

【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31年2月14日 (2019.2.14)

【公表番号】特表2018-501286(P2018-501286A)

【公表日】平成30年1月18日 (2018.1.18)

【年通号数】公開・登録公報2018-002

【出願番号】特願2017-536293(P2017-536293)

【国際特許分類】

C 0 7 D 233/50 (2006.01)

A 6 1 K 31/496 (2006.01)

C 0 7 D 401/12 (2006.01)

A 6 1 K 31/4439 (2006.01)

C 0 7 D 409/12 (2006.01)

A 6 1 K 31/4178 (2006.01)

C 0 7 D 405/12 (2006.01)

A 6 1 K 31/506 (2006.01)

A 6 1 K 31/4184 (2006.01)

C 0 7 D 487/08 (2006.01)

A 6 1 K 31/4995 (2006.01)

C 0 7 D 401/04 (2006.01)

A 6 1 K 31/5377 (2006.01)

C 0 7 D 413/12 (2006.01)

A 6 1 K 31/4245 (2006.01)

C 0 7 D 417/12 (2006.01)

A 6 1 K 31/433 (2006.01)

C 0 7 D 403/12 (2006.01)

A 6 1 K 31/4709 (2006.01)

A 6 1 K 31/427 (2006.01)

A 6 1 P 35/00 (2006.01)

A 6 1 P 35/02 (2006.01)

A 6 1 K 45/00 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 D 233/50 C S P

A 6 1 K 31/496

C 0 7 D 401/12

A 6 1 K 31/4439

C 0 7 D 409/12

A 6 1 K 31/4178

C 0 7 D 405/12

A 6 1 K 31/506

A 6 1 K 31/4184

C 0 7 D 487/08

A 6 1 K 31/4995

C 0 7 D 401/04

A 6 1 K 31/5377

C 0 7 D 413/12

A 6 1 K 31/4245

C 0 7 D 417/12

A 6 1 K 31/433

C 0 7 D 403/12  
 A 6 1 K 31/4709  
 A 6 1 K 31/427  
 A 6 1 P 35/00  
 A 6 1 P 35/02  
 A 6 1 K 45/00

## 【手続補正書】

【提出日】平成31年1月7日(2019.1.7)

## 【手続補正 1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

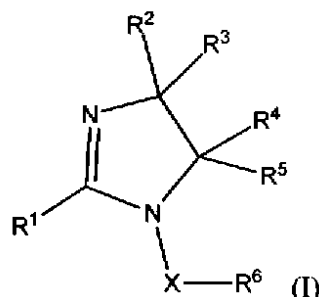
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 ( I ) :

【化 8 1】



( 式中、

X は C ( = O ) または S ( O )<sub>2</sub> であり ;

R<sup>1</sup> は、N 連結ピペラジニル、N 連結ピペリジン、および N 連結ジアザビシクロ [ 3 . 2 . 1 ] オクタンからなる群から選択され、R<sup>1</sup> は、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、アリール、3 ~ 10 員ヘテロ環、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意のアリール、3 ~ 10 員ヘテロ環、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、ハロ、C<sub>1</sub> ~ 4 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 4 アルケニル、および C<sub>2</sub> ~ 4 アルキニルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、および C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニルは、ハロ、C<sub>1</sub> ~ 4 アルコキシ、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキル ( 該 C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキルで任意選択的に置換される ) から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され ;

R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> は、H、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルからそれぞれ独立して選択され、任意の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、ハロおよびオキソから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され ; または、R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> が、それらが結合する炭素とともに、ハロ、オキソ、C<sub>1</sub> ~ 4 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 4 アルケニル、および C<sub>2</sub> ~ 4 アルキニルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換された 3、4、5、または 6 員の炭素環式環を形成し ;

R<sup>4</sup> および R<sup>5</sup> は、H、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルからそれぞれ独立して選択され、任意の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、ハロ

およびオキソから独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され；または、 $R^4$  および  $R^5$  が、それらが結合する炭素とともに、ハロ、オキソ、 $C_1 \sim 4$  アルキル、 $C_2 \sim 4$  アルケニル、および  $C_2 \sim 4$  アルキニルから独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換された3、4、5、または6員の炭素環式環を形成し；

$R^6$  は、5～10員ヘテロアリール、5～10員ヘテロ環、または6～10員アリールであり、5～10員ヘテロアリール、5～10員ヘテロ環、および6～10員アリールは、 $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、 $C_2 \sim 6$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、ヘテロアリール、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、および  $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$  からなる群から独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され；各々の  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、 $C_2 \sim 6$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、およびヘテロアリールは、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$ 、および  $C_1 \sim 6$  アルキル（該  $C_1 \sim 6$  アルキルは、ハロから独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換される）からなる群から独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され；

各々の  $R^b$  は、水素、 $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、アリール、および  $C_2 \sim 6$  アルキニルからなる群から独立して選択され、各々の  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、アリール、および  $C_2 \sim 6$  アルキニルは、ハロ、 $-N(R^c)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^c)_2$ 、 $-S(O)-N(R^c)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^c)_2$ 、 $-O-R^c$ 、 $-S-R^c$ 、 $-O-C(O)-R^c$ 、 $-C(O)-R^c$ 、 $-C(O)-OR^c$ 、 $-S(O)-R^c$ 、 $-S(O)_2-R^c$ 、 $-N(R^c)-C(O)-R^c$ 、 $-N(R^c)-S(O)-R^c$ 、 $-N(R^c)-C(O)-N(R^c)_2$ 、および  $-N(R^c)-S(O)_2-R^c$  からなる群から独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され；または、2つの  $R^b$  が、それらが結合する窒素とともに、ピロリジノ環、ピペリジノ環、またはピペラジノ環を形成し；

各々の  $R^c$  は、水素、 $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、および  $C_2 \sim 6$  アルキニルからなる群から独立して選択され、各々の  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、および  $C_2 \sim 6$  アルキニルは、オキソ、ハロ、アミノ、ヒドロキシ、および  $C_1 \sim 6$  アルコキシからなる群から独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換されるか；または、2つの  $R^c$  が、それらが結合する窒素とともに、オキソ、ハロ、および  $C_1 \sim 3$  アルキル（該  $C_1 \sim 3$  アルキルは、オキソおよびハロからなる群から独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換される）からなる群から独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換されたヘテロシクリルを形成し；

但し、

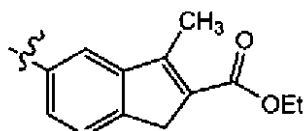
$X$  が  $S(O)_2$  であり；

$R^1$  が、任意選択的に置換されたピペラジン-1-イルであり；

$R^2 \sim R^5$  がそれぞれHである場合、

$R^6$  は、2,5-ジメトキシフェニルでも、3,4-ジメチルフェニルでも、4-エチルフェニルでも、4-プロモフェニルでも、2,4-ジメチルフェニルでも、4-エトキシフェニルでも、4-クロロ-2-メトキシフェニルでも、4-プロピルフェニルでも、2-(トリフルオロメチル)フェニルでも、2,4,5-トリメチルフェニルでも、3-メチルフェニルでも、2-(メチルカルボニルアミノ)-5-メチルフェニルでも、4-クロロフェニルでも、4-(イソプロピル)フェニルでも、3-クロロ-4-フルオロフ

フェニルでも、4 - シクロヘキシルフェニルでも、4 - (イソブチル)フェニルでも、2 - メチルフェニルでも、4 - アセチルフェニルでも、4 - (tert - ブチル)フェニルでも、4 - (メチルカルボニルアミノ)フェニルでも、2 - フルオロフェニルでも、フェニルでも、3, 5 - ジメチルフェニルでも、4 - メチルフェニルでも、5 - フルオロ - 2 - メチルフェニルでも、4 - フルオロフェニルでも、5, 6, 7, 8 - テトラヒドロナフタレン(naphthalene) - 2 - イルでも、2, 4, 6 - トリメチルフェニルでも、3 - クロロ - 4 - フルオロフェニルでも、4 - (エトキシカルボニルアミノ)フェニルでも、2, 5 - ジフルオロフェニルでも、2 - クロロフェニルでも、3 - クロロフェニルでも、4 - メトキシフェニルでも、2 - メトキシ - 4 - クロロフェニルでも、  
【化 8 2】



でもないことを条件とし；

但し、

X が S ( O )<sub>2</sub> であり；

R<sup>1</sup> が 4 - ベンジルピペリジノであり；

R<sup>2</sup> ~ R<sup>5</sup> がそれぞれ H である場合、

R<sup>6</sup> は 4 - メチルフェニルではないことを条件とし、

但し、

X が C ( = O ) であり；

R<sup>1</sup> が、任意選択的に置換されたピペラジン - 1 - イルであり；

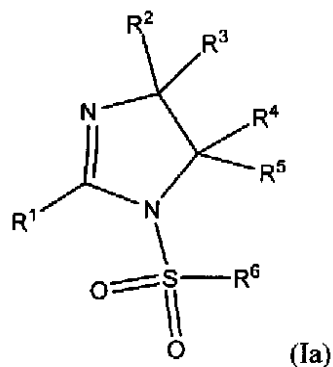
R<sup>2</sup> ~ R<sup>5</sup> がそれぞれ H である場合、

R<sup>6</sup> は、2 - メトキシフェニルでも、2 - メチルフェニルでも、2 - クロロフェニルでも、4 - エチルフェニルでも、3, 5 - ジメチルフェニルでも、2, 3 - ジメトキシフェニルでも、4 - メチルフェニルでも、4 - エトキシフェニルでも、3, 4 - ジメチルフェニルでも、2, 3 - ベンゾジオキサゾール - 5 - イルでも、3 - クロロフェニルでも、3 - メチルフェニルでも、4 - メトキシフェニルでも、3, 5 - ジメトキシフェニルでも、2 - フルオロフェニルでも、4 - フルオロフェニルでも、3 - フルオロ - 4 - メチルフェニルでも、2, 3 - ジメトキシフェニルでも、4 - (tert - ブチル)フェニルでも、3, 4, 5 - トリメトキシフェニルでも、2 - ブロモフェニルでも、4 - クロロフェニルでも、2 - トリフルオロメチルフェニルでも、フェニルでも、4 - ブロモフェニルでも、3, 4 - ジフルオロフェニルでも、2, 6 - ジフルオロフェニルでも、2 - (ジメチルアミノ)フェニルでも、4 - エトキシフェニルでも、3 - フルオロ - 4 - メチルフェニルでも、2, 4 - ジメチルフェニルでも、4 - (トリフルオロメチル)フェニルでも、4 - (ジメチルアミノ)フェニルでも、3 - メトキシフェニルでも、2 - メトキシ - 4 - クロロでも、または 3 - (ジメチルアミノ)フェニルでもないことを条件とする)の化合物またはその塩。

【請求項 2】

式 ( I a )：

## 【化 8 3】



の化合物である、請求項 1 に記載の化合物またはその塩。

## 【請求項 3】

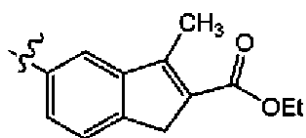
$R^2$  および  $R^3$  はそれぞれ H であるか、または  $R^2$  および  $R^3$  が、それらが結合する炭素とともに、5 員炭素環式環を形成し；

$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれ H である、請求項 2 に記載の化合物 またはその塩。

## 【請求項 4】

$R^6$  が任意選択的に置換されたフェニルであるか、または、式：

## 【化 8 4】



を有し；

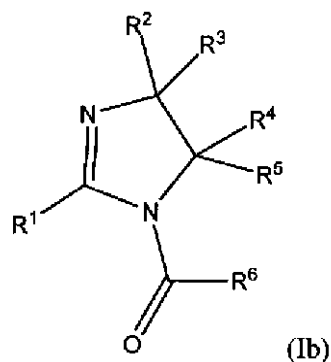
$R^2 \sim R^5$  がそれぞれ H である場合；

$R^1$  は、4 - ベンジルピペリジノでも、メチル、エチル、3 - クロロフェニル、4 - フルオロフェニル、2 - クロロフェニル、2 - フルオロフェニル、4 - メトキシフェニル、および 2 - メトキシフェニルからなる群から選択される基で 4 位が置換されたピペラジン - 1 - イルでもないことを条件とする、請求項 2 に記載の化合物 またはその塩。

## 【請求項 5】

式 (I b)：

## 【化 8 5】



の化合物である、請求項 1 に記載の化合物またはその塩。

## 【請求項 6】

R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> はそれぞれ H であるか、または R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> が、それらが結合する炭素とともに、5 員炭素環式環を形成し；

R<sup>4</sup> および R<sup>5</sup> はそれぞれ H である、請求項 5 に記載の化合物 またはその塩。

## 【請求項 7】

R<sup>6</sup> が任意選択的に置換されたフェニルまたは 2, 3 - ベンゾジオキサゾール - 5 - イルであり；

R<sup>2</sup> ~ R<sup>5</sup> がそれぞれ H である場合；

R<sup>1</sup> は、メチル、エチル、3 - クロロフェニル、2 - フルオロフェニル、3 - クロロフェニル、および 4 - フルオロフェニルからなる群から選択される基で 4 位が置換されたピペラジン - 1 - イルではないことを条件とする、請求項 5 に記載の化合物 またはその塩。

## 【請求項 8】

R<sup>1</sup> は、任意選択的に置換された N 連結ピペラジニルである、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物 またはその塩。

## 【請求項 9】

R<sup>1</sup> は、任意選択的に置換された N 連結ピペリジンである、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物 またはその塩。

## 【請求項 10】

R<sup>1</sup> は、任意選択的に置換された N 連結ジアザビスクロ [ 3 . 2 . 1 ] オクタンである、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物 またはその塩。

## 【請求項 11】

R<sup>1</sup> はピペラジン - 1 - イルであり、ピペラジン - 1 - イルは、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、アリール、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意のアリールおよび C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、ハロ、C<sub>1</sub> ~ 4 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 4 アルケニル、および C<sub>2</sub> ~ 4 アルキニルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、および C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニルは、ハロ、C<sub>1</sub> ~ 4 アルコキシ、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物 またはその塩。

## 【請求項 12】

R<sup>1</sup> は、N 連結ピペラジニル、N 連結ピペリジン、および N 連結ジアザビスクロ [ 3 . 2 . 1 ] オクタンからなる群から選択され、R<sup>1</sup> は、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、アリール、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意のアリールおよび C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、ハロおよび C<sub>1</sub> ~ 4 アルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキルは、ハロ、C<sub>1</sub> ~ 4 アルコキシ、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物 またはその塩。

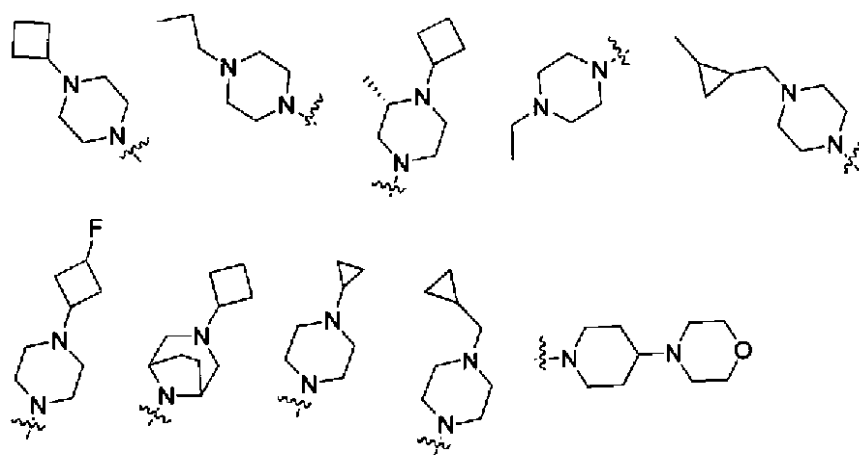
## 【請求項 13】

R<sup>1</sup> は、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、アリール、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルから選択される基で 4 位が置換されたピペラジン - 1 - イルであり、任意のアリールおよび C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、ハロおよび C<sub>1</sub> ~ 4 アルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキルは、ハロ、C<sub>1</sub> ~ 4 アルコキシ、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物 またはその塩。

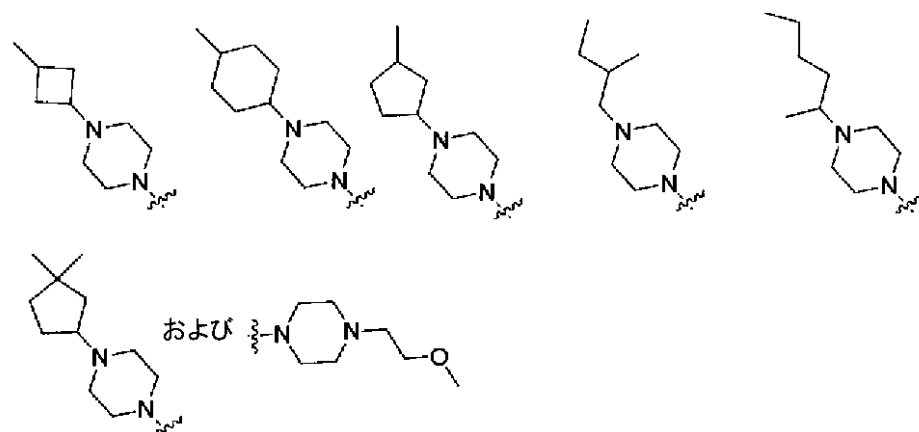
## 【請求項 14】

R<sup>1</sup> は、

## 【化 8 6】



## 【化 8 7】



からなる群から選択される、請求項 1 ～ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその塩。

## 【請求項 1 5】

$R^2$  および  $R^3$  はそれぞれ H であるか、または  $R^2$  および  $R^3$  が、それらが結合する炭素とともに、5 員炭素環式環を形成する、請求項 1 ～ 1 4 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその塩。

## 【請求項 1 6】

$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれ H である、請求項 1 ～ 1 5 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその塩。

## 【請求項 1 7】

$R^6$  は、 $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、 $C_2 \sim 6$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、ヘテロアリール、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、および  $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$  からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；各々の  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、 $C_2 \sim 6$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、およびヘテロアリールは、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O$

- R<sup>b</sup>、- S - R<sup>b</sup>、- O - C ( O ) - R<sup>b</sup>、- C ( O ) - R<sup>b</sup>、- C ( O ) - O R<sup>b</sup>、  
 - S ( O ) - R<sup>b</sup>、- S ( O )<sub>2</sub> - R<sup>b</sup>、- N ( R<sup>b</sup> ) - C ( O ) - R<sup>b</sup>、- N ( R<sup>b</sup> )  
 - S ( O ) - R<sup>b</sup>、- N ( R<sup>b</sup> ) - C ( O ) - N ( R<sup>b</sup> )<sub>2</sub>、- N ( R<sup>b</sup> ) - S ( O )<sub>2</sub>  
 - R<sup>b</sup>、および C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル ( 該 C<sub>1</sub> ~ 6 アルキルは、ハ口から独立して選択される  
 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される ) からなる群から独立して選択される 1 つ  
 または複数の基で任意選択的に置換される 6 ~ 10 員アリールである、請求項 1 ~ 16 の  
 いずれか 1 項に記載の化合物 またはその塩。

【請求項 18】

R<sup>6</sup> は、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、炭素環、ハ口、- C N、- C ( O ) - N ( R<sup>b</sup> )<sub>2</sub>、- O  
 - R<sup>b</sup>、- S ( O )<sub>2</sub> - R<sup>b</sup>、および - N ( R<sup>b</sup> ) - C ( O ) - R<sup>b</sup> からなる群から独立  
 して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換されたフェニルで置換されたフェ  
 ニルであり、各々の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキルおよび炭素環は、ハ口からなる群から独立して選択  
 される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される、請求項 1 ~ 16 のいずれか 1 項に  
 記載の化合物 またはその塩。

【請求項 19】

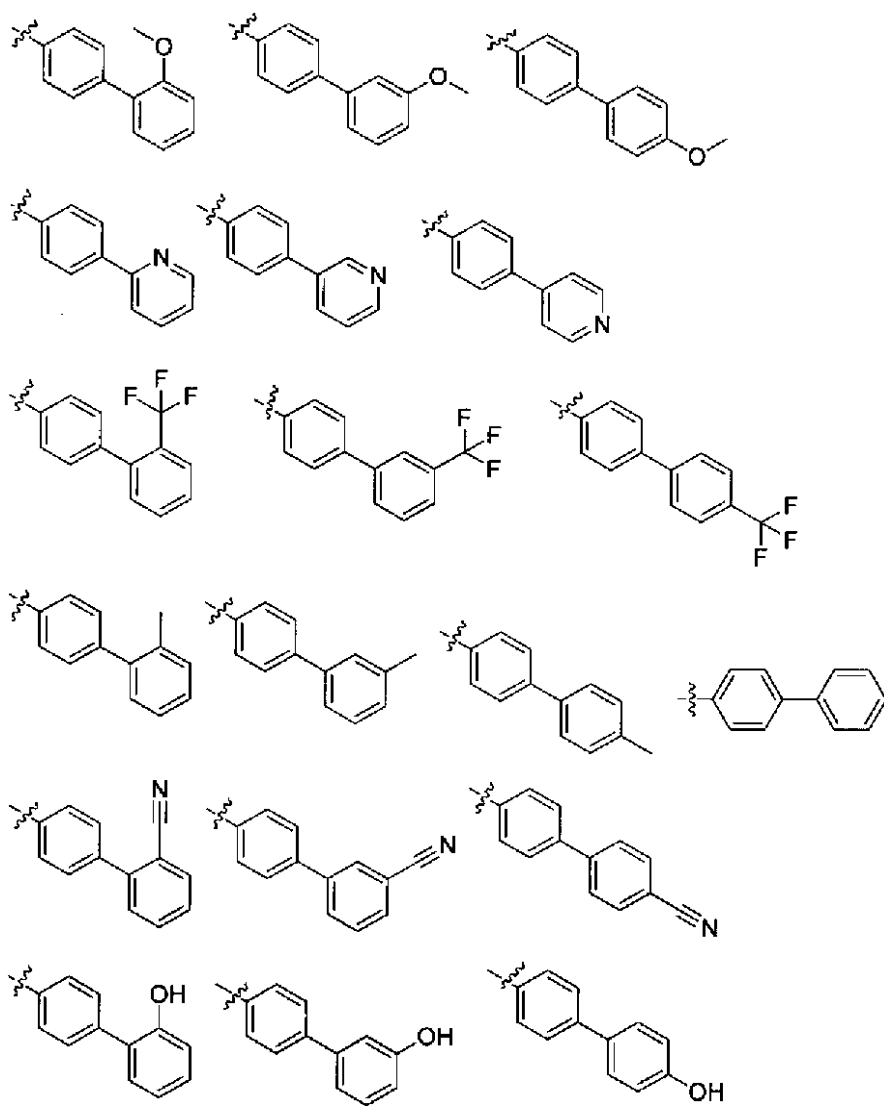
R<sup>6</sup> は、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、炭素環、ハ口、- C N、- C ( O ) - N ( R<sup>b</sup> )<sub>2</sub>、- O  
 - R<sup>b</sup>、- S ( O )<sub>2</sub> - R<sup>b</sup>、- N ( R<sup>b</sup> ) - C ( O ) - R<sup>b</sup>、および - N ( R<sup>b</sup> ) - C  
 ( O ) - N ( R<sup>b</sup> )<sub>2</sub> からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択  
 的に置換されたフェニルであり、各々の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキルおよび炭素環は、ハ口からなる  
 群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される、請求項 1 ~ 1  
 6 のいずれか 1 項に記載の化合物 またはその塩。

【請求項 20】

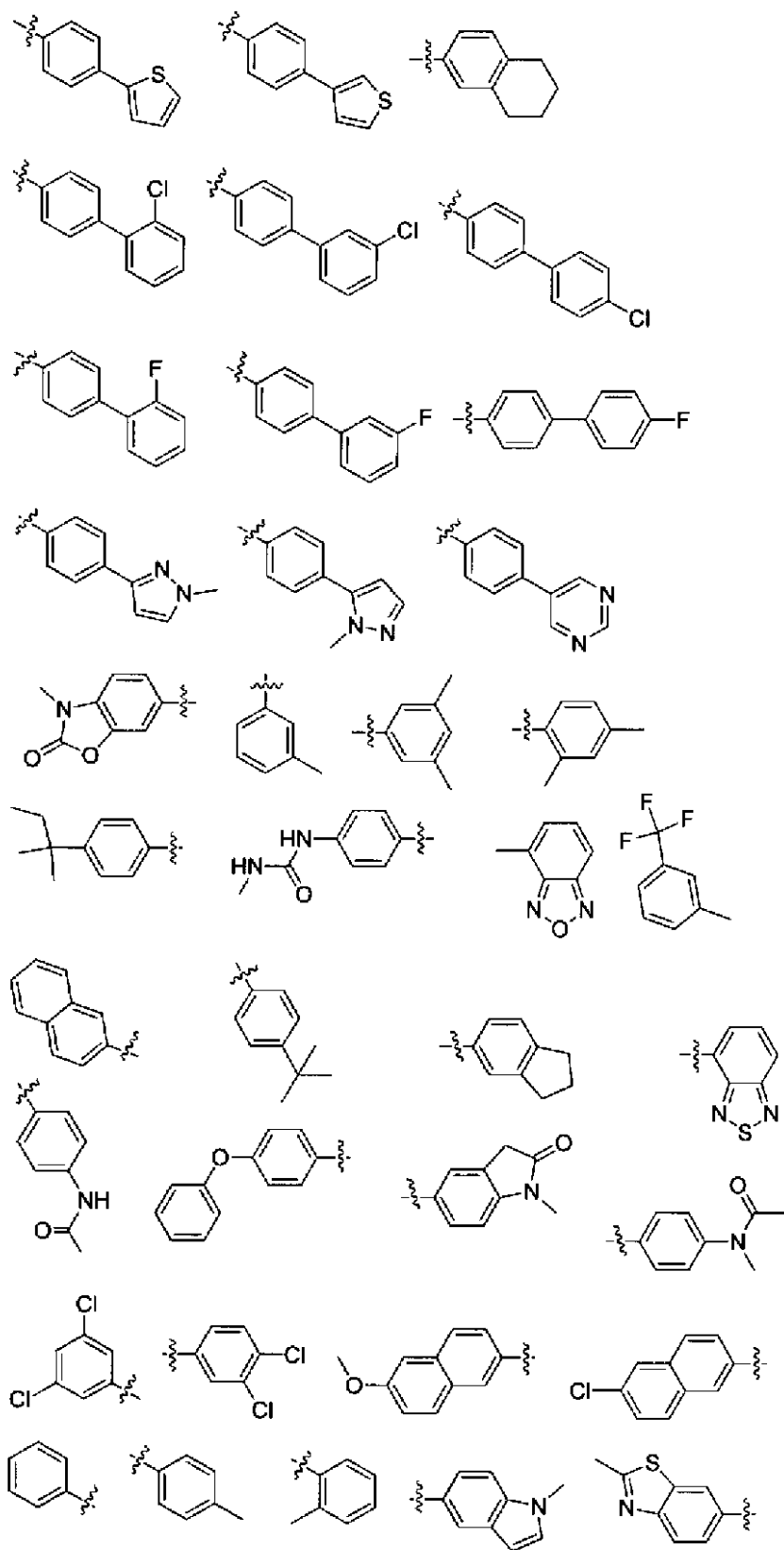
R<sup>6</sup> は、



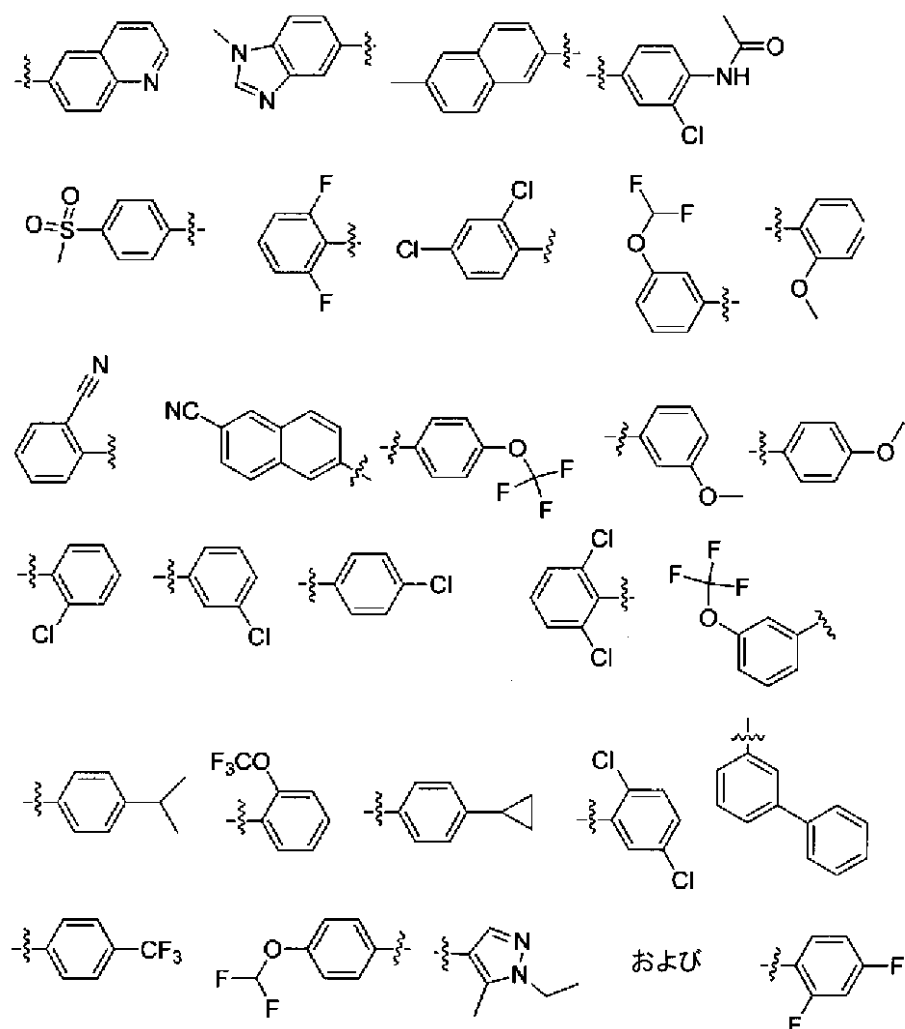
## 【化 8 8】



## 【化 8 9】



【化 9 0】

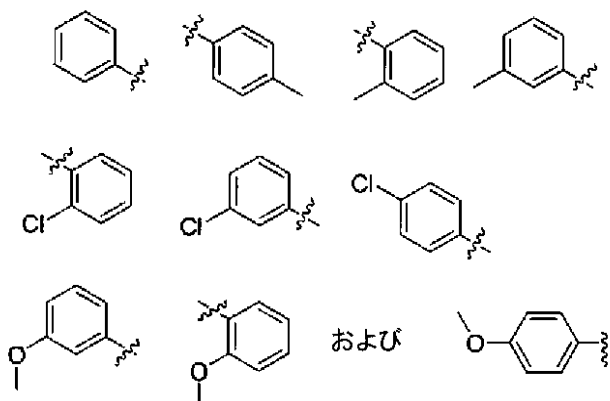


からなる群から選択される、請求項 1 ~ 16 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその塩。

【請求項 21】

R<sup>6</sup> は、

【化 9 1】



からなる群から選択される、請求項 1 ~ 16 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその塩。

## 【請求項 2 2】

$R^1$  は、N 連結ピペラジニル、N 連結ピペリジン、および N 連結ジアザビシクロ [ 3 . 2 . 1 ] オクタンからなる群から選択され、 $R^1$  は、 $C_1 \sim 6$  アルキル、アリール、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意のアリールおよび  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルは、ハロおよび  $C_1 \sim 4$  アルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の  $C_1 \sim 6$  アルキルは、ハロ、 $C_1 \sim 4$  アルコキシ、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；

$R^2$  および  $R^3$  は、それぞれ、H であるか、または、 $R^2$  および  $R^3$  が、それらが結合する炭素とともに、5 員炭素環式環を形成し；

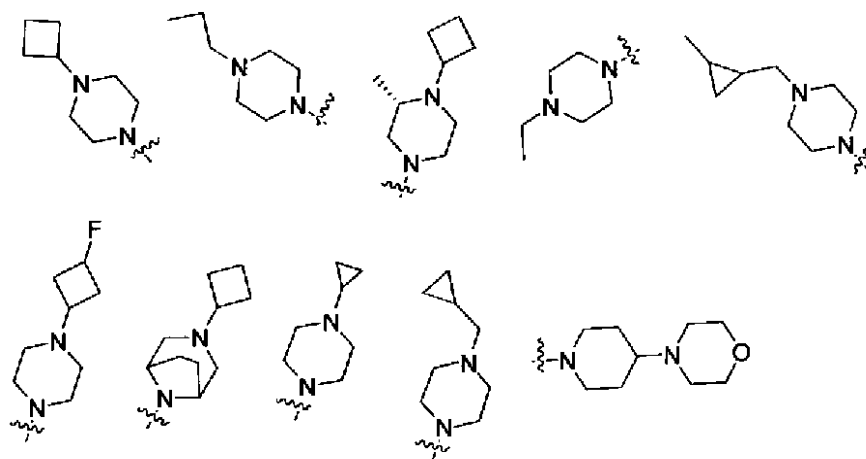
$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれ H であり；

$R^6$  は、 $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、 $C_2 \sim 6$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、ヘテロアリール、ハロ、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^b)_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{N}(\text{R}^b)_2$ 、 $-\text{S}(\text{O})-\text{N}(\text{R}^b)_2$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2-\text{N}(\text{R}^b)_2$ 、 $-\text{O}-\text{R}^b$ 、 $-\text{S}-\text{R}^b$ 、 $-\text{O}-\text{C}(\text{O})-\text{R}^b$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{R}^b$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^b$ 、 $-\text{S}(\text{O})-\text{R}^b$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2-\text{R}^b$ 、 $-\text{N}(\text{R}^b)-\text{C}(\text{O})-\text{R}^b$ 、 $-\text{N}(\text{R}^b)-\text{S}(\text{O})-\text{R}^b$ 、 $-\text{N}(\text{R}^b)-\text{C}(\text{O})-\text{N}(\text{R}^b)_2$ 、および  $-\text{N}(\text{R}^b)-\text{S}(\text{O})_2-\text{R}^b$  からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；各々の  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、 $C_2 \sim 6$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、およびヘテロアリールは、ハロ、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^b)_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{N}(\text{R}^b)_2$ 、 $-\text{S}(\text{O})-\text{N}(\text{R}^b)_2$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2-\text{N}(\text{R}^b)_2$ 、 $-\text{O}-\text{R}^b$ 、 $-\text{S}-\text{R}^b$ 、 $-\text{O}-\text{C}(\text{O})-\text{R}^b$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{R}^b$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^b$ 、 $-\text{S}(\text{O})-\text{R}^b$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2-\text{R}^b$ 、 $-\text{N}(\text{R}^b)-\text{C}(\text{O})-\text{R}^b$ 、 $-\text{N}(\text{R}^b)-\text{S}(\text{O})-\text{R}^b$ 、 $-\text{N}(\text{R}^b)-\text{C}(\text{O})-\text{N}(\text{R}^b)_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^b)-\text{S}(\text{O})_2-\text{R}^b$ 、および  $C_1 \sim 6$  アルキル（該  $C_1 \sim 6$  アルキルは、ハロから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される）からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される 6 ~ 10 員アリールである、請求項 3 または 4 に記載の化合物またはその塩。

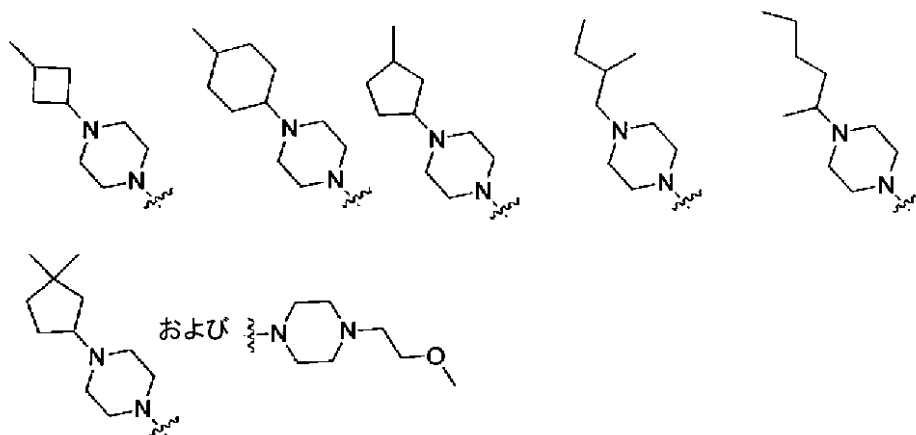
## 【請求項 2 3】

$R^1$  は、

## 【化 9 2】



## 【化 9 3】



からなる群から選択され、

$R^2$  および  $R^3$  は、それぞれ、Hであるか、または、 $R^2$  および  $R^3$  が、それらが結合する炭素とともに、5員炭素環式環を形成し；

$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれHであり；

$R^6$  は、 $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、 $C_2 \sim 6$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、ヘテロアリール、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、および  $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$  からなる群から独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され；各々の  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、 $C_2 \sim 6$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、およびヘテロアリールは、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$ 、および  $C_1 \sim 6$  アルキル（該  $C_1 \sim 6$  アルキルは、ハロから独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換される）からなる群から独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換される6～10員アリールである、請求項3または4に記載の化合物またはその塩。

## 【請求項 2 4】

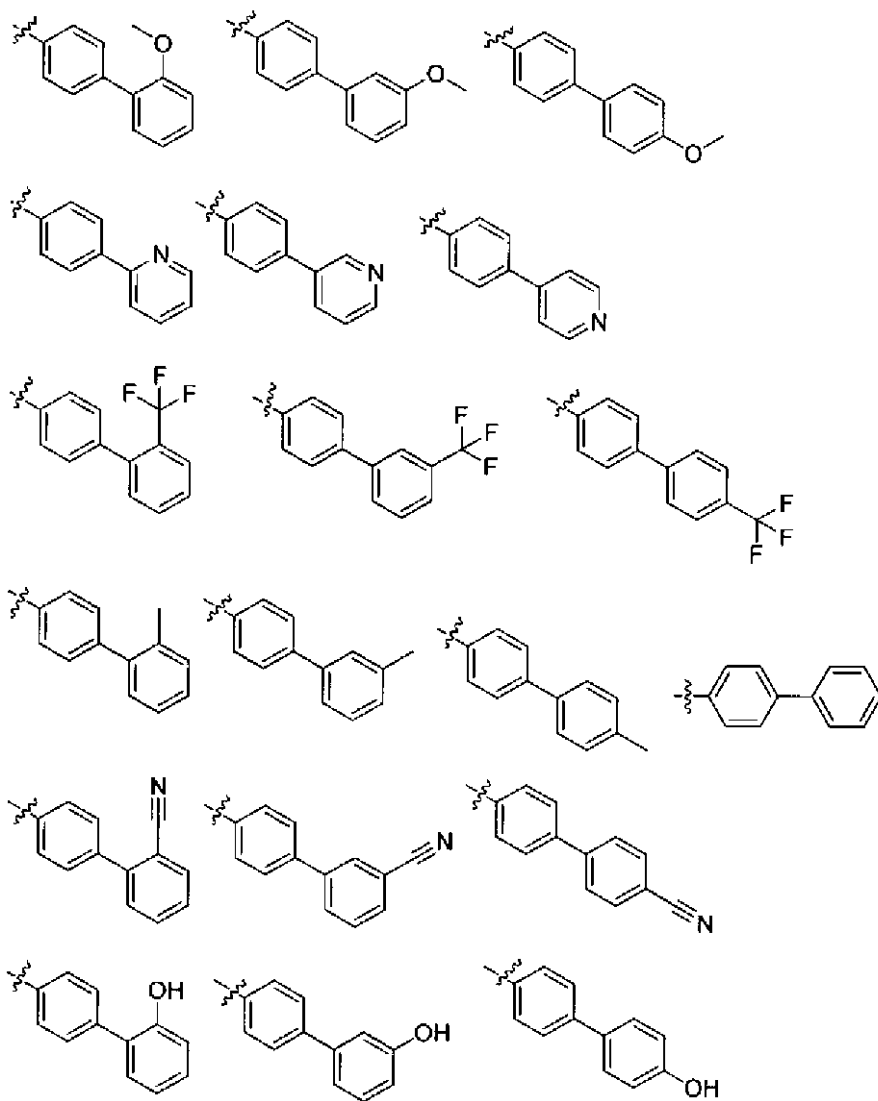
$R^1$  は、N連結ピペラジニル、N連結ピペリジン、およびN連結ジアザビシクロ[3.2.1]オクタンからなる群から選択され、 $R^1$  は、 $C_1 \sim 6$  アルキル、アリール、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルから独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意のアリールおよび  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルは、ハロおよび  $C_1 \sim 4$  アルキルから独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の  $C_1 \sim 6$  アルキルは、ハロ、 $C_1 \sim 4$  アルコキシ、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルから独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され；

$R^2$  および  $R^3$  は、それぞれ、Hであるか、または、 $R^2$  および  $R^3$  が、それらが結合する炭素とともに、5員炭素環式環を形成し；

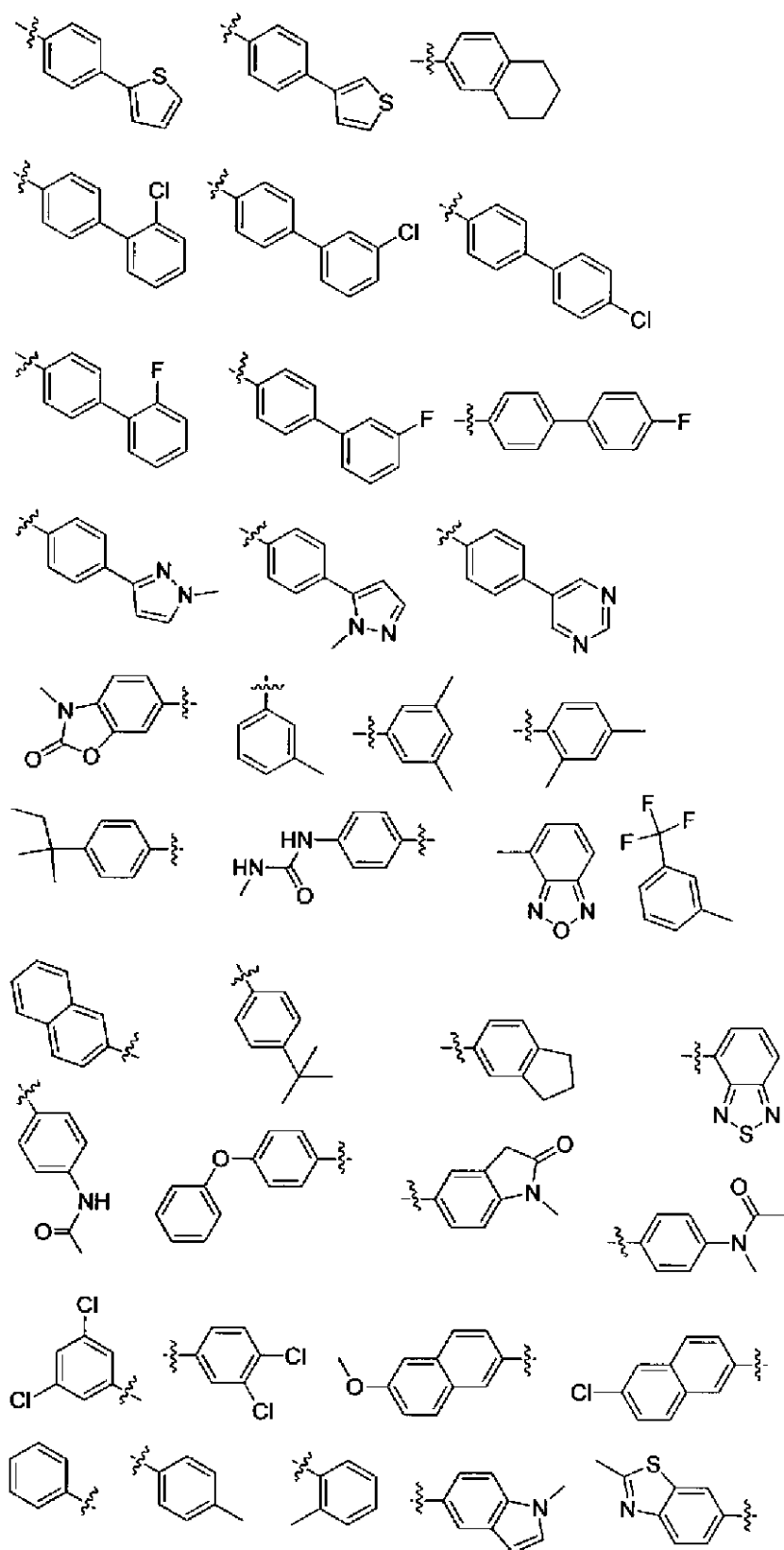
$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれHであり；

$R^6$  は、

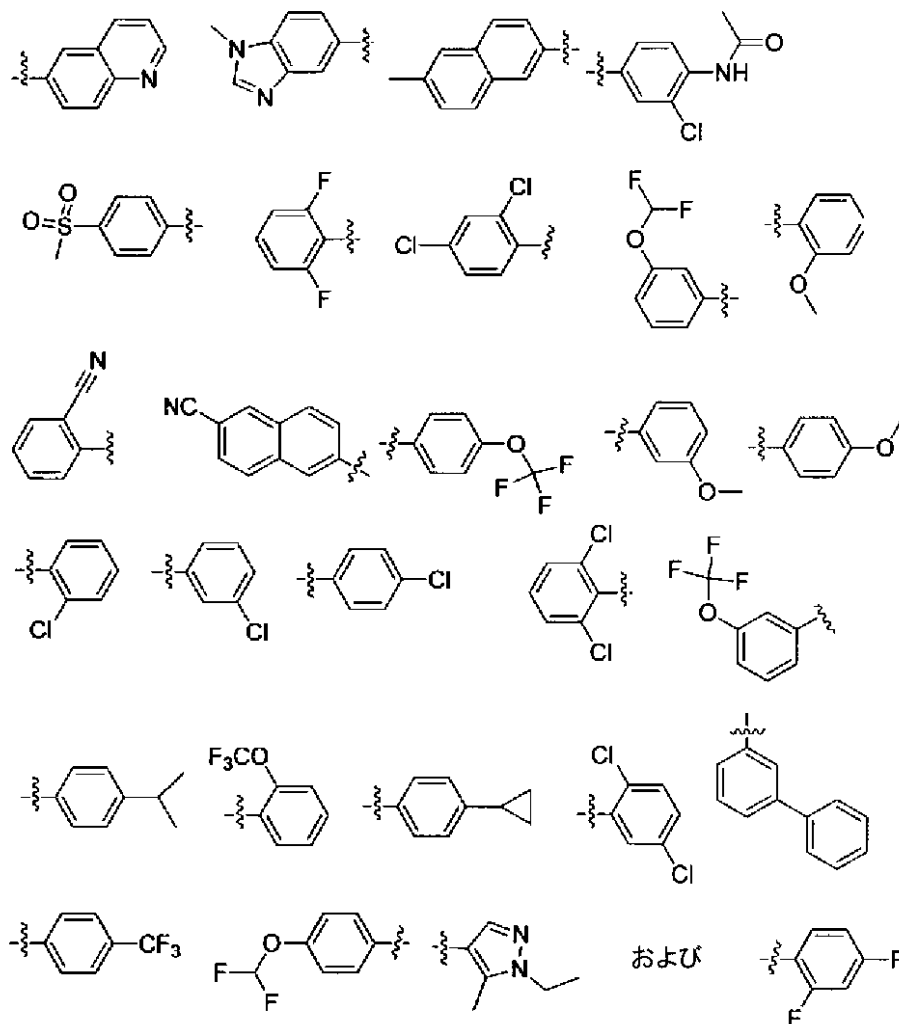
## 【化 9 4】



【化 9 5】



## 【化 9 6】

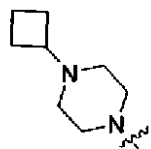


からなる群から選択される、請求項 3 または 4 に記載の化合物またはその塩。

## 【請求項 2 5】

R<sup>1</sup> は、

## 【化 9 7】



であり；

R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> は、それぞれ、H であるか、または、R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> が、それらが結合する炭素とともに、5 員炭素環式環を形成し；

R<sup>4</sup> および R<sup>5</sup> はそれぞれ H であり；

R<sup>6</sup> は、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、ハロ、CN、および - O - R<sup>b</sup> からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換されたフェニルであり、各々の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキルは、ハロからなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される、請求項 6 または 7 に記載の化合物またはその塩。

## 【請求項 2 6】

R<sup>1</sup> は、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、アリール、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルから選択される



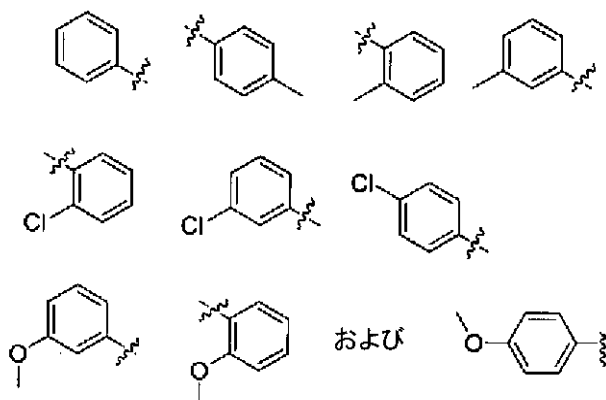
基で 4 位が置換されたピペラジン - 1 - イルであり、任意のアリールおよび  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルは、ハロおよび  $C_1 \sim 4$  アルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の  $C_1 \sim 6$  アルキルは、ハロ、 $C_1 \sim 4$  アルコキシ、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；

$R^2$  および  $R^3$  はそれぞれ H であり；

$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれ H であり；

$R^6$  は、

【化 9 8】



からなる群から選択される、請求項 6 または 7 に記載の化合物またはその塩。

【請求項 2 7】

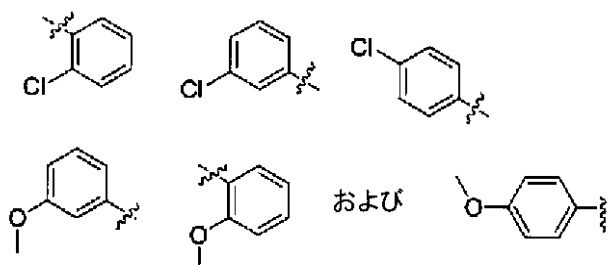
$R^1$  は、 $C_1 \sim 6$  アルキル、アリール、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルから選択される基で 4 位が置換されたピペラジン - 1 - イルであり、任意のアリールおよび  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルは、ハロおよび  $C_1 \sim 4$  アルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の  $C_1 \sim 6$  アルキルは、ハロ、 $C_1 \sim 4$  アルコキシ、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；

$R^2$  および  $R^3$  はそれぞれ H であり；

$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれ H であり；

$R^6$  は、

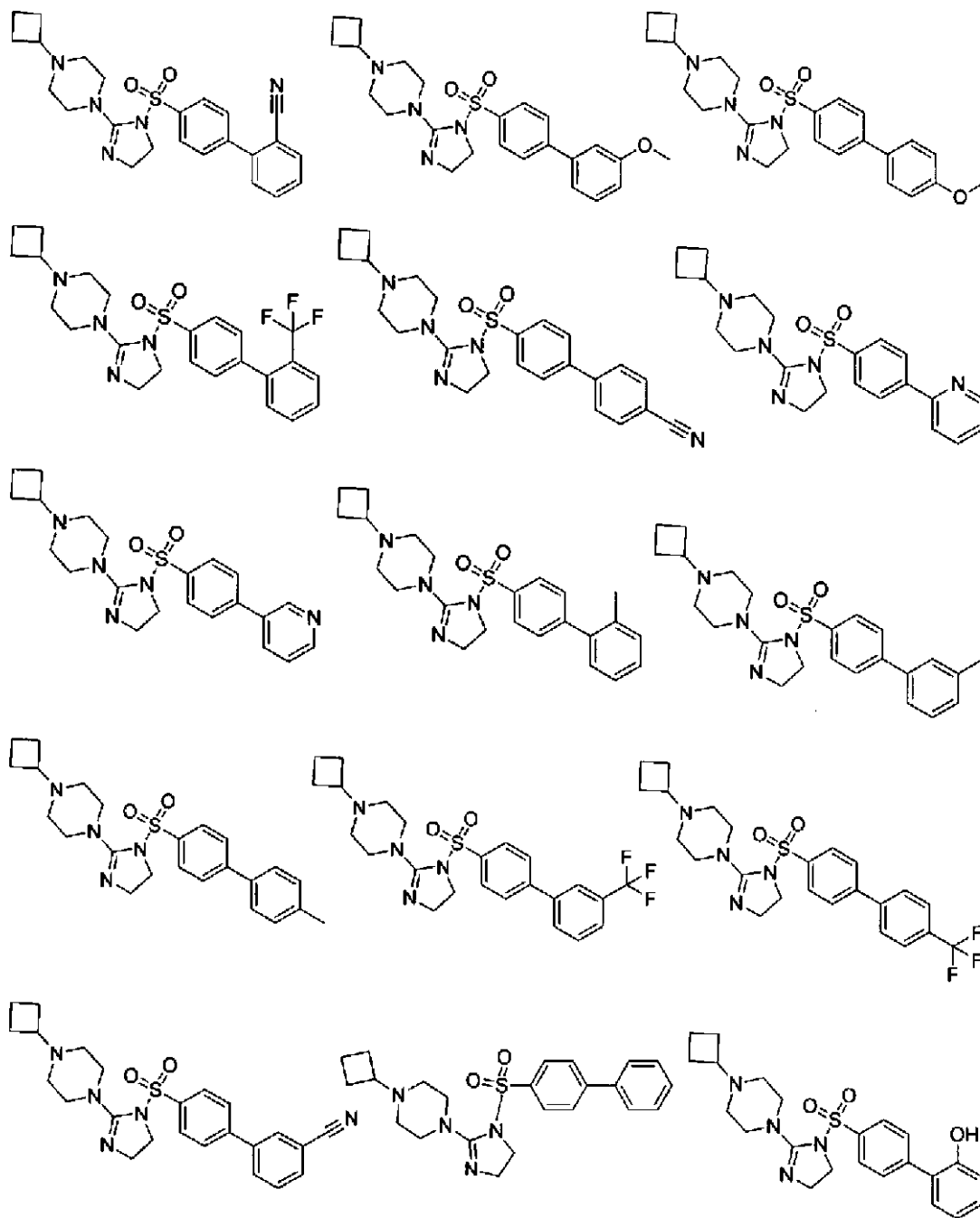
【化 9 9】



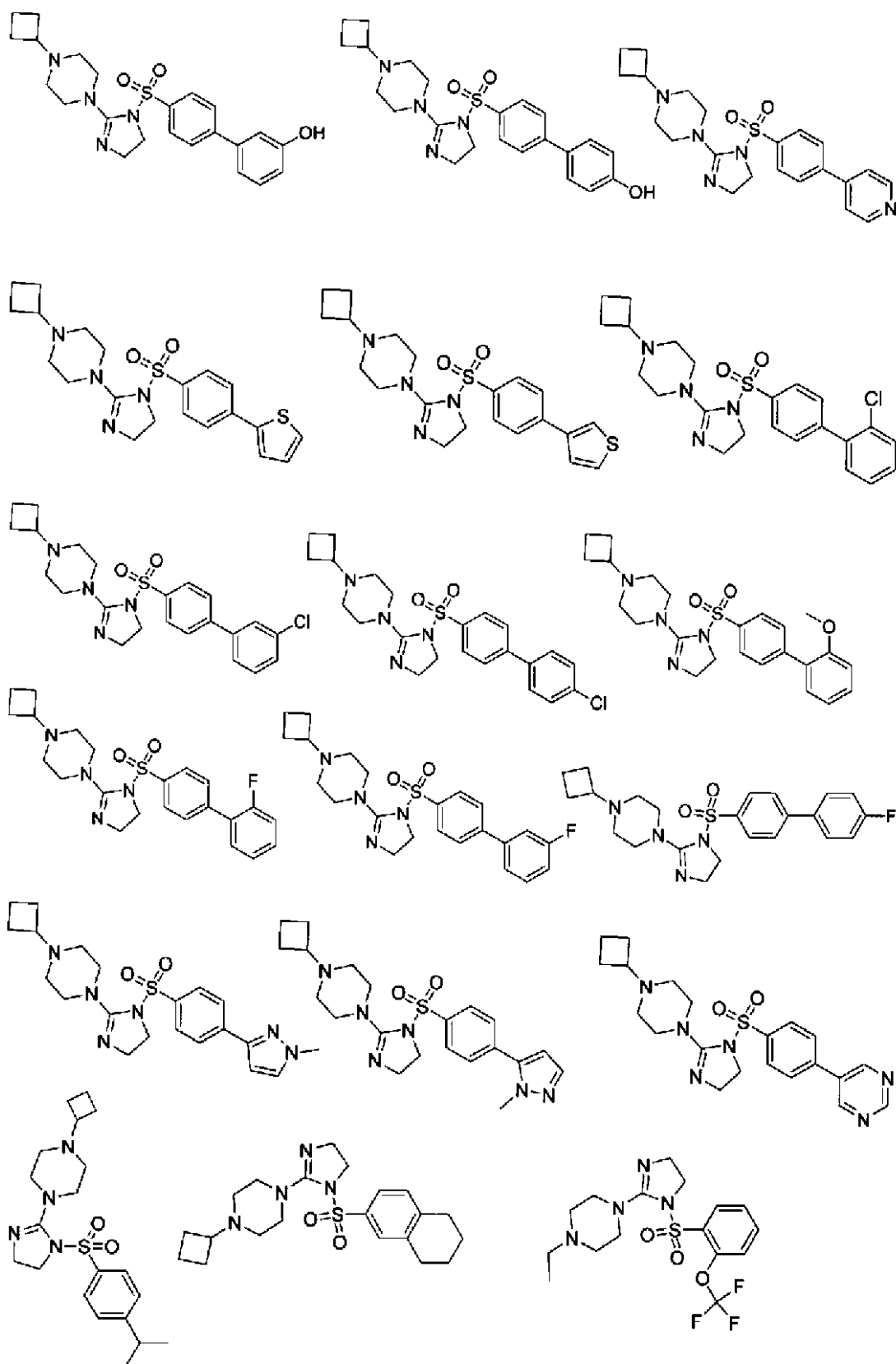
からなる群から選択される、請求項 6 または 7 に記載の化合物またはその塩。

【請求項 2 8】

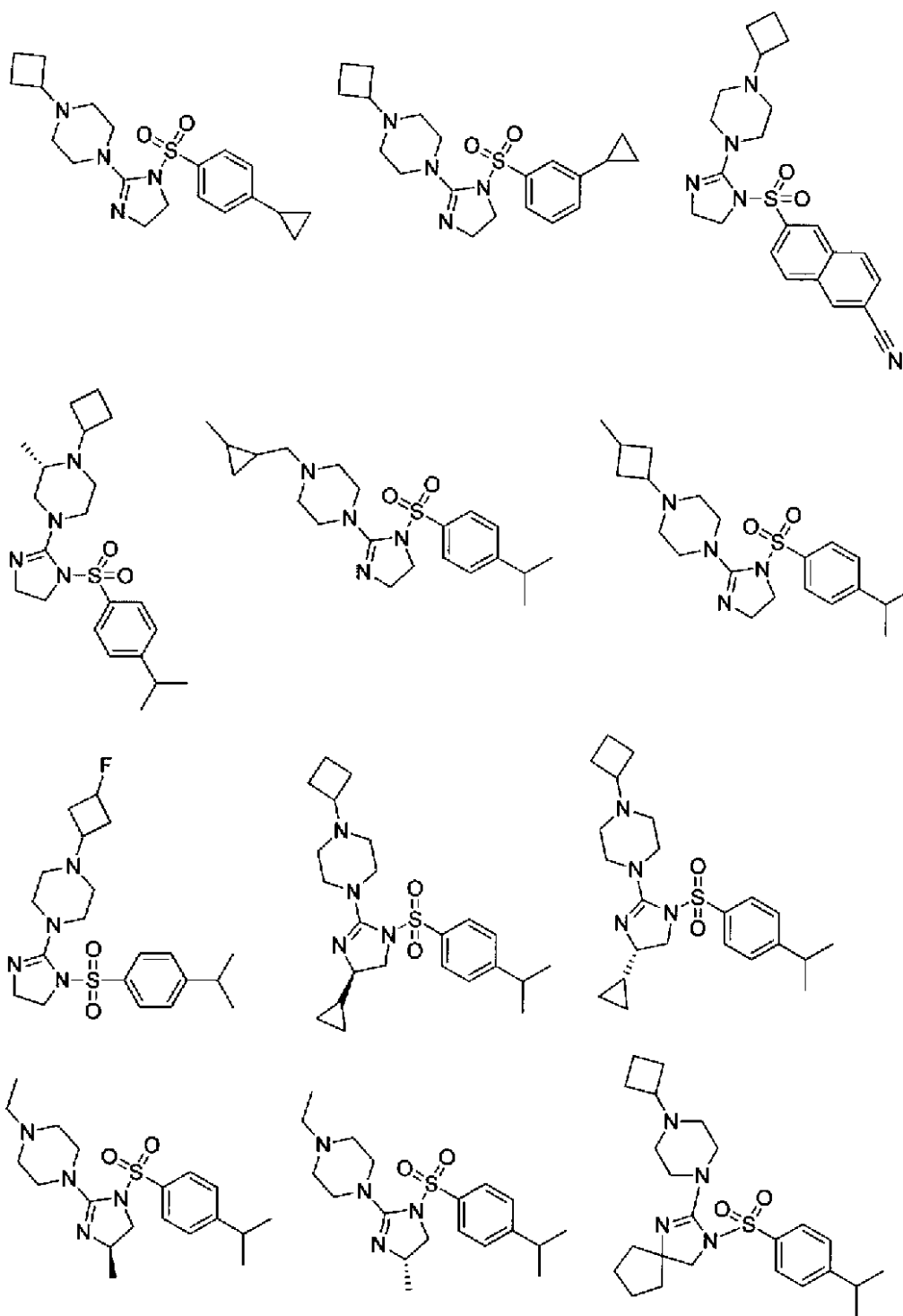
【化 1 0 0】



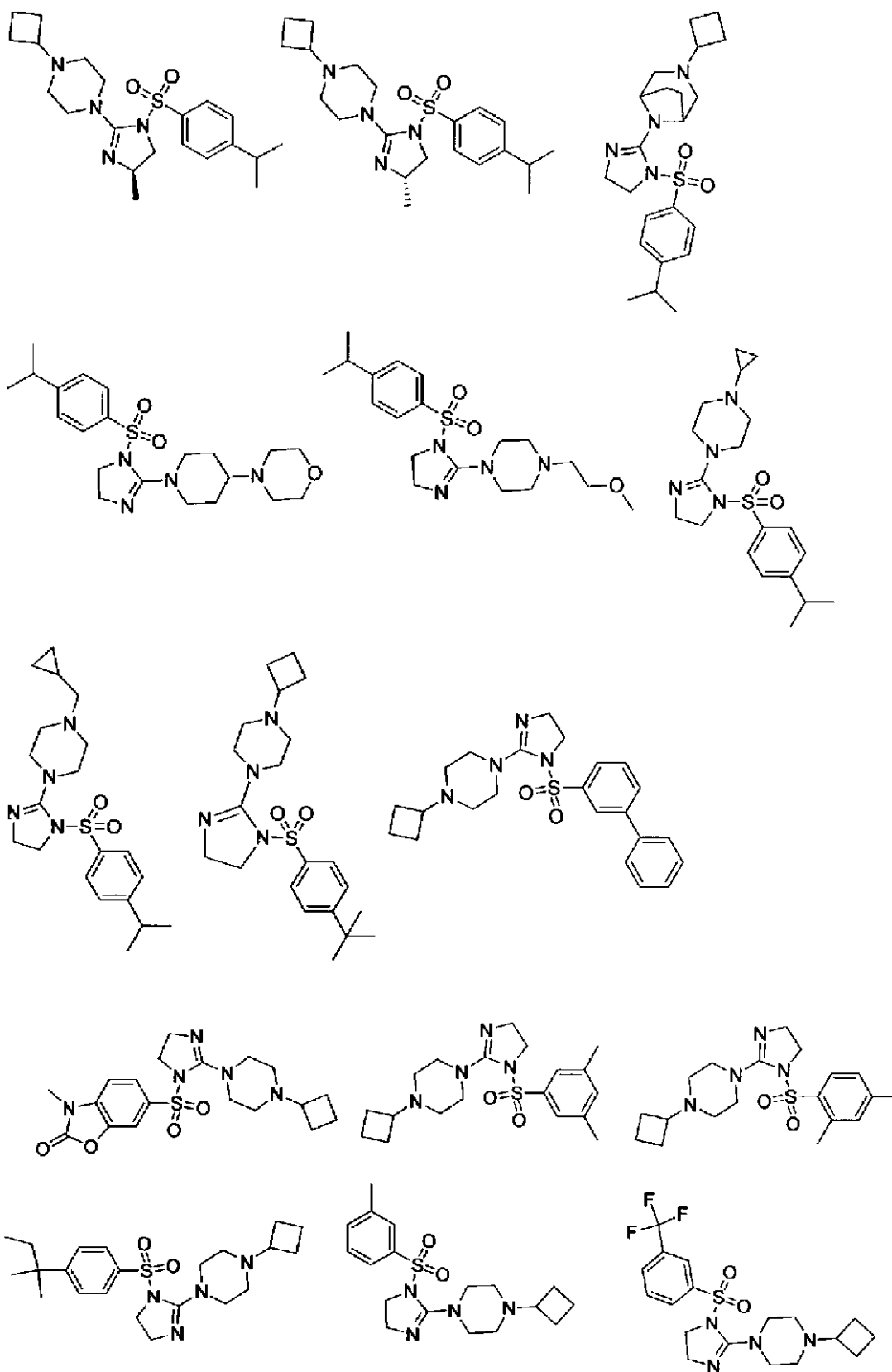
## 【化 1 0 1】



【化 1 0 2】



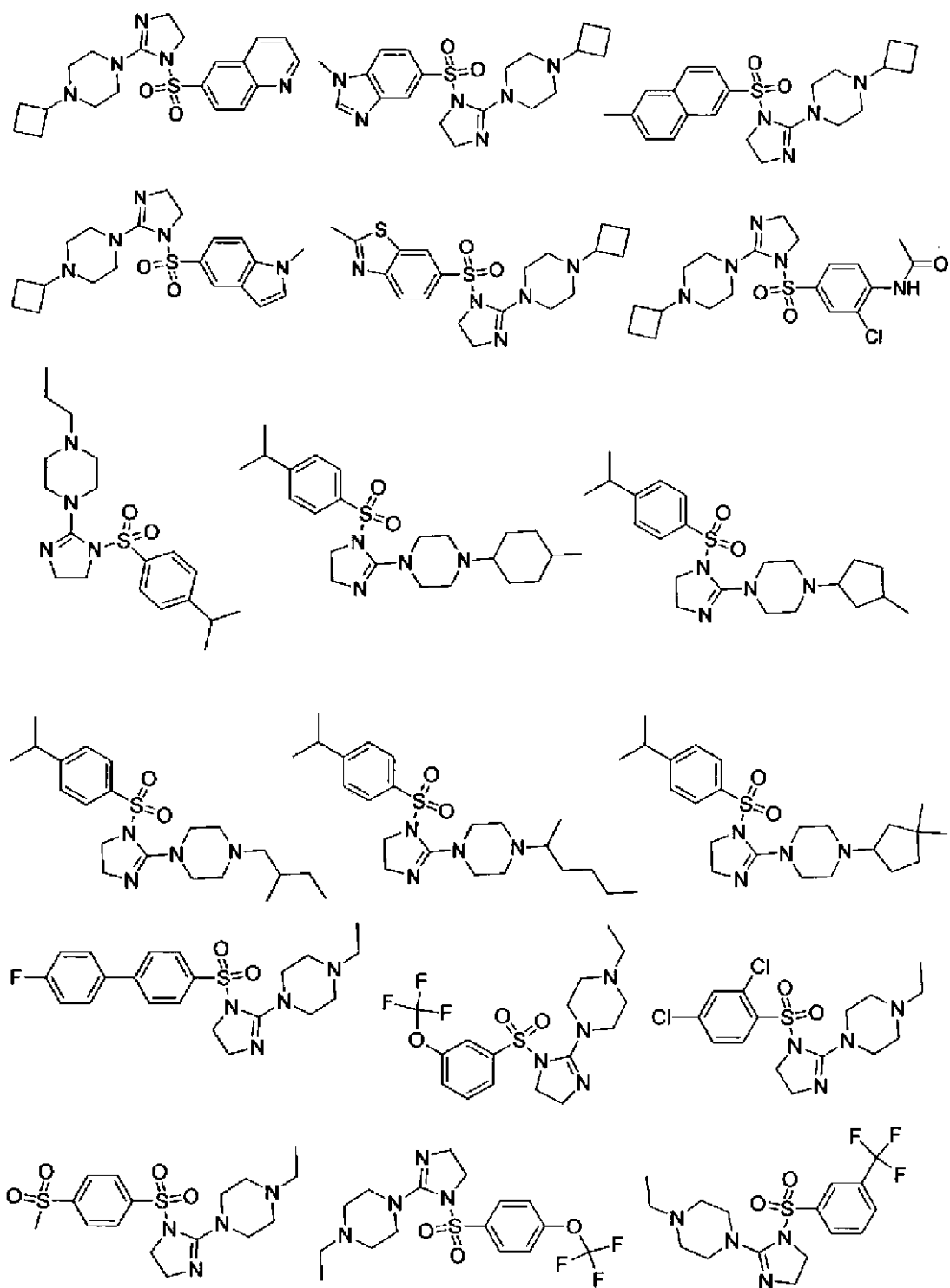
【化 1 0 3】



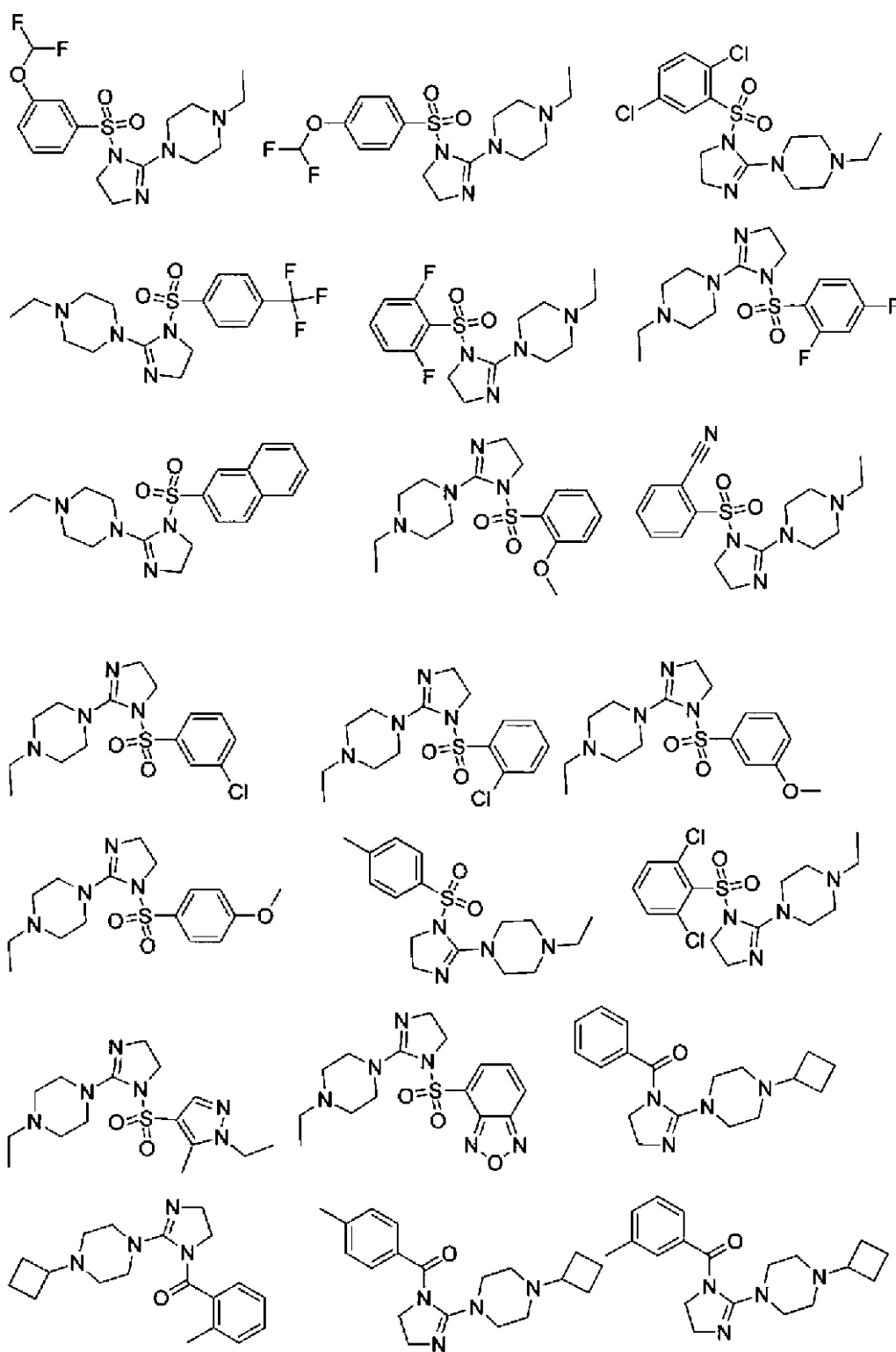
Chemical structures of 15 compounds (1a-1o) are shown, all featuring a 1,4-diazepane ring substituted with a cyclobutyl group and a 1,2,4-triazole ring substituted with a sulfonyl group. The sulfonyl group is linked to various aromatic and heterocyclic systems.

- 1a**: 1-(cyclobutyl)-4-(naphthalen-1-ylsulfonyl)-1,2,4-triazole
- 1b**: 1-(cyclobutyl)-4-(2,4-dichlorophenylsulfonyl)-1,2,4-triazole
- 1c**: 1-(cyclobutyl)-4-(4-(carbamoylamino)phenylsulfonyl)-1,2,4-triazole
- 1d**: 1-(cyclobutyl)-4-(benzo[1,2-b:4,5-b']diazol-5-ylsulfonyl)-1,2,4-triazole
- 1e**: 1-(cyclobutyl)-4-(4-phenyloxyphenylsulfonyl)-1,2,4-triazole
- 1f**: 1-(cyclobutyl)-4-(benzo[1,2-b:4,5-b']thiazol-5-ylsulfonyl)-1,2,4-triazole
- 1g**: 1-(cyclobutyl)-4-(3,4-dichlorophenylsulfonyl)-1,2,4-triazole
- 1h**: 1-(cyclobutyl)-4-(4-(tert-butyl)phenylsulfonyl)-1,2,4-triazole
- 1i**: 1-(cyclobutyl)-4-(3,4-dichlorophenylsulfonyl)-1,2,4-triazole
- 1j**: 1-(cyclobutyl)-4-(4-(tert-butyl)phenylsulfonyl)-1,2,4-triazole
- 1k**: 1-(cyclobutyl)-4-(4-(tert-butyl)phenylsulfonyl)-1,2,4-triazole
- 1l**: 1-(cyclobutyl)-4-(4-(tert-butyl)phenylsulfonyl)-1,2,4-triazole
- 1m**: 1-(cyclobutyl)-4-(4-(tert-butyl)phenylsulfonyl)-1,2,4-triazole
- 1n**: 1-(cyclobutyl)-4-(4-(tert-butyl)phenylsulfonyl)-1,2,4-triazole
- 1o**: 1-(cyclobutyl)-4-(4-(tert-butyl)phenylsulfonyl)-1,2,4-triazole

【化 1 0 5】

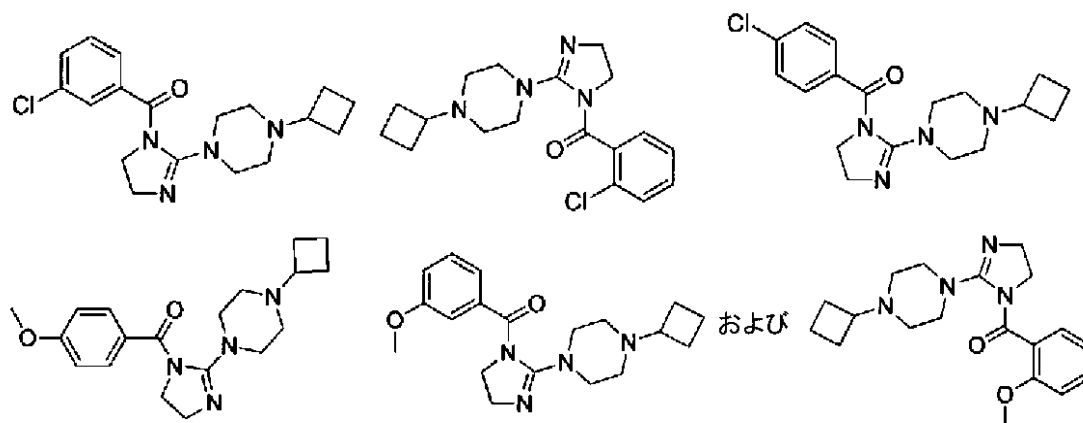


【化 1 0 6】





## 【化 1 0 7】



から選択される、請求項 1 に記載の化合物またはその塩。

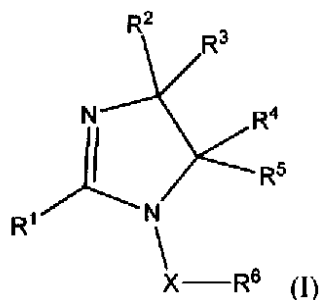
## 【請求項 2 9】

請求項 1 ~ 2 8 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩、および薬学的に許容され得るアジュバント、担体、またはビヒクルを含む組成物。

## 【請求項 3 0】

癌の処置を必要とする哺乳動物において癌を処置するための組成物であって、請求項 1 ~ 2 8 のいずれか 1 項に記載の化合物もしくはその薬学的に許容され得る塩；または式 (I)：

## 【化 1 0 8】



(式中、

X は C ( = O ) または S ( O )<sub>2</sub> であり；

R<sup>1</sup> は、N 連結ピペラジニル、N 連結ピペリジン、および N 連結ジアザビシクロ [ 3 . 2 . 1 ] オクタンからなる群から選択され、R<sup>1</sup> は、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、アリール、3 ~ 10 員ヘテロ環、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意のアリール、3 ~ 10 員ヘテロ環、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、ハロ、C<sub>1</sub> ~ 4 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 4 アルケニル、および C<sub>2</sub> ~ 4 アルキニルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、および C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニルは、ハロ、C<sub>1</sub> ~ 4 アルコキシ、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキル ( 該 C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキルで任意選択的に置換される ) から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；

R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> は、H、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルからそれぞれ独立して選択され、任意の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、ハロおよびオキソから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；また

は、 $R^2$  および  $R^3$  が、それらが結合する炭素とともに、ハロ、オキソ、 $C_1 \sim 4$  アルキル、 $C_2 \sim 4$  アルケニル、および  $C_2 \sim 4$  アルキニルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換された 3、4、5、または 6 員の炭素環式環を形成し；

$R^4$  および  $R^5$  は、H、 $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、 $C_2 \sim 6$  アルキニル、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルからそれぞれ独立して選択され、任意の  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、 $C_2 \sim 6$  アルキニル、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルは、ハロおよびオキソから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；または、 $R^4$  および  $R^5$  が、それらが結合する炭素とともに、ハロ、オキソ、 $C_1 \sim 4$  アルキル、 $C_2 \sim 4$  アルケニル、および  $C_2 \sim 4$  アルキニルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換された 3、4、5、または 6 員の炭素環式環を形成し；

$R^6$  は、5～10 員ヘテロアリール、5～10 員ヘテロ環、または 6～10 員アリールであり、5～10 員ヘテロアリール、5～10 員ヘテロ環、および 6～10 員アリールは、 $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、 $C_2 \sim 6$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、ヘテロアリール、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、および  $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$  からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；各々の  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、 $C_2 \sim 6$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、およびヘテロアリールは、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$ 、および  $C_1 \sim 6$  アルキル（該  $C_1 \sim 6$  アルキルは、ハロから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される）からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；

各々の  $R^b$  は、水素、 $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、アリール、および  $C_2 \sim 6$  アルキニルからなる群から独立して選択され、各々の  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、アリール、および  $C_2 \sim 6$  アルキニルは、ハロ、 $-N(R^c)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^c)_2$ 、 $-S(O)-N(R^c)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^c)_2$ 、 $-O-R^c$ 、 $-S-R^c$ 、 $-O-C(O)-R^c$ 、 $-C(O)-R^c$ 、 $-C(O)-OR^c$ 、 $-S(O)-R^c$ 、 $-S(O)_2-R^c$ 、 $-N(R^c)-C(O)-R^c$ 、 $-N(R^c)-S(O)-R^c$ 、 $-N(R^c)-C(O)-N(R^c)_2$ 、および  $-N(R^c)-S(O)_2-R^c$  からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；または、2 つの  $R^b$  が、それらが結合する窒素とともに、ピロリジノ環、ピペリジノ環、またはピペラジノ環を形成し；

各々の  $R^c$  は、水素、 $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、および  $C_2 \sim 6$  アルキニルからなる群から独立して選択され、各々の  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C_2 \sim 6$  アルケニル、および  $C_2 \sim 6$  アルキニルは、オキソ、ハロ、アミノ、ヒドロキシ、および  $C_1 \sim 6$  アルコキシからなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換されるか；または、2 つの  $R^c$  が、それらが結合する窒素とともに、オキソ、ハロ、および  $C_1 \sim 3$  アルキル（該  $C_1 \sim 3$  アルキルは、オキソおよびハロからなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される）からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換されたヘテロシクリルを形成する）の化合物もしくはその薬学的に許容され得る塩を含む、組成物。

【請求項 3 1】

前記癌が癌幹細胞 / 前駆細胞を含む、請求項 3 0 に記載の組成物。

【請求項 3 2】

癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の分化の誘導を必要とする哺乳動物において癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の分化を誘導するための組成物であって、請求項 1 ~ 28 および請求項 30 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を含む、組成物。

【請求項 33】

癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の活性の低下を必要とする哺乳動物において癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の活性を低下させるための組成物であって、請求項 1 ~ 28 および請求項 30 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を含む、組成物。

【請求項 34】

癌幹細胞 / 前駆細胞の枯渇を必要とする哺乳動物において癌幹細胞 / 前駆細胞を枯渇させるための組成物であって、請求項 1 ~ 28 および請求項 30 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を含む、組成物。

【請求項 35】

癌発生の減少を必要とする哺乳動物において癌発生を減少させるための組成物であって、請求項 1 ~ 28 および請求項 30 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を含む、組成物。

【請求項 36】

前記癌が、肺癌、白血病、またはリンパ腫である、請求項 30 ~ 35 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 37】

医学療法における使用のための、請求項 1 ~ 28 および 30 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を含む組成物。

【請求項 38】

癌の治療的処置または予防的処置のための、請求項 1 ~ 28 および 30 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を含む組成物。

【請求項 39】

前記癌が癌幹細胞 / 前駆細胞を含む、請求項 38 に記載の組成物。

【請求項 40】

癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の分化を誘導するための、請求項 1 ~ 28 および 30 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を含む組成物。

【請求項 41】

癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の活性を低下させるための、請求項 1 ~ 28 および 30 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を含む組成物。

【請求項 42】

癌幹細胞 / 前駆細胞を枯渇させるための、請求項 1 ~ 28 および 30 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を含む組成物。

【請求項 43】

癌発生を減少させるための、請求項 1 ~ 28 および 30 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を含む組成物。

【請求項 44】

前記癌が、肺癌、白血病、またはリンパ腫である、請求項 38 ~ 43 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 45】

哺乳動物における癌を処置するための医薬を調製するための、請求項 1 ~ 28 および請求項 30 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩の使用。

【請求項 46】

前記癌が癌幹細胞 / 前駆細胞を含む、請求項 45 に記載の使用。

【請求項 47】

哺乳動物における癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の分化を誘導するための医薬を調製す

るための、請求項 1 ~ 2 8 および請求項 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩の使用。

【請求項 4 8】

哺乳動物における癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の活性を低下させるための医薬を調製するための、請求項 1 ~ 2 8 および請求項 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩の使用。

【請求項 4 9】

哺乳動物における癌幹細胞 / 前駆細胞を枯渇させるための医薬を調製するための、請求項 1 ~ 2 8 および請求項 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩の使用。

【請求項 5 0】

哺乳動物における癌発生を減少させるための医薬を調製するための、請求項 1 ~ 2 8 および請求項 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩の使用。

【請求項 5 1】

前記癌が、肺癌、白血病、またはリンパ腫である、請求項 4 5 ~ 5 0 のいずれか 1 項に記載の使用。

【請求項 5 2】

癌の処置を必要とする個体において癌を処置するための組成物であって、K D M 2 インヒビターを含む、組成物。

【請求項 5 3】

前記癌が癌幹細胞 / 前駆細胞を含む、請求項 5 2 に記載の組成物。

【請求項 5 4】

前記 K D M 2 インヒビターが、前記個体において癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の分化を誘導し、癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の活性を低下させ、そして / または癌幹細胞 / 前駆細胞集団を枯渇させるのに有効である、請求項 5 2 または 5 3 に記載の組成物。

【請求項 5 5】

前記 K D M 2 インヒビターが、前記個体における癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の N o t c h シグナル伝達を低下させるのに有効である、請求項 5 2 ~ 5 4 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 5 6】

癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の分化の誘導を必要とする個体において癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の分化を誘導するための組成物であって、K D M 2 インヒビターを含む、組成物。

【請求項 5 7】

癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の活性の低下を必要とする個体において癌幹細胞 / 前駆細胞 (複数可) の活性を低下させるための組成物であって、K D M 2 インヒビターを含む、組成物。

【請求項 5 8】

癌幹細胞 / 前駆細胞集団の枯渇を必要とする個体において癌幹細胞 / 前駆細胞集団を枯渇させるための組成物であって、K D M 2 インヒビターを含む、組成物。

【請求項 5 9】

癌発生の減少を必要とする個体において癌発生を減少させるための組成物であって、K D M 2 インヒビターを含む、組成物。

【請求項 6 0】

前記癌が、肺癌、白血病 (例えば、A M L、A L L、M L L)、またはリンパ腫である、請求項 5 2 ~ 5 9 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 6 1】

前記インヒビターが K D M 2 B インヒビターである、請求項 5 2 ~ 6 0 のいずれか 1 項に記載の組成物。

## 【請求項 6 2】

前記 KDM 2 インヒビターが、KDM 2 に特異的に結合し、KDM 2 デメチラーゼ活性を阻害する、請求項 5 2 ~ 6 1 のいずれか 1 項に記載の組成物。

## 【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 2 1 9

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 2 1 9】

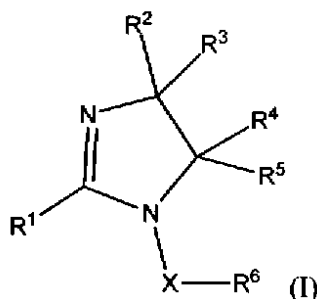
多数の実施形態を記載しているが、これらの実施例を、本明細書中に記載の化合物および方法を利用する他の実施形態を得るために変更することができる。したがって、本発明の範囲を、例で示した特定の実施形態ではなく添付の特許請求の範囲によって定義すべきである。

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)

式 (I) :

【化 8 1】



(式中、

X は C ( = O ) または S ( O )<sub>2</sub> であり ;

R<sup>1</sup> は、N 連結ピペラジニル、N 連結ピペリジン、および N 連結ジアザビシクロ [ 3 . 2 . 1 ] オクタンからなる群から選択され、R<sup>1</sup> は、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、アリール、3 ~ 10 員ヘテロ環、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意のアリール、3 ~ 10 員ヘテロ環、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、ハロ、C<sub>1</sub> ~ 4 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 4 アルケニル、および C<sub>2</sub> ~ 4 アルキニルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、および C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニルは、ハロ、C<sub>1</sub> ~ 4 アルコキシ、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキル ( 該 C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキルで任意選択的に置換される ) から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され ;

R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> は、H、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルからそれぞれ独立して選択され、任意の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、ハロおよびオキソから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され ; または、R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> が、それらが結合する炭素とともに、ハロ、オキソ、C<sub>1</sub> ~ 4 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 4 アルケニル、および C<sub>2</sub> ~ 4 アルキニルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換された 3、4、5、または 6 員の炭素環式環を形成し ;

R<sup>4</sup> および R<sup>5</sup> は、H、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルからそれぞれ独立して選択され、任意の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、ハロ

およびオキソから独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され；または、 $R^4$  および  $R^5$  が、それらが結合する炭素とともに、ハロ、オキソ、 $C_{1-4}$  アルキル、 $C_{2-4}$  アルケニル、および  $C_{2-4}$  アルキニルから独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換された3、4、5、または6員の炭素環式環を形成し；

$R^6$  は、5～10員ヘテロアリール、5～10員ヘテロ環、または6～10員アリールであり、5～10員ヘテロアリール、5～10員ヘテロ環、および6～10員アリールは、 $C_{1-6}$  アルキル、 $C_{2-6}$  アルケニル、 $C_{2-6}$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、ヘテロアリール、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、および  $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$  からなる群から独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され；各々の  $C_{1-6}$  アルキル、 $C_{2-6}$  アルケニル、 $C_{2-6}$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、およびヘテロアリールは、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$ 、および  $C_{1-6}$  アルキル（該  $C_{1-6}$  アルキルは、ハロから独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換される）からなる群から独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され；

各々の  $R^b$  は、水素、 $C_{1-6}$  アルキル、 $C_{2-6}$  アルケニル、アリール、および  $C_{2-6}$  アルキニルからなる群から独立して選択され、各々の  $C_{1-6}$  アルキル、 $C_{2-6}$  アルケニル、アリール、および  $C_{2-6}$  アルキニルは、ハロ、 $-N(R^c)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^c)_2$ 、 $-S(O)-N(R^c)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^c)_2$ 、 $-O-R^c$ 、 $-S-R^c$ 、 $-O-C(O)-R^c$ 、 $-C(O)-R^c$ 、 $-C(O)-OR^c$ 、 $-S(O)-R^c$ 、 $-S(O)_2-R^c$ 、 $-N(R^c)-C(O)-R^c$ 、 $-N(R^c)-S(O)-R^c$ 、 $-N(R^c)-C(O)-N(R^c)_2$ 、および  $-N(R^c)-S(O)_2-R^c$  からなる群から独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され；または、2つの  $R^b$  が、それらが結合する窒素とともに、ピロリジノ環、ピペリジノ環、またはピペラジノ環を形成し；

各々の  $R^c$  は、水素、 $C_{1-6}$  アルキル、 $C_{2-6}$  アルケニル、および  $C_{2-6}$  アルキニルからなる群から独立して選択され、各々の  $C_{1-6}$  アルキル、 $C_{2-6}$  アルケニル、および  $C_{2-6}$  アルキニルは、オキソ、ハロ、アミノ、ヒドロキシ、および  $C_{1-6}$  アルコキシからなる群から独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換されるか；または、2つの  $R^c$  が、それらが結合する窒素とともに、オキソ、ハロ、および  $C_{1-3}$  アルキル（該  $C_{1-3}$  アルキルは、オキソおよびハロからなる群から独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換される）からなる群から独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換されたヘテロシクリルを形成し；

但し、

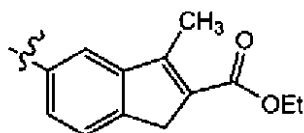
$X$  が  $S(O)_2$  であり；

$R^1$  が、任意選択的に置換されたピペラジン-1-イルであり；

$R^2 \sim R^5$  がそれぞれ H である場合、

$R^6$  は、2,5-ジメトキシフェニルでも、3,4-ジメチルフェニルでも、4-エチルフェニルでも、4-プロモフェニルでも、2,4-ジメチルフェニルでも、4-エトキシフェニルでも、4-クロロ-2-メトキシフェニルでも、4-プロピルフェニルでも、2-(トリフルオロメチル)フェニルでも、2,4,5-トリメチルフェニルでも、3-メチルフェニルでも、2-(メチルカルボニルアミノ)-5-メチルフェニルでも、4-クロロフェニルでも、4-(イソプロピル)フェニルでも、3-クロロ-4-フルオロフ

フェニルでも、4 - シクロヘキシルフェニルでも、4 - (イソブチル)フェニルでも、2 - メチルフェニルでも、4 - アセチルフェニルでも、4 - (tert - ブチル)フェニルでも、4 - (メチルカルボニルアミノ)フェニルでも、2 - フルオロフェニルでも、フェニルでも、3, 5 - ジメチルフェニルでも、4 - メチルフェニルでも、5 - フルオロ - 2 - メチルフェニルでも、4 - フルオロフェニルでも、5, 6, 7, 8 - テトラヒドロナフタレン(naphthalene) - 2 - イルでも、2, 4, 6 - トリメチルフェニルでも、3 - クロロ - 4 - フルオロフェニルでも、4 - (エトキシカルボニルアミノ)フェニルでも、2, 5 - ジフルオロフェニルでも、2 - クロロフェニルでも、3 - クロロフェニルでも、4 - メトキシフェニルでも、2 - メトキシ - 4 - クロロフェニルでも、  
【化82】



でもないことを条件とし；

但し、

XがS(O)<sub>2</sub>であり；

R<sup>1</sup>が4 - ベンジルピペリジノであり；

R<sup>2</sup> ~ R<sup>5</sup>がそれぞれHである場合、

R<sup>6</sup>は4 - メチルフェニルではないことを条件とし、

但し、

XがC(=O)であり；

R<sup>1</sup>が、任意選択的に置換されたピペラジン - 1 - イルであり；

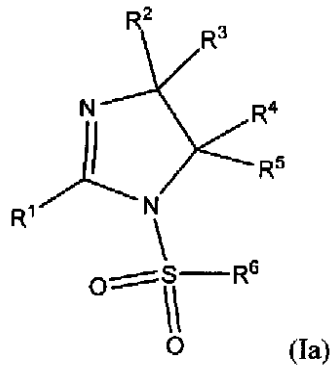
R<sup>2</sup> ~ R<sup>5</sup>がそれぞれHである場合、

R<sup>6</sup>は、2 - メトキシフェニルでも、2 - メチルフェニルでも、2 - クロロフェニルでも、4 - エチルフェニルでも、3, 5 - ジメチルフェニルでも、2, 3 - ジメトキシフェニルでも、4 - メチルフェニルでも、4 - エトキシフェニルでも、3, 4 - ジメチルフェニルでも、2, 3 - ベンゾジオキサゾール - 5 - イルでも、3 - クロロフェニルでも、3 - メチルフェニルでも、4 - メトキシフェニルでも、3, 5 - ジメトキシフェニルでも、2 - フルオロフェニルでも、4 - フルオロフェニルでも、3 - フルオロ - 4 - メチルフェニルでも、2, 3 - ジメトキシフェニルでも、4 - (tert - ブチル)フェニルでも、3, 4, 5 - トリメトキシフェニルでも、2 - プロモフェニルでも、4 - クロロフェニルでも、2 - トリフルオロメチルフェニルでも、フェニルでも、4 - プロモフェニルでも、3, 4 - ジフルオロフェニルでも、2, 6 - ジフルオロフェニルでも、2 - (ジメチルアミノ)フェニルでも、4 - エトキシフェニルでも、3 - フルオロ - 4 - メチルフェニルでも、2, 4 - ジメチルフェニルでも、4 - (トリフルオロメチル)フェニルでも、4 - (ジメチルアミノ)フェニルでも、3 - メトキシフェニルでも、2 - メトキシ - 4 - クロロでも、または3 - (ジメチルアミノ)フェニルでもないことを条件とする)の化合物またはその塩。

(項目2)

式(Ia)：

## 【化 8 3】



の化合物である、項目 1 に記載の化合物またはその塩。

(項目 3)

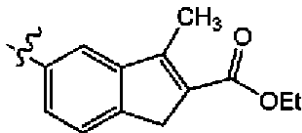
$R^2$  および  $R^3$  はそれぞれ H であるか、または  $R^2$  および  $R^3$  が、それらが結合する炭素とともに、5 員炭素環式環を形成し；

$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれ H である、項目 2 に記載の化合物。

(項目 4)

$R^6$  が任意選択的に置換されたフェニルであるか、または、式：

## 【化 8 4】



を有し；

$R^2 \sim R^5$  がそれぞれ H である場合；

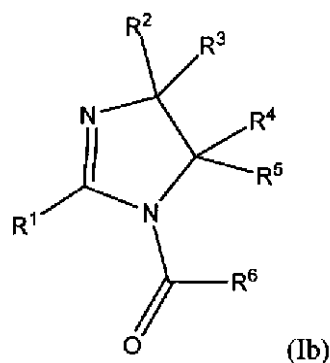
$R^1$  は、4 - ベンジルピペリジノでも、メチル、エチル、3 - クロロフェニル、4 - フルオロフェニル、2 - クロロフェニル、2 - フルオロフェニル、4 - メトキシフェニル、および 2 - メトキシフェニルからなる群から選択される基で 4 位が置換されたピペラジン - 1 - イルでもないことを条件とする、項目 2 に記載の化合物。

(項目 5)

式 (I b)：



## 【化 8 5】



の化合物である、項目 1 に記載の化合物またはその塩。

(項目 6)

$R^2$  および  $R^3$  はそれぞれ H であるか、または  $R^2$  および  $R^3$  が、それらが結合する炭素とともに、5 員炭素環式環を形成し；

$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれ H である、項目 5 に記載の化合物。

(項目 7)

$R^6$  が任意選択的に置換されたフェニルまたは 2, 3 - ベンゾジオキサゾール - 5 - イルであり；

$R^2 \sim R^5$  がそれぞれ H である場合；

$R^1$  は、メチル、エチル、3 - クロロフェニル、2 - フルオロフェニル、3 - クロロフェニル、および 4 - フルオロフェニルからなる群から選択される基で 4 位が置換されたピペラジン - 1 - イルではないことを条件とする、項目 5 に記載の化合物。

(項目 8)

$R^1$  は、任意選択的に置換された N 連結ピペラジニルである、項目 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項目 9)

$R^1$  は、任意選択的に置換された N 連結ピペリジンである、項目 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項目 10)

$R^1$  は、任意選択的に置換された N 連結ジアザビシクロ [ 3 . 2 . 1 ] オクタンである、項目 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項目 11)

$R^1$  はピペラジン - 1 - イルであり、ピペラジン - 1 - イルは、 $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、 $C_{2 \sim 6}$  アルキニル、アリール、および  $C_{3 \sim 8}$  シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意のアリールおよび  $C_{3 \sim 8}$  シクロアルキルは、ハロ、 $C_{1 \sim 4}$  アルキル、 $C_{2 \sim 4}$  アルケニル、および  $C_{2 \sim 4}$  アルキニルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の  $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、および  $C_{2 \sim 6}$  アルキニルは、ハロ、 $C_{1 \sim 4}$  アルコキシ、および  $C_{3 \sim 8}$  シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される、項目 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項目 12)

$R^1$  は、N 連結ピペラジニル、N 連結ピペリジン、および N 連結ジアザビシクロ [ 3 . 2 . 1 ] オクタンからなる群から選択され、 $R^1$  は、 $C_{1 \sim 6}$  アルキル、アリール、および  $C_{3 \sim 8}$  シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意のアリールおよび  $C_{3 \sim 8}$  シクロアルキルは、ハロおよび  $C_{1 \sim 4}$  アルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の  $C_{1 \sim 6}$  ア

ルキルは、ハロ、 $C_1 \sim 4$  アルコキシ、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される、項目 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

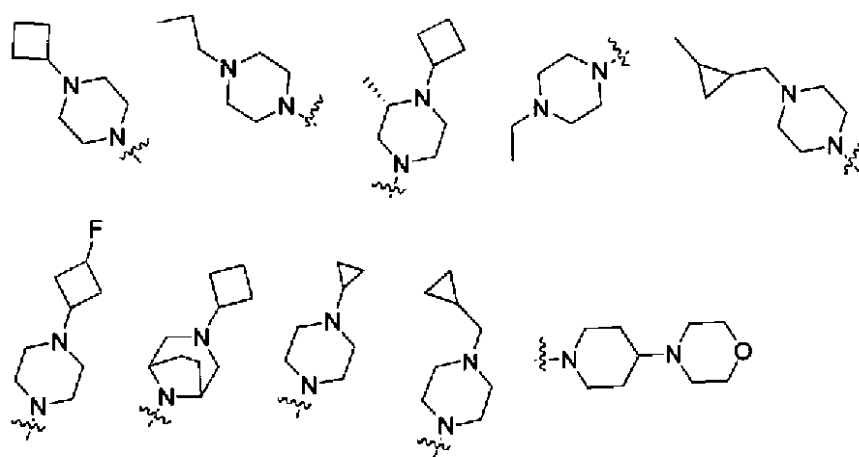
(項目 1 3)

$R^1$  は、 $C_1 \sim 6$  アルキル、アリール、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルから選択される基で 4 位が置換されたピペラジン - 1 - イルであり、任意のアリールおよび  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルは、ハロおよび  $C_1 \sim 4$  アルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の  $C_1 \sim 6$  アルキルは、ハロ、 $C_1 \sim 4$  アルコキシ、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される、項目 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

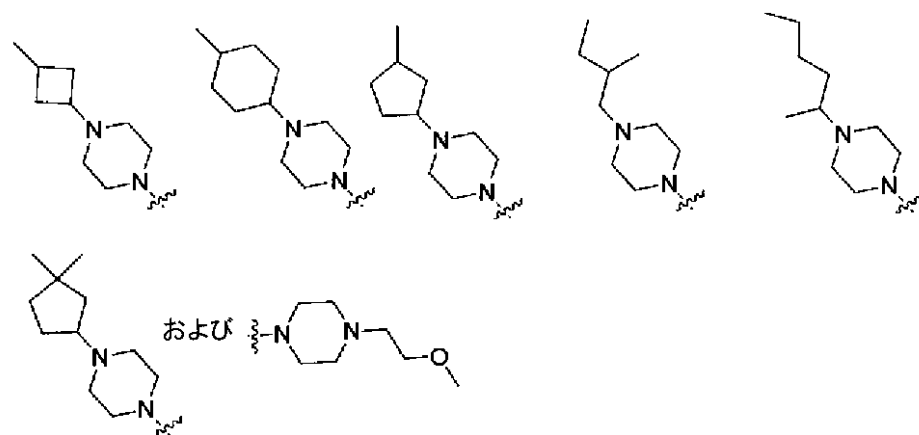
(項目 1 4)

$R^1$  は、

【化 8 6】



【化 8 7】



からなる群から選択される、項目 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項目 1 5)

$R^2$  および  $R^3$  はそれぞれ H であるか、または  $R^2$  および  $R^3$  が、それらが結合する炭素とともに、5 員炭素環式環を形成する、項目 1 ~ 1 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項目 1 6)

$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれ H である、項目 1 ~ 1 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項目 1 7 )

$R^6$  は、 $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、 $C_{2 \sim 6}$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、ヘテロアリール、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、および  $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$  からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される；各々の  $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、 $C_{2 \sim 6}$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、およびヘテロアリールは、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$ 、および  $C_{1 \sim 6}$  アルキル（該  $C_{1 \sim 6}$  アルキルは、ハロから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される）からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される 6 ~ 10 員アリールである、項目 1 ~ 16 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項目 1 8 )

$R^6$  は、 $C_{1 \sim 6}$  アルキル、炭素環、ハロ、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、および  $-N(R^b)-C(O)-R^b$  からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換されたフェニルで置換されたフェニルであり、各々の  $C_{1 \sim 6}$  アルキルおよび炭素環は、ハロからなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される、項目 1 ~ 16 のいずれか 1 項に記載の化合物。

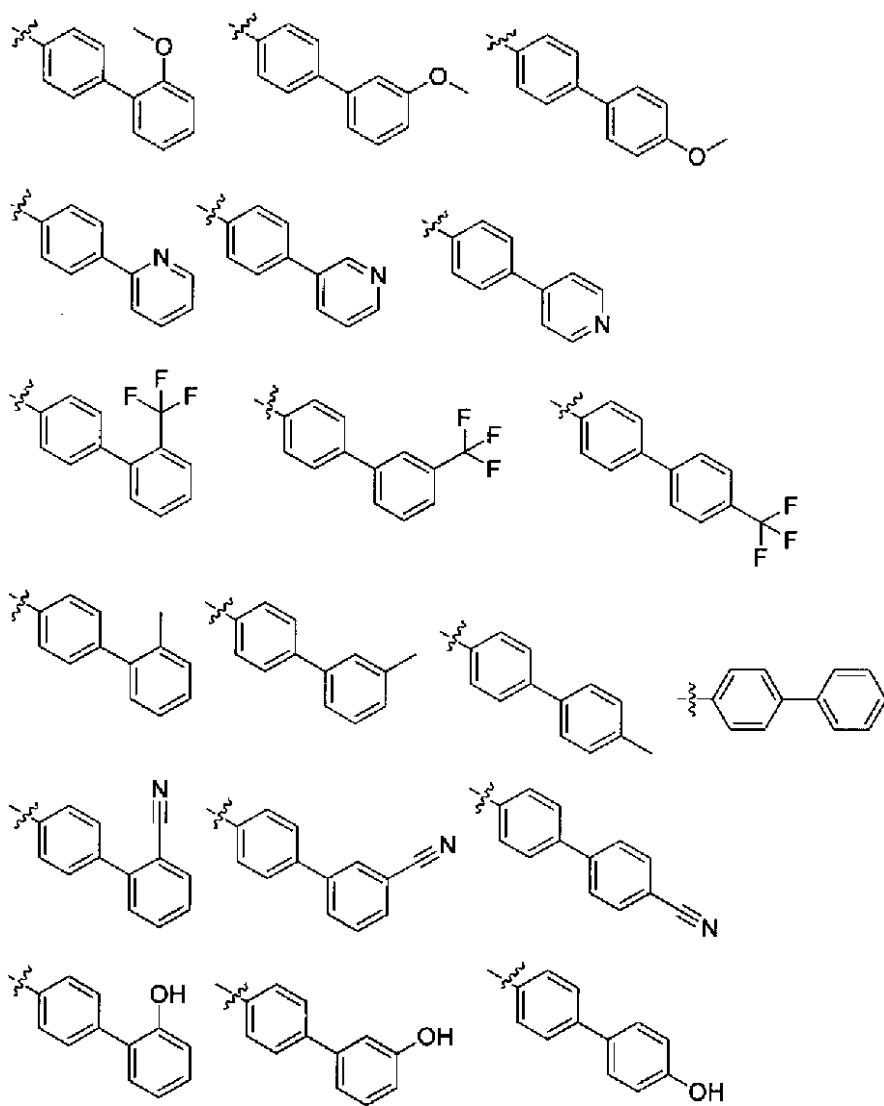
( 項目 1 9 )

$R^6$  は、 $C_{1 \sim 6}$  アルキル、炭素環、ハロ、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、および  $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$  からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換されたフェニルであり、各々の  $C_{1 \sim 6}$  アルキルおよび炭素環は、ハロからなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される、項目 1 ~ 16 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項目 2 0 )

$R^6$  は、

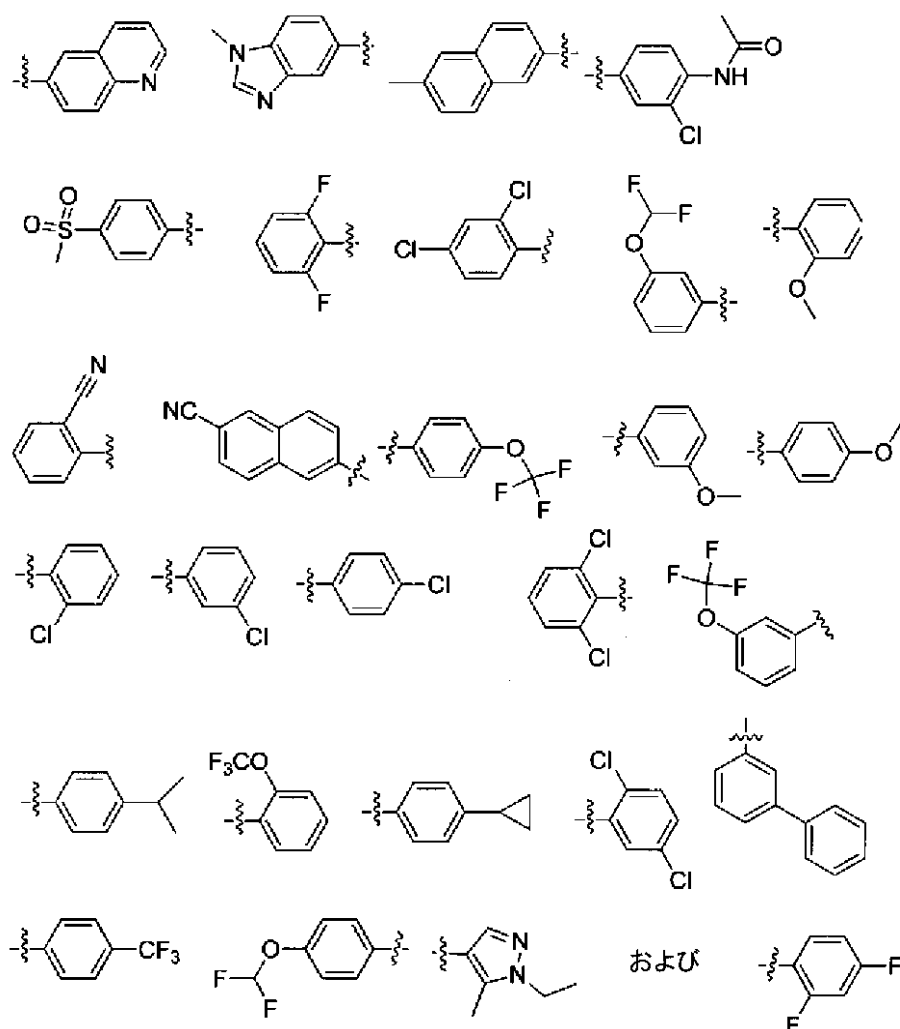
【化 8 8】



The image displays 15 chemical structures of monomers, arranged in a grid-like fashion. Each structure is a potential monomer for polymer synthesis, indicated by wavy lines representing attachment points. The structures include:

- 1. 4-(thiophen-2-yl)phenyl
- 2. 4-(thiophen-2-yl)phenyl
- 3. 4-(naphthalen-1-yl)phenyl
- 4. 4-(2-chlorophenyl)phenyl
- 5. 4-(3-chlorophenyl)phenyl
- 6. 4-(4-chlorophenyl)phenyl
- 7. 4-(2-fluorophenyl)phenyl
- 8. 4-(3-fluorophenyl)phenyl
- 9. 4-(4-fluorophenyl)phenyl
- 10. 4-(1-methyl-1H-imidazol-2-yl)phenyl
- 11. 4-(1-methyl-1H-imidazol-2-yl)phenyl
- 12. 4-(1,2,4-triazin-5-yl)phenyl
- 13. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 14. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 15. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 16. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 17. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 18. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 19. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 20. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 21. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 22. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 23. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 24. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 25. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 26. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 27. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 28. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 29. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 30. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 31. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 32. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 33. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 34. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 35. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 36. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 37. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 38. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 39. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 40. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 41. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 42. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 43. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 44. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 45. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 46. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 47. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 48. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 49. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 50. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 51. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 52. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 53. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 54. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 55. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 56. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 57. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 58. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 59. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 60. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 61. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 62. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 63. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 64. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 65. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 66. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 67. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 68. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 69. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 70. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 71. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 72. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 73. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 74. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 75. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 76. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 77. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 78. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 79. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 80. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 81. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 82. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 83. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 84. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 85. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 86. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 87. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 88. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 89. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 90. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 91. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 92. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 93. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 94. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 95. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 96. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 97. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 98. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 99. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl
- 100. 4-(2,3-dimethyl-1,3-dioxol-5-yl)phenyl

【化 9 0】

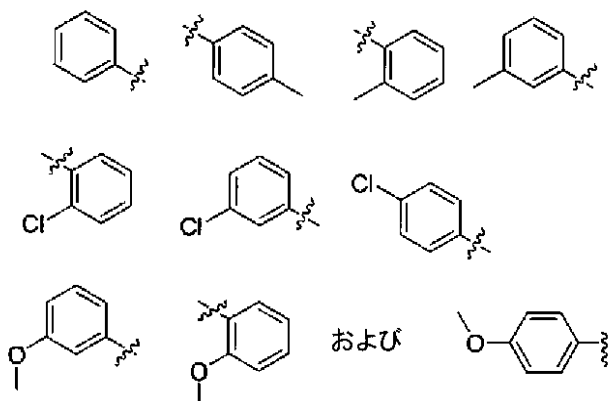


からなる群から選択される、項目 1 ~ 16 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項目 2 1 )

R<sup>6</sup> は、

【化 9 1】



からなる群から選択される、項目 1 ~ 16 のいずれか 1 項に記載の化合物。

## (項目 2 2)

$R^1$  は、N 連結ピペラジニル、N 連結ピペリジン、および N 連結ジアザビシクロ [ 3 . 2 . 1 ] オクタンからなる群から選択され、 $R^1$  は、 $C_{1 \sim 6}$  アルキル、アリール、および  $C_{3 \sim 8}$  シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意のアリールおよび  $C_{3 \sim 8}$  シクロアルキルは、ハロおよび  $C_{1 \sim 4}$  アルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の  $C_{1 \sim 6}$  アルキルは、ハロ、 $C_{1 \sim 4}$  アルコキシ、および  $C_{3 \sim 8}$  シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；

$R^2$  および  $R^3$  は、それぞれ、H であるか、または、 $R^2$  および  $R^3$  が、それらが結合する炭素とともに、5 員炭素環式環を形成し；

$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれ H であり；

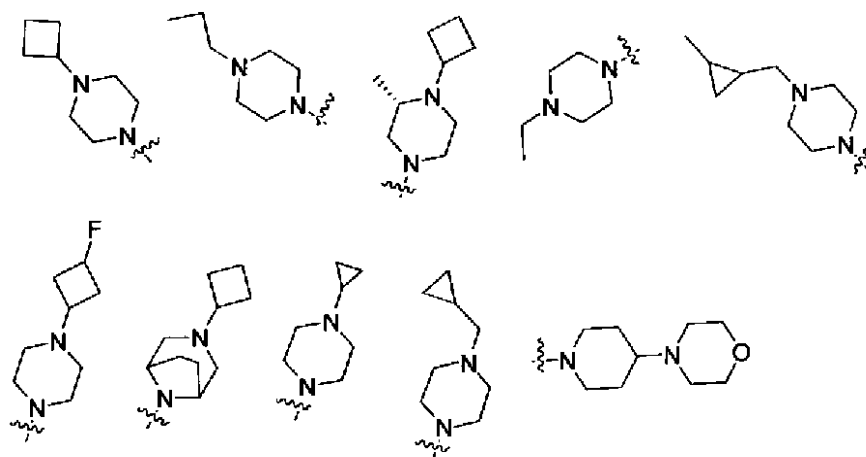
$R^6$  は、 $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、 $C_{2 \sim 6}$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、ヘテロアリール、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、および  $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$  からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；各々の  $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、 $C_{2 \sim 6}$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、およびヘテロアリールは、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$ 、および  $C_{1 \sim 6}$  アルキル (該  $C_{1 \sim 6}$  アルキルは、ハロから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される) からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される 6 ~ 10 員アリールである；

、項目 3 または 4 に記載の化合物。

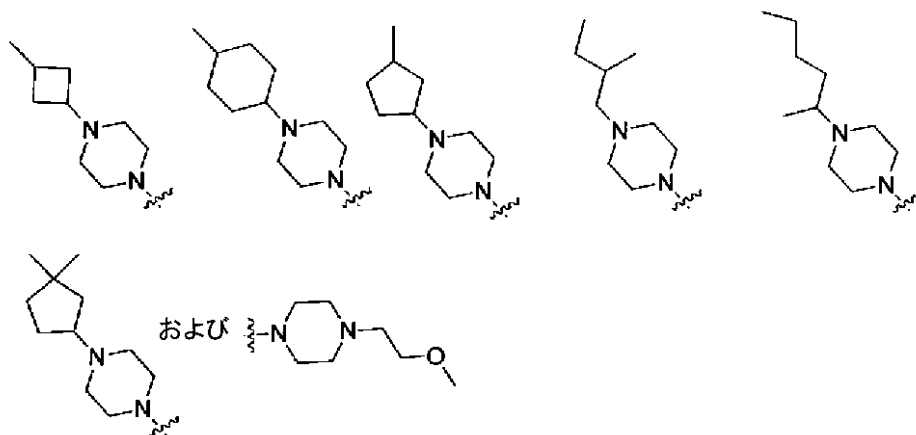
## (項目 2 3)

$R^1$  は、

【化 9 2】



## 【化 9 3】



からなる群から選択され、

$R^2$  および  $R^3$  は、それぞれ、H であるか、または、 $R^2$  および  $R^3$  が、それらが結合する炭素とともに、5 員炭素環式環を形成し；

$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれ H であり；

$R^6$  は、 $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、 $C_{2 \sim 6}$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、ヘテロアリール、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、および  $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$  からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；各々の  $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、 $C_{2 \sim 6}$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、およびヘテロアリールは、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$ 、および  $C_{1 \sim 6}$  アルキル（該  $C_{1 \sim 6}$  アルキルは、ハロから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される）からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される 6 ～ 10 員アリールである；

、項目 3 または 4 に記載の化合物。

（項目 2 4）

$R^1$  は、N 連結ピペラジニル、N 連結ピペリジン、および N 連結ジアザビシクロ [ 3 . 2 . 1 ] オクタンからなる群から選択され、 $R^1$  は、 $C_{1 \sim 6}$  アルキル、アリール、および  $C_{3 \sim 8}$  シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意のアリールおよび  $C_{3 \sim 8}$  シクロアルキルは、ハロおよび  $C_{1 \sim 4}$  アルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の  $C_{1 \sim 6}$  アルキルは、ハロ、 $C_{1 \sim 4}$  アルコキシ、および  $C_{3 \sim 8}$  シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；

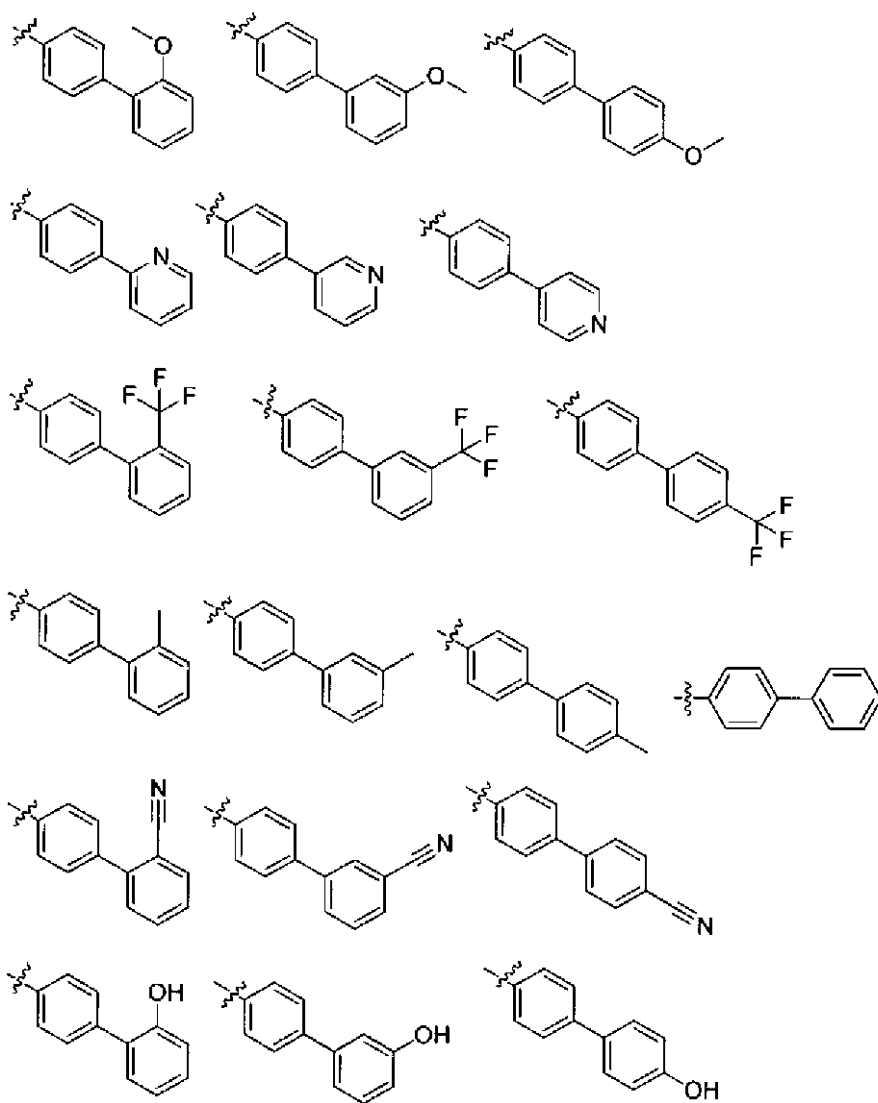
$R^2$  および  $R^3$  は、それぞれ、H であるか、または、 $R^2$  および  $R^3$  が、それらが結合する炭素とともに、5 員炭素環式環を形成し；

$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれ H であり；

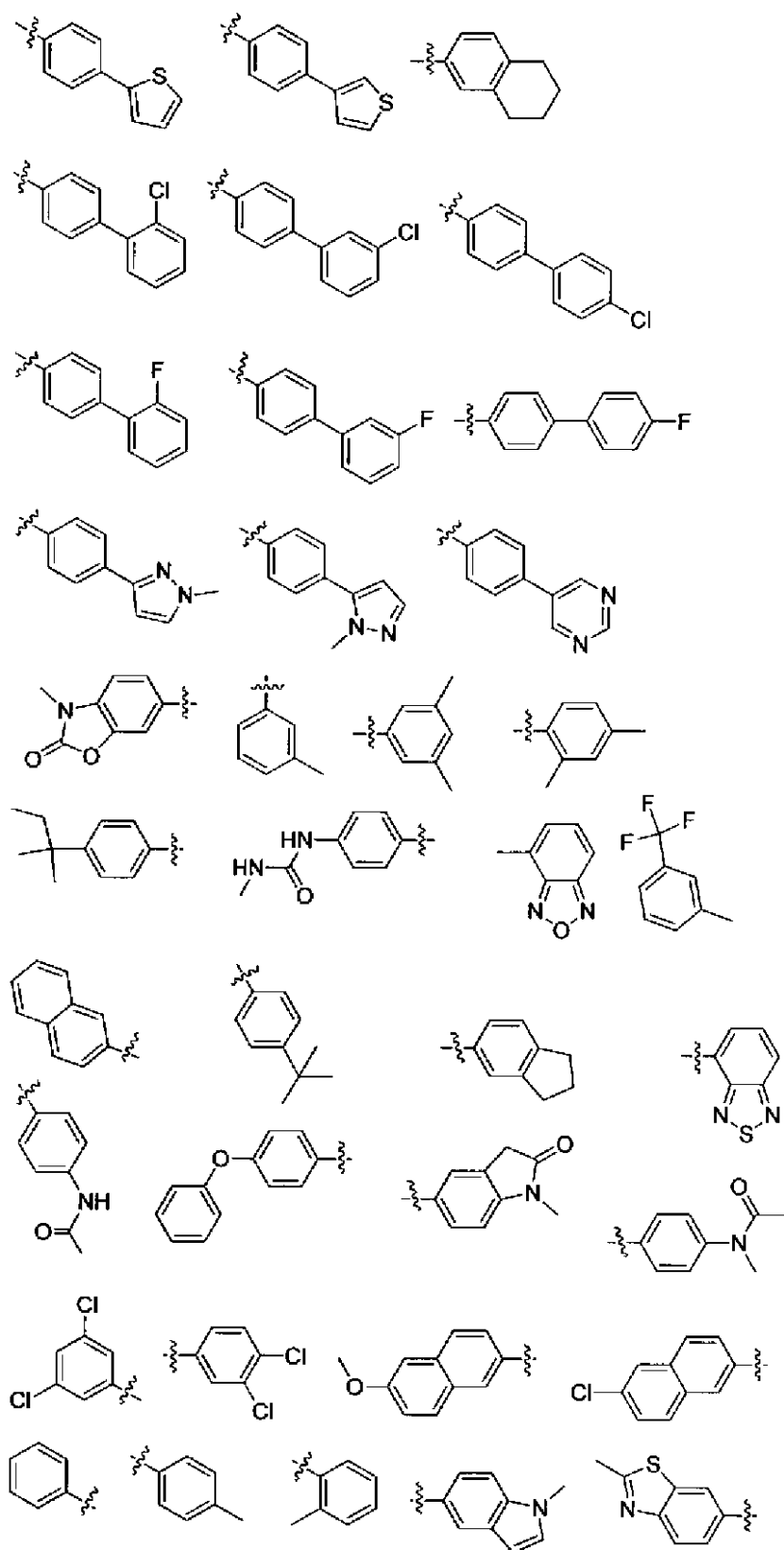
$R^6$  は、



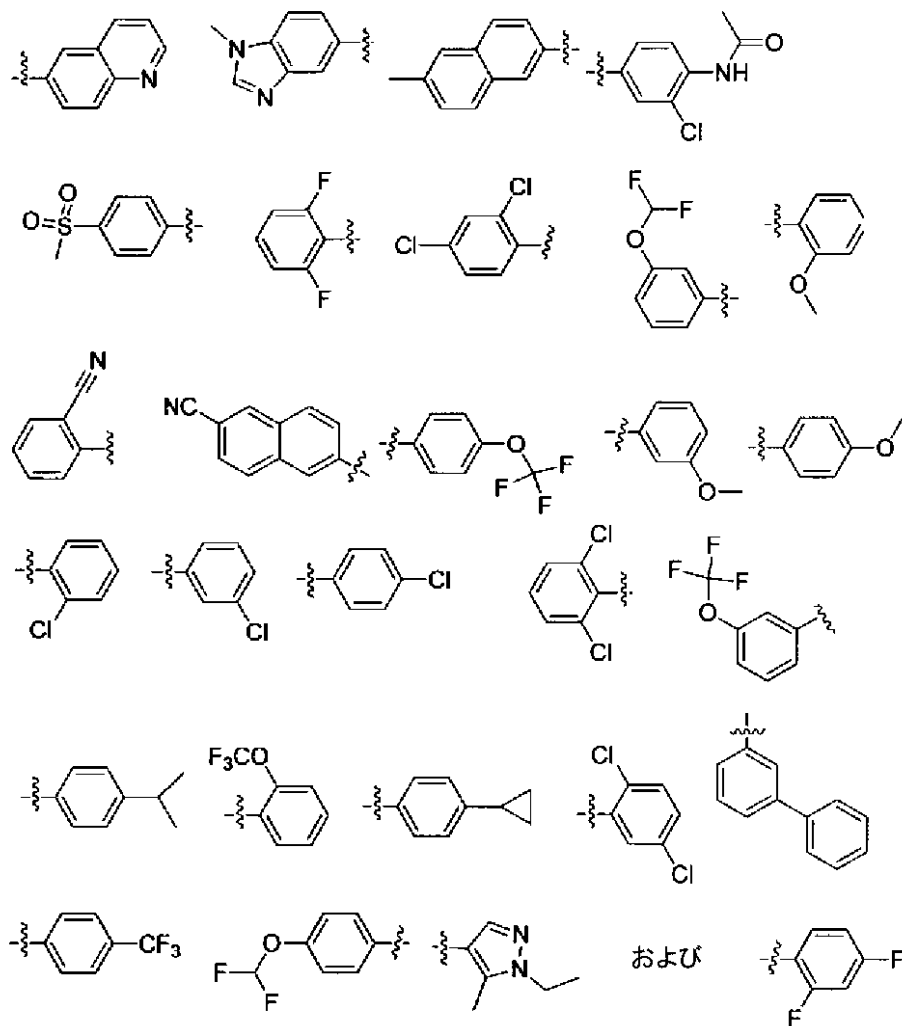
## 【化 9 4】



## 【化 9 5】



## 【化 9 6】

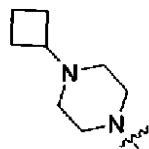


からなる群から選択される、項目 3 または 4 に記載の化合物。

( 項目 2 5 )

R<sup>1</sup> は、

## 【化 9 7】



であり；

R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> は、それぞれ、H であるか、または、R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> が、それらが結合する炭素とともに、5 員炭素環式環を形成し；

R<sup>4</sup> および R<sup>5</sup> はそれぞれ H であり；

R<sup>6</sup> は、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、ハロ、CN、および - O - R<sup>b</sup> からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換されたフェニルであり、各々の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキルは、ハロからなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される、項目 6 または 7 に記載の化合物。

## (項目 26)

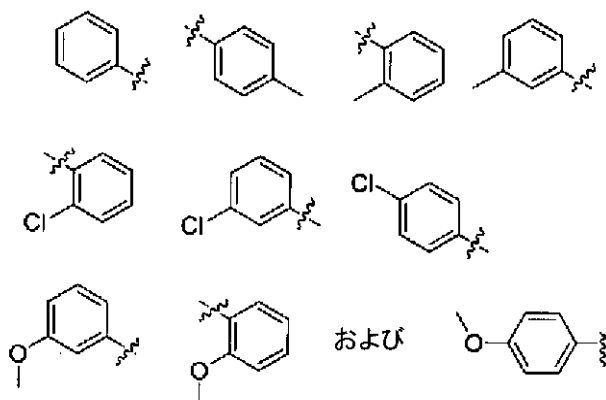
$R^1$  は、 $C_1 \sim 6$  アルキル、アリール、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルから選択される基で4位が置換されたピペラジン-1-イルであり、任意のアリールおよび  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルは、ハロおよび  $C_1 \sim 4$  アルキルから独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の  $C_1 \sim 6$  アルキルは、ハロ、 $C_1 \sim 4$  アルコキシ、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルから独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され；

$R^2$  および  $R^3$  はそれぞれ H であり；

$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれ H であり；

$R^6$  は、

【化 98】



からなる群から選択される、項目 6 または 7 に記載の化合物。

## (項目 27)

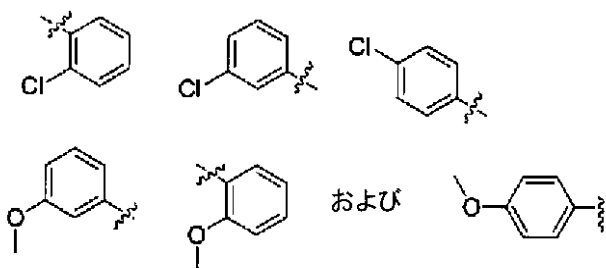
$R^1$  は、 $C_1 \sim 6$  アルキル、アリール、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルから選択される基で4位が置換されたピペラジン-1-イルであり、任意のアリールおよび  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルは、ハロおよび  $C_1 \sim 4$  アルキルから独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の  $C_1 \sim 6$  アルキルは、ハロ、 $C_1 \sim 4$  アルコキシ、および  $C_3 \sim 8$  シクロアルキルから独立して選択される1つまたは複数の基で任意選択的に置換され；

$R^2$  および  $R^3$  はそれぞれ H であり；

$R^4$  および  $R^5$  はそれぞれ H であり；

$R^6$  は、

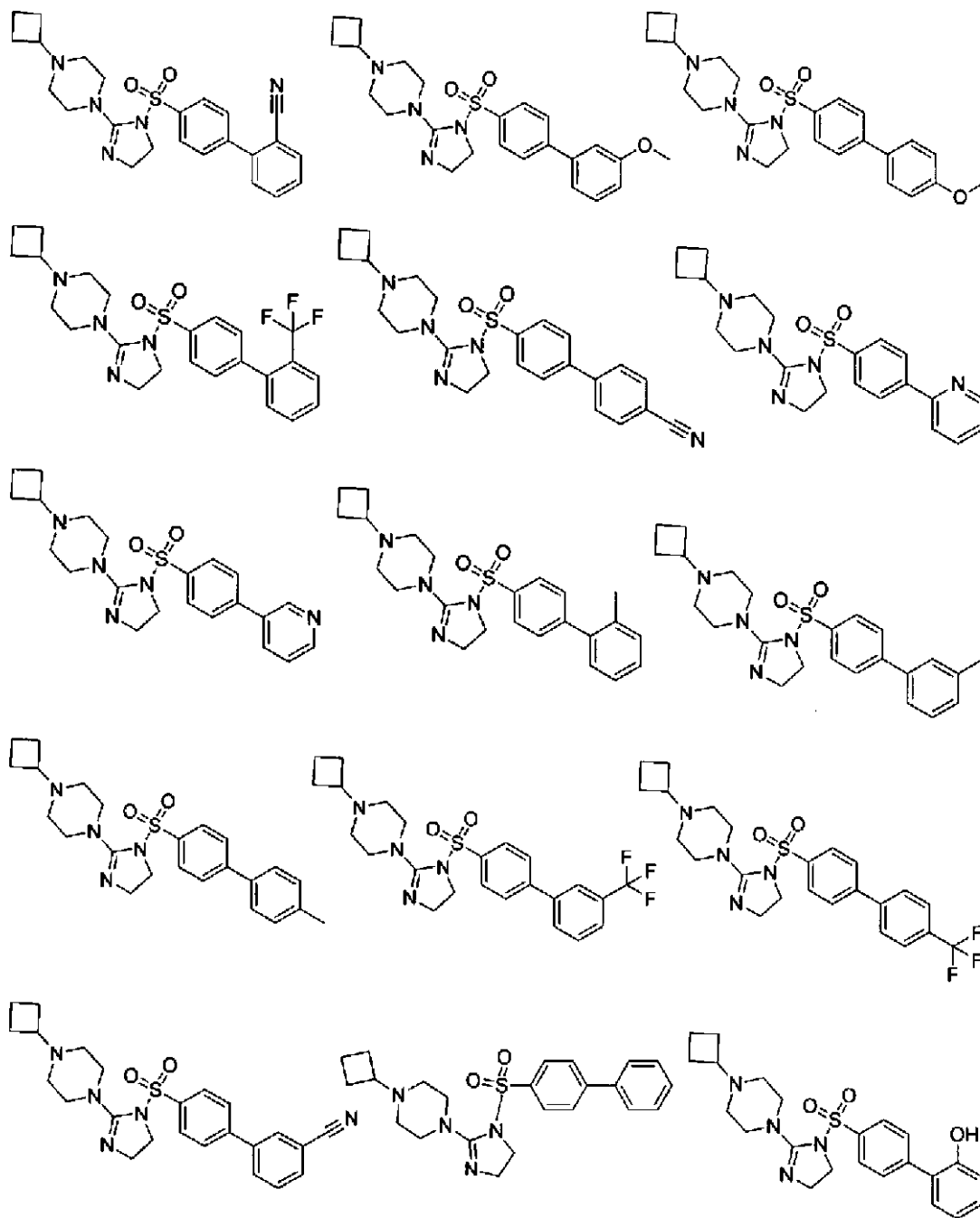
【化 99】



からなる群から選択される、項目 6 または 7 に記載の化合物。

## (項目 28)

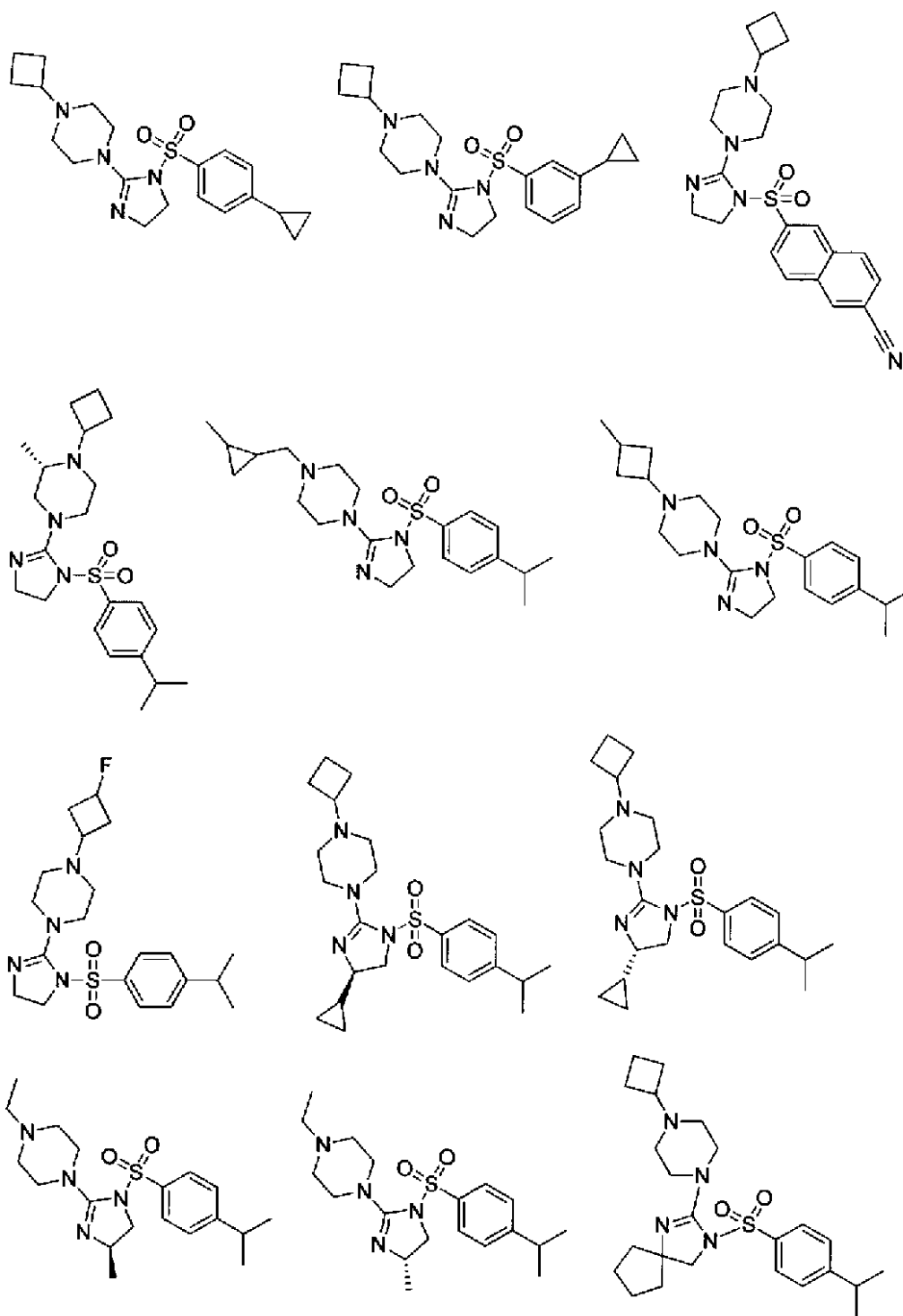
【化 1 0 0】



Chemical structures of 15 compounds (1a-1o) are shown, all featuring a 1-cyclobutyl-4,5,6,7-tetrahydropyrimidin-2(1H)-one core. The substituents are as follows:

- 1a: 3-hydroxyphenyl
- 1b: 4-hydroxyphenyl
- 1c: 4-pyridyl
- 1d: 2-thienyl
- 1e: 3-thienyl
- 1f: 2-chlorophenyl
- 1g: 3-chlorophenyl
- 1h: 4-chlorophenyl
- 1i: 2-methoxyphenyl
- 1j: 2-fluorophenyl
- 1k: 3-fluorophenyl
- 1l: 4-fluorophenyl
- 1m: 1-methyl-2-methylimidazol-5-yl
- 1n: 1-methyl-2-methylimidazol-4-yl
- 1o: 4-pyridyl

【化 1 0 2】

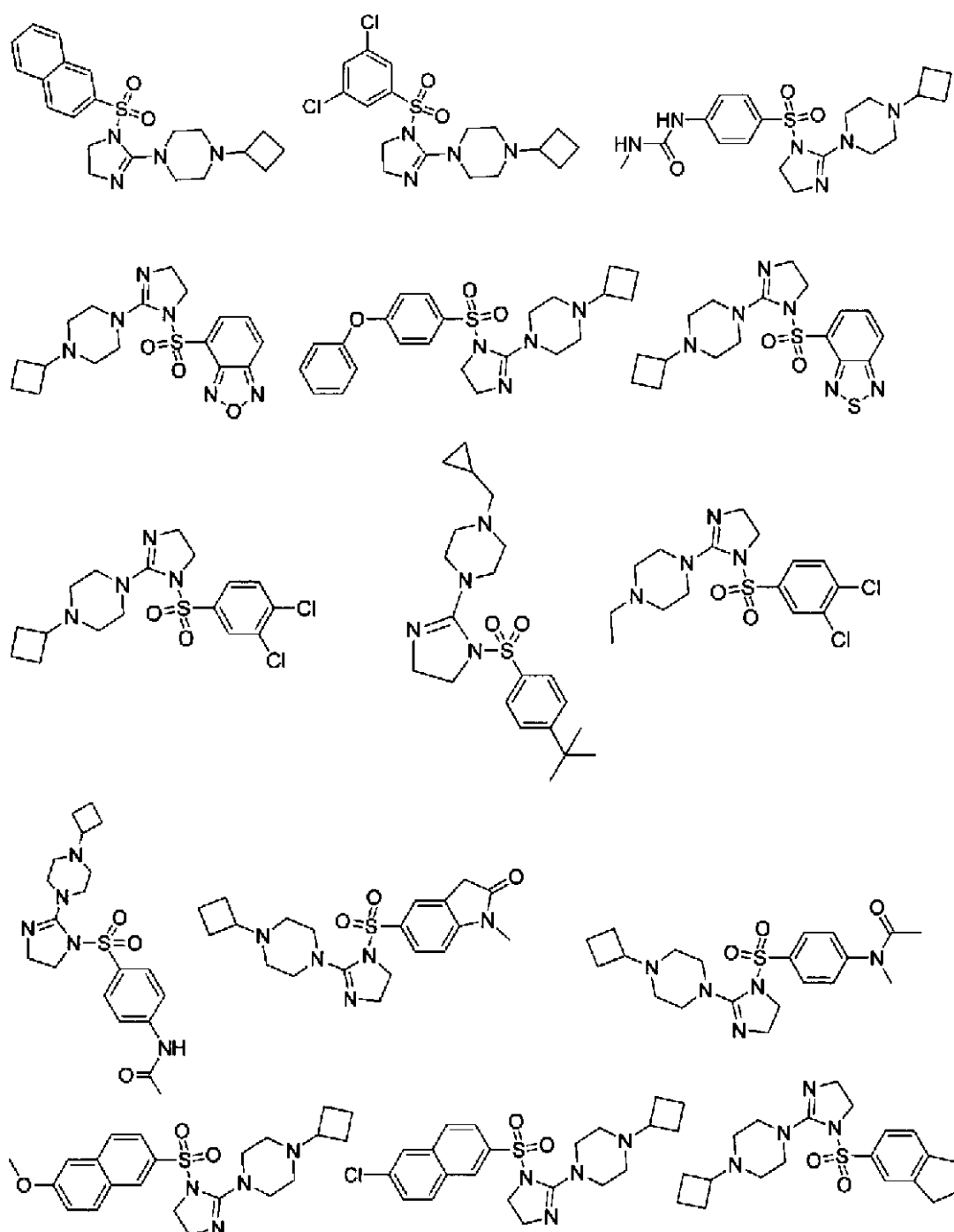


The image displays 15 chemical structures, each featuring a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) attached to a benzene ring. The structures are arranged in a grid-like pattern, with some structures having additional substituents on the benzene ring or the sulfonamide group.

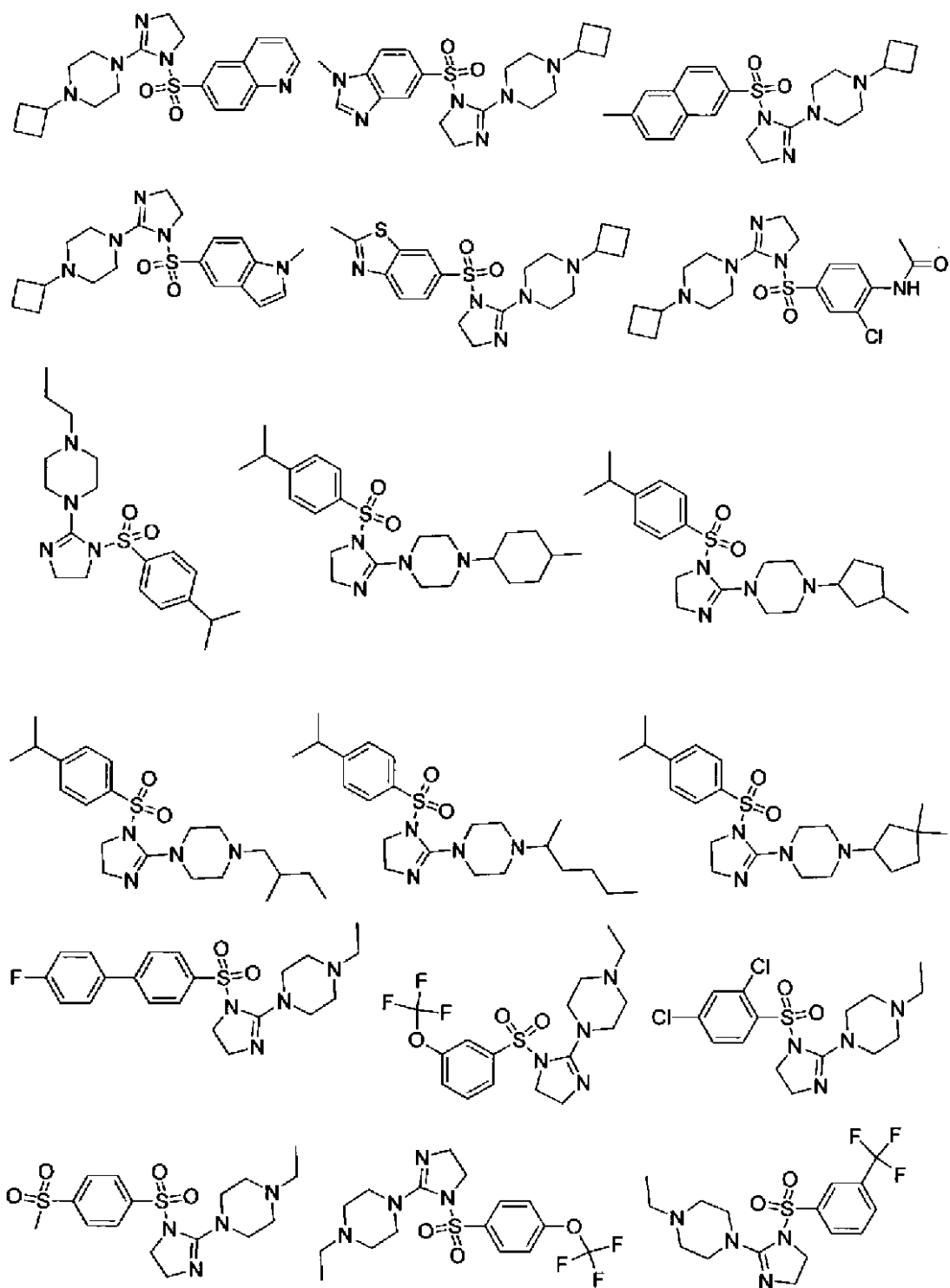
- Structure 1 (top left): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.
- Structure 2 (top middle): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.
- Structure 3 (top right): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.
- Structure 4 (middle left): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.
- Structure 5 (middle middle): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.
- Structure 6 (middle right): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.
- Structure 7 (bottom left): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.
- Structure 8 (bottom middle): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.
- Structure 9 (bottom right): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.
- Structure 10 (bottom left): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.
- Structure 11 (bottom middle): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.
- Structure 12 (bottom right): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.
- Structure 13 (bottom left): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.
- Structure 14 (bottom middle): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.
- Structure 15 (bottom right): A benzene ring with a sulfonamide group (SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>) and a 4-isopropylphenyl group.



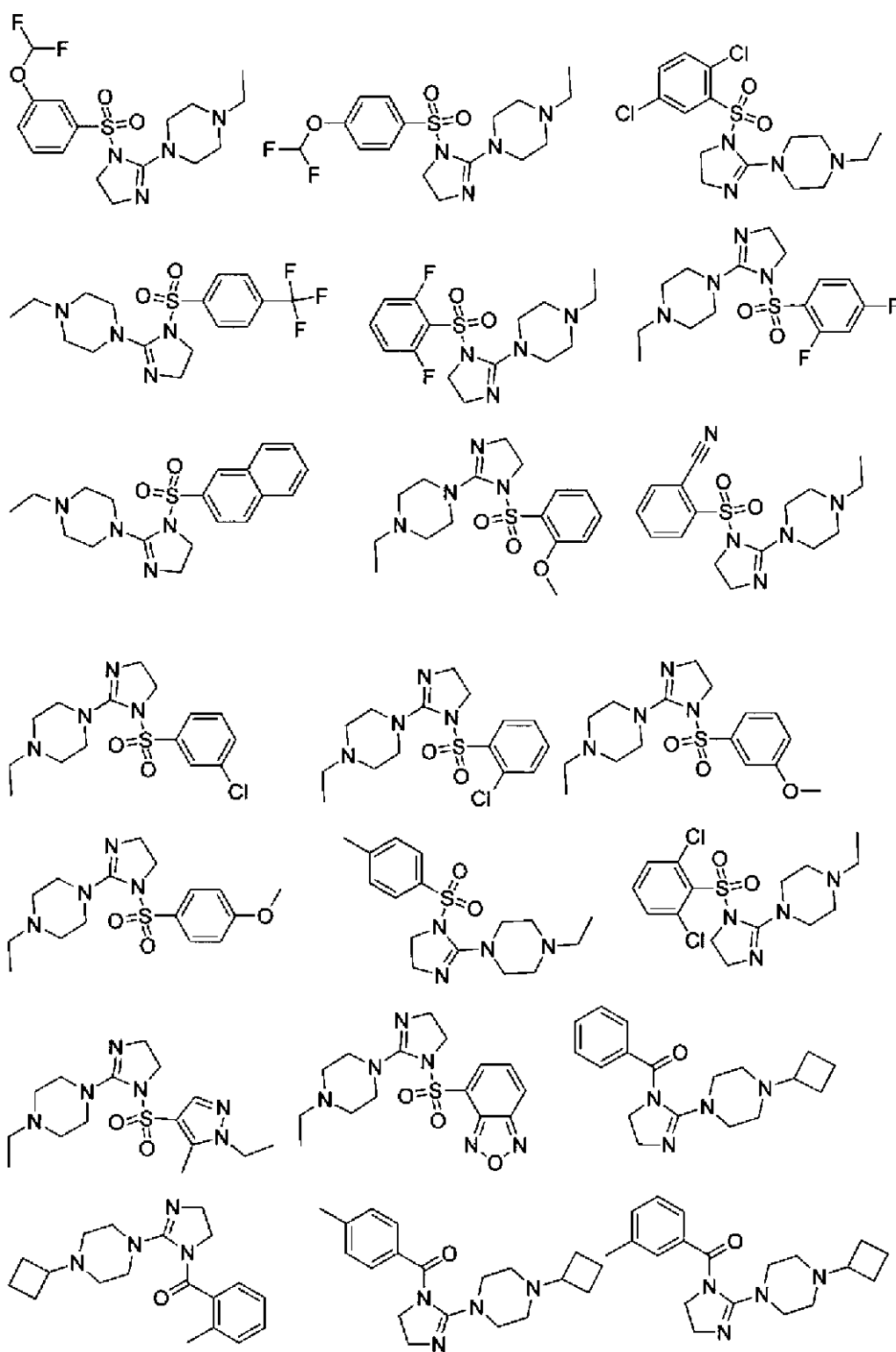
【化 1 0 4】



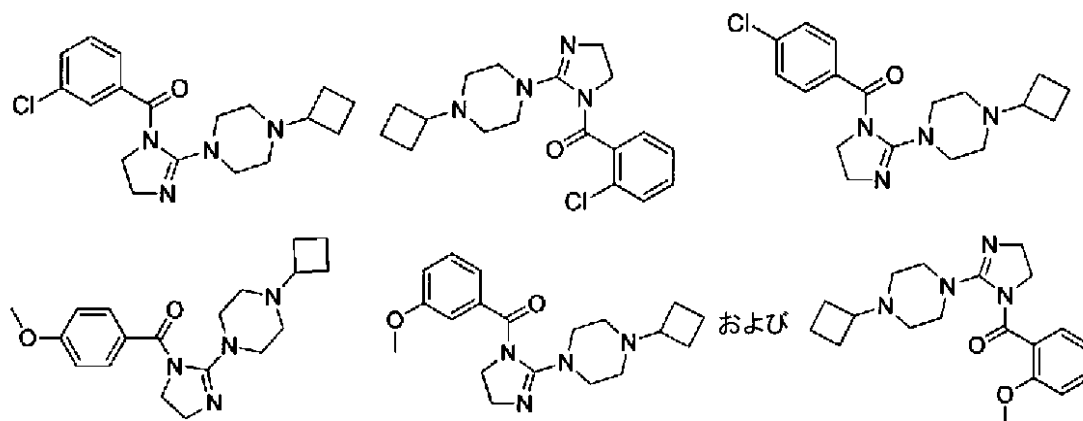
【化 1 0 5】



【化 1 0 6】



## 【化 1 0 7】



ならびにその塩から選択される、項目 1 に記載の化合物。

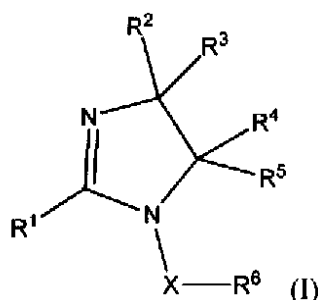
( 項目 2 9 )

項目 1 ~ 2 8 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩、および薬学的に許容され得るアジュバント、担体、またはビヒクルを含む組成物。

( 項目 3 0 )

癌の処置を必要とする哺乳動物において癌を処置する方法であって、有効量の項目 1 ~ 2 8 のいずれか 1 項に記載の化合物もしくはその薬学的に許容され得る塩；または式 ( I )

【化 1 0 8】



( 式中、

X は C ( = O ) または S ( O )<sub>2</sub> であり；

R<sup>1</sup> は、N 連結ピペラジニル、N 連結ピペリジン、および N 連結ジアザビシクロ [ 3 . 2 . 1 ] オクタンからなる群から選択され、R<sup>1</sup> は、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、アリール、3 ~ 10 員ヘテロ環、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意のアリール、3 ~ 10 員ヘテロ環、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、ハロ、C<sub>1</sub> ~ 4 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 4 アルケニル、および C<sub>2</sub> ~ 4 アルキニルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され、任意の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、および C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニルは、ハロ、C<sub>1</sub> ~ 4 アルコキシ、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキル ( 該 C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルは、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキルで任意選択的に置換される ) から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；

R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> は、H、C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、および C<sub>3</sub> ~ 8 シクロアルキルからそれぞれ独立して選択され、任意の C<sub>1</sub> ~ 6 アルキ

ル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、 $C_{2 \sim 6}$  アルキニル、および  $C_{3 \sim 8}$  シクロアルキルは、ハロおよびオキソから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；または、 $R^2$  および  $R^3$  が、それらが結合する炭素とともに、ハロ、オキソ、 $C_{1 \sim 4}$  アルキル、 $C_{2 \sim 4}$  アルケニル、および  $C_{2 \sim 4}$  アルキニルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換された 3、4、5、または 6 員の炭素環式環を形成し；

$R^4$  および  $R^5$  は、H、 $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、 $C_{2 \sim 6}$  アルキニル、および  $C_{3 \sim 8}$  シクロアルキルからそれぞれ独立して選択され、任意の  $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、 $C_{2 \sim 6}$  アルキニル、および  $C_{3 \sim 8}$  シクロアルキルは、ハロおよびオキソから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；または、 $R^4$  および  $R^5$  が、それらが結合する炭素とともに、ハロ、オキソ、 $C_{1 \sim 4}$  アルキル、 $C_{2 \sim 4}$  アルケニル、および  $C_{2 \sim 4}$  アルキニルから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換された 3、4、5、または 6 員の炭素環式環を形成し；

$R^6$  は、5 ~ 10 員ヘテロアリール、5 ~ 10 員ヘテロ環、または 6 ~ 10 員アリールであり、5 ~ 10 員ヘテロアリール、5 ~ 10 員ヘテロ環、および 6 ~ 10 員アリールは、 $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、 $C_{2 \sim 6}$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、ヘテロアリール、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、および  $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$  からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；各々の  $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、 $C_{2 \sim 6}$  アルキニル、炭素環、ヘテロ環、アリール、およびヘテロアリールは、ハロ、 $-NO_2$ 、 $-N(R^b)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)-N(R^b)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^b)_2$ 、 $-O-R^b$ 、 $-S-R^b$ 、 $-O-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-R^b$ 、 $-C(O)-OR^b$ 、 $-S(O)-R^b$ 、 $-S(O)_2-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-S(O)-R^b$ 、 $-N(R^b)-C(O)-N(R^b)_2$ 、 $-N(R^b)-S(O)_2-R^b$ 、および  $C_{1 \sim 6}$  アルキル（該  $C_{1 \sim 6}$  アルキルは、ハロから独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される）からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；

各々の  $R^b$  は、水素、 $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、アリール、および  $C_{2 \sim 6}$  アルキニルからなる群から独立して選択され、各々の  $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、アリール、および  $C_{2 \sim 6}$  アルキニルは、ハロ、 $-N(R^c)_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)-N(R^c)_2$ 、 $-S(O)-N(R^c)_2$ 、 $-S(O)_2-N(R^c)_2$ 、 $-O-R^c$ 、 $-S-R^c$ 、 $-O-C(O)-R^c$ 、 $-C(O)-R^c$ 、 $-C(O)-OR^c$ 、 $-S(O)-R^c$ 、 $-S(O)_2-R^c$ 、 $-N(R^c)-C(O)-R^c$ 、 $-N(R^c)-S(O)-R^c$ 、 $-N(R^c)-C(O)-N(R^c)_2$ 、および  $-N(R^c)-S(O)_2-R^c$  からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換され；または、2 つの  $R^b$  が、それらが結合する窒素とともに、ピロリジノ環、ピペリジノ環、またはピペラジノ環を形成し；

各々の  $R^c$  は、水素、 $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、および  $C_{2 \sim 6}$  アルキニルからなる群から独立して選択され、各々の  $C_{1 \sim 6}$  アルキル、 $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、および  $C_{2 \sim 6}$  アルキニルは、オキソ、ハロ、アミノ、ヒドロキシ、および  $C_{1 \sim 6}$  アルコキシからなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換されるか；または、2 つの  $R^c$  が、それらが結合する窒素とともに、オキソ、ハロ、および  $C_{1 \sim 3}$  アルキル（該  $C_{1 \sim 3}$  アルキルは、オキソおよびハロからなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換される）からなる群から独立して選択される 1 つまたは複数の基で任意選択的に置換されたヘテロシクリルを形成する）の化合物もしくはその薬学的に許容され得る塩を前記哺乳動物に投与する工程を含む、方法。

（項目 31）

前記癌が癌幹細胞 / 前駆細胞を含む、項目 3 0 に記載の方法。

( 項目 3 2 )

癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の分化の誘導を必要とする哺乳動物において癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の分化を誘導する方法であって、有効量の項目 1 ~ 2 8 および項目 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を前記哺乳動物に投与することを含む、方法。

( 項目 3 3 )

癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の活性の低下を必要とする哺乳動物において癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の活性を低下させる方法であって、有効量の項目 1 ~ 2 8 および項目 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を前記哺乳動物に投与することを含む、方法。

( 項目 3 4 )

癌幹細胞 / 前駆細胞の枯渇を必要とする哺乳動物において癌幹細胞 / 前駆細胞を枯渇させる方法であって、有効量の項目 1 ~ 2 8 および項目 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を前記哺乳動物に投与することを含む、方法。

( 項目 3 5 )

癌発生の減少を必要とする哺乳動物において癌発生を減少させる方法であって、有効量の項目 1 ~ 2 8 および項目 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を前記哺乳動物に投与することを含む、方法。

( 項目 3 6 )

前記癌が、肺癌、白血病、またはリンパ腫である、項目 3 0 ~ 3 5 のいずれか 1 項に記載の方法。

( 項目 3 7 )

医学療法における使用のための、項目 1 ~ 2 8 および 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

( 項目 3 8 )

癌の治療的処置または予防的処置のための、項目 1 ~ 2 8 および 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

( 項目 3 9 )

前記癌が癌幹細胞 / 前駆細胞を含む、項目 3 8 に記載の化合物。

( 項目 4 0 )

癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の分化を誘導するための、項目 1 ~ 2 8 および 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

( 項目 4 1 )

癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の活性を低下させるための、項目 1 ~ 2 8 および 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

( 項目 4 2 )

癌幹細胞 / 前駆細胞を枯渇させるための、項目 1 ~ 2 8 および 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

( 項目 4 3 )

癌発生を減少させるための、項目 1 ~ 2 8 および 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

( 項目 4 4 )

前記癌が、肺癌、白血病、またはリンパ腫である、項目 3 8 ~ 4 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項目 4 5 )

哺乳動物における癌を処置するための医薬を調製するための、項目 1 ~ 2 8 および項目 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩の使用。

( 項目 4 6 )

前記癌が癌幹細胞 / 前駆細胞を含む、項目 4 5 に記載の使用。

( 項目 4 7 )

哺乳動物における癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の分化を誘導するための医薬を調製するための、項目 1 ~ 2 8 および項目 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩の使用。

( 項目 4 8 )

哺乳動物における癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の活性を低下させるための医薬を調製するための、項目 1 ~ 2 8 および項目 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩の使用。

( 項目 4 9 )

哺乳動物における癌幹細胞 / 前駆細胞を枯渇させるための医薬を調製するための、項目 1 ~ 2 8 および項目 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩の使用。

( 項目 5 0 )

哺乳動物における癌発生を減少させるための医薬を調製するための、項目 1 ~ 2 8 および項目 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩の使用。

( 項目 5 1 )

前記癌が、肺癌、白血病、またはリンパ腫である、項目 4 5 ~ 5 0 のいずれか 1 項に記載の使用。

( 項目 5 2 )

癌の処置を必要とする個体において癌を処置する方法であって、有効量の K D M 2 インヒビターを前記個体に投与することを含む、方法。

( 項目 5 3 )

前記癌が癌幹細胞 / 前駆細胞を含む、項目 5 2 に記載の方法。

( 項目 5 4 )

前記 K D M 2 インヒビターが、前記個体において癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の分化を誘導し、癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の活性を低下させ、そして / または癌幹細胞 / 前駆細胞集団を枯渇させるのに有効である、項目 5 2 または 5 3 に記載の方法。

( 項目 5 5 )

前記 K D M 2 インヒビターが、前記個体における癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の N o t c h シグナル伝達を低下させるのに有効である、項目 5 2 ~ 5 4 のいずれか 1 項に記載の方法。

( 項目 5 6 )

癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の分化の誘導を必要とする個体において癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の分化を誘導する方法であって、有効量の K D M 2 インヒビターを前記個体に投与することを含む、方法。

( 項目 5 7 )

癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の活性の低下を必要とする個体において癌幹細胞 / 前駆細胞 ( 複数可 ) の活性を低下させる方法であって、有効量の K D M 2 インヒビターを前記個体に投与することを含む、方法。

( 項目 5 8 )

癌幹細胞 / 前駆細胞集団の枯渇を必要とする個体において癌幹細胞 / 前駆細胞集団を枯渇させる方法であって、有効量の K D M 2 インヒビターを前記個体に投与することを含む、方法。

( 項目 5 9 )

癌発生の減少を必要とする個体において癌発生を減少させる方法であって、有効量の K D M 2 インヒビターを前記個体に投与することを含む、方法。

( 項目 6 0 )

前記癌が、肺癌、白血病 ( 例えば、A M L、A L L、M L L )、またはリンパ腫である、項目 5 2 ~ 5 9 のいずれか 1 項に記載の方法。

( 項目 6 1 )

前記インヒビターがKDM2Bインヒビターである、項目52～60のいずれか1項に記載の方法。

(項目62)

前記KDM2インヒビターが、KDM2に特異的に結合し、KDM2デメチラーゼ活性を阻害する、項目52～61のいずれか1項に記載の方法。