

【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26年12月4日(2014.12.4)

【公表番号】特表2013-542941(P2013-542941A)

【公表日】平成25年11月28日(2013.11.28)

【年通号数】公開・登録公報2013-064

【出願番号】特願2013-534002(P2013-534002)

【国際特許分類】

C 07 D 277/60	(2006.01)
A 61 P 35/00	(2006.01)
A 61 P 29/00	(2006.01)
A 61 P 9/00	(2006.01)
A 61 P 37/08	(2006.01)
A 61 P 37/06	(2006.01)
A 61 P 19/02	(2006.01)
A 61 P 9/12	(2006.01)
A 61 P 7/02	(2006.01)
A 61 K 31/55	(2006.01)
A 61 K 31/542	(2006.01)
A 61 K 31/5377	(2006.01)
A 61 K 31/4436	(2006.01)
A 61 K 31/4439	(2006.01)
A 61 K 31/428	(2006.01)
A 61 K 31/444	(2006.01)
A 61 K 31/4433	(2006.01)
C 07 D 495/04	(2006.01)
C 07 D 497/04	(2006.01)
C 07 D 409/04	(2006.01)
C 07 D 513/04	(2006.01)
C 07 D 495/10	(2006.01)
C 07 D 417/04	(2006.01)
C 07 D 333/50	(2006.01)
C 07 D 333/52	(2006.01)
C 07 D 491/048	(2006.01)
C 07 D 487/04	(2006.01)
C 07 D 498/04	(2006.01)
C 07 D 513/20	(2006.01)

【F I】

C 07 D 277/60	C S P
A 61 P 35/00	
A 61 P 29/00	
A 61 P 9/00	
A 61 P 37/08	
A 61 P 37/06	
A 61 P 29/00	1 0 1
A 61 P 19/02	
A 61 P 9/12	
A 61 P 7/02	
A 61 K 31/55	

A 6 1 K 31/542
 A 6 1 K 31/5377
 A 6 1 K 31/4436
 A 6 1 K 31/4439
 A 6 1 K 31/428
 A 6 1 K 31/444
 A 6 1 K 31/4433
 C 0 7 D 495/04 1 0 8
 C 0 7 D 497/04
 C 0 7 D 495/04 1 0 1
 C 0 7 D 409/04
 C 0 7 D 495/04 1 0 3
 C 0 7 D 513/04 3 7 1
 C 0 7 D 513/04 3 6 1
 C 0 7 D 495/10
 C 0 7 D 417/04
 C 0 7 D 333/50
 C 0 7 D 333/52
 C 0 7 D 495/04 1 0 5 Z
 C 0 7 D 491/048
 C 0 7 D 487/04 1 5 0
 C 0 7 D 498/04 1 0 8
 C 0 7 D 495/04 1 0 5 A
 C 0 7 D 513/20

【手続補正書】

【提出日】平成26年10月14日(2014.10.14)

【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】

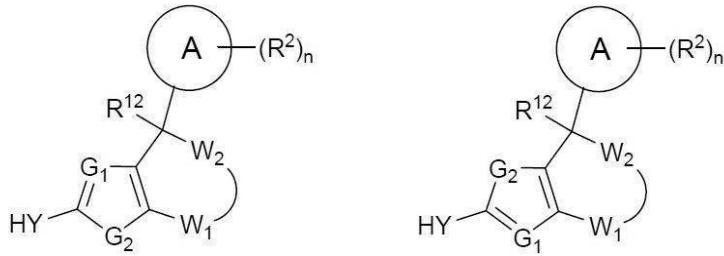
【特許請求の範囲】

【請求項1】

構造式 I - A または I - B に示す化合物

【化1 - 3】

【化1】



I - A

I - B

-

または薬剤的に許容される塩であり、式中

G₁ は N または C₁~C₆ 脂肪族、
 3~10員の脂環式、または -Z-R¹¹ から選択される任意に置換される基であり、こ

ここで

Z は任意に置換される C_{1-3} アルキレン鎖、-O-、-N(R^{1a})-、-S-、-S(O)-、S(O)₂-、-C(O)-、-CO₂-、-C(O)NR^{1a}-、-N(R^{1a})C(O)-、-N(R^{1a})CO₂-、-S(O)₂NR^{1a}-、-N(R^{1a})S(O)₂-、-OC(O)N(R^{1a})-、-N(R^{1a})C(O)NR^{1a}-、-N(R^{1a})S(O)₂N(R^{1a})-、または-OC(O)-から選択され、

R^{1a} は水素または任意に置換される C_{1-4} 脂肪族であり、および

R^{1b} は水素または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、または6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、および

G₂ は S であり、

環 A は6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R² の各出現は独立して -R^{12a}、-T₂-R^{12d}、または -V₂-T₂-R^{12d} であり、および

R^{12a} の各出現は独立してハロゲン、-CN、-NO₂、-R^{12c}、-N(R^{12b})₂、-OR^{12b}、-SR^{12c}、-S(O)₂R^{12c}、-C(O)R^{12b}、-C(O)OR^{12b}、-C(O)N(R^{12b})₂、-S(O)₂N(R^{12b})₂、-OC(O)N(R^{12b})₂、-N(R^{12e})C(O)R^{12b}、-N(R^{12e})S(O)₂R^{12c}、-N(R^{12e})C(O)OR^{12b}、-N(R^{12e})C(O)N(R^{12b})₂、または -N(R^{12e})SO₂N(R^{12b})₂ であり、または R^{12b} の2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素若しくは硫黄から選択される0~1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシクリル環を形成し、

R^{12b} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{12c} の各出現は独立して、 C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{12d} の各出現は独立して水素、または3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{12e} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族基であり、

V₂ の各出現は独立して -N(R^{12e})-、-O-、-S-、-S(O)-、-S(O)₂-、-C(O)-、-C(O)O-、-C(O)N(R^{12e})-、-S(O)₂N(R^{12e})-、-OC(O)N(R^{12e})-、-N(R^{12e})C(O)-、-N(R^{12e})SO₂-、-N(R^{12e})C(O)O-、-N(R^{12e})C(O)N(R^{12e})-、-N(R^{12e})SO₂N(R^{12e})-、-OC(O)-、または -C(O)N(R^{12e})-O- であり、および

T₂ は任意に置換される C_{1-6} アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、-N

(R^{1-3}) -、-O-、-S-、-S(O)-、-S(O)₂-、-C(O)-、-C(O)O-、-C(O)N(R¹⁻³)-、-S(O)₂N(R¹⁻³)-、-OC(O)N(R¹⁻³)-、-N(R¹⁻³)C(O)-、-N(R¹⁻³)SO₂-、-N(R¹⁻³)C(O)O-、-N(R¹⁻³)C(O)N(R¹⁻³)-、-N(R¹⁻³)S(O)₂N(R¹⁻³)-、-OC(O)-、または-C(O)N(R¹⁻³)-O-によって任意に割り込まれ、またはT₂若しくはその部分は任意に置換される3~7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成し、ここでR¹⁻³は水素または任意に置換されるC₁₋₄脂肪族基であり、

nは0~4であり、

R¹⁻²は水素、ハロ、またはC₁₋₆脂肪族、-C(O)N(R^{5-a})₂、3~10員の脂環式、-N(R^{4-b})₂、-OR^{4-a}、または-SR^{4-a}から選択される任意に置換される基であり、

またはR²およびR¹⁻²は任意に置換される3~10員の脂環式を形成し、

W₁は、-C(O)NR^{4-a}-、-C(O)C(R⁴)₂-、-C(R⁴)₂C(O)-、-C(O)O-、-OC(O)-、-NR^{4-a}C(O)-、-C(=NR^{4-b})C(R⁴)₂-、-C(R⁴)₂C(=NR^{4-b})-、-C(=NR^{4-b})O-、-OC(=NR^{4-b})-、-C(=NR^{4-b})NR^{4-a}-、-NR^{4-a}C(=NR^{4-b})-、-S(O)C(R⁴)₂-、-C(R⁴)₂S(O)-、-S(O)O-、-OS(O)-、-S(O)NR^{4-a}-、-NR^{4-a}S(O)-、-S(O)₂C(R⁴)₂-、-C(R⁴)₂S(O)₂-、-S(O)₂O-、-OS(O)₂-、-S(O)₂NR^{4-a}-、-NR^{4-a}S(O)₂-、-C(S)C(R⁴)₂-、-C(R⁴)₂C(S)-、-C(S)O-、-OC(S)-、-C(S)NR^{4-a}-、または-NR^{4-a}C(S)-から選択され、

W₂は-(C-W₃)_rであるか、またはW₂の任意の2つの出現は独立して-C(R⁵)=C(R⁵)-であり、

ここでW₃の各出現は独立して-(R⁵)₂または=Oであり、

rは0~3であり、

R⁴の各出現は独立して水素、ハロ、または任意に置換されるC₁₋₆脂肪族または-C(O)OR^{4-c}であり、

R^{4-a}の各出現は独立して水素または任意に置換されるC₁₋₆脂肪族であり、

R^{4-b}の各出現は独立して水素、または任意に置換されるC₁₋₆脂肪族、-OR^{4-c}、または-N(R^{4-a})₂から選択される基であり、

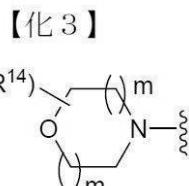
R^{4-c}の各出現は独立して水素または任意に置換されるC₁₋₆脂肪族であり、

R⁵の各出現は独立して水素、ハロ、またはC₁₋₆脂肪族、-C(O)N(R^{5-a})₂、3~10員の脂環式、6~10員のアリール、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリール、-N(R^{4-b})₂、-OR^{4-a}、または-SR^{4-a}から選択される任意に置換される基であり、

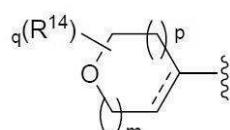
R^{5-a}の各出現は独立して水素または任意に置換されるC₁₋₆脂肪族であり、

HYは

【化3-3】



E または



F

であり、

ここで R^{1-4} の各出現は独立して $-R^{1-4}a$ または $-T_1 - R^{1-4}d$ であり、ここで $R^{1-4}a$ の各出現は、原子価および安定性が許容できる範囲で独立してフッ素、=O、=S、-CN、-NO₂、-R¹⁻⁴c、-N(R¹⁻⁴b)₂、-OR¹⁻⁴b、-SR¹⁻⁴c、-S(O)₂R¹⁻⁴c、-C(O)R¹⁻⁴b、-C(O)OR¹⁻⁴b、-C(O)N(R¹⁻⁴b)₂、-N(R¹⁻⁴e)C(O)R¹⁻⁴b、-N(R¹⁻⁴e)SO₂R¹⁻⁴c、-N(R¹⁻⁴e)SO₂N(R¹⁻⁴b)₂ であるか、R¹⁻⁴b の2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、または硫黄から選択される0~1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシクリル環を形成し、

$R^{1-4}b$ の各出現は独立して水素、またはC₁~C₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

$R^{1-4}c$ の各出現は独立してC₁~C₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

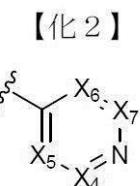
$R^{1-4}d$ の各出現は独立して水素、または3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから任意に置換され、

$R^{1-4}e$ の各出現は独立して水素または任意に置換されるC₁~C₆脂肪族基であり、および

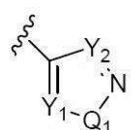
T_1 は任意に置換されるC₁~C₆アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、-N(R¹⁻⁴b)-、-O-、-S-、-S(O)-、-S(O)₂-、-C(O)-、-C(O)O-、-C(O)N(R¹⁻⁴b)-、-S(O)₂N(R¹⁻⁴b)-、-OC(O)N(R¹⁻⁴b)-、-N(R¹⁻⁴b)C(O)-、-N(R¹⁻⁴b)SO₂-、-N(R¹⁻⁴b)C(O)O-、-NR¹⁻⁴bC(O)N(R¹⁻⁴b)-、-N(R¹⁻⁴b)SO₂N(R¹⁻⁴b)-、-OC(O)-、または-C(O)N(R¹⁻⁴b)-O-によって任意に割り込まれ、または T_1 若しくはその部分は、任意に置換される3~7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成し、または

HYは以下の構造式から選択される任意に置換される基であり、

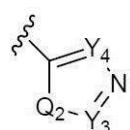
【化2-3】



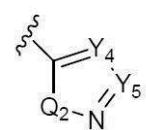
A、



B、



C、または



D

ここで X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 の各出現は独立して $-CR^{1-0}$ または N であり、ただし X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 のうちの2つより多い出現が N であることはなく、

Q_1 および Q_2 の各出現は独立して S 、 O または $-NR^{1-0}$ であり、

Y_1 、 Y_2 、 Y_3 、 Y_4 、および Y_5 の各出現は独立して $-CR^{1-0}$ または N であり、または、 X_4 および X_5 、 X_6 および X_7 、 Y_1 および Q_1 、 Y_3 および Q_2 、また

は Y_4 および Y_5 の 2 つの隣接する出現は、それらが結合される原子と一緒にになって、5 ~ 6 員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 6 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し、

ここで R^{10} は $-R^{10b}$ 、 $-V_1-R^{10c}$ 、 $-T_1-R^{10b}$ 、または $-V_1-T_1-R^{10b}$ であり、ここで

V_1 は $-NR^7-$ 、 $-NR^7-C(O)-$ 、 $-NR^7-C(S)-$ 、 $-NR^7-C(NR^7)-$ 、 $-NR^7-C(NR^7)OR^{10a}-$ 、 $-NR^7C(O)NR^7-$ 、 $-NR^7C(O)SR^{10a}-$ 、 $-NR^7C(S)OR^{10a}-$ 、 $-NR^7C(S)NR^7-$ 、 $-NR^7C(S)SR^{10a}-$ 、 $-NR^7C(NR^7)OR^{10a}-$ 、 $-NR^7C(NR^7)NR^7-$ 、 $-NR^7S(O)_2-$ 、 $-NR^7S(O)_2NR^7-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-CO_2-$ 、 $-C(O)NR^7-$ 、 $-C(O)NR^7O-$ 、 $-SO_2-$ 、または $-SO_2NR^7-$ であり、

R^{10a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

T_1 は任意に置換される C_{1-6} アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、 $-N(R^7)-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^7)-$ 、 $-S(O)_2N(R^7)-$ 、 $-OC(O)N(R^7)-$ 、 $-N(R^7)C(O)-$ 、 $-N(R^7)SO_2-$ 、 $-N(R^{10a})C(O)O-$ 、 $-NR^{10a}C(O)N(R^{10a})-$ 、 $-N(R^{10a})S(O)_2N(R^{10a})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^7)-O-$ によって任意に割り込まれ、または T_1 は任意に置換される 3 ~ 7 員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を形成し、

R^{10b} の各出現は独立して水素、ハロゲン、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-N(R^7)_2$ 、 $-OR^{10a}$ 、 $-SR^{10a}$ 、 $-S(O)_2R^{10a}$ 、 $-C(O)R^{10a}$ 、 $-C(O)OR^{10a}$ 、 $-C(O)N(R^7)_2$ 、 $-S(O)_2N(R^7)_2$ 、 $-OC(O)N(R^7)_2$ 、 $-N(R^7)C(O)R^{10a}$ 、 $-N(R^7)SO_2R^{10a}$ 、 $-N(R^7)C(O)OR^{10a}$ 、 $-N(R^7)C(O)N(R^7)_2$ 、または $-N(R^7)SO_2N(R^7)_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{10c} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、または

R^7 および R^{10c} は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、または硫黄から独立して選択される 0 ~ 1 の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される 4 ~ 7 員のヘテロシクリル環を形成し、

R^7 の各出現は独立して水素、 $-C(O)R^{7a}$ 、 $-CO_2R^{7a}$ 、 $-C(O)N(R^{7a})_2$ 、 $-C(O)N(R^{7a})-OR^{7a}$ 、 $-SO_2R^{7a}$ 、 $-SO_2N(R^{7a})_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

ここで R^{7a} の各出現は独立して水素または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員

のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^6 の各出現は独立して水素、-C(O)R^{6a}、-CO₂R^{6a}、-C(O)N(R^{6b})₂、-SO₂R^{6a}、-SO₂N(R^{6b})₂、またはC_{1～6}脂肪族、3～10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

ここで R^6a の各出現は独立して水素、またはC_{1～6}脂肪族、3～10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^6b の各出現は独立して水素、またはC_{1～6}脂肪族、3～10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、または R^6b の2つの出現はそれらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する3～6員のヘテロシクリル、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基を形成し、

qは0～6であり、

mは1または2であり、および

pは0、1、または2である、化合物または薬剤的に許容される塩。

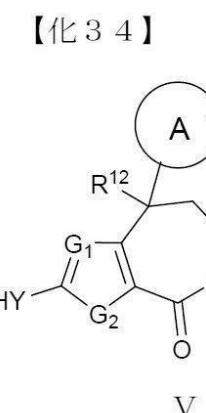
【請求項2】

G₂はSであり、G₁はNであり、HYはモルホリノであり、W₁は-C(=O)NH-であり、W₂は-(CH₂)₂-であり、R^{1～2}はHであり、環Aは任意に置換される6～10員のアリールであり、nは1であり、R²は任意に置換されるフェニルまたは5～6員のヘテロアリールである、請求項1に記載の式I-Aの化合物。

【請求項3】

以下に示す構造式Vを有する、請求項1に記載の化合物：

【化34-1】



または薬剤的に許容される塩。

【請求項4】

G₂はSであり、G₁はNであり、HYはモルホリノであり、R^{1～2}はHであり、環Aは任意に置換される6～10員のアリールであり、nは1であり、R²は任意に置換され

るフェニルまたは5～6員のヘテロアリールである、請求項3に記載の化合物。

【請求項5】

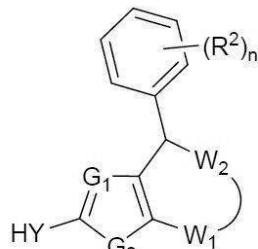
環Aは10員のアリールである、請求項2または4に記載の化合物。

【請求項6】

以下に示す構造式I Vを有する、請求項1に記載の化合物：

【化10-3】

【化10】



I V.

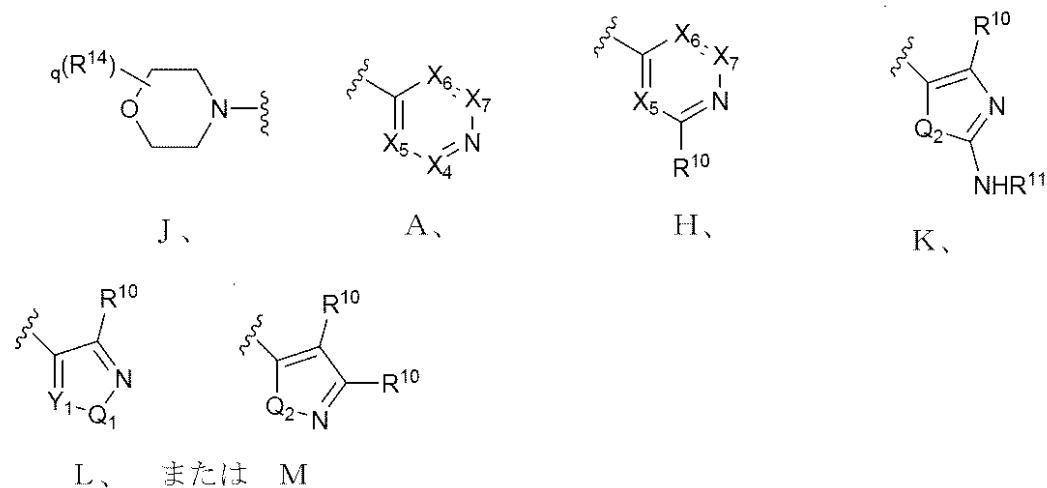
または薬剤的に許容される塩。

【請求項7】

請求項1、3または6のいずれかに記載の化合物であって、HYは以下に示す構造式から選択され、

【化11-3】

【化11】



式中X₄、X₅、X₆、およびX₇の各出現は独立して-CR¹⁻⁰またはNであり、ただしX₄、X₅、X₆、およびX₇のうちの2つより多い出現がNであることはなく、

Q₁およびQ₂の各出現は独立してS、Oまたは-NR⁶であり、

Y₁の各出現は独立して-CR¹⁻⁰またはNであり、

またはX₆およびX₇、またはY₁およびQ₁の2つの隣接する出現は、それらが結合される原子と一緒にになって、5～6員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～6員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し、

R¹⁻⁴の各出現は独立して任意に置換されるC₁₋₆脂肪族基である、化合物。

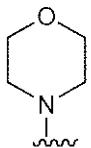
【請求項8】

請求項1、3、6または7のいずれかに記載の化合物であって、HYは以下に示す構造

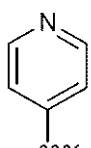
式から選択され、

【化12-3】

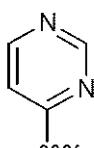
【化12】



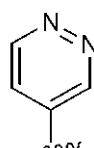
i v、



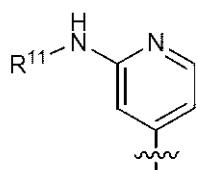
i、



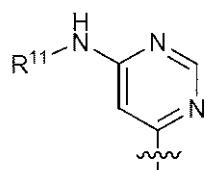
i i、



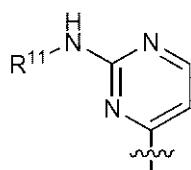
i i i、



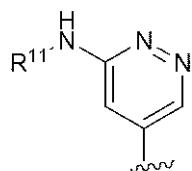
v、



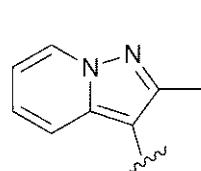
v i、



v i i、



v i i i または i x



各 H Y 基は R¹⁻⁰ または R¹⁻⁴ の 1 つまたは複数の出現で、任意に、さらに置換される、化合物。

【請求項 9】

G₁ は N である、請求項 1 ~ 8 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 10】

請求項 1 または 3 のいずれかに記載の化合物であって、環 A はフェニル基であり、R² の各出現は独立してハロゲン、C₁₋₃ アルキル、-CN、C₁₋₃ ハロアルキル、-O-C₁₋₃ アルキル、-OC₁₋₃ ハロアルキル、-NHCO(O)C₁₋₃ アルキル、-NHC(O)NHC₁₋₃ アルキル、-NHCO₂C₁₋₃ アルキル、または -C(O)H であり、n は 0 ~ 3 である、化合物。

【請求項 11】

請求項 10 に記載の化合物であって、R² の各出現は独立してハロゲン、C₁₋₃ アルキル、-CN、C₁₋₃ ハロアルキル、-OC₁₋₃ アルキル、-OC₁₋₃ ハロアルキル、-NHCO(O)C₁₋₃ アルキル、-NHCO(O)NHC₁₋₃ アルキル、-NHCO₂C₁₋₃ アルキル、または -C(O)H であり、n は 0 ~ 3 である、化合物。

【請求項 12】

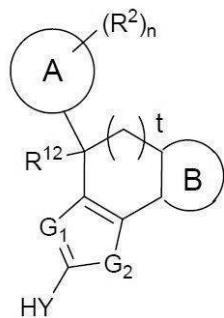
R² はハロゲンであり、および n は 1 または 2 である、請求項 10 または 11 に記載の化合物。

【請求項 13】

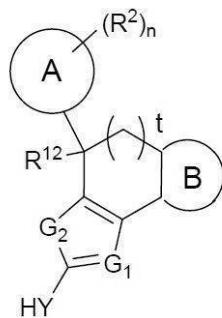
構造式 VI-A または VI-B に示す化合物

【化16-3】

【化16】



V I - A



V I - B

または薬剤的に許容される塩であり、式中

G₁ は N または C R¹ であり、ここで R¹ は H、-C N、ハロゲン、または C₁ ~ 6 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、または -Z-R¹¹ から選択される任意に置換される基であり、ここで

Z は任意に置換される C₁ ~ 3 アルキレン鎖、-O-、-N(R¹^a)-、-S-、-S(O)-、S(O)₂-、-C(O)-、-CO₂-、-C(O)NR¹^a-、-N(R¹^a)C(O)-、-N(R¹^a)CO₂-、-S(O)₂NR¹^a-、-N(R¹^a)S(O)₂-、-OC(O)N(R¹^a)-、-N(R¹^a)C(O)NR¹^a-、-N(R¹^a)S(O)₂N(R¹^a)-、または -OC(O)- であり、

R¹^a は水素または任意に置換される C₁ ~ 4 脂肪族であり、および

R¹¹ は水素、または C₁ ~ 6 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、および

G₂ は S、O、または NR³ であり、ここで R³ は水素または任意に置換される C₁ ~ 6 脂肪族であり、

環 A は 6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

環 B は 窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 3 のヘテロ原子を有する 5 または 6 員のヘテロシクリル、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 3 のヘテロ原子を有する 5 または 6 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、ただし環 B には酸素または硫黄の出現が 1 つよりおおくなることはなく、

t は 1 ~ 3 であり、

R² の各出現は独立して -R¹²^a、-T₂-R¹²^d、または -V₂-T₂-R¹²^d であり、および

R¹²^a の各出現は独立してハロゲン、-C N、-NO₂、-R¹²^c、-N(R¹²^b)₂、-OR¹²^b、-SR¹²^c、-S(O)₂R¹²^c、-C(O)R¹²^b、-C(O)OR¹²^b、-C(O)N(R¹²^b)₂、-S(O)₂N(R¹²^b)₂、-OC(O)N(R¹²^b)₂、-N(R¹²^e)C(O)R¹²^b、-N(R¹²^e)S(O)₂R¹²^c、-N(R¹²^e)C(O)OR¹²^b、-N(R¹²^e)C(O)N(R¹²^b)₂、または -N(R¹²^e)SO₂N(R¹²^b)₂ であり、または R¹²^b の

2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される0～1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4～7員のヘテロシリル環を形成し、

R^{1-2b} の各出現は独立して水素、または $C_1\sim C_6$ 脂肪族、3～10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2c} の各出現は独立して $C_1\sim C_6$ 脂肪族、3～10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2d} の各出現は独立して水素、または3～10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシリル、6～10員のアリール、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから任意に置換され、

R^{1-2e} の各出現は独立して水素または任意に置換される $C_1\sim C_6$ 脂肪族基であり、

V_2 の各出現は独立して $-N(R^{1-2e})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-2e})-$ 、 $-OC(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)-$ 、 $-N(R^{1-2e})SO_2-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)O-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-N(R^{1-2e})SO_2N(R^{1-2e})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{1-2e})-O-$ であり、および

T_2 は任意に置換される $C_1\sim C_6$ アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、 $-N(R^{1-3})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-3})-$ 、 $-OC(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)-$ 、 $-N(R^{1-3})SO_2-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)O-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-N(R^{1-3})S(O)_2N(R^{1-3})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{1-3})-O-$ によって任意に割り込まれ、または T_2 若しくはその部分は、任意に置換される3～7員の脂環式またはヘテロシリル環の部分を任意に形成し、ここで R^{1-3} は水素または任意に置換される $C_1\sim C_4$ 脂肪族基であり、

n は0～4であり、

R^{1-2} は水素、ハロ、または $C_1\sim C_6$ 脂肪族、 $-C(O)N(R^{5a})_2$ 、3～10員の脂環式、 $-N(R^{4b})_2$ 、 $-OR^{4a}$ 、または $-SR^{4a}$ から選択される任意に置換される基であり、

または R^2 および R^{1-2} は任意に置換される3～10員の脂環式を形成し、

R^{4a} の各出現は独立して水素または任意に置換される $C_1\sim C_6$ 脂肪族であり、

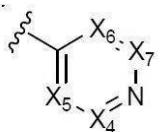
R^{4b} の各出現は独立して水素、または任意に置換される $C_1\sim C_6$ 脂肪族、 $-OR^{4c}$ 、または $-N(R^{4a})_2$ から選択される基であり、

R^{4c} の各出現は独立して水素または任意に置換される $C_1\sim C_6$ 脂肪族であり、

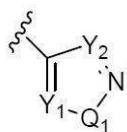
HY は以下に示す構造式から選択される任意に置換される基であり、

【化17-3】

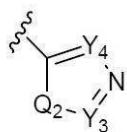
【化17】



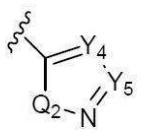
A、



B、



C、 または D



ここで X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 の各出現は独立して $-CR^{10}$ または N であり、ただし X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 のうちの 2つより多い出現が N であることはなく、

Q_1 および Q_2 の各出現は独立して S 、 O または $-NR^6$ であり、

Y_1 、 Y_2 、 Y_3 、 Y_4 、および Y_5 の各出現は独立して $-CR^{10}$ または N であり、

または X_4 および X_5 、 X_6 および X_7 、 Y_1 および Q_1 、 Y_3 および Q_2 、または Y_4 および Y_5 の 2つの隣接する出現は、それらが結合する原子と一緒にになって、5~6員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1~5 のヘテロ原子を有する 5~6 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し、

ここで R^{10} は $-R^{10b}$ 、 $-V_1-R^{10c}$ 、 $-T_1-R^{10b}$ 、または $-V_1-T_1-R^{10b}$ であり、ここで

V_1 は $-NR^7-$ 、 $-NR^7-C(O)-$ 、 $-NR^7-C(S)-$ 、 $-NR^7-C(NR^7)-$ 、 $-NR^7-C(O)OR^{10a}-$ 、 $-NR^7C(O)NR^7-$ 、 $-NR^7C(O)SR^{10a}-$ 、 $-NR^7C(S)OR^{10a}-$ 、 $-NR^7C(S)NR^7-$ 、 $-NR^7C(S)SR^{10a}-$ 、 $-NR^7C(NR^7)OR^{10a}-$ 、 $-NR^7C(NR^7)NR^7-$ 、 $-NR^7S(O)_2-$ 、 $-NR^7S(O)_2NR^7-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-CO_2-$ 、 $-C(O)NR^7-$ 、 $-C(O)NR^7O-$ 、 $-SO_2-$ 、または $-SO_2NR^7-$ であり、

R^{10a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1~5 のヘテロ原子を有する 4~10 員のヘテロシクリル、6~10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1~5 のヘテロ原子を有する 5~10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

T_1 は任意に置換される C_{1-6} アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、 $-N(R^7)-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^7)-$ 、 $-S(O)_2N(R^7)-$ 、 $-OC(O)N(R^7)-$ 、 $-N(R^7)C(O)-$ 、 $-N(R^7)SO_2-$ 、 $-N(R^{10a})C(O)O-$ 、 $-NR^{10a}C(O)N(R^{10a})-$ 、 $-N(R^{10a})S(O)_2N(R^{10a})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^7)-O-$ によって任意に割り込まれ、または T_1 は任意に置換される 3~7 員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を形成し、

R^{10b} の各出現は独立して水素、ハロゲン、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-N(R^7)_2$ 、 $-OR^{10a}$ 、 $-SR^{10a}$ 、 $-S(O)_2R^{10a}$ 、 $-C(O)R^{10a}$ 、 $-C(O)OR^{10a}$ 、 $-C(O)N(R^7)_2$ 、 $-S(O)_2N(R^7)_2$ 、 $-OC(O)N(R^7)_2$ 、 $-N(R^7)C(O)R^{10a}$ 、 $-N(R^7)SO_2R^{10a}$ 、 $-N(R^7)C(O)N(R^7)_2$ 、または $-N(R^7)SO_2N(R^7)_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1~5 のヘテロ原子を有する 4~10 員のヘテロシクリル、6~10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1~5 のヘテロ原子を有する 5~10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{10c} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、または

R^7 および R^{10c} はそれらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される0~1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシクリル環を形成し、

R^7 の各出現は独立して水素、 $-C(O)R^{7a}$ 、 $-CO_2R^{7a}$ 、 $-C(O)N(R^{7a})_2$ 、 $-C(O)N(R^{7a})-OR^{7a}$ 、 $-SO_2R^{7a}$ 、 $-SO_2N(R^{7a})_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

ここで R^{7a} の各出現は独立して水素または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^6 の各出現は独立して水素、 $-C(O)R^{6a}$ 、 $-CO_2R^{6a}$ 、 $-C(O)N(R^{6b})_2$ 、 $-SO_2R^{6a}$ 、 $-SO_2N(R^{6b})_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

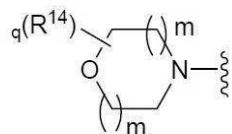
ここで R^{6a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{6b} の各出現は水素または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であるか、または R^{6b} の2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する3~6員のヘテロシクリル、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基を形成し、

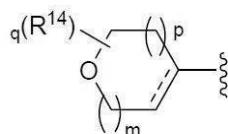
または HY は

【化18-3】

【化18】



E または



F

であり、

ここで R^{1-4} の各出現は独立して $-R^{1-4}a$ または $-T_1 - R^{1-4}d$ であり、ここで

$R^{1-4}a$ の各出現は、原子価および安定性が許容できる範囲で独立してフッ素、=O、=S、-CN、-NO₂、-R¹⁻⁴c、-N(R¹⁻⁴b)₂、-OR¹⁻⁴b、-SR¹⁻⁴c、-S(O)₂R¹⁻⁴c、-C(O)R¹⁻⁴b、-C(O)OR¹⁻⁴b、-C(O)N(R¹⁻⁴b)₂、-S(O)₂N(R¹⁻⁴b)₂、-OC(O)N(R¹⁻⁴b)₂、-N(R¹⁻⁴e)C(O)R¹⁻⁴b、-N(R¹⁻⁴e)SO₂R¹⁻⁴c、-N(R¹⁻⁴e)C(O)N(R¹⁻⁴b)₂、または-N(R¹⁻⁴e)SO₂N(R¹⁻⁴b)₂ であるか、または $R^{1-4}b$ の2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される0~1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシクリル環を形成し、

$R^{1-4}b$ の各出現は独立して水素、またはC₁~C₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

$R^{1-4}c$ の各出現は独立してC₁~C₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

$R^{1-4}d$ の各出現は独立して水素、または3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから任意に置換され、

$R^{1-4}e$ の各出現は独立して水素または任意に置換されるC₁~C₆脂肪族基であり、および

T_1 は任意に置換されるC₁~C₆アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、-N(R¹⁻⁴b)-、-O-、-S-、-S(O)-、-S(O)₂-、-C(O)-、-C(O)O-、-C(O)N(R¹⁻⁴b)-、-S(O)₂N(R¹⁻⁴b)-、-OC(O)N(R¹⁻⁴b)-、-N(R¹⁻⁴b)C(O)-、-N(R¹⁻⁴b)SO₂-、-N(R¹⁻⁴b)C(O)O-、-NR¹⁻⁴bC(O)N(R¹⁻⁴b)-、-N(R¹⁻⁴b)SO₂N(R¹⁻⁴b)-、-OC(O)-、または-C(O)N(R¹⁻⁴b)-O-によって任意に割り込まれ、または T_1 若しくはその部分は、任意に置換される3~7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成し、

qは0~6であり、

mは1または2であり、および

pは0、1、または2である、

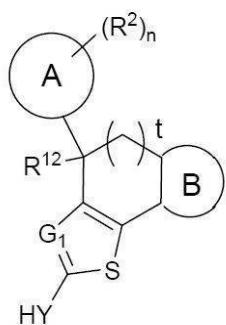
化合物または薬剤的に許容される塩。

【請求項14】

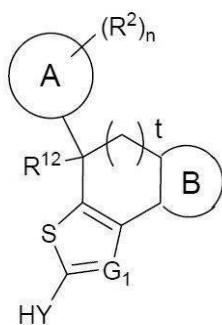
構造式VII-AまたはVII-Bに示す化合物

【化19-3】

【化19】



VII I-A



VII I-B

または薬剤的に許容される塩であって、式中

G₁ は N または C R¹ であり、ここで R¹ は H、-CN、ハロゲン、または C₁ ~ C₆ 脂肪族、3 ~ 10員の脂環式、または-Z-R¹₁ であり、ここで

Z は任意に置換される C₁ ~ C₃ アルキレン鎖、-O-、-N(R¹^a)-、-S-、-S(O)-、S(O)₂-、-C(O)-、-CO₂-、-C(O)NR¹^a-、-N(R¹^a)C(O)-、-N(R¹^a)CO₂-、-S(O)₂NR¹^a-、-N(R¹^a)S(O)₂-、-OC(O)N(R¹^a)-、-N(R¹^a)C(O)NR¹^a-、-N(R¹^a)S(O)₂N(R¹^a)-、または-OC(O)-から選択され、

R¹^a は水素または任意に置換される C₁ ~ C₄ 脂肪族であり、および

R¹₁ は水素、または C₁ ~ C₆ 脂肪族、3 ~ 10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、および

環 A は 6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

環 B は窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 3 のヘテロ原子を有する 5 または 6 員のヘテロシクリルまたは窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 3 のヘテロ原子を有する 5 または 6 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、ただし環 B には酸素または硫黄の出現が 1 つより多くなることはなく、

t は 1 ~ 3 であり、

R² の各出現は独立して -R¹₂、-T₂-R¹₂^d、または -V₂-T₂-R¹₂^d であり、および

R¹₂^a の各出現は独立してハロゲン、-CN、-NO₂、-R¹₂^c、-N(R¹₂^b)₂、-OR¹₂^b、-SR¹₂^c、-S(O)₂R¹₂^c、-C(O)R¹₂^b、-C(O)OR¹₂^b、-C(O)N(R¹₂^b)₂、-S(O)₂N(R¹₂^b)₂、-OC(O)N(R¹₂^b)₂、-N(R¹₂^e)C(O)R¹₂^b、-N(R¹₂^e)S(O)₂R¹₂^c、-N(R¹₂^e)C(O)OR¹₂^b、-N(R¹₂^e)C(O)N(R¹₂^b)₂、または -N(R¹₂^e)SO₂N(R¹₂^b)₂ であり、または R¹₂^b の 2 つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される 0 ~ 1 の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される 4 ~ 7 員のヘテロシクリル環を形成し、

R¹₂^b の各出現は独立して水素、または C₁ ~ C₆ 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立

して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2c} の各出現は独立して C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2d} の各出現は独立して水素、または 3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから任意に置換され、

R^{1-2e} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族基であり、

V_2 の各出現は独立して $-N(R^{1-2e})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-2e})-$ 、 $-OC(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)-$ 、 $-N(R^{1-2e})SO_2-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)O-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-N(R^{1-2e})SO_2N(R^{1-2e})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{1-2e})-O-$ であり、および

T_2 は任意に置換される C_{1-6} アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、 $-N(R^{1-3})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-3})-$ 、 $-OC(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)-$ 、 $-N(R^{1-3})SO_2-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)O-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-N(R^{1-3})S(O)_2N(R^{1-3})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{1-3})-O-$ によって任意に割り込まれ、または T_2 若しくはその部分は任意に置換される 3 ~ 7 員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成し、ここで R^{1-3} は水素または任意に置換される C_{1-4} 脂肪族基であり、

n は 0 ~ 4 であり、

R^{1-2} は水素、ハロまたは C_{1-6} 脂肪族、 $-C(O)N(R^{5a})_2$ 、3 ~ 10 員の脂環式、 $-N(R^{4b})_2$ 、 $-OR^{4a}$ 、または $-SR^{4a}$ であり、

または R^2 および R^{1-2} は任意に置換される 3 ~ 10 員の脂環式を形成し、

R^{4a} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族であり、

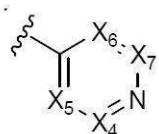
R^{4b} の各出現は独立して水素、または任意に置換される $-OR^{4c}$ 、または $-N(R^{4a})_2$ から選択される基であり、

R^{4c} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族であり、

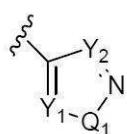
HY は以下に示す構造式から選択される任意に置換される基であり、

【化 20 - 3】

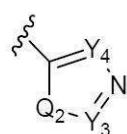
【化 20】



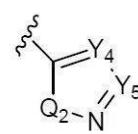
A、



B、



C、



D

ここで X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 の各出現は独立して $-CR^{1-0}$ または N であり、ただし、 X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 のうちの 2 つより多い出現が N であることはなく、

Q_1 および Q_2 の各出現は独立して S 、 O または $-NR^6$ であり、

Y₁、Y₂、Y₃、Y₄、およびY₅の各出現は独立して-CR^{1 0}またはNであり、またはX₄およびX₅、X₆およびX₇、Y₁およびQ₁、Y₃およびQ₂、またはY₄およびY₅の2つの隣接する出現は、それらが結合する原子と一緒にになって、5~6員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~6員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し、

ここでR^{1 0}は-R^{1 0}^b、-V₁-R^{1 0}^c、-T₁-R^{1 0}^b、または-V₁-T₁-R^{1 0}^bであり、ここで

V₁は-NR⁷-、-NR⁷-C(O)-、-NR⁷-C(S)-、-NR⁷-C(NR⁷)-、-NR⁷C(O)OR^{1 0}^a-、-NR⁷C(O)NR⁷-、-NR⁷C(O)SR^{1 0}^a-、-NR⁷C(S)OR^{1 0}^a-、-NR⁷C(S)NR⁷-、-NR⁷C(S)SR^{1 0}^a-、-NR⁷C(NR⁷)OR^{1 0}^a-、-NR⁷C(NR⁷)NR⁷-、-NR⁷S(O)₂-、-NR⁷S(O)₂NR⁷-、-C(O)-、-CO₂-、-C(O)NR⁷-、-C(O)NR⁷O-、-SO₂-、または-SO₂NR⁷-であり、

R^{1 0}^aの各出現は独立して水素、またはC₁~₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

T₁は任意に置換されるC₁~₆アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、-N(R⁷)-、-O-、-S-、-S(O)-、-S(O)₂-、-C(O)-、-C(O)O-、-C(O)N(R⁷)-、-S(O)N(R⁷)-、-S(O)₂N(R⁷)-、-OC(O)N(R⁷)-、-N(R⁷)C(O)-、-N(R⁷)SO₂-、-N(R^{1 0}^a)C(O)O-、-NR^{1 0}^aC(O)N(R^{1 0}^a)-、-N(R^{1 0}^a)S(O)₂N(R^{1 0}^a)-、-OC(O)-、または-C(O)N(R⁷)-O-によって任意に割り込まれ、またはT₁は任意に置換される3~7員の脂環式またはヘテロシクリル環を形成し、

R^{1 0}^bの各出現は独立して水素、ハロゲン、-CN、-NO₂、-N(R⁷)₂、-OR^{1 0}^a、-SR^{1 0}^a、-S(O)₂R^{1 0}^a、-C(O)R^{1 0}^a、-C(O)OR^{1 0}^a、-C(O)N(R⁷)₂、-S(O)₂N(R⁷)₂、-OC(O)N(R⁷)₂、-N(R⁷)C(O)R^{1 0}^a、-N(R⁷)SO₂R^{1 0}^a、-N(R⁷)C(O)OR^{1 0}^a、-N(R⁷)C(O)N(R⁷)₂、または-N(R⁷)SO₂N(R⁷)₂、またはC₁~₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1 0}^cの各出現は独立して水素、またはC₁~₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、または

R⁷およびR^{1 0}^cは、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される0~1のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシクリル環を形成し、

R⁷の各出現は独立して水素、-C(O)R⁷^a、-CO₂R⁷^a、-C(O)N(R⁷^a)₂、-C(O)N(R⁷^a)-OR⁷^a、-SO₂R⁷^a、-SO₂N(R⁷^a)₂、またはC₁~₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

ここで R^7 の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^6 の各出現は独立して水素、- $C(O)R^{6a}$ 、- CO_2R^{6a} 、- $C(O)N(R^{6b})_2$ 、- SO_2R^{6a} 、- $SO_2N(R^{6b})_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

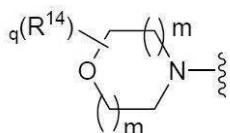
ここで R^{6a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{6b} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であるか、または R^{6b} の2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する3~6員のヘテロシクリル、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基を形成し、

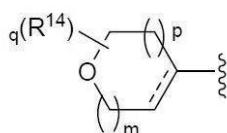
または HY は

【化21-3】

【化21】



E または



F

であり、

R^{1-4} の各出現は独立して- R^{1-4a} または- T_1 - R^{1-4d} であり、ここで

R^{1-4a} の各出現は、原子価および安定性が許容できる範囲で独立してフッ素、=O、=S、-CN、-NO₂、-R^{1-4c}、-N(R^{1-4b})₂、-OR^{1-4b}、-SR^{1-4c}、-S(O)₂R^{1-4c}、-C(O)R^{1-4b}、-C(O)OR^{1-4b}、-C(O)N(R^{1-4b})₂、-S(O)₂N(R^{1-4b})₂、-OC(O)N(R^{1-4b})₂、-N(R^{1-4e})C(O)R^{1-4b}、-N(R^{1-4e})SO₂R^{1-4c}、-N(R^{1-4e})C(O)OR^{1-4b}、-N(R^{1-4e})C(O)N(R^{1-4b})₂、または-N(R^{1-4e})SO₂N(R^{1-4b})₂ であるか、または R^{1-4a} の2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される0~1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシクリル環を形成し、

R^{1-4b} の各出現は、独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択され

る任意に置換される基であり、

R^{1-4c} の各出現は、独立して C_1-C_6 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-4d} の各出現は、独立して水素、または3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから任意に置換され、

R^{1-4e} の各出現は、独立して水素または任意に置換される C_1-C_6 脂肪族基であり、および

T_1 は任意に置換される C_1-C_6 アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、 $-N(R^{1-4b})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-4b})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-4b})-$ 、 $-OC(O)N(R^{1-4b})-$ 、 $-N(R^{1-4b})C(O)-$ 、 $-N(R^{1-4b})SO_2-$ 、 $-N(R^{1-4b})C(O)O-$ 、 $-NR^{1-4b}C(O)N(R^{1-4b})-$ 、 $-N(R^{1-4b})S(O)_2N(R^{1-4b})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{1-4b})-O-$ によって任意に割り込まれ、または T_1 若しくはその部分は、任意に置換される3~7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成し、

q は0~6であり、

m は1または2であり、および

p は0、1、または2である、

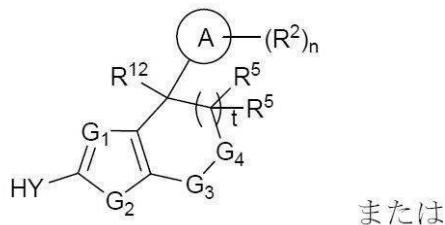
化合物または薬剤的に許容される塩。

【請求項15】

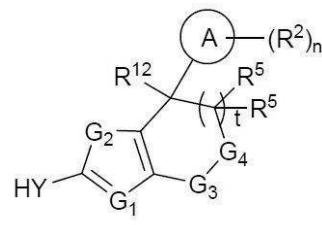
構造式VIII-AまたはVIII-Bを有する化合物

【化24-3】

【化24】



または



VIII-A

VIII-B

または薬剤的に許容される塩であり、式中

G_1 はNまたはCR¹であり、ここでR¹はH、-CN、ハロゲン、またはC₁₋₆脂肪族、3~10員の脂環式、または-Z-R¹⁻¹であり、ここで

Zは任意に置換されるC₁₋₃アルキレン鎖、-O-、-N(R^{1-a})-、-S-、-S(O)-、S(O)₂-、-C(O)-、-CO₂-、-C(O)NR^{1-a}-、-N(R^{1-a})C(O)-、-N(R^{1-a})CO₂-、-S(O)₂NR^{1-a}-、-N(R^{1-a})S(O)₂-、-OC(O)N(R^{1-a})-、-N(R^{1-a})C(O)NR^{1-a}-、-N(R^{1-a})S(O)₂N(R^{1-a})-、または-OC(O)-から選択され、

R^{1-a}は水素または任意に置換されるC₁₋₄脂肪族であり、および

R¹⁻¹は水素、またはC₁₋₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基で

あり、および

G_2 は S 、 $S\text{e}$ 、 O 、または NR^3 であり、ここで R^3 は水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族であり、

G_3 は $C=O$ または SO_2 であり、

G_4 は NR^{4a} または O であり、ここで R^{4a} は水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族であり、

環 A は 6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^2 の各出現は独立して $-R^{12a}$ 、 $-T_2-R^{12d}$ 、または $-V_2-T_2-R^{12d}$ であり、および

R^{12a} の各出現は独立してハロゲン、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-R^{12c}$ 、 $-N(R^{12b})_2$ 、 $-OR^{12b}$ 、 $-SR^{12c}$ 、 $-S(O)_2R^{12c}$ 、 $-C(O)R^{12b}$ 、 $-C(O)OR^{12b}$ 、 $-C(O)N(R^{12b})_2$ 、 $-S(O)_2N(R^{12b})_2$ 、 $-OC(O)N(R^{12b})_2$ 、 $-N(R^{12e})C(O)R^{12b}$ 、 $-N(R^{12e})SO_2R^{12c}$ 、 $-N(R^{12e})C(O)OR^{12b}$ 、 $-N(R^{12e})C(O)N(R^{12b})_2$ 、または $-N(R^{12e})SO_2N(R^{12b})_2$ であるか、または R^{12b} の 2 つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される 0 ~ 1 の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される 4 ~ 7 員のヘテロシクリル環を形成し、

R^{12b} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{12c} の各出現は独立して C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{12d} の各出現は独立して水素、または 3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから任意に置換され、

R^{12e} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族基であり、

V_2 の各出現は独立して $-N(R^{12e})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{12e})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{12e})-$ 、 $-OC(O)N(R^{12e})-$ 、 $-N(R^{12e})C(O)-$ 、 $-N(R^{12e})SO_2-$ 、 $-N(R^{12e})C(O)O-$ 、 $-N(R^{12e})C(O)N(R^{12e})-$ 、 $-N(R^{12e})SO_2N(R^{12e})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{12e})-O-$ であり、および

T_2 は任意に置換される C_{1-6} アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、 $-N(R^{13})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{13})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{13})-$ 、 $-OC(O)N(R^{13})-$ 、 $-N(R^{13})C(O)-$ 、 $-N(R^{13})SO_2-$ 、 $-N(R^{13})C(O)O-$ 、 $-N(R^{13})C(O)N(R^{13})-$ 、 $-N(R^{13})SO_2N(R^{13})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{13})-O-$ によって任意に割り込まれ、または T_2 若しくはその部分は任意に置換される 3 ~ 7 員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を形成し、ここで R^{13} は水素または任意に置換される C_{1-4} 脂肪族基であり、

n は 0 ~ 4 であり、

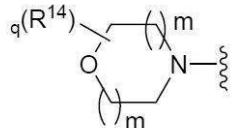
R^{1-2} は水素、ハロ、または C_{1-6} 脂肪族、 $-C(O)N(R^{5a})_2$ 、3 ~ 10 員の脂環式、 $-N(R^{4b})_2$ 、 $-OR^{4a}$ 、または $-SR^{4a}$ から選択される任意に置換される基であり、

または R^2 および R^{1-2} は任意に置換される 3 ~ 10 員の脂環式を形成し、

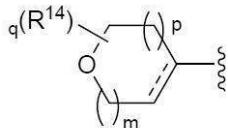
HY は

【化 26 - 3】

【化 26】



E または



F

であり、

R^{1-4} の各出現は独立して $-R^{1-4a}$ または $-T_1 - R^{1-4d}$ であり、ここで

R^{1-4a} の各出現は、原子価および安定性が許容できる範囲で独立してフッ素、 $=O$ 、 $=S$ 、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-R^{1-4c}$ 、 $-N(R^{1-4b})_2$ 、 $-OR^{1-4b}$ 、 $-SR^{1-4c}$ 、 $-S(O)_2R^{1-4c}$ 、 $-C(O)R^{1-4b}$ 、 $-C(O)OR^{1-4b}$ 、 $-C(O)$
 $N(R^{1-4b})_2$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-4b})_2$ 、 $-OC(O)N(R^{1-4b})_2$ 、 $-N(R^{1-4e})C(O)R^{1-4b}$ 、 $-N(R^{1-4e})SO_2R^{1-4c}$ 、 $-N(R^{1-4e})C(O)OR^{1-4b}$ 、 $-N(R^{1-4e})C(O)N(R^{1-4b})_2$ 、または $-N(R^{1-4e})SO_2N(R^{1-4b})_2$ であるか、または R^{1-4b} の 2 つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される 0 ~ 1 の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される 4 ~ 7 員のヘテロシクリル環を形成し、

R^{1-4b} の各出現は、独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-4c} の各出現は、独立して C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-4d} の各出現は、独立して水素、または 3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから任意に置換され、

R^{1-4e} の各出現は、独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族基であり、および

T_1 は、任意に置換される C_{1-6} アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、 $-N(R^{1-4b})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-4b})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-4b})-$ 、 $-OC(O)N(R^{1-4b})-$ 、 $-N(R^{1-4b})C(O)-$ 、 $-N(R^{1-4b})SO_2-$ 、 $-N(R^{1-4b})C(O)O-$ 、 $-N(R^{1-4b})C(O)N(R^{1-4b})-$ 、 $-N(R^{1-4b})SO_2N(R^{1-4b})-$ 、 $-O(C(O))-$ 、または $-C(O)N(R^{1-4b})-O-$

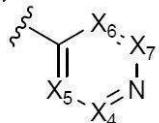
- によって任意に割り込まれ、または T_1 若しくはその部分は任意に置換される 3 ~ 7 員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成し、

または

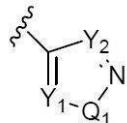
HY は以下に示す構造式から選択される任意に置換される基であり、

【化 25 - 3】

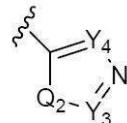
【化 25】



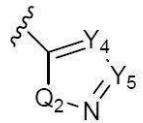
A、



B、



C、 または D



ここで X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 の各出現は独立して $-CR^{1\sim 0}$ または N であり、ただし X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 のうちの 2 つより多い出現が N であることはなく、

Q_1 および Q_2 の各出現は独立して S 、 O または $-NR^6$ であり、

Y_1 、 Y_2 、 Y_3 、 Y_4 、および Y_5 の各出現は独立して $-CR^{1\sim 0}$ または N であり、

または X_4 および X_5 、 X_6 および X_7 、 Y_1 および Q_1 、 Y_3 および Q_2 、または Y_4 および Y_5 の 2 つの隣接する出現は、それらが結合する原子と一緒にになって、5 ~ 6 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 6 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し、

$R^{1\sim 0}$ は $-R^{1\sim 0}b$ 、 $-V_1-R^{1\sim 0}c$ 、 $-T_1-R^{1\sim 0}b$ 、または $-V_1-T_1-R^{1\sim 0}b$ であり、ここで

V_1 は $-NR^7-$ 、 $-NR^7-C(O)-$ 、 $-NR^7-C(S)-$ 、 $-NR^7-C(NR^7)-$ 、 $-NR^7-C(O)OR^{1\sim 0}a-$ 、 $-NR^7C(O)NR^7-$ 、 $-NR^7C(O)SR^{1\sim 0}a-$ 、 $-NR^7C(S)OR^{1\sim 0}a-$ 、 $-NR^7C(S)NR^7-$ 、 $-NR^7C(S)SR^{1\sim 0}a-$ 、 $-NR^7C(NR^7)OR^{1\sim 0}a-$ 、 $-NR^7C(NR^7)NR^7-$ 、 $-NR^7S(O)_2-$ 、 $-NR^7S(O)_2NR^7-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-CO_2-$ 、 $-C(O)NR^7-$ 、 $-C(O)NR^7O-$ 、 $-SO_2-$ 、または $-SO_2NR^7-$ であり、

$R^{1\sim 0}a$ の各出現は独立して水素、または $C_{1\sim 6}$ 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

T_1 は任意に置換される $C_{1\sim 6}$ アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、 $-N(R^7)-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^7)-$ 、 $-S(O)_2N(R^7)-$ 、 $-OC(O)N(R^7)-$ 、 $-N(R^7)C(O)-$ 、 $-N(R^7)SO_2-$ 、 $-N(R^{1\sim 0}a)C(O)O-$ 、 $-NR^{1\sim 0}aC(O)N(R^{1\sim 0}a)-$ 、 $-N(R^{1\sim 0}a)S(O)_2N(R^{1\sim 0}a)-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^7)-O-$ によって任意に割り込まれ、または T_1 は任意に置換される 3 ~ 7 員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を形成し、

$R^{1\sim 0}b$ の各出現は独立して水素、ハロゲン、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-N(R^7)_2$ 、 $-OR^{1\sim 0}a$ 、 $-SR^{1\sim 0}a$ 、 $-S(O)_2R^{1\sim 0}a$ 、 $-C(O)R^{1\sim 0}a$ 、 $-C(O)OR^{1\sim 0}a$ 、 $-C(O)N(R^7)_2$ 、 $-S(O)_2N(R^7)_2$ 、 $-OC(O)N(R^7)_2$ 、 $-N(R^7)C(O)R^{1\sim 0}a$ 、 $-N(R^7)SO_2R^{1\sim 0}a$ 、 $-N(R^7)C(O)OR^{1\sim 0}a$ 、 $-N(R^7)C(O)N(R^7)_2$ 、または $-N(R^7)SO_2N(R^7)_2$ 、または $C_{1\sim 6}$ 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から

独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{10c} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、または

R^7 および R^{10c} は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 0 ~ 1 の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される 4 ~ 7 員のヘテロシクリル環を形成し、

R^7 の各出現は独立して水素、 $-C(O)R^{7a}$ 、 $-CO_2R^{7a}$ 、 $-C(O)N(R^{7a})_2$ 、 $-C(O)N(R^{7a})-OR^{7a}$ 、 $-SO_2R^{7a}$ 、 $-SO_2N(R^{7a})_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

ここで R^{7a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^6 の各出現は独立して水素、 $-C(O)R^{6a}$ 、 $-CO_2R^{6a}$ 、 $-C(O)N(R^{6b})_2$ 、 $-SO_2R^{6a}$ 、 $-SO_2N(R^{6b})_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

ここで R^{6a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、および

R^{6b} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であるか、または R^{6b} の 2 つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 3 ~ 6 員のヘテロシクリル、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基を形成し、

q は 0 ~ 6 であり、

m は 1 または 2 であり、

p は 0、1、または 2 であり、

t は 1 または 2 であり、

R^5 の各出現は、独立して $-R^{15a}$ または $-T_5-R^{15d}$ であり、ここで

R^{15a} の各出現は、原子価および安定性が許容できる範囲で独立して水素、フッ素、 $=O$ 、 $=S$ 、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-R^{15c}$ 、 $-N(R^{15b})_2$ 、 $-OR^{15b}$ 、 $-SR^{15c}$ 、 $-S(O)_2R^{15c}$ 、 $-C(O)R^{15b}$ 、 $-C(O)OR^{15b}$ 、 $-C$

(O)N(R^{15b})₂、-S(O)₂N(R^{15b})₂、-OC(O)N(R^{15b})₂、-N(R^{15e})C(O)R^{15b}、-N(R^{15e})SO₂R^{15c}、-N(R^{15e})C(O)OR^{15b}、-N(R^{15e})C(O)N(R^{15b})₂、または-N(R^{15e})SO₂N(R^{15b})₂であるか、R^{15b}の2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される0～1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4～7員のヘテロシクリル環を形成し、

R^{15b}の各出現は、独立して水素、またはC₁～C₆脂肪族、3～10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{15c}の各出現は、独立してC₁～C₆脂肪族、3～10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{15d}の各出現は、独立して水素、-N(R^{15b})₂、-OR^{15b}、-SR^{15c}、-S(O)₂R^{15c}、-C(O)R^{15b}、-C(O)OR^{15b}、-C(O)N(R^{15b})₂、-S(O)₂N(R^{15b})₂、-OC(O)N(R^{15b})₂、-N(R^{15e})C(O)R^{15b}、-N(R^{15e})SO₂R^{15c}、-N(R^{15e})C(O)OR^{15b}、-N(R^{15e})C(O)N(R^{15b})₂、-N(R^{15e})SO₂N(R^{15b})₂、または3～10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{15e}の各出現は、独立して水素または任意に置換されるC₁～C₆脂肪族基であり、および

T₅は、任意に置換されるC₁～C₆アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、-N(R^{15b})₂、-O-、-S-、-S(O)-、-S(O)₂、-C(O)-、-C(O)O-、-C(O)N(R^{15b})₂、-S(O)₂N(R^{15b})₂、-OC(O)N(R^{15b})₂、-N(R^{15b})C(O)O-、-NR^{15b}C(O)N(R^{15b})₂、-N(R^{15b})SO₂、-N(R^{15b})C(O)O-、-N(R^{15b})C(O)N(R^{15b})₂、-N(R^{15b})SO₂N(R^{15b})₂、-OC(O)-、または-C(O)N(R^{15b})₂O-により任意に割り込まれ、またはT₅若しくはその部分は任意に置換される3～7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成する、化合物または薬剤的に許容される塩。

【請求項16】

G₂はSであり、G₁はNであり、HYは、モルホリノであり、G₃は-C(=O)-であり、G₄は-NH-であり、tは2であり、R⁵はHであり、R¹²はHであり、環Aは任意に置換される6～10員のアリールであり、nは1であり、R²は任意に置換されるフェニルまたは5～6員のヘテロアリールである、請求項15に記載のVIIIAの化合物。

【請求項17】

環Aは10員のアリールである、請求項16に記載の化合物。

【請求項18】

G₁はCR¹であり、およびG₂はSである、請求項15に記載の化合物。

【請求項19】

G₁はNであり、およびG₂はSである、請求項15に記載の化合物。

【請求項20】

構造式VIIIAを有する、請求項15～19のいずれか1項に記載の化合物または

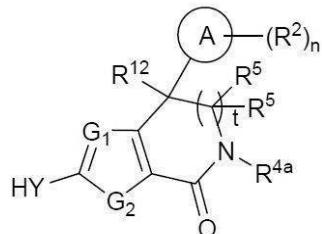
薬剤的に許容される塩。

【請求項 2 1】

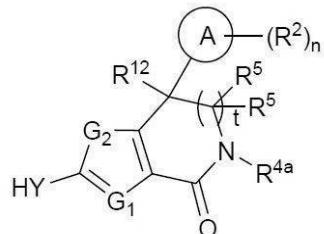
構造式 V I I I I - A - i または V I I I I - B - i を有する、請求項 1 5、1 8 または 1 9 のいずれか 1 項に記載の化合物：

【化 2 7 - 3】

【化 2 7】



V I I I I - A - i



V I I I I - B - i。

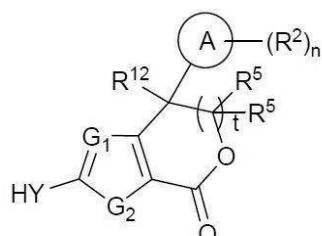
または薬剤的に許容される塩。

【請求項 2 2】

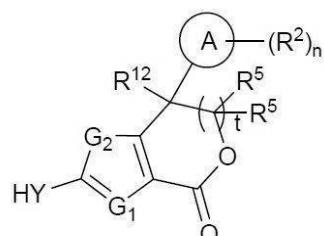
以下の式の 1 つに従う構造式を有する、請求項 1 5、1 8 または 1 9 のいずれか 1 項に記載の化合物：

【化 2 8 - 3】

【化 2 8】



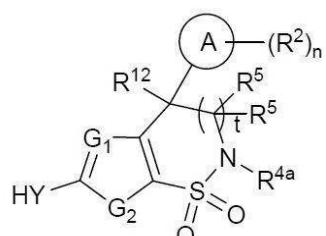
V I I I I - A - i i



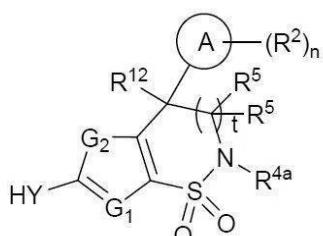
V I I I I - B - i i。

【化 2 9 - 3】

【化 2 9】



V I I I I - A - i i i



V I I I I - B - i i i。

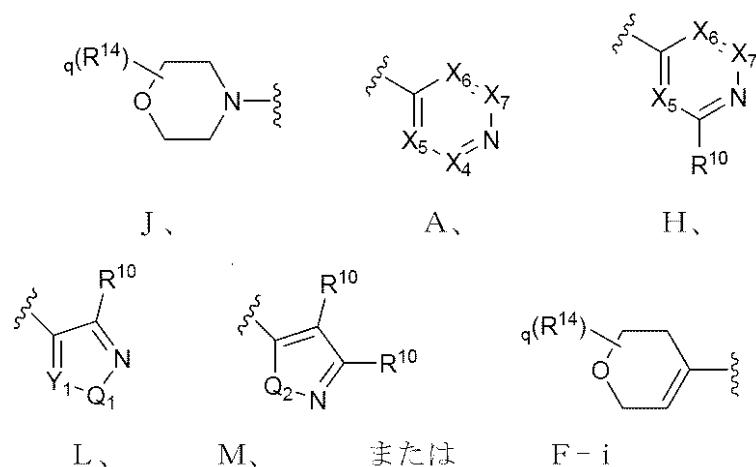
または薬剤的に許容される塩。

【請求項 2 3】

請求項 1 5 または 1 8 ~ 2 2 のいずれか 1 項に記載の化合物であって、HY は以下に示す構造式から選択され、

【化30-3】

【化30】



式中 X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 の各出現は独立して $-CR^{1-0}$ または N であり、
 ただし X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 のうちの 2 つより多い出現が N であることはなく、

Q_1 および Q_2 の各出現は独立して S 、 O または $-NR^{6-}$ であり、

Y_1 の各出現は独立して $-CR^{1-0}$ または N であり、

または X_6 および X_7 、または Y_1 および Q_1 の 2 つの隣接する出現は、それらが結合される原子と一緒にになって、5 ~ 6 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 6 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し、

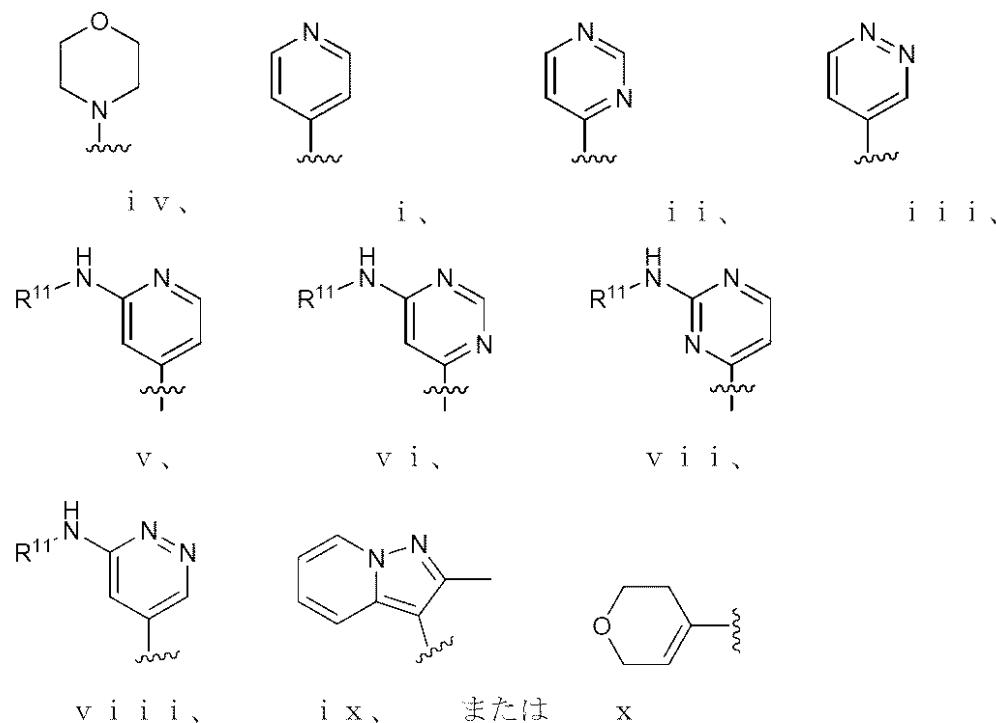
R^{1-4} の各出現は独立して任意に置換される C_{1-6} 脂肪族基である、
 化合物。

【請求項24】

請求項 15 または 18 ~ 22 のいずれか 1 項に記載の化合物であって、HY は以下に示す構造式から選択され、

【化31-3】

【化31】



各 HY 基は R¹⁻⁰ または R¹⁻⁴ の 1 つまたは複数の出現で、任意に、さらに置換される化合物。

【請求項25】

HY は任意に置換されるモルホリノ (i v) またはジヒドロピラン (x) から選択される、請求項24に記載の化合物。

【請求項26】

HY は任意に置換されるモルホリノ (i v) から選択される、請求項25に記載の化合物。

【請求項27】

請求項15または18~22のいずれか1項に記載の化合物であって、環Aは任意に置換されるナフチル、フェニル、キノリン、イソキノリン、またはベンズイミダゾール環である、化合物。

【請求項28】

請求項27に記載の化合物であって、環AはR²によって任意に置換され、およびR²の各出現は独立してハロゲン、C₁₋₃アルキル、-CN、C₁₋₃ハロアルキル、-OC₁₋₃アルキル、-OC₁₋₃ハロアルキル、-NHC(O)C₁₋₃アルキル、-NHC(O)NHC₁₋₃アルキル、-NHS(O)₂C₁₋₃アルキル、または-C(O)Hであり、nは0~3である、化合物。

【請求項29】

請求項28に記載の化合物であって、環Aはフェニル基であり、R²の各出現は独立してハロゲン、C₁₋₃アルキル、-CN、C₁₋₃ハロアルキル、-OC₁₋₃アルキル、-OC₁₋₃ハロアルキル、-NHC(O)C₁₋₃アルキル、-NHC(O)NHC₁₋₃アルキル、-NHS(O)₂C₁₋₃アルキル、または-C(O)Hであり、nは0~3である、化合物。

【請求項30】

請求項28に記載の化合物であって、環Aはフェニル基であり、R²はハロゲンであり

、nは1または2である、化合物。

【請求項31】

請求項15に記載の化合物であって、R⁵の各出現は独立して水素、ハロ、またはC₁~₆脂肪族、-C(O)N(R¹~⁵^b)₂、-C(O)OR¹~⁵^b、-CH₂N(R¹~⁵^b)₂、-CH₂OR¹~⁵^b、-CH₂SR¹~⁵^c、3~10員の脂環式、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基である、化合物。

【請求項32】

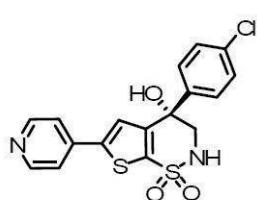
以下：

【表1-1】

【表1】



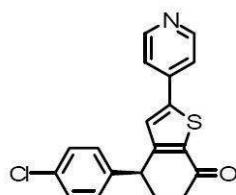
1



2



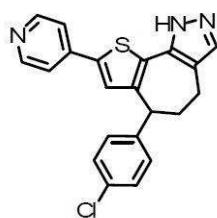
3



4

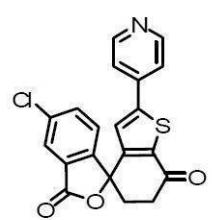
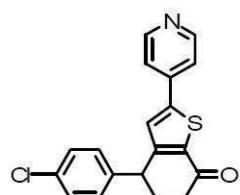
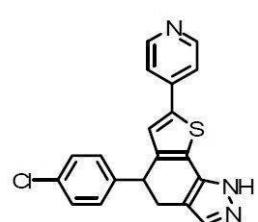
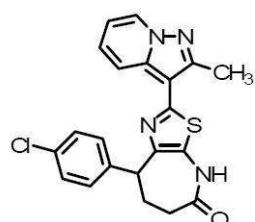
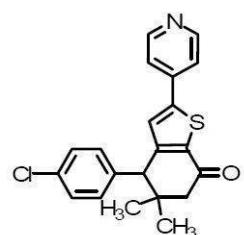
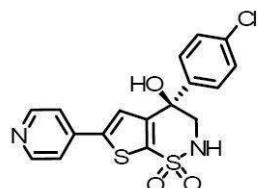
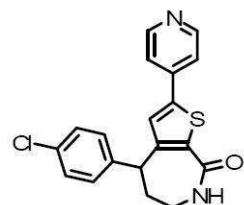


5

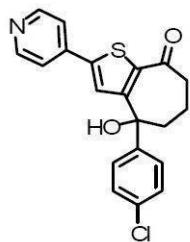


6

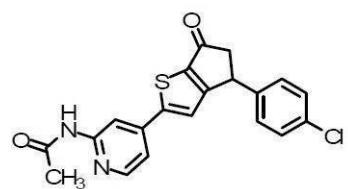
【表 1 - 2】



【表1-3】



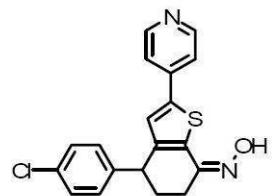
15



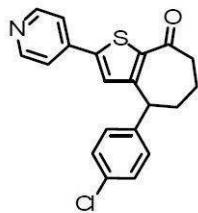
16



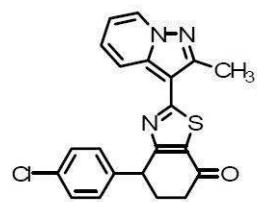
17



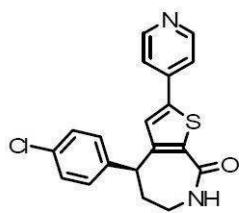
18



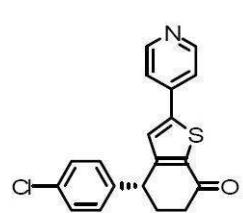
19



20

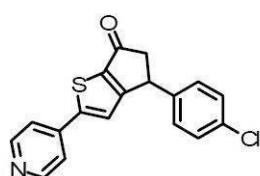


21

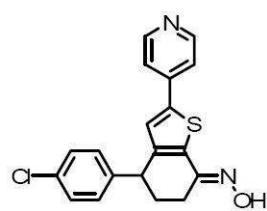


22

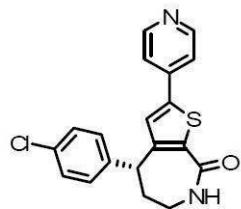
【表 1 - 4】



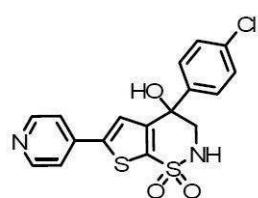
23



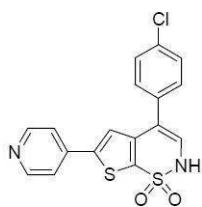
24



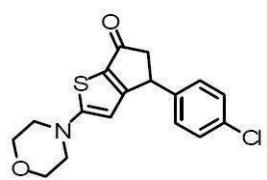
25



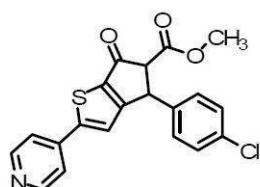
26



27



28



29

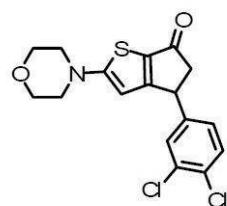


30

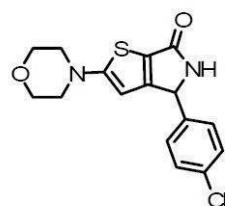
【表 1 - 5】



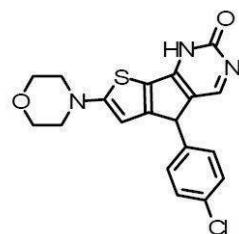
31



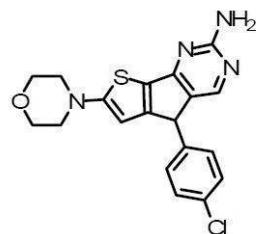
32



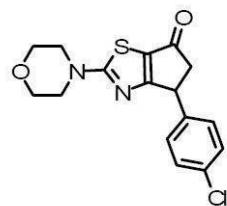
33



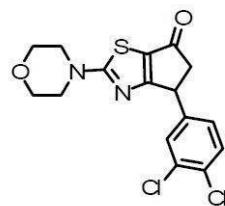
34



35

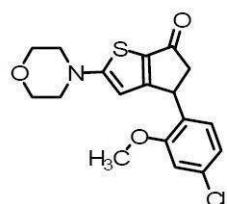


36

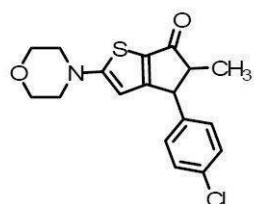


37

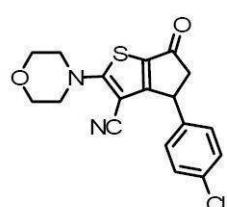
【表 1 - 6】



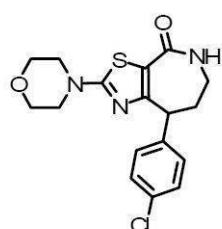
38



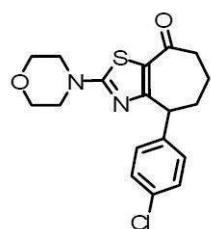
39



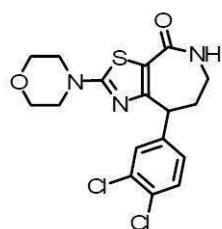
40



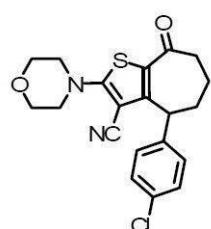
41



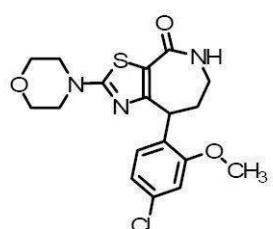
42



43



44



45

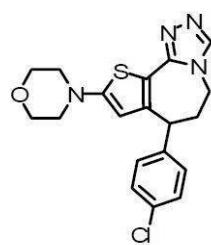
【表 1 - 7】



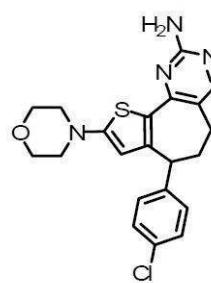
46



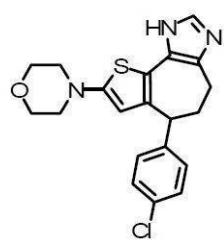
47



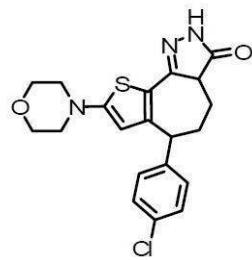
48



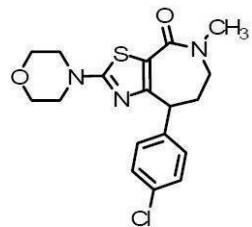
49



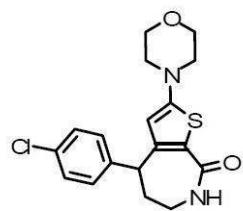
50



51

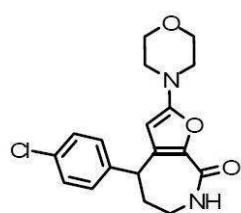


52

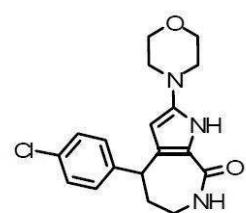


53

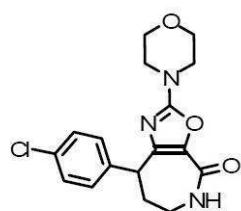
【表 1 - 8】



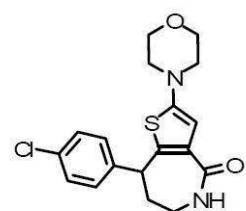
54



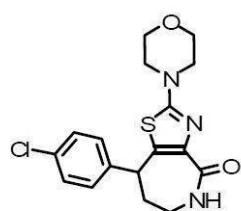
55



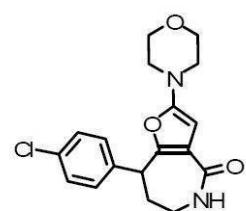
56



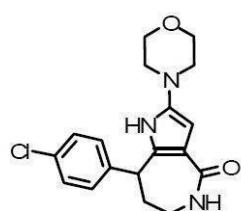
57



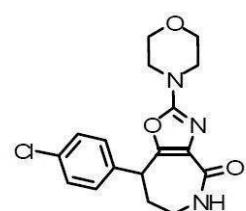
58



59

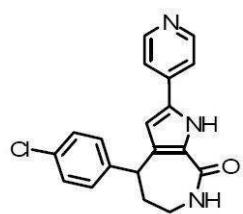


60

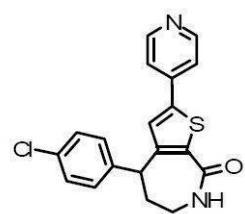


61

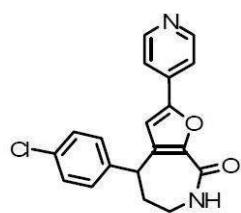
【表 1 - 9】



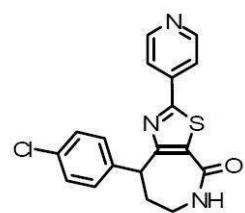
62



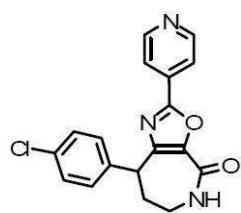
63



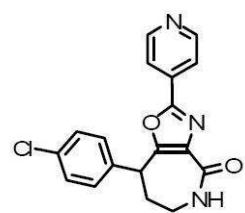
64



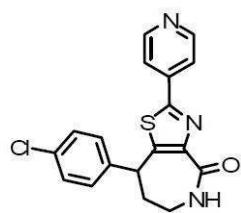
65



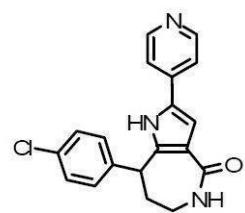
66



67

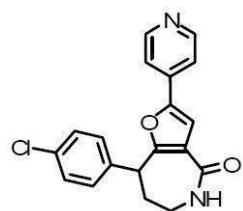


68

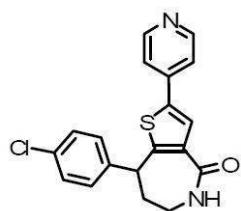


69

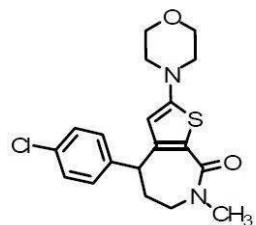
【表 1 - 10】



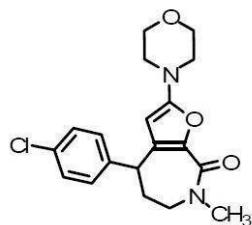
70



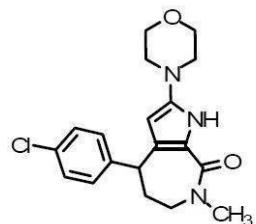
71



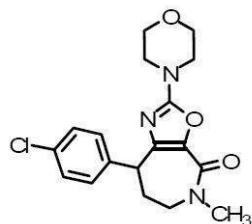
72



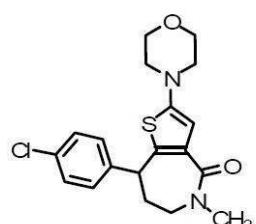
73



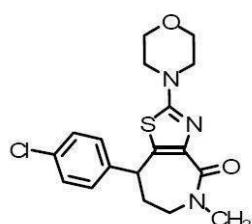
74



75

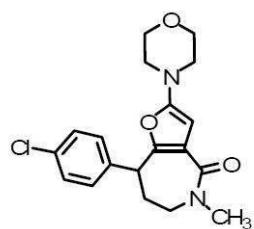


76

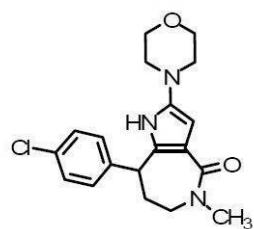


77

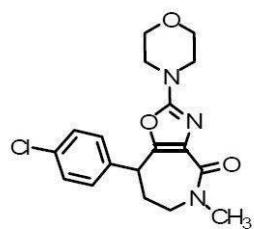
【表 1 - 11】



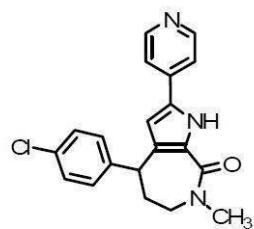
78



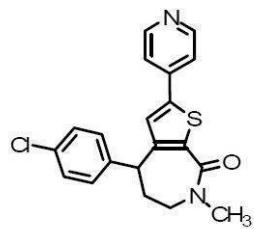
79



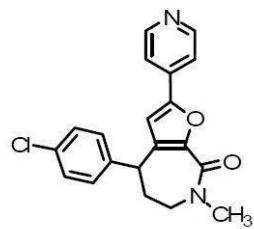
80



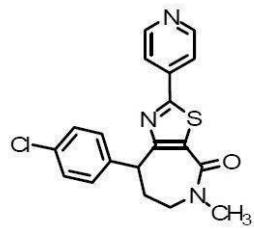
81



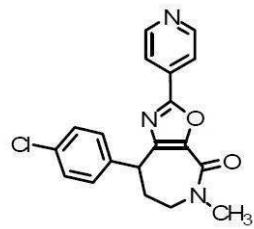
82



83

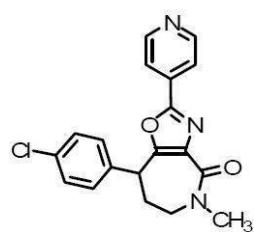


84

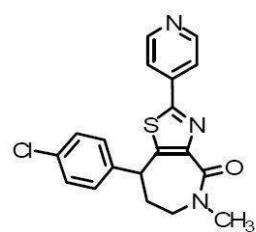


85

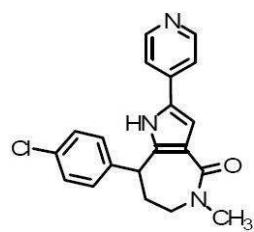
【表 1 - 1 2】



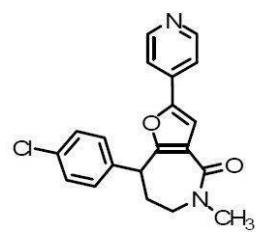
86



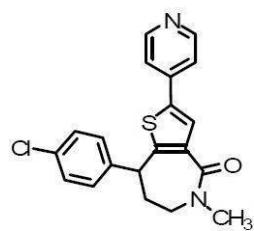
87



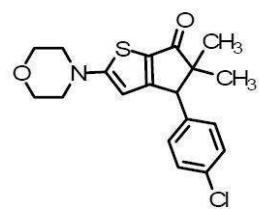
88



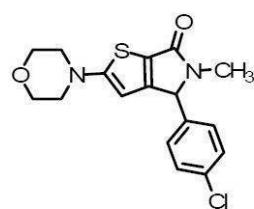
89



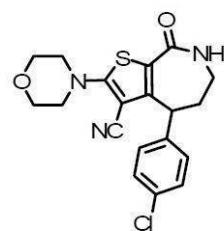
90



91

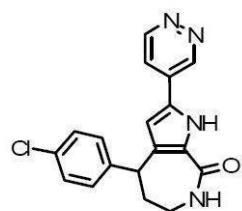


92

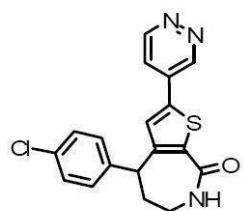


93

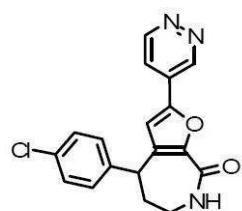
【表 1 - 1 3】



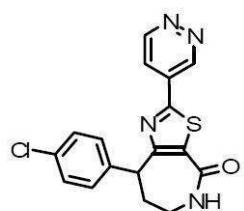
94



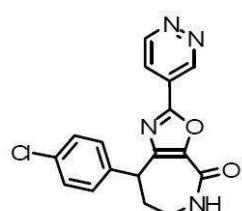
95



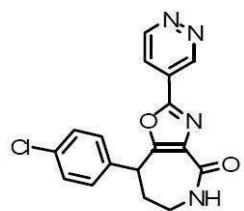
96



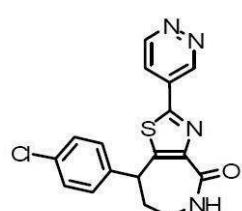
97



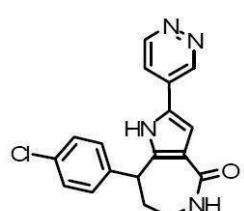
98



99

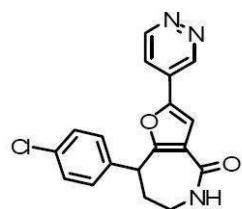


100

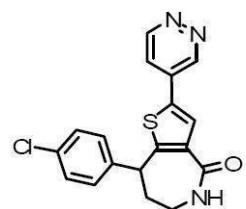


101

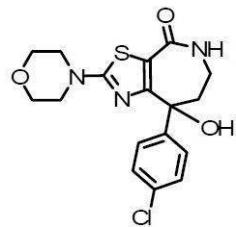
【表 1 - 1 4】



102



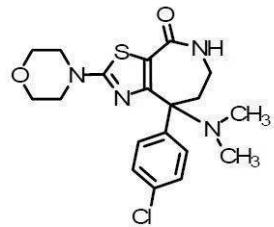
103



104



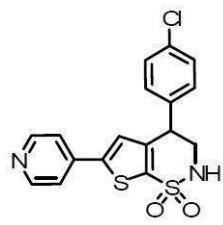
105



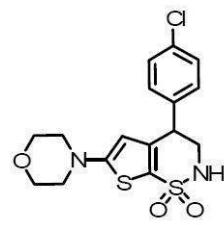
106



107



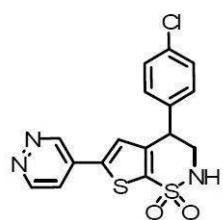
108



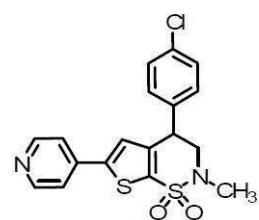
109

-

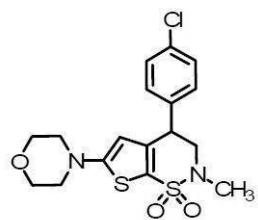
【表 1 - 15】



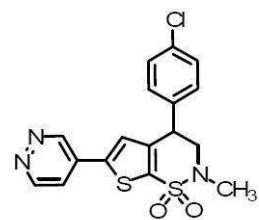
110



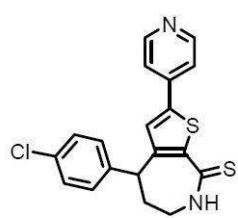
111



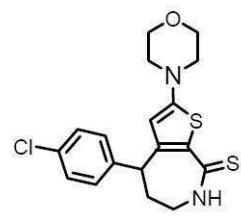
112



113



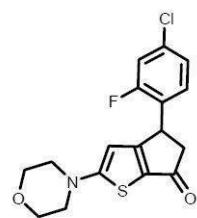
114



115

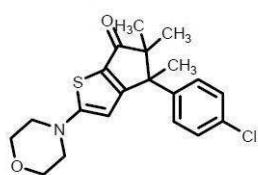


116

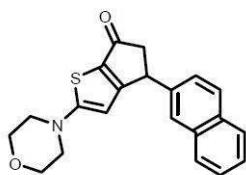


117

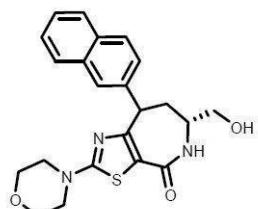
【表 1 - 1 6】



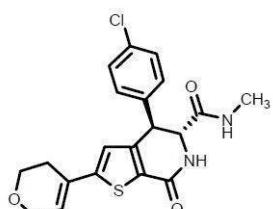
118



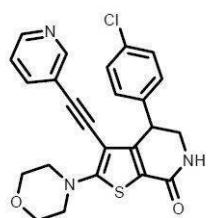
119



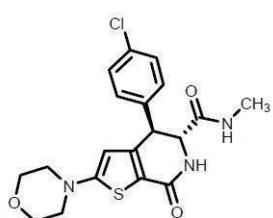
120



121



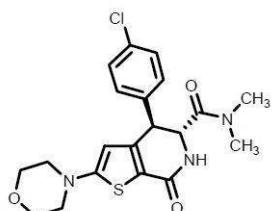
122



123



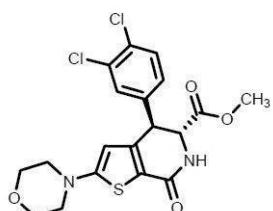
124



125

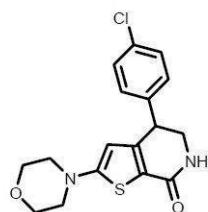


126

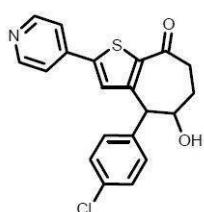


127

【表 1 - 17】



128



129



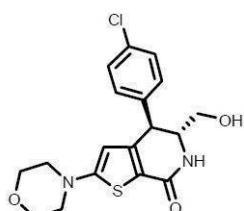
130



131



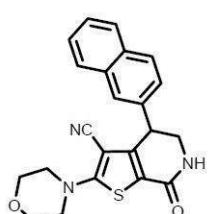
132



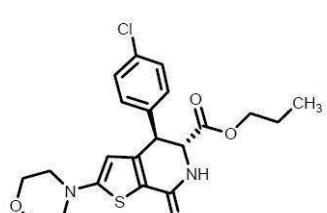
133



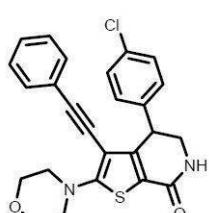
134



135



136

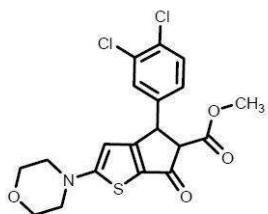


137

【表 1 - 1 8】



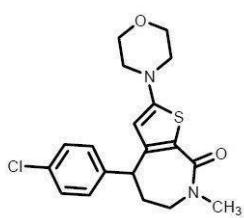
138



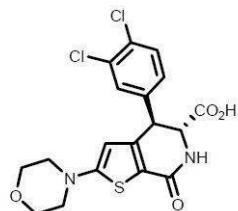
139



140



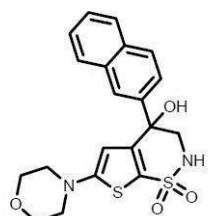
141



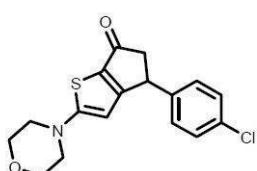
142



143



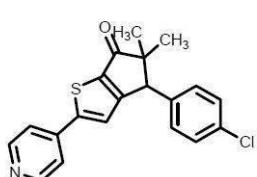
144



145



146

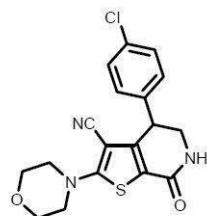


147

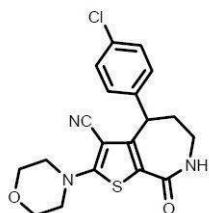
【表 1 - 1 9】



148



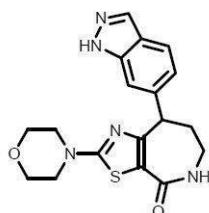
149



150



151



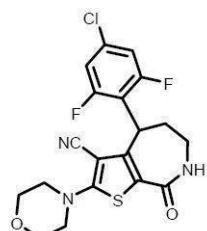
152



153



154



155

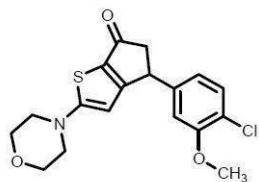


156



157

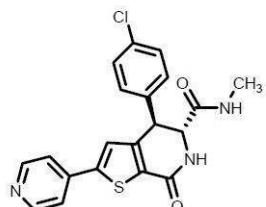
【表 1 - 20】



158



159



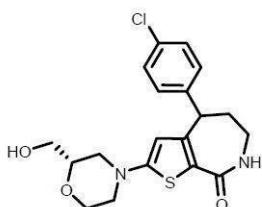
160



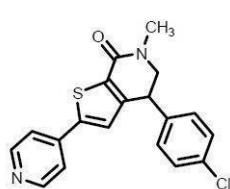
161



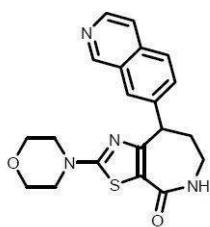
162



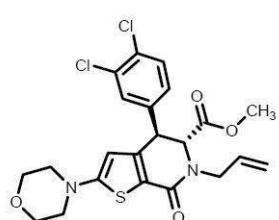
163



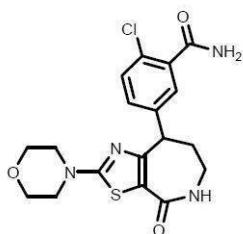
164



165

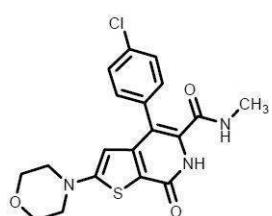


166



167

【表 1 - 2 1】



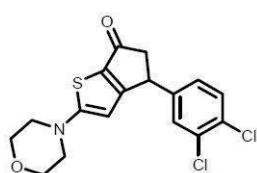
168



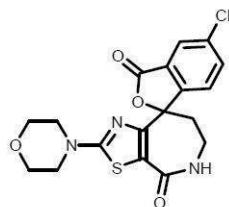
169



170



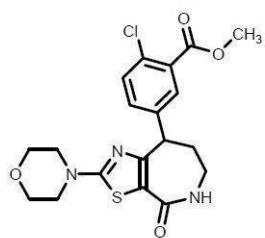
171



172



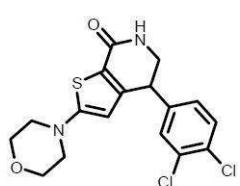
173



174



175

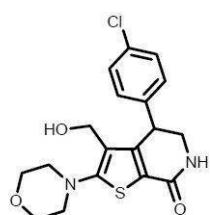


176

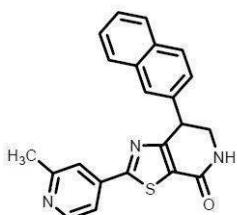


177

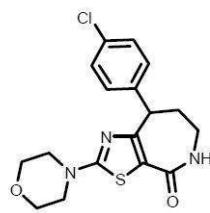
【表 1 - 2 2】



178



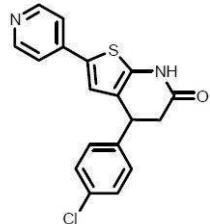
179



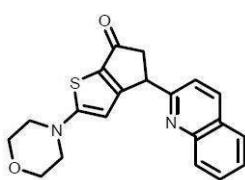
180



181



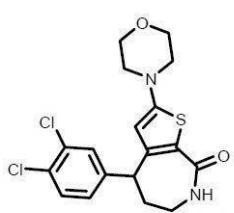
182



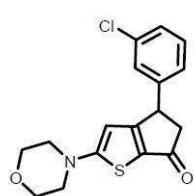
183



184



185



186



187

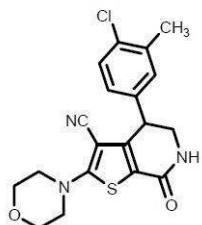
【表 1 - 2 3】



188



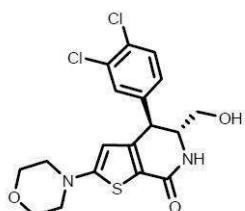
189



190



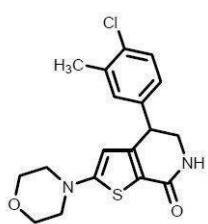
191



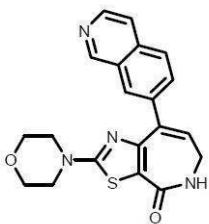
192



193



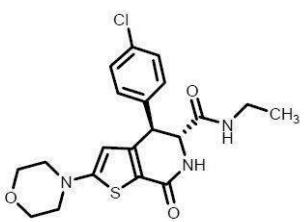
194



195



196



197

【表 1 - 2 4】



198



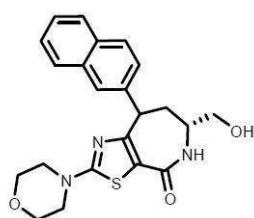
199



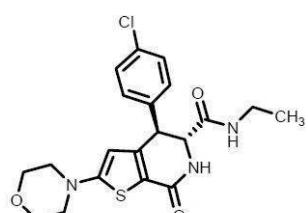
200



201



202



203



204



205

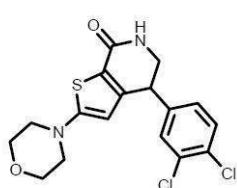


206

【表1-25】



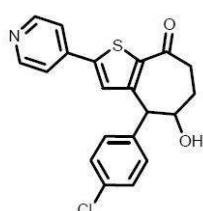
207



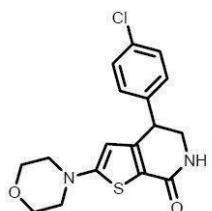
208



209



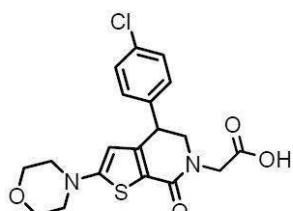
210



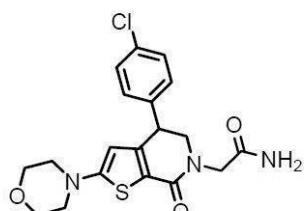
211



212



213



214

からなる群から選択される、化合物または薬剤的に許容される塩。

【請求項33】

請求項1～32のいずれか1項に記載の化合物および薬剤的に許容される担体を含む組成物。

【請求項34】

患者における増殖性障害、炎症性障害、または心血管障害を治療するための組成物であって、治療有効量の請求項1～32に記載の化合物を含む、組成物。

【請求項35】

患者におけるP13KまたはmTOR活性を阻害するための組成物であって、治療有効量の請求項1～32のいずれか1項に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】0009

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0009】

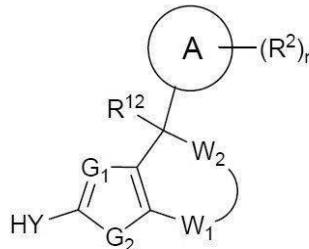
一実施形態において、例えば、以下の項目が提供される。

(項目1)

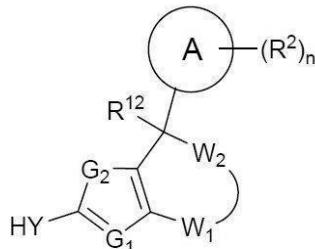
構造式 I - A または I - B に示す化合物

【化1 - 3】

【化1】



I - A



I - B

-

または薬剤的に許容される塩であり、式中

G_1 は N または $C\ R^1$ であり、 R^1 は H、-CN、ハロゲン、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10員の脂環式、または $-Z-R^{1-1}$ から選択される任意に置換される基であり、ここで

Z は任意に置換される C_{1-3} アルキレン鎖、-O-、-N(R^{1-a})-、-S-、-S(O)-、S(O)₂-、-C(O)-、-CO₂-、-C(O)NR^{1-a}-、-N(R^{1-a})C(O)-、-N(R^{1-a})CO₂-、-S(O)₂NR^{1-a}-、-N(R^{1-a})S(O)₂-、-OC(O)N(R^{1-a})-、-N(R^{1-a})C(O)NR^{1-a}-、-N(R^{1-a})S(O)₂NR^{1-a}-、または-OC(O)-から選択され、

R^{1-a} は水素または任意に置換される C_{1-4} 脂肪族であり、および

R^{1-1} は水素または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、または 6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、および

G_2 は S、O、または NR^3 であり、ここで R^3 は水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族であり、

環 A は 6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^2 の各出現は独立して - R^{1-2-a} 、- T_2 - R^{1-2-d} 、または - V_2 - T_2 - R^{1-2-d} であり、および

R^{1-2-a} の各出現は独立してハロゲン、-CN、-NO₂、-R^{1-2-c}、-N(R^{1-2-b})₂、-OR^{1-2-b}、-SR^{1-2-c}、-S(O)₂R^{1-2-c}、-C(O)R^{1-2-b}、-C(O)OR^{1-2-b}、-C(O)N(R^{1-2-b})₂、-S(O)₂N(R^{1-2-b})₂、-OC(O)N(R^{1-2-b})₂、-N(R^{1-2-e})C(O)R^{1-2-b}、-N(R^{1-2-e})S(O)₂R^{1-2-c}、-N(R^{1-2-e})C(O)OR^{1-2-b}、-N(R^{1-2-e})C(O)N(R^{1-2-b})₂、または -N(R^{1-2-e})SO₂N(R^{1-2-b})₂ であり、または R^{1-2-b} の 2 つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素若しくは硫黄から選択される 0 ~ 1 の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される 4 ~ 7 員のヘテロシクリル環を形成し、

R^{1-2-b} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して

選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2c} の各出現は独立して、C₁₋₆脂肪族、3～10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2d} の各出現は独立して水素、または3～10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2e} の各出現は独立して水素または任意に置換されるC₁₋₆脂肪族基であり、

V_2 の各出現は独立して-N(R^{1-2e})-、-O-、-S-、-S(O)-、-S(O)₂-、-C(O)-、-C(O)O-、-C(O)N(R^{1-2e})-、-S(O)₂N(R^{1-2e})-、-OC(O)N(R^{1-2e})-、-N(R^{1-2e})C(O)-、-N(R^{1-2e})SO₂-、-N(R^{1-2e})C(O)O-、-N(R^{1-2e})C(O)N(R^{1-2e})-、-N(R^{1-2e})SO₂N(R^{1-2e})-、-OC(O)-、または-C(O)N(R^{1-2e})-O-であり、および

T_2 は任意に置換されるC₁₋₆アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、-N(R¹⁻³)-、-O-、-S-、-S(O)-、-S(O)₂-、-C(O)-、-C(O)O-、-C(O)N(R¹⁻³)-、-S(O)₂N(R¹⁻³)-、-OC(O)N(R¹⁻³)-、-N(R¹⁻³)C(O)-、-N(R¹⁻³)SO₂-、-N(R¹⁻³)C(O)O-、-N(R¹⁻³)C(O)N(R¹⁻³)-、-N(R¹⁻³)S(O)₂N(R¹⁻³)-、-OC(O)-、または-C(O)N(R¹⁻³)-O-によって任意に割り込まれ、または T_2 若しくはその部分は任意に置換される3～7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成し、ここで R^{1-3} は水素または任意に置換されるC₁₋₄脂肪族基であり、

n は0～4であり、

R^{1-2} は水素、ハロ、またはC₁₋₆脂肪族、-C(O)N(R^{5a})-₂、3～10員の脂環式、-N(R^{4b})-₂、-OR^{4a}、または-SR^{4a}から選択される任意に置換される基であり、

または R^2 および R^{1-2} は任意に置換される3～10員の脂環式を形成し、

W_1 は、-C(O)C(R⁴)-₂-、-C(R⁴)-₂C(O)-、-C(O)O-、-OC(O)-、-C(O)NR^{4a}-、-NR^{4a}C(O)-、-C(=NR^{4b})C(R⁴)-₂-、-C(R⁴)-₂C(=NR^{4b})-、-C(=NR^{4b})O-、-OC(=NR^{4b})-、-C(=NR^{4b})NR^{4a}-、-NR^{4a}C(=NR^{4b})-、-S(O)C(R⁴)-₂-、-C(R⁴)-₂S(O)-、-S(O)O-、-OS(O)-、-S(O)NR^{4a}-、-NR^{4a}S(O)-、-C(S)C(R⁴)-₂-、-C(R⁴)-₂C(S)-、-C(S)O-、-OC(S)-、-C(S)NR^{4a}-、または-NR^{4a}C(S)-から選択され、

W_2 は-(C-W₃)_rであるか、または W_2 の任意の2つの出現は独立して-C(R⁵)=C(R⁵)-であり、

ここで W_3 の各出現は独立して-(R⁵)_rまたは=Oであり、

r は0～3であり、

R^{4-} の各出現は独立して水素、ハロ、または任意に置換されるC₁₋₆脂肪族または-C(O)OR^{4c}であり、

R^{4a} の各出現は独立して水素または任意に置換されるC₁₋₆脂肪族であり、

R^{4b} の各出現は独立して水素、または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族、-OR

R^{4c} 、または- $N(R^{4a})_2$ から選択される基であり、

R^{4c} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族であり、

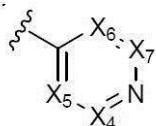
R^{5a} の各出現は独立して水素、ハロ、または C_{1-6} 脂肪族、-C(O)N(R^{5b})₂、3~10員の脂環式、6~10員のアリール、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリール、-N(R^{4b})₂、-OR^{4a}、または-SR^{4a}から選択される任意に置換される基であり、

R^{5a} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族であり、

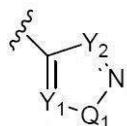
HYは以下の構造式から選択される任意に置換される基であり、

【化2-3】

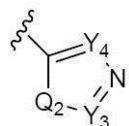
【化2】



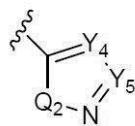
A、



B、



C、または



D

ここで X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 の各出現は独立して- CR^{10} または N であり、

ただし X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 のうちの2つより多い出現が N であることはなく、 Q_1 および Q_2 の各出現は独立して S 、 O または- NR^6 であり、

Y_1 、 Y_2 、 Y_3 、 Y_4 、および Y_5 の各出現は独立して- CR^{10} または N であり、

または、 X_4 および X_5 、 X_6 および X_7 、 Y_1 および Q_1 、 Y_3 および Q_2 、または Y_4 および Y_5 の2つの隣接する出現は、それらが結合される原子と一緒にになって、5~6員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~6員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し、

ここで R^{10} は- R^{10b} 、- V_1-R^{10c} 、- T_1-R^{10b} 、または- $V_1-T_1-R^{10b}$ であり、ここで

V_1 は- NR^7 、- $NR^7-C(O)$ 、- $NR^7-C(S)$ 、- $NR^7-C(NR^7)$ 、- $NR^7-C(O)OR^{10a}$ 、- $NR^7-C(O)NR^7$ 、- $NR^7-C(O)SR^{10a}$ 、- $NR^7-C(S)OR^{10a}$ 、- $NR^7-C(S)NR^7$ 、- $NR^7-C(S)SR^{10a}$ 、- $NR^7-C(NR^7)OR^{10a}$ 、- $NR^7-C(NR^7)NR^7$ 、- $NR^7-S(O)_2$ 、- $NR^7-S(O)_2NR^7$ 、- $C(O)$ 、- CO_2 、- $C(O)NR^7$ 、- $C(O)NR^7O$ 、- SO_2 、または- SO_2NR^7 であり、

R^{10a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

T_1 は任意に置換される C_{1-6} アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、- $N(R^7)$ 、- O 、- S 、- $S(O)$ 、- $S(O)_2$ 、- $C(O)$ 、- $C(O)O$ 、- $C(O)N(R^7)$ 、- $S(O)_2N(R^7)$ 、- $O C(O)N(R^7)$ 、- $N(R^7)SO_2$ 、- $N(R^10a)C(O)O$ 、- $NR^{10a}C(O)N(R^{10a})$ 、- $N(R^{10a})S(O)_2N(R^{10a})$ 、- $O C(O)$ 、または- $C(O)N(R^7)$ - O によって任意に割り込まれ、または T_1 は任意に置換される3~7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を形成し、

R^{10b} の各出現は独立して水素、ハロゲン、-CN、-NO₂、-N(R⁷)₂、-OR^{10a}、-SR^{10a}、-S(O)₂R^{10a}、-C(O)R^{10a}、-C(O)OR^{10a}、-C(O)N(R⁷)₂、-C(O)N(R⁷)₂、-S(O)₂N(R⁷)₂、-OC(O)N(R⁷)₂、-N(R⁷)C(O)R^{10a}、-N(R⁷)SO₂R^{10a}、-N(R⁷)C(O)OR^{10a}、-N(R⁷)C(O)N(R⁷)₂、または-N(R⁷)SO₂N(R⁷)₂、またはC₁₋₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{10c} の各出現は独立して水素、またはC₁₋₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、または

R⁷ およびR^{10c} は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、または硫黄から独立して選択される0~1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシクリル環を形成し、

R⁷ の各出現は独立して水素、-C(O)R^{7a}、-CO₂R^{7a}、-C(O)N(R^{7a})₂、-C(O)N(R^{7a})-OR^{7a}、-SO₂R^{7a}、-SO₂N(R^{7a})₂、またはC₁₋₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

ここでR^{7a} の各出現は独立して水素またはC₁₋₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R⁶ の各出現は独立して水素、-C(O)R^{6a}、-CO₂R^{6a}、-C(O)N(R^{6b})₂、-SO₂R^{6a}、-SO₂N(R^{6b})₂、またはC₁₋₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

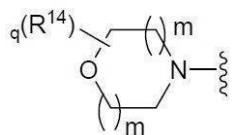
ここでR^{6a} の各出現は独立して水素、またはC₁₋₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{6b} の各出現は独立して水素、またはC₁₋₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、またはR^{6b} の2つの出現はそれらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する3~6員のヘテロシクリル、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基を形成し、

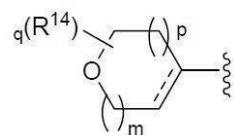
またはHYは

【化3-3】

【化3】



E



または

F

であり、

ここで R^{1-4} の各出現は独立して $-R^{1-4}a$ または $-T_1 - R^{1-4}d$ であり、ここで $R^{1-4}a$ の各出現は、原子価および安定性が許容できる範囲で独立してフッ素、=O、=S、-CN、-NO₂、-R¹⁻⁴c、-N(R¹⁻⁴b)₂、-OR¹⁻⁴b、-SR¹⁻⁴c、-S(O)₂R¹⁻⁴c、-C(O)R¹⁻⁴b、-C(O)OR¹⁻⁴b、-C(O)N(R¹⁻⁴b)₂、-N(R¹⁻⁴e)C(O)R¹⁻⁴b、-N(R¹⁻⁴e)SO₂R¹⁻⁴c、-N(R¹⁻⁴e)C(O)N(R¹⁻⁴b)₂、または-N(R¹⁻⁴e)SO₂N(R¹⁻⁴b)₂ であるか、 $R^{1-4}b$ の2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、または硫黄から選択される0~1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシクリル環を形成し、

$R^{1-4}b$ の各出現は独立して水素、またはC₁~C₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

$R^{1-4}c$ の各出現は独立してC₁~C₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

$R^{1-4}d$ の各出現は独立して水素、または3~10員の脂環式、窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから任意に置換され、

$R^{1-4}e$ の各出現は独立して水素または任意に置換されるC₁~C₆脂肪族基であり、および

T_1 は任意に置換されるC₁~C₆アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、-N(R¹⁻⁴b)-、-O-、-S-、-S(O)-、-S(O)₂-、-C(O)-、-C(O)O-、-C(O)N(R¹⁻⁴b)-、-S(O)₂N(R¹⁻⁴b)-、-O-C(O)N(R¹⁻⁴b)-、-N(R¹⁻⁴b)C(O)-、-N(R¹⁻⁴b)C(O)O-、-NR¹⁻⁴bC(O)N(R¹⁻⁴b)-、-N(R¹⁻⁴b)S(O)₂N(R¹⁻⁴b)-、-O-C(O)-、または-C(O)N(R¹⁻⁴b)-O-によって任意に割り込まれ、または T_1 若しくはその部分は、任意に置換される3~7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成し、

qは0~6であり、

mは1または2であり、および

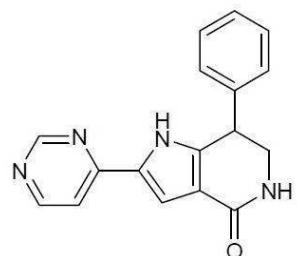
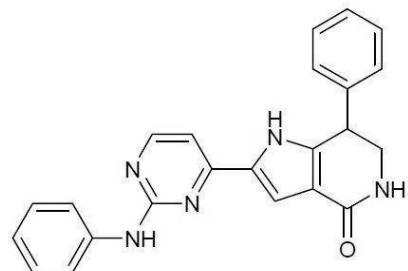
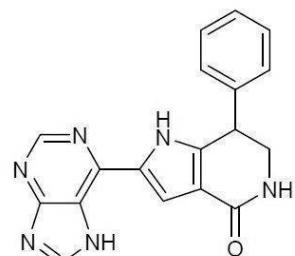
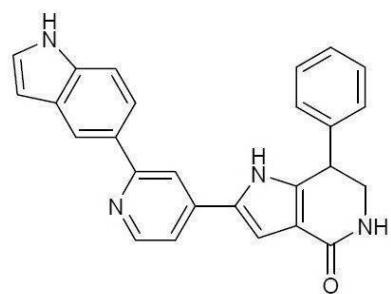
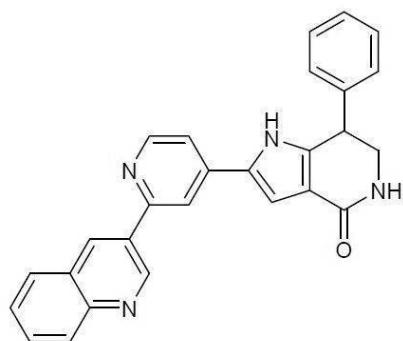
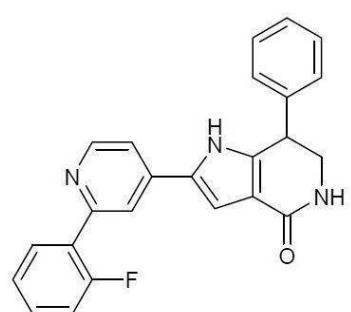
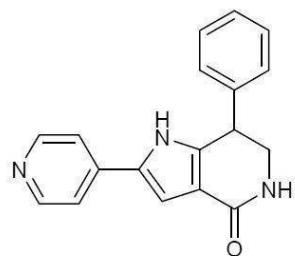
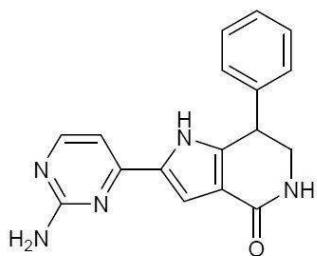
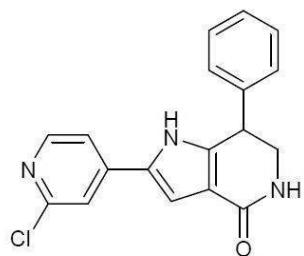
pは0、1、または2であり、

ただし構造式I-Bの化合物については、以下に示す構造式以外である、

化合物または薬剤的に許容される塩：

【化4-3】

【化4】



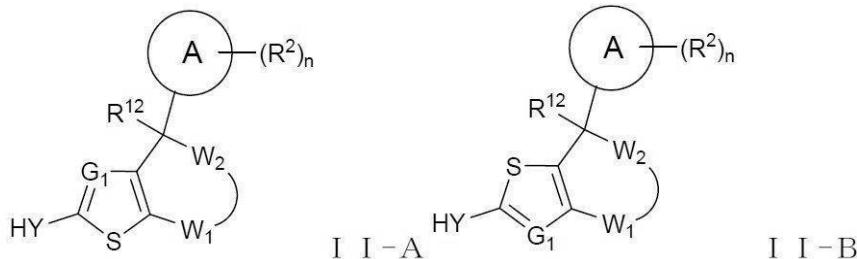
、または

(項目 2)

構造式 II-A または II-B に示す化合物

【化 5 - 3】

【化5】



または薬剤的に許容される塩であり、式中

G_1 は N または C R^1 であり、 R^1 は H 、- CN 、ハロゲン、または $C_1 - C_6$ 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、または $-Z-R^{11}$ から選択される任意に置換される基であり、ここで

Z は任意に置換される C_{1-3} アルキレン鎖、-O-、-N(R^{1a})-、-S-、-S(O)-、S(O)₂-、-C(O)-、-CO₂-、-C(O)NR^{1a}-、-N(R^{1a})C(O)-、-N(R^{1a})CO₂-、-S(O)₂NR^{1a}-、-N(R^{1a})S(O)₂-、-OC(O)N(R^{1a})-、-N(R^{1a})C(O)NR^{1a}-、-N(R^{1a})S(O)₂NR^{1a}-、または-OC(O)-から選択され、

R^1 は水素または任意に置換される C_{1-4} 脂肪族であり、および

R¹ は水素、またはC₁ ~ 6 脂肪族、3 ~ 10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1 ~ 5のヘテロ原子を有する4 ~ 10員のヘテロシクリル、または6 ~ 10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1 ~ 5のヘテロ原子を有する5 ~ 10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、および

環 A は 6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^2 の各出現は独立して $-R^{1/2}a$ 、 $-T_2 - R^{1/2}d$ 、または $-V_2 - T_2 - R^{1/2}d$ であり、および

R^{1-2} ^a の各出現は独立してハロゲン、-C N、-NO₂、-R¹⁻²^c、-N(R¹⁻²_b)₂、-OR¹⁻²_b、-SR¹⁻²_c、-S(O)₂R¹⁻²_c、-C(O)R¹⁻²_b、-C(O)OR¹⁻²_b、-C(O)N(R¹⁻²_b)₂、-S(O)₂N(R¹⁻²_b)₂、-OC(O)N(R¹⁻²_b)₂、-N(R¹⁻²_e)C(O)R¹⁻²_b、-N(R¹⁻²_e)S₂R¹⁻²_c、-N(R¹⁻²_e)C(O)OR¹⁻²_b、-N(R¹⁻²_e)C(O)N(R¹⁻²_b)₂、または-N(R¹⁻²_e)SO₂N(R¹⁻²_b)₂であり、またはR¹⁻²_bの2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される0~1の追加のヘテロ原子を有する4~7員のヘテロシクリル環を形成し

$R^{1,2}$ ^b の各出現は独立して水素または C_{1~6} 脂肪族、3~10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1~5 のヘテロ原子を有する 4~10 員のヘテロシクリル、6~10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1~5 のヘテロ原子を有する 5~10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2c} の各出現は独立して C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2d} の各出現は独立して水素、または3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換され、

R^{1-2e} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族基であり、

V_2 の各出現は独立して $-N(R^{1-2e})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $N(R^{1-2e})-$ 、 $-OC(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-N(R^{1-2e})SO_2-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)O-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-N(R^{1-2e})SO_2N(R^{1-2e})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{1-2e})-$ $O-$ であり、および

T_2 は任意に置換される C_{1-6} アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は $-N(R^{1-3})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-3})-$ 、 $-OC(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)-$ 、 $-N(R^{1-3})SO_2-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)O-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-N(R^{1-3})S(O)_2N(R^{1-3})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{1-3})-$ $O-$ によって任意に割り込まれ、または T_2 若しくはその部分は任意に置換される3~7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成し、 R^{1-3} は水素または任意に置換される C_{1-4} 脂肪族基であり、

n は 0~4 であり、

R^{1-2} は水素、ハロ、または C_{1-6} 脂肪族、 $-C(O)N(R^{5a})_2$ 、3~10員の脂環式、 $-N(R^{4b})_2$ 、 $-OR^{4a}$ 、または $-SR^{4a}$ から選択される任意に置換される基であり、

または R^2 および R^{1-2} は任意に置換される3~10員の脂環式を形成し、

W_1 は $-C(O)C(R^4)_2-$ 、 $-C(R^4)_2C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-O$ $C(O)-$ 、 $-C(O)NR^{4a}-$ 、 $-NR^{4a}C(O)-$ 、 $-C(=NR^{4b})C(R^4)_2-$ 、 $-C(R^4)_2C(=NR^{4b})-$ 、 $-C(=NR^{4b})O-$ 、 $-OC(=NR^{4b})-$ 、 $-C(=NR^{4b})NR^{4a}-$ 、 $-NR^{4a}C(=NR^{4b})-$ 、 $-S(O)C(R^4)_2-$ 、 $-C(R^4)_2S(O)-$ 、 $-S(O)O-$ 、 $-OS(O)-$ 、 $-S(O)NR^{4a}-$ 、 $-NR^{4a}S(O)-$ 、 $-S(O)_2C(R^4)_2-$ 、 $-C(R^4)_2S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2O-$ 、 $-OS(O)_2-$ 、 $-S(O)_2NR^{4a}-$ 、 $-NR^{4a}C(S)-$ 、 $-C(S)O-$ 、 $-OC(S)-$ 、 $-C(S)NR^{4a}-$ 、または $-NR^{4a}C(S)-$ から選択され、

W_2 は $- (C - W_3)_r$ であり、または W_2 の任意の2つの出現は独立して $-C(R^5) = C(R^5) -$ であり、

ここで W_3 の各出現は独立して $- (R^5)_2$ または $=O$ であり、

r は 0~3 であり、

R^4 の各出現は独立して水素、ハロ、または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族または $-C(O)OR^{4c}$ であり、

R^{4a} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族であり、

R^{4b} の各出現は独立して水素、または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族、 $-OR^{4c}$ 、または $-N(R^{4a})_2$ から選択される基であり、

R^{4c} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族であり、

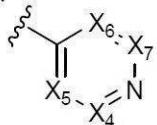
R^5 の各出現は独立して水素、ハロゲン、または $C_1 - C_6$ 脂肪族、 $-C(O)N(R^5)$ 、 $3 - 10$ 員の脂環式、 $6 - 10$ 員のアリール、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される $1 - 5$ のヘテロ原子を有する $5 - 10$ 員のヘテロアリール、 $-N(R^4)$ 、 $-OR^4$ 、または $-SR^4$ であり、

R^5 の各出現は独立して水素または任意に置換される $C_1 - C_6$ 脂肪族であり、

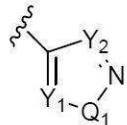
HY は以下に示す構造式から選択される任意に置換される基であり、

【化6-3】

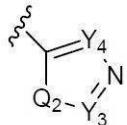
【化6】



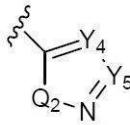
A、



B、



C、または



D

ここで X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 の各出現は独立して $-CR^{10}$ または N であり、ただし X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 のうちの 2 つより多い出現が N であることはなく、

Q_1 および Q_2 の各出現は独立して S 、 O または $-NR^6$ であり、

Y_1 、 Y_2 、 Y_3 、 Y_4 、および Y_5 の各出現は独立して $-CR^{10}$ または N であり、

または、 X_4 および X_5 、 X_6 および X_7 、 Y_1 および Q_1 、 Y_3 および Q_2 、または Y_4 および Y_5 の 2 つの隣接する出現は、それらが結合される原子と一緒にになって、 $5 - 6$ 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される $1 - 5$ のヘテロ原子を有する $5 - 6$ 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し、

ここで R^{10} は $-R^{10b}$ 、 $-V_1 - R^{10c}$ 、 $-T_1 - R^{10b}$ 、または $-V_1 - T_1 - R^{10b}$ であり、ここで

V_1 は $-NR^7$ 、 $-NR^7 - C(O)$ 、 $-NR^7 - C(S)$ 、 $-NR^7 - C(NR^7)$ 、 $-NR^7 C(O)OR^{10a}$ 、 $-NR^7 C(O)NR^7$ 、 $-NR^7 C(O)SR^{10a}$ 、 $-NR^7 C(S)OR^{10a}$ 、 $-NR^7 C(S)NR^7$ 、 $-NR^7 C(S)SR^{10a}$ 、 $-NR^7 C(NR^7)OR^{10a}$ 、 $-NR^7 C(NR^7)NR^7$ 、 $-NR^7 S(O)_2$ 、 $-NR^7 S(O)_2 NR^7$ 、 $-C(O)$ 、 $-CO_2$ 、 $-C(O)NR^7$ 、 $-C(O)NR^7 O$ 、 $-SO_2$ 、または $-SO_2 NR^7$ であり、

R^{10a} の各出現は独立して水素または $C_1 - C_6$ 脂肪族、 $3 - 10$ 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される $1 - 5$ のヘテロ原子を有する $4 - 10$ 員のヘテロシクリル、 $6 - 10$ 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される $1 - 5$ のヘテロ原子を有する $5 - 10$ 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

T_1 は任意に置換される $C_1 - C_6$ アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は $-N(R^7)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)$ 、 $-S(O)_2$ 、 $-C(O)$ 、 $-C(O)O$ 、 $-C(O)N(R^7)$ 、 $-S(O)_2 N(R^7)$ 、 $-OC(O)N(R^7)$ 、 $-N(R^7)C(O)$ 、 $-N(R^7)SO_2$ 、 $-N(R^{10a})C(O)O$ 、 $-NR^{10a}C(O)N(R^{10a})$ 、 $-N(R^{10a})SO_2$ 、 $-N(R^{10a})C(O)_2 N(R^{10a})$ 、 $-OC(O)$ 、または $-C(O)N(R^7)O$ によって任意に割り込まれ、または T_1 は任意に置換される $3 - 7$ 員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を形成し、

R^{10b} の各出現は独立して水素、ハロゲン、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-N(R^7)_2$ 、 $-OR^{10a}$ 、 $-SR^{10a}$ 、 $-S(O)_2 R^{10a}$ 、 $-C(O)R^{10a}$ 、 $-C(O)OR^{10a}$ 、 $-C(O)N(R^7)_2$ 、 $-S(O)_2 N(R^7)_2$ 、 $-OC(O)N(R^7)_2$ 、 $-N(R^7)C(O)R^{10a}$ 、 $-N(R^7)SO_2 R^{10a}$ 、 $-N(R^7)C$

$(O)OR^{10a}$ 、 $-N(R^7)C(O)N(R^7)_2$ 、または $-N(R^7)SO_2N(R^7)_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{10c} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、または

R^7 および R^{10c} は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される0~1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシクリル環を形成し、

R^7 の各出現は独立して水素、 $-C(O)R^{7a}$ 、 $-CO_2R^{7a}$ 、 $-C(O)N(R^{7a})_2$ 、 $-C(O)N(R^{7a})-OR^{7a}$ 、 $-SO_2R^{7a}$ 、 $-SO_2N(R^{7a})_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

ここで R^{7a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^6 の各出現は独立して水素、 $-C(O)R^{6a}$ 、 $-CO_2R^{6a}$ 、 $-C(O)N(R^{6b})_2$ 、 $-SO_2R^{6a}$ 、 $-SO_2N(R^{6b})_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

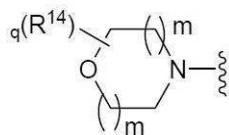
ここで R^{6a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{6b} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であるか、または R^{6b} の2つの出現はそれらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する3~6員のヘテロシクリル、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基を形成し、

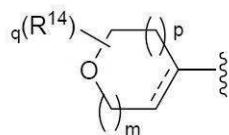
またはHYは

【化7-3】

【化7】



E または



F

であり、

ここで R^{1-4} の各出現は独立して $-R^{1-4}a$ または $-T_1 - R^{1-4}d$ であり、

$R^{1-4}a$ の各出現は、原子価および安定性が許容できる範囲で独立してフッ素、=O、=S、-CN、-NO₂、-R¹⁻⁴c、-N(R¹⁻⁴b)₂、-OR¹⁻⁴b、-SR¹⁻⁴c、-S(O)₂R¹⁻⁴c、-C(O)R¹⁻⁴b、-C(O)OR¹⁻⁴b、-C(O)N(R¹⁻⁴b)₂、-S(O)₂N(R¹⁻⁴b)₂、-OC(O)N(R¹⁻⁴b)₂、-N(R¹⁻⁴e)C(O)R¹⁻⁴b、-N(R¹⁻⁴e)SO₂R¹⁻⁴c、-N(R¹⁻⁴e)C(O)OR¹⁻⁴b、-N(R¹⁻⁴e)C(O)N(R¹⁻⁴b)₂、または-N(R¹⁻⁴e)SO₂N(R¹⁻⁴b)₂ であり、 $R^{1-4}b$ の2つの出現はそれらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される0~1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシクリル環を形成し、

$R^{1-4}b$ の各出現は独立して水素、またはC₁~C₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

$R^{1-4}c$ の各出現は独立してC₁~C₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

$R^{1-4}d$ の各出現は独立して水素、または3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから任意に置換され、

$R^{1-4}e$ の各出現は独立して水素または任意に置換されるC₁~C₆脂肪族基であり、および

T_1 は任意に置換されるC₁~C₆アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、-N(R¹⁻⁴b)-、-O-、-S-、-S(O)-、-S(O)₂-、-C(O)-、-C(O)O-、-C(O)N(R¹⁻⁴b)-、-S(O)₂N(R¹⁻⁴b)-、-OC(O)N(R¹⁻⁴b)-、-N(R¹⁻⁴b)C(O)-、-N(R¹⁻⁴b)SO₂-、-N(R¹⁻⁴b)C(O)O-、-NR¹⁻⁴bC(O)N(R¹⁻⁴b)-、-N(R¹⁻⁴b)SO₂N(R¹⁻⁴b)-、-OC(O)-、または-C(O)N(R¹⁻⁴b)-O-によって任意に割り込まれ、または T_1 若しくはその部分は任意に置換される3~7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成し、

q は 0~6 であり、

m は 1 または 2 であり、および

p は 0、1、または 2 である、

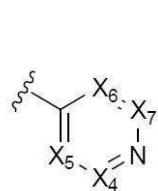
化合物または薬剤的に許容される塩。

(項目3)

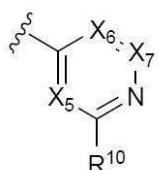
項目1または2に記載の化合物であって、HYは以下に示す構造式から選択され、

【化8-3】

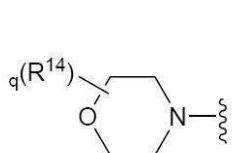
【化8】



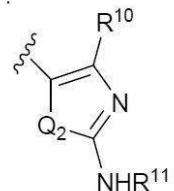
A、



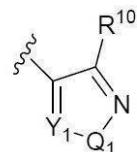
H、



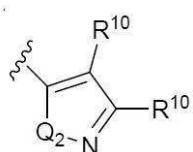
J、



K、



L、 または M



式中 X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 の各出現は独立して $-CR^{1-0}$ または N であり、た
だし X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 のうちの 2つより多い出現が N であることはなく、
 Q_1 および Q_2 の各出現は独立して S 、 O または $-NR^{6-}$ であり、
 Y_1 の各出現は独立して $-CR^{1-0}$ または N であり、

または X_6 および X_7 、または Y_1 および Q_1 の 2つの隣接する出現は、それらが結
合される原子と一緒にになって、5~6員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄か
ら独立して選択される 1~5 のヘテロ原子を有する 5~6 員のヘテロアリールから選択さ
れる任意に置換される縮合基を形成し、

R^{1-4} の各出現は独立して任意に置換される C_{1-6} 脂肪族基である、
化合物。

(項目4)

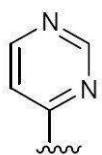
項目1または2に記載の化合物であって、HYは以下に示す構造式から選択され、

【化9-3】

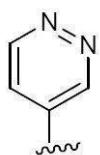
【化9】



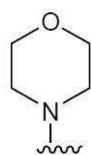
i、



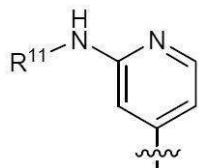
i i、



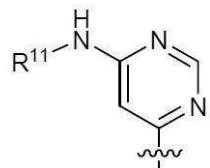
i i i、



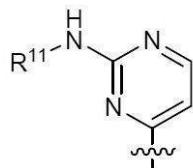
i v、



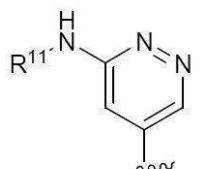
v、



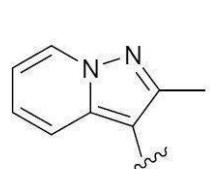
v i、



v i i、



v i i i または i x



各HY基は、R¹⁻⁰またはR¹⁻⁴の1つまたは複数の出現で、任意に、さらに置換される、化合物。

(項目5)

G₁はNである項目1または2に記載の化合物。

(項目6)

G₁はCR¹である項目1または2に記載の化合物。

(項目7)

項目1または2に記載の化合物であって、環Aはフェニル基であり、R²の各出現は独立してハロゲン、C₁₋₃アルキル、-CN、C₁₋₃ハロアルキル、-OC₁₋₃アルキル、-OC₁₋₃ハロアルキル、-NHCO(O)C₁₋₃アルキル、-NHCO(O)NHC₁₋₃アルキル、-NHCO(O)₂C₁₋₃アルキル、または-C(O)Hであり、およびnは0~3である、化合物。

(項目8)

環Aはフェニル基であり、R²はハロゲンであり、およびnは1または2である、項目7に記載の化合物。

(項目9)

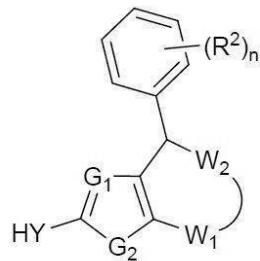
R¹⁻²はOHである、項目1または2に記載の化合物。

(項目10)

以下に示す構造式IVを有する、項目1に記載の化合物：

【化10-3】

【化10】



I V。

(項目11)

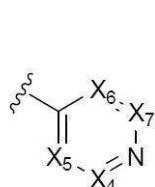
G₂はSである、項目10に記載の化合物。

(項目12)

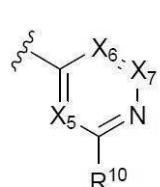
項目10に記載の化合物であって、HYは以下に示す構造式から選択され、

【化11-3】

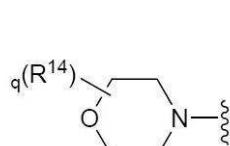
【化11】



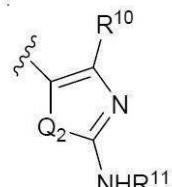
A、



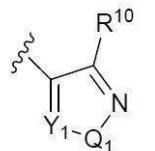
H、



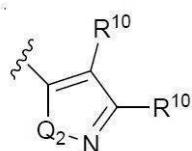
J、



K、



L、 または M

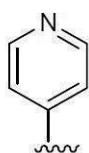
式中X₄、X₅、X₆、およびX₇の各出現は独立して-CR¹⁻⁰またはNであり、ただしX₄、X₅、X₆、およびX₇のうちの2つより多い出現がNであることはなく、Q₁およびQ₂の各出現は独立してS、Oまたは-NR⁶であり、Y₁の各出現は独立して-CR¹⁻⁰またはNであり、またはX₆およびX₇、またはY₁およびQ₁の2つの隣接する出現は、それらが結合される原子と一緒にになって、5~6員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~6員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し、R¹⁻⁴の各出現は独立して任意に置換されるC₁₋₆脂肪族基である、化合物。

(項目13)

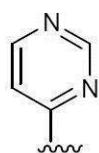
項目10に記載の化合物であって、HYは以下に示す構造式から選択され、

【化12-3】

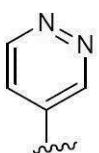
【化12】



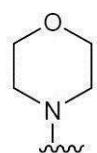
i、



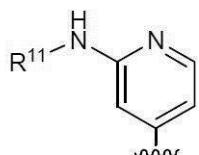
i i、



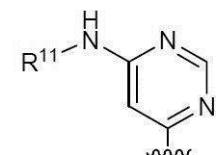
i i i、



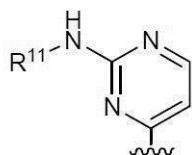
i v、



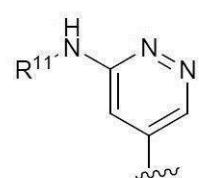
v、



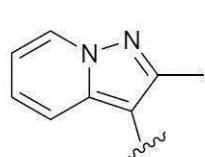
v i、



v i i、



v i i i または i x



各 HY 基は R¹⁻⁰ または R¹⁻⁴ の 1 つまたは複数の出現で、任意に、さらに置換される化合物。

(項目14)

G₁ は N である、項目10に記載の化合物。

(項目15)

G₁ は C R¹ である、項目10に記載の化合物。

(項目16)

項目10に記載の化合物であって、R² の各出現は独立してハロゲン、C₁₋₃ アルキル、-CN、C₁₋₃ ハロアルキル、-OC₁₋₃ アルキル、-OC₁₋₃ ハロアルキル、-NHC(O)C₁₋₃ アルキル、-NHC(O)NHC₁₋₃ アルキル、-NHS(O)₂C₁₋₃ アルキル、または -C(O)H であり、n は 0 ~ 3 である、化合物。

(項目17)

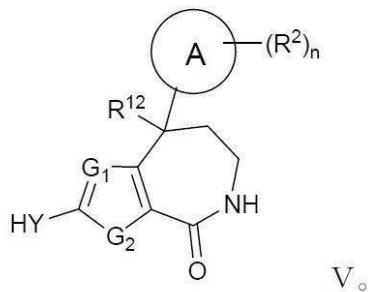
R² はハロゲンであり、およびnは1または2である、項目16に記載の化合物。

(項目18)

以下の構造式Vを有する、項目1に記載の化合物：

【化13-3】

【化13】



(項目19)

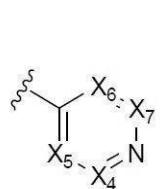
G₂はSである、項目18に記載の化合物。

(項目20)

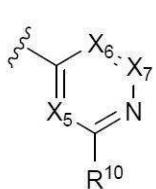
項目18に記載の化合物であって、HYは以下に示す構造式から選択され、

【化14-3】

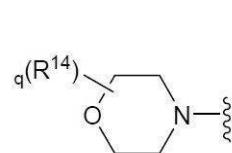
【化14】



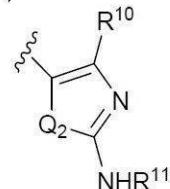
A、



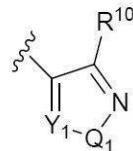
H、



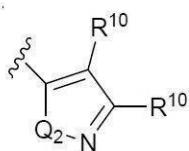
J、



K、



L、 または M

式中X₄、X₅、X₆、およびX₇の各出現は独立して-CR¹⁻⁰またはNであり、ただしX₄、X₅、X₆、およびX₇のうちの2つより多い出現がNであることはなく、Q₁およびQ₂の各出現は独立してS、Oまたは-NR⁶であり、Y₁の各出現は独立して-CR¹⁻⁰またはNであり、またはX₆およびX₇、またはY₁およびQ₁の2つの隣接する出現は、それらが結合される原子と一緒にになって、5~6員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~6員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し、R¹⁻⁴の各出現は独立して任意に置換されるC₁₋₆脂肪族基である、化合物。

(項目21)

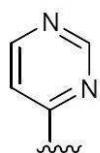
項目18に記載の化合物であって、HYは以下に示す構造式から選択され、

【化15-3】

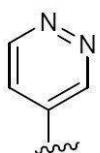
【化15】



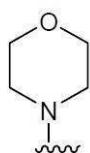
i、



i i、



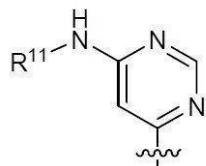
i i i、



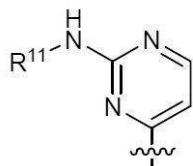
i v、



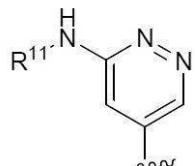
v、



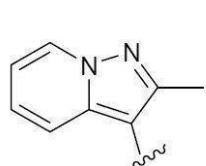
v i、



v i i、



v i i i または i x



各HY基はR¹⁻⁰またはR¹⁻⁴の1つまたは複数の出現で、任意に、さらに置換される化合物。

(項目22)

G₁はNである、項目18に記載の化合物。

(項目23)

G₁はCR¹である、項目18に記載の化合物。

(項目24)

項目18に記載の化合物であって、環Aはフェニル基であり、R²の各出現は独立してハロゲン、C₁₋₃アルキル、-CN、C₁₋₃ハロアルキル、-OC₁₋₃アルキル、-OC₁₋₃ハロアルキル、-NHCO(O)C₁₋₃アルキル、-NHCO(O)NHCO₁₋₃アルキル、-NHSC(O)₂C₁₋₃アルキル、または-C(O)Hであり、nは0~3である、化合物。

(項目25)

環Aはフェニル基であり、R²はハロゲンであり、およびnは1または2である、項目24に記載の化合物。

(項目26)

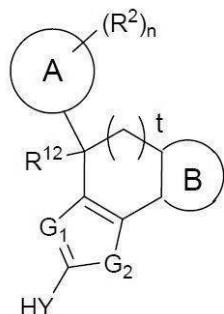
R¹⁻²はOHである、項目18に記載の化合物。

(項目27)

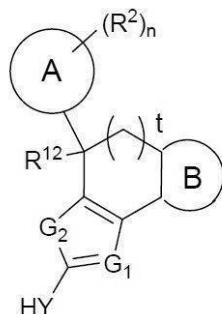
構造式VI-AまたはVI-Bに示す化合物

【化 1 6 - 3】

【化 1 6】



V I - A



V J-B

または薬剤的に許容される塩であり、式中

G₁ は N または C R¹ であり、ここで R¹ は H、-CN、ハロゲン、または C₁~₆ 脂肪族、3~10員の脂環式、または -Z-R¹¹ から選択される任意に置換される基であり、ここで

Z は任意に置換される C₁ - C₃ アルキレン鎖、 - O - 、 - N (R¹ a) - 、 - S - 、
 - S (O) - 、 S (O)₂ - 、 - C (O) - 、 - CO₂ - 、 - C (O) NR¹ a - 、 - N
 (R¹ a) C (O) - 、 - N (R¹ a) CO₂ - 、 - S (O)₂ NR¹ a - 、 - N (R¹
 a) S (O)₂ - 、 - OC (O) N (R¹ a) - 、 - N (R¹ a) C (O) NR¹ a - 、
 - N (R¹ a) S (O)₂ N (R¹ a) - 、 または - OC (O) - であり、

R^1 は水素または任意に置換される C_{1-4} 脂肪族であり、および

$R^{1,1}$ は水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、および

G_2 は S、O、または NR³ であり、ここで R³ は水素または任意に置換される C₁–₆ 脂肪族であり、

環 A は 6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

環 B は窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 3 のヘテロ原子を有する 5 または 6 員のヘテロシクリル、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 3 のヘテロ原子を有する 5 または 6 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、ただし環 B には酸素または硫黄の出現が 1 つよりおおくなることはなく

t は 1 ~ 3 であり、

R^2 の各出現は独立して $-R^{1/2}a$ 、 $-T_2 - R^{1/2}d$ 、または $-V_2 - T_2 - R^{1/2}$
 d であり、および

$R^{1,2}$ の各出現は独立してハロゲン、-CN、-NO₂、-R^{1,2}c、-N(R^{1,2}b)₂、-OR^{1,2}b、-SR^{1,2}c、-S(O)₂R^{1,2}c、-C(O)R^{1,2}b、-C(O)OR^{1,2}b、-C(O)N(R^{1,2}b)₂、-S(O)₂N(R^{1,2}b)₂、-OC(O)N(R^{1,2}b)₂、-N(R^{1,2}e)C(O)R^{1,2}b、-N(R^{1,2}e)S(O)₂R^{1,2}c、-N(R^{1,2}e)C(O)OR^{1,2}b、-N(R^{1,2}e)C(O)N(R^{1,2}b)₂

R^{1-2b}_2 、または $-N(R^{1-2e})SO_2N(R^{1-2b})_2$ であり、または R^{1-2b} の2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される0~1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシリクリル環を形成し、

R^{1-2b} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシリクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2c} の各出現は独立して C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシリクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2d} の各出現は独立して水素、または3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシリクリル、6~10員のアリール、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから任意に置換され、

R^{1-2e} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族基であり、 V_2 の各出現は独立して $-N(R^{1-2e})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-S(N(R^{1-2e})SO_2)-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)O-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-N(R^{1-2e})SO_2N(R^{1-2e})-$ 、 $-OCC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{1-2e})-O-$ であり、および

T_2 は任意に置換される C_{1-6} アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、 $-N(R^{1-3})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-3})-$ 、 $-OCC(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)-$ 、 $-N(R^{1-3})SO_2-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)O-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-N(R^{1-3})S(O)_2N(R^{1-3})-$ 、 $-OCC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{1-3})-O-$ によって任意に割り込まれ、または T_2 若しくはその部分は、任意に置換される3~7員の脂環式またはヘテロシリクリル環の部分を任意に形成し、ここで R^{1-3} は水素または任意に置換される C_{1-4} 脂肪族基であり、

n は0~4であり、

R^{1-2} は水素、ハロ、または C_{1-6} 脂肪族、 $-C(O)N(R^{5a})_2$ 、3~10員の脂環式、 $-N(R^{4b})_2$ 、 $-OR^{4a}$ 、または $-SR^{4a}$ から選択される任意に置換される基であり、

または R^2 および R^{1-2} は任意に置換される3~10員の脂環式を形成し、

R^{4a} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族であり、

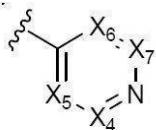
R^{4b} の各出現は独立して水素、または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族、 $-OR^4$ 、または $-N(R^{4a})_2$ から選択される基であり、

R^{4c} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族であり、

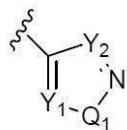
HY は以下に示す構造式から選択される任意に置換される基であり、

【化17-3】

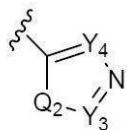
【化17】



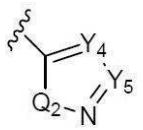
A、



B、



C、 または



D

ここで X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 の各出現は独立して $-CR^{10}$ または N であり、ただし X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 のうちの 2つより多い出現が N であることはなく、 Q_1 および Q_2 の各出現は独立して S 、 O または $-NR^6$ であり、 Y_1 、 Y_2 、 Y_3 、 Y_4 、および Y_5 の各出現は独立して $-CR^{10}$ または N であり、または X_4 および X_5 、 X_6 および X_7 、 Y_1 および Q_1 、 Y_3 および Q_2 、または Y_4 および Y_5 の 2つの隣接する出現は、それらが結合する原子と一緒にになって、5~6員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1~5 のヘテロ原子を有する 5~6 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し、

ここで R^{10} は $-R^{10b}$ 、 $-V_1-R^{10c}$ 、 $-T_1-R^{10b}$ 、または $-V_1-T_1-R^{10b}$ であり、ここで

V_1 は $-NR^7$ 、 $-NR^7-C(O)$ 、 $-NR^7-C(S)$ 、 $-NR^7-C(NR^7)$ 、 $-NR^7-C(O)OR^{10a}$ 、 $-NR^7-C(O)NR^7$ 、 $-NR^7-C(O)SR^{10a}$ 、 $-NR^7-C(S)OR^{10a}$ 、 $-NR^7-C(S)NR^7$ 、 $-NR^7-C(S)SR^{10a}$ 、 $-NR^7-C(NR^7)OR^{10a}$ 、 $-NR^7-C(NR^7)NR^7$ 、 $-NR^7-S(O)_2$ 、 $-NR^7-S(O)_2NR^7$ 、 $-C(O)$ 、 $-CO$ 、 $-C(O)NR^7$ 、 $-C(O)NR^7O$ 、 $-SO_2$ 、または $-SO_2NR^7$ であり、

R^{10a} の各出現は独立して水素、または C_1-C_6 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1~5 のヘテロ原子を有する 4~10 員のヘテロシクリル、6~10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1~5 のヘテロ原子を有する 5~10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

T_1 は任意に置換される C_1-C_6 アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、 $-N(R^7)$ 、 $-O$ 、 $-S$ 、 $-S(O)$ 、 $-S(O)_2$ 、 $-C(O)$ 、 $-C(O)O$ 、 $-C(O)N(R^7)$ 、 $-S(O)_2N(R^7)$ 、 $-OC(O)N(R^7)$ 、 $-N(R^7)C(O)$ 、 $-N(R^7)SO_2$ 、 $-N(R^{10a})C(O)O$ 、 $-NR^{10a}C(O)N(R^{10a})$ 、 $-N(R^{10a})S(O)_2N(R^{10a})$ 、 $-OC(O)$ 、または $-C(O)N(R^7)O$ によって任意に割り込まれ、または T_1 は任意に置換される 3~7 員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を形成し、

R^{10b} の各出現は独立して水素、ハロゲン、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-N(R^7)_2$ 、 $-OR^{10a}$ 、 $-SR^{10a}$ 、 $-S(O)_2R^{10a}$ 、 $-C(O)R^{10a}$ 、 $-C(O)OR^{10a}$ 、 $-C(O)N(R^7)_2$ 、 $-S(O)_2N(R^7)_2$ 、 $-OC(O)N(R^7)_2$ 、 $-N(R^7)C(O)R^{10a}$ 、 $-N(R^7)SO_2R^{10a}$ 、 $-N(R^7)NR^{10a}$ 、 $-N(R^7)C(O)N(R^7)_2$ 、または $-N(R^7)SO_2N(R^7)_2$ 、または C_1-C_6 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1~5 のヘテロ原子を有する 4~10 員のヘテロシクリル、6~10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1~5 のヘテ

口原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、
 R^{10c} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、
 窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10
 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立
 して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される
 任意に置換される基であり、または

R^7 および R^{10c} はそれらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若
 しくは硫黄から独立して選択される 0 ~ 1 の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される
 4 ~ 7 員のヘテロシクリル環を形成し、

R^7 の各出現は独立して水素、 $-C(O)R^{7a}$ 、 $-CO_2R^{7a}$ 、 $-C(O)N(R^{7a})_2$ 、 $-C(O)N(R^{7a})-OR^{7a}$ 、 $-SO_2R^{7a}$ 、 $-SO_2N(R^{7a})_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

ここで R^{7a} の各出現は独立して水素または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、
 窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 1
 0 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立
 して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択され
 る任意に置換される基であり、

R^6 の各出現は独立して水素、 $-C(O)R^{6a}$ 、 $-CO_2R^{6a}$ 、 $-C(O)N(R^{6b})_2$ 、 $-SO_2R^{6a}$ 、 $-SO_2N(R^{6b})_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10
 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有
 する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは
 硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから
 選択される任意に置換される基であり、

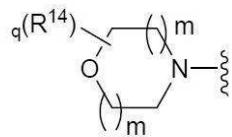
ここで R^{6a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、
 窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 1
 0 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立
 して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択され
 る任意に置換される基であり、

R^{6b} の各出現は水素または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若
 しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリ
 ル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される
 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換され
 る基であるか、または R^{6b} の 2 つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒ににな
 って、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 3 ~
 6 員のヘテロシクリル、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5
 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基を
 形成し、

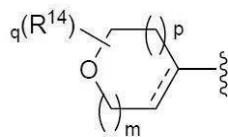
または HY は

【化18-3】

【化18】



E または F



であり、

ここで R^{1-4} の各出現は独立して $-R^{1-4}a$ または $-T_1 - R^{1-4}d$ であり、ここで $R^{1-4}a$ の各出現は、原子価および安定性が許容できる範囲で独立してフッ素、=O₄ c、=S、-CN、-NO₂、-R¹⁻⁴c、-N(R¹⁻⁴b)₂、-OR¹⁻⁴b、-SR¹⁻⁴c、-S(O)₂R¹⁻⁴c、-C(O)R¹⁻⁴b、-C(O)OR¹⁻⁴b、-C(O)N(R¹⁻⁴b)₂、-N(R¹⁻⁴e)C(O)R¹⁻⁴b、-N(R¹⁻⁴e)SO₂R¹⁻⁴c、-N(R¹⁻⁴e)C(O)N(R¹⁻⁴b)₂、または-N(R¹⁻⁴e)SO₂N(R¹⁻⁴b)₂ であるか、または $R^{1-4}b$ の2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される0~1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシクリル環を形成し、

$R^{1-4}b$ の各出現は独立して水素、またはC₁~C₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

$R^{1-4}c$ の各出現は独立してC₁~C₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

$R^{1-4}d$ の各出現は独立して水素、または3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから任意に置換され、

$R^{1-4}e$ の各出現は独立して水素または任意に置換されるC₁~C₆脂肪族基であり、および

T_1 は任意に置換されるC₁~C₆アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、-N(R¹⁻⁴b)-、-O-、-S-、-S(O)-、-S(O)₂-、-C(O)-、-C(O)O-、-C(O)N(R¹⁻⁴b)-、-S(O)₂N(R¹⁻⁴b)-、-O-C(O)N(R¹⁻⁴b)-、-N(R¹⁻⁴b)C(O)-、-N(R¹⁻⁴b)C(O)O-、-NR¹⁻⁴bC(O)N(R¹⁻⁴b)-、-N(R¹⁻⁴b)S(O)₂N(R¹⁻⁴b)-、-O-C(O)-、または-C(O)N(R¹⁻⁴b)-O-によって任意に割り込まれ、または T_1 若しくはその部分は、任意に置換される3~7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成し、

qは0~6であり、

mは1または2であり、および

pは0、1、または2である、

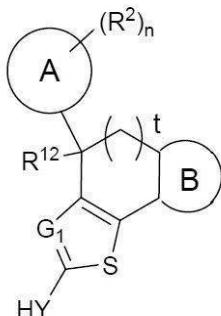
化合物または薬剤的に許容される塩。

(項目28)

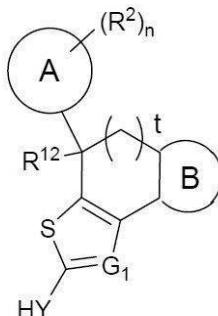
構造式 VI - A または VI - B に示す化合物

【化19-3】

【化19】



VI - A



VI - B

または薬剤的に許容される塩であって、式中

G₁ は N または C R¹ であり、ここで R¹ は H、-CN、ハロゲン、または C₁ - 6 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、または -Z-R¹₁ であり、ここで

Z は任意に置換される C₁ - 3 アルキレン鎖、-O-、-N(R¹^a) -、-S-、-S(O)-、S(O)₂ -、-C(O)-、-CO₂-、-C(O)NR¹^a-、-N(R¹^a)C(O)-、-N(R¹^a)CO₂-、-S(O)₂NR¹^a-、-N(R¹^a)S(O)₂-、-OC(O)N(R¹^a) -、-N(R¹^a)C(O)NR¹^a-、-N(R¹^a)S(O)₂N(R¹^a) -、または -OC(O) - から選択され、

R¹^a は水素または任意に置換される C₁ - 4 脂肪族であり、および

R¹₁ は水素、または C₁ - 6 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、および

環 A は 6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

環 B は窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 3 のヘテロ原子を有する 5 または 6 員のヘテロシクリルまたは窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 3 のヘテロ原子を有する 5 または 6 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、ただし環 B には酸素または硫黄の出現が 1 つより多くなることはなく、

t は 1 ~ 3 であり、

R² の各出現は独立して -R¹₂ -、-T₂ -、-R¹₂^d 、または -V₂ -、-T₂ -、-R¹₂^d であり、および

R¹₂^a の各出現は独立してハロゲン、-CN、-NO₂、-R¹₂^c、-N(R¹₂^b)₂、-OR¹₂^b、-SR¹₂^c、-S(O)₂R¹₂^c、-C(O)R¹₂^b、-C(O)OR¹₂^b、-C(O)N(R¹₂^b)₂、-S(O)₂N(R¹₂^b)₂、-OC(O)N(R¹₂^b)₂、-N(R¹₂^e)C(O)R¹₂^b、-N(R¹₂^e)S(O)₂R¹₂^c、-N(R¹₂^e)C(O)OR¹₂^b、-N(R¹₂^e)C(O)N(R¹₂^b)₂、または -N(R¹₂^e)SO₂N(R¹₂^b)₂ であり、または R¹₂^b の 2 つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される 0 ~ 1 の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される 4 ~ 7 員のヘテロシクリル環を形成し、

R¹₂^b の各出現は独立して水素、または C₁ - C₆ 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、

窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2c} の各出現は独立して C_{1-6} 脂肪族、3～10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2d} の各出現は独立して水素、または3～10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから任意に置換され、

R^{1-2e} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族基であり、

V_2 の各出現は独立して $-N(R^{1-2e})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-2e})-$ 、 $-OC(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)-$ 、 $-N(R^{1-2e})SO_2-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)O-$ 、 $-N(R^{1-2e})C(O)N(R^{1-2e})-$ 、 $-N(R^{1-2e})SO_2N(R^{1-2e})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{1-2e})-O-$ であり、および

T_2 は任意に置換される C_{1-6} アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、 $-N(R^{1-3})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-3})-$ 、 $-OC(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)-$ 、 $-N(R^{1-3})SO_2-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)O-$ 、 $-N(R^{1-3})C(O)N(R^{1-3})-$ 、 $-N(R^{1-3})S(O)_2N(R^{1-3})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{1-3})-O-$ によって任意に割り込まれ、または T_2 若しくはその部分は任意に置換される3～7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成し、ここで R^{1-3} は水素または任意に置換される C_{1-4} 脂肪族基であり、

n は0～4であり、

R^{1-2} は水素、ハロまたは C_{1-6} 脂肪族、 $-C(O)N(R^{5a})_2$ 、3～10員の脂環式、 $-N(R^{4b})_2$ 、 $-OR^{4a}$ 、または $-SR^{4a}$ であり、

または R^2 および R^{1-2} は任意に置換される3～10員の脂環式を形成し、

R^{4a} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族であり、

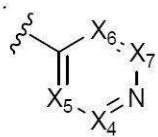
R^{4b} の各出現は独立して水素、または任意に置換される $-OR^{4c}$ 、または $-N(R^{4a})_2$ から選択される基であり、

R^{4c} の各出現は独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族であり、

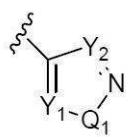
HY は以下に示す構造式から選択される任意に置換される基であり、

【化20-3】

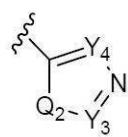
【化20】



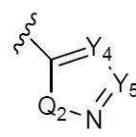
A、



B、



C、



D

ここで X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 の各出現は独立して $-CR^{1-0}$ またはNであり、

ただし、 X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 のうちの2つより多い出現がNであることはなく、

Q_1 および Q_2 の各出現は独立してS、Oまたは $-NR^6$ であり、

Y_1 、 Y_2 、 Y_3 、 Y_4 、および Y_5 の各出現は独立して $-CR^{10}$ またはNであり、

または X_4 および X_5 、 X_6 および X_7 、 Y_1 および Q_1 、 Y_3 および Q_2 、または Y_4 および Y_5 の2つの隣接する出現は、それらが結合する原子と一緒にになって、5~6員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~6員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し、

ここで R^{10} は $-R^{10b}$ 、 $-V_1-R^{10c}$ 、 $-T_1-R^{10b}$ 、または $-V_1-T_1-R^{10b}$ であり、ここで

V_1 は $-NR^7-$ 、 $-NR^7-C(O)-$ 、 $-NR^7-C(S)-$ 、 $-NR^7-C(NR^7)-$ 、 $-NR^7-C(NR^7C(O)OR^{10a})-$ 、 $-NR^7-C(NR^7NR^7)-$ 、 $-NR^7-C(NR^7C(O)SR^{10a})-$ 、 $-NR^7-C(S)OR^{10a}-$ 、 $-NR^7-C(S)NR^7-$ 、 $-NR^7-C(S)SR^{10a}-$ 、 $-NR^7-C(NR^7)OR^{10a}-$ 、 $-NR^7-C(NR^7NR^7)-$ 、 $-NR^7-S(O)_2-$ 、 $-NR^7-S(O)_2NR^7-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-CO_2-$ 、 $-C(O)NR^7-$ 、 $-C(O)NR^7O-$ 、 $-SO_2-$ 、または $-SO_2NR^7-$ であり、

R^{10a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

T_1 は任意に置換される C_{1-6} アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、 $-N(R^7)-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^7)-$ 、 $-S(O)_2N(R^7)-$ 、 $-OC(O)N(R^7)-$ 、 $-N(R^7)C(O)-$ 、 $-N(R^7)SO_2-$ 、 $-N(R^{10a})C(O)O-$ 、 $-NR^{10a}C(O)N(R^{10a})-$ 、 $-N(R^{10a})S(O)_2N(R^{10a})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^7)-O-$ によって任意に割り込まれ、または T_1 は任意に置換される3~7員の脂環式またはヘテロシクリル環を形成し、

R^{10b} の各出現は独立して水素、ハロゲン、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-N(R^7)_2$ 、 $-OR^{10a}$ 、 $-SR^{10a}$ 、 $-S(O)_2R^{10a}$ 、 $-C(O)R^{10a}$ 、 $-C(O)OR^{10a}$ 、 $-C(O)N(R^7)_2$ 、 $-S(O)_2N(R^7)_2$ 、 $-OC(O)N(R^7)_2$ 、 $-N(R^7)C(O)R^{10a}$ 、 $-N(R^7)SO_2R^{10a}$ 、 $-N(R^7)C(O)OR^{10a}$ 、 $-N(R^7)C(O)N(R^7)_2$ 、または $-N(R^7)SO_2N(R^7)_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{10c} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、または

R^7 および R^{10c} は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される0~1のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシクリル環を形成し、

R^7 の各出現は独立して水素、 $-C(O)R^{7a}$ 、 $-CO_2R^{7a}$ 、 $-C(O)N(R^{7a})_2$ 、 $-C(O)N(R^{7a})-OR^{7a}$ 、 $-SO_2R^{7a}$ 、 $-SO_2N(R^{7a})_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立し

て選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

ここで R^{7a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{6b} の各出現は独立して水素、- $C(O)R^{6a}$ 、- CO_2R^{6a} 、- $C(O)N(R^{6b})_2$ 、- SO_2R^{6a} 、- $SO_2N(R^{6b})_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

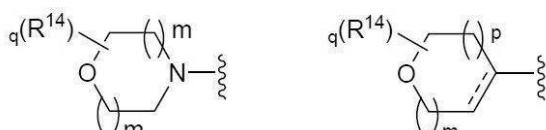
ここで R^{6a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{6b} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であるか、または R^{6b} の 2 つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 3 ~ 6 員のヘテロシクリル、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基を形成し、

または HY は

【化 21 - 3】

【化 21】



E または F

であり、

R^{1-4} の各出現は独立して - R^{1-4a} または - $T_1 - R^{1-4d}$ であり、ここで

R^{1-4a} の各出現は、原子価および安定性が許容できる範囲で独立してフッ素、=O、=S、-CN、-NO₂、-R^{1-4c}、-N(R^{1-4b})₂、-OR^{1-4b}、-SR^{1-4c}、-S(O)₂R^{1-4c}、-C(O)R^{1-4b}、-C(O)OR^{1-4b}、-C(O)N(R^{1-4b})₂、-S(O)₂N(R^{1-4b})₂、-OC(O)N(R^{1-4b})₂、-N(R^{1-4e})C(O)R^{1-4b}、-N(R^{1-4e})SO₂R^{1-4c}、-N(R^{1-4e})C(O)OR^{1-4b}、-N(R^{1-4e})C(O)N(R^{1-4b})₂、または -N(R^{1-4e})SO₂N(R^{1-4b})₂ であるか、または R^{1-4a} の 2 つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される 0 ~ 1 の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される 4 ~ 7 員のヘテロシクリル環を形成し、

R^{1-4b} の各出現は、独立して水素、または C_1-C_6 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-4c} の各出現は、独立して C_1-C_6 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-4d} の各出現は、独立して水素、または3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから任意に置換され、

R^{1-4e} の各出現は、独立して水素または任意に置換される C_1-C_6 脂肪族基であり、および

T_1 は任意に置換される C_1-C_6 アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、 $-N(R^{1-4b})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-4b})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-4b})-$ 、 $-OC(O)N(R^{1-4b})-$ 、 $-N(R^{1-4b})C(O)-$ 、 $-N(R^{1-4b})SO_2-$ 、 $-N(R^{1-4b})C(O)O-$ 、 $-NR^{1-4b}C(O)N(R^{1-4b})-$ 、 $-N(R^{1-4b})S(O)_2N(R^{1-4b})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{1-4b})-O-$ によって任意に割り込まれ、または T_1 若しくはその部分は、任意に置換される3~7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成し、

q は 0~6 であり、

m は 1 または 2 であり、および

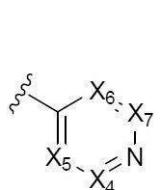
p は 0、1、または 2 である、

化合物または薬剤的に許容される塩。

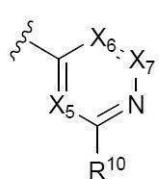
(項目 29)

項目 27 または 28 に記載の化合物であって、HY は以下に示す構造式から選択され、
【化 22-3】

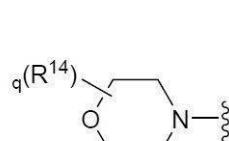
【化 22】



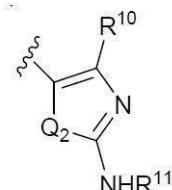
A、



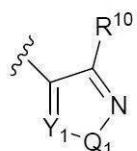
H、



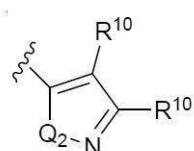
J、



K、



L、 または M



式中 X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 の各出現は独立して $-CR^{1-10}$ または N であり、ただし X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 のうちの 2 つより多い出現が N であることはなく、 Q_1 および Q_2 の各出現は独立して S 、 O または $-NR^{6-}$ であり、

Y₁ の各出現は独立して - C R¹⁻⁰ または N であり、

または X₆ および X₇、または Y₁ および Q₁ の 2 つの隣接する出現は、それらが結合される原子と一緒にになって、5 ~ 6 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 6 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し、

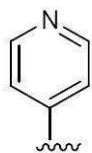
R¹⁻⁴ の各出現は独立して任意に置換される C₁₋₆ 脂肪族基である、

化合物。

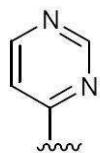
(項目 30)

項目 27 または 28 に記載の化合物であって、HY は以下に示す構造式から選択され、
【化 23-3】

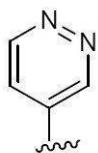
【化 23】



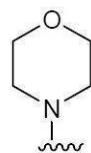
i、



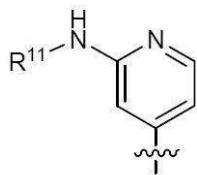
i i、



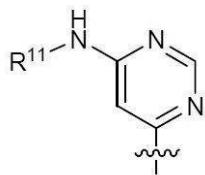
i i i、



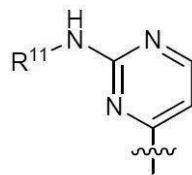
i v、



v、



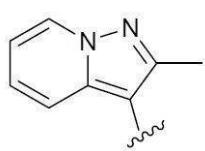
v i、



v i i、



v i i i または i x



各 HY 基は、R¹⁻⁰ または R¹⁻⁴ の 1 つまたは複数の出現で、任意に、さらに置換される、化合物。

(項目 31)

G₁ は N である、項目 27 または 28 に記載の化合物。

(項目 32)

G₁ は C R¹ である、項目 27 または 28 に記載の化合物。

(項目 33)

項目 27 または 28 に記載の化合物であって、環 A はフェニル基であり、R² の各出現は独立してハロゲン、C₁₋₃ アルキル、- C N、C₁₋₃ ハロアルキル、- O C₁₋₃ アルキル、- O C₁₋₃ ハロアルキル、- N H C (O) C₁₋₃ アルキル、- N H C (O) N H C₁₋₃ アルキル、- N H S (O)₂ C₁₋₃ アルキル、または - C (O) H であり、および n は 0 ~ 3 である、化合物。

(項目 34)

環 A はフェニル基であり、R² はハロゲンであり、n は 1 または 2 である、項目 33 に記載の化合物。

(項目 35)

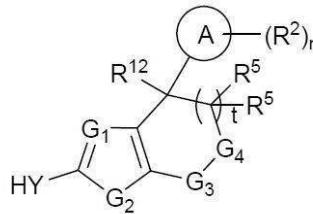
R¹⁻² は O H である、項目 27 または 28 に記載の化合物。

(項目 36)

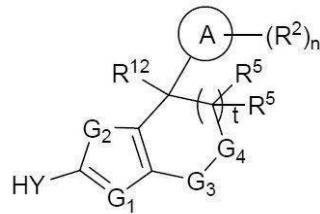
化合物は表1に挙げる化合物から選択される、項目1または27に記載の化合物。
(項目37)

構造式VIIII-AまたはVIIII-Bを有する化合物
【化24-3】

【化24】



または



VIIII-A

VIIII-B

または薬剤的に許容される塩であり、式中

G₁ はNまたはC R¹であり、ここでR¹はH、-CN、ハロゲン、またはC₁-₆脂肪族、3~10員の脂環式、または-Z-R¹¹であり、ここで

Zは任意に置換されるC₁-₃アルキレン鎖、-O-、-N(R¹^a)-、-S-、-S(O)-、S(O)₂-、-C(O)-、-CO₂-、-C(O)NR¹^a-、-N(R¹^a)C(O)-、-N(R¹^a)CO₂-、-S(O)₂NR¹^a-、-N(R¹^a)S(O)₂-、-OC(O)N(R¹^a)-、-N(R¹^a)C(O)NR¹^a-、-N(R¹^a)S(O)₂N(R¹^a)-、または-OC(O)-から選択され、

R¹^aは水素または任意に置換されるC₁-₄脂肪族であり、および

R¹¹は水素、またはC₁-₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、および

G₂はS、Se、O、またはNR³であり、ここでR³は水素または任意に置換されるC₁-₆脂肪族であり、

G₃はC=OまたはSO₂であり、

G₄はOまたはNR⁴^aであり、ここでR⁴^aは水素または任意に置換されるC₁-₆脂肪族であり、

環Aは6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R²の各出現は独立して-R¹²^a、-T₂-R¹²^d、または-V₂-T₂-R¹²^dであり、および

R¹²^aの各出現は独立してハロゲン、-CN、-NO₂、-R¹²^c、-N(R¹²^b)₂、-OR¹²^b、-SR¹²^c、-S(O)₂R¹²^c、-C(O)R¹²^b、-C(O)OR¹²^b、-C(O)N(R¹²^b)₂、-S(O)₂N(R¹²^b)₂、-OC(O)N(R¹²^b)₂、-N(R¹²^e)C(O)R¹²^b、-N(R¹²^e)C(O)OR¹²^b、-N(R¹²^e)C(O)N(R¹²^b)₂、または-N(R¹²^e)SO₂N(R¹²^b)₂であるか、またはR¹²^bの2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される0~1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシクリル環を形成し、

R¹²^bの各出現は独立して水素、またはC₁-₆脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10

員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2c} の各出現は独立してC₁₋₆脂肪族、3～10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-2d} の各出現は独立して水素、または3～10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから任意に置換され、

R^{1-2e} の各出現は独立して水素または任意に置換されるC₁₋₆脂肪族基であり、
 V_2 の各出現は独立して-N(R^{1-2e})-、-O-、-S-、-S(O)-、-S(O)₂-、-C(O)-、-C(O)O-、-C(O)N(R^{1-2e})-、-S(O)₂N(R^{1-2e})-、-OC(O)N(R^{1-2e})-、-N(R^{1-2e})C(O)-、-N(R^{1-2e})SO₂-、-N(R^{1-2e})C(O)O-、-N(R^{1-2e})C(O)N(R^{1-2e})-、-N(R^{1-2e})SO₂N(R^{1-2e})-、-OC(O)-、または-C(O)N(R^{1-2e})-O-であり、および

T_2 は任意に置換されるC₁₋₆アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、-N(R¹⁻³)-、-O-、-S-、-S(O)-、-S(O)₂-、-C(O)-、-C(O)O-、-C(O)N(R¹⁻³)-、-S(O)₂N(R¹⁻³)-、-OC(O)N(R¹⁻³)-、-N(R¹⁻³)C(O)-、-N(R¹⁻³)SO₂-、-N(R¹⁻³)C(O)O-、-N(R¹⁻³)C(O)N(R¹⁻³)-、-N(R¹⁻³)SO₂N(R¹⁻³)-、-OC(O)-、または-C(O)N(R¹⁻³)-O-によって任意に割り込まれ、または T_2 若しくはその部分は任意に置換される3～7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を形成し、ここで R^{1-3} は水素または任意に置換されるC₁₋₄脂肪族基であり、

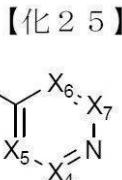
n は0～4であり、

R^{1-2} は水素、ハロ、またはC₁₋₆脂肪族、-C(O)N(R^{5a})-₂、3～10員の脂環式、-N(R^{4b})-₂、-OR^{4a}、または-SR^{4a}から選択される任意に置換される基であり、

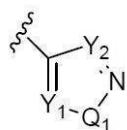
または R^2 および R^{1-2} は任意に置換される3～10員の脂環式を形成し、

HYは以下に示す構造式から選択される任意に置換される基であり、

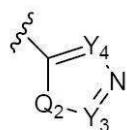
【化25-3】



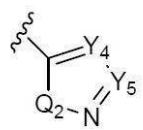
A、



B、



C、 または D



ここで X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 の各出現は独立して-CR¹⁻⁰またはNであり、ただし X_4 、 X_5 、 X_6 、および X_7 のうちの2つより多い出現がNであることはなく、 Q_1 および Q_2 の各出現は独立してS、Oまたは-NR⁶であり、 Y_1 、 Y_2 、 Y_3 、 Y_4 、および Y_5 の各出現は独立して-CR¹⁻⁰またはNであり、または X_4 および X_5 、 X_6 および X_7 、 Y_1 および Q_1 、 Y_3 および Q_2 、または

Y_4 および Y_5 の 2 つの隣接する出現は、それらが結合する原子と一緒にになって、5 ~ 6 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 6 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し

R^{10} は $-R^{10b}$ 、 $-V_1-R^{10c}$ 、 $-T_1-R^{10b}$ 、または $-V_1-T_1-R^{10b}$ であり、ここで

V_1 は $-NR^7$ 、 $-NR^7-C(O)$ 、 $-NR^7-C(S)$ 、 $-NR^7-C(NR^7)$ 、 $-NR^7-C(O)OR^{10a}$ 、 $-NR^7C(O)NR^7$ 、 $-NR^7C(O)SR^{10a}$ 、 $-NR^7C(S)OR^{10a}$ 、 $-NR^7C(S)NR^7$ 、 $-NR^7C(S)SR^{10a}$ 、 $-NR^7C(NR^7)OR^{10a}$ 、 $-NR^7C(NR^7)NR^7$ 、 $-NR^7S(O)$ 、 $-NR^7S(O)NR^7$ 、 $-C(O)$ 、 $-CO_2$ 、 $-C(O)NR^7$ 、 $-C(O)NR^7O$ 、 $-SO_2$ 、または $-SO_2NR^7$ であり、

R^{10a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

T_1 は任意に置換される C_{1-6} アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、 $-N(R^7)$ 、 $-O$ 、 $-S$ 、 $-S(O)$ 、 $-S(O)_2$ 、 $-C(O)$ 、 $-C(O)O$ 、 $-C(O)N(R^7)$ 、 $-S(O)N(R^7)$ 、 $-OC(O)N(R^7)$ 、 $-N(R^7)C(O)$ 、 $-N(R^7)SO_2$ 、 $-N(R^{10a})C(O)O$ 、 $-NR^{10a}C(O)N(R^{10a})$ 、 $-N(R^{10a})S(O)_2N(R^{10a})$ 、 $-OC(O)$ 、または $-C(O)N(R^7)-O$ によって任意に割り込まれ、または T_1 は任意に置換される 3 ~ 7 員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を形成し、

R^{10b} の各出現は独立して水素、ハロゲン、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-N(R^7)_2$ 、 $-OR^{10a}$ 、 $-SR^{10a}$ 、 $-S(O)_2R^{10a}$ 、 $-C(O)R^{10a}$ 、 $-C(O)OR^{10a}$ 、 $-C(O)N(R^7)_2$ 、 $-S(O)_2N(R^7)_2$ 、 $-OC(O)N(R^7)_2$ 、 $-N(R^7)C(O)R^{10a}$ 、 $-N(R^7)SO_2R^{10a}$ 、 $-N(R^7)C(O)OR^{10a}$ 、 $-N(R^7)C(O)N(R^7)_2$ 、または $-N(R^7)SO_2N(R^7)_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{10c} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、または

R^7 および R^{10c} は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 0 ~ 1 の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される 4 ~ 7 員のヘテロシクリル環を形成し、

R^7 の各出現は独立して水素、 $-C(O)R^{7a}$ 、 $-CO_2R^{7a}$ 、 $-C(O)N(R^{7a})_2$ 、 $-C(O)N(R^{7a})-OR^{7a}$ 、 $-SO_2R^{7a}$ 、 $-SO_2N(R^{7a})_2$ 、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

ここで R^{7a} の各出現は独立して水素、または C_{1-6} 脂肪族、3 ~ 10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~

10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{6a} の各出現は独立して水素、-C(O)R^{6a}、-CO₂R^{6a}、-C(O)N(R^{6b})₂、-SO₂R^{6a}、-SO₂N(R^{6b})₂、またはC₁₋₆脂肪族、3～10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

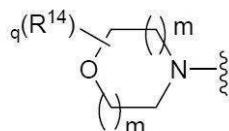
ここで R^{6a} の各出現は独立して水素、またはC₁₋₆脂肪族、3～10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、および

R^{6b} の各出現は独立して水素、またはC₁₋₆脂肪族、3～10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であるか、または R^{6b} の2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する3～6員のヘテロシクリル、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基を形成し、

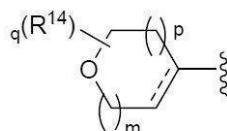
またはHYは

【化26-3】

【化26】



E または



F

■

であり、

R^{1-4a} の各出現は独立して- R^{1-4a} または- T_1-R^{1-4d} であり、ここで

R^{1-4a} の各出現は、原子価および安定性が許容できる範囲で独立してフッ素、=O^{4c}、=S、-CN、-NO₂、-R^{1-4c}、-N(R^{1-4b})₂、-OR^{1-4b}、-SR^{1-4c}、-S(O)₂R^{1-4c}、-C(O)R^{1-4b}、-C(O)OR^{1-4b}、-C(O)N(R^{1-4b})₂、-N(R^{1-4e})C(O)R^{1-4b}、-N(R^{1-4e})SO₂R^{1-4c}、-N(R^{1-4e})C(O)OR^{1-4b}、-N(R^{1-4e})C(O)N(R^{1-4b})₂、または-N(R^{1-4e})SO₂N(R^{1-4b})₂であるか、または R^{1-4b} の2つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される0～1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4～7員のヘテロシクリル環を形成し、

R^{1-4b} の各出現は、独立して水素、またはC₁₋₆脂肪族、3～10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する4～10員のヘテロシクリル、6～10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1～5のヘテロ原子を有する5～10員のヘテロアリールから選択され

る任意に置換される基であり、

R^{1-4c} の各出現は、独立して C_1-C_6 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-4d} の各出現は、独立して水素、または3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから任意に置換され、

R^{1-4e} の各出現は、独立して水素または任意に置換される C_1-C_6 脂肪族基であり、および

T_1 は、任意に置換される C_1-C_6 アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、
 $-N(R^{1-4b})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、
 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-4b})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-4b})-$ 、 $-OC(O)N(R^{1-4b})-$
 $-C(O)N(R^{1-4b})-$ 、 $-N(R^{1-4b})C(O)-$ 、 $-N(R^{1-4b})SO_2-$ 、
 $-N(R^{1-4b})C(O)O-$ 、 $-N(R^{1-4b})C(O)N(R^{1-4b})-$ 、 $-N(R^{1-4b})SO_2-$ 、
 $-N(R^{1-4b})N(R^{1-4b})-$ 、 $-OC(O)-$ 、または $-C(O)N(R^{1-4b})-O-$
- によって任意に割り込まれ、または T_1 若しくはその部分は任意に置換される3~7員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成し、

q は 0~6 であり、

m は 1 または 2 であり、

p は 0、1、または 2 であり、

t は 1 または 2 であり、

R^{5-} の各出現は、独立して $-R^{1-5a}$ または $-T_5-R^{1-5d}$ であり、ここで

R^{1-5a} の各出現は、原子価および安定性が許容できる範囲で独立して水素、フッ素、 $=O$ 、 $=S$ 、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-R^{1-5c}$ 、 $-N(R^{1-5b})_2$ 、 $-OR^{1-5b}$ 、
 $-SR^{1-5c}$ 、 $-S(O)_2R^{1-5c}$ 、 $-C(O)R^{1-5b}$ 、 $-C(O)OR^{1-5b}$ 、 $-C(O)N(R^{1-5b})_2$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-5b})_2$ 、 $-OC(O)N(R^{1-5b})_2$ 、
 $-N(R^{1-5e})C(O)R^{1-5b}$ 、 $-N(R^{1-5e})SO_2R^{1-5c}$ 、 $-N(R^{1-5e})C(O)OR^{1-5b}$ 、 $-N(R^{1-5e})C(O)N(R^{1-5b})_2$ 、または $-N(R^{1-5e})SO_2N(R^{1-5b})_2$ であるか、 R^{1-5b} の 2 つの出現は、それらが結合される窒素原子と一緒にになって、窒素、酸素、若しくは硫黄から選択される0~1の追加のヘテロ原子を有する任意に置換される4~7員のヘテロシクリル環を形成し、

R^{1-5b} の各出現は、独立して水素、または C_1-C_6 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-5c} の各出現は、独立して C_1-C_6 脂肪族、3~10員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する4~10員のヘテロシクリル、6~10員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される1~5のヘテロ原子を有する5~10員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-5d} の各出現は、独立して水素、 $-N(R^{1-5b})_2$ 、 $-OR^{1-5b}$ 、 $-SR^{1-5c}$ 、 $-S(O)_2R^{1-5c}$ 、 $-C(O)R^{1-5b}$ 、 $-C(O)OR^{1-5b}$ 、 $-C(O)N(R^{1-5b})_2$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-5b})_2$ 、 $-OC(O)N(R^{1-5b})_2$ 、 $-N(R^{1-5e})C(O)R^{1-5b}$ 、 $-N(R^{1-5e})SO_2R^{1-5c}$ 、 $-N(R^{1-5e})C(O)OR^{1-5b}$ 、 $-N(R^{1-5e})C(O)N(R^{1-5b})_2$ 、 $-N(R^{1-5e})SO_2N(R^{1-5b})_2$ 、または 3~10 員の脂環式、窒素、酸素、若しくは硫黄から独立

して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 4 ~ 10 員のヘテロシクリル、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基であり、

R^{1-5e} の各出現は、独立して水素または任意に置換される C_{1-6} 脂肪族基であり、および

T_5 は、任意に置換される C_{1-6} アルキレン鎖であり、ここでアルキレン鎖は、
 $-N(R^{1-5b})-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-C(O)-$ 、
 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^{1-5b})-$ 、 $-S(O)_2N(R^{1-5b})-$ 、 $-OC(O)N(R^{1-5b})-$ 、
 $-N(R^{1-5b})C(O)-$ 、 $-N(R^{1-5b})SO_2-$ 、 $-N(R^{1-5b})C(O)O-$ 、 $-N(R^{1-5b})C(O)N(R^{1-5b})-$ 、 $-N(R^{1-5b})SO_2-$ 、
 $-O-$ により任意に割り込まれ、または T_5 若しくはその部分は任意に置換される 3 ~ 7 員の脂環式またはヘテロシクリル環の部分を任意に形成する、

化合物または薬剤的に許容される塩。

(項目 38)

G_1 は CR^1 または N であり、および G_2 は S である、項目 37 に記載の化合物。

(項目 39)

G_1 は CR^1 または N であり、および G_2 は Se である、項目 37 に記載の化合物。

(項目 40)

G_1 は CR^1 または N であり、および G_2 は O である、項目 37 に記載の化合物。

(項目 41)

G_1 は CR^1 または N であり、および G_2 は NR^3 である、項目 37 に記載の化合物。

(項目 42)

G_1 は CR^1 であり、および G_2 は S である、項目 37 に記載の化合物。

(項目 43)

G_1 は N であり、および G_2 は S である、項目 37 に記載の化合物。

(項目 44)

項目 37 ~ 43 のいずれか 1 項の化合物であって、 G_1 が CR_1 であるとき、 R^1 は水素、 CN 、任意に置換される C_{1-6} 脂肪族または C_{3-6} 脂環式、または任意に置換されるアルキンである、化合物。

(項目 45)

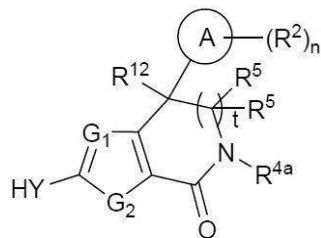
構造式 VII - A を有する、項目 37 ~ 43 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項目 46)

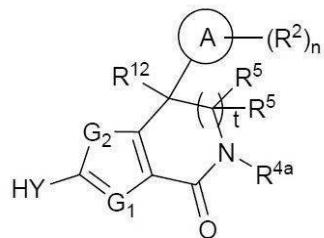
構造式 VII - A - i または VII - B - i を有する、項目 37 ~ 43 のいずれか 1 項に記載の化合物：

【化 27 - 3】

【化 27】



VII - A - i



VII - B - i。

(項目 47)

構造式 VII - A - i i または VII - B - i i を有する、項目 37 ~ 43 のいずれか 1 項に記載の化合物：

Y₁ の各出現は独立して - C R¹⁻⁰ または N であり、

または X₆ および X₇、または Y₁ および Q₁ の 2 つの隣接する出現は、それらが結合される原子と一緒にになって、5 ~ 6 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 6 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される縮合基を形成し、

R¹⁻⁴ の各出現は独立して任意に置換される C₁₋₆ 脂肪族基である、

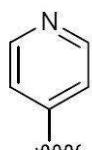
化合物。

(項目 50)

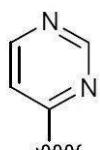
項目 37 ~ 48 のいずれか 1 項に記載の化合物であって、HY は以下に示す構造式から選択され、

【化 31 - 3】

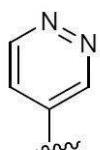
【化 31】



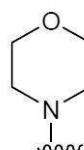
i、



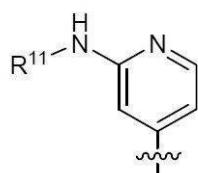
i i、



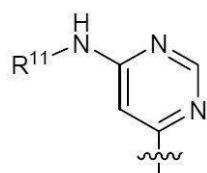
i i i、



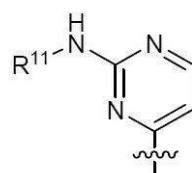
i v、



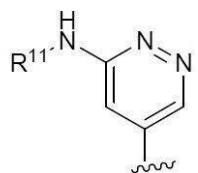
v、



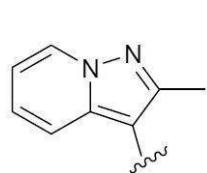
v i、



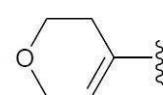
v i i、



v i i i、



i x、



または

x

—

各 HY 基は R¹⁻⁰ または R¹⁻⁴ の 1 つまたは複数の出現で、任意に、さらに置換される化合物。

(項目 51)

HY は任意に置換されるモルホリノ (i v) またはジヒドロピラン (x) から選択される、項目 50 に記載の化合物。

(項目 52)

HY は任意に置換されるモルホリノ (i v) から選択される、項目 51 に記載の化合物。

(項目 53)

項目 37 ~ 48 のいずれか 1 項に記載の化合物であって、環 A は任意に置換されるフェニル、ナフチル、キノリン、イソキノリン、またはベンズイミダゾール環である、化合物。

(項目 54)

項目 53 に記載の化合物であって、環 A は R² によって任意に置換され、および R² の各出現は独立してハロゲン、C₁₋₃ アルキル、-CN、C₁₋₃ ハロアルキル、-OC₁₋₃ アルキル、-OC₁₋₃ ハロアルキル、-NHCO(O)C₁₋₃ アルキル、-NH

C (O) NH C_{1 - 3} アルキル、-NHS (O)₂ C_{1 - 3} アルキル、または-C (O) H であり、n は 0 ~ 3 である、化合物。

(項目 55)

項目 54 に記載の化合物であって、環 A はフェニル基であり、R² の各出現は独立してハロゲン、C_{1 - 3} アルキル、-CN、C_{1 - 3} ハロアルキル、-OC_{1 - 3} アルキル、-OC_{1 - 3} ハロアルキル、-NHC (O) C_{1 - 3} アルキル、-NHC (O) NHC_{1 - 3} アルキル、-NHS (O)₂ C_{1 - 3} アルキル、または-C (O) H であり、n は 0 ~ 3 である、化合物。

(項目 56)

項目 55 に記載の化合物であって、環 A はフェニル基であり、R² はハロゲンであり、n は 1 または 2 である、化合物。

(項目 57)

R^{4 a} は任意に置換される脂肪族である、項目 37 に記載の化合物。

(項目 58)

項目 57 に記載の化合物であって、任意に置換される脂肪族は - (C (R^{4 d})₂)_{1 - 4} R^{4 e} であり、R^{4 d} は水素または任意に置換される C_{1 - 6} 脂肪族であり、R^{4 e} は水素、任意に置換される 5 員のヘテロアリール、COOR^{4 f} または CONR^{4 f} であり、R^{4 f} は水素または任意に置換される C_{1 - 6} 脂肪族である、化合物。

(項目 59)

項目 37 に記載の化合物であって、R⁵ の各出現は独立して水素、ハロ、または C_{1 - 6} 脂肪族、-C (O) N (R^{1 5 b})₂、-C (O) OR^{1 5 b}、-CH₂ N (R^{1 5 b})₂、-CH₂ OR^{1 5 b}、-CH₂ SR^{1 5 c}、3 ~ 10 員の脂環式、6 ~ 10 員のアリール、または窒素、酸素、若しくは硫黄から独立して選択される 1 ~ 5 のヘテロ原子を有する 5 ~ 10 員のヘテロアリールから選択される任意に置換される基である、化合物。

(項目 60)

項目 59 に記載の化合物であって、R^{1 5 b} は任意に置換される脂肪族基であり、および任意に置換される脂肪族基はヒドロキシリル、C_{1 - 6} アルコキシリル、アミノ、または C_{1 - 6} ジアルキルアミノで、任意に、さらに置換される、化合物。

(項目 61)

項目 1、2、10、18、27、28、29、または 37 のいずれか 1 項に記載の化合物および薬剤的に許容される担体を含む組成物。

(項目 62)

患者における増殖性障害を治療する方法であって、治療有効量の項目 1、2、10、18、27、28、29、または 37 に記載の化合物を当該患者に投与することを含む、方法。

(項目 63)

前記増殖性障害は乳癌、膀胱癌、結腸癌、神経膠腫、膠芽腫、肺癌、肝細胞癌、胃癌、黑色腫、甲状腺癌、子宮内膜癌、腎癌、子宮頸癌、膵臓癌、食道癌、前立腺癌、脳癌、または卵巣癌である、項目 64 に記載の方法。

(項目 64)

患者における炎症性または心血管障害を治療する方法であって、治療有効量の項目 1、2、10、18、27、28、29 または 37 のいずれか 1 項に記載の化合物を当該患者に投与することを含む、方法。

(項目 65)

前記炎症性または心血管障害はアレルギー / アナフィラキシー、急性慢性炎症、関節リウマチ、自己免疫障害、血栓症、高血圧、心臓肥大、および心不全から選択される、項目 64 に記載の方法。

(項目 66)

患者における PI3K または mTOR 活性を阻害する方法であって、治療有効量の項目 1、2、10、18、27、28、29、または 37 のいずれか 1 項に記載の化合物を含

む組成物を投与することを含む、方法。

1. 本発明の化合物の概要

本発明は P I 3 K の阻害剤であり、したがって増殖性、炎症性または心血管障害の治療に役立つ化合物を提供する。本発明の化合物は構造式 I - A または I - B に示され、