

【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23年3月31日(2011.3.31)

【公表番号】特表2010-518125(P2010-518125A)

【公表日】平成22年5月27日(2010.5.27)

【年通号数】公開・登録公報2010-021

【出願番号】特願2009-549295(P2009-549295)

【国際特許分類】

C 07 D 209/22 (2006.01)
C 12 Q 1/68 (2006.01)
A 61 P 43/00 (2006.01)
A 61 K 45/00 (2006.01)
A 61 K 31/7056 (2006.01)
A 61 K 31/4196 (2006.01)
A 61 K 31/4412 (2006.01)
A 61 K 45/06 (2006.01)
A 61 K 39/395 (2006.01)
A 61 K 31/427 (2006.01)
A 61 K 38/21 (2006.01)
A 61 P 31/16 (2006.01)
C 07 D 409/06 (2006.01)
A 61 K 31/405 (2006.01)
C 07 D 409/14 (2006.01)
A 61 K 31/41 (2006.01)
A 61 K 31/4155 (2006.01)
C 07 D 333/24 (2006.01)
A 61 K 31/381 (2006.01)
A 61 K 31/506 (2006.01)
A 61 K 31/53 (2006.01)
C 07 D 473/16 (2006.01)
A 61 K 31/52 (2006.01)
C 07 D 417/14 (2006.01)
A 61 K 31/433 (2006.01)
C 07 D 403/10 (2006.01)
C 07 D 401/10 (2006.01)
A 61 K 31/4439 (2006.01)
C 07 D 413/06 (2006.01)
A 61 K 31/422 (2006.01)
C 07 D 409/04 (2006.01)
C 07 D 409/12 (2006.01)
C 07 D 413/12 (2006.01)
C 07 D 307/79 (2006.01)
A 61 K 31/343 (2006.01)
C 07 D 333/60 (2006.01)
C 07 D 471/04 (2006.01)
A 61 K 31/437 (2006.01)
C 07 D 491/056 (2006.01)
A 61 K 31/407 (2006.01)
A 61 K 31/5377 (2006.01)

A 6 1 K 31/496 (2006.01)
 C 0 7 D 209/42 (2006.01)
 C 0 7 D 403/12 (2006.01)
 A 6 1 K 31/4184 (2006.01)
 C 0 7 D 209/88 (2006.01)
 A 6 1 K 31/403 (2006.01)
 A 6 1 K 31/4188 (2006.01)
 C 0 7 D 401/06 (2006.01)
 A 6 1 K 31/4709 (2006.01)
 C 0 7 D 403/06 (2006.01)
 C 0 7 D 417/06 (2006.01)
 A 6 1 K 31/428 (2006.01)
 C 0 7 D 405/10 (2006.01)
 A 6 1 K 31/416 (2006.01)
 C 0 7 D 473/32 (2006.01)
 C 0 7 D 473/34 (2006.01)
 A 6 1 K 31/7064 (2006.01)
 C 0 7 F 9/572 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 D 209/22	C S P
C 1 2 Q 1/68	Z N A Z
A 6 1 P 43/00	1 1 1
A 6 1 K 45/00	
A 6 1 K 31/7056	
A 6 1 K 31/4196	
A 6 1 K 31/4412	
A 6 1 K 45/06	
A 6 1 K 39/395	D
A 6 1 K 31/427	
A 6 1 K 37/66	G
A 6 1 P 43/00	1 2 1
A 6 1 P 31/16	
C 0 7 D 409/06	
A 6 1 K 31/405	
C 0 7 D 409/14	
A 6 1 K 31/41	
A 6 1 K 31/4155	
C 0 7 D 333/24	
A 6 1 K 31/381	
A 6 1 K 31/506	
A 6 1 K 31/53	
C 0 7 D 473/16	
A 6 1 K 31/52	
C 0 7 D 417/14	
A 6 1 K 31/433	
C 0 7 D 403/10	
C 0 7 D 401/10	
A 6 1 K 31/4439	
C 0 7 D 413/06	
A 6 1 K 31/422	

C 0 7 D 409/04
C 0 7 D 409/12
C 0 7 D 413/12
C 0 7 D 307/79
A 6 1 K 31/343
C 0 7 D 333/60
C 0 7 D 471/04 1 0 4 Z
A 6 1 K 31/437
C 0 7 D 491/056
A 6 1 K 31/407
A 6 1 K 31/5377
A 6 1 K 31/496
C 0 7 D 209/42
C 0 7 D 403/12
A 6 1 K 31/4184
C 0 7 D 209/88
A 6 1 K 31/403
A 6 1 K 31/4188
C 0 7 D 401/06
A 6 1 K 31/4709
C 0 7 D 403/06
C 0 7 D 417/06
A 6 1 K 31/428
C 0 7 D 405/10
A 6 1 K 31/416
C 0 7 D 473/32
C 0 7 D 473/34 3 6 1
A 6 1 K 31/7064
C 0 7 F 9/572 A

【手続補正書】

【提出日】平成23年2月10日(2011.2.10)

【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

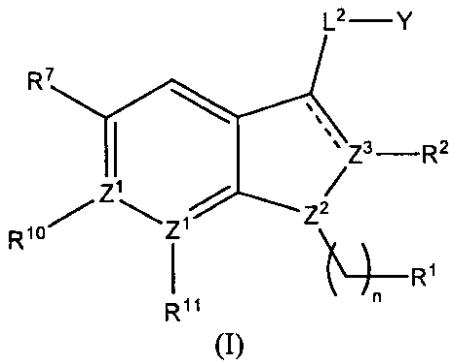
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

式1：

【化1】



(式中、

nは0～3の整数であり、

R¹は、H、-A¹-L¹-A²、および任意選択で置換された：アルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、ヘテロシクリル、アリール、ヘテロアリール、-C(O)-アリール、-C(O)-アラルキルもしくは-C(O)-ヘテロシクリル-アラルキルからなる群から選択されるか、またはZ²がOまたはSである場合、R¹は存在せず、nは0であり、

ここで、R¹が-C(O)-アリール、-C(O)-アラルキルまたは-C(O)-ヘテロシクリルアラルキルである場合には、nは0ではなく、

A¹およびA²は、任意選択で置換されたアリールおよび任意選択で置換されたヘテロアリールからなる群から独立に選択され、

L¹は、オキシ、C₁～₆アルコキシ、-NR⁵C(O)-アルキル-、-NR⁵C(O)CH₂S-、-NR⁵CH₂-であるか、または存在せず、

L²は、-CR^{3a}R^{3b}-、-CR^{3a}R^{3b}CR^{3a}R^{3b}-、-CR^{3a}=CR^{3a}-であるか、または存在せず、各R^{3a}および各R^{3b}は、H、ハロ、ヒドロキシ、NH₃⁺、-NHC(O)NH₂、-NHC(O)OR⁹、-NHC(O)R⁹、および任意選択で置換された：C₁～₆アルキル、シクロアルキル-アルキル、ヘテロシクリル-アルキル、ヘテロアラルキル、アラルキルもしくはアリールからなる群から独立に選択されるか、またはR^{3a}とR^{3b}は一緒になってオキソを形成しており、

R^{3a}は、R²と一緒にになって任意選択で置換されたシクロアルキルまたは任意選択で置換されたヘテロシクリルを任意選択で形成しており、

Yは、H、ハロ、エチニル、-C(O)H、-CN、-C(O)OR⁴、-C(O)NR⁵R⁶、-C(O)NHSO₂R⁹、-PO₃H₂、1H-テトラゾール-5-イル、1H-1,2,4-トリアゾール-5-イル、1H-ピラゾール-5-イル、1,2-ジヒドロ-1,2,4-トリアゾール-3-オン-5-イルおよび1,2-ジヒドロ-ピラゾール-3-オン-5-イルからなる群から選択され、

ここで、YがHである場合には、

少なくとも1つのR^{3a}もしくはR^{3b}は任意選択で置換されたアリールであるか、または、

R¹は-A¹-L¹-A²または任意選択で置換された：アリール、ヘテロアリール、-C(O)-アリール、-C(O)-アラルキルもしくは-C(O)-ヘテロシクリル-アラルキルであり、

R⁷は、H、ハロ、-CH=CH-C(O)OR⁴、-OR⁴、-SR⁴、-CH₂NHC(O)OR⁴、-CH₂NHSO₂R⁹、-CH₂NHC(O)R⁴、および任意選択で置換された：アルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシ、シクロアルキル、シクロアルキルアルコキシ、アリール、アラルキル、ヘテロアリールまたはヘテロアラルキルからなる群から選択され、

R¹⁰は、H、ハロ、-CH=CH-C(O)OR⁴、-OR⁴、-SR⁴、-CH₂NHC(O)OR⁴、-CH₂NHSO₂R⁹、-CH₂NHC(O)R⁴、および任意選択で置換された：アルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシ、シクロアルキル、シクロアルキルアルコキシ、アリール、アラルキル、ヘテロアリール、ヘテロアラルキルからなる群から選択されるか、もしくは存在せず、またはR⁷とR¹⁰は一緒になって任意選択で置換された環または環系を形成しており、

R¹¹は、H、ハロ、-CH=CH-C(O)OR⁴、-OR⁴、-SR⁴、-CH₂NHC(O)OR⁴、-CH₂NHSO₂R⁹、-CH₂NHC(O)R⁴、および任意選択で置換された：アルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシ、シクロアルキル、シクロアルキルアルコキシ、アリール、アラルキル、ヘテロアリールま

たはヘテロアラルキルからなる群から選択されるか、または存在せず、

各Z¹は独立にCまたはNであり、

Z²は、CH、N、OまたはSであり、

Z³はCまたはNであり、

R²は、H、-C(O)OR⁴、-C(O)NR⁵R⁶、-C(O)-A¹-L¹-A²、-CH₂-A¹-L¹-A²、-C(O)CH₂-A¹-L¹-A²、-C(O)NHCH₂-A¹-L¹-A²、および任意選択で置換された：アルキル、-C(O)-アルキル、アリール、-C(O)-アリール、アラルキル、-C(O)-アラルキルまたはヘテロアラルキルからなる群から選択され、

ここで、R¹が-A¹-L¹-A²または任意選択で置換された：アリール、ヘテロアリール、-C(O)-アリール、-C(O)-アラルキルもしくは-C(O)-ヘテロシクリル-アラルキルでない場合には

、R²は、-C(O)-A¹-L¹-A²、-CH₂-A¹-L¹-A²、-C(O)CH₂-A¹-L¹-A²、-CH₂-（任意選択で置換されたヘテロアリール）および任意選択で置換された-C(O)-アラルキルからなる群から選択され、

少なくとも1つのR^{3a}またはR^{3b}は任意選択で置換されたヘテロアラルキルであり、

Yは-C(O)OHもしくは-C(O)Hであり、少なくとも1つのZ¹はNであるか、

Yは-C(O)OHもしくは-C(O)Hであり、R¹⁰はフェニルもしくは-O-ベンジルであるか、

Yは-C(O)OHもしくは-C(O)Hであり、R¹¹は-O-（任意選択で置換されたフェニル）であるか、または

Yは-C(O)OHもしくは-C(O)Hであり、R⁷は-O-ベンジルであり、R¹⁰は-O-メチルであり、

R⁴はHまたは任意選択で置換された：アルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、アラルキル、ヘテロアリールもしくはヘテロアラルキルであり、

R⁵およびR⁶は、H、CN、および任意選択で置換された：C₁～₆アルキル、C₃～₇シクロアルキル、ヘテロシクリル、-ヘテロシクリル-C(O)OR⁴、アリール、ヘテロアリール、アラルキル、ヘテロアラルキルもしくはシクロアルキルアルキルからなる群からそれぞれ独立に選択されるか、またはR⁵とR⁶は一緒になって任意選択で置換された環または環系を形成しており、

R⁹は、アルキル、シクロアルキルおよびアリールからなる群から選択され、

ただし、

R¹が、ピリジン、ピリミジンもしくはキノリンであるか、またはR¹がナフタレンであり、nが0ではない場合、YはCO₂Hではなく、

R¹が非置換フェニルである場合、Yは、-C(O)OMe、-C(O)OEt、-C(O)O-t-Bu、-C(O)OBn、-C(O)NMe₂、-C(O)NEt₂または-C(O)N(i-Pr)₂ではなく、

nが3未満であり、R¹が非置換フェニルまたは非置換ビフェニルであり、Yが-C(O)OHである場合、R²は、-C(O)-A¹-L¹-A²、-CH₂-A¹-L¹-A²、-C(O)CH₂-A¹-L¹-A²、および任意選択で置換された：-C(O)-アリール、アラルキル、-C(O)-アラルキルもしくはヘテロアラルキルからなる群から選択されるか、またはR⁷は-OBnもしくはBrであり、

Yが-C(O)OHであり、R¹が、単一のハロゲン、-SO₂Me、-OCF₃、-OCF₂CF₃、-OCF₂CF₂H、-NC(O)CH₂Br、-Me、-SCH₃もしくは-t-Buで置換されたフェニルであるか、またはR¹がジオキソラン環と縮合したフェニルである場合、R⁷は-OBnまたはBrであり、

Yが-C(O)OMeであり、R¹が単一のCIで置換されたフェニルである場合、R⁷は-OBnであり、

Yが-C(O)OEtであり、R¹が、単一のハロゲン、-SO₂Me、-NH₂、-OH、-OCH₃もしくは-NO₂または2個のCIで置換されたフェニルである場合、R⁷は-OBnであり、

Yが-C(O)O-（置換フェニル）であり、R¹が2個のCIで置換されたフェニルである場合、R⁷は-OBnであり、

Yが-C(O)O-アルキル-フェニルであり、R¹が非置換フェニルまたは単一のBrで置換されたフェニルである場合、R⁷は-OBnであり、

nが0であり、R¹が非置換フェニルまたは単一のメチルで置換されたフェニルである場合、R²は、-C(O)-A¹-L¹-A²、-CH₂-A¹-L¹-A²、-C(O)CH₂-A¹-L¹-A²、および任意選択で置換された：-C(O)-アリール、アラルキル、-C(O)-アラルキルもしくはヘテロアラルキルからなる

群から選択されるか、またはR⁷は-OBnであり、

R¹が-A¹-L¹-A²であり、L¹がメトキシであり、A¹が非置換フェニルであり、A²が単一のCF₃で置換されたフェニルであり、Yが-C(O)OHである場合、R⁷は-OBnであり、

R¹が-A¹-L¹-A²であり、L¹が存在せず、A¹がベンゾフランであり、A²がチアゾールであり、Yが-C(O)OHである場合、R⁷は-OBnであり、

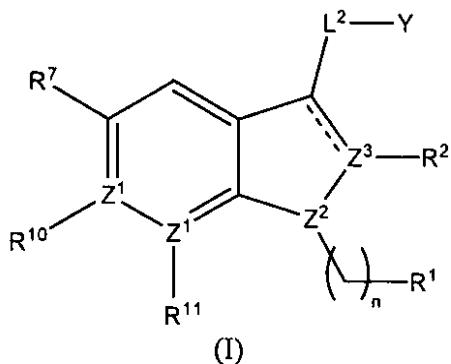
R¹が-A¹-L¹-A²であり、L¹がメトキシであるかまたは存在せず、A¹が非置換フェニルであり、A²が非置換フェニルであり、R²がアルキルであり、Yが-C(O)O-アルキルである場合、R⁷は-OBnである)

の構造を有する化合物または薬剤として許容されるその塩、溶媒和物、多形体もしくはプロドラッグ。

【請求項 2】

式1：

【化 2】



(式中、

nは0～3の整数であり、

R¹は、H、-A¹-L¹-A²、および任意選択で置換された：アルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、ヘテロシクリル、アリール、ヘテロアリール、-C(O)-アリール、-C(O)-アラルキル、-C(O)-ヘテロアリールもしくは-C(O)-ヘテロシクリル-アラルキルからなる群から選択されるか、またはZ²がOまたはSである場合、R¹は存在せず、nは0であり、R¹が、-C(O)-アリール、-C(O)-アラルキルまたは-C(O)-ヘテロシクリル-アラルキルである場合、nは0ではなく、

A¹およびA²は、任意選択で置換されたアリールおよび任意選択で置換されたヘテロアリールからなる群から独立に選択され、

L¹は、オキシ、C₁～₆アルコキシ、-NR⁵C(O)-アルキル-、-NR⁵C(O)CH₂S-、-NR⁵CH₂-、-NR⁵であるか、または存在せず、

L²は、-CR^{3a}R^{3b}-、-CR^{3a}R^{3b}CR^{3a}R^{3b}-、-CR^{3a}=CR^{3a}-であるか、または存在せず、各R^{3a}および各R^{3b}は、H、ハロ、ヒドロキシ、NH₃⁺、-NHC(O)NH₂、-NHC(O)OR⁹、-NHC(O)R⁹、-C(O)R⁴および任意選択で置換された：C₁～₆アルキル、シクロアルキル-アルキル、ヘテロシクリル-アルキル、ヘテロアラルキル、アラルキルもしくはアリールからなる群から独立に選択されるか、またはR^{3a}とR^{3b}は一緒になってオキソを形成してあり、

R^{3a}は、R²と一緒にになって任意選択で置換されたシクロアルキルまたは任意選択で置換されたヘテロシクリルを任意選択で形成しており、

Yは、H、ハロ、エチニル、-C(O)H、-CN、-C(O)OR⁴、-C(O)NR⁵R⁶、-C(O)NHSO₂R⁹、-C(O)NHOR⁴、-C(O)OCH₃OC(O)R⁴、-NHC(O)R⁴、-C(O)NHOR⁴、-C(O)OCH₃OR⁴、-PO₃H₂、1H-テトラゾール-5-イル、1H-1,2,4-トリアゾール-5-イル、1H-ピラゾール-5-イル、1,2-ジヒドロ-1,2,4-トリアゾール-3-オン-5-イルおよび1,2-ジヒドロ-ピラゾール-3-オン-5-イルからなる群から選択され、

ここで、YがHである場合には、

少なくとも1つのR^{3a}またはR^{3b}は任意選択で置換されたアリールであるか、あるいは、R¹は-A¹-L¹-A²または任意選択で置換された：アリール、ヘテロアリール、-C(O)-アリール、

-C(O)-アラルキルもしくは-C(O)-ヘテロシクリル-アラルキルであり、R⁷は、H、ハロ、-CH=CH-C(O)OR⁴、-OR⁴、-SR⁴、-CH₂NHC(O)OR⁴、-CH₂NHSO₂R⁹、-CH₂NHC(O)R⁴、および任意選択で置換された：アルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシ、シクロアルキル、シクロアルキルアルコキシ、アリール、アラルキル、ヘテロアリールまたはヘテロアラルキルからなる群から選択され、

R¹⁰は、H、ハロ、-CN、-CH=CH-C(O)OR⁴、-OR⁴、-SR⁴、-CH₂NHC(O)OR⁴、-CH₂NHSO₂R⁹、-CH₂NHC(O)R⁴、および任意選択で置換された：アルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシ、シクロアルキル、ヘテロシクリル、シクロアルキルアルコキシ、アリール、アラルキル、ヘテロアリール、ヘテロアラルキルからなる群から選択され、もしくは存在しないか、またはR⁷とR¹⁰は一緒になって任意選択で置換された環または環系を形成しており、

R¹¹は、H、ハロ、-CH=CH-C(O)OR⁴、-OR⁴、-SR⁴、-CH₂NHC(O)OR⁴、-CH₂NHSO₂R⁹、-CH₂NHC(O)R⁴、および任意選択で置換された：アルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシ、シクロアルキル、シクロアルキルアルコキシ、アリール、アラルキル、ヘテロアリールもしくはヘテロアラルキルからなる群から選択されるか、または存在せず、

各Z¹は独立にCまたはNであり、

Z²は、CH、N、OまたはSであり、

Z³はCまたはNであり、

R²は、H、-C(O)OR⁴、-C(O)NR⁵R⁶、-C(O)-A¹-L¹-A²、-CH₂-A¹-L¹-A²、-C(O)CH₂-A¹-L¹-A²、-C(O)NHCH₂-A¹-L¹-A²、および任意選択で置換された：アルキル、-C(O)-アルキル、アリール、-C(O)-アリール、アラルキル、-C(O)-アラルキルまたはヘテロアラルキルからなる群から選択され、

R¹が-A¹-L¹-A²または任意選択で置換された：アリール、ヘテロアリール、-C(O)-アリール、-C(O)-アラルキルもしくは-C(O)-ヘテロシクリル-アラルキルでない場合、

R²は、-C(O)-A¹-L¹-A²、-CH₂-A¹-L¹-A²、-C(O)CH₂-A¹-L¹-A²、-CH₂-（任意選択で置換されたヘテロアリール）および任意選択で置換された-C(O)-アラルキルからなる群から選択され、

少なくとも1つのR^{3a}またはR^{3b}は任意選択で置換されたヘテロアラルキルであり、

Yは-C(O)OHまたは-C(O)Hであり、少なくとも1つのZ¹はNであるか、

Yは-C(O)OHまたは-C(O)Hであり、R¹⁰はフェニル、1つもしくは複数のアミノで置換されたフェニルまたは-O-ベンジルであるか、

Yは-C(O)OHまたは-C(O)Hであり、R¹¹は-O-（任意選択で置換されたフェニル）であるか、あるいは

Yは-C(O)OHまたは-C(O)Hであり、R⁷は-O-ベンジルであり、R¹⁰は-O-メチルであり、

R⁴は、Hまたは任意選択で置換された：アルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、アラルキル、ヘテロアリール、ヘテロシクリルもしくはヘテロアラルキルであり、

R⁵およびR⁶は、H、CN、および任意選択で置換された：C₁～₆アルキル、C₃～₇シクロアルキル、ヘテロシクリル、-ヘテロシクリル-C(O)OR⁴、アリール、ヘテロアリール、アラルキル、ヘテロアラルキルもしくはシクロアルキル-アルキルからなる群からそれぞれ独立に選択されるか、またはR⁵とR⁶は一緒になって任意選択で置換された環または環系を形成しております、

R⁹は、アルキル、シクロアルキルおよびアリールからなる群から選択され、ただし、

R¹が、ピリジン、ピリミジンもしくはキノリンであるか、またはR¹がナフタレンであり、nが0でない場合、YはCO₂Hではなく、

R¹が非置換フェニルである場合、Yは、-C(O)OMe、-C(O)OEt、-C(O)O-t-Bu、-C(O)OBn、-C(O)NMe₂、-C(O)NEt₂または-C(O)N(i-Pr)₂ではなく、

nが3未満であり、R¹が非置換フェニルまたは非置換ビフェニルであり、Yが-C(O)OHである場合、R²は、-C(O)-A¹-L¹-A²、-CH₂-A¹-L¹-A²、-C(O)CH₂-A¹-L¹-A²、および任意選択で置換された：-C(O)-アリール、アラルキル、-C(O)-アラルキルもしくはヘテロアラルキルからなる群から選択されるか、またはR⁷は-OBn、Brまたは1つもしくは複数のアミノで置換されたフェニルであり、

Yが-C(O)OHであり、R¹が、单一のハロゲン、-SO₂Me、-OCF₃、-OCF₂CF₃、-OCF₂CF₂H、-NC(O)CH₂Br、-Me、-SCH₃または-t-Buで置換されたフェニルであるか、またはR¹がジオキソラン環と縮合したフェニルである場合、R⁷は-OBnまたはBrであり、

Yが-C(O)OMeであり、R¹が单一のCIで置換されたフェニルである場合、R⁷は-OBnであり、Yが-C(O)OEtであり、R¹が、单一のハロゲン、-SO₂Me、-NH₂、-OH、-OCH₃もしくは-NO₂、または2個のCIで置換されたフェニルである場合、R⁷は-OBnであるか、またはR¹⁰は1つもしくは複数のニトロで置換されたフェニルであり、

Yが-C(O)O-(置換フェニル)であり、R¹が2個のCIで置換されたフェニルである場合、R⁷は-OBnであり、

Yが-C(O)O-アルキル-フェニルであり、R¹が非置換フェニルまたは单一のBrで置換されたフェニルである場合、R⁷は-OBnであり、

nが0であり、R¹が非置換フェニルまたは单一のメチルで置換されたフェニルである場合、R²は、-C(O)-A¹-L¹-A²、-CH₂-A¹-L¹-A²、-C(O)CH₂-A¹-L¹-A²、および任意選択で置換された:-C(O)-アリール、アラルキル、-C(O)-アラルキルもしくはヘテロアラルキルからなる群から選択されるか、またはR⁷は-OBnであり、

R¹が-A¹-L¹-A²であり、L¹がメトキシであり、A¹が非置換フェニルであり、A²が单一のCF₃で置換されたフェニルであり、Yが-C(O)OHである場合、R⁷は-OBnであり、

R¹が-A¹-L¹-A²であり、L¹が存在せず、A¹がベンゾフランであり、A²がチアゾールであり、Yが-C(O)OHである場合、R⁷は-OBnであり、

R¹が-A¹-L¹-A²であり、L¹がメトキシであるかまたは存在せず、A¹が非置換フェニルであり、A²が非置換フェニルであり、R²がアルキルであり、Yが-C(O)O-アルキルである場合、R⁷は-OBnである)

の構造を有する化合物または薬剤として許容されるその塩、溶媒和物、多形体もしくはプロドラッグ。

【請求項3】

R¹が任意選択で置換されたフェニルである、請求項1または2に記載の化合物。

【請求項4】

R¹が任意選択で置換されたヘテロアリールである、請求項1または2に記載の化合物。

【請求項5】

R¹が-A¹-L¹-A²である、請求項1から4のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項6】

A¹およびA²が任意選択で置換されたフェニルである、請求項5に記載の化合物。

【請求項7】

Yが-C(O)OR⁴である、請求項1から6のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項8】

Yが-C(O)OHである、請求項1から7のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項9】

R⁷がHではない、請求項1から8のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項10】

R⁷が、ハロゲン、-CH=CH-C(O)OR⁴、-OR⁴、-SR⁴、-CH₂NHC(O)OR⁴および-CH₂NHC(O)R⁴からなる群から選択される、請求項1から9のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項11】

R⁷が臭素または-O-ベンジルである、請求項1から10のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項12】

R²が-C(O)NR⁵R⁶である、請求項1から11のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項13】

R²が任意選択で置換されたヘテロアラルキルである、請求項1から12のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項14】

R²が-C(O)NHCH₂-A¹-L¹-A²および-C(O)-A¹-L¹-A²からなる群から選択される、請求項1か

ら13のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項15】

A¹およびA²が任意選択で置換されたフェニルである、請求項14に記載の化合物。

【請求項16】

R¹⁰がHではない、請求項1から15のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項17】

R¹⁰が、ハロ、-CH=CH-C(O)OR⁴、-OR⁴、-SR⁴、-CH₂NHC(O)OR⁴、-CH₂NHC(O)R⁴、任意選択で置換されたアリールおよび任意選択で置換されたヘテロアリールからなる群から選択される、請求項1から16のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項18】

少なくとも1つのR^{3a}またはR^{3b}が任意選択で置換されたアラルキルである、請求項1から17のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項19】

本明細書に記載した表1から表39の化合物の式からなる群から選択される式を有する、請求項1または2に記載の化合物。

【請求項20】

前記化合物がプロドラッグである、請求項1から19のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項21】

塩である、請求項1から20のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項22】

請求項1から21のいずれか一項に記載の化合物及び薬剤として許容される賦形剤もしくは担体を含む、NS3/NS4ヘリカーゼ活性を阻害するための医薬組成物。

【請求項23】

エクスピボでの使用のための、請求項22に記載の医薬組成物。

【請求項24】

個体における使用のための、請求項22に記載の医薬組成物。

【請求項25】

請求項1から21のいずれか一項に記載の化合物及び薬剤として許容される賦形剤もしくは担体を含む、個体におけるC型肝炎感染症の治療のための医薬組成物。

【請求項26】

持続性ウイルス応答を達成するための、請求項25に記載の医薬組成物。

【請求項27】

有効量のリトナビルと併用するための、請求項22から26のいずれか一項に記載の医薬組成物。

【請求項28】

NS3/NS4ヘリカーゼを請求項1から21のいずれか一項に記載の化合物または請求項22に記載の医薬組成物と接触させることを含む、インビトロでNS3/NS4ヘリカーゼ活性を阻害する方法。

【請求項29】

請求項1から21のいずれか一項に記載の化合物または請求項22に記載の医薬組成物の、個体におけるNS3/NS4ヘリカーゼ活性の阻害のための薬剤の調製における使用。

【請求項30】

個体がC型肝炎ウイルスに罹患している、請求項29に記載の使用。

【請求項31】

持続性ウイルス応答が達成される、請求項30に記載の使用。

【請求項32】

有効量の界面活性剤を前記溶液に加える工程を含む溶液中のNS3のプロテアーゼ活性を増大させる方法。

【請求項33】

前記増大したNS3のプロテアーゼ活性が、基礎NS3プロテアーゼ活性の少なくとも200%で

ある、請求項32に記載の方法。

【請求項 3 4】

有効量のアミンオキシドを前記溶液に加える工程を含む溶液中のNS3のプロテアーゼ活性を増大させる方法。

【請求項 3 5】

前記増大したNS3のプロテアーゼ活性が、基礎NS3プロテアーゼ活性の少なくとも200%である、請求項34に記載の方法。

【請求項 3 6】

溶液中のNS3のATPアーゼ活性を測定する方法であって、
有効量の界面活性剤を前記溶液に加えてNS3のATPアーゼ活性を増大させる工程と、
ATP基質を前記溶液に加える工程と、
ADPに特異的な抗体を前記溶液に加える工程と、
検出可能なマーカーと結合したADPを前記溶液に加える工程と、
前記溶液をインキュベートして、NS3に、ATPをADPへ脱リン酸化させる工程と、
前記抗体と結合した検出可能なマーカーの量を測定する工程であって、前記検出可能なマーカーからの減少したシグナルを、増大したNS3のATPアーゼ活性と相関させる工程と
を含む方法。

【請求項 3 7】

溶液中のNS3のATPアーゼ活性を阻害する化合物の能力を測定する方法であって、
前記化合物を前記溶液に加える工程と、
有効量の界面活性剤を前記溶液に加えてNS3のATPアーゼ活性を増大させる工程と、
ATP基質を前記溶液に加える工程と、
ADPに特異的な抗体を前記溶液に加える工程と、
検出可能なマーカーと結合したADPを前記溶液に加える工程と、
前記溶液をインキュベートして、NS3に、ATPをADPへ脱リン酸化させる工程と、
前記抗体と結合した検出可能なマーカーの量を測定する工程であって、前記検出可能なマーカーからの減少したシグナルを、増大したNS3のATPアーゼ活性と相関させる工程と、
前記シグナルと前記化合物の不存在下で生成したシグナルとを比較して、前記化合物がNS3のヘリカーゼ活性を阻害する能力を判定する工程と
を含む方法。

【請求項 3 8】

前記検出可能なマーカーからのシグナルを測定する前に、停止液を加えてNS3のATPアーゼ活性を停止させる、請求項36または37に記載の方法。

【請求項 3 9】

前記検出可能なマーカーが蛍光標識である、請求項36または37に記載の方法。

【請求項 4 0】

前記界面活性剤がLDAOである、請求項36または37に記載の方法。

【請求項 4 1】

前記LDAOが、前記溶液中に0.1mM～1.0mMの濃度で存在する、請求項40に記載の方法。

【請求項 4 2】

Tween20、Triton X100、Pluronic F127、CHAPS、-オクチルグルコシド、ラウリルマルトシド、N-ラウロイルサルコシンおよびヘキサデシルトリメチルアンモニウムプロミドからなる群から選択される第2の界面活性剤を加える工程をさらに含む、請求項40に記載の方法。

【請求項 4 3】

Triton X100を加える、請求項42に記載の方法。

【請求項 4 4】

Triton X100が、前記溶液中に0.01%～0.10%の濃度で存在する、請求項43に記載の方法
。

【請求項 4 5】

前記増大したNS3のATPアーゼ活性が、基礎NS3ATPアーゼ活性の少なくとも200%である、請求項36または37に記載の方法。

【請求項 4 6】

溶液中のNS3のATPアーゼ活性を測定する方法であって、有効量のアミンオキシドを前記溶液に加えてNS3のATPアーゼ活性を増大させる工程と、ATP基質を前記溶液に加える工程と、ADPに特異的な抗体を前記溶液に加える工程と、検出可能なマーカーと結合したADPを前記溶液に加える工程と、前記溶液をインキュベートして、NS3に、ATPをADPへ脱リン酸化させる工程と、前記抗体と結合した検出可能なマーカーの量を測定する工程であって、前記検出可能なマーカーからの減少したシグナルを、増大したNS3のATPアーゼ活性と相関させる工程とを含む方法。

【請求項 4 7】

溶液中のNS3のATPアーゼ活性を阻害する化合物の能力を測定する方法であって、前記化合物を前記溶液に加える工程と、有効量のアミンオキシドを前記溶液に加えてNS3のATPアーゼ活性を増大させる工程と、ATP基質を前記溶液に加える工程と、ADPに特異的な抗体を前記溶液に加える工程と、検出可能なマーカーと結合したADPを前記溶液に加える工程と、前記溶液をインキュベートして、NS3に、ATPをADPへ脱リン酸化させる工程と、前記抗体と結合した検出可能なマーカーの量を測定する工程であって、前記検出可能なマーカーからの減少したシグナルを、増大したNS3のATPアーゼ活性と相関させる工程と、前記シグナルと前記化合物の不存在下で生成したシグナルとを比較して、前記化合物がNS3のヘリカーゼ活性を阻害する能力を判定する工程とを含む方法。

【請求項 4 8】

前記検出可能なマーカーからのシグナルを測定する前に、停止液を加えてNS3のATPアーゼ活性を停止させる、請求項46または47に記載の方法。

【請求項 4 9】

前記検出可能なマーカーが蛍光標識である、請求項46または47に記載の方法。

【請求項 5 0】

前記アミンオキシドが、N,N-ジメチルヘキシリアルアミンN-オキシド、N,N-ジメチルオクチルアミンN-オキシド、N,N-ジメチルノニルアミンN-オキシド、N,N-ジメチルデシルアミンN-オキシドおよびN,N-ジメチルドデシルアミンN-オキシドからなる群から選択される、請求項46または47に記載の方法。

【請求項 5 1】

前記アミンオキシドがLDAOである、請求項46または47に記載の方法。

【請求項 5 2】

前記LDAOが、前記溶液中に0.1mM～1.0mMの濃度で存在する、請求項51に記載の方法。

【請求項 5 3】

Tween20、Triton X100、Pluronic F127、CHAPS、-オクチルグルコシド、ラウリルマルトシド、N-ラウロイルサルコシンおよびヘキサデシルトリメチルアンモニウムプロミドからなる群から選択される界面活性剤を加える工程をさらに含む、請求項46または47に記載の方法。

【請求項 5 4】

Triton X100を加える、請求項53に記載の方法。

【請求項 5 5】

Triton X100が、前記溶液中に0.01%～0.10%の濃度で存在する、請求項54に記載の方法。

【請求項 5 6】

前記増大したNS3のATPアーゼ活性が、基礎NS3ATPアーゼ活性の少なくとも200%である、請求項46または47に記載の方法。