

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 3 部門第 2 区分

【発行日】平成24年6月7日(2012.6.7)

【公表番号】特表2011-518192(P2011-518192A)

【公表日】平成23年6月23日(2011.6.23)

【年通号数】公開・登録公報2011-025

【出願番号】特願2011-505260(P2011-505260)

【国際特許分類】

C 07 J 63/00 (2006.01)

C 07 J 71/00 (2006.01)

A 61 K 31/56 (2006.01)

A 61 K 31/58 (2006.01)

A 61 P 43/00 (2006.01)

A 61 K 9/127 (2006.01)

A 61 P 35/00 (2006.01)

A 61 P 35/02 (2006.01)

A 61 P 29/00 (2006.01)

A 61 P 1/04 (2006.01)

A 61 P 1/00 (2006.01)

A 61 P 9/10 (2006.01)

A 61 P 3/10 (2006.01)

A 61 P 9/12 (2006.01)

A 61 P 9/00 (2006.01)

A 61 P 13/12 (2006.01)

A 61 P 17/00 (2006.01)

A 61 P 17/06 (2006.01)

A 61 P 17/10 (2006.01)

A 61 P 37/08 (2006.01)

A 61 P 25/28 (2006.01)

A 61 P 25/02 (2006.01)

A 61 P 21/00 (2006.01)

【 F I 】

C 07 J 63/00 C S P

C 07 J 71/00

A 61 K 31/56

A 61 K 31/58

A 61 P 43/00 1 2 3

A 61 K 9/127

A 61 P 35/00

A 61 P 35/02

A 61 P 29/00

A 61 P 29/00 1 0 1

A 61 P 1/04

A 61 P 1/00

A 61 P 9/10

A 61 P 3/10

A 61 P 9/12

A 61 P 9/10 1 0 1

A 61 P 9/00

A 6 1 P 13/12
 A 6 1 P 17/00
 A 6 1 P 17/06
 A 6 1 P 17/10
 A 6 1 P 37/08
 A 6 1 P 25/28
 A 6 1 P 25/02
 A 6 1 P 21/00

【手続補正書】

【提出日】平成24年4月18日(2012.4.18)

【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

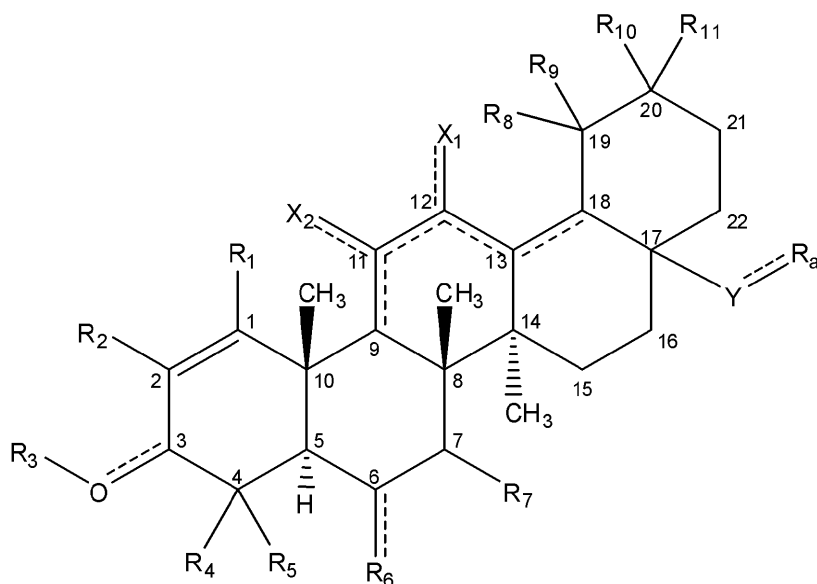
【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

以下の式：



の化合物、あるいはその薬学的に許容される塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、プロドラッグ、または光学異性体：

式中、

Y は、アルカンジイル (C₈)、アルケンジイル (C₈)、アルキンジイル (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R_a は、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ニトロ、シアノ、アジド、ホスフェート、1, 3 - ジオキソイソインドリン - 2 - イル、メルカプト、もしくはシリル；または

アルキル (C₁₋₂)、アルケニル (C₁₋₂)、アルキニル (C₁₋₂)、アリール (C₁₋₂)、アラルキル (C₁₋₂)、ヘテロアリール (C₁₋₂)、ヘテロアラルキル (C₁₋₂)、アシル (C₁₋₂)、アルコキシ (C₁₋₂)、アルケニルオキシ (C₁₋₂)、アルキニルオキシ (C₁₋₂)、アリールオキシ (C₁₋₂)、アラルコキシ (C₁₋₂)、ヘテロアリールオキシ (C₁₋₂)、ヘテロアラルコキシ (C₁₋₂)、アシルオキシ (C₁₋₂)、アルキルアミノ (C₁₋₂)、ジアルキルアミノ (C₁₋₂)、アルケニルアミノ (C₁₋₂)、アルキニルアミノ (C₁₋₂)、アリールアミノ (C₁₋₂)、

C₁₂）、アラルキルアミノ（C₁₂）、ヘテロアリールアミノ（C₁₂）、ヘテロアラルキルアミノ（C₁₂）、アルキルスルホニルアミノ（C₁₂）、アミド（C₁₂）、アルキルチオ（C₁₂）、アルケニルチオ（C₁₂）、アルキニルチオ（C₁₂）、アリールチオ（C₁₂）、アラルキルチオ（C₁₂）、ヘテロアリールチオ（C₁₂）、ヘテロアラルキルチオ（C₁₂）、アシルチオ（C₁₂）、チオアシル（C₁₂）、アルキルスルホニル（C₁₂）、アルケニルスルホニル（C₁₂）、アルキニルスルホニル（C₁₂）、アリールスルホニル（C₁₂）、アラルキルスルホニル（C₁₂）、ヘテロアリールスルホニル（C₁₂）、ヘテロアラルキルスルホニル（C₁₂）、アルキルスルフィニル（C₁₂）、アルケニルスルフィニル（C₁₂）、アルキニルスルフィニル（C₁₂）、アリールスルフィニル（C₁₂）、アラルキルスルフィニル（C₁₂）、ヘテロアリールスルフィニル（C₁₂）、ヘテロアラルキルスルフィニル（C₁₂）、アルキルホスホニル（C₁₂）、アルキルホスフェート（C₁₂）、ジアルキルホスフェート（C₁₂）、アルキルアンモニウム（C₁₂）、アルキルスルホニウム（C₁₂）、アルキルシリル（C₁₂）、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；あるいは

YおよびR_aは、YおよびR_aが-O-およびアルカンジイル（C₁₋₅）の1つまたは複数を介して互いにさらに接続するように三員環～七員環を形成し、さらに、Yは-CH-であり、かつR_aは-CH₂-であり；あるいは

Y、R_a、ならびに炭素番号13、17および18は、R_aが炭素13に結合するように環を形成し、Yは、アルカンジイル（C=1）または置換アルカンジイル（C=1）であり、かつR_aは-O-であり；

X₁およびX₂は独立して、水素、OR_b、NR_bR_c、またはSR_bであり、ここで、R_bおよびR_cはそれぞれ独立して、

水素もしくはヒドロキシ；

アルキル（C₈）、アリール（C₈）、アラルキル（C₈）、アシル（C₈）、アルコキシ（C₈）、アリールオキシ（C₈）、アシルオキシ（C₈）、アルキルアミノ（C₈）、アリールアミノ（C₈）、アミド（C₈）、もしくはこれらの群のいずれかの置換型；または

インビボで水素に変換可能な置換基であり；

但し、R_bは、それが結合する原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、R_bが存在しない場合には、それが結合する原子は二重結合の一部であり；

R₁は、

水素、シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

アルキル（C₈）、アルケニル（C₈）、アルキニル（C₈）、アリール（C₈）、アラルキル（C₈）、ヘテロアリール（C₈）、ヘテロアラルキル（C₈）、アシル（C₈）、アルコキシ（C₈）、アリールオキシ（C₈）、アシルオキシ（C₈）、アルキルアミノ（C₈）、アリールアミノ（C₈）、アミド（C₈）、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R₂は、

シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

フルオロアルキル（C₈）、アルケニル（C₈）、アルキニル（C₈）、アリール（C₈）、ヘテロアリール（C₈）、アシル（C₈）、アルコキシ（C₈）、アリールオキシ（C₈）、アシルオキシ（C₈）、アルキルアミノ（C₈）、アリールアミノ（C₈）、アミド（C₈）、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R₃は、

存在しないか、もしくは水素；

アルキル（C₈）、アリール（C₈）、アラルキル（C₈）、アシル（C₈）、もしくはこれらの群のいずれかの置換型；または

インビボで水素に変換可能な置換基であり；

但し、 R_3 は、それが結合する酸素原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、 R_3 が存在しない場合には、それが結合する酸素原子は二重結合の一部であり；

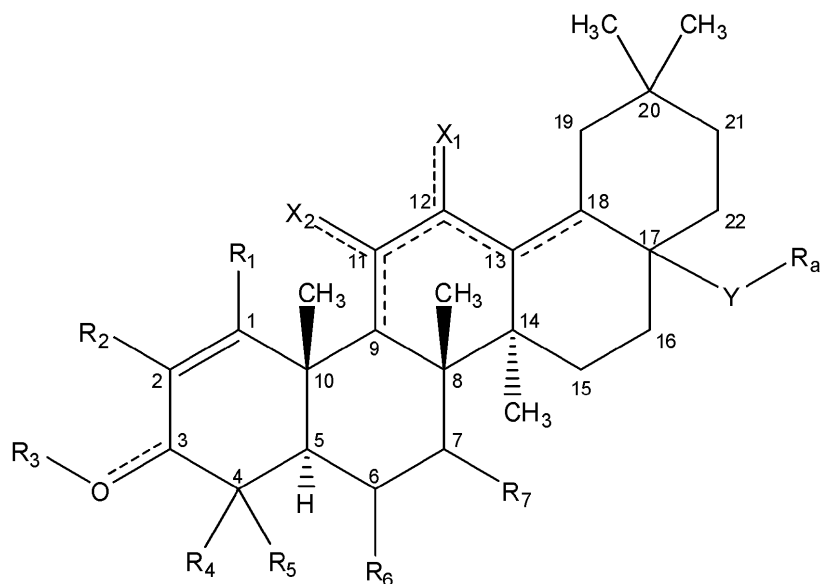
R_4 および R_5 はそれぞれ独立して、アルキル (c 8) または置換アルキル (c 8) であり；

R_6 は、水素、ヒドロキシ、またはオキソであり；かつ

R_7 は、水素またはヒドロキシであり；

R_8 、 R_9 、 R_{10} 、および R_{11} はそれぞれ独立して、水素、ヒドロキシ、アルキル (c 8)、置換アルキル (c 8)、アルコキシ (c 8) または置換アルコキシ (c 8) である。

【請求項 2】



のようにさらに定義される、請求項 1 記載の化合物、あるいはその薬学的に許容される塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、プロドラッグ、または光学異性体；
式中、

Y は、アルカンジイル (c 8)、アルケンジイル (c 8)、アルキンジイル (c 8)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R_a は、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ニトロ、シアノ、アジド、ホスフェート、1, 3 - ジオキソイソインドリン - 2 - イル、メルカプト、もしくはシリル；または

アルキル (c 12)、アルケニル (c 12)、アルキニル (c 12)、アリー
ル (c 12)、アラルキル (c 12)、ヘテロアリール (c 12)、ヘテロアラル
キル (c 12)、アシル (c 12)、アルコキシ (c 12)、アルケニルオキシ (c
12)、アルキニルオキシ (c 12)、アリールオキシ (c 12)、アラルコキ
シ (c 12)、ヘテロアリールオキシ (c 12)、ヘテロアラルコキシ (c 12)
、アシルオキシ (c 12)、アルキルアミノ (c 12)、ジアルキルアミノ (c 1
2)、アルケニルアミノ (c 12)、アルキニルアミノ (c 12)、アリールアミノ
(c 12)、アラルキルアミノ (c 12)、ヘテロアリールアミノ (c 12)、ヘ
テロアラルキルアミノ (c 12)、アルキルスルホニルアミノ (c 12)、アミド (c
12)、アルキルチオ (c 12)、アルケニルチオ (c 12)、アルキニルチオ
(c 12)、アリールチオ (c 12)、アラルキルチオ (c 12)、ヘテロアリー
ルチオ (c 12)、ヘテロアラルキルチオ (c 12)、アシルチオ (c 12)、チ
オアシル (c 12)、アルキルスルホニル (c 12)、アルケニルスルホニル (c
12)、アルキニルスルホニル (c 12)、アリールスルホニル (c 12)、アラル
キルスルホニル (c 12)、ヘテロアリールスルホニル (c 12)、ヘテロアラルキ
ルスルホニル (c 12)、アルキルスルフィニル (c 12)、アルケニルスルフィニ

ル (C₁₋₂)、アルキニルスルフィニル (C₁₋₂)、アリールスルフィニル (C₁₋₂)、アラルキルスルフィニル (C₁₋₂)、ヘテロアリールスルフィニル (C₁₋₂)、ヘテロアラルキルスルフィニル (C₁₋₂)、アルキルホスホニル (C₁₋₂)、アルキルホスホニル (C₁₋₂)、アルキルホスフェート (C₁₋₂)、ジアルキルホスフェート (C₁₋₂)、アルキルアンモニウム (C₁₋₂)、アルキルスルホニウム (C₁₋₂)、アルキルシリル (C₁₋₂)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；あるいは

Y および R_a は、Y および R_a が - O - およびアルカンジイル (C₁₋₄) の 1 つまたは複数を介して互いにさらに接続するように三員環～六員環を形成し、さらに、Y は - CH₂ - であり、かつ R_a は - CH₂ - であり；

X₁ および X₂ は独立して、水素、OR_b、NR_bR_c、または SR_b であり、ここで、R_b および R_c はそれぞれ独立して、

水素；

アルキル (C₈)、アリール (C₈)、アラルキル (C₈)、アシル (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型；または

インビボで水素に変換可能な置換基であり；

但し、R_b は、それが結合する原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、R_b が存在しない場合には、それが結合する原子は二重結合の一部であり；

R₁ は、

水素、シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

アルキル (C₈)、アルケニル (C₈)、アルキニル (C₈)、アリール (C₈)、アラルキル (C₈)、ヘテロアリール (C₈)、ヘテロアラルキル (C₈)、アシル (C₈)、アルコキシ (C₈)、アリールオキシ (C₈)、アシルオキシ (C₈)、アルキルアミノ (C₈)、アリールアミノ (C₈)、アミド (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R₂ は、

シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

フルオロアルキル (C₈)、アルケニル (C₈)、アルキニル (C₈)、アリール (C₈)、ヘテロアリール (C₈)、アシル (C₈)、アルコキシ (C₈)、アリールオキシ (C₈)、アシルオキシ (C₈)、アルキルアミノ (C₈)、アリールアミノ (C₈)、アミド (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R₃ は、

存在しないか、もしくは水素；

アルキル (C₈)、アリール (C₈)、アラルキル (C₈)、アシル (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型；あるいは

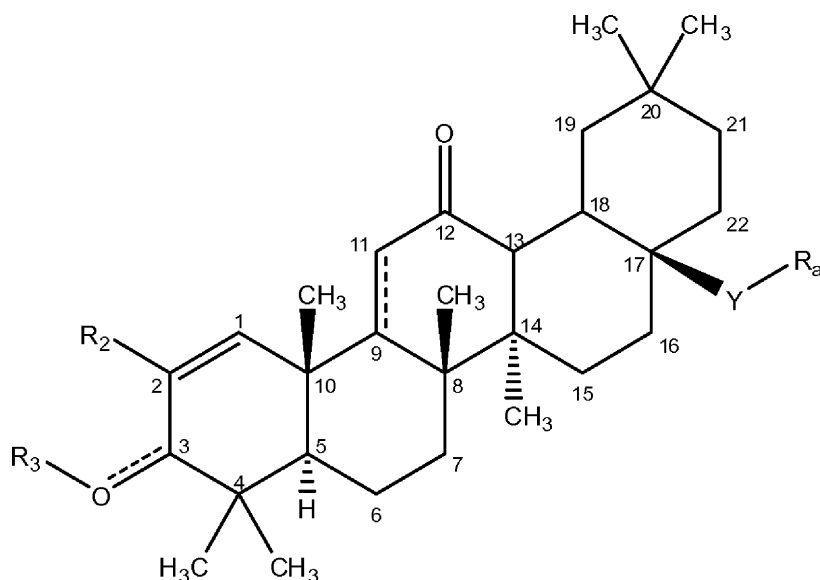
インビボで水素に変換可能な置換基であり；

但し、R₃ は、それが結合する酸素原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、R₃ が存在しない場合には、それが結合する酸素原子は二重結合の一部であり；

R₄ および R₅ はそれぞれ独立して、アルキル (C₈) または置換アルキル (C₈) であり；かつ

R₆ および R₇ はそれぞれ独立して、水素またはヒドロキシである。

【請求項 3】



のようにさらに定義される、請求項 2 記載の化合物、あるいはその薬学的に許容される塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、プロドラッグ、または光学異性体：

式中、

Y は、アルカンジイル (C₅) または置換アルカンジイル (C₅) であり；

R_a は、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ホスフェート、1, 3 - ジオキソイソインドリン - 2 - イル、もしくはシアノ；または

アルキル (C₁₋₂)、アルケニル (C₁₋₂)、アルキニル (C₁₋₂)、アリール (C₁₋₂)、アラルキル (C₁₋₂)、ヘテロアリール (C₁₋₂)、ヘテロアラルキル (C₁₋₂)、アシル (C₁₋₂)、アルコキシ (C₁₋₂)、アルケニルオキシ (C₁₋₂)、アルキニルオキシ (C₁₋₂)、アリールオキシ (C₁₋₂)、アラルコキシ (C₁₋₂)、ヘテロアリールオキシ (C₁₋₂)、ヘテロアラルコキシ (C₁₋₂)、アシルオキシ (C₁₋₂)、アルキルアミノ (C₁₋₂)、ジアルキルアミノ (C₁₋₂)、アルケニルアミノ (C₁₋₂)、アルキニルアミノ (C₁₋₂)、アリールアミノ (C₁₋₂)、アラルキルアミノ (C₁₋₂)、ヘテロアリールアミノ (C₁₋₂)、ヘテロアラルキルアミノ (C₁₋₂)、アルキルスルホニルアミノ (C₁₋₂)、アミド (C₁₋₂)、アリールスルホニル (C₁₋₂)、アリールスルフィニル (C₁₋₂)、アルキルホスフェート (C₁₋₂)、ジアルキルホスフェート (C₁₋₂)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；あるいは

Y および R_a は、Y および R_a が - O - およびアルカンジイル (C₁₋₃) の 1 つまたは複数を介して互いにさらに接続するように三員環 ~ 五員環を形成し、さらに、Y は - CH₂ - であり、かつ R_a は - CH₂ - であり；

R₂ は、

シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

フルオロアルキル (C₈)、アルケニル (C₈)、アルキニル (C₈)、アリール (C₈)、ヘテロアリール (C₈)、アシル (C₈)、アルコキシ (C₈)、アリールオキシ (C₈)、アシルオキシ (C₈)、アルキルアミノ (C₈)、アリールアミノ (C₈)、アミド (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；かつ

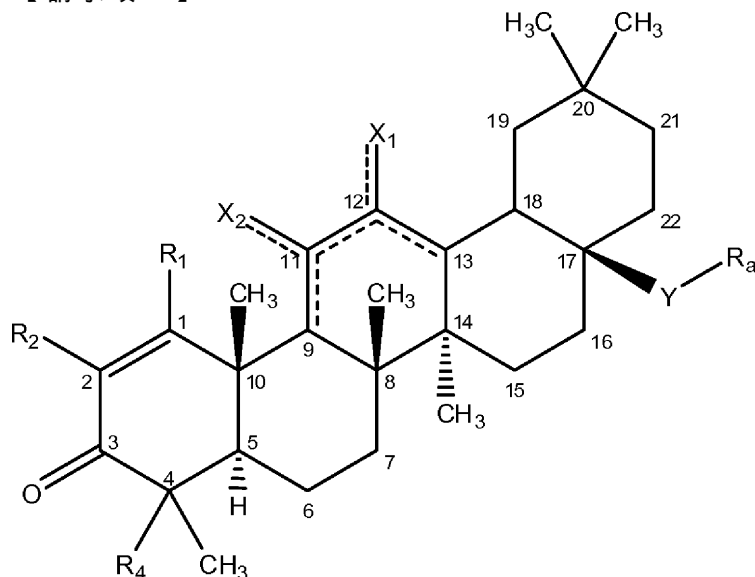
R₃ は、

存在しないか、もしくは水素；

アルキル (C₈)、アリール (C₈)、アラルキル (C₈)、アシル (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型；または
インビボで水素に変換可能な置換基であり；
但し、R₃ は、それが結合する酸素原子が二重結合の一部である場合には存在せず、

さらに、 R_3 が存在しない場合には、それが結合する酸素原子は二重結合の一部である。

【請求項 4】



のようにさらに定義される、請求項 2 記載の化合物、あるいはその薬学的に許容される塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、プロドラッグ、または光学異性体：

式中、

Y は、アルカンジイル (C_8)、アルケンジイル (C_8)、アルキンジイル (C_8)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R_a は、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ニトロ、シアノ、アジド、ホスフェート、1,3-ジオキソイソインドリン-2-イル、メルカプト、もしくはシリル；または

アルキル (C_{1-2})、アルケニル (C_{1-2})、アルキニル (C_{1-2})、アリール (C_{1-2})、アラルキル (C_{1-2})、ヘテロアリール (C_{1-2})、ヘテロアラルキル (C_{1-2})、アシル (C_{1-2})、アルコキシ (C_{1-2})、アルケニルオキシ (C_{1-2})、アルキニルオキシ (C_{1-2})、アリールオキシ (C_{1-2})、アラルコキシ (C_{1-2})、ヘテロアリールオキシ (C_{1-2})、ヘテロアラルコキシ (C_{1-2})、アシルオキシ (C_{1-2})、アルキルアミノ (C_{1-2})、ジアルキルアミノ (C_{1-2})、アルケニルアミノ (C_{1-2})、アルキニルアミノ (C_{1-2})、アリールアミノ (C_{1-2})、アラルキルアミノ (C_{1-2})、ヘテロアリールアミノ (C_{1-2})、ヘテロアラルキルアミノ (C_{1-2})、アルキルスルホニルアミノ (C_{1-2})、アミド (C_{1-2})、アルキルアンモニウム (C_{1-2})、アルキルスルホニウム (C_{1-2})、アルキルシリル (C_{1-2})、アリールスルホニル (C_{1-2})、アリールスルフィニル (C_{1-2})、アルキルホスフェート (C_{1-2})、ジアルキルホスフェート (C_{1-2})、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；あるいは

Y および R_a は、 Y および R_a が -O- およびアルカンジイル (C_{1-3}) の 1 つまたは複数を介して互いにさらに接続するように三員環～五員環を形成し、さらに、 Y は -CH- であり、かつ R_a は -CH₂- であり；

X_1 および X_2 は独立して、OR_b、NR_bR_c、または SR_b であり、ここで、 R_b および R_c はそれぞれ独立して、

水素；

アルキル (C_8)、アリール (C_8)、アラルキル (C_8)、アシル (C_8)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型；または

インビボで水素に変換可能な置換基であり；

但し、 R_b は、それが結合する原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、 R_b が存在しない場合には、それが結合する原子は二重結合の一部であり；

R_1 は、

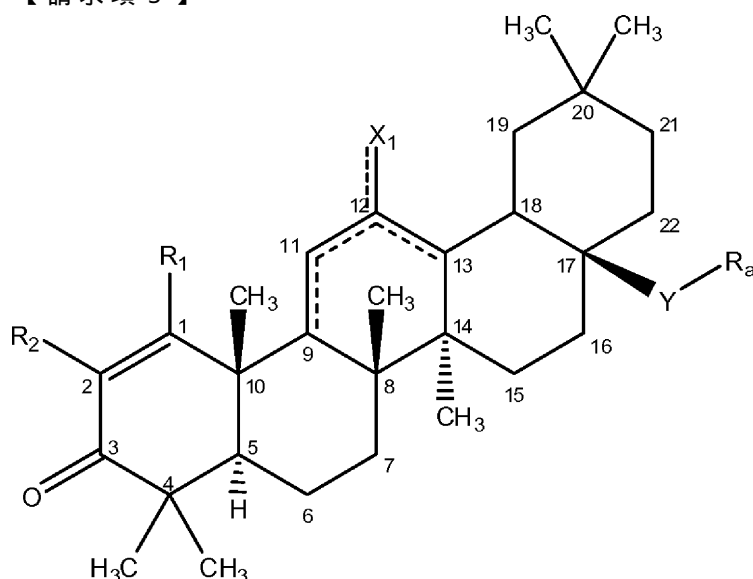
水素、シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または
 アルキル (C₈)、アルケニル (C₈)、アルキニル (C₈)、アリール (C₈)、アラルキル (C₈)、ヘテロアリール (C₈)、ヘテロアラルキル (C₈)、アシル (C₈)、アルコキシ (C₈)、アリールオキシ (C₈)、アシルオキシ (C₈)、アルキルアミノ (C₈)、アリールアミノ (C₈)、アミド (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R₂ は、

シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または
 フルオロアルキル (C₈)、アルケニル (C₈)、アルキニル (C₈)、アリール (C₈)、ヘテロアリール (C₈)、アシル (C₈)、アルコキシ (C₈)、アリールオキシ (C₈)、アシルオキシ (C₈)、アルキルアミノ (C₈)、アリールアミノ (C₈)、アミド (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；かつ

R₄ は、アルキル (C₈) または置換アルキル (C₈) である。

【請求項 5】



のようにさらに定義される、請求項 2 記載の化合物、あるいはその薬学的に許容される塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、プロドラッグ、または光学異性体；

式中、

Y は、アルカンジイル (C₈)、アルケンジイル (C₈)、アルキンジイル (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R_a は、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ニトロ、シアノ、アジド、ホスフェート、1,3-ジオキソイソインドリン-2-イル、メルカプト、もしくはシリル；または

アルキル (C₁₂)、アルケニル (C₁₂)、アルキニル (C₁₂)、アリール (C₁₂)、アラルキル (C₁₂)、ヘテロアリール (C₁₂)、ヘテロアラルキル (C₁₂)、アシル (C₁₂)、アルコキシ (C₁₂)、アルケニルオキシ (C₁₂)、アルキニルオキシ (C₁₂)、アリールオキシ (C₁₂)、アラルコキシ (C₁₂)、ヘテロアリールオキシ (C₁₂)、ヘテロアラルコキシ (C₁₂)、アシルオキシ (C₁₂)、アルキルアミノ (C₁₂)、ジアルキルアミノ (C₁₂)、アルケニルアミノ (C₁₂)、アルキニルアミノ (C₁₂)、アリールアミノ (C₁₂)、アラルキルアミノ (C₁₂)、ヘテロアリールアミノ (C₁₂)、ヘテロアラルキルアミノ (C₁₂)、アミド (C₁₂)、アリールスルホニル (C₁₂)、アリールスルフィニル (C₁₂)、アルキルホスフェート (C₁₂)、ジアルキルホスフェート (C₁₂)、アルキルホスフェート (C₁₂)、ジアルキルホスフェート (C₁₂)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；あるいは

Y および R_a は、Y および R_a が - O - およびアルカンジイル (C₁ - 3) の 1 つまたは複数を介して互いにさらに接続するように三員環 ~ 五員環を形成し、さらに、Y は - C H - であり、かつ R_a は - C H₂ - であり；

X₁ は、O R_b、N R_b R_c、または S R_b であり、ここで、R_b および R_c はそれぞれ独立して、

水素；

アルキル (C₈)、アリール (C₈)、アラルキル (C₈)、アシル (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型；または
インビボで水素に変換可能な置換基であり；

但し、R_b は、それが結合する原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、R_b が存在しない場合には、それが結合する原子は二重結合の一部であり；

R₁ は、

水素、シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

アルキル (C₈)、アルケニル (C₈)、アルキニル (C₈)、アリール (C₈)、アラルキル (C₈)、ヘテロアリール (C₈)、ヘテロアラルキル (C₈)、アシル (C₈)、アルコキシ (C₈)、アリールオキシ (C₈)、アシルオキシ (C₈)、アルキルアミノ (C₈)、アリールアミノ (C₈)、アミド (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R₂ は、

シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

フルオロアルキル (C₈)、アルケニル (C₈)、アルキニル (C₈)、アリール (C₈)、ヘテロアリール (C₈)、アシル (C₈)、アルコキシ (C₈)、アリールオキシ (C₈)、アシルオキシ (C₈)、アルキルアミノ (C₈)、アリールアミノ (C₈)、アミド (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型である。

【請求項 6】

R₁ が - H、- O H、または - F である、請求項 1、2、4 および 5 のいずれか一項記載の化合物。

【請求項 7】

R₁ が - H である、請求項 6 記載の化合物。

【請求項 8】

R₂ が - C N である、請求項 1 ~ 5 のいずれか一項記載の化合物。

【請求項 9】

R₂ が - C F₃ である、請求項 1 ~ 5 のいずれか一項記載の化合物。

【請求項 10】

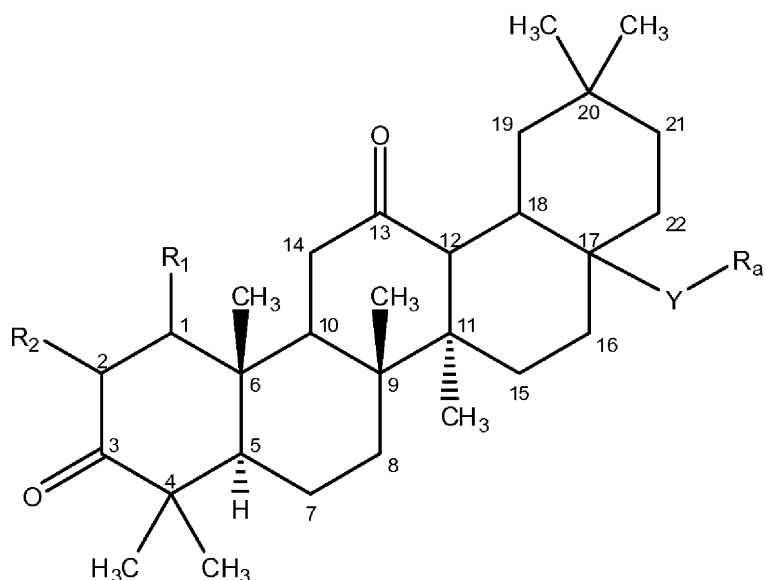
R₂ が置換アシル (C₁ - 3) である、請求項 1 ~ 5 のいずれか一項記載の化合物。

【請求項 11】

R₂ が - C (= O) N H S (= O)₂ C H₃ である、請求項 10 記載の化合物。

【請求項 12】

以下の式：



の化合物、あるいは、その塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、または光学異性体：

式中、

Y は、アルカンジイル (C₈)、アルケンジイル (C₈)、アルキンジイル (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R_a は、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ニトロ、シアノ、アジド、メルカプト、もしくはシリル；または

アルキル (C₁₋₂)、アルケニル (C₁₋₂)、アルキニル (C₁₋₂)、アリール (C₁₋₂)、アラルキル (C₁₋₂)、ヘテロアリール (C₁₋₂)、ヘテロアラルキル (C₁₋₂)、アシル (C₁₋₂)、アルコキシ (C₁₋₂)、アルケニルオキシ (C₁₋₂)、アルキニルオキシ (C₁₋₂)、アリールオキシ (C₁₋₂)、アラルコキシ (C₁₋₂)、ヘテロアリールオキシ (C₁₋₂)、ヘテロアラルコキシ (C₁₋₂)、アシルオキシ (C₁₋₂)、アルキルアミノ (C₁₋₂)、ジアルキルアミノ (C₁₋₂)、アルケニルアミノ (C₁₋₂)、アルキニルアミノ (C₁₋₂)、アリールアミノ (C₁₋₂)、アラルキルアミノ (C₁₋₂)、ヘテロアリールアミノ (C₁₋₂)、ヘテロアラルキルアミノ (C₁₋₂)、アルキルスルホニルアミノ (C₁₋₂)、アミド (C₁₋₂)、アルキルチオ (C₁₋₂)、アルケニルチオ (C₁₋₂)、アルキニルチオ (C₁₋₂)、アリールチオ (C₁₋₂)、アラルキルチオ (C₁₋₂)、ヘテロアリールチオ (C₁₋₂)、ヘテロアラルキルチオ (C₁₋₂)、アシルチオ (C₁₋₂)、チオアシル (C₁₋₂)、アルキルスルホニル (C₁₋₂)、アルケニルスルホニル (C₁₋₂)、アルキニルスルホニル (C₁₋₂)、アリールスルホニル (C₁₋₂)、アラルキルスルホニル (C₁₋₂)、アルキルアンモニウム (C₁₋₂)、アルキルスルホニウム (C₁₋₂)、アルキルシリル (C₁₋₂)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R₁ は、

水素、シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

アルキル (C₈)、アルケニル (C₈)、アルキニル (C₈)、アリール (C₈)、アラルキル (C₈)、ヘテロアリール (C₈)、ヘテロアラルキル (C₈)、アシル (C₈)、アルコキシ (C₈)、アリールオキシ (C₈)、アシルオキシ (C₈)、アルキルアミノ (C₈)、アリールアミノ (C₈)、アミド (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

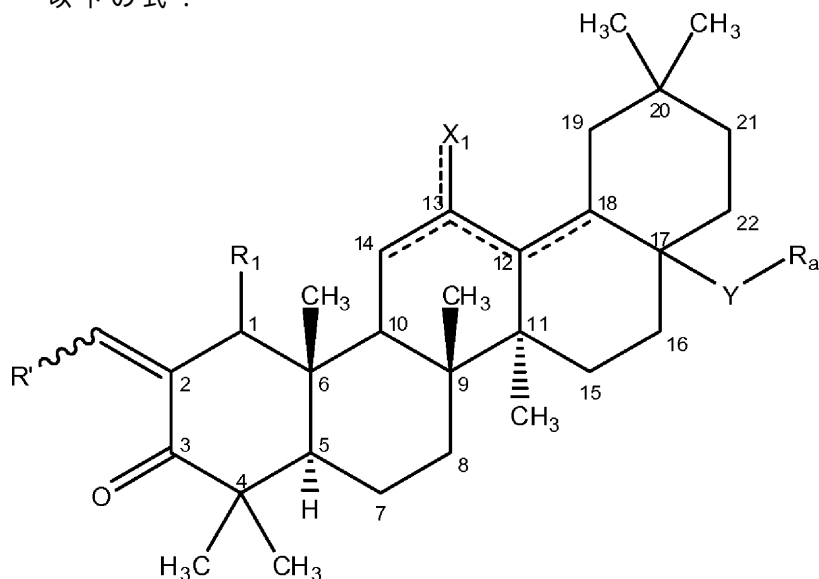
R₂ は、

シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

フルオロアルキル (C₈)、アルケニル (C₈)、アルキニル (C₈)、アリ

【請求項 13】

以下の式：



式中、

R_a は、

アルキル (C₁₋₂)、アルケニル (C₁₋₂)、アルキニル (C₁₋₂)、アリー
ル (C₁₋₂)、アラルキル (C₁₋₂)、ヘテロアリール (C₁₋₂)、ヘテロアラル
キル (C₁₋₂)、アシル (C₁₋₂)、アルコキシ (C₁₋₂)、アルケニルオキシ (C₁₋₂)、アルキニルオキシ (C₁₋₂)、アリー
ルオキシ (C₁₋₂)、アラルコキシ (C₁₋₂)、ヘテロアリールオキシ (C₁₋₂)、ヘテロアラルコキシ (C₁₋₂)
、アシルオキシ (C₁₋₂)、アルキルアミノ (C₁₋₂)、ジアルキルアミノ (C₁₋₂)、アルケニルアミノ (C₁₋₂)、アルキニルアミノ (C₁₋₂)、アリー
ルアミノ (C₁₋₂)、アラルキルアミノ (C₁₋₂)、ヘテロアリールアミノ (C₁₋₂)、ヘ
テロアラルキルアミノ (C₁₋₂)、アルキルスルホニルアミノ (C₁₋₂)、アミド (C₁₋₂)、アルキルチオ (C₁₋₂)、アルケニルチオ (C₁₋₂)、アルキニルチオ
(C₁₋₂)、アリールチオ (C₁₋₂)、アラルキルチオ (C₁₋₂)、ヘテロアリー
ルチオ (C₁₋₂)、ヘテロアラルキルチオ (C₁₋₂)、アシルチオ (C₁₋₂)、チ
オアシル (C₁₋₂)、アルキルスルホニル (C₁₋₂)、アルケニルスルホニル (C₁₋₂)、アルキニルスルホニル (C₁₋₂)、アリー
ルスルホニル (C₁₋₂)、アラル
キルスルホニル (C₁₋₂)、アルキルアンモニウム (C₁₋₂)、アルキルスルホニウ
ム (C₁₋₂)、アルキルシリル (C₁₋₂)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型
であり；

水素；

アルキル (C₈)、アリール (C₈)、アラルキル (C₈)、アシル (C₈)

)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり;あるいは
但し、 R_b は、それが結合する原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、 R_b が存在しない場合には、それが結合する原子は二重結合の一部であり;かつ

R_1 は、

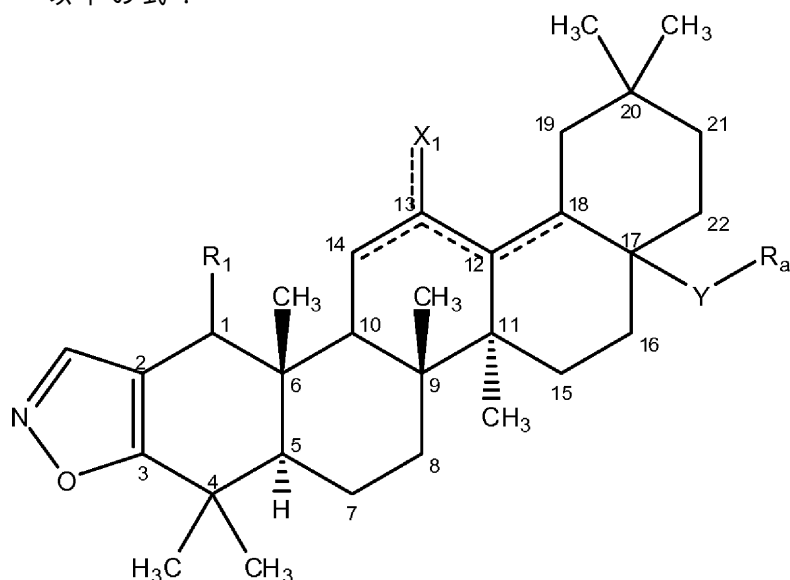
水素、シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ;または

アルキル (C_{1-8})、アルケニル (C_{2-8})、アルキニル (C_{2-8})、アリール (C_{6-8})、アラルキル (C_{7-8})、ヘテロアリール (C_{6-8})、ヘテロアラルキル (C_{7-8})、アシル (C_{1-8})、アルコキシ (C_{1-8})、アリールオキシ (C_{6-8})、アシルオキシ (C_{1-8})、アルキルアミノ (C_{1-8})、アリールアミノ (C_{6-8})、アミド (C_{1-8})、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり;

R' は、ヒドロキシ、アルコキシ (C_{1-2})、置換アルコキシ (C_{1-2})、アリールオキシ (C_{6-8})、置換アリールオキシ (C_{6-8})、アラルコキシ (C_{7-8})、置換アラルコキシ (C_{7-8})、アシルオキシ (C_{1-2})、または置換アシルオキシ (C_{1-2})である。

【請求項14】

以下の式:



の化合物、あるいは、その塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、または光学異性体:

式中、

Y は、アルカンジイル (C_{1-8})、アルケンジイル (C_{2-8})、アルキンジイル (C_{2-8})、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり;

R_a は、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ニトロ、シアノ、アジド、メルカプト、もしくはシリル;または

アルキル (C_{1-2})、アルケニル (C_{1-2})、アルキニル (C_{1-2})、アリール (C_{6-8})、アラルキル (C_{7-8})、ヘテロアリール (C_{6-8})、ヘテロアラルキル (C_{7-8})、アシル (C_{1-2})、アルコキシ (C_{1-2})、アルケニルオキシ (C_{2-8})、アルキニルオキシ (C_{2-8})、アリールオキシ (C_{6-8})、アラルコキシ (C_{7-8})、ヘテロアリールオキシ (C_{6-8})、ヘテロアラルコキシ (C_{7-8})、アシルオキシ (C_{1-2})、アルキルアミノ (C_{1-2})、ジアルキルアミノ (C_{1-2})、アルケニルアミノ (C_{2-8})、アルキニルアミノ (C_{2-8})、アリールアミノ (C_{6-8})、アラルキルアミノ (C_{7-8})、ヘテロアリールアミノ (C_{6-8})、ヘテロアラルキルアミノ (C_{7-8})、アルキルスルホニルアミノ (C_{1-2})、アミド (C_{1-2})、アルキルチオ (C_{1-2})、アルケニルチオ (C_{2-8})、アルキニルチオ (C_{2-8})、アリールチオ (C_{6-8})、アラルキルチオ (C_{7-8})、ヘテロアリー

ルチオ (C₁₂)、ヘテロアラルキルチオ (C₁₂)、アシルチオ (C₁₂)、チオアシル (C₁₂)、アルキルスルホニル (C₁₂)、アルケニルスルホニル (C₁₂)、アルキニルスルホニル (C₁₂)、アリールスルホニル (C₁₂)、アラルキルスルホニル (C₁₂)、アルキルアンモニウム (C₁₂)、アルキルスルホニウム (C₁₂)、アルキルシリル (C₁₂)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

X₁ は、OR_b、NR_bR_c、またはSR_bであり、ここで、R_b および R_c はそれぞれ独立して、

水素；

アルキル (C₈)、アリール (C₈)、アラルキル (C₈)、アシル (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；あるいは

但し、R_b は、それが結合する原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、R_b が存在しない場合には、それが結合する原子は二重結合の一部であり；かつ

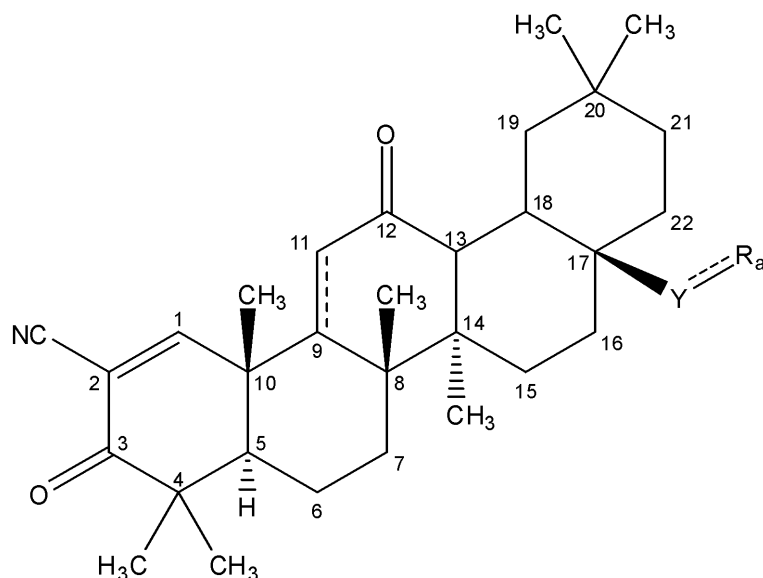
R₁ は、

水素、シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

アルキル (C₈)、アルケニル (C₈)、アルキニル (C₈)、アリール (C₈)、アラルキル (C₈)、ヘテロアリール (C₈)、ヘテロアラルキル (C₈)、アシル (C₈)、アルコキシ (C₈)、アリールオキシ (C₈)、アシルオキシ (C₈)、アルキルアミノ (C₈)、アリールアミノ (C₈)、アミド (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型である。

【請求項 15】

以下の式：



の化合物、あるいはその薬学的に許容される塩、または互変異性体：

式中、

Y は、アルカンジイル (C₈)、アルケンジイル (C₈)、アルキンジイル (C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R_a は、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ニトロ、シアノ、アジド、ホスフェート、1,3-ジオキソイソインドリン-2-イル、メルカプト、もしくはシリル；または

アルキル (C₁₂)、アルケニル (C₁₂)、アルキニル (C₁₂)、アリール (C₁₂)、アラルキル (C₁₂)、ヘテロアリール (C₁₂)、ヘテロアラルキル (C₁₂)、アシル (C₁₂)、アルコキシ (C₁₂)、アルケニルオキシ (C₁₂)、アルキニルオキシ (C₁₂)、アリールオキシ (C₁₂)、アラルコキシ (C₁₂)、ヘテロアリールオキシ (C₁₂)、ヘテロアラルコキシ (C₁₂)、

Y および R_a は、Y および R_a が - O - およびアルカンジイル (C_{1 - 5}) の 1 つまたは複数を介して互いにさらに接続するように三員環 ~ 七員環を形成し、さらに、Y は - C H - であり、かつ R_a は - C H₂ - である。

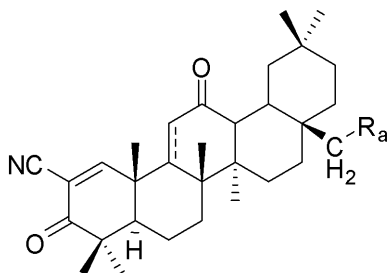
Chemical structure of a complex polycyclic molecule, likely a steroid derivative, featuring a fused ring system and various substituents. The structure is numbered 1 through 22, indicating the carbon atoms. Key features include:

- A cyclohexene ring (1-6) fused to a cyclohexane ring (7-12).
- A cyclohexane ring (13-18) fused to the second ring.
- A cyclohexane ring (19-22) attached to the third ring.
- Substituents:
 - Cyano group (NC) at C2.
 - Carbonyl group (C=O) at C3.
 - Methyl group (CH₃) at C10.
 - Methyl group (CH₃) at C8.
 - Methyl group (CH₃) at C14.
 - Side chain (CH₂-R_a) at C17.
- Stereochemistry is indicated with wedges and dashes.

アルキル (C₁₋₂)、アルケニル (C₁₋₂)、アルキニル (C₁₋₂)、アリー
ル (C₁₋₂)、アラルキル (C₁₋₂)、ヘテロアリール (C₁₋₂)、ヘテロアラル
キル (C₁₋₂)、アシル (C₁₋₂)、アルコキシ (C₁₋₂)、アルケニルオキシ (C₁₋₂)、アルキニルオキシ (C₁₋₂)、アリーロキシ (C₁₋₂)、アラルコキ
シ (C₁₋₂)、ヘテロアリーロキシ (C₁₋₂)、ヘテロアラルコキシ (C₁₋₂)
、アシルオキシ (C₁₋₂)、アルキルアミノ (C₁₋₂)、ジアルキルアミノ (C₁₋₂)、アルケニルアミノ (C₁₋₂)、アルキニルアミノ (C₁₋₂)、アリールアミノ

(C 1 2)、アラルキルアミノ(C 1 2)、ヘテロアリールアミノ(C 1 2)、ヘテロアラルキルアミノ(C 1 2)、アミド(C 1 2)、アリールスルホニル(C 1 2)、アリールスルフィニル(C 1 2)、アルキルホスフェート(C 1 2)、ジアルキルホスフェート(C 1 2)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型である。

【請求項 17】



のようにさらに定義される、請求項 16 記載の化合物、あるいはその薬学的に許容される塩、または互変異性体：

式中、

R_a は、ヒドロキシ、アミノ、アシル(C 8)、置換アシル(C 8)、アシルオキシ(C 8)、置換アシルオキシ(C 8)、アミド(C 8)、または置換アミド(C 8)である。

【請求項 18】

Y が $-C(OH)HCH_2-$ である、請求項 15 記載の化合物。

【請求項 19】

R_a が $-OH$ である、請求項 15 記載の化合物。

【請求項 20】

R_a が $-Cl$ である、請求項 15 記載の化合物。

【請求項 21】

R_a が $-Br$ である、請求項 15 記載の化合物。

【請求項 22】

R_a が $-H$ である、請求項 15 記載の化合物。

【請求項 23】

R_a がアシル(C 1 - 3)または置換アシル(C 1 - 3)である、請求項 15 記載の化合物。

【請求項 24】

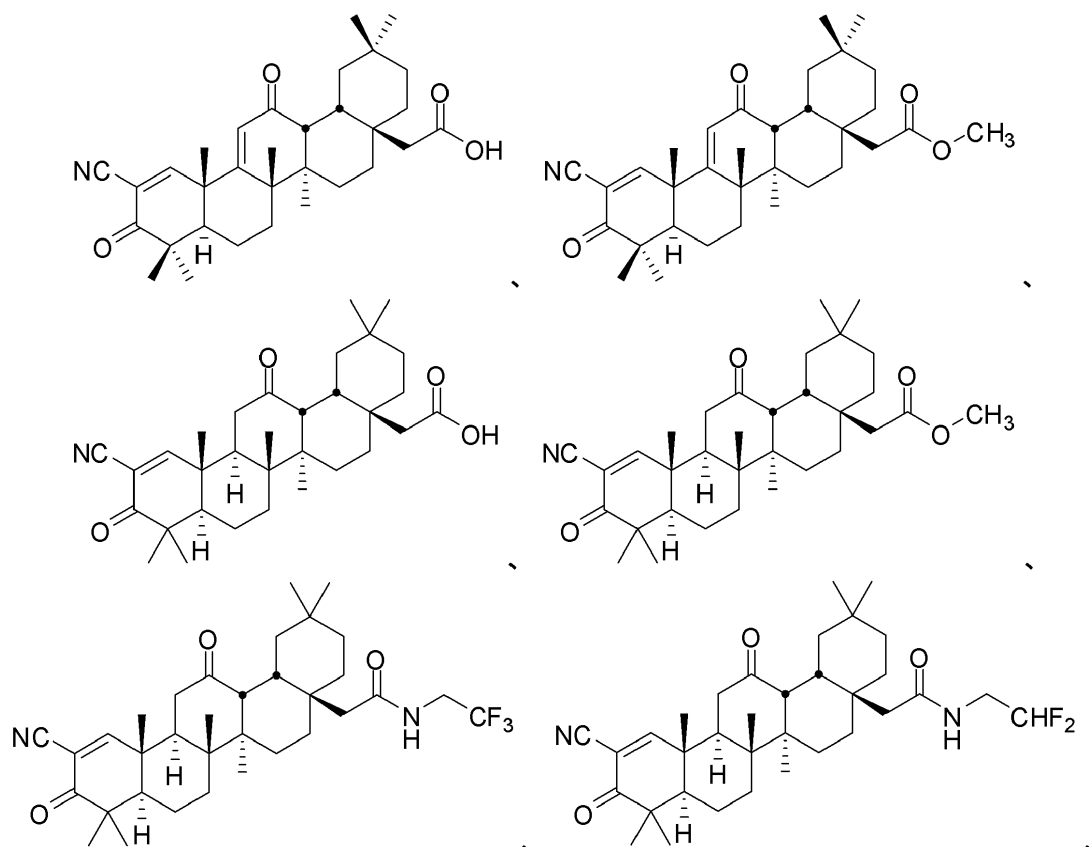
R_a がアシルオキシ(C 1 - 8)または置換アシルオキシ(C 1 - 3)である、請求項 15 記載の化合物。

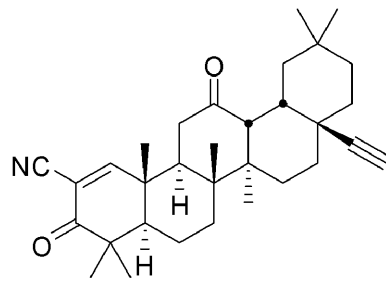
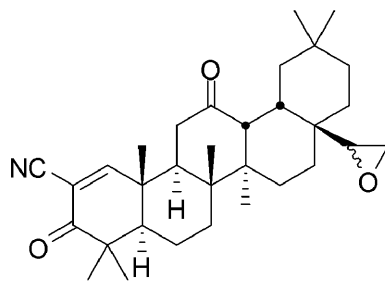
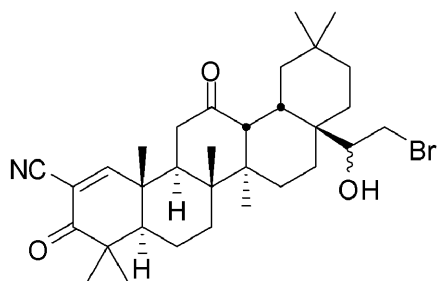
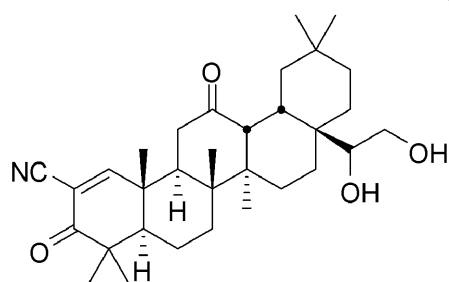
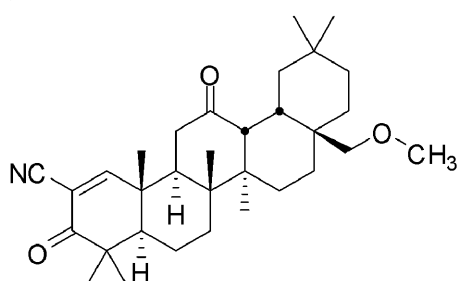
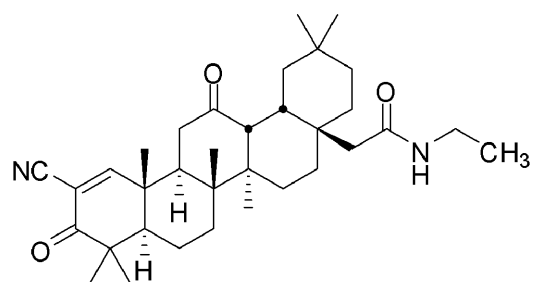
【請求項 25】

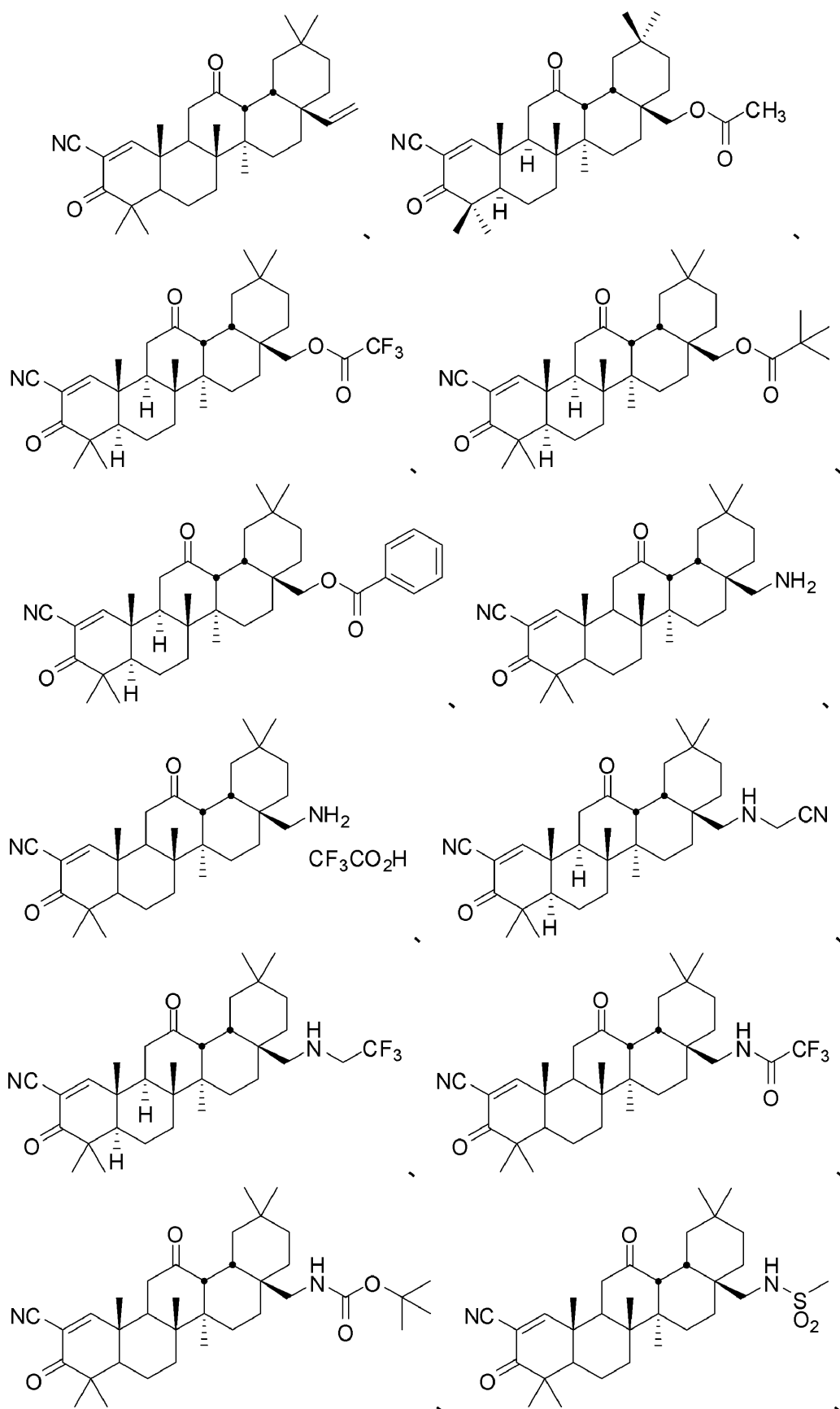
R_a が、アルキルアミノ(C 1 2)、ジアルキルアミノ(C 1 2)、アルケニルアミノ(C 1 2)、アルキニルアミノ(C 1 2)、アリールアミノ(C 1 2)、アラルキルアミノ(C 1 2)、ヘテロアリールアミノ(C 1 2)、ヘテロアラルキルアミノ(C 1 2)、アルキルスルホニルアミノ(C 1 2)、もしくはアミド(C 1 2)、またはこれらの群のいずれかの置換型である、請求項 15 記載の化合物。

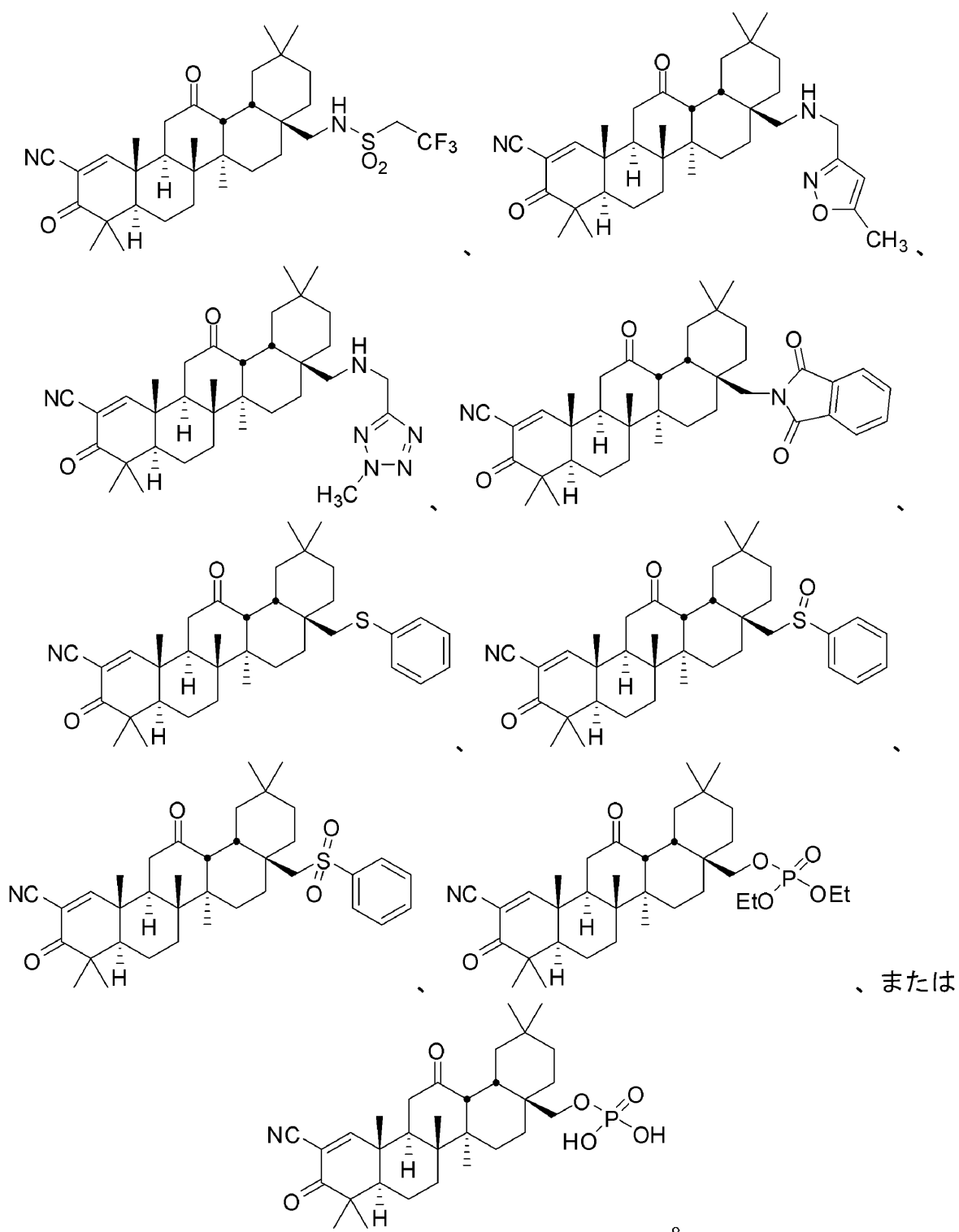
【請求項 26】

以下のようにさらに定義される、請求項 15 記載の化合物：



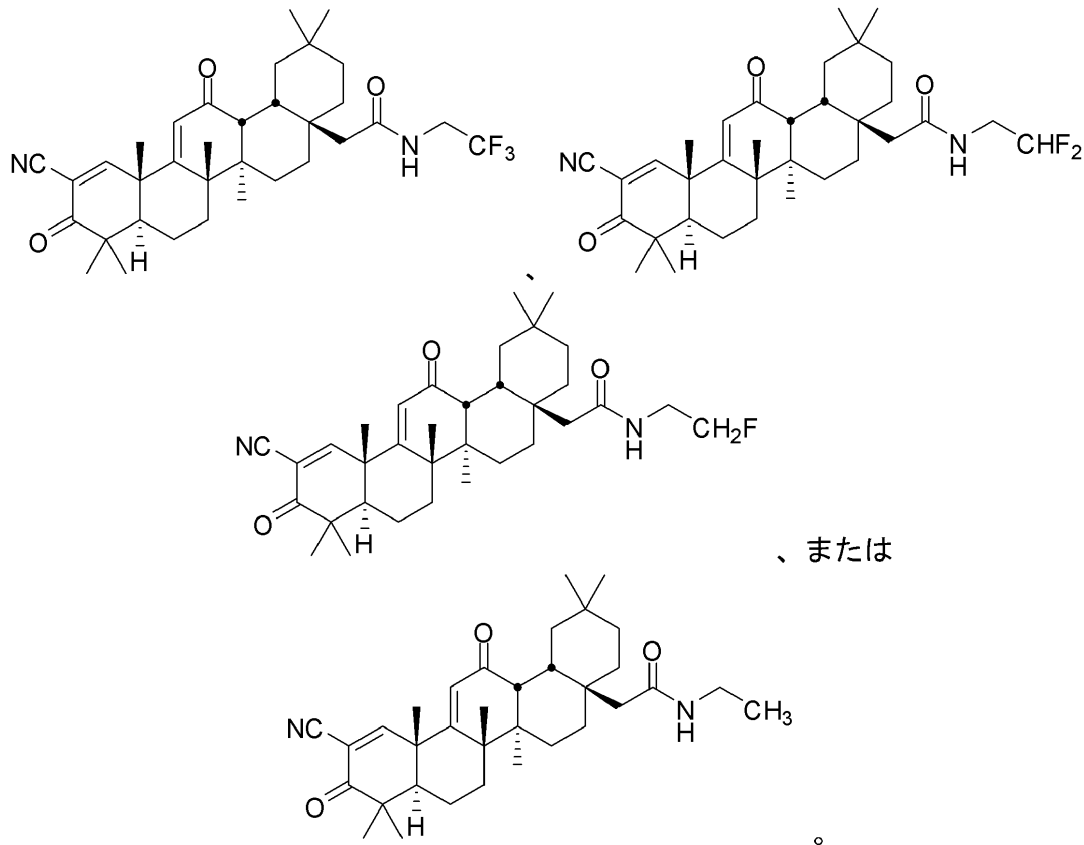






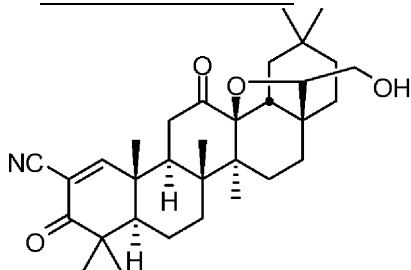
【請求項 27】

以下のようにさらに定義される、請求項 15 記載の化合物：



【請求項 28】

下記式の化合物：



【請求項 29】

請求項 1 ～ 28 のいずれか一項記載の化合物および薬学的に許容される担体を含む、薬学的組成物。

【請求項 30】

炎症性成分を伴う疾患の処置のための薬剤の製造における請求項 1 ～ 28 のいずれか一項記載の化合物の使用。

【請求項 31】

炎症性成分を伴う疾患の処置に使用するための、請求項 1 ～ 28 のいずれか一項記載の化合物。

【請求項 32】

炎症性成分を伴う疾患の処置に使用するための、請求項 1 ～ 28 のいずれか一項記載の化合物を含む組成物。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0062

【補正方法】変更

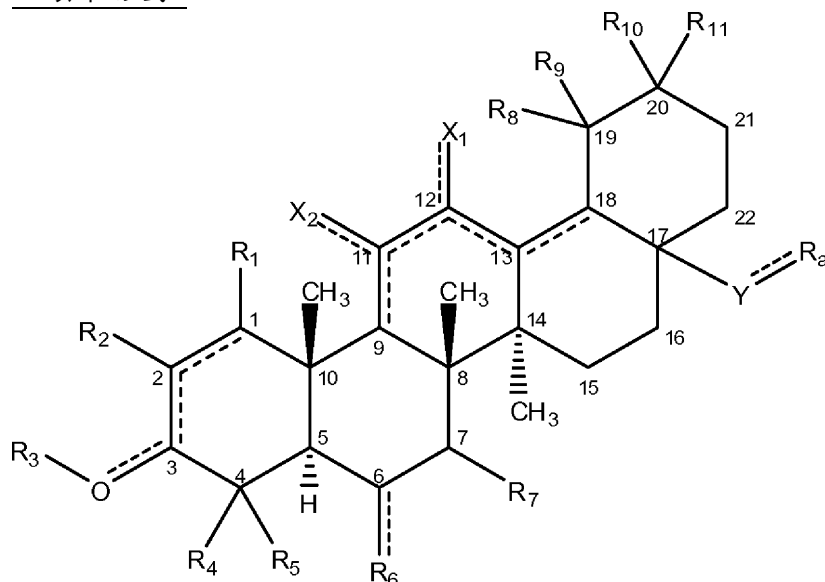
【補正の内容】

【 0 0 6 2 】

本開示の他の目的、特徴および利点は、以下の詳細な説明より明らかになるであろう。しかし、詳細な説明および具体的な実施例が、本発明の具体的な態様を示すが例示のみを目的として与えられるということを理解すべきである。これは、本発明の精神および範囲内の各種の変更および改変が、この詳細な説明より当業者には明らかになるためである。単に特定の化合物が1つの特定の一般式に帰することをもちて、それが別の一般式にも属することができないことを意味するわけではないことに留意されたい。

[本発明1001]

以下の式：



の化合物、あるいはその薬学的に許容される塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、プロドラッグ、または光学異性体；

式中、

Yは、アルカンジイル_(C₁₋₈)、アルケンジイル_(C₂₋₈)、アルキンジイル_(C₂₋₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R_aは、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ニトロ、シアノ、アジド、ホスフェート、1,3-ジオキソイソインドリン-2-イル、メルカプト、もしくはシリル；または

アルキル_(C₁₋₁₂)、アルケニル_(C₂₋₁₂)、アルキニル_(C₂₋₁₂)、アリール_(C₆₋₁₂)、アラルキル_(C₇₋₁₂)、ヘテロアリール_(C₆₋₁₂)、ヘテロアラルキル_(C₇₋₁₂)、アシル_(C₂₋₁₂)、アルコキシ_(C₁₋₁₂)、アルケニルオキシ_(C₂₋₁₂)、アルキニルオキシ_(C₂₋₁₂)、アリールオキシ_(C₆₋₁₂)、アラルコキシ_(C₇₋₁₂)、ヘテロアリールオキシ_(C₆₋₁₂)、ヘテロアラルコキシ_(C₇₋₁₂)、アシルオキシ_(C₂₋₁₂)、アルキルアミノ_(C₁₋₁₂)、ジアルキルアミノ_(C₁₋₁₂)、アルケニルアミノ_(C₂₋₁₂)、アルキニルアミノ_(C₂₋₁₂)、アリールアミノ_(C₆₋₁₂)、アラルキルアミノ_(C₇₋₁₂)、ヘテロアリールアミノ_(C₆₋₁₂)、ヘテロアラルキルアミノ_(C₇₋₁₂)、アルキルスルホニルアミノ_(C₁₋₁₂)、アミド_(C₁₋₁₂)、アルキルチオ_(C₁₋₁₂)、アルケニルチオ_(C₂₋₁₂)、アルキニルチオ_(C₂₋₁₂)、アリールチオ_(C₆₋₁₂)、アラルキルチオ_(C₇₋₁₂)、ヘテロアリールチオ_(C₆₋₁₂)、ヘテロアラルキルチオ_(C₇₋₁₂)、アシルチオ_(C₂₋₁₂)、チオアシル_(C₂₋₁₂)、アルキルスルホニル_(C₁₋₁₂)、アルケニルスルホニル_(C₂₋₁₂)、アルキニルスルホニル_(C₂₋₁₂)、アリールスルホニル_(C₆₋₁₂)、アラルキルスルホニル_(C₇₋₁₂)、ヘテロアリールスルホニル_(C₆₋₁₂)、ヘテロアラルキルスルホニル_(C₇₋₁₂)、アルキルスルフィニル_(C₁₋₁₂)、アルケニルスルフィニル_(C₂₋₁₂)、アルキルスルフィニル_(C₂₋₁₂)、アリールスルフィニル_(C₆₋₁₂)、アラルキルスルフィニル_(C₇₋₁₂)、ヘテロアリールスルフィニル_(C₆₋₁₂)、ヘテロアラルキルスルフィニル_(C₇₋₁₂)、アルキルホスホニル_(C₁₋₁₂)、アルキルホスフェート_(C₁₋₁₂)、ジアルキルホスフェート_(C₁₋₁₂)、アルキル

アンモニウム_(C₁₂)、アルキルスルホニウム_(C₁₂)、アルキルシリル_(C₁₂)、
もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり;あるいは

YおよびR_aは、YおよびR_aが-O-およびアルカンジイル_(C₁₋₅)の1つまたは複数を介して互いにさらに接続するように三員環～七員環を形成し、さらに、Yは-CH-であり、かつR_aは-CH₂-であり;あるいは

Y、R_a、ならびに炭素番号13、17および18は、R_aが炭素13に結合するように環を形成し、Yは、アルカンジイル_(C₁)または置換アルカンジイル_(C₁)であり、かつR_aは-O-であり;

X₁およびX₂は独立して、水素、OR_b、NR_bR_c、またはSR_bであり、ここで、R_bおよびR_cはそれぞれ独立して、

水素もしくはヒドロキシ;

アルキル_(C₈)、アリール_(C₈)、アラルキル_(C₈)、アシル_(C₈)、アルコキシ_(C₈)、アリールオキシ_(C₈)、アシルオキシ_(C₈)、アルキルアミノ_(C₈)、アリールアミノ_(C₈)、アミド_(C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型;または

インビボで水素に変換可能な置換基であり;

但し、R_bは、それが結合する原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、R_bが存在しない場合には、それが結合する原子は二重結合の一部であり;

R₁は、

水素、シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ;または

アルキル_(C₈)、アルケニル_(C₈)、アルキニル_(C₈)、アリール_(C₈)、アラルキル_(C₈)、ヘテロアリール_(C₈)、ヘテロアラルキル_(C₈)、アシル_(C₈)、アルコキシ_(C₈)、アリールオキシ_(C₈)、アシルオキシ_(C₈)、アルキルアミノ_(C₈)、アリールアミノ_(C₈)、アミド_(C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり;

R₂は、

シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ;または

フルオロアルキル_(C₈)、アルケニル_(C₈)、アルキニル_(C₈)、アリール_(C₈)、ヘテロアリール_(C₈)、アシル_(C₈)、アルコキシ_(C₈)、アリールオキシ_(C₈)、アシルオキシ_(C₈)、アルキルアミノ_(C₈)、アリールアミノ_(C₈)、アミド_(C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり;

R₃は、

存在しないか、もしくは水素;

アルキル_(C₈)、アリール_(C₈)、アラルキル_(C₈)、アシル_(C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型;または

インビボで水素に変換可能な置換基であり;

但し、R₃は、それが結合する酸素原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、R₃が存在しない場合には、それが結合する酸素原子は二重結合の一部であり;

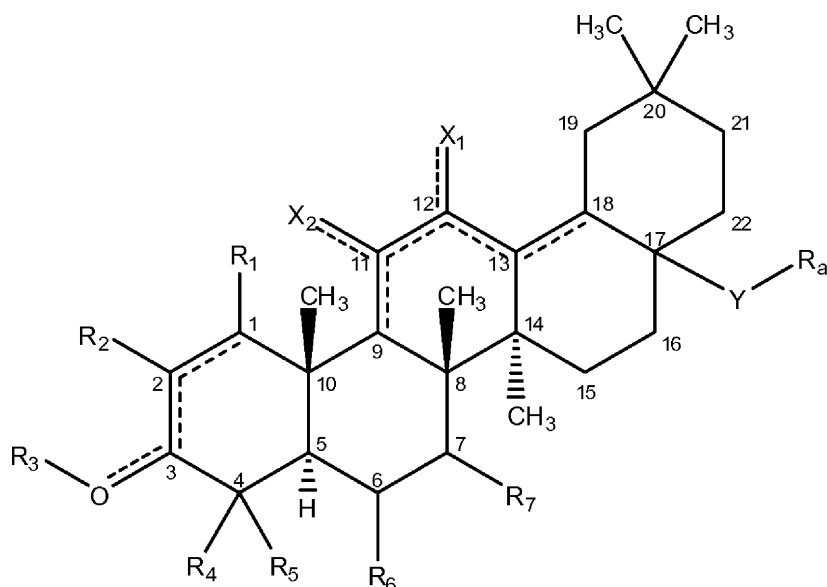
R₄およびR₅はそれぞれ独立して、アルキル_(C₈)または置換アルキル_(C₈)であり;

R₆は、水素、ヒドロキシ、またはオキソであり;かつ

R₇は、水素またはヒドロキシであり;

R₈、R₉、R₁₀、およびR₁₁はそれぞれ独立して、水素、ヒドロキシ、アルキル_(C₈)、置換アルキル_(C₈)、アルコキシ_(C₈)または置換アルコキシ_(C₈)である。

[本発明1002]



のようにさらに定義される、本発明1001の化合物、あるいは その薬学的に許容される塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、プロドラッグ、または光学異性体：

式中、

Yは、アルカンジイル (C₁₋₈)、アルケンジイル (C₂₋₈)、アルキンジイル (C₂₋₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R_aは、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ニトロ、シアノ、アジド、ホスフェート、1,3-ジ
オキソイソインドリン-2-イル、メルカプト、もしくはシリル；または

アルキル (C₁₋₁₂)、アルケニル (C₂₋₁₂)、アルキニル (C₂₋₁₂)、アリール (C₆₋₁₂)、アラルキル (C₇₋₁₂)、ヘテロアリール (C₆₋₁₂)、ヘテロアラルキル (C₇₋₁₂)、アシル (C₂₋₁₂)、アルコキシ (C₁₋₁₂)、アルケニルオキシ (C₂₋₁₂)、アルキニルオキシ (C₂₋₁₂)、アリールオキシ (C₆₋₁₂)、アラルコキシ (C₇₋₁₂)、ヘテロアリールオキシ (C₆₋₁₂)、ヘテロアラルコキシ (C₇₋₁₂)、アシルオキシ (C₂₋₁₂)、アルキルアミノ (C₁₋₁₂)、ジアルキルアミノ (C₁₋₁₂)、アルケニルアミノ (C₂₋₁₂)、アルキニルアミノ (C₂₋₁₂)、アリールアミノ (C₆₋₁₂)、アラルキルアミノ (C₇₋₁₂)、ヘテロアリールアミノ (C₆₋₁₂)、ヘテロアラルキルアミノ (C₇₋₁₂)、アルキルスルホニルアミノ (C₁₋₁₂)、アミド (C₁₋₁₂)、アルキルチオ (C₁₋₁₂)、アルケニルチオ (C₂₋₁₂)、アルキニルチオ (C₂₋₁₂)、アリールチオ (C₆₋₁₂)、アラルキルチオ (C₇₋₁₂)、ヘテロアリールチオ (C₆₋₁₂)、ヘテロアラルキルチオ (C₇₋₁₂)、アシルチオ (C₂₋₁₂)、チオアシル (C₂₋₁₂)、アルキルスルホニル (C₁₋₁₂)、アルケニルスルホニル (C₂₋₁₂)、アルキニルスルホニル (C₂₋₁₂)、アリールスルホニル (C₆₋₁₂)、アラルキルスルホニル (C₇₋₁₂)、ヘテロアリールスルホニル (C₆₋₁₂)、ヘテロアラルキルスルホニル (C₇₋₁₂)、アルキルスルフィニル (C₁₋₁₂)、アルケニルスルフィニル (C₂₋₁₂)、アルキニルスルフィニル (C₂₋₁₂)、アリールスルフィニル (C₆₋₁₂)、アラルキルスルフィニル (C₇₋₁₂)、ヘテロアリールスルフィニル (C₆₋₁₂)、ヘテロアラルキルスルフィニル (C₇₋₁₂)、アルキルホスホニル (C₁₋₁₂)、アルキルホスホニル (C₁₋₁₂)、アルキルホスフェート (C₁₋₁₂)、ジアルキルホスフェート (C₁₋₁₂)、アルキルアンモニウム (C₁₋₁₂)、アルキルスルホニウム (C₁₋₁₂)、アルキルシリル (C₁₋₁₂)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；あるいは

YおよびR_aは、YおよびR_aが-O-およびアルカンジイル (C₁₋₄) の1つまたは複数を介して互いにさらに接続するように三員環～六員環を形成し、さらに、Yは-CH-であり、かつR_aは-CH₂-であり；

X₁およびX₂は独立して、水素、OR_b、NR_bR_c、またはSR_bであり、ここで、R_bおよびR_cはそれぞれ独立して、

水素；

アルキル_(C₈)、アリール_(C₈)、アラルキル_(C₈)、アシル_(C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型;または

インビボで水素に変換可能な置換基であり;

但し、R₆は、それが結合する原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、R₆が存在しない場合には、それが結合する原子は二重結合の一部であり;

R₁は、

水素、シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ;または

アルキル_(C₈)、アルケニル_(C₈)、アルキニル_(C₈)、アリール_(C₈)、アラルキル_(C₈)、ヘテロアリール_(C₈)、ヘテロアラルキル_(C₈)、アシル_(C₈)、アルコキシ_(C₈)、アリーロキシ_(C₈)、アシルオキシ_(C₈)、アルキルアミノ_(C₈)、アリールアミノ_(C₈)、アミド_(C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり;

R₂は、

シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ;または

フルオロアルキル_(C₈)、アルケニル_(C₈)、アルキニル_(C₈)、アリール_(C₈)、ヘテロアリール_(C₈)、アシル_(C₈)、アルコキシ_(C₈)、アリーロキシ_(C₈)、アシルオキシ_(C₈)、アルキルアミノ_(C₈)、アリールアミノ_(C₈)、アミド_(C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり;

R₃は、

存在しないか、もしくは水素;

アルキル_(C₈)、アリール_(C₈)、アラルキル_(C₈)、アシル_(C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型;あるいは

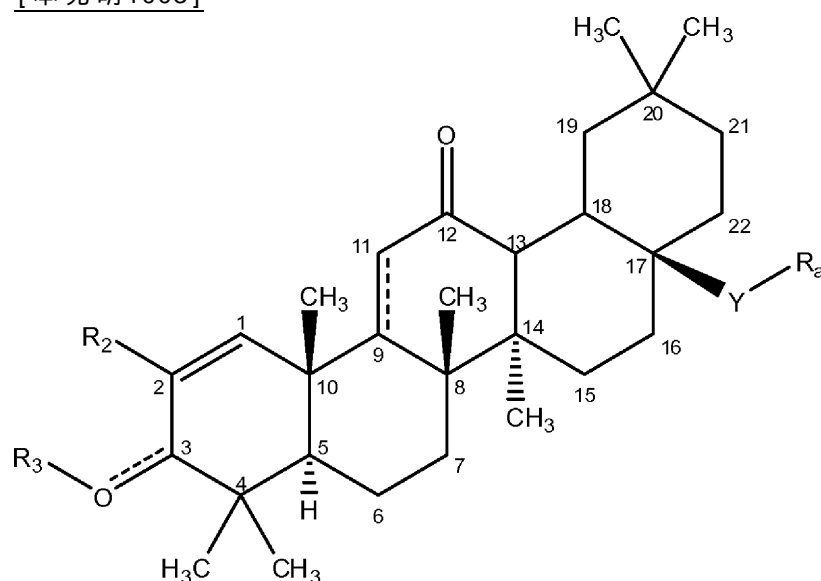
インビボで水素に変換可能な置換基であり;

但し、R₃は、それが結合する酸素原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、R₃が存在しない場合には、それが結合する酸素原子は二重結合の一部であり;

R₄およびR₅はそれぞれ独立して、アルキル_(C₈)または置換アルキル_(C₈)であり;かつ

R₆およびR₇はそれぞれ独立して、水素またはヒドロキシである。

[本発明1003]



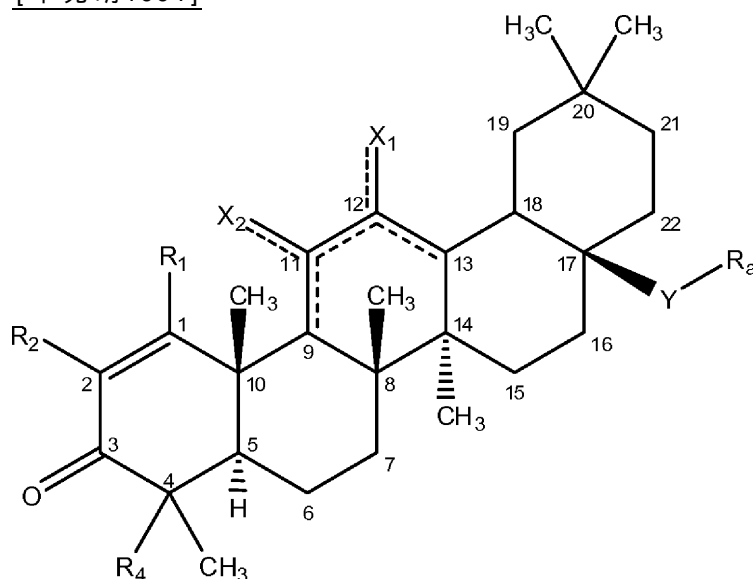
のようにさらに定義される、本発明1002の化合物、あるいはその薬学的に許容される塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、プロドラッグ、または光学異性体:

式中、

Yは、アルカンジイル_(C₅)または置換アルカンジイル_(C₅)であり;

R_aは、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ホスフェート、1,3-ジオキソイソインドリン-2-



R_a は、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ニトロ、シアノ、アジド、ホスフェート、1,3-ジオキソイソインドリン-2-イル、メルカプト、もしくはシリル;または

アルキル_(C 12)、アルケニル_(C 12)、アルキニル_(C 12)、アリール_(C 12)、アラキル_(C 12)、ヘテロアリール_(C 12)、ヘテロアラキル_(C 12)、アシル_(C 12)、アルコキシ_(C 12)、アルケニルオキシ_(C 12)、アルキニルオキシ_(C 12)、アリールオキシ_(C 12)、アラルコキシ_(C 12)、ヘテロアリールオキシ_(C 12)、ヘテロアラルコキシ_(C 12)、アシルオキシ_(C 12)、アルキルアミノ_(C 12)、ジアルキルアミノ_(C 12)、アルケニルアミノ_(C 12)、アルキニルアミノ_(C 12)、アリールアミノ_(C 12)、アラルキルアミノ_(C 12)、ヘテロアリールアミノ_(C 12)、ヘテロアラルキルアミノ_(C 12)、アルキルスルホニルアミノ_(C 12)、アミド_(C 12)、アルキルアンモニウム_(C 12)、アルキルスルホニウム_(C 12)、アルキルシリル_(C 12)、アリールスルホニル_(C 12)、アリールスルフィニル_(C 12)、アルキルホスフェート_(C 12)、ジアルキルホスフェート_(C 12)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり;あるいは

YおよびR_aは、YおよびR_aが-O-およびアルカンジイル_(C1-3)の1つまたは複数を介して互いにさらに接続するように三員環~五員環を形成し、さらに、Yは-CH-であり、かつR_aは-CH₂-であり;

X₁およびX₂は独立して、OR_b、NR_bR_c、またはSR_bであり、ここで、R_bおよびR_cはそれぞれ独立して、

水素;

アルキル_(C 8)、アリール_(C 8)、アラキル_(C 8)、アシル_(C 8)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型;または

インビボで水素に変換可能な置換基であり;

但し、R_bは、それが結合する原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、R_bが存在しない場合には、それが結合する原子は二重結合の一部であり;

R₁は、

水素、シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ;または

アルキル_(C 8)、アルケニル_(C 8)、アルキニル_(C 8)、アリール_(C 8)、アラキル_(C 8)、ヘテロアリール_(C 8)、ヘテロアラキル_(C 8)、アシル_(C 8)、アルコキシ_(C 8)、アリールオキシ_(C 8)、アシルオキシ_(C 8)、アルキルアミノ_(C 8)、アリールアミノ_(C 8)、アミド_(C 8)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり;

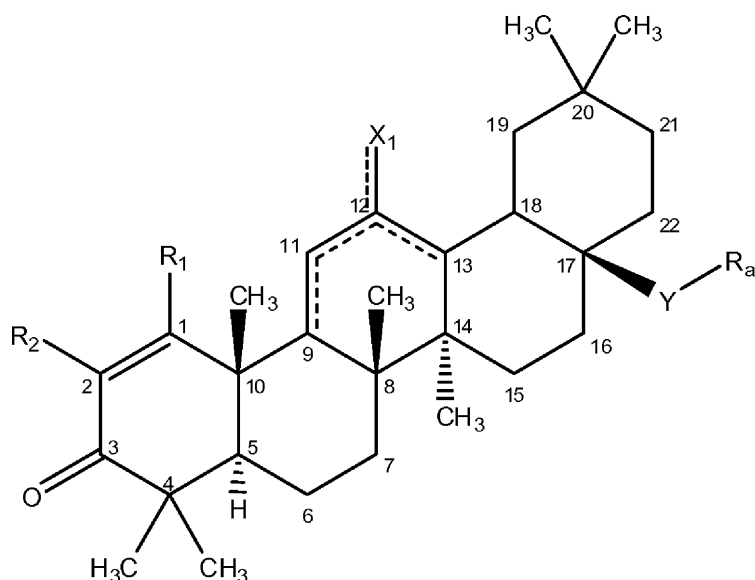
R₂は、

シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ;または

フルオロアルキル_(C 8)、アルケニル_(C 8)、アルキニル_(C 8)、アリール_(C 8)、ヘテロアリール_(C 8)、アシル_(C 8)、アルコキシ_(C 8)、アリールオキシ_(C 8)、アシルオキシ_(C 8)、アルキルアミノ_(C 8)、アリールアミノ_(C 8)、アミド_(C 8)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり;かつ

R₄は、アルキル_(C 8)または置換アルキル_(C 8)である。

[本発明1005]



のようにさらに定義される、本発明1002の化合物、あるいはその薬学的に許容される塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、プロドラッグ、または光学異性体：

式中、

Yは、アルカンジイル (C_{1-8})、アルケンジイル (C_{2-8})、アルキンジイル (C_{1-8})、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R_aは、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ニトロ、シアノ、アジド、ホスフェート、1,3-ジオキソイソインドリン-2-イル、メルカプト、もしくはシリル；または

アルキル (C_{1-12})、アルケニル (C_{2-12})、アルキニル (C_{1-12})、アリール (C_{1-2})、アラールキル (C_{1-12})、ヘテロアリール (C_{1-12})、ヘテロアラールキル (C_{1-12})、アシル (C_{1-12})、アルコキシ (C_{1-12})、アルケニルオキシ (C_{2-12})、アルキニルオキシ (C_{1-12})、アリールオキシ (C_{1-12})、アラールコキシ (C_{1-12})、ヘテロアリールオキシ (C_{1-12})、ヘテロアラールコキシ (C_{1-12})、アシルオキシ (C_{1-12})、アルキルアミノ (C_{1-12})、ジアルキルアミノ (C_{1-12})、アルケニルアミノ (C_{2-12})、アルキニルアミノ (C_{1-12})、アリールアミノ (C_{1-12})、アラールキルアミノ (C_{1-12})、ヘテロアリールアミノ (C_{1-12})、ヘテロアラールキルアミノ (C_{1-12})、アミド (C_{1-12})、アリールスルホニル (C_{1-12})、アリールスルフィニル (C_{1-12})、アルキルホスフェート (C_{1-12})、ジアルキルホスフェート (C_{1-12})、アルキルホスフェート (C_{1-12})、ジアルキルホスフェート (C_{1-12})、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；あるいは

YおよびR_aは、YおよびR_aが-O-およびアルカンジイル (C_{1-3}) の1つまたは複数を介して互いにさらに接続するように三員環～五員環を形成し、さらに、Yは-CH-であり、かつR_aは-CH₂-であり；

X₁は、OR_b、NR_bR_c、またはSR_bであり、ここで、R_bおよびR_cはそれぞれ独立して、

水素；

アルキル (C_{1-8})、アリール (C_{1-8})、アラールキル (C_{1-8})、アシル (C_{1-8})、もしくはこれらの群のいずれかの置換型；または

インビボで水素に変換可能な置換基であり；

但し、R_bは、それが結合する原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、R_bが存在しない場合には、それが結合する原子は二重結合の一部であり；

R₁は、

水素、シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

アルキル (C_{1-8})、アルケニル (C_{2-8})、アルキニル (C_{1-8})、アリール (C_{1-8})、アラールキル (C_{1-8})、ヘテロアリール (C_{1-8})、ヘテロアラールキル (C_{1-8})、アシル (C_{1-8})、アルコキシ (C_{1-8})、アリールオキシ (C_{1-8})、アシルオキシ (C_{1-8})、アルキルアミノ (C_{1-8})、アリールアミノ (C_{1-8})、アミド (C_{1-8})、もしくはこれらの群のい

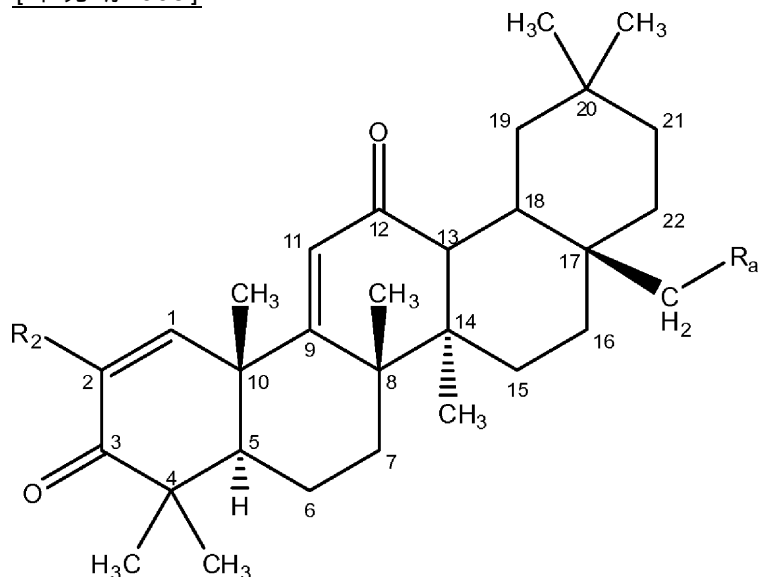
いずれかの置換型であり；

R_2 は、

シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

フルオロアルキル_(C 8)、アルケニル_(C 8)、アルキニル_(C 8)、アリール_(C 8)、ヘテロアリール_(C 8)、アシル_(C 8)、アルコキシ_(C 8)、アリールオキシ_(C 8)、アシルオキシ_(C 8)、アルキルアミノ_(C 8)、アリールアミノ_(C 8)、アミド_(C 8)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型である。

[本発明1006]



のようにさらに定義される、本発明1002の化合物、あるいはその薬学的に許容される塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、プロドラッグ、または光学異性体；

式中、

R_a は、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ホスフェート、1,3-ジオキソイソインドリン-2-イル、もしくはシアノ；または

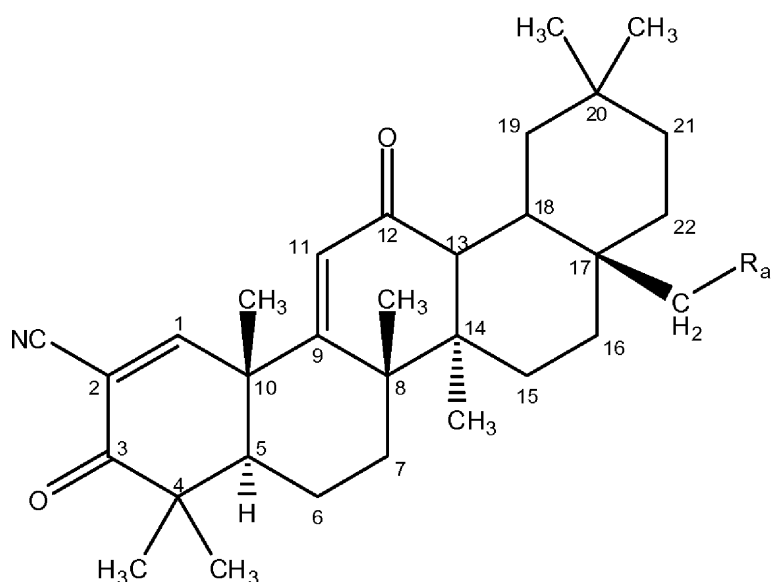
アルキル_(C 12)、アルケニル_(C 12)、アルキニル_(C 12)、アリール_(C 12)、アラルキル_(C 12)、ヘテロアリール_(C 12)、ヘテロアラルキル_(C 12)、アシル_(C 12)、アルコキシ_(C 12)、アルケニルオキシ_(C 12)、アルキニルオキシ_(C 12)、アリールオキシ_(C 12)、アラルコキシ_(C 12)、ヘテロアリールオキシ_(C 12)、ヘテロアラルコキシ_(C 12)、アシルオキシ_(C 12)、アルキルアミノ_(C 12)、ジアルキルアミノ_(C 12)、アルケニルアミノ_(C 12)、アルキニルアミノ_(C 12)、アリールアミノ_(C 12)、アラルキルアミノ_(C 12)、ヘテロアリールアミノ_(C 12)、ヘテロアラルキルアミノ_(C 12)、アミド_(C 12)、アリールスルホニル_(C 12)、アリールスルフィニル_(C 12)、アルキルホスフェート_(C 12)、ジアルキルホスフェート_(C 12)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R_2 は、

シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

フルオロアルキル_(C 8)、アルケニル_(C 8)、アルキニル_(C 8)、アリール_(C 8)、ヘテロアリール_(C 8)、アシル_(C 8)、アルコキシ_(C 8)、アリールオキシ_(C 8)、アシルオキシ_(C 8)、アルキルアミノ_(C 8)、アリールアミノ_(C 8)、アミド_(C 8)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型である。

[本発明1007]



のようにさらに定義される、本発明1002の化合物、あるいはその薬学的に許容される塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、プロドラッグ、または光学異性体：

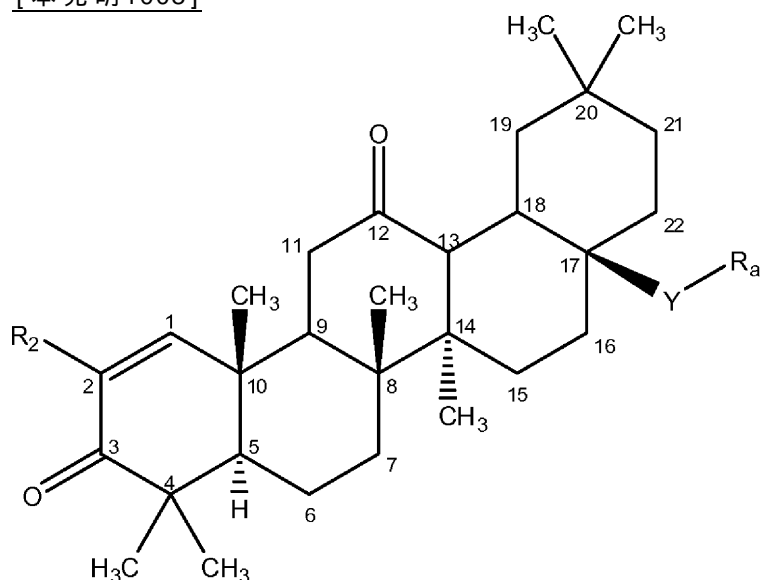
式中、

R_a は、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ホスフェート、1,3-ジオキソイソインドリン-2-イル、もしくはシアノ；または

アルキル (C_{1-12})、アルケニル (C_{2-12})、アルキニル (C_{2-12})、アリール (C_{6-10})、アラキル (C_{1-12})、ヘテロアリール (C_{6-10})、ヘテロアラキル (C_{1-12})、アシル (C_{1-12})、アルコキシ (C_{1-12})、アルケニルオキシ (C_{2-12})、アルキニルオキシ (C_{2-12})、アリールオキシ (C_{6-10})、アラルコキシ (C_{1-12})、ヘテロアリールオキシ (C_{6-10})、ヘテロアラルコキシ (C_{1-12})、アシルオキシ (C_{1-12})、アルキルアミノ (C_{1-12})、ジアルキルアミノ (C_{1-12})、アルケニルアミノ (C_{2-12})、アルキニルアミノ (C_{2-12})、アリールアミノ (C_{6-10})、アラキルアミノ (C_{1-12})、ヘテロアリールアミノ (C_{6-10})、ヘテロアラキルアミノ (C_{1-12})、アミド (C_{1-12})、アリールスルホニル (C_{6-10})、アラキルスルフィニル (C_{1-12})、アルキルホスフェート (C_{1-12})、ジアルキルホスフェート (C_{1-12})、もしくはこれらの群のいずれかの置換型である。

[本発明1008]



のようにさらに定義される、本発明1002の化合物、あるいはその薬学的に許容される塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、プロドラッグ、または光学異性体：

式中、

Yは、アルカンジイル(C₃)または置換アルカンジイル(C₃)であり;

R_aは、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ホスフェート、1,3-ジオキソイソインドリン-2-イル、もしくはシアノ;または

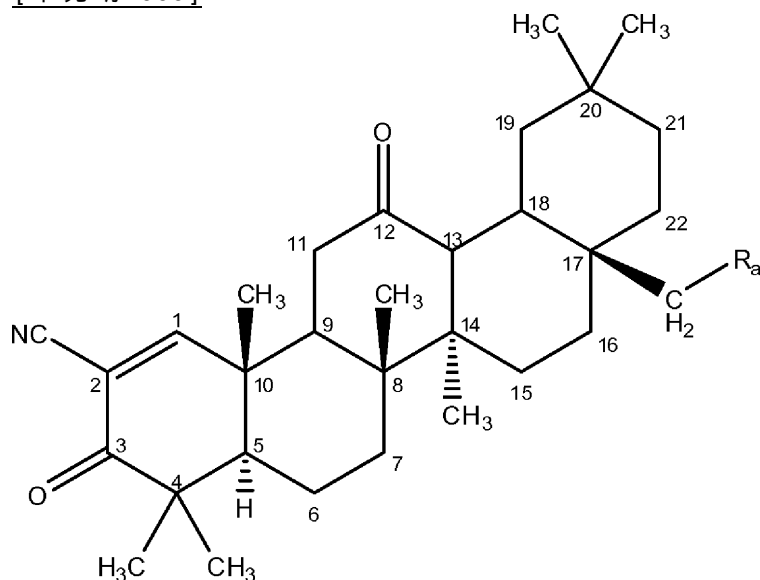
アルキル(C₁₂)、アルケニル(C₁₂)、アルキニル(C₁₂)、アリール(C₁₂)、アラルキル(C₁₂)、ヘテロアリール(C₁₂)、ヘテロアラルキル(C₁₂)、アシル(C₁₂)、アルコキシ(C₁₂)、アルケニルオキシ(C₁₂)、アルキニルオキシ(C₁₂)、アリールオキシ(C₁₂)、アラルコキシ(C₁₂)、ヘテロアリールオキシ(C₁₂)、ヘテロアラルコキシ(C₁₂)、アシルオキシ(C₁₂)、アルキルアミノ(C₁₂)、ジアルキルアミノ(C₁₂)、アルケニルアミノ(C₁₂)、アルキニルアミノ(C₁₂)、アリールアミノ(C₁₂)、アラルキルアミノ(C₁₂)、ヘテロアリールアミノ(C₁₂)、ヘテロアラルキルアミノ(C₁₂)、アミド(C₁₂)、アリールスルホニル(C₁₂)、アリールスルフィニル(C₁₂)、アルキルホスフェート(C₁₂)、ジアルキルホスフェート(C₁₂)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり;かつ

R₂は、

シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ;または

フルオロアルキル(C₈)、アルケニル(C₈)、アルキニル(C₈)、アリール(C₈)、ヘテロアリール(C₈)、アシル(C₈)、アルコキシ(C₈)、アリールオキシ(C₈)、アシルオキシ(C₈)、アルキルアミノ(C₈)、アリールアミノ(C₈)、アミド(C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型である。

[本発明1009]



のようにさらに定義される、本発明1002の化合物、あるいはその薬学的に許容される塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、プロドラッグ、または光学異性体;

式中、

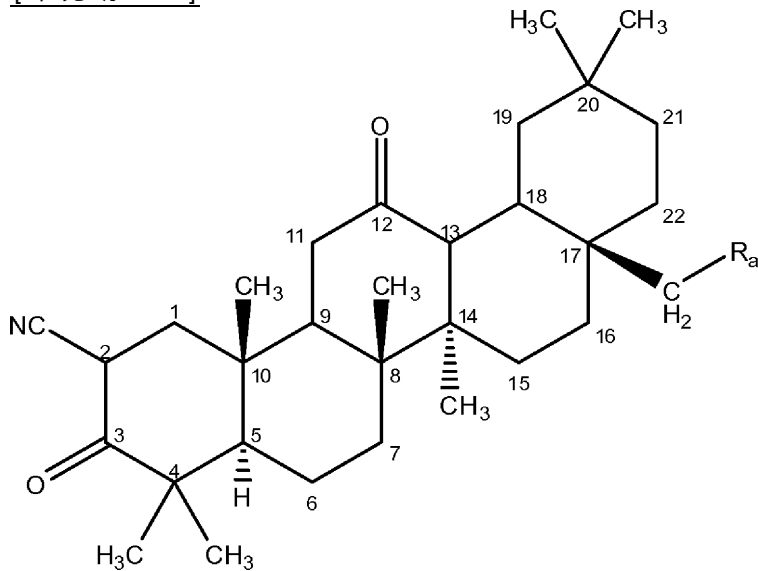
R_aは、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ホスフェート、1,3-ジオキソイソインドリン-2-イル、もしくはシアノ;または

アルキル(C₁₂)、アルケニル(C₁₂)、アルキニル(C₁₂)、アリール(C₁₂)、アラルキル(C₁₂)、ヘテロアリール(C₁₂)、ヘテロアラルキル(C₁₂)、アシル(C₁₂)、アルコキシ(C₁₂)、アルケニルオキシ(C₁₂)、アルキニルオキシ(C₁₂)、アリールオキシ(C₁₂)、アラルコキシ(C₁₂)、ヘテロアリールオキシ(C₁₂)、ヘテロアラルコキシ(C₁₂)、アシルオキシ(C₁₂)、アルキルアミノ(C₁₂)、ジアルキルアミノ(C₁₂)、アルケニルアミノ(C₁₂)、アルキニルアミノ(C₁₂)、アリールアミノ(C₁₂)、アラルキルアミノ(C₁₂)、ヘテロアリールアミノ(C₁₂)、ヘテロアラルキルアミノ(C₁₂)、アミド(C₁₂)、アリールスルホニル(C₁₂)、アリールスルフィニル(C₁₂)、アルキルホスフェート(C₁₂)、ジアルキルホスフェート(C₁₂)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり;かつ

C_{12} ）、アリールスルフィニル (C_{12})、アルキルホスフェート (C_{12})、ジアルキルホスフェート (C_{12})、もしくはこれらの群のいずれかの置換型である。

[本発明1010]



のようにさらに定義される、本発明1002の化合物、あるいは、その塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、または光学異性体：

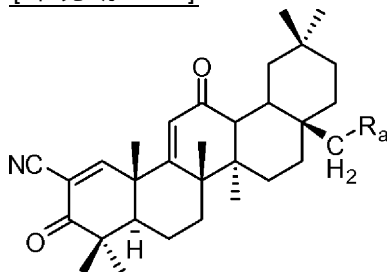
式中、

R_a は、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ホスフェート、1,3-ジオキソイソインドリン-2-イル、もしくはシアノ；または

アルキル (C_{12})、アルケニル (C_{12})、アルキニル (C_{12})、アリール (C_{12})、アラルキル (C_{12})、ヘテロアリール (C_{12})、ヘテロアラルキル (C_{12})、アシル (C_{12})、アルコキシ (C_{12})、アルケニルオキシ (C_{12})、アルキニルオキシ (C_{12})、アリールオキシ (C_{12})、アラルコキシ (C_{12})、ヘテロアリールオキシ (C_{12})、ヘテロアラルコキシ (C_{12})、アシルオキシ (C_{12})、アルキルアミノ (C_{12})、ジアルキルアミノ (C_{12})、アルケニルアミノ (C_{12})、アルキニルアミノ (C_{12})、アリールアミノ (C_{12})、アラルキルアミノ (C_{12})、ヘテロアリールアミノ (C_{12})、ヘテロアラルキルアミノ (C_{12})、アミド (C_{12})、アリールスルホニル (C_{12})、アリールスルフィニル (C_{12})、アルキルホスフェート (C_{12})、ジアルキルホスフェート (C_{12})、もしくはこれらの群のいずれかの置換型である。

[本発明1011]

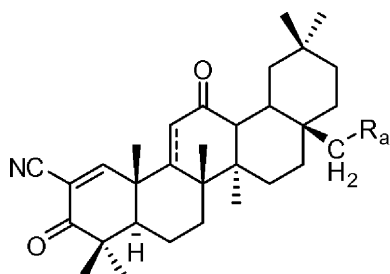


のようにさらに定義される、本発明1002の化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体：

式中、

R_a は、ヒドロキシ、シアノ、アシル (C_8)、置換アシル (C_8)、アシルオキシ (C_8)、または置換アシル (C_8) である。

[本発明1012]

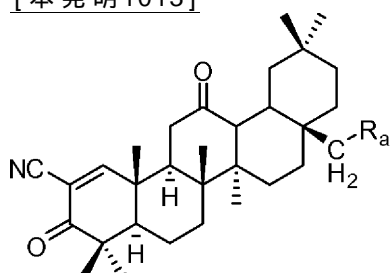


のようにさらに定義される、本発明1002の化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体：

式中、

R_a は、ヒドロキシ、シアノ、アシル (C_{1-8})、置換アシル (C_{1-8})、アシルオキシ (C_{1-8})、置換アシル (C_{1-8})、アミド (C_{1-8})、もしくは置換アミド (C_{1-8}) である。

[本発明1013]

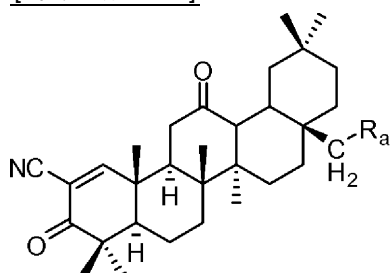


のようにさらに定義される、本発明1002の化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体：

式中、

R_a は、ヒドロキシ、シアノ、アシル (C_{1-8})、置換アシル (C_{1-8})、アシルオキシ (C_{1-8})、または置換アシル (C_{1-8}) である。

[本発明1014]



のようにさらに定義される、本発明1002の化合物：

式中、

R_a は、アルキルアミノ (C_{1-12})、ジアルキルアミノ (C_{1-12})、アルケニルアミノ (C_{1-12})、アルキニルアミノ (C_{1-12})、アリールアミノ (C_{1-12})、アラールキルアミノ (C_{1-12})、ヘテロアリールアミノ (C_{1-12})、ヘテロアラールキルアミノ (C_{1-12})、アルキルスルホニルアミノ (C_{1-12})、もしくはアミド (C_{1-12})、またはこれらの群のいずれかの置換型である。

[本発明1015]

Yが、アルカンジイル (C_{1-4}) または置換アルカンジイル (C_{1-4}) である、本発明1001～1005および1008のいずれかの化合物。

[本発明1016]

Yが $-CH_2-$ である、本発明1015の化合物。

[本発明1017]

Yが $-C(OH)HCH_2-$ である、本発明1015の化合物。

[本発明1018]

Yが $-C-C-$ である、本発明1001の化合物。

[本発明1019]

X₁がOR_bであり、かつR_bが存在しない、本発明1001、1002、1004および1005のいずれかの化合物。

[本発明1020]

X₂が水素である、本発明1001、1002および1004のいずれかの化合物。

[本発明1021]

R_aが-OHである、本発明1001～1013および1017のいずれかの化合物。

[本発明1022]

R_aが-CNである、本発明1001～1013および1017のいずれかの化合物。

[本発明1023]

R_aが-Clである、本発明1001～1013および1017のいずれかの化合物。

[本発明1024]

R_aが-Brである、本発明1001～1013および1017のいずれかの化合物。

[本発明1025]

R_aが-Hである、本発明1001～1013および1018のいずれかの化合物。

[本発明1026]

R_aがアシル_(C1-6)または置換アシル_(C1-6)である、本発明1001～1013のいずれかの化合物。

[本発明1027]

R_aがアシル_(C4-6)または置換アシル_(C4-6)である、本発明1001～1013のいずれかの化合物。

[本発明1028]

R_aがアシル_(C1-4)または置換アシル_(C1-4)である、本発明1001～1013のいずれかの化合物。

[本発明1029]

R_aがアシル_(C1-3)または置換アシル_(C1-3)である、本発明1001～1013のいずれかの化合物。

[本発明1030]

R_aが、-C(=O)OH、-C(=O)OCH₃、-C(=O)NHCH₃、-C(=O)NHCH₂CH₃、および-C(=O)NHCH₂CF₃からなる群より選択される、本発明1029の化合物。

[本発明1031]

R_aがアシルオキシ_(C1-8)または置換アシルオキシ_(C1-3)である、本発明1001～1013のいずれかの化合物。

[本発明1032]

R_aが置換アシルオキシ_(C1-3)である、本発明1031の化合物。

[本発明1033]

R_aがアシルオキシ_(C2-8)である、本発明1031の化合物。

[本発明1034]

R_aがフルオロ基を含む、本発明1001～1014のいずれかの化合物。

[本発明1035]

R_aがトリフルオロメチル基を含む、本発明1034の化合物。

[本発明1036]

R_aが、アルキルアミノ_(C1-12)、ジアルキルアミノ_(C1-12)、アルケニルアミノ_(C1-12)、アルキニルアミノ_(C1-12)、アリールアミノ_(C1-12)、アラールキルアミノ_(C1-12)、ヘテロアリールアミノ_(C1-12)、ヘテロアラールキルアミノ_(C1-12)、アルキルスルホニルアミノ_(C1-12)、もしくはアミド_(C1-12)、またはこれらの群のいずれかの置換型である、本発明1001～1004および1014のいずれかの化合物。

[本発明1037]

R_aがアリールスルホニル_(C1-8)またはアリールスルフィニル_(C1-8)である、本発明1001～1010のいずれかの化合物。

[本発明1038]

R_aが-OP(O)(OH)₂である、本発明1001～1010のいずれかの化合物。

[本発明1039]

R_aがアルキルホスフェート (C₁₋₁₂) またはジアルキルホスフェート (C₁₋₁₂) である、本発明1001～1010のいずれかの化合物。

[本発明1040]

R_aがジアルキルホスフェート (C₁₋₈) である、本発明1039の化合物。

[本発明1041]

R_aが-OP(O)(OEt)₂である、本発明1040の化合物。

[本発明1042]

R_aが1,3-ジオキソイソインドリン-2-イルである、本発明1001～1010のいずれかの化合物。

[本発明1043]

-Y-R_aがオキシラン-2-イルである、本発明1002～1005のいずれかの化合物。

[本発明1044]

-Y-R_aが1,3-ジオキソラン-4-イルである、本発明1002～1005のいずれかの化合物。

[本発明1045]

R₁が-H、-OH、または-Fである、本発明1001、1002、1004および1005のいずれかの化合物。

[本発明1046]

R₁が-Hである、本発明1045の化合物。

[本発明1047]

R₂が-CNである、本発明1001～1006および1008のいずれかの化合物。

[本発明1048]

R₂が-CF₃である、本発明1001～1006および1008のいずれかの化合物。

[本発明1049]

R₂が置換アシル (C₁₋₃) である、本発明1001～1006および1008のいずれかの化合物。

[本発明1050]

R₂が-C(=O)NHS(=O)₂CH₃である、本発明1049の化合物。

[本発明1051]

R₃が存在しない、本発明1001～1003のいずれかの化合物。

[本発明1052]

R₄がメチルである、本発明1001、1002および1004のいずれかの化合物。

[本発明1053]

R₄がヒドロキシメチルである、本発明1001、1002および1004のいずれかの化合物。

[本発明1054]

R₄およびR₅がそれぞれメチルである、本発明1001または1002の化合物。

[本発明1055]

R₆およびR₇がそれぞれ水素である、本発明1001または1002の化合物。

[本発明1056]

R₈およびR₉がそれぞれ水素である、本発明1001の化合物。

[本発明1057]

R₁₀およびR₁₁がそれぞれメチルである、本発明1001の化合物。

[本発明1058]

Y、R_a、ならびに炭素番号13、17および18が環を形成し、Yが、アルカンジイル (C₌₁) または置換アルカンジイル (C₌₁) であり、かつR_aが-O-である、本発明1002の化合物。

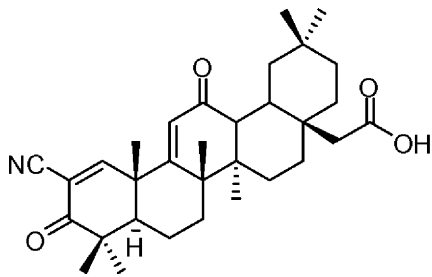
[本発明1059]

炭素9と炭素11との結合が単結合である、本発明1001～1005のいずれかの化合物。

[本発明1060]

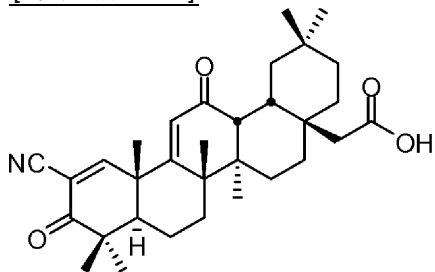
炭素9と炭素11との結合が二重結合である、本発明1001～1005のいずれかの化合物。

[本発明1061]



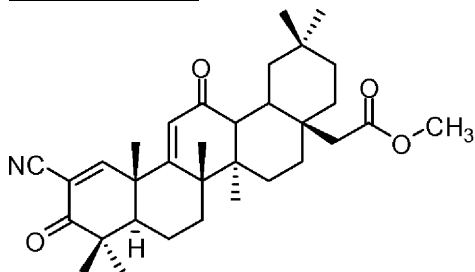
のようにさらに定義される、本発明1001～1007、1015～1020、1026～1030、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1060のいずれかの化合物、または
その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1062]



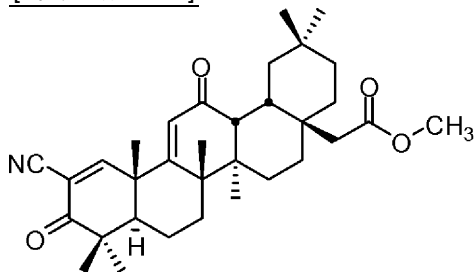
のようにさらに定義される化合物であって、他のその光学異性体を実質的に含まない、本発明1061の化合物、または
その薬学的に許容される塩。

[本発明1063]



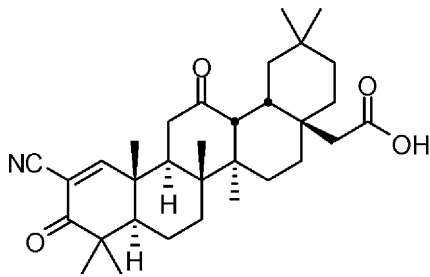
のようにさらに定義される、本発明1001～1007、1015～1030、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1060のいずれかの化合物、または
その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1064]

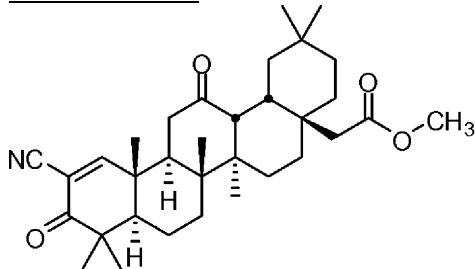


のようにさらに定義される化合物であって、他のその光学異性体を実質的に含まない、本発明1063の化合物、または
その薬学的に許容される塩。

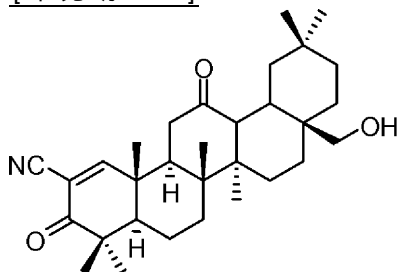
[本発明1065]



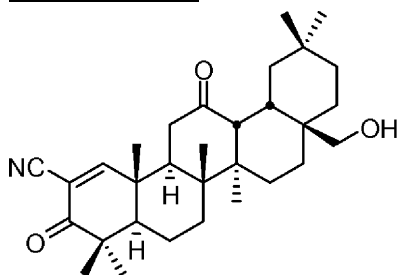
のようにさらに定義される、本発明1013の化合物、または
その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。
[本発明1066]



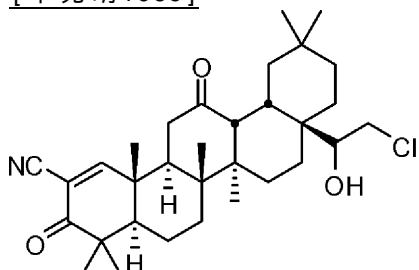
のようにさらに定義される、本発明1013の化合物、または
その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。
[本発明1067]



のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008、1009、1011、1013、1015～1021、
1045～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、または
その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。
[本発明1068]



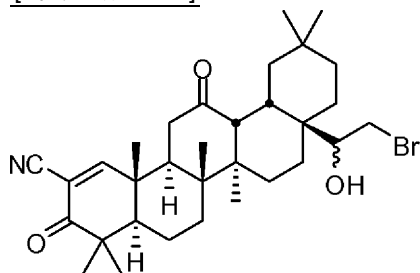
のようにさらに定義される化合物であって、他のその光学異性体を実質的に含まない、本
発明1067の化合物、または
その薬学的に許容される塩。
[本発明1069]



のようにさらに定義される、本発明1023の化合物、または

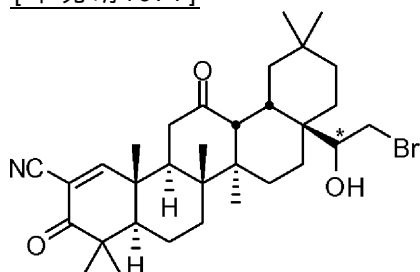
その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1070]



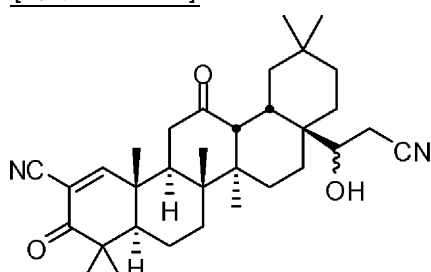
のようにさらに定義される、本発明1023の化合物、または
その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1071]



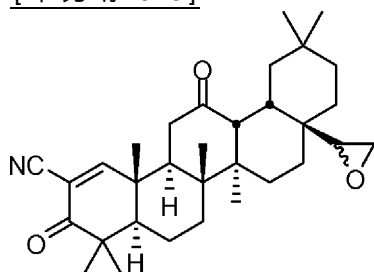
のようにさらに定義される化合物であって、他のその光学異性体を実質的に含まない、本
発明1070の化合物、または
その薬学的に許容される塩。

[本発明1072]



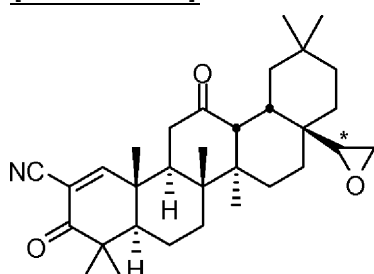
のようにさらに定義される、本発明1022の化合物、または
その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1073]



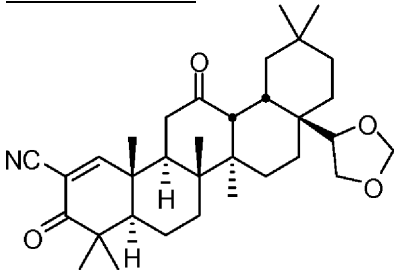
のようにさらに定義される、本発明1043の化合物、または
その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1074]



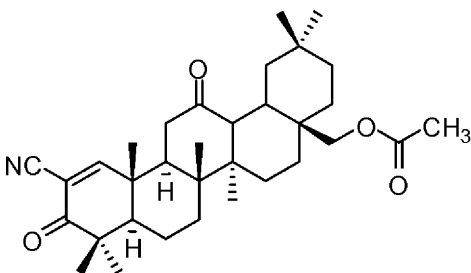
のようにさらに定義される化合物であって、他のその光学異性体を実質的に含まない、本発明1073の化合物、またはその薬学的に許容される塩。

[本発明1075]



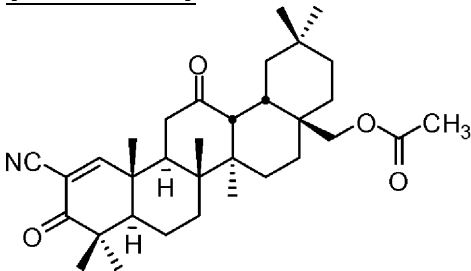
のようにさらに定義される、本発明1044の化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1076]



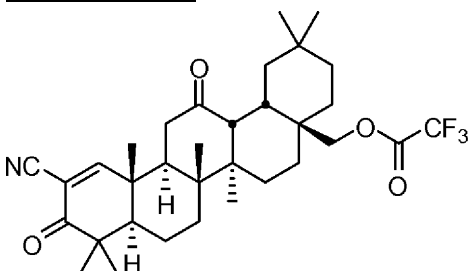
のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008、1009、1011、1013、1015～1020、1032、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1077]



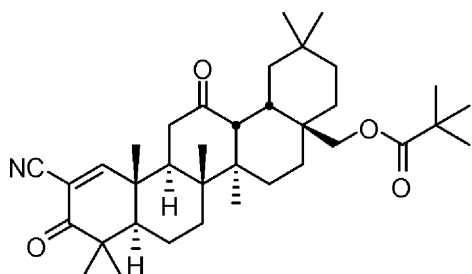
のようにさらに定義される化合物であって、他のその光学異性体を実質的に含まない、本発明1076の化合物、またはその薬学的に許容される塩。

[本発明1078]

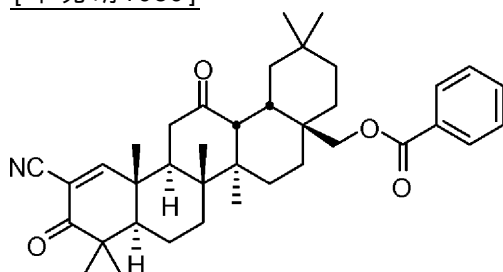


のようにさらに定義される、本発明1032の化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

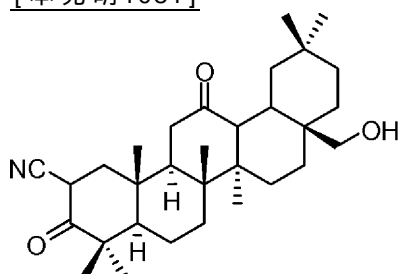
[本発明1079]



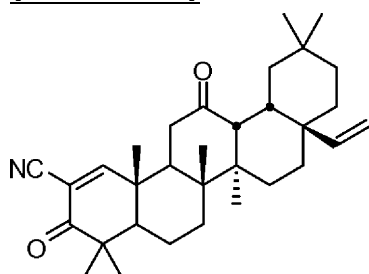
のようにさらに定義される、本発明1031の化合物、または
 その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。
 [本発明1080]



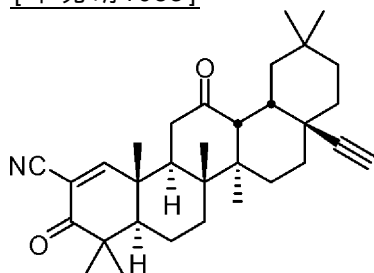
のようにさらに定義される、本発明1033の化合物、または
 その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。
 [本発明1081]



のようにさらに定義される、本発明1001、1002、1010、1015～1021、1045～1047、1051、
 1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、または
 その塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。
 [本発明1082]



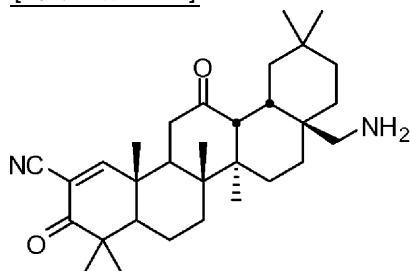
のようにさらに定義される、本発明1001、1002、1004、1005、1019、1020、1045～1047、
 1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、または
 その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。
 [本発明1083]



のようにさらに定義される、本発明1025の化合物、または

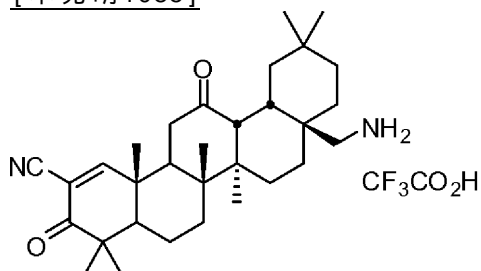
その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1084]



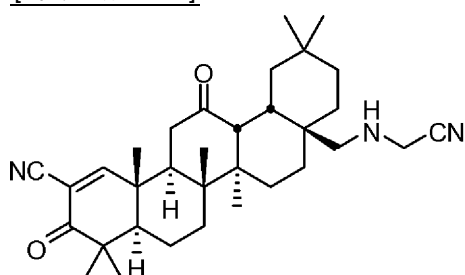
のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008、1009、1015～1020、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1085]



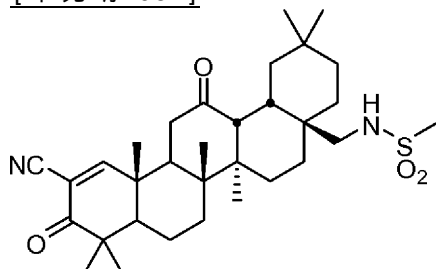
のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008、1009、1015～1020、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、またはその水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1086]



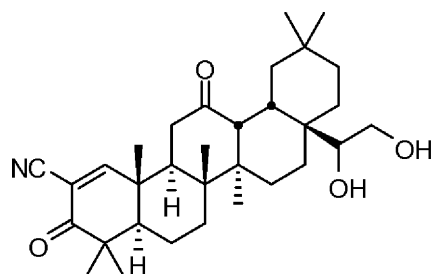
のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008、1009、1014～1020、1036～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1087]



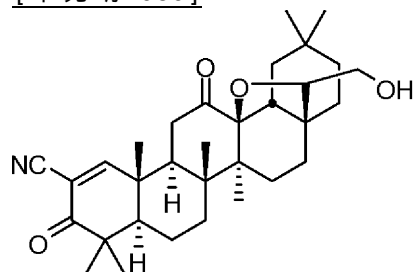
のようにさらに定義される、本発明1001～1004、1014～1020、1036、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1088]



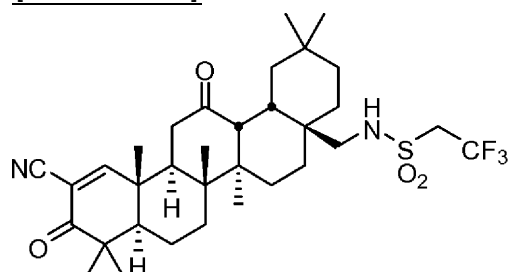
のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008、1015、1019、1020、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1089]



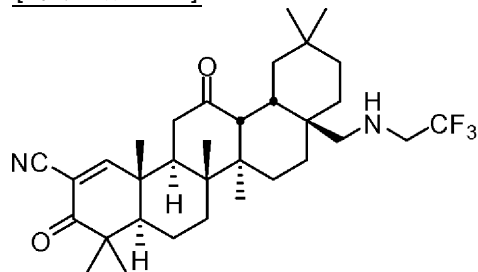
のようにさらに定義される、本発明1001、1019、1020、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1090]



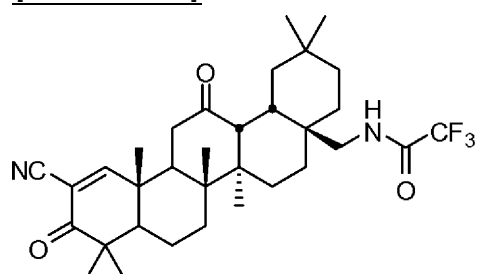
のようにさらに定義される、本発明1001～1004、1014～1020、1034～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1091]



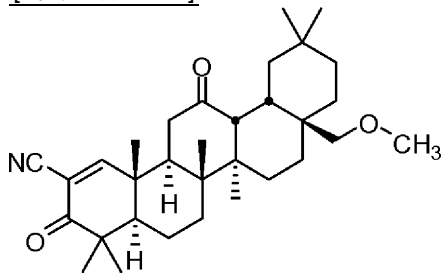
のようにさらに定義される、本発明1014の化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1092]



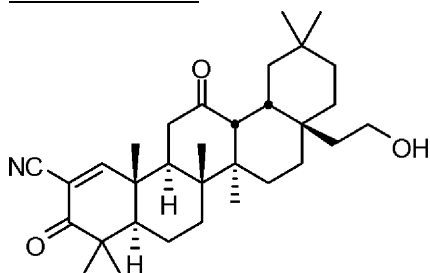
のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008、1009、1013、1015～1020、1034～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1093]



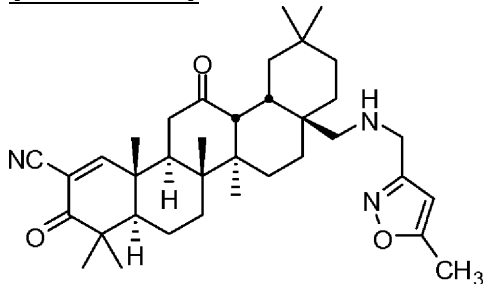
のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008～1010、1015～1020、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1094]



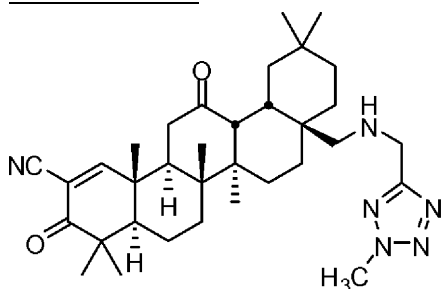
のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008、1009、1015～1020、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1095]



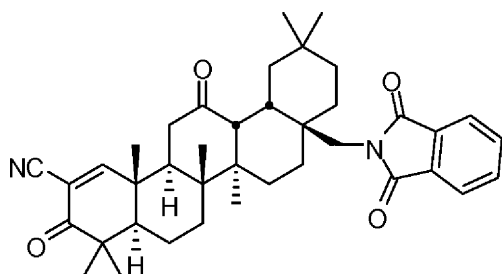
のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008～1010、1014～1020、1036～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1096]

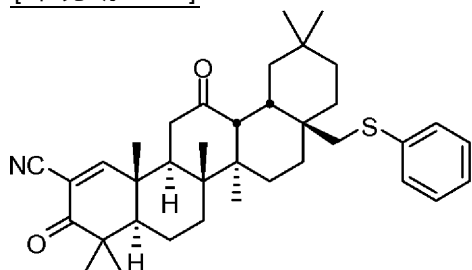


のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008～1010、1014～1020、1036～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

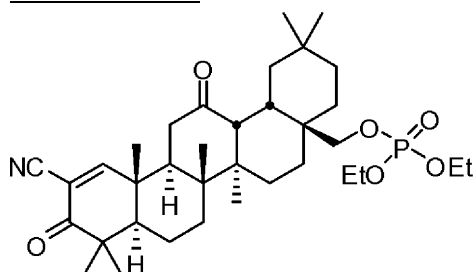
[本発明1097]



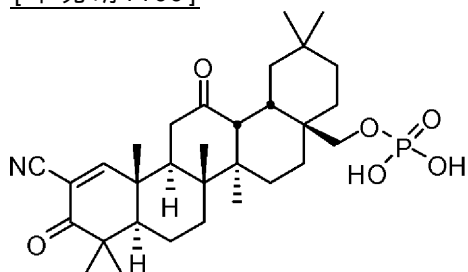
のようにさらに定義される、本発明1044の化合物、または
その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。
[本発明1098]



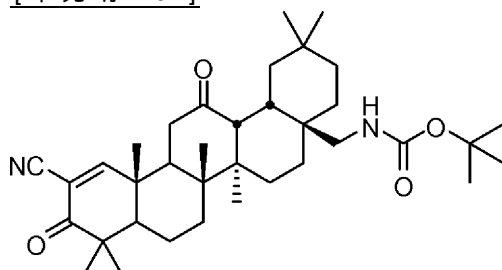
のようにさらに定義される、本発明1001、1002、1015～1020、1045～1047、1051、1052、
1054、1055および1059のいずれかの化合物、または
その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。
[本発明1099]



のようにさらに定義される、本発明1041の化合物、または
その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。
[本発明1100]



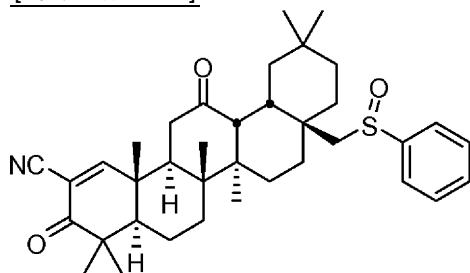
のようにさらに定義される、本発明1038の化合物、または
その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。
[本発明1101]



のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008、1009、1014～1020、1045～1047、
1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、または

その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

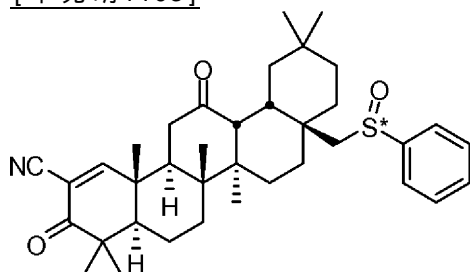
[本発明1102]



のようにさらに定義される、本発明1037の化合物、または

その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1103]

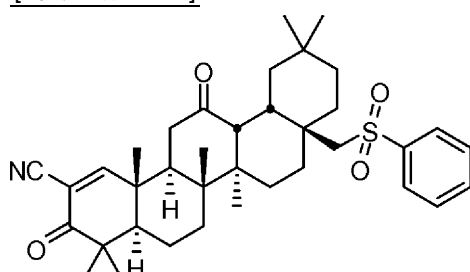


のようにさらに定義される化合物であって、他のその光学異性体を実質的に含まない、本

発明1102の化合物、または

その薬学的に許容される塩。

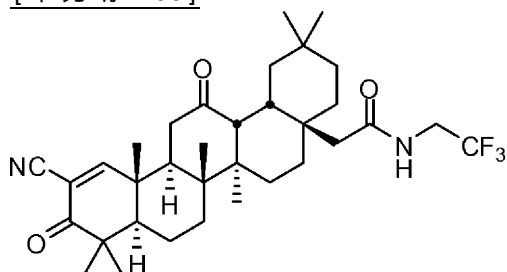
[本発明1104]



のようにさらに定義される、本発明1037の化合物、または

その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1105]



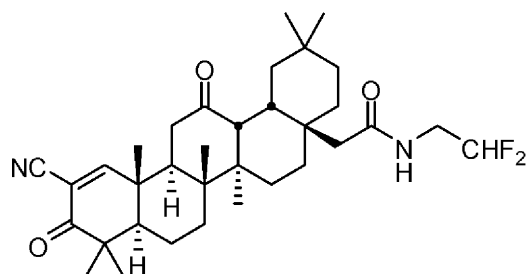
のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008、1009、1011、1013、1015～1020、

1026～1030、1034、1035、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの

化合物、または

その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

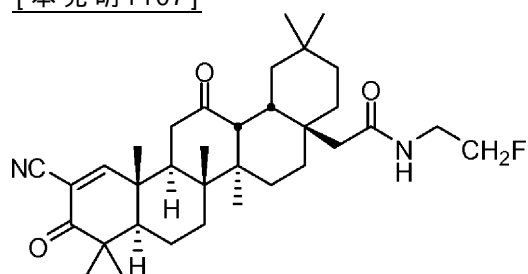
[本発明1106]



のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008、1009、1011、1013、1015～1020、1026～1029、1034、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、または

その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

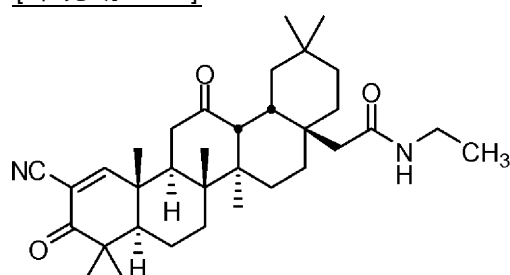
[本発明1107]



のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008、1009、1011、1013、1015～1020、1026～1029、1034、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、または

その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

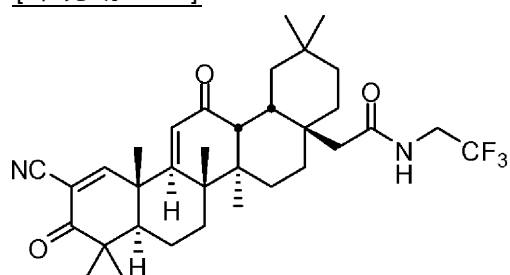
[本発明1108]



のようにさらに定義される、本発明1001～1005、1008、1009、1011、1013、1015～1020、1026～1030、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1059のいずれかの化合物、または

その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

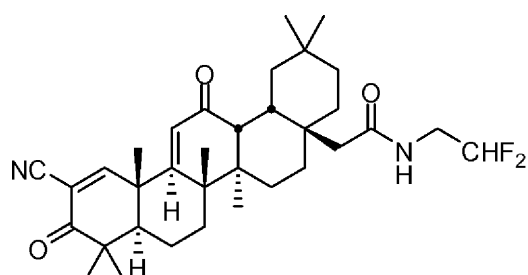
[本発明1109]



のようにさらに定義される、本発明1001～1007、1011、1013、1015～1020、1026～1030、1034、1035、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1060のいずれかの化合物、または

その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

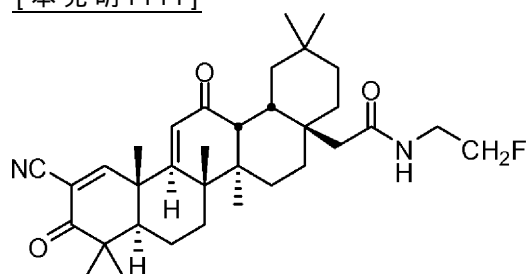
[本発明1110]



のようにさらに定義される、本発明1001～1007、1011、1013、1011、1013、1015～1020、1026～1029、1034、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1060のいずれかの化合物、または

その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

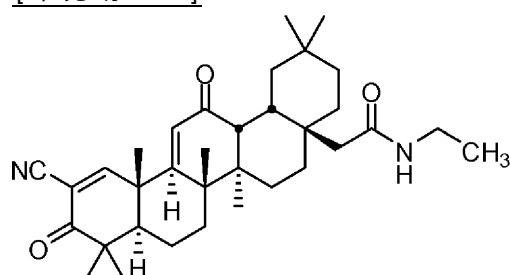
[本発明1111]



のようにさらに定義される、本発明1001～1007、1011、1013、1011、1013、1015～1020、1026～1029、1034、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1060のいずれかの化合物、または

その薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1112]



のようにさらに定義される、本発明1001～1007、1011、1013、1015～1020、1026～1030、1034、1045～1047、1051、1052、1054、1055および1060のいずれかの化合物、またはその薬学的に許容される塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1113]

以下からなる群より選択される化合物：

メチル-2-((4aR,6aR,6bS,8aR,12aS,14aR,14bS)-11-シアノ-2,2,6a,6b,9,9,12a-ヘプタメチル-10,14-ジオキソ-1,2,3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,12a,14,14a,14b-オクタデカヒドロピセン-4a-イル)アセテート、

2-((4aR,6aR,6bS,8aR,12aS,14aR,14bS)-11-シアノ-2,2,6a,6b,9,9,12a-ヘプタメチル-10,14-ジオキソ-1,2,3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,12a,14,14a,14b-オクタデカヒドロピセン-4a-イル)酢酸、

(4aR,6aR,6bR,8aS,12aS,12bR,14bR)-8a-(ヒドロキシメチル)-4,4,6a,6b,11,11,14b-ヘプタメチル-3,13-ジオキソ-3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,11,12,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、

((4aS,6aR,6bR,8aR,12aR,14aR,14bS)-11-シアノ-2,2,6a,6b,9,9,12a-ヘプタメチル-10,14-ジオキソ-1,2,3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-4a-イル)酢酸メチル、

(6aR,6bR,8aR,12aS,12bR,14bR)-4,4,6a,6b,11,11,14b-ヘプタメチル-3,13-ジオキソ-8a-ビニル-3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,11,12,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセ

ン-2-カルボニトリル、

(6aR,6bR,8aS,12aS,12bR,14bR)-8a-(アミノメチル)-4,4,6a,6b,11,11,14b-ヘプタメチル-3,13-ジオキソ-3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,11,12,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、

(6aR,6bR,8aS,12aS,12bR,14bR)-8a-(アミノメチル)-4,4,6a,6b,11,11,14b-ヘプタメチル-3,13-ジオキソ-3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,11,12,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒ

ドロピセン-2-カルボニトリルトリフルオロ酢酸塩、

(4aR,6aR,6bR,8aS,12aS,12bR,14aR,14bR)-8a-((シアノメチルアミノ)メチル)-4,4,6a,6b,11,11,14b-ヘプタメチル-3,13-ジオキソ-3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,11,12,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、

N-(((4aS,6aR,6bR,12aR,14aR,14bS)-11-シアノ-2,2,6a,6b,9,9,12a-ヘプタメチル-10,14-ジオキソ-1,2,3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-4a-イル)メチル)メタンスルホンアミド、

(4aR,6aR,6bR,8aS,12aS,12bR,14aR,14bR)-8a-((R)-1,2-ジヒドロキシエチル)-4,4,6a,6b,11,11,14b-ヘプタメチル-3,13-ジオキソ-3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,11,12,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、

N-(((4aS,6aR,6bR,8aR,12aR,12bR,14aR,14bS)-11-シアノ-2,2,6a,6b,9,9,12a-ヘプタメチル-10,14-ジオキソ-1,2,3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-4a-イル)メチル)-2,2,2-トリフルオロエタンスルホンアミド、

N-(((4aS,6aR,6bR,12aR,14aR,14bS)-11-シアノ-2,2,6a,6b,9,9,12a-ヘプタメチル-10,14-ジオキソ-1,2,3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-4a-イル)メチル)-2,2,2-トリフルオロアセトアミド、

(4aR,6aR,6bR,8aS,12aS,12bR,14aR,14bR)-8a-(メトキシメチル)-4,4,6a,6b,11,11,14b-ヘプタメチル-3,13-ジオキソ-3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,11,12,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、

(4aR,6aR,6bR,8aR,12aS,12bR,14aR,14bR)-8a-(2-ヒドロキシエチル)-4,4,6a,6b,11,11,14b-ヘプタメチル-3,13-ジオキソ-3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,11,12,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、

(4aR,6aR,6bR,8aS,12aS,12bR,14aR,14bR)-4,4,6a,6b,11,11,14b-ヘプタメチル-8a-(((5-メチルイソキサゾール-3-イル)メチルアミノ)メチル)-3,13-ジオキソ-3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,11,12,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、

(4aR,6aR,6bR,8aS,12aS,12bR,14aR,14bR)-4,4,6a,6b,11,11,14b-ヘプタメチル-8a-(((2-メチル-2H-テトラゾール-5-イル)メチルアミノ)メチル)-3,13-ジオキソ-3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,11,12,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、

(4aR,6aR,6bR,8aS,12aS,12bR,14aR,14bR)-4,4,6a,6b,11,11,14b-ヘプタメチル-3,13-ジオキソ-8a-(フェニルチオメチル)-3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,11,12,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、

((4aS,6aR,6bR,8aR,12aR,12bR,14aR,14bS)-11-シアノ-2,2,6a,6b,9,9,12a-ヘプタメチル-10,14-ジオキソ-1,2,3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-4a-イル)メチルジエチルホスフェート、

tert-ブチル((4aS,6aR,6bR,12aR,14aR,14bS)-11-シアノ-2,2,6a,6b,9,9,12a-ヘプタメチル-10,14-ジオキソ-1,2,3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-4a-イル)メチルカルバメート、

(4aR,6aR,6bR,8aS,12aS,12bR,14aR,14bR)-4,4,6a,6b,11,11,14b-ヘプタメチル-3,13-ジオキソ-8a-(フェニルスルフィニルメチル)-3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,11,12,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、

(4aR,6aR,6bR,8aS,12aS,12bR,14aR,14bR)-4,4,6a,6b,11,11,14b-ヘプタメチル-3,13-ジオキソ-8a-(フェニルスルホニルメチル)-3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,11,12,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、

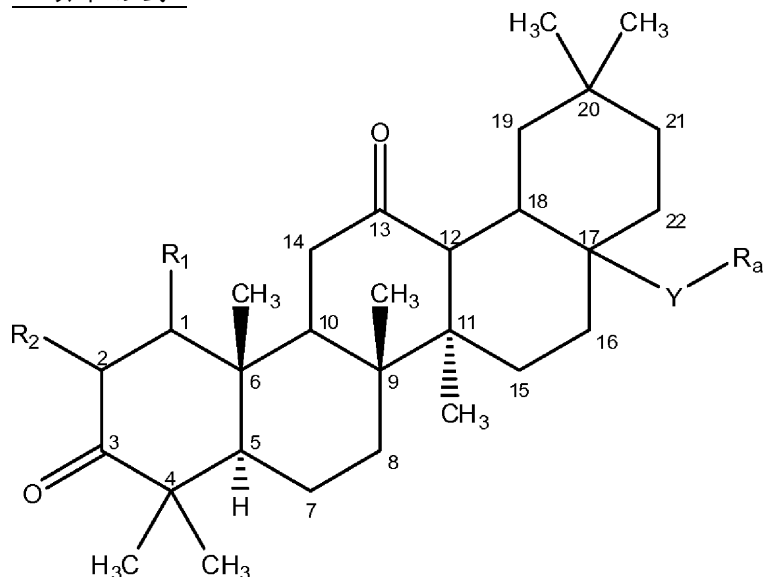
((4aS,6aR,6bR,8aR,12aR,12bR,14aR,14bS)-11-シアノ-2,2,6a,6b,9,9,12a-ヘプタメチル-

10, 14- ジオキソ-1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-4a-イル)メチル二水素ホスフェート、
(4aR, 6aR, 6bR, 8aS, 12aS, 12bR, 14aR, 14bR) -4, 4, 6a, 6b, 11, 11, 14b- ヘプタメチル-3, 13- ジオキソ-8a- ((2, 2, 2-トリフルオロエチルアミノ)メチル)-3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 11, 12, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、
(4aR, 6aR, 6bR, 8aS, 12aS, 12bR, 14aR, 14bR) -4, 4, 6a, 6b, 11, 11, 14b- ヘプタメチル-8a- ((R)-オキシラン-2-イル)-3, 13-ジオキソ-3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 11, 12, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、
(4aR, 6aR, 6bR, 8aS, 12aS, 12bR, 14aR, 14bR) -8a- ((1, 3-ジオキソイソインドリン-2-イル)メチル)-4, 4, 6a, 6b, 11, 11, 14b- ヘプタメチル-3, 13-ジオキソ-3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 11, 12, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、
(4aR, 6aR, 6bR, 8aS, 12aS, 12bR, 14aR, 14bR) -8a- ((R)-2-プロモ-1-ヒドロキシエチル)-4, 4, 6a, 6b, 11, 11, 14b- ヘプタメチル-3, 13-ジオキソ-3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 11, 12, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、
(4aR, 6aR, 6bR, 8aS, 12aS, 12bR, 14aR, 14bR) -8a- ((R)-2-クロロ-1-ヒドロキシエチル)-4, 4, 6a, 6b, 11, 11, 14b- ヘプタメチル-3, 13-ジオキソ-3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 11, 12, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、
(4aR, 6aR, 6bR, 8aS, 12aS, 12bR, 14aR, 14bR) -8a- ((S)-1, 3-ジオキソラン-4-イル)-4, 4, 6a, 6b, 11, 11, 14b- ヘプタメチル-3, 13-ジオキソ-3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 11, 12, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、
(4aR, 6aR, 6bR, 8aS, 12aS, 12bR, 14aR, 14bR) -4, 4, 6a, 6b, 11, 11, 14b- ヘプタメチル-3, 13-ジオキソ-8a- (フェニルスルフィニルメチル)-3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 11, 12, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、
((4aS, 6aR, 6bR, 8aR, 12aR, 12bR, 14aR, 14bS) -11-シアノ-2, 2, 6a, 6b, 9, 9, 12a-ヘプタメチル-10, 14-ジオキソ-1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-4a-イル)メチル2, 2, 2-トリフルオロアセテート、
((4aS, 6aR, 6bR, 8aR, 12aR, 12bR, 14aR, 14bS) -11-シアノ-2, 2, 6a, 6b, 9, 9, 12a-ヘプタメチル-10, 14-ジオキソ-1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-4a-イル)メチルピバレート、
((4aS, 6aR, 6bR, 8aR, 12aR, 12bR, 14aR, 14bS) -11-シアノ-2, 2, 6a, 6b, 9, 9, 12a-ヘプタメチル-10, 14-ジオキソ-1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-4a-イル)メチルベンゾエート、
(4aR, 6aR, 6bR, 8aS, 12aS, 12bR, 14aR, 14bR) -8a- (2-シアノ-1-ヒドロキシエチル)-4, 4, 6a, 6b, 11, 11, 14b- ヘプタメチル-3, 13-ジオキソ-3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 11, 12, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、
(4aR, 6aR, 6bR, 8aS, 12aS, 12bR, 14aR, 14bR) -8a- エチニル-4, 4, 6a, 6b, 11, 11, 14b- ヘプタメチル-3, 13-ジオキソ-3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 11, 12, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-2-カルボニトリル、
2- ((4aR, 6aR, 6bR, 8aR, 12aR, 12bR, 14aR, 14bS) -11-シアノ-2, 2, 6a, 6b, 9, 9, 12a-ヘプタメチル-10, 14-ジオキソ-1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-4a-イル)酢酸、
メチル2- ((4aR, 6aR, 6bR, 8aR, 12aR, 12bR, 14aR, 14bS) -11-シアノ-2, 2, 6a, 6b, 9, 9, 12a-ヘプタメチル-10, 14-ジオキソ-1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-4a-イル)アセテート、
2- ((4aR, 6aR, 6bR, 8aR, 12aR, 12bR, 14aR, 14bS) -11-シアノ-2, 2, 6a, 6b, 9, 9, 12a-ヘプタメチル-10, 14-ジオキソ-1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-4a-イル)-N-エチルアセトアミド、
2- ((4aR, 6aR, 6bR, 8aR, 12aR, 12bR, 14aR, 14bS) -11-シアノ-2, 2, 6a, 6b, 9, 9, 12a-ヘプタメチル-10, 14-ジオキソ-1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 6a, 6b, 7, 8, 8a, 9, 10, 12a, 12b, 13, 14, 14a, 14b- イコサヒドロピセン-4a-イル)-N-(2-フルオロエチル)アセトアミド、

2-((4aR,6aR,6bR,8aR,12aR,12bR,14aR,14bS)-11-シアノ-2,2,6a,6b,9,9,12a-ヘプタメチル-10,14-ジオキソ-1,2,3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-4a-イル)-N-(2,2-ジフルオロエチル)アセトアミド、および
 2-((4aR,6aR,6bR,8aR,12aR,12bR,14aR,14bS)-11-シアノ-2,2,6a,6b,9,9,12a-ヘプタメチル-10,14-ジオキソ-1,2,3,4,4a,5,6,6a,6b,7,8,8a,9,10,12a,12b,13,14,14a,14b-イコサヒドロピセン-4a-イル)-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)アセトアミド。

[本発明1114]

以下の式：



の化合物、あるいは、その塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、または光学異性体：

式中、

Yは、アルカンジイル(C₈)、アルケンジイル(C₈)、アルキンジイル(C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R_aは、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ニトロ、シアノ、アジド、メルカプト、もしくはシリル；または

アルキル(C₁₂)、アルケニル(C₁₂)、アルキニル(C₁₂)、アリール(C₁₂)、アラルキル(C₁₂)、ヘテロアリール(C₁₂)、ヘテロアラルキル(C₁₂)、アシル(C₁₂)、アルコキシ(C₁₂)、アルケニルオキシ(C₁₂)、アルキニルオキシ(C₁₂)、アリールオキシ(C₁₂)、アラルコキシ(C₁₂)、ヘテロアリールオキシ(C₁₂)、ヘテロアラルコキシ(C₁₂)、アシルオキシ(C₁₂)、アルキルアミノ(C₁₂)、ジアルキルアミノ(C₁₂)、アルケニルアミノ(C₁₂)、アルキニルアミノ(C₁₂)、アリールアミノ(C₁₂)、アラルキルアミノ(C₁₂)、ヘテロアリールアミノ(C₁₂)、ヘテロアラルキルアミノ(C₁₂)、アルキルスルホニルアミノ(C₁₂)、アミド(C₁₂)、アルキルチオ(C₁₂)、アルケニルチオ(C₁₂)、アルキニルチオ(C₁₂)、アリールチオ(C₁₂)、アラルキルチオ(C₁₂)、ヘテロアリールチオ(C₁₂)、ヘテロアラルキルチオ(C₁₂)、アシルチオ(C₁₂)、チオアシル(C₁₂)、アルキルスルホニル(C₁₂)、アルケニルスルホニル(C₁₂)、アルキニルスルホニル(C₁₂)、アリールスルホニル(C₁₂)、アラルキルスルホニル(C₁₂)、アルキルアンモニウム(C₁₂)、アルキルスルホニウム(C₁₂)、アルキルシリル(C₁₂)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R₁は、

水素、シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

アルキル(C₈)、アルケニル(C₈)、アルキニル(C₈)、アリール(C₈)、アラルキル(C₈)、ヘテロアリール(C₈)、ヘテロアラルキル(C₈)、アシル(C₈)、

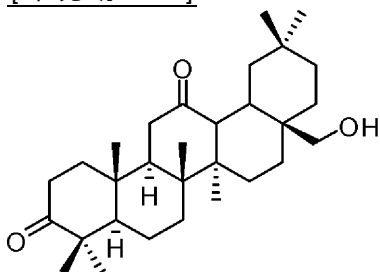
8)、アルコキシ(C₈)、アリールオキシ(C₈)、アシルオキシ(C₈)、アルキルアミノ(C₈)、アリールアミノ(C₈)、アミド(C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり;

R₂は、

シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ;または

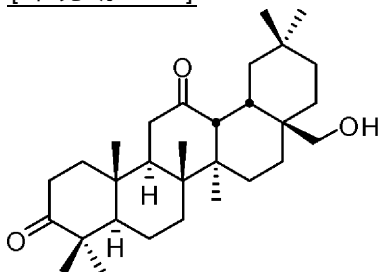
フルオロアルキル(C₈)、アルケニル(C₈)、アルキニル(C₈)、アリール(C₈)、ヘテロアリール(C₈)、アシル(C₈)、アルコキシ(C₈)、アリールオキシ(C₈)、アシルオキシ(C₈)、アルキルアミノ(C₈)、アリールアミノ(C₈)、アミド(C₈)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型である。

[本発明1115]



のようにさらに定義される、本発明1114の化合物、またはその塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

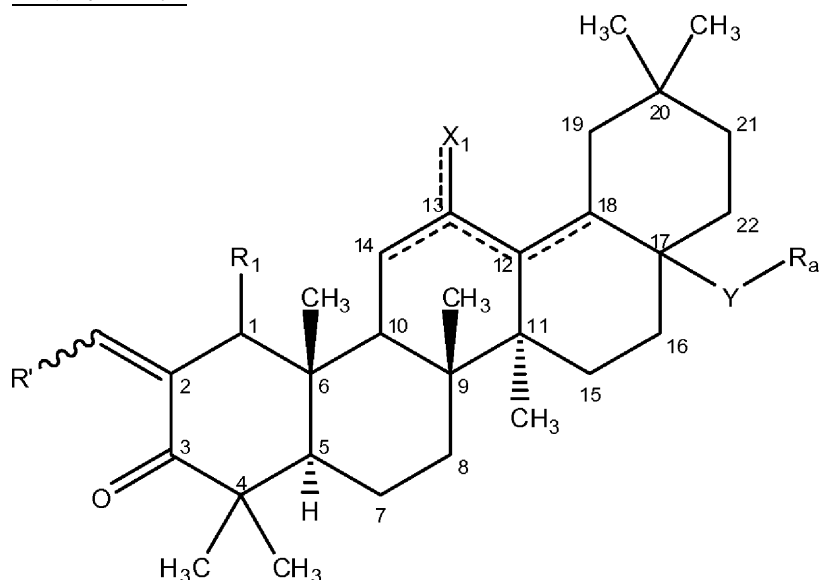
[本発明1116]



のようにさらに定義される化合物であって、他のその光学異性体を実質的に含まない、本発明1114の化合物。

[本発明1117]

以下の式:



の化合物、あるいは、その塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、または光学異性体:

式中、

Yは、アルカンジイル(C₈)、アルケンジイル(C₈)、アルキンジイル(C₈)、

もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R_a は、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ニトロ、シアノ、アジド、メルカプト、もしくはシリル；または

アルキル_(C 12)、アルケニル_(C 12)、アルキニル_(C 12)、アリーール_(C 12)、アラルキル_(C 12)、ヘテロアリーール_(C 12)、ヘテロアラルキル_(C 12)、アシル_(C 12)、アルコキシ_(C 12)、アルケニルオキシ_(C 12)、アルキニルオキシ_(C 12)、アリーールオキシ_(C 12)、アラルコキシ_(C 12)、ヘテロアリーールオキシ_(C 12)、ヘテロアラルコキシ_(C 12)、アシルオキシ_(C 12)、アルキルアミノ_(C 12)、ジアルキルアミノ_(C 12)、アルケニルアミノ_(C 12)、アルキニルアミノ_(C 12)、アリーールアミノ_(C 12)、アラルキルアミノ_(C 12)、ヘテロアリーールアミノ_(C 12)、ヘテロアラルキルアミノ_(C 12)、アルキルスルホニルアミノ_(C 12)、アミド_(C 12)、アルキルチオ_(C 12)、アルケニルチオ_(C 12)、アルキニルチオ_(C 12)、アリーールチオ_(C 12)、アラルキルチオ_(C 12)、ヘテロアリーールチオ_(C 12)、ヘテロアラルキルチオ_(C 12)、アシルチオ_(C 12)、チオアシル_(C 12)、アルキルスルホニル_(C 12)、アルケニルスルホニル_(C 12)、アルキニルスルホニル_(C 12)、アリーールスルホニル_(C 12)、アラルキルスルホニル_(C 12)、アルキルアンモニウム_(C 12)、アルキルスルホニウム_(C 12)、アルキルシリル_(C 12)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

X_1 は、 OR_b 、 NR_bR_c 、または SR_b であり、ここで、 R_b および R_c はそれぞれ独立して、

水素；

アルキル_(C 8)、アリーール_(C 8)、アラルキル_(C 8)、アシル_(C 8)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；あるいは

但し、 R_b は、それが結合する原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、 R_b が存在しない場合には、それが結合する原子は二重結合の一部であり；かつ

R_1 は、

水素、シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

アルキル_(C 8)、アルケニル_(C 8)、アルキニル_(C 8)、アリーール_(C 8)、アラルキル_(C 8)、ヘテロアリーール_(C 8)、ヘテロアラルキル_(C 8)、アシル_(C 8)、アルコキシ_(C 8)、アリーールオキシ_(C 8)、アシルオキシ_(C 8)、アルキルアミノ_(C 8)、アリーールアミノ_(C 8)、アミド_(C 8)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R' は、ヒドロキシ、アルコキシ_(C 12)、置換アルコキシ_(C 12)、アリーールオキシ_(C 12)、置換アリーールオキシ_(C 12)、アラルコキシ_(C 12)、置換アラルコキシ_(C 12)、アシルオキシ_(C 12)、または置換アシルオキシ_(C 12)である。

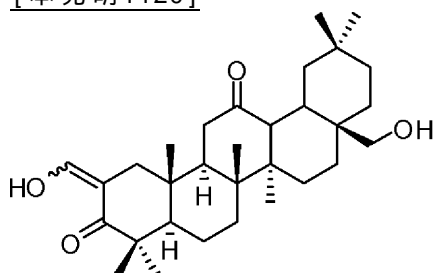
[本発明1118]

R' がアセチルオキシである、本発明1117の化合物。

[本発明1119]

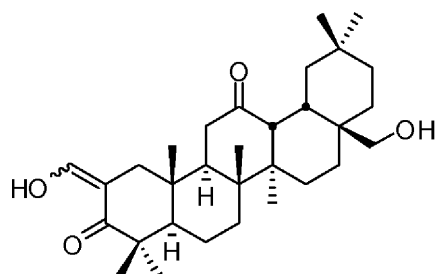
R' がヒドロキシである、本発明1117の化合物。

[本発明1120]



のようにさらに定義される、本発明1119の化合物、またはその塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

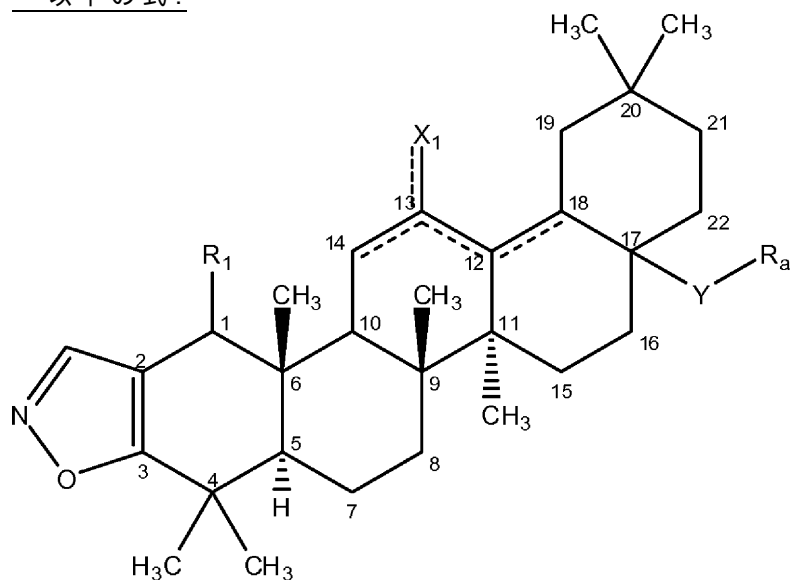
[本発明1121]



のようにさらに定義される化合物であって、他のその光学異性体を実質的に含まない、本発明1120の化合物。

[本発明1122]

以下の式：



の化合物、あるいは、その塩、エステル、水和物、溶媒和物、互変異性体、または光学異性体：

式中、

Yは、アルカンジイル (C_{8})、アルケンジイル (C_{8})、アルキンジイル (C_{8})、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

R_a は、

水素、ヒドロキシ、ハロ、アミノ、ニトロ、シアノ、アジド、メルカプト、もしくはシリル；または

アルキル (C_{12})、アルケニル (C_{12})、アルキニル (C_{12})、アリール (C_{12})、アラルキル (C_{12})、ヘテロアリール (C_{12})、ヘテロアラルキル (C_{12})、アシル (C_{12})、アルコキシ (C_{12})、アルケニルオキシ (C_{12})、アルキニルオキシ (C_{12})、アリールオキシ (C_{12})、アラルコキシ (C_{12})、ヘテロアリールオキシ (C_{12})、ヘテロアラルコキシ (C_{12})、アシルオキシ (C_{12})、アルキルアミノ (C_{12})、ジアルキルアミノ (C_{12})、アルケニルアミノ (C_{12})、アルキニルアミノ (C_{12})、アリールアミノ (C_{12})、アラルキルアミノ (C_{12})、ヘテロアリールアミノ (C_{12})、ヘテロアラルキルアミノ (C_{12})、アルキルスルホニルアミノ (C_{12})、アミド (C_{12})、アルキルチオ (C_{12})、アルケニルチオ (C_{12})、アルキニルチオ (C_{12})、アリールチオ (C_{12})、アラルキルチオ (C_{12})、ヘテロアリールチオ (C_{12})、ヘテロアラルキルチオ (C_{12})、アシルチオ (C_{12})、チオアシル (C_{12})、アルキルスルホニル (C_{12})、アルケニルスルホニル (C_{12})、アルキニルスルホニル (C_{12})、アリールスルホニル (C_{12})、アラルキルスルホニル (C_{12})、アルキルアンモニウム (C_{12})、アルキルスルホニウム (C_{12})、アルキルシリル (C_{12})、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；

X_1 は、 OR_b 、 NR_bR_c 、または SR_b であり、ここで、 R_b および R_c はそれぞれ独立して、

水素；

アルキル_(C 8)、アリール_(C 8)、アラルキル_(C 8)、アシル_(C 8)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型であり；あるいは

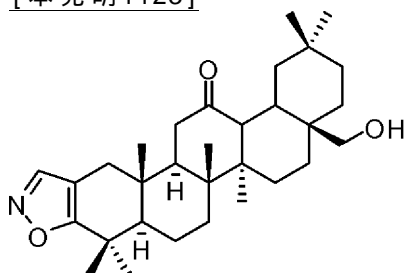
但し、R₆は、それが結合する原子が二重結合の一部である場合には存在せず、さらに、R₆が存在しない場合には、それが結合する原子は二重結合の一部であり；かつ

R₁は、

水素、シアノ、ヒドロキシ、ハロ、もしくはアミノ；または

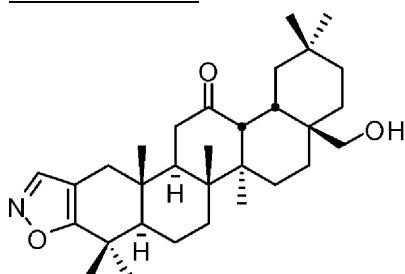
アルキル_(C 8)、アルケニル_(C 8)、アルキニル_(C 8)、アリール_(C 8)、アラルキル_(C 8)、ヘテロアリール_(C 8)、ヘテロアラルキル_(C 8)、アシル_(C 8)、アルコキシ_(C 8)、アリールオキシ_(C 8)、アシルオキシ_(C 8)、アルキルアミノ_(C 8)、アリールアミノ_(C 8)、アミド_(C 8)、もしくはこれらの群のいずれかの置換型である。

[本発明1123]



のようにさらに定義される、本発明1122の化合物、またはその塩、水和物、溶媒和物、互変異性体、もしくは光学異性体。

[本発明1124]



のようにさらに定義される化合物であって、他のその光学異性体を実質的に含まない、本発明1123の化合物。

[本発明1125]

薬学的に許容される塩の形態である、本発明1001～1077および1082～1112のいずれかの化合物。

[本発明1126]

塩ではない、本発明1001～1112のいずれかの化合物。

[本発明1127]

水和物である、本発明1001～1061、1063、1067、1076および1081～1112のいずれかの化合物。

[本発明1128]

水和物ではない、本発明1001～1061、1063、1067、1076および1081～1112のいずれかの化合物。

[本発明1129]

溶媒和物である、本発明1001～1061、1063、1067、1076および1081～1112のいずれかの化合物。

[本発明1130]

溶媒和物ではない、本発明1001～1061、1063、1067、1076および1081～1112のいずれかの化合物。

[本発明1131]

化合物のエステルである、本発明1001～1014のいずれかの化合物。

[本発明1132]

エステルが式のヒドロキシ基とピオチンのカルボン酸基との縮合反応に起因する、本発明1131の化合物。

[本発明1133]

そのエステルではない、本発明1001～1014のいずれかの化合物。

[本発明1134]

立体異性体の混合物として存在する、本発明1001～1061、1063、1067、1076および1081～1105のいずれかの化合物。

[本発明1135]

主に1種類の光学異性体として存在する、本発明1001～1061、1063、1067、1076および1081～1105のいずれかの化合物。

[本発明1136]

1種類の立体異性体として存在する、本発明1001～1061、1063、1067、1076および1081～1105のいずれかの化合物。

[本発明1137]

マクロファージにおけるIFN-誘導性NO産生の阻害に有効であり、さらに、0.2 μ M未満のIC₅₀値を有する、本発明1001～1113のいずれかの化合物。

[本発明1138]

活性成分として本発明1001～1113のいずれかの化合物および薬学的に許容される担体を含む、薬学的組成物。

[本発明1139]

経口投与、脂肪内投与、動脈内投与、関節内投与、頭蓋内投与、皮内投与、病巣内投与、筋肉内投与、鼻腔内投与、眼内投与、心膜内投与、腹腔内投与、胸膜内投与、前立腺内投与、直腸内投与、くも膜下腔内投与、気管内投与、腫瘍内投与、臍帯内投与、腔内投与、静脈内投与、小胞内投与、硝子体内投与、リボソーム投与、局所投与、粘膜投与、経口投与、非経口投与、直腸投与、結膜下投与、皮下投与、舌下投与、局部投与、経頬投与、経皮投与、腔投与、クリームでの投与、脂質組成物での投与、カテーテルを介した投与、洗浄を介した投与、連続注入を介した投与、注入を介した投与、吸入を介した投与、注射を介した投与、局所送達を介した投与、局所灌流を介した投与、標的細胞を直接浸すことを介した投与、またはそれらの任意の組み合わせからなる群より選択される経路による投与に適合させた、本発明1138の薬学的組成物。

[本発明1140]

経口送達用に処方された、本発明1139の組成物。

[本発明1141]

硬カプセルもしくは軟カプセル、錠剤、シロップ剤、懸濁剤、カシェ剤、またはエリキシル剤として処方された、本発明1140の組成物。

[本発明1142]

軟カプセルがゼラチンカプセルである、本発明1141の組成物。

[本発明1143]

保護コーティングをさらに含む、本発明1140の組成物。

[本発明1144]

吸収を遅延する薬剤をさらに含む、本発明1140の組成物。

[本発明1145]

溶解性または分散性を増強する薬剤をさらに含む、本発明1140の組成物。

[本発明1146]

化合物が、リボソーム、油および水エマルジョン、または水および油エマルジョンの中に分散された、本発明1138の組成物。

[本発明1147]

薬学的に有効な量の本発明1001～1113のいずれかの化合物を対象に投与する段階を含む

、治療方法。

[本発明1148]

対象がヒトである、本発明1147の方法。

[本発明1149]

処置を必要とする対象を特定する段階をさらに含む、本発明1147の方法。

[本発明1150]

薬学的に有効な量の本発明1001～1113のいずれかの化合物を対象に投与する段階を含む、対象においてがんを処置する方法。

[本発明1151]

がんが、癌腫、肉腫、リンパ腫、白血病、黒色腫、中皮腫、多発性骨髄腫、または精上皮腫である、本発明1150の方法。

[本発明1152]

がんが、膀胱、血液、骨、脳、乳房、中枢神経系、結腸、子宮内膜、食道、尿生殖器管、頭部、喉頭、肝臓、肺、頸部、卵巣、膵臓、前立腺、脾臓、小腸、大腸、胃、または精巣のがんである、本発明1150の方法。

[本発明1153]

対象が霊長類である、本発明1150の方法。

[本発明1154]

対象がヒトである、本発明1150の方法。

[本発明1155]

処置を必要とする対象を特定する段階をさらに含む、本発明1150の方法。

[本発明1156]

対象ががんの家族歴または患者歴を有する、本発明1155の方法。

[本発明1157]

対象ががんの症状を有する、本発明1150の方法。

[本発明1158]

化合物が局所投与される、本発明1150の方法。

[本発明1159]

腫瘍内に直接注射することによって、または腫瘍脈管構造に注射することによって化合物が投与される、本発明1158の方法。

[本発明1160]

化合物が全身投与される、本発明1150の方法。

[本発明1161]

化合物が、静脈内投与、動脈内投与、筋肉内投与、腹腔内投与、皮下投与、または経口投与される、本発明1160の方法。

[本発明1162]

薬学的に有効な量が0.1～1000mg/kgである、本発明1150の方法。

[本発明1163]

薬学的に有効な量が1日当たり1回の用量で投与される、本発明1162の方法。

[本発明1164]

薬学的に有効な量が1日当たり2回またはそれ以上の用量で投与される、本発明1162の方法。

[本発明1165]

エキスピボでのパージ(purging)中に腫瘍細胞と接触させることによって化合物が投与される、本発明1150の方法。

[本発明1166]

- a) 腫瘍細胞において細胞傷害性を誘導すること；
- b) 腫瘍細胞を死滅させること；
- c) 腫瘍細胞においてアポトーシスを誘導すること；
- d) 腫瘍細胞において分化を誘導すること；または

e)腫瘍細胞における増殖を阻害することを含む、本発明1150の方法。

[本発明1167]

腫瘍細胞が白血病細胞である、本発明1166の方法。

[本発明1168]

腫瘍細胞が、膀胱がん細胞、乳がん細胞、肺がん細胞、結腸がん細胞、前立腺がん細胞、肝臓がん細胞、膵臓がん細胞、胃がん細胞、精巣がん細胞、脳がん細胞、卵巣がん細胞、リンパがん細胞、皮膚がん細胞、脳がん細胞、骨がん細胞、または軟部組織がん細胞である、本発明1166の方法。

[本発明1169]

薬学的に有効な量の第2の薬物の投与、放射線療法、遺伝子療法、および外科手術からなる群より選択される処置をさらに含む、本発明1150の方法。

[本発明1170]

(1)腫瘍細胞と第2の薬物を接触させる前に、腫瘍細胞と化合物を接触させる段階、

(2)腫瘍細胞と化合物を接触させる前に、腫瘍細胞と第2の薬物を接触させる段階、または

(3)腫瘍細胞と化合物および第2の薬物を同時に接触させる段階

をさらに含む、本発明1169の方法。

[本発明1171]

第2の薬物が、抗生物質、抗炎症剤、抗新生物剤、抗増殖剤、抗ウイルス剤、免疫調節剤、または免疫抑制剤である、本発明1169の方法。

[本発明1172]

第2の薬物が、アルキル化剤、アンドロゲン受容体モジュレーター、細胞骨格破壊剤 (cytoskeletal disruptor)、エストロゲン受容体モジュレーター、ヒストン-デアセチラーゼ阻害剤、HMG-CoA還元酵素阻害剤、プレニル-タンパク質トランスフェラーゼ阻害剤、レチノイド受容体モジュレーター、トポイソメラーゼ阻害剤、またはチロシンキナーゼ阻害剤である、本発明1169の方法。

[本発明1173]

第2の薬物が、5-アザシチジン、5-フルオロウラシル、9-cis-レチノイン酸、アクチノマイシンD、アリトレチノイン、オールトランスレチノイン酸、アンナマイシン、アキシチニブ、ベリノスタット、ベバシズマブ、ベキサロテン、ボスチニブ、ブスルファン、カペシタビン、カルボプラチン、カルムスチン、CD437、セジラニブ、セツキシマブ、クロランブシル、シスプラチン、シクロホスファミド、シタラビン、ダカルバジン、ダサチニブ、ダウノルビシン、デシタビン、ドセタキセル、ドラスタチン-10、ドキシフルリジン、ドキシソルピシン、ドキシソルピシン、エピルピシン、エルロチニブ、エトボシド、エトボシド、ゲフィチニブ、ゲムシタビン、ゲムツズマブオゾガマイシン、ヘキサメチルメラミン、イダルビシン、イホスファミド、イマチニブ、イリノテカン、イソトレチノイン、イクサベピロン、ラパチニブ、LBH589、ロムスチン、メクロレタミン、メルファラン、メルカプトプリン、メトトレキサート、マイトマイシン、ミトキサントロン、MS-275、ネラチニブ、ニロチニブ、ニトロソ尿素、オキサリプラチン、バクリタキセル、プリカマイシン、プロカルバジン、セマキサニブ、セムスチン、酪酸ナトリウム、フェニル酢酸ナトリウム、ストレプトゾトシン、スベロイルアニリドヒドロキサム酸、スニチニブ、タモキシフェン、テニボシド、チオテパ (thiopeta)、チオグアニン、トボテカン、TRAIL、トラスツズマブ、トレチノイン、トリコスタチンA、バルプロ酸、バルルピシン、バンデタニブ、ピンブラスチン、ピンクリスチン、ビンデシン、またはビノレルビンである、本発明1169の方法。

[本発明1174]

薬学的に有効な量の本発明1001~1113のいずれかの化合物を対象に投与する段階を含む、対象において炎症性成分を伴う疾患を処置または予防する方法。

[本発明1175]

疾患が狼瘡または関節リウマチである、本発明1174の方法。

[本発明1176]

疾患が炎症性腸疾患である、本発明1174の方法。

[本発明1177]

炎症性腸疾患がクローン病または潰瘍性大腸炎である、本発明1176の方法。

[本発明1178]

炎症性成分を伴う疾患が心血管疾患である、本発明1174の方法。

[本発明1179]

炎症性成分を伴う疾患が糖尿病である、本発明1174の方法。

[本発明1180]

糖尿病が1型糖尿病である、本発明1179の方法。

[本発明1181]

糖尿病が2型糖尿病である、本発明1179の方法。

[本発明1182]

糖尿病に関連する1つまたは複数の合併症も有効に処置する、本発明1179の方法。

[本発明1183]

合併症が、肥満、高血圧、アテローム性動脈硬化症、冠動脈性心疾患、脳卒中、末梢血管疾患、高血圧、腎症、神経障害、筋壊死、網膜症、およびメタボリックシンドローム(シンドロームX)からなる群より選択される、本発明1182の方法。

[本発明1184]

炎症性成分を伴う疾患がメタボリックシンドローム(シンドロームX)である、本発明1174の方法。

[本発明1185]

炎症性成分を伴う疾患が皮膚病である、本発明1174の方法。

[本発明1186]

投与が局部投与または経口投与である、本発明1185の方法。

[本発明1187]

皮膚病が、乾癬、ざ瘡、またはアトピー性皮膚炎である、本発明1185の方法。

[本発明1188]

薬学的に有効な量の本発明1001～1113のいずれかの化合物を対象に投与する段階を含む、対象において心血管疾患を処置または予防する方法。

[本発明1189]

心血管疾患が、アテローム性動脈硬化症、心筋症、先天性心疾患、うっ血性心不全、心筋炎、リウマチ性心疾患、弁疾患、冠動脈疾患、心内膜炎、または心筋梗塞である、本発明1188の方法。

[本発明1190]

薬学的に有効な量の第2の薬物を投与する段階をさらに含む、本発明1188の方法。

[本発明1191]

第2の薬物が、コレステロール降下薬、抗高脂血症剤、カルシウムチャンネル遮断薬、降圧剤、またはHMG-CoA還元酵素阻害剤である、本発明1190の方法。

[本発明1192]

第2の薬物が、アムロジピン、アスピリン、エゼチミブ、フェロジピン、ラシジピン、レルカニジピン、ニカルジピン、ニフェジピン、ニモジピン、ニソルジピン、またはニトレンジピンである、本発明1191の方法。

[本発明1193]

第2の薬物が、アテノロール、ブシンドロール、カルベジロール、クロニジン、ドキサゾシン、インドラミン、ラベタロール、メチルドパ、メトプロロール、ナドロール、オクスプレノロール、フェノキシベンザミン、フェントラミン、ピンドロール、ブラゾシン、プロプラノロール、テラゾシン、チモロール、またはトラゾリンである、本発明1191の方法。

[本 発 明 1194]

第2の薬物がスタチンである、本発明1190の方法。

[本 発 明 1195]

スタチンが、アトルバスタチン、セリバスタチン、フルバスタチン、ロバスタチン、メバスタチン、ピタバスタチン、プラバスタチン、ロスバスタチン、またはシンバスタチンである、本発明1194の方法。

[本 発 明 1196]

薬学的に有効な量の本発明1001～1113のいずれかの化合物を対象に投与する段階を含む、対象において神経変性疾患を処置または予防する方法。

[本 発 明 1197]

神経変性疾患が、パーキンソン病、アルツハイマー病、多発性硬化症(MS)、ハンチントン病、および筋萎縮性側索硬化症からなる群より選択される、本発明1196の方法。

[本 発 明 1198]

神経変性疾患がアルツハイマー病である、本発明1197の方法。

[本 発 明 1199]

神経変性疾患がMSである、本発明1197の方法。

[本 発 明 1200]

MSが、一次進行型、再発寛解型、二次進行型、または進行再発型である、本発明1199の方法。

[本 発 明 1201]

処置が対象の脳または脊髄にあるニューロンの脱髄を抑制する、本発明1199の方法。

[本 発 明 1202]

処置が炎症性脱髄を抑制する、本発明1201の方法。

[本 発 明 1203]

処置が対象の脳または脊髄におけるニューロン軸索の切断を抑制する、本発明1199の方法。

[本 発 明 1204]

処置が対象の脳または脊髄における神経突起の切断を抑制する、本発明1199の方法。

[本 発 明 1205]

処置が対象の脳または脊髄におけるニューロンのアポトーシスを抑制する、本発明1199の方法。

[本 発 明 1206]

処置が対象の脳または脊髄におけるニューロン軸索の再ミエリン化を刺激する、本発明1199の方法。

[本 発 明 1207]

処置がMS発作後に失われた機能を修復する、本発明1199の方法。

[本 発 明 1208]

処置が新たなMS発作を予防する、本発明1199の方法。

[本 発 明 1209]

処置がMS発作に起因する能力障害を予防する、本発明1199の方法。

[本 発 明 1210]

対象が霊長類である、本発明1199の方法。

[本 発 明 1211]

霊長類がヒトである、本発明1210の方法。

[本 発 明 1212]

薬学的に有効な量の本発明1001～1113のいずれかの化合物を対象に投与する段階を含む、対象においてiNOS遺伝子の過剰発現を特徴とする障害を処置または予防する方法。

[本 発 明 1213]

薬学的に有効な量の本発明1001～1113のいずれかの化合物を対象に投与する段階を含む、対象の細胞におけるIFN-誘導性一酸化窒素産生を阻害する方法。

[本発明1214]

薬学的に有効な量の本発明1001～1113のいずれかの化合物を対象に投与する段階を含む、対象においてCOX-2遺伝子の過剰発現を特徴とする障害を治療または予防する方法。

[本発明1215]

薬学的に有効な量の本発明1001～1113のいずれかの化合物を対象に投与する段階を含む、対象において腎/腎臓疾患(RKD)を処置する方法。

[本発明1216]

RKDが毒性傷害に起因する、本発明1215の方法。

[本発明1217]

毒性傷害が造影剤または薬物に起因する、本発明1216の方法。

[本発明1218]

薬物が化学療法剤である、本発明1217の方法。

[本発明1219]

RKDが虚血/再灌流傷害に起因する、本発明1215の方法。

[本発明1220]

RKDが糖尿病または高血圧に起因する、本発明1215の方法。

[本発明1221]

RKDが自己免疫疾患に起因する、本発明1215の方法。

[本発明1222]

RKDが慢性RKDに起因する、本発明1215の方法。

[本発明1223]

RKDが急性RKDに起因する、本発明1215の方法。

[本発明1224]

対象が透析を受けたことがあるか、透析を受けている、本発明1215の方法。

[本発明1225]

対象が腎移植を受けたことがあるか、腎移植を受ける候補である、本発明1215の方法。

[本発明1226]

対象が霊長類である、本発明1215の方法。

[本発明1227]

霊長類がヒトである、本発明1226の方法。

[本発明1228]

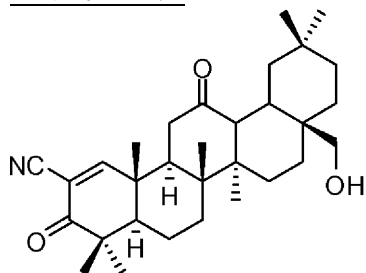
対象が、ウシ、ウマ、イヌ、ネコ、ブタ、マウス、ラット、またはモルモットである、本発明1215の方法。

[本発明1229]

薬学的に有効な量の本発明1001～1113のいずれかの化合物を対象に投与する段階を含む、対象において糸球体濾過率またはクレアチニンクリアランスを改善する方法。

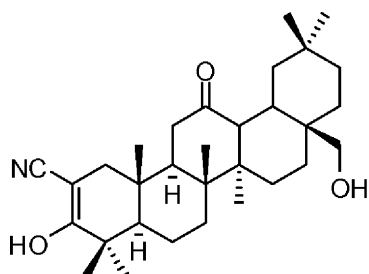
[本発明1230]

以下の式：



の標的化合物を作る方法であって、

以下の式：



の化合物と酸化剤を一組の条件下で反応させて、標的化合物を形成する段階を含む方法。

[本発明1231]

以下を含むキット：

本発明1001～1113のいずれかの化合物；ならびに

化合物の投与の対象となる疾患状態、化合物の保管情報、投薬情報、および化合物の投与法に関する説明を示すものからなる群より選択される1つまたは複数の形態の情報を含む説明書。

[本発明1232]

複数回用量の形態で化合物を含む、本発明1231のキット。

[本発明1233]

本発明1001～1113のいずれかの化合物；および

包装材料

を含む、製造物品。

[本発明1234]

包装材料が、化合物を収容するための容器を含む、本発明1233の製造物品。

[本発明1235]

容器が、化合物の投与の対象となる疾患状態、保管情報、投薬情報、および/または化合物の投与法に関する説明からなる群の1つまたは複数のメンバーを示すラベルを含む、本発明1234の製造物品。

[本発明1236]

化合物を複数回用量の形態で含む、本発明1233の製造物品。

—