくは 7 個の原子からなる。

(b) Y は、それぞれ任意選択により、フルオロおよび -OH からなる群からそれぞれ独立して選択される 1 ~ 3 置換基で置換される直鎖状の  $C_1 \sim C_7$  アルカンジイルまたは  $C_2 \sim C_7$  アルケンジイルを示す。

(c) Y は、それぞれ任意選択により -OH で置換される直鎖状の  $C_1 \sim C_7$  アルカンジイルまたは  $C_2 \sim C_7$  アルケンジイルを示す。

(d) R<sup>2</sup> は、任意選択により、それぞれ独立して選択される 1 つ以上のフルオロおよび / または -OH 置換基で置換される  $C_1 \sim C_6$  アルキルである。好ましくは、R<sup>2</sup> は、1 つ以上のフルオロ置換基で置換された分岐  $C_1 \sim C_6$  アルキルである。

(e) R<sup>2</sup> は、任意選択により 1 つ以上の -OH 置換基で置換された  $C_1 \sim C_6$  アルキルである。特に、R<sup>2</sup> は、1 つの -OH で置換された  $C_1 \sim C_6$  アルキルである。

(f) R<sup>2</sup> は、任意選択により 1 つ以上のフルオロ置換基で置換される  $C_1 \sim C_4$  アルキルである。

(g) R<sup>2</sup> は、任意選択により 1 つ以上のフルオロ置換基で置換されていてもよい  $C_3 \sim C_6$  アルキルである。

(h) R<sup>3</sup> は、 $C_1 \sim C_4$  アルキル、特にメチルである。

(i) R<sup>3</sup> は、 $C_1 \sim C_4$  アルキル、特にメチルであり；かつ R<sup>2</sup> は、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、および、任意選択により、1 または 2 個のヘテロ原子を含む单環アリールからなる群から選択され、該  $C_1 \sim C_6$  アルキルまたは单環アリールは、任意選択により 1 つ以上の R<sup>8</sup> で置換され、ここで、R<sup>8</sup> は本明細書に定義された通りである。

(j) R<sup>4</sup> は、 $C_1 \sim C_3$  アルキル、このましくはメチルである。

(k) R<sup>b</sup> は、水素またはフルオロである。

(l) R<sup>b</sup> および R<sup>c</sup> は、独立して、水素、フルオロおよび -CN から選択される。

(m) R<sup>b</sup> および R<sup>c</sup> は、独立して、水素またはフルオロから選択される。

(n) R<sup>b</sup> および R<sup>c</sup> は、独立して、フルオロおよび -CN から選択される。

(o) R<sup>a</sup> および / または R<sup>d</sup> は、水素である。

(p) R<sup>a</sup> および R<sup>d</sup> は、いずれも水素である。

(q) R<sup>b</sup> および / または R<sup>c</sup> は、フルオロである。

(r) R<sup>1</sup> は、水素、または、任意選択により、-OH およびフルオロからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基、特に 1 ~ 4 置換基で置換される  $C_1 \sim C_6$  アルキルである。

( s )  $R^{-1}$  は、水素である。

( t )

【化 2 9】



は、フェニルを示す。

( u )

【化30】



は、1つ以上のハロゲン置換基で置換されたフェニルを示す。

( v )

【化 3 1】

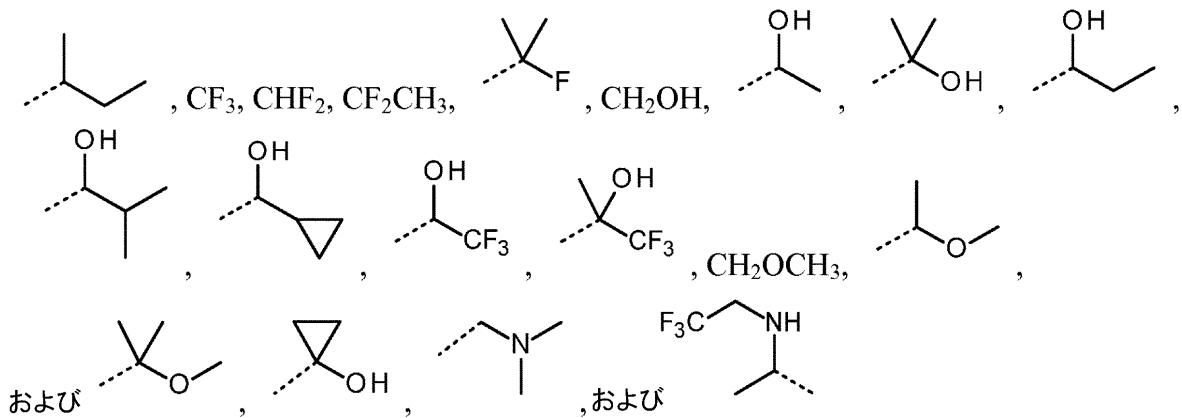


は、少なくとも 1 つのハロゲン、より好ましくは、少なくとも 1 つのフルオロ、より一層好ましくは、2 つのフルオロで置換されたフェニルを示す。

( w )  $R^7$  は、3～7員飽和環、特にシクロプロピルである。

( x )  $R^2$  は、メチル、エチル、イソプロピル、

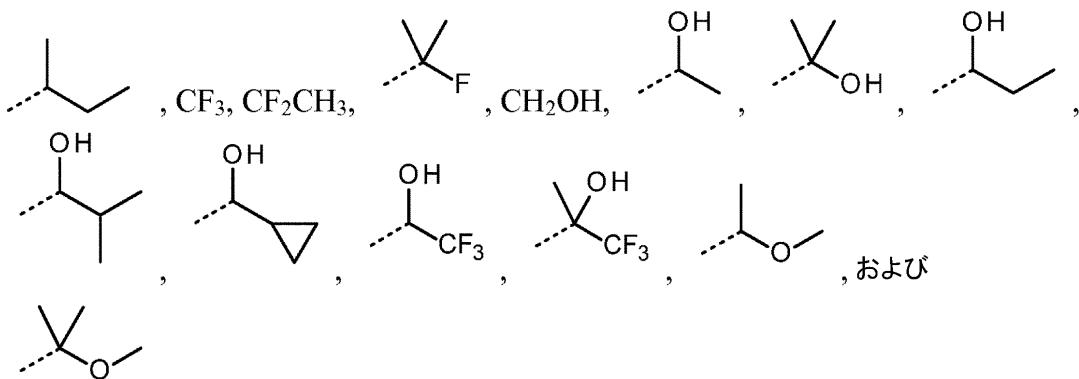
### 【化 3 2】



からなる群から選択される。

( y )  $R^2$  は、メチル、エチル、イソプロピル、

## 【化33】



からなる群から選択される。

(z)

## 【化34】



はフェニルを示し、R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>およびR<sup>d</sup>は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、-CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub>-メチル、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、および-C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群から選択される。

(aa)

## 【化35】



はフェニルを示し、R<sup>a</sup>は水素およびハロゲンから選択され、R<sup>b</sup>は、水素またはハロゲン、特にハロゲンであり、R<sup>c</sup>は、ハロゲン、CH<sub>3</sub>、CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>、CF<sub>3</sub>および-CNから選択され、かつR<sup>d</sup>は、水素およびハロゲン、特に水素から選択される。

(bb)

## 【化36】



はフェニルを示し、R<sup>a</sup>は水素およびハロゲンから選択され、R<sup>b</sup>は、水素またはハロゲン、特にハロゲンであり、R<sup>c</sup>は、ハロゲン、CH<sub>3</sub>、CF<sub>3</sub>および-CNから選択され、かつR<sup>d</sup>は、水素およびハロゲン、特に水素から選択される。

## 【誤訳訂正16】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0036

【訂正方法】変更

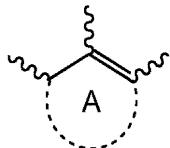
【訂正の内容】

## 【0036】

さらなる実施形態において、本発明は、本明細書で定義される式(I-A)の化合物、またはその立体異性体もしくは互変異性体

[式中、

## 【化37】



は、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル、特にメチル、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、-CNおよびハロゲンからなる群からそれぞれ独立して選択される1つまたは2つの置換基でそれぞれ任意選択により置換されるピロリル、チオフェニル、ピラゾリル、フェニルおよびピリジルからなる群から選択される单環の5または6員アリールまたはヘテロアリールを示し、

## 【化38】



は、フェニルまたはピリジルを示し；

Xは-CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>-を示し；

Yは、それぞれ任意選択により、フルオロおよび-OHからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ、2つまたは3つの置換基で置換される直鎖状のC<sub>1</sub>～C<sub>7</sub>アルカンジイルまたはC<sub>2</sub>～C<sub>7</sub>アルケンジイルを示し；

Zは、酸素、または単結合を示し；

R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>、およびR<sup>d</sup>は、水素、ハロゲン、-CHF<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub>-メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、および-C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択され；

R<sup>1</sup>は、水素、または、任意選択により、-OHおよびフルオロからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ、2つ、3つもしくは4つの置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルであり；

R<sup>2</sup>は、水素；任意選択により、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、および-C(=O)OC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1～4個の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル；C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>；C<sub>2</sub>～C<sub>4</sub>アルキニル；任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1または2個のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環；ならびに、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有する单環アリールからなる群から選択され；ここで、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、3～7員飽和環、または单環アリールは、それぞれ任意選択により、1つ以上のR<sup>8</sup>置換基で置換され；

R<sup>3</sup>は、水素、または、任意選択により、-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル；特に、水素、またはメチルであり；

あるいは、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有し、かつ、任意選択により、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、ベンジル、およびC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換される3～7員飽和環を形成し；

$R^7$  は、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有し、かつ、任意選択により、ハロおよび $C_{1\sim 3}$ アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つまたは2つの置換基で置換される单環アリール；任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3~7員飽和環；または $-N R^9 R^{10}$ を示し；

ここで、 $R^9$ および $R^{10}$ は、水素、および、任意選択により1つ以上のフルオロ置換基で置換される $C_{1\sim 3}$ アルキルからそれぞれ独立して選択され；

各 $R^8$ は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1~4</sub>アルキル、C<sub>1~4</sub>アルキルオキシC<sub>1~4</sub>アルキルオキシ、ならびに、任意選択により、フルオロおよび/または-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1~4</sub>アルキルからなる群から独立して選択される】

あるいは、その薬学的に許容される塩または溶媒和物に関する。

【誤訳訂正17】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0037

【訂正方法】変更

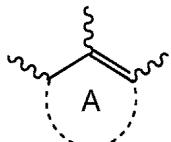
【訂正の内容】

【0037】

さらなる実施形態において、本発明は、本明細書で定義される式(I-A)の化合物、またはその立体異性体もしくは互変異性体

[式中、

【化39】



は、C<sub>1~3</sub>アルキル、特にメチルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つまたは2つの置換基でそれぞれ任意選択により置換されるピロリル、チオフェニルおよびピラゾリルからなる群から選択される单環5員ヘテロアリールを示し；

【化40】



は、フェニルまたはピリジルを示し；

Xは-CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>-を示し；

Yは、それぞれ任意選択により、フルオロおよび-OHからなる群からそれぞれ独立して選択される1つまたは2つの置換基で置換される直鎖状のC<sub>1~7</sub>アルカンジイルまたはC<sub>2~7</sub>アルケンジイルを示し；

Zは、酸素、または単結合を示し；

$R^a$ 、 $R^b$ 、 $R^c$ 、および $R^d$ は、水素、ハロゲン、-CH<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub>-メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3~4</sub>シクロアルキル、および-C<sub>1~4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択され；

$R^1$ は、水素、または、任意選択により、-OHおよびフルオロ、より特には水素から

なる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ、 2 つもしくは 3 つの置換基で置換される  $C_1 \sim C_3$  アルキルであり；

$R^2$  は、水素；任意選択により、-OH、フルオロおよびメトキシからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ、 2 つ、 3 つもしくは 4 つの置換基で置換される  $C_1 \sim C_6$  アルキル； $C_1 \sim C_3$  アルキル- $R^7$ ； $C_2 \sim C_4$  アルキニル；シクロプロピル、テトラヒドロピラニルおよびピペリジニルからなる群から選択され、任意選択により、O、S およびN からなる群からそれぞれ独立して選択される 1 または 2 個のヘテロ原子を含有する 3 ~ 7 員飽和環；ならびに、フェニル、ピリジル、ピリミジニル、ピラジニル、ピラゾリル、イミダゾリルおよびオキサゾリルからなる群から選択され、任意選択により、1 または 2 個のヘテロ原子を含有する单環アリールからなる群から選択され；ここで、 $C_1 \sim C_3$  アルキル- $R^7$ 、3 ~ 7 員飽和環、または单環アリールは、それぞれ任意選択により、1 つ以上の  $R^8$  置換基で置換され；

$R^3$  は、水素、または、任意選択により -OH で置換される  $C_1 \sim C_3$  アルキル；特に、水素、またはメチルであり；

あるいは、 $R^2$  および  $R^3$  は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、それぞれ任意選択によりベンジルで置換されるシクロプロピル環、オキセタニル環、テトラヒドロフラニル環、テトラヒドロピラニル環、ピロリジニル環またはピペリジニル環を形成し；

$R^7$  は、それぞれ任意選択により、ハロおよび  $C_1 \sim C_3$  アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つまたは 2 つの置換基で置換されるフェニル、ピリジル、ピラゾリル、イミダゾリルおよびオキサゾリル；シクロプロピル；ならびに -NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup> からなる群から選択され；

ここで、 $R^9$  および  $R^{10}$  は、水素、および、任意選択により 1 つ以上のフルオロ置換基で置換される  $C_1 \sim C_3$  アルキルからそれぞれ独立して選択され；

各  $R^8$  は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルオキシC<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルオキシ、ならびに、任意選択により、フルオロおよび / または -OH からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群から独立して選択される]、あるいは、その薬学的に許容される塩または溶媒和物に関する。

### 【誤訳訂正 18】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0039

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0039】

さらなる実施形態において、本発明は、本明細書で定義される本発明の化合物であって、

$R^2$  は、水素；任意選択により、-OH、フルオロおよびメトキシからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 ~ 4 置換基で置換される  $C_1 \sim C_6$  アルキル；任意選択により -OH で置換される  $C_1 \sim C_3$  アルキル- $R^7$ ；任意選択により 1 ~ 3 フルオロ置換基で置換されてもよい  $C_1 \sim C_4$  アルキルでそれぞれ任意選択により置換されるピペリジニルおよびテトラヒドロピラニルから選択されるヘテロシクリル；ならびに、それぞれ任意選択によりメチルで置換されるフェニル、ピリジル、ピラジニル、ピリミジニルおよびオキサゾリルからなる群から選択されるアリールまたはヘテロアリールからなる群から選択され；

ここで、 $R^7$  は、それぞれ任意選択により、ハロおよびメチルからそれぞれ独立して選択される 1 ~ 3 置換基で置換されるシクロプロピル、フェニル、ピリジル、オキサゾリル、ピラゾリルおよびイミダゾリル；ならびに -NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup> からなる群から選択され；ここで、 $R^9$  および  $R^{10}$  は、水素、 $C_1 \sim C_3$  アルキル、および1 ~ 3 フルオロ置換基で置

換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキルからそれぞれ独立して選択され；

R<sup>3</sup> は、水素、または、任意選択により、-OH で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル；特に、水素、またはメチルであり；

あるいは、R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択によりベンジルで置換されるシクロプロピル環、オキセタニル環、テトラヒドロフラニル環またはピロリジニル環、特にオキセタニル環またはテトラヒドロフラニル環を形成する、

化合物に関する。

【誤訳訂正 19】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0040

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0040】

さらなる実施形態において、本発明は、本明細書で定義される本発明の化合物であって、

R<sup>2</sup> は、任意選択により、-OH およびフルオロからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 ~ 4 置換基で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル；任意選択により -OH で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル - R<sup>7</sup>；任意選択により 1 ~ 3 フルオロ置換基で置換されてもよい C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルでそれぞれ任意選択により置換されてもよいピペリジニルまたはテトラヒドロピラニル；それぞれ任意選択によりメチルで置換されるフェニル、ピリジル、ピラジニル、ピリミジニル、オキサゾリルからなる群から選択され；

ここで、R<sup>7</sup> は、それぞれ任意選択により、ハロおよびメチルからそれぞれ独立して選択される 1 ~ 3 置換基で置換されるシクロプロピル、フェニル、ピリジル、オキサゾリル、ピラゾリルおよびイミダゾリル；ならびに -NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup> から選択され；ここで、R<sup>9</sup> および R<sup>10</sup> は、水素、および C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキルからそれぞれ独立して選択され；

R<sup>3</sup> は、水素、または C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル；特に、水素、またはメチルであり；

あるいは、R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> は、それらが結合している炭素原子と一緒にになってシクロプロピル環、オキセタニル環、テトラヒドロフラニル環、特に、オキセタニル環、またはテトラヒドロフラニル環を形成する化合物に関する。

【誤訳訂正 20】

【訂正対象書類名】明細書

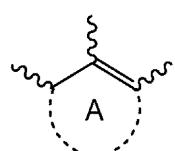
【訂正対象項目名】0057

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0057】

【化 43】



は、任意選択により 1 または 2 個のヘテロ原子を含有する单環の 5 または 6 員アリールを示し、該アリールは、任意選択により、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル、特にメチル、C<sub>3</sub> ~ C<sub>4</sub> シクロアルキル、-CN およびハロゲンからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換される。本明細書で定義されるように、そのような单環の 5 または 6 員

アリールまたはヘテロアリール基には、限定はされないが、フェニル、ピリジル、ピリミジニル、ピラジニル、ピリダジニル、ピロリル、チエニル、ピラゾリル、イミダゾリルおよびオキサゾリルが含まれる。本明細書で定義されるように、環 A は、それに代えて、任意選択の置換基、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>3</sub> ~ C<sub>4</sub> シクロアルキル、-CN およびハロゲンを、それらを R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup> および R<sup>6</sup> と称することによって（該当する場合）、特定の位置に有するように表すことができる。

## 【誤訳訂正 2 1】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0 0 5 9

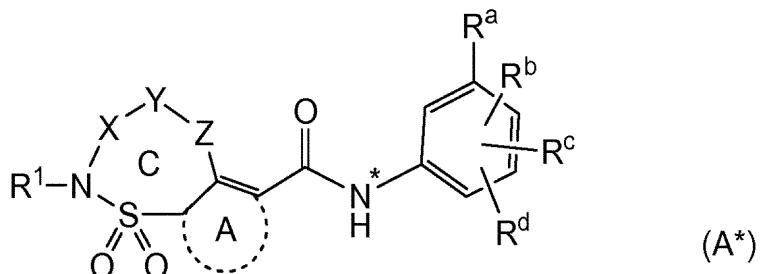
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0 0 5 9】

環 B 上に示される位置（例えば、オルト、メタ、および / またはパラ）は、アリール B を主要な構造に接続する結合に関連して示される。メタ R<sup>a</sup> の位置に関する一例として、配置は、式 (A\*) に示すように、主要な構造に接続する窒素 (\*) に対して示される。

【化 4 4】



## 【誤訳訂正 2 2】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0 5 3 4

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0 5 3 4】

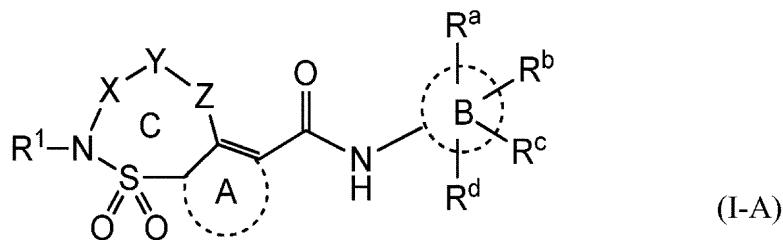
【表15】

化合物番号	HBV-AVE-HepG2.117 EC50 (μM)	TOX-HepG2-4d CC50 (μM)
215b	>0.125	>25
216	0.034	>25
217a	0.025	>25
217b	0.10	>25
218a	>0.125	>25
218b	0.079	>25
218c	0.006	>25
218d	0.021	>25
219	データなし	>25
220a	0.007	>25
220b	0.034	>25
228	>0.5	>25
229	>0.5	>25
230	>0.5	>25
231	>0.5	>25
232	>0.5	>25
233	>0.5	>25
234	>0.5	>25
235	>0.5	>25
236	0.34	>25
237	>0.5	>25
238	0.077	>25
239	>0.5	>25
240	>0.25	>25
241	>0.25	>25
242	>0.13	>25
243	>0.5	>25
244	>0.5	>25
245	>25	>25
246	>0.13	>25
247	>0.13	>25

本発明は、以下の態様を包含し得る。

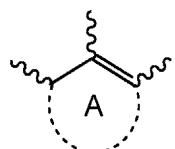
[ 1 ]

式 ( I - A ) :  
【化 2 8 3】



の化合物、またはその立体異性体もしくは互変異性体、

【式中：  
【化 2 8 4】



は、任意選択により 1 または 2 個のヘテロ原子を含有する单環の 5 または 6 員アリールを示し、該アリールは、任意選択により、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル、特にメチル、C<sub>3</sub> ~ C<sub>4</sub> シクロアルキル、-CN およびハロゲンからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換され；

【化 2 8 5】



は、任意選択により 1 個の窒素原子を含有する 6 員アリールを示し、

X は -CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>- を示し；

Y は、それぞれ任意選択により、C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキル、フルオロおよび-OH からなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>7</sub> アルカンジイルまたは C<sub>2</sub> ~ C<sub>7</sub> アルケンジイルを示し；

Z は、ヘテロ原子、好ましくは NH もしくは酸素、より好ましくは酸素、または単結合を示し；

R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>、および R<sup>d</sup> は、水素、ハロゲン、-CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>、-CF<sub>3</sub>、-メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub> ~ C<sub>4</sub> シクロアルキル、および -C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択され、

R<sup>1</sup> は、水素、または、任意選択により -OH、フルオロ、およびオキソからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>10</sub> アルキルであり；

R<sup>2</sup> は、水素；任意選択により、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、および -C(=O)OC<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される 1 つ以上の置換基で置換される C<sub>1</sub> ~ C<sub>10</sub> アルキル；C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル -R<sup>7</sup>；C<sub>2</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキニル；任意選択により、O、S および N からなる群からそれぞれ独立して選択される 1 個以上のヘテロ原子を含有する 3 ~ 7 員飽和環；ならびに、任意選択により、1 または 2 個の

ヘテロ原子を含有する単環アリールからなる群から選択され；ここで、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、3～7員飽和環、または単環アリールは、それぞれ任意選択により、1つ以上のR<sup>8</sup>置換基で置換され；

R<sup>3</sup>は、水素、または、任意選択により、-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル；特に、水素、またはメチルであり；

あるいは、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有し、かつ、任意選択により、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキル、ベンジル、ならびに、任意選択によりフルオロおよび/または-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換される3～7員飽和環を形成し；

R<sup>7</sup>は、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有し、かつ、任意選択により、ハロおよびC<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つまたは2つの置換基で置換される単環アリール；任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環；または-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>を示し；

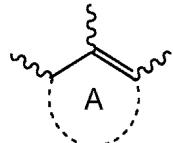
ここで、R<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>は、水素、および、任意選択により1つ以上のフルオロ置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキルからそれぞれ独立して選択され；

各R<sup>8</sup>は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルオキシC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルオキシ、ならびに、任意選択により、フルオロおよび/または-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群から独立して選択される]、

またはその薬学的に許容される塩もしくは溶媒和物。

【2】

上記【1】に記載の化合物であって、式中、  
【化286】



は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環の5または6員アリールを示し、該アリールは、任意選択により、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル、特にメチル、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、-CNおよびハロゲンからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換され；

【化287】



は、任意選択により1個の窒素原子を含有する6員アリールを示し；

Xは-CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>-を示し；

Yは、それぞれ任意選択により、C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルおよび-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>7</sub>アルカンジイルまたはC<sub>2</sub>～C<sub>7</sub>アルケンジイルを示し；

Z は、ヘテロ原子、好ましくは酸素、または単結合を示し；

R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>、およびR<sup>d</sup> は、水素、ハロゲン、-CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub>-メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub>~C<sub>4</sub>シクロアルキル、および-C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択され、

R<sup>1</sup> は、水素、またはC<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキルであり、該C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキルは、任意選択により、-OH、フルオロ、オキソ、ならびに任意選択により1つ以上のフルオロおよび/もしくは-OHで置換されるC<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換され；

R<sup>2</sup> は、水素、C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3~7員飽和環、ならびに、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリールからなる群から選択され、該C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、3~7員飽和環、または単環アリールは、任意選択により1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

R<sup>3</sup> は、水素、またはC<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキルであり；

あるいは、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3~7員飽和環を形成し、該3~7員飽和環は、任意選択により、1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

R<sup>7</sup> は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリール；任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3~7員飽和環；または-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>を示し；

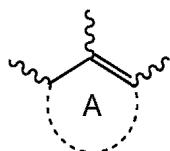
ここで、R<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>は、水素、および、C<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキルからそれぞれ独立して選択され；

各R<sup>8</sup>は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキル、ならびに、任意選択により、フルオロおよび/または-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキルからなる群から独立して選択される、上記[1]に記載の化合物。

[3]

上記[1]または[2]に記載の化合物であって、式中、

【化288】



は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環の5または6員アリールを示し、該アリールは、任意選択により、C<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>3</sub>~C<sub>4</sub>シクロアルキル、-CNおよびハロゲンからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換され；

【化289】



は、任意選択により1個の窒素原子を含有する6員アリールを示し；

Xは-CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>-を示し；

Yは、それぞれ任意選択により、C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルおよび-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>7</sub>アルカンジイルまたはC<sub>2</sub>～C<sub>7</sub>アルケンジイルを示し；

Zは、ヘテロ原子、好ましくは酸素、または単結合を示し；

R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>、およびR<sup>d</sup>は、水素、ハロゲン、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、および-C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択され、

R<sup>1</sup>は、水素、またはC<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルであり、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルは、任意選択により、-OH、フルオロ、オキソ、ならびに任意選択により1つ以上のフルオロおよび/もしくは-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換され；

R<sup>2</sup>は、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環、ならびに、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有する单環アリールからなる群から選択され、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、3～7員飽和環、または单環アリールは、任意選択により1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

R<sup>3</sup>は水素であり；

あるいは、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環を形成し、該3～7員飽和環は、任意選択により、1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

R<sup>7</sup>は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する单環アリール；任意選択によりO、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環；または-NR<sup>9</sup>R<sup>10</sup>を示し；

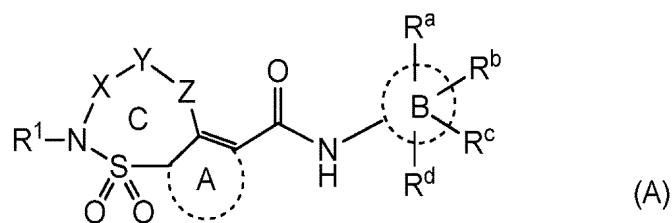
ここで、R<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>は、水素、および、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキルからそれぞれ独立して選択され；

各R<sup>8</sup>は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキル、ならびに、任意選択により、フルオロおよび/または-OHからそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群から独立して選択される、上記[1]または[2]に記載の化合物。

[4]

式(A)：

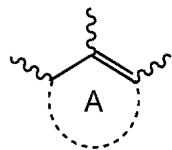
【化290】



で表される上記[1]～[3]のいずれか1項に記載の化合物、またはその立体異性体もしくは互変異性体

[式中：

【化291】



は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環の5または6員アリールを示し、該アリールは、任意選択により1つ以上のメチル、-CNまたはハロゲンで置換され；

【化292】



は、任意選択により1個の窒素原子を含有する6員アリールを示し；

Xは-CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>-を示し；

Yは、それぞれ任意選択により、1つ以上のC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルまたは-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>7</sub>アルカンジイルまたはC<sub>2</sub>～C<sub>7</sub>アルケンジイルを示し；

Zは、ヘテロ原子、好ましくは酸素、または単結合を示し；

R<sup>a</sup>、R<sup>b</sup>、R<sup>c</sup>、およびR<sup>d</sup>は、水素、ハロゲン、-CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>、-CF<sub>2</sub>-メチル、-CH<sub>2</sub>F、-CF<sub>3</sub>、-OCF<sub>3</sub>、-CN、C<sub>3</sub>～C<sub>4</sub>シクロアルキル、およびC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群から独立して選択され、

R<sup>1</sup>は、水素、またはC<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルであり、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルは、任意選択により、-OH、フルオロ、オキソ、ならびに任意選択により1つ以上のフルオロおよび/もしくは-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換され；

R<sup>2</sup>は、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環、ならびに、任意選択により、1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリールからなる群から選択され、該C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>アルキル-R<sup>7</sup>、3～7員飽和環、または単環アリールは、任意選択により1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

R<sup>3</sup>は水素であり；

あるいは、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>は、それらが結合している炭素原子と一緒にになって、任意選択により、O、SおよびNからなる群からそれぞれ独立して選択される1個以上のヘテロ原子を含有する3～7員飽和環を形成し、該3～7員飽和環は、任意選択により、1つ以上のR<sup>8</sup>で置換され；

R<sup>7</sup>は、任意選択により1または2個のヘテロ原子を含有する単環アリールを示し；

各R<sup>8</sup>は、-OH、フルオロ、メトキシ、オキソ、-C(=O)OC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキル、ならびに、任意選択により1つ以上のフルオロおよび/または-OHで置換されるC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルからなる群から独立して選択される]、

あるいは、その薬学的に許容される塩または溶媒和物。

[5]

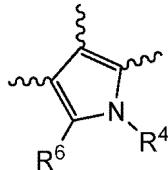
上記[1]～[3]のいずれか一項に記載の化合物であって、式中、

【化293】



は、

【化294】

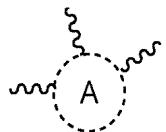


(式中、R<sup>4</sup>は、水素、-C<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキル、またはC<sub>3</sub>~C<sub>4</sub>シクロアルキルであり；かつR<sup>6</sup>は、水素、メチル、-CNおよびハロゲンから選択される)を示す上記[1]~[3]のいずれか一項に記載の化合物。

[6]

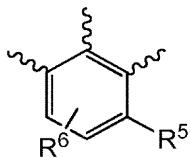
上記[1]~[4]のいずれか一項に記載の化合物であって、式中、

【化295】



は、

【化296】



(式中、R<sup>5</sup>は、水素またはハロゲンであり；かつR<sup>6</sup>は、水素、メチル、-CNおよびハロゲンから選択される)を示す上記[1]~[4]のいずれか一項に記載の化合物。

[7]

環Cは、6~8個の原子、好ましくは7個の原子からなる上記[1]~[6]のいずれか一項に記載の化合物。

[8]

R<sup>4</sup>はメチルである上記[5]または[7]に記載の化合物。

[9]

R<sup>6</sup>は水素である上記[5]~[8]のいずれか一項に記載の化合物。

[10]

R<sup>2</sup>は、任意選択により、-OH、フルオロおよびメトキシからなる群からそれぞれ独立して選択される1つ以上の置換基で置換されるC<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキルである上記[1]~

[ 9 ] のいずれか一項に記載の化合物。

[ 11 ]

上記 [ 1 ] ~ [ 10 ] のいずれか一項に記載の化合物であって、式中、

【化 297】

~~~  
B

はフェニルを示し、R<sup>a</sup> は水素およびハロゲンから選択され、R<sup>b</sup> は水素またはハロゲンであり、R<sup>c</sup> はハロゲン、CH<sub>3</sub>、CHF<sub>2</sub>、CF<sub>3</sub>、および-CNから選択され、かつR<sup>d</sup> は水素およびハロゲンから選択される上記 [ 1 ] ~ [ 10 ] のいずれか一項に記載の化合物。

[ 12 ]

R<sup>2</sup> は、任意選択により 1 個以上のフルオロで置換されるC<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルである上記 [ 1 ] ~ [ 11 ] のいずれか一項に記載の化合物。

[ 13 ]

R<sup>2</sup> は、任意選択により 1 つ以上の-OH 置換基で置換されるC<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキルである上記 [ 1 ] ~ [ 12 ] のいずれか一項に記載の化合物。

[ 14 ]

R<sup>1</sup> は水素である上記 [ 1 ] ~ [ 13 ] のいずれか一項に記載の化合物。

[ 15 ]

医薬品として使用するための上記 [ 1 ] ~ [ 14 ] のいずれか一項に記載の化合物。

[ 16 ]

哺乳動物におけるHBV 感染の予防または治療に使用するための上記 [ 1 ] ~ [ 14 ] のいずれか一項に記載の化合物。

[ 17 ]

上記 [ 1 ] ~ [ 14 ] のいずれか一項に記載の化合物、および薬学的に許容される担体を含む医薬組成物。

[ 18 ]

HBV 感染の治療において同時に、別々に、または順次使用する組み合わせ製剤として、(a) 上記 [ 1 ] ~ [ 14 ] のいずれか一項に記載の化合物、または上記 [ 17 ] に記載の医薬組成物、および (b) 他のHBV 阻害剤を含有する製品。

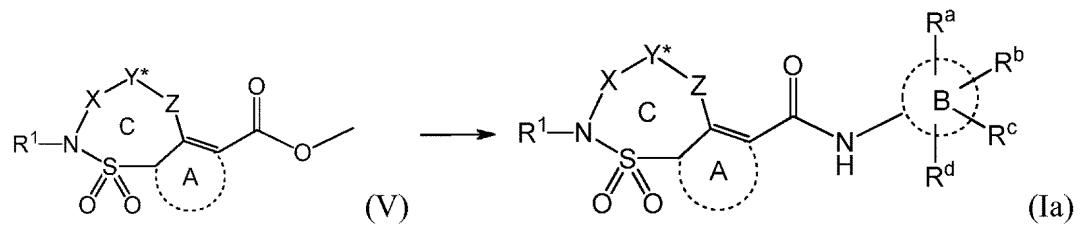
[ 19 ]

HBV に感染するか、またはHBV に感染するリスクのある温血動物、特にヒトを治療する方法であって、上記 [ 1 ] ~ [ 14 ] のいずれか一項に記載の化合物、または上記 [ 17 ] に記載の医薬組成物を治療有効量、投与することを含む方法。

[ 20 ]

上記 [ 1 ] ~ [ 14 ] のいずれか一項に記載の化合物の製造方法であって、(a) 溶媒中で、塩基の存在下に、式 (V) の化合物を式 (VI) のアミンと反応させて、式 (Ia) の化合物を生成し、任意選択により、前記式 (Ia) の化合物を水素化する工程、

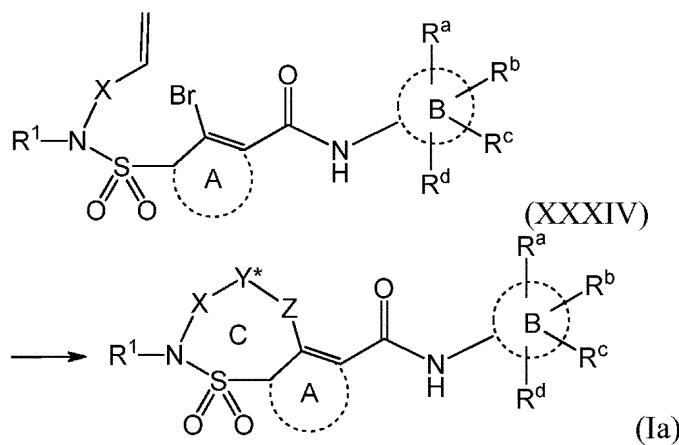
【化 2 9 8】



または

(b) 式 (XXXIV) の化合物を、ヘック反応の条件下に置いて、式 (Ia) の化合物を生成し、任意選択により、前記式 (Ia) の化合物を水素化する工程、

【化 2 9 9 】

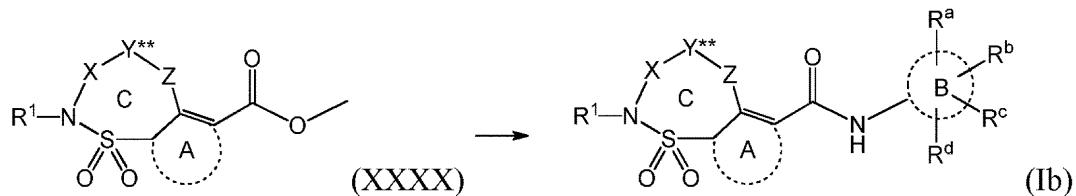


または

(c) 好適な溶媒中で、好適な塩基の存在下に、式 (XXXX) の化合物を式 (VI) のアミンと反応させる工程

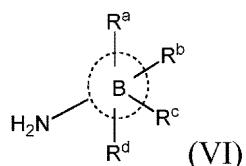
を含み、

【化 3 0 0】



前記式（V I）のアミンは、

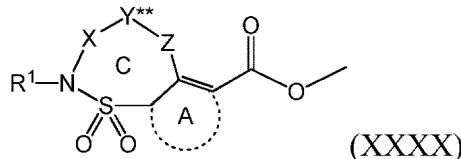
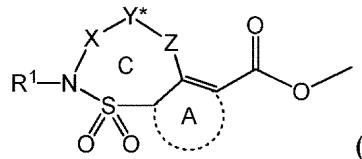
【化 3 0 1 】



であり、Y\*は、C<sub>2</sub>～C<sub>7</sub>アルケンジイルであり、Y\*\*は、C<sub>1</sub>～C<sub>7</sub>アルカンジイルであり、かつ他の可変符号は全て上記[1]～[14]のいずれか一項に定義された通りである方法。

[21]

式(V)または式(XXXX)の化合物：  
【化302】



(式中、

Y\*は、C<sub>2</sub>～C<sub>7</sub>アルケンジイルであり、Y\*\*はC<sub>1</sub>～C<sub>7</sub>アルカンジイルであり、かつ他の可変符号は全て上記[1]～[14]のいずれか一項に定義された通りである)

。