

【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29年10月12日 (2017.10.12)

【公開番号】特開2017-114876(P2017-114876A)

【公開日】平成29年6月29日 (2017.6.29)

【年通号数】公開・登録公報2017-024

【出願番号】特願2017-18192(P2017-18192)

【国際特許分類】

C 07 J 63/00 (2006.01)

A 61 P 31/00 (2006.01)

A 61 P 35/00 (2006.01)

A 61 K 39/00 (2006.01)

A 61 K 39/39 (2006.01)

A 61 K 31/569 (2006.01)

A 61 K 31/57 (2006.01)

【F I】

C 07 J 63/00 C S P

A 61 P 31/00

A 61 P 35/00

A 61 K 39/00 A

A 61 K 39/39

A 61 K 31/569

A 61 K 31/57

【手続補正書】

【提出日】平成29年8月17日 (2017.8.17)

【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

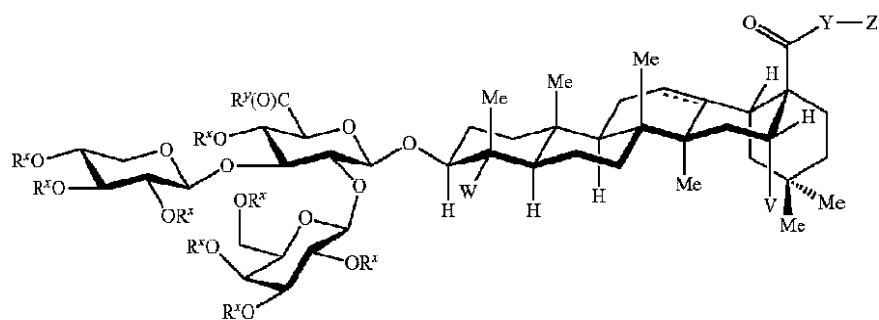
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 V I I - b の化合物または医薬として許容されるその塩：

【化 2 6 1】



VII-b

(式中、

W は、Me、-CHO、

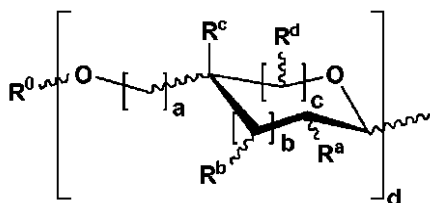
$$\begin{array}{c} \text{R}^{\text{X}'}\text{O}-\text{C}-\text{OR}^{\text{X}'} \\ | \\ \text{wavy line} \\ | \end{array}$$

V は、水素または -OR^x であり；

Zは、水素；アシル、脂肪族、ヘテロ脂肪族、アリール、アリールアルキル、ヘテロシクリル、およびヘテロアリールからなる群から選択される環式もしくは非環式の任意選択で置換された部分であるか；またはZは、

式中、

【化 2 5 0】



式中、

d は、1 ~ 5 の整数であり、ここでは、角括弧でくくられた d 構造が、フラノースまたはピラノース部分を表し、かつ b と c の合計が 1 または 2 であり、角括弧でくくられた各 d 構造は、同じでも異なってもよく；

R^a 、 R^b 、 R^c 、および R^d の各存在は独立に、水素、ハロゲン、OH、OR、OR^x、NR₂、NHCOR；あるいはアシル、C₁ ~ C₁₀ 脂肪族、C₁ ~ C₆ ヘテロ脂肪族、

6～10員のアリール、アリールアルキル、窒素、酸素、または硫黄から独立に選択される1～4個のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリール、窒素、酸素、および硫黄からなる群から独立に選択される1～2個のヘテロ原子を有する4～7員のヘテロシクリルから選択される任意選択で置換された基であり；

R^2 は、水素、ハロゲン、OR、 $OC(O)R^4$ 、 $OC(O)OR^4$ 、 $OC(O)NR^4$ 、 $OC(O)SR^4$ 、 $NRC(O)R^4$ 、 $NHC(O)OR^4$ 、 $NHC(O)NRR^4$ 、 $N(R^4)_2$ 、 NRR^4 、 N_3 ；または C_{1-10} 脂肪族、 C_{1-6} ヘテロ脂肪族、6～10員のアリール、アリールアルキル、窒素、酸素および硫黄からなる群から独立に選択される1～4個のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリール、窒素、酸素、および硫黄からなる群から独立に選択される1～2個のヘテロ原子を有する4～7員のヘテロシクリルから選択される任意選択で置換された基であり；

R^x の各存在は独立に、水素であるか、または $-OR^x$ として、アルキルエーテル、ベンジルエーテル、シリルエーテル、アセタール、ケタール、エステル、カルバミン酸エステル、および炭酸エステルからなる群から選択される酸素保護基を形成し；

R^y は、 $-OH$ 、または $-OR$ であるか；または $-C(O)R^y$ として、エステル、アミド、およびヒドラジドからなる群から選択されるカルボキシル保護基を形成し；

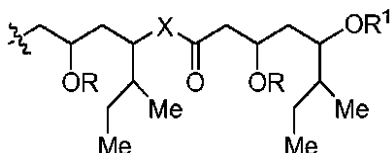
$R^{x'}$ の各存在は独立に、6～10員のアリール、 C_{1-6} 脂肪族；または窒素、酸素、および硫黄からなる群から独立に選択される1～2個のヘテロ原子を有する C_{1-6} ヘテロ脂肪族から選択される任意選択で置換された基であるか；あるいは2つの $OR^{x'}$ が共に、窒素、酸素、および硫黄からなる群から独立に選択される1～2個のヘテロ原子を有する5～7員の複素環を形成し；

R の各存在は独立に、水素；アシル、アリールアルキル、6～10員のアリール、 C_{1-12} 脂肪族、または窒素、酸素、および硫黄からなる群から独立に選択される1～2個のヘテロ原子を有する C_{1-12} ヘテロ脂肪族から選択される任意選択で置換された基であるか；あるいは同じ窒素原子上の2つの $-OR$ が、窒素と共に、窒素、酸素、および硫黄からなる群から独立に選択される1～2個のヘテロ原子を有する4～7員の複素環を形成し；

R^3 は、 R^3 がメチルでなく、かつ水素、ハロゲン、 CH_2OR^1 ；またはアシル、 C_{1-10} 脂肪族、 C_{1-6} ヘテロ脂肪族、6～10員のアリール、アリールアルキル、窒素、酸素、および硫黄からなる群から独立に選択される1～4個のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリール、窒素、酸素、および硫黄からなる群から独立に選択される1～2個のヘテロ原子を有する4～7員のヘテロシクリルからなる群から選択される任意選択で置換された基であり；

R^4 は、

【化252】



(式中、Xは、 $-O-$ または $-NR-$ である)であるか；あるいは

R^4 は、 $T-R^2$ であり、式中、

Tは、共有結合、あるいは、飽和または不飽和の二価の直鎖または分枝状 C_{1-26} 脂肪族またはヘテロ脂肪族鎖である；かつ

R^2 は、水素、ハロゲン、 $-OR$ 、 $-OR^x$ 、 $-OR^1$ 、 $-SR$ 、 $-NR_2$ 、 $-NC(O)OR$ ；またはアシル、アリールアルキル、ヘテロアリールアルキル、 C_{1-6} 脂肪族、6～10員のアリール、窒素、酸素、または硫黄から独立に選択される1～4個のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリール、窒素、酸素、および硫黄からなる群から独立に選択される1～2個のヘテロ原子を有する4～7員のヘテロシクリルから選択される

任意選択で置換された基である；あるいは、

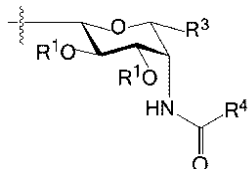
同じ窒素原子上の 2 つの $-C(O)R^4$ が、窒素と共に、窒素、酸素、および硫黄からなる群から独立に選択される 1 ～ 2 個のヘテロ原子を有する 4 ～ 7 員の複素環を形成する)

ただし、

(1) Y に直接結合する糖質ドメインは、フコシルではなく、

(2) Y が $-O-$ である場合、Z は、

【化 2 5 3】



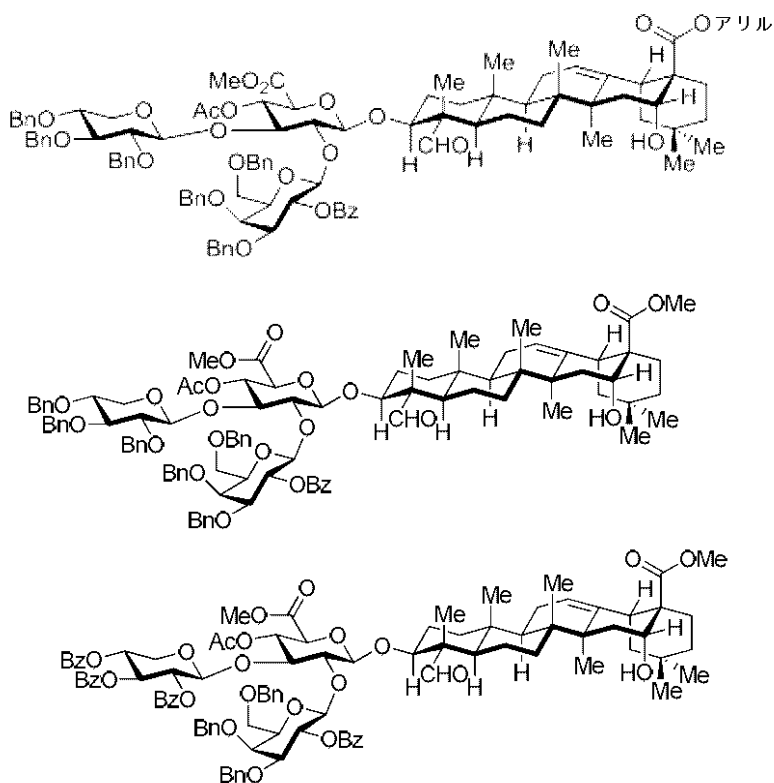
ではなく、

(3) すべての R^x 基が水素である場合、または少なくとも 4 つの R^x 基がメチルである場合、Y - Z は、 $-OH$ でも $-OMe$ でもなく；そして

(4) 該化合物は、以下

Chemical structures of compounds 1, 2, 3, 4, and 5 are shown. Each structure consists of a steroid-like core with a carboxylic acid group and various protecting groups (BnO, Et₃SiO, OBn). The structures are labeled 1, 2, 3, 4, and 5 from top to bottom.

【化 2 5 5】

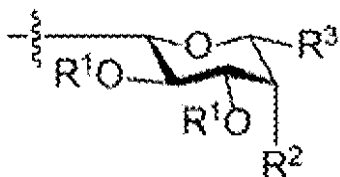


のうちの1つではない、化合物または医薬として許容されるその塩。

【請求項 2】

請求項 1 に記載の化合物であって、Z が、

【化 2 5 6】

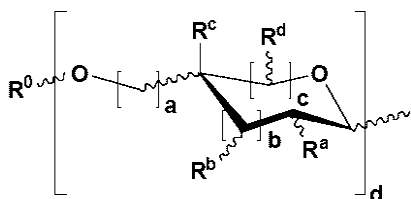


の構造を有する基である、化合物。

【請求項 3】

請求項 2 に記載の化合物であって、R¹ の各存在が、独立して、水素または

【化 2 5 7】

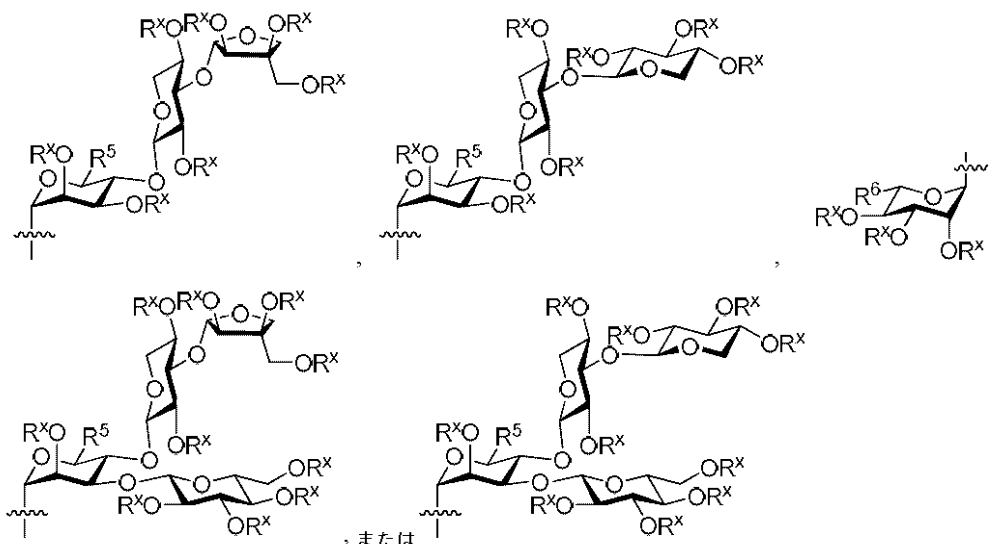


の構造を有する基である、化合物。

【請求項 4】

請求項 2 に記載の化合物であって、R¹ の各存在が、

【化 2 5 8】



からなる群から独立して選択され、

R^5 および R^6 が独立に、水素；アシル、 $C_{1 \sim 10}$ 脂肪族、 $C_{1 \sim 6}$ ヘテロ脂肪族、 $6 \sim 10$ 員のアリール、アリールアルキル、窒素、酸素、および硫黄からなる群から独立に選択される $1 \sim 4$ 個のヘテロ原子を有する $5 \sim 10$ 員のヘテロアリール、窒素、酸素、および硫黄からなる群から独立に選択される $1 \sim 2$ 個のヘテロ原子を有する $4 \sim 7$ 員のヘテロシクリルからなる群から選択される任意選択で置換された基である、化合物。

【請求項 5】

R^2 が、 N_3 、 $OC(O)R^4$ 、 $OC(O)NHR^4$ 、 $NRC(O)R^4$ 、 $NHC(O)OR^4$ 、または $NHC(O)NHR^4$ である、請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 6】

R^2 が、 $NHC(O)R^4$ である、請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 7】

R^4 が、 $-T-R^z$ である、請求項 6 に記載の化合物。

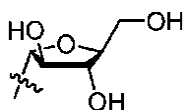
【請求項 8】

R^z が、水素、ハロゲン、 $-OR^x$ 、 OR^1 、 $-OR$ ；あるいは、アシル、アリールアルキル、ヘテロアリールアルキル、 $C_{1 \sim 6}$ 脂肪族、 $6 \sim 10$ 員のアリール、窒素、酸素、または硫黄から独立に選択される $1 \sim 4$ 個のヘテロ原子を有する $5 \sim 10$ 員のヘテロアリール、窒素、酸素、または硫黄から独立に選択される $1 \sim 2$ 個のヘテロ原子を有する $4 \sim 7$ 員のヘテロシクリルから選択される任意選択で置換された基である、請求項 7 に記載の化合物。

【請求項 9】

R^z が、水素、メチル、または

【化 2 5 9】



から選択される、請求項 8 に記載の化合物。

【請求項 10】

R^3 、 R^5 、および R^6 の各々が独立に、任意選択で置換された $C_{1 \sim 10}$ 脂肪族基である、請求項 4 に記載の化合物。

【請求項 11】

R⁵ および R⁶ の各々が独立に、メチルである、請求項 10 に記載の化合物。

【請求項 12】

R³、R⁵、および R⁶ の各々が独立に、CH₂OR である、請求項 10 に記載の化合物。

【請求項 13】

R³、R⁵、および R⁶ のうちの 1 つまたは複数が、CH₂OH である、請求項 10 に記載の化合物。

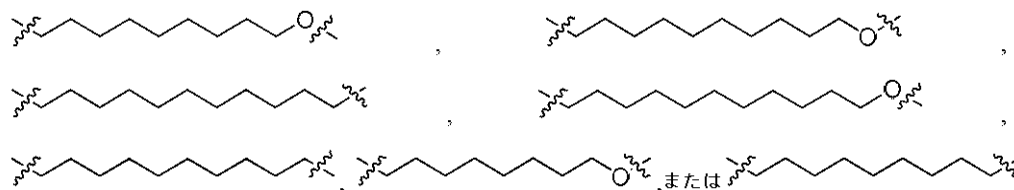
【請求項 14】

R³、R⁵、および R⁶ の各々が、CH₂OH である、請求項 10 に記載の化合物。

【請求項 15】

- T - が、

【化 260】



から選択される、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 16】

医薬組成物であって、

請求項 1 に記載の化合物と、

医薬として許容される賦形剤と、

免疫学的に有効な量の抗原と

を含む医薬組成物。