

【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 19 年 1 月 25 日 (2007.1.25)

【公表番号】特表 2006-508192 (P2006-508192A)

【公表日】平成 18 年 3 月 9 日 (2006.3.9)

【年通号数】公開・登録公報 2006-010

【出願番号】特願 2005-510253 (P2005-510253)

【国際特許分類】

C 0 7 D 407/10 (2006.01)

A 6 1 K 31/422 (2006.01)

A 6 1 K 31/433 (2006.01)

A 6 1 K 31/4439 (2006.01)

A 6 1 K 31/4545 (2006.01)

A 6 1 K 31/661 (2006.01)

A 6 1 K 31/695 (2006.01)

A 6 1 K 45/00 (2006.01)

A 6 1 P 31/04 (2006.01)

C 0 7 D 413/14 (2006.01)

C 0 7 D 417/14 (2006.01)

C 0 7 F 7/18 (2006.01)

C 0 7 F 9/653 (2006.01)

【F I】

C 0 7 D 407/10 C S P

A 6 1 K 31/422

A 6 1 K 31/433

A 6 1 K 31/4439

A 6 1 K 31/4545

A 6 1 K 31/661

A 6 1 K 31/695

A 6 1 K 45/00

A 6 1 P 31/04

C 0 7 D 413/14

C 0 7 D 417/14

C 0 7 F 7/18 U

C 0 7 F 9/653

【手続補正書】

【提出日】平成 18 年 11 月 24 日 (2006.11.24)

【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

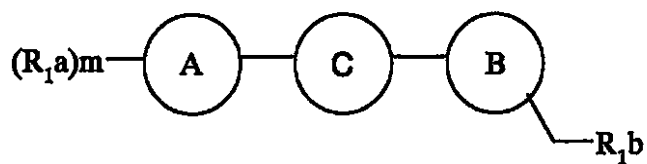
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 (I)

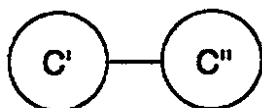
【化 1】



(I)

〔式 (I) 中、C は、ビアリール基 C' - C''〕

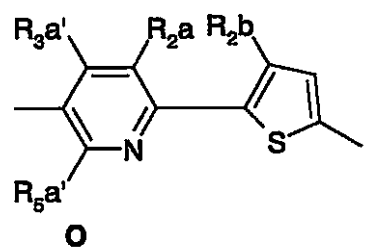
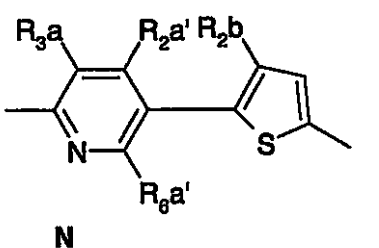
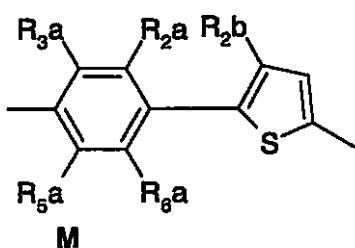
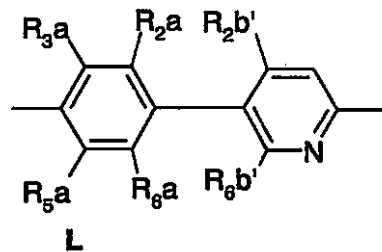
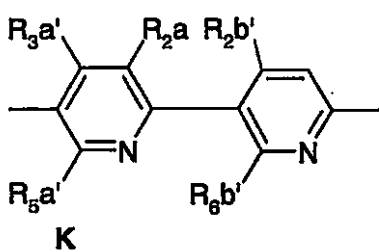
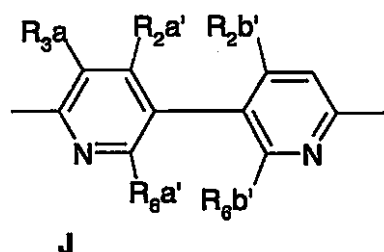
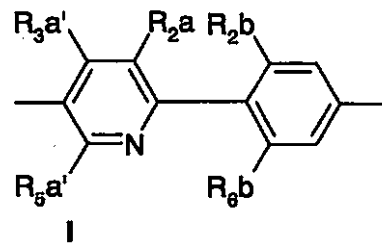
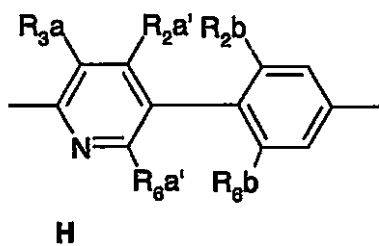
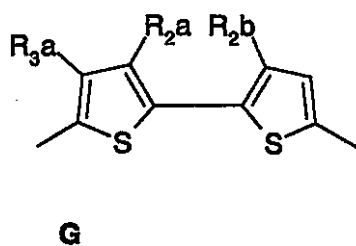
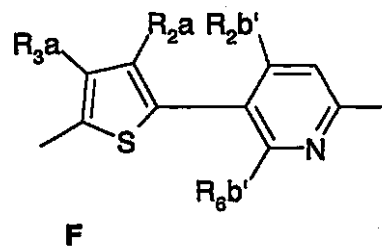
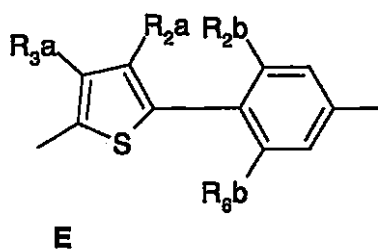
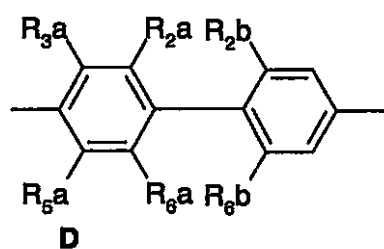
【化 2】



であり、但し、

C' および C'' は、独立して、アリール環またはヘテロアリール環であって、基 C が、下の基 D ~ O

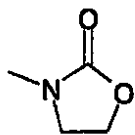
【化 3】



のいずれか一つで表されるような環であり、ここにおいて、基 D ~ O は、環 A および環 B

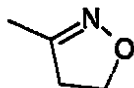
に、示された配向 [(A - C') および (C'' - B)] で結合していて ; ここにおいて、
A および B は、独立して、(i)

【化 4】



および (ii)

【化 5】



より選択され、ここにおいて、

A は、(I) に示されるように、基 C の環 C' に 3 位によって連結していて、そして独立して、(I) に示されるように 4 位および 5 位に、1 個またはそれを超える置換基 - (R₁ a) m で置換されていて ; そして

B は、(I) に示されるように、基 C の環 C'' に 3 位によって連結していて、そして独立して、(I) に示されるように 5 位に、置換基 - CH₂ - R₁ b で置換されていて ;

R₂ b および R₆ b は、独立して、H、F、Cl、OMe、SMe、Me、Et および CF₃ より選択され ;

R₂ b' および R₆ b' は、独立して、H、OMe、Me、Et および CF₃ より選択され ;

R₂ a および R₆ a は、独立して、H、Br ; F、Cl、OMe、SMe ; Me、Et および CF₃ より選択され ;

R₂ a' および R₆ a' は、独立して、H、OMe、SMe ; Me、Et および CF₃ より選択され ;

R₃ a および R₅ a は、独立して、H、(1 - 4 C) アルキル、Br、F、Cl、OH、(1 - 4 C) アルコキシ、- S (O)_n (1 - 4 C) アルキル (式中、n = 0、1 または 2)、アミノ、(1 - 4 C) アルキルカルボニルアミノ -、ニトロ、シアノ、- CHO、- CO (1 - 4 C) アルキル、- CONH₂ および - CONH (1 - 4 C) アルキルより選択され ;

R₃ a'、R₅ a' は、独立して、H、(1 - 4 C) アルキル、OH、(1 - 4 C) アルコキシ、(1 - 4 C) アルキルチオ、アミノ、(1 - 4 C) アルキルカルボニルアミノ -、ニトロ、シアノ、- CHO、- CO (1 - 4 C) アルキル、- CONH₂ および - CONH (1 - 4 C) アルキルより選択され ; ここにおいて、

R₃ a、R₅ a、R₃ a'、R₅ a' の内一つは、環 A の 4 位にある置換基 R₁ a および環 A および環 C' と一緒になって、5 ~ 7 員環を形成してよく ;

いずれの (1 - 4 C) アルキル基も、F、OH、(1 - 4 C) アルコキシ、- S (O)_n (1 - 4 C) アルキル (式中、n = 0、1 または 2) またはシアノで置換されていてよく ;

環 C' がピリジン環である場合 (すなわち、基 C が、基 H、基 I、基 J、基 K、基 N または基 O である場合)、その環窒素は、N - オキシドへと酸化されていてもよく ;

R₁ a は、独立して、下の R₁ a 1 ~ R₁ a 5 :

R₁ a 1 : AR 1、AR 2、AR 2 a、AR 2 b、AR 3、AR 3 a、AR 3 b、AR 4、AR 4 a、CY 1、CY 2 ;

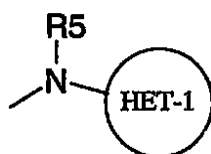
R₁ a 2 : シアノ、カルボキシ、(1 - 4 C) アルコキシカルボニル、- C (= W) N R v R w [式中、W は、O または S であり、R v および R w は、独立して、H または (1 - 4 C) アルキルであり、そしてここにおいて、R v および R w は、それらが結合してい

るアミドまたはチオアミドの窒素と一緒に、5～7員環を形成することができるが、場合により、そのように形成される環の1個の炭素原子の代わりに、N、O、S(O)_nより選択される追加のヘテロ原子を含み；ここにおいて、該環がピペラジン環である場合、その環は、追加の窒素上に、(1-4C)アルキル、(3-6C)シクロアルキル、(1-4C)アルカノイル、-COO(1-4C)アルキル、-S(O)_n(1-4C)アルキル(式中、n=1または2)、-COOAR₁、-CS(1-4C)アルキル)および-C(=S)O(1-4C)アルキルより選択される基で置換されていてもよく；ここにおいて、いずれの(1-4C)アルキル、(1-4C)アルカノイルおよび(3-6C)シクロアルキル置換基も、それ自体、シアノ、ヒドロキシまたはハロで置換されていてもよく、但し、このような置換基は、ピペラジン環の窒素原子に隣接した炭素上ではないという条件付きである]、エテニル、2-(1-4C)アルキルエテニル、2-シアノエテニル、2-シアノ-2-(1-4C)アルキルエテニル、2-ニトロエテニル、2-ニトロ-2-(1-4C)アルキルエテニル、2-(1-4C)アルキルアミノカルボニルエテニル、2-(1-4C)アルコキシカルボニルエテニル、2-(AR₁)エテニル、2-(AR₂)エテニル、2-(AR_{2a})エテニル；

R_{1a3}: (1-10C)アルキル

{ヒドロキシ、(1-10C)アルコキシ、(1-4C)アルコキシ-(1-4C)アルコキシ、(1-4C)アルコキシ-(1-4C)アルコキシ-(1-4C)アルコキシ、(1-4C)アルキルカルボニル、ホスホリル[-O-P(O)(OH)₂]およびそのモノ-およびジ-(1-4C)アルコキシ誘導体]、ホスフィリル[-O-P(OH)₂]およびそのモノ-およびジ-(1-4C)アルコキシ誘導体]およびアミノより各々独立して選択される1個またはそれを超える基(ジェミナル二置換を含めた)で置換されていてもよい；および/またはカルボキシ、ホスホネート[ホスホノ、-P(O)(OH)₂]およびそのモノ-およびジ-(1-4C)アルコキシ誘導体]、ホスフィネート[-P(OH)₂]およびそのモノ-およびジ-(1-4C)アルコキシ誘導体]、シアノ、ハロ、トリフルオロメチル、(1-4C)アルコキシカルボニル、(1-4C)アルコキシ-(1-4C)アルコキシカルボニル、(1-4C)アルコキシ-(1-4C)アルコキシ-(1-4C)アルコキシカルボニル、(1-6C)アルカノイルオキシ(1-4C)アルコキシ、カルボキシ(1-4C)アルコキシ、ハロ(1-4C)アルコキシ、ジハロ(1-4C)アルコキシ、トリハロ(1-4C)アルコキシ、モルホリノエトキシ、(N'-メチル)ピペラジノエトキシ、2-、3-または4-ピリジル(1-6C)アルコキシ、N-メチル(イミダゾ-2または3-イル)(1-4C)アルコキシ、イミダゾ-1-イル(1-6C)アルコキシ、(1-4C)アルキルアミノ、ジ((1-4C)アルキル)アミノ、(1-6C)アルカノイルアミノ、(1-4C)アルコキシカルボニルアミノ、N-(1-4C)アルキル-N-(1-6C)アルカノイルアミノ、-C(=W)NR_vR_w[式中、Wは、OまたはSであり、R_vおよびR_wは、独立して、Hまたは(1-4C)アルキルであり、そしてここにおいて、R_vおよびR_wは、それらが結合しているアミドまたはチオアミドの窒素と一緒に、5～7員環を形成することができるが、場合により、そのように形成される環の1個の炭素原子の代わりに、N、O、S(O)_nより選択される追加のヘテロ原子を含み；ここにおいて、該環がピペラジン環である場合、その環は、追加の窒素上に、(1-4C)アルキル、(3-6C)シクロアルキル、(1-4C)アルカノイル、-COO(1-4C)アルキル、-S(O)_n(1-4C)アルキル(式中、n=1または2)、-COOAR₁、-CS(1-4C)アルキル)および-C(=S)O(1-4C)アルキルより選択される基で置換されていてもよい]、(=NOR_v)(式中、R_vは、本明細書中の前に定義の通りである)、(1-4C)アルキルS(O)_pNH-、(1-4C)アルキルS(O)_p-(1-4C)アルキル)N-、フルオロ(1-4C)アルキルS(O)_pNH-、フルオロ(1-4C)アルキルS(O)_p((1-4C)アルキル)N-、(1-4C)アルキルS(O)_q-、CY₁、CY₂、AR₁、AR₂、AR₃、AR₁-O-、AR₂-O-、AR₃-O-、AR₁-S(O)_q-、AR₂-S(O)_q-、AR₃-S(O)_q-、AR₁-NH-、AR

【化 6】



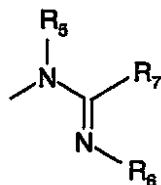
、 (b)

【化 7】



および (c)

【化 8】



より選択され、ここにおいて、

W は、O または S であり；

但し、基 C が、基 H または基 I である場合、そして置換基 R_{2b} および R_{6b} の一方が H であり、もう一方が F である場合、そして置換基 R_{2a} 、 R_{6a} 、 $R_{2a'}$ 、 $R_{6a'}$ 、 R_{3a} 、 R_{5a} 、 $R_{3a'}$ 、 $R_{5a'}$ が全て、各々のところで H である場合、 R_{1b} は $-NHCH(=O)Me$ ではないという条件付きであり；

R_4 は、水素、アミノ、(1-8C)アルキル、(2-6C)アルキル(メチル、クロロ、ブromo、フルオロ、メトキシ、メチルチオ、アジドおよびシアノより独立して選択される1個、2個または3個の置換基で置換される)、メチル(メチル、クロロ、ブromo、フルオロ、メトキシ、メチルチオ、ヒドロキシ、ベンジルオキシ、エチニル、(1-4C)アルコキシカルボニル、アジドおよびシアノより独立して選択される1個、2個または3個の置換基で置換される)、 $-NHR_{12}$ 、 $-N(R_{12})(R_{13})$ 、 $-OR_{12}$ または $-SR_{12}$ 、(2-4C)アルケニル、 $-(1-8C)$ アルキルアリール、モノ-、ジ-、トリ-およびペルハロ(1-8C)アルキル、 $-(CH_2)_p(3-6C)$ シクロアルキルおよび $-(CH_2)_p(3-6C)$ シクロアルケニルより選択され、ここにおいて、p は、0、1または2であり；

R_5 は、水素、(3-6C)シクロアルキル、フェニルオキシカルボニル、tert-ブトキシカルボニル、フルオレニルオキシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、(1-6C)アルキル(シアノまたは(1-4C)アルコキシカルボニルで置換されていてよい)、 $-CO_2R_8$ 、 $-C(=O)R_8$ 、 $-C(=O)SR_8$ 、 $-C(=S)R_8$ 、 $P(O)(OR_9)(OR_{10})$ および $-SO_2R_{11}$ より選択され、ここにおいて、 R_8 、 R_9 、 R_{10} および R_{11} は、本明細書中の下に定義の通りであり；

HET-1 は、HET-1A および HET-1B より選択され、ここにおいて、

HET-1A は、N、O および S より独立して選択される2~4個のヘテロ原子を含有するC連結5員ヘテロアリール環であり；その環は、C原子上に、オキソ基またはチオキソ基で置換されていてよく；および/またはその環は、いずれか利用可能なC原子上に、以下に定義のRTより選択される1個または2個の置換基で、および/または利用可能な窒素原子上に、(その環がそこで第四級化されていないという条件付きで)(1-4C)アルキルで置換されていてよく；

HET-1B は、2個または3個の窒素ヘテロ原子を含有するC連結6員ヘテロアリール環であり、その環は、C原子上に、オキソ基またはチオキソ基で置換されていてよく；および/またはその環は、いずれか利用可能なC原子上に、以下に定義のRTより選択される1個、2個または3個の置換基で、および/または利用可能な窒素原子上に、(その環がそこで第四級化されていないという条件付きで)(1-4C)アルキルで置換されていてよく；

HET-2 は、HET-2A および HET-2B より選択され、ここにおいて、

H E T - 2 A は、N 連結 5 員完全または部分不飽和複素環式環であって、(i) 1 ~ 3 個の追加の窒素ヘテロ原子を含有するかまたは、(ii) O および S より選択される追加のヘテロ原子を任意の追加の窒素ヘテロ原子と一緒に含有する環であり；その環は、連結している N 原子に隣接した C 原子以外の C 原子上に、オキソ基またはチオキソ基で置換されていてよく；および / またはその環は、連結している N 原子に隣接した C 原子以外のいずれか利用可能な C 原子上に、以下に定義の R T より選択される置換基で、および / または連結している N 原子に隣接した N 原子以外の利用可能な窒素原子上に、(その環がそこで第四級化されていないという条件付きで) (1 - 4 C) アルキルで置換されていてよく；

H E T - 2 B は、(連結しているヘテロ原子を含めて) 合計 3 個までの窒素ヘテロ原子を含有する N 連結 6 員ジハロヘテロアリール環であり、その環は、連結している N 原子に隣接した C 原子以外の適する C 原子上に、オキソ基またはチオキソ基で置換されていてよく、および / またはその環は、連結している N 原子に隣接した C 原子以外のいずれか利用可能な C 原子上に、以下に定義の R T より独立して選択される 1 個または 2 個の置換基で、および / または連結している N 原子に隣接した N 原子以外の利用可能な窒素原子上に、(その環がそこで第四級化されていないという条件付きで) (1 - 4 C) アルキルで置換されていてよく；

R T は、次の群による置換基：

(R T a 1)：水素、ハロゲン、(1 - 4 C) アルコキシ、(2 - 4 C) アルケニルオキシ、(2 - 4 C) アルケニル、(2 - 4 C) アルキニル、(1 - 4 C) アルコキシカルボニル、(3 - 6 C) シクロアルキル、(3 - 6 C) シクロアルケニル、(1 - 4 C) アルキルチオ、アミノ、アジド、シアノおよびニトロ；または

(R T a 2)：(1 - 4 C) アルキルアミノ、ジ - (1 - 4 C) アルキルアミノおよび (2 - 4 C) アルケニルアミノより選択され；または

R T は、次の群：

(R T b 1)：(1 - 4 C) アルキル基であって、ヒドロキシ、(1 - 4 C) アルコキシ、(1 - 4 C) アルキルチオ、シアノおよびアジドより選択される 1 個の置換基で置換されていてよいもの；または

(R T b 2)：(1 - 4 C) アルキル基であって、(2 - 4 C) アルケニルオキシ、(3 - 6 C) シクロアルキルおよび (3 - 6 C) シクロアルケニルより選択される 1 個の置換基で置換されていてよいものより選択され；または

R T は、次の群：

(R T c)：O、N および S (酸化されていてよい) より独立して選択される 1 個または 2 個のヘテロ原子を含有し、環窒素または炭素原子によって連結した、完全飽和 4 員単環式環

より選択され；そしてここにおいて、

(R T a 1) または (R T a 2)、(R T b 1) または (R T b 2)、または (R T c) 中のアルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキルまたはシクロアルケニル部分を含有する R T 置換基の各々のところで、このような部分は各々、利用可能な炭素原子上に、F、Cl、Br、OH および CN より独立して選択される 1 個、2 個、3 個またはそれを超える置換基で置換されていてよく；

R₆ は、シアノ、-COR_{1 2}、-COOR_{1 2}、-CONHR_{1 2}、-CON(R_{1 2})(R_{1 3})、-SO₂R_{1 2}、-SO₂NHR_{1 2}、-SO₂N(R_{1 2})(R_{1 3}) または NO₂ であり、ここにおいて、R_{1 2} および R_{1 3} は、本明細書中の下に定義の通りであり；

R₇ は、水素、アミノ、(1 - 8 C) アルキル、-NHR_{1 2}、-N(R_{1 2})(R_{1 3})、-OR_{1 2} または -SR_{1 2}、(2 - 4 C) アルケニル、-(1 - 8 C) アルキルアリール、モノ -、ジ -、トリ - および ペルハロ (1 - 8 C) アルキル、-(CH₂)_p (3 - 6 C) シクロアルキルまたは -(CH₂)_p (3 - 6 C) シクロアルケニルであり

、ここにおいて、 p は、0、1または2であり；

R_8 は、水素、(3 - 6 C)シクロアルキル、フェニル、ベンジル、(1 - 5 C)アルカノイル、(1 - 6 C)アルキル((1 - 5 C)アルコキシカルボニル、ヒドロキシ、シアノ、3個までのハロゲン原子および - $NR_{15}R_{16}$ (式中、 R_{15} および R_{16} は、独立して、水素、フェニル(ハロゲン、(1 - 4 C)アルキル、および1個、2個、3個またはそれを超えるハロゲン原子で置換された(1 - 4 C)アルキルより選択される1個またはそれを超える置換基で置換されていてよい)および(1 - 4 C)アルキル(1個、2個、3個またはそれを超えるハロゲン原子で置換されていてよい)より独立して選択され、またはいずれかの $N(R_{15})(R_{16})$ 基について、 R_{15} および R_{16} は、更に、それらが結合している窒素原子と一緒にあって、ピロリジニル環、ピペリジニル環またはモルホリニル環を形成してよい)より独立して選択される置換基で置換されていてよい)であり；

R_9 および R_{10} は、独立して、水素および(1 - 4 C)アルキルより選択され；

R_{11} は、(1 - 4 C)アルキルまたはフェニルであり；

R_{12} および R_{13} は、独立して、水素、フェニル(ハロゲン、(1 - 4 C)アルキル、および1個、2個、3個またはそれを超えるハロゲン原子で置換された(1 - 4 C)アルキルより選択される1個またはそれを超える置換基で置換されていてよい)および(1 - 4 C)アルキル(1個、2個、3個またはそれを超えるハロゲン原子で置換されていてよい)より選択され、またはいずれかの $N(R_{12})(R_{13})$ 基について、 R_{12} および R_{13} は、更に、それらが結合している窒素原子と一緒にあって、ピロリジニル環、ピペリジニル環またはモルホリニル環を形成してよく、その環は、(1 - 4 C)アルキル、(3 - 6 C)シクロアルキル、(1 - 4 C)アルカノイル、- $COO(1 - 4 C)$ アルキル、 $S(O)_n(1 - 4 C)$ アルキル(式中、 $n = 1$ または 2)、- $COOAR1$ 、- $CS(1 - 4 C)$ アルキルおよび - $C(=S)O(1 - 4 C)$ アルキルより選択される基で置換されていてよく；

$AR1$ は、置換されていてよいフェニルまたは置換されていてよいナフチルであり；

$AR2$ は、O、NおよびSより独立して選択される4個までのヘテロ原子を含有する(が、いずれのO - O、O - SまたはS - S結合も含有しない)置換されていてよい5員または6員の完全不飽和(すなわち、最大不飽和度を有する)単環式ヘテロアリール環であって、環炭素原子によって、またはその環がそこで第四級化されていない場合、環窒素原子によって連結したものであり；

$AR2a$ は、 $AR2$ の部分水素化型(すなわち、完全ではないが若干の不飽和度を保持している $AR2$ 系)であって、環炭素原子によって連結した、またはその環がそこで第四級化されていない場合、環窒素原子によって連結したものであり；

$AR2b$ は、 $AR2$ の完全水素化型(すなわち、不飽和でない $AR2$ 系)であって、環炭素原子によって連結したまたは環窒素原子によって連結したものであり；

$AR3$ は、O、NおよびSより独立して選択される4個までのヘテロ原子を含有する(が、いずれのO - O、O - SまたはS - S結合も含有しない)置換されていてよい8員、9員または10員の完全不飽和(すなわち、最大不飽和度を有する)二環式ヘテロアリール環であって、二環式系を含むどちらかの環中の環炭素原子によって連結したものであり；

$AR3a$ は、 $AR3$ の部分水素化型(すなわち、完全ではないが若干の不飽和度を保持している $AR3$ 系)であって、二環式系を含むどちらかの環中において、環炭素原子によって連結した、またはその環がそこで第四級化されていない場合、環窒素原子によって連結したものであり；

$AR3b$ は、 $AR3$ の完全水素化型(すなわち、不飽和でない $AR3$ 系)であって、二環式系を含むどちらかの環中において、環炭素原子によって連結したまたは環窒素原子によって連結したものであり；

$AR4$ は、O、NおよびSより独立して選択される4個までのヘテロ原子を含有する(が、いずれのO - O、O - SまたはS - S結合も含有しない)置換されていてよい13員

または 14 員の完全不飽和（すなわち、最大不飽和度を有する）三環式ヘテロアリール環であって、三環式系を含むいずれかの環中の環炭素原子によって連結したものであり；

AR 4 a は、AR 4 の部分水素化型（すなわち、完全ではないが若干の不飽和度を保持している AR 4 系）であって、三環式系を含むいずれかの環中において、環炭素原子によって連結した、またはその環がそこで第四級化されていない場合、環窒素原子によって連結したものであり；

CY 1 は、置換されていてよいシクロブチル環、シクロペンチル環またはシクロヘキシル環であり；

CY 2 は、置換されていてよいシクロペンテニル環またはシクロヘキセニル環であり；
 ここにおいて、

AR 1、AR 2、AR 2 a、AR 2 b、AR 3、AR 3 a、AR 3 b、AR 4、AR 4 a、CY 1 および CY 2 上の任意の置換基は、（利用可能な炭素原子上において）（1 - 4 C）アルキル { ヒドロキシ、トリフルオロメチル、（1 - 4 C）アルキル S (O)_q - （q は、0、1 または 2 である）、（1 - 4 C）アルコキシ、（1 - 4 C）アルコキシカルボニル、シアノ、ニトロ、（1 - 4 C）アルカノイルアミノ、- CONR_vR_w または - NR_vR_w より独立して選択される置換基で置換されていてよい }、トリフルオロメチル、ヒドロキシ、ハロ、ニトロ、シアノ、チオール、（1 - 4 C）アルコキシ、（1 - 4 C）アルカノイルオキシ、ジメチルアミノメチレンアミノカルボニル、ジ（N - （1 - 4 C）アルキル）アミノメチルイミノ、カルボキシ、（1 - 4 C）アルコキシカルボニル、（1 - 4 C）アルカノイル、（1 - 4 C）アルキル SO₂ アミノ、（2 - 4 C）アルケニル { カルボキシまたは（1 - 4 C）アルコキシカルボニルで置換されていてよい }、（2 - 4 C）アルキニル、（1 - 4 C）アルカノイルアミノ、オキソ (= O)、チオキソ (= S)、（1 - 4 C）アルカノイルアミノ { この（1 - 4 C）アルカノイル基は、ヒドロキシで置換されていてよい }、（1 - 4 C）アルキル S (O)_q - （q は、0、1 または 2 である） { この（1 - 4 C）アルキル基は、シアノ、ヒドロキシおよび（1 - 4 C）アルコキシより独立して選択される 1 個またはそれを超える基で置換されていてよい }、- CONR_vR_w または - NR_vR_w [式中、R_v は、水素または（1 - 4 C）アルキルであり；R_w は、水素または（1 - 4 C）アルキルである] より独立して選択される 3 個までの置換基であり；そして更に、

AR 1、AR 2、AR 2 a、AR 2 b、AR 3、AR 3 a、AR 3 b、AR 4、AR 4 a、CY 1 および CY 2 上の（利用可能な炭素原子上の）、そして更に、（特に断らない限り）アルキル基上の任意の置換基は、トリフルオロメトキシ、ベンゾイルアミノ、ベンゾイル、フェニル { ハロ、（1 - 4 C）アルコキシまたはシアノより独立して選択される 3 個までの置換基で置換されていてよい }、フラン、ピロール、ピラゾール、イミダゾール、トリアゾール、ピリミジン、ピリダジン、ピリジン、イソオキサゾール、オキサゾール、イソチアゾール、チアゾール、チオフエン、ヒドロキシイミノ（1 - 4 C）アルキル、（1 - 4 C）アルコキシイミノ（1 - 4 C）アルキル、ハロ - （1 - 4 C）アルキル、（1 - 4 C）アルカンスルホンアミド、- SO₂ NR_vR_w [式中、R_v は、水素または（1 - 4 C）アルキルであり；R_w は、水素または（1 - 4 C）アルキルである] より独立して選択される 3 個までの置換基であり；そして

AR 2、AR 2 a、AR 2 b、AR 3、AR 3 a、AR 3 b、AR 4 および AR 4 a 上の任意の置換基は、（このような置換が第四級化を引き起こさない場合に利用可能な窒素原子上において）（1 - 4 C）アルキル、（1 - 4 C）アルカノイル { 但し、この（1 - 4 C）アルキル基および（1 - 4 C）アルカノイル基は、シアノ、ヒドロキシ、ニトロ、トリフルオロメチル、（1 - 4 C）アルキル S (O)_q - （q は、0、1 または 2 である）、（1 - 4 C）アルコキシ、（1 - 4 C）アルコキシカルボニル、（1 - 4 C）アルカノイルアミノ、- CONR_vR_w または - NR_vR_w [式中、R_v は、水素または（1 - 4 C）アルキルであり；R_w は、水素または（1 - 4 C）アルキルである] より独立して選択される（好ましくは、1 個の）置換基で置換されていてよい }、（2 - 4 C）アルケニル、（2 - 4 C）アルキニル、（1 - 4 C）アルコキシカルボニルまたはオキソ（N -

オキシドを形成する)である]

を有する化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加水分解性エステル。

【請求項 2】

基 C が、基 D、基 E、基 H および基 I のいずれか一つで表される、請求項 1 に記載の式 (I) の化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加水分解性エステル。

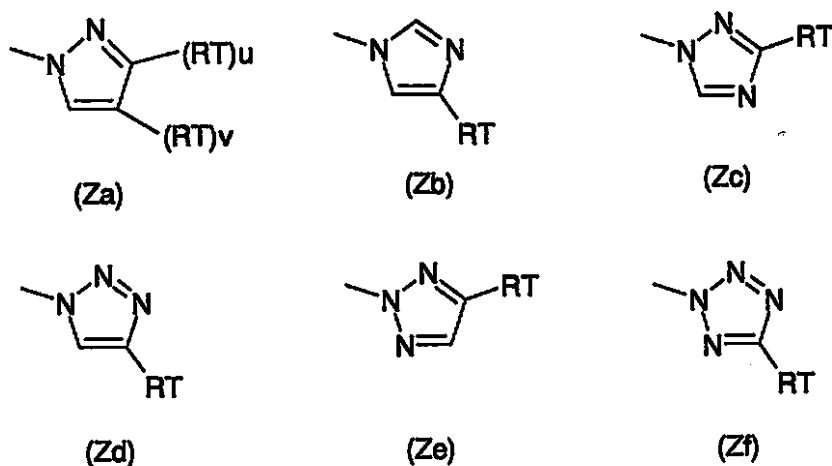
【請求項 3】

R_1 a および R_1 b が、独立して、-NHCO(1-4C)アルキル、-NHCO(1-4C)シクロアルキル、-NHCS(1-4C)アルキル、-N(R_5)-HET-1 および HET-2 より選択される、請求項 1 または請求項 2 に記載の式 (I) の化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加水分解性エステル。

【請求項 4】

HET-2A が、下の構造 (Za) ~ (Zf) :

【化 9】



(式中、u および v は、独立して、0 または 1 である)

より選択される、請求項 1、請求項 2 または請求項 3 に記載の式 (I) の化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加水分解性エステル。

【請求項 5】

RT が、

- (a) 水素;
- (b) ハロゲン;
- (c) シアノ;
- (d) (1-4C) アルキル;
- (e) 一置換 (1-4C) アルキル;
- (f) 二置換 (1-4C) アルキル、および
三置換 (1-4C) アルキル

より選択される、請求項 4 に記載の式 (I) の化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加水分解性エステル。

【請求項 6】

A および B の少なくとも一つがオキサゾリジノンである、請求項 1 ~ 5 のいずれか 1 項に記載の式 (I) の化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加水分解性エステル。

【請求項 7】

A がイソオキサゾリンであり且つ B がオキサゾリジノンである、請求項 1 ~ 6 のいずれか 1 項に記載の式 (I) の化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加

水分解性エステル。

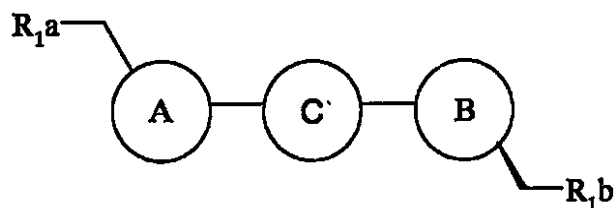
【請求項 8】

基 C が、基 H で表される、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の式 (I) の化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加水分解性エステル。

【請求項 9】

請求項 1 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の式 (I a)

【化 10】



(Ia)

を有する化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加水分解性エステル。

【請求項 10】

請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の化合物のプロドラッグ。

【請求項 11】

温血動物の抗細菌作用を生じる方法であって、該動物に、有効量の請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の本発明の化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加水分解性エステルを投与することを含む方法。

【請求項 12】

薬剤として用いるための、請求項 1 ~ 10 のいずれか 1 項に記載の本発明の化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加水分解性エステル。

【請求項 13】

温血動物に抗細菌作用を生じる際に使用するための、有効量の請求項 1 ~ 10 のいずれか 1 項に記載の本発明の化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加水分解性エステルの使用。

【請求項 14】

医薬組成物であって、請求項 1 ~ 10 のいずれか 1 項に記載の本発明の化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加水分解性エステル、および薬学的に許容しうる希釈剤または担体を含む医薬組成物。

【請求項 15】

前記組成物がビタミンを含む、請求項 14 に記載の医薬組成物。

【請求項 16】

前記ビタミンがビタミン B である、請求項 15 に記載の医薬組成物。

【請求項 17】

前記組成物が、式 (I) の化合物と、グラム陽性細菌に対して活性な抗細菌薬との組合せを含む、請求項 14 に記載の医薬組成物。

【請求項 18】

前記組成物が、式 (I) の化合物と、グラム陰性細菌に対して活性な抗細菌薬との組合せを含む、請求項 14 に記載の医薬組成物。

【請求項 19】

請求項 1 に記載の式 (I) の化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加水分解性エステルの製造方法であって、方法 (a) ~ (j) の内の一つ；そしてその後、必要ならば、

(i) 保護基を全て除去すること；

(ii) プロドラッグ（例えば、in-vivo 加水分解性エステル）を形成すること；および

/ または

(iii) 薬学的に許容しうる塩を形成すること

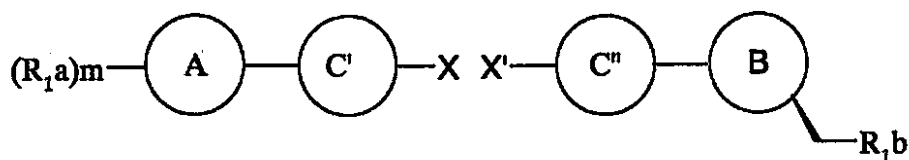
を含み；ここにおいて、

該方法 (a) ~ (j) が、

(a) 標準的な化学を用いることにより、本発明の別の化合物中の置換基を修飾すること、または本発明の別の化合物中に置換基を導入すること；

(b) 式 (IIa) の化合物の分子と、(IIb) の化合物の分子との反応であって、ここにおいて、X および X' は、パラジウムカップリングに有用な脱離基であり、そしてアリール - アリール結合、ヘテロアリール - アリール結合またはヘテロアリール - ヘテロアリール結合が、アリール - X (またはヘテロアリール - X) 結合およびアリール - X' (またはヘテロアリール - X') 結合に置き換えられるように選択される反応；

【化 1 1】

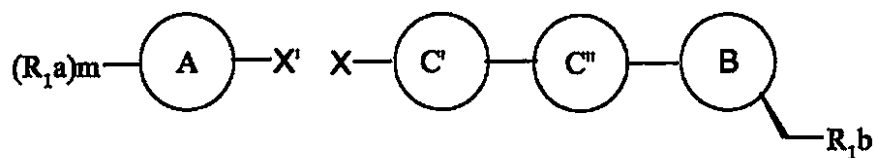


(IIa)

(IIb)

(c) 式 (IIIa) の化合物と、式 (IIIb) の化合物の反応：

【化 1 2】



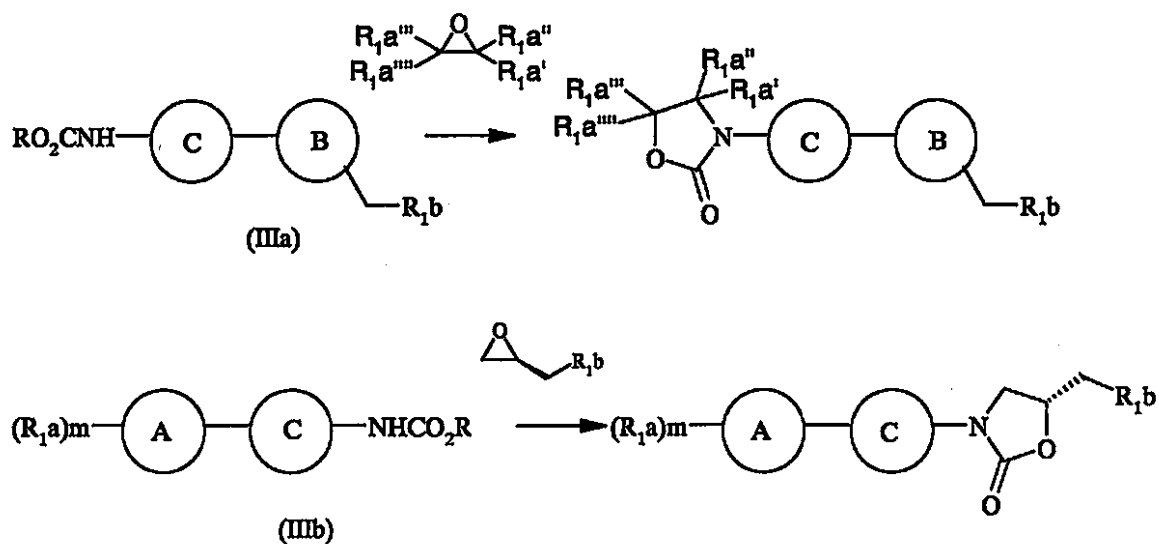
(IIIa)

(IIIb)

この場合、X および X' は、置換可能な置換基であり、そしてここにおいて、置換基 X および X' は、当該技術分野において、遷移金属によって触媒されるカップリング反応に相補的基質として適していることが知られている置換基の相補対であるように選択される；

(d) (ヘテロ) ピアリール誘導体 (IIIa) または (IIIb) カルバメートと、適当に置換されたオキシラン (式中、0、1 個または 2 個の R_{1a'} - R_{1a''''} は、R_{1a} について定義の置換基であり、残りは水素である) とを反応させて、未発達のアリール位置にオキサゾリジノン環を形成すること；

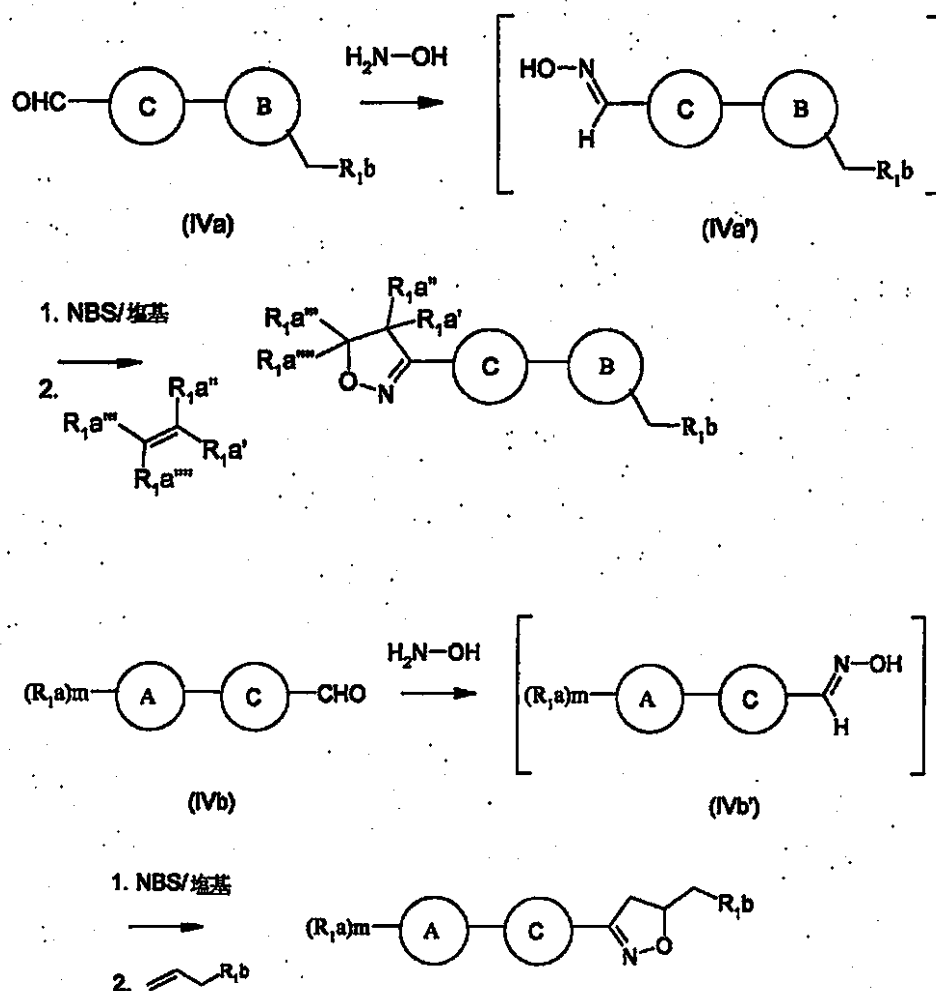
【化 1 3】



または該カルバメートが、イソシアネートでまたはアミンで置き換えられているおよび / または該オキシランが、均等な試薬 $\text{X}-\text{C}(\text{R}_1\text{a}')(\text{R}_1\text{a}'')\text{C}(\text{R}_1\text{a}''')(\text{保護されていてよいO})(\text{R}_1\text{a}'''')$ または $\text{X}-\text{CH}_2\text{CH}(\text{保護されていてよいO})\text{CH}_2\text{R}_1\text{b}$ (但し、 X は置換可能な基である) で置き換えられているこの方法の変法による ;

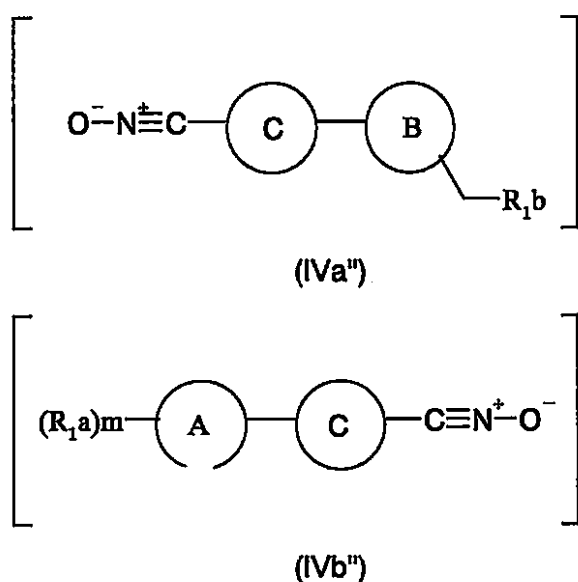
(e) (ヘテロ) ピアリール誘導体 (IVa) または (IVb) を反応させて、未発達のアリール位置にイソオキサゾリン環を形成すること ;

【化 1 4】



または反応性中間体（ニトリルオキシド IVa'' または IVb''）が、オキシム（IVa'）または（IVb'）の酸化以外によって得られるこの方法の変法による；

【化 1 5】



（f）置換されていてよい 1, 2, 3 - トリアゾールとしての HET について、アジド（ここにおいて、例えば、(II) 中の Y はアジドである）を経た、アセチレンへの、またはアセチレン均等物、または脱離可能な置換基を有する置換されていてよいエチレンへの

付加環化による；

(g) 式(I)の4-置換1, 2, 3-トリアゾール化合物としてのHETについて、アミノメチルオキサゾリジノンと、1, 1-ジハロケトンスルホニルヒドラゾンとを反応させることによる；

(h) 式(I)の4-置換1, 2, 3-トリアゾール化合物としてのHETについて、アジドメチルオキサゾリジノンと末端アルキンとを、Cu(I)触媒を用いて反応させて、4-置換1, 2, 3-トリアゾールを生じることによる；

(j) 式(I)の4-ハロゲン化1, 2, 3-トリアゾール化合物としてのHETについて、アジドメチルオキサゾリジノンと、ハロビニルスルホニルクロリドとを、そのままかまたは不活性希釈剤中において、0 ~ 100 の温度で反応させることによるものである方法。

【請求項20】

病原性細菌による疾患に罹っている温血動物に対して有効量の請求項1~9のいずれか1項に記載の本発明の化合物、またはその薬学的に許容しうる塩または in-vivo 加水分解性エステルを投与することを含む、病原性細菌による温血動物の疾患を治療する方法。