

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6360878号
(P6360878)

(45) 発行日 平成30年7月18日 (2018. 7. 18)

(24) 登録日 平成30年6月29日 (2018. 6. 29)

(51) Int. Cl.

F I

C O 7 D 241/42 (2006. 01)

C O 7 D 241/42 C S P

C O 7 D 271/12 (2006. 01)

C O 7 D 271/12

C O 7 D 401/12 (2006. 01)

C O 7 D 401/12

C O 7 D 401/14 (2006. 01)

C O 7 D 401/14

C O 7 D 403/12 (2006. 01)

C O 7 D 403/12

請求項の数 85 (全 407 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2016-501636 (P2016-501636)
 (86) (22) 出願日 平成26年3月12日 (2014. 3. 12)
 (65) 公表番号 特表2016-516706 (P2016-516706A)
 (43) 公表日 平成28年6月9日 (2016. 6. 9)
 (86) 国際出願番号 PCT/US2014/024767
 (87) 国際公開番号 W02014/159690
 (87) 国際公開日 平成26年10月2日 (2014. 10. 2)
 審査請求日 平成29年3月10日 (2017. 3. 10)
 (31) 優先権主張番号 61/777, 816
 (32) 優先日 平成25年3月12日 (2013. 3. 12)
 (33) 優先権主張国 米国 (US)

(73) 特許権者 598032106
 バークテックス ファーマシューティカルズ
 インコーポレイテッド
 VERTEX PHARMACEUTICALS INCORPORATED
 アメリカ合衆国 マサチューセッツ 02
 210, ボストン, ノーザン アベニ
 ュー 50
 (74) 代理人 100078282
 弁理士 山本 秀策
 (74) 代理人 100113413
 弁理士 森下 夏樹

最終頁に続く

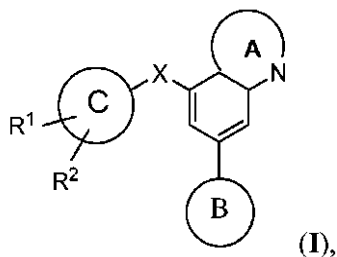
(54) 【発明の名称】 DNA-PK阻害剤

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

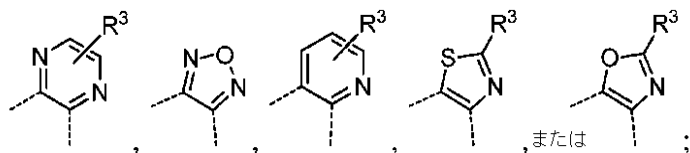
式：

【化 1 0 1】



を有する化合物、または薬学的に受容可能なその塩
 (式中、
 環 A は、

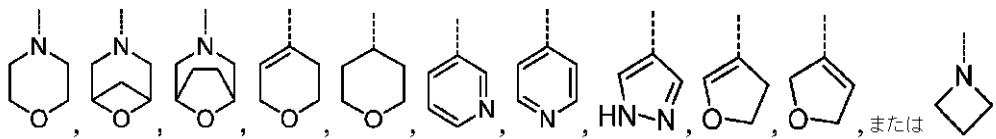
【化 102】



であり；

環 B は、

【化 103】



であり；

環 B は、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの OH、または最大 2 個までの C_{1-4} アルキル（これは、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの OH、または最大 2 個までの OC_{1-2} アルキル基で任意選択で置換されている）で任意選択で置換されており、

環 C は、シクロヘキサンまたはシクロブタン環であり；

X は、 $-NH-$ 、 $-O-$ 、または $-OC_{1-4}$ アルキル - であり；

R^1 および R^2 のそれぞれは、独立に、水素、 $-C(O)NHR^4$ 、 $-C(O)OR^4$ 、 $-NHC(O)R^4$ 、 $-NHC(O)OR^4$ 、 $-NHC(O)NHR^4$ 、 $-NHS(O)_2R^4$ 、 $-C_{0-4}$ アルキル - NHR^4 、または $-OR^4$ であり、ここでは、 R^1 および R^2 は、同時に水素ではあり得ず、かつ、 R^1 および R^2 および介在する炭素原子は、ジオキサンまたはジオキソラン環を形成することができ；

R^3 は、水素、 $-C_{1-4}$ アルキル、フルオロ、クロロ、 $-OC_{1-2}$ アルキル、 $-C(O)H$ 、 $-C(O)OH$ 、 $-C(O)OC_{1-2}$ アルキル、 $-CN$ 、 $-C(O)NHC_{1-2}$ アルキル、または $-C(O)NH_2$ であり、ここでは、該 R^3 アルキルのそれぞれは、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの OH、または最大 2 個までの OC_{1-2} アルキル基で任意選択で置換されており；

R^4 は、水素、 C_{1-4} アルキル、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-5} シクロアルキル、フェニル、5 ~ 10 員の単環または二環のヘテロアリール環（ピロール、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、ピリジン、ピリミジン、ピリミジノン、ピラジン、ピリダジン、およびキノリンから選択される）、または 4 ~ 10 員の単環または二環のヘテロシクリル環（オキセタン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロピラン、ジヒドロイソオキサゾール、ピリミジン - 2, 4 (1H, 3H) - ジオン、ジヒドロフロピリミジン、ジヒドロピラノピリミジン、ジヒドロピロピリミジン、テトラヒドロプテリジン、およびテトラヒドロピリドピリミジンから選択される）であり、ここでは、該 R^4 基のそれぞれは、最大 4 個までの Br、Cl、F、または C_{1-4} アルキル、最大 3 個までの、 CN 、 NO_2 、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-6} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - $O - C_{1-4}$ アルキル、 C_{0-4} アルキル - $O - C_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1-4}$ アルキル) $_2$ 、 $C(O)NH(C_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル)、 CH_2OR^5 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)N(R^5)_2$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)OR^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $NHC(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $N(R^5)_2$ 、複素環系（オキセタン、アゼ

10

20

30

40

50

チジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、およびピペラジンから選択される)、ヘテロアリール環系(フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、およびテトラゾールから選択される)あるいは最大2個までのOR⁵で任意選択で置換され、ここでは、該任意選択のR⁴置換基のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までのC₁~₄アルキル基、最大2個までのOH基、最大2個までのOC₁~₄アルキル基、最大2個までのSC₁~₄アルキル基、C(O)C₁~₄アルキル、C(O)OC₁~₄アルキル、またはC(O)OC₀~₄アルキル-C₃~₅シクロアルキルで任意選択で置換されており;および

各R⁵は、独立に、水素、C₁~₄アルキル、5~6員のヘテロアリール(イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、およびピリミジンから選択される)、4~6員のヘテロシクリル(オキセタン、テトラヒドロフラン、およびテトラヒドロピランから選択される)であり、かつ各R⁵基は、クロロ、最大3個までのフッ素原子、最大2個までのC₁~₂アルキル、CH₂OH、CN、最大2個までのOH、最大2個までのOC₁~₂アルキル、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換されている、または2個のR⁵基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する)。

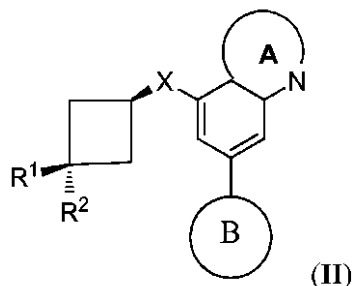
【請求項2】

環Cがシクロブタンである、請求項1に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項3】

次式

【化104】

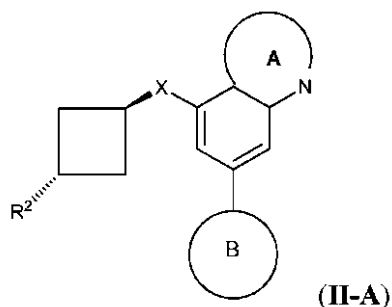


を有する、請求項2に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項4】

次式

【化105】

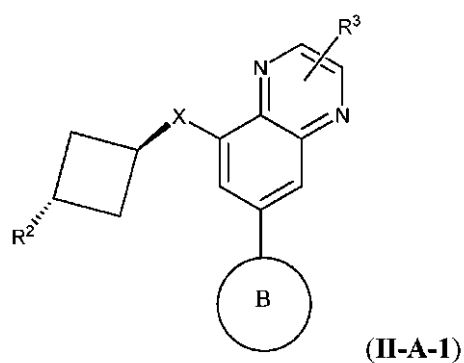


を有する、請求項3に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項5】

次式

【化 1 0 6】



10

を有する、請求項 4 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

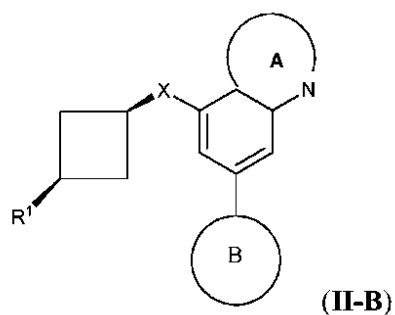
【請求項 6】

R^2 が、 $-C_{0-4}$ アルキル - NHR^4 である、請求項 4 または 5 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 7】

次式

【化 1 0 7】



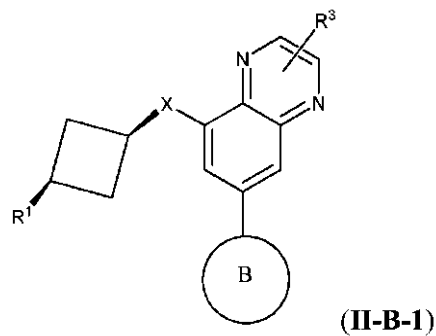
20

を有する、請求項 3 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 8】

次式

【化 1 0 8】



30

40

を有する、請求項 7 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 9】

R^1 が、 $-C_{0-4}$ アルキル - NHR^4 である、請求項 7 または 8 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

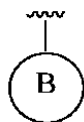
【請求項 10】

50

X が、-O- または -OC₁₋₄ アルキル- である、請求項 2 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

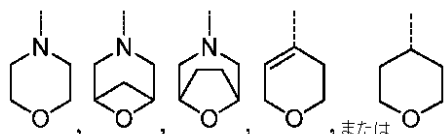
【請求項 11】

【化 109】



が

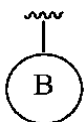
【化 110】



である、請求項 2 ~ 10 のいずれか 1 項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

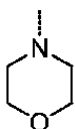
【請求項 12】

【化 111】



が

【化 112】



である、請求項 11 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 13】

R³ が水素である、請求項 2 ~ 12 のいずれか 1 項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 14】

R⁴ が、水素、C₁₋₄ アルキル、C₂₋₄ アルケニル、C₂₋₄ アルキニル、C₃₋₅ シクロアルキル、またはフェニルであり、ここでは、前記 R⁴ 基のそれぞれが、最大 4 個までの Br、Cl、F、または C₁₋₄ アルキル、最大 3 個までの、CN、NO₂、C₂₋₄ アルケニル、C₂₋₄ アルキニル、C₃₋₆ シクロアルキル、C₀₋₄ アルキル - C₃₋₅ シクロアルキル、C₀₋₄ アルキル - O - C₁₋₄ アルキル、C₀₋₄ アルキル - O - C₀₋₄ アルキル - C₃₋₅ シクロアルキル、C(O)OC₁₋₄ アルキル、C(O)OC₀₋₄ アルキル - C₃₋₅ シクロアルキル、C(O)OC₁₋₄ アルキル、C(O)NH₂、C(O)NHC₁₋₄ アルキル、C(O)N(C₁₋₄ アルキル)₂、C(O)NH(C₀₋₄ アルキル - C₃₋₅ シクロアルキル)、CH₂OR⁵、C₀₋₄ アルキル - C(O)R⁵、C₀₋₄ アルキル - C(O)N(R⁵)₂、C₀₋₄ アルキル - C(O)OR⁵、C₀₋₄ アルキル - NHC(O)R⁵、C₀₋₄ アルキル - N(R⁵)₂、複素環系 (オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、およびピペラジンから選択される)、ヘテロアリ

10

20

30

40

50

ール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、およびテトラゾールから選択される）あるいは最大2個までのOR⁵で任意選択で置換されており、ここでは、前記任意選択のR⁴置換基のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までのC₁～₄アルキル基、最大2個までのOH基、最大2個までのOC₁～₄アルキル基、最大2個までのSC₁～₄アルキル基、C(O)C₁～₄アルキル、C(O)OC₁～₄アルキル、またはC(O)OC₀～₄アルキル-C₃～₅シクロアルキルで任意選択で置換されており；および

各R⁵が、独立に、水素、C₁～₄アルキル、5～6員のヘテロアリール（イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、およびピリミジンから選択される）、4～6員のヘテロシクリル（オキセタン、テトラヒドロフラン、およびテトラヒドロピランから選択される）であり、かつ各R⁵基が、クロロ、最大3個までのフッ素原子、最大2個までのC₁～₂アルキル、CH₂OH、CN、最大2個までのOH、最大2個までのOC₁～₂アルキル、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換されている、または2個のR⁵基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、請求項2～13のいずれか1項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項15】

R⁴が、5～10員の単環または二環のヘテロアリール環（ピロール、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、ピリジン、ピリミジン、ピリミジノン、ピラジン、ピリダジン、およびキノリンから選択される）であり、ここでは、前記R⁴基のそれぞれは、最大4個までのBr、Cl、F、またはC₁～₄アルキル、最大3個までの、CN、NO₂、C₂～₄アルケニル、C₂～₄アルキニル、C₃～₆シクロアルキル、C₀～₄アルキル-C₃～₅シクロアルキル、C₀～₄アルキル-O-C₁～₄アルキル、C₀～₄アルキル-O-C₀～₄アルキル-C₃～₅シクロアルキル、C(O)OC₁～₄アルキル、C(O)OC₀～₄アルキル-C₃～₅シクロアルキル、C₀～₄アルキル-C(O)NH₂、C(O)NH-C₁～₄アルキル、C(O)N(C₁～₄アルキル)₂、C(O)NH(C₀～₄アルキル-C₃～₅シクロアルキル)、CH₂OR⁵、C₀～₄アルキル-C(O)R⁵、C₀～₄アルキル-C(O)N(R⁵)₂、C₀～₄アルキル-C(O)OR⁵、C₀～₄アルキル-NHC(O)R⁵、C₀～₄アルキル-N(R⁵)₂、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、およびピペラジンから選択される）、ヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、およびテトラゾールから選択される）あるいは最大2個までのOR⁵で任意選択で置換されており、ここでは、前記任意選択のR⁴置換基のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までのC₁～₄アルキル基、最大2個までのOH基、最大2個までのOC₁～₄アルキル基、最大2個までのSC₁～₄アルキル基、C(O)C₁～₄アルキル、C(O)OC₁～₄アルキル、またはC(O)OC₀～₄アルキル-C₃～₅シクロアルキルで任意選択で置換されており；および

各R⁵が、独立に、水素、C₁～₄アルキル、5～6員のヘテロアリール（イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、およびピリミジンから選択される）、4～6員のヘテロシクリル（オキセタン、テトラヒドロフラン、およびテトラヒドロピランから選択される）であり、かつ各R⁵基は、クロロ、最大3個までのフッ素原子、最大2個までのC₁～₂アルキル、CH₂OH、CN、最大2個までのOH、最大2個までのOC₁～₂アルキル、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換されている、または2個のR⁵基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、請求項2～13のいずれか1項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項16】

R⁴が、4～10員の単環または二環のヘテロシクリル環（オキセタン、テトラヒドロフ

10

20

30

40

50

ラン、テトラヒドロピラン、ジヒドロイソオキサゾール、ピリミジン - 2, 4 (1H, 3H) - ジオン、ジヒドロフロピリミジン、ジヒドロピラノピリミジン、ジヒドロピロリミジン、テトラヒドロプテリジン、およびテトラヒドロピリドピリミジンから選択される) であり、ここでは、前記 R⁴ 基のそれぞれは、最大 4 個までの Br、Cl、F、または C₁ ~ 4 アルキル、最大 3 個までの、CN、NO₂、C₂ ~ 4 アルケニル、C₂ ~ 4 アルキニル、C₃ ~ 6 シクロアルキル、C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C₀ ~ 4 アルキル - O - C₁ ~ 4 アルキル、C₀ ~ 4 アルキル - O - C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C(O)OC₁ ~ 4 アルキル、C(O)OC₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)NH₂、C(O)NHC₁ ~ 4 アルキル、C(O)N(C₁ ~ 4 アルキル)₂、C(O)NH(C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル)、CH₂OR⁵、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)R⁵、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)N(R⁵)₂、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)OR⁵、C₀ ~ 4 アルキル - NHC(O)R⁵、C₀ ~ 4 アルキル - N(R⁵)₂、複素環系 (オキサタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、およびピペラジンから選択される)、ヘテロアリアル環系 (フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、およびテトラゾールから選択される) あるいは最大 2 個までの OR⁵ で任意選択で置換されており、ここでは、前記任意選択の R⁴ 置換基のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C₁ ~ 4 アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの OC₁ ~ 4 アルキル基、最大 2 個までの SC₁ ~ 4 アルキル基、C(O)C₁ ~ 4 アルキル、C(O)OC₁ ~ 4 アルキル、または C(O)OC₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキルで任意選択で置換されており；および

各 R⁵ は、独立に、水素、C₁ ~ 4 アルキル、5 ~ 6 員のヘテロアリアル (イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、およびピリミジンから選択される)、4 ~ 6 員のヘテロシクリル (オキサタン、テトラヒドロフラン、およびテトラヒドロピランから選択される) であり、かつ各 R⁵ 基は、クロロ、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C₁ ~ 2 アルキル、CH₂OH、CN、最大 2 個までの OH、最大 2 個までの OC₁ ~ 2 アルキル、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換されている、または 2 個の R⁵ 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、請求項 2 ~ 13 のいずれか 1 項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

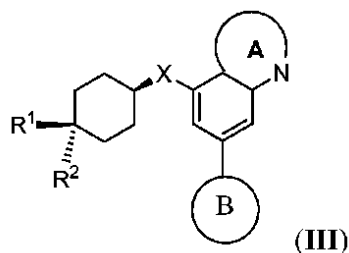
【請求項 17】

環 C がシクロヘキサンである、請求項 1 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 18】

次式

【化 113】



を有する、請求項 17 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

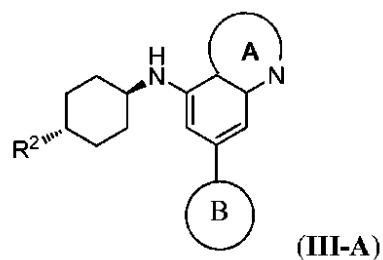
【請求項 19】

X が -NH- である、請求項 17 または 18 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 20】

次式

【化 114】



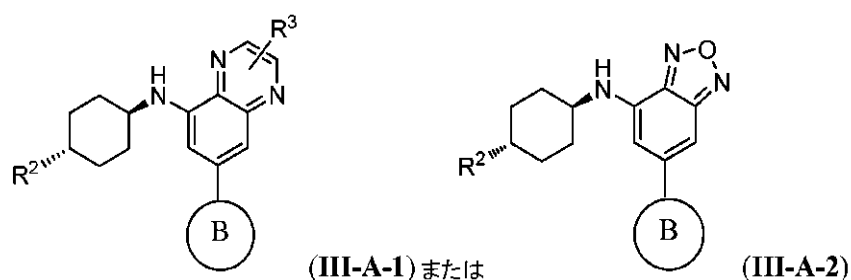
10

を有する、請求項 17 ~ 19 のいずれか 1 項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 21】

次式

【化 115】



20

を有する、請求項 20 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 22】

R^2 が、 $-C_0 - 4$ アルキル - NHR^4 または $-OR^4$ である、請求項 20 または 21 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

30

【請求項 23】

R^2 が、 $-NHR^4$ である、請求項 22 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

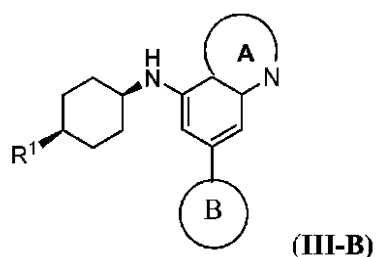
【請求項 24】

R^2 が、 $-OR^4$ である、請求項 22 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 25】

次式

【化 116】



40

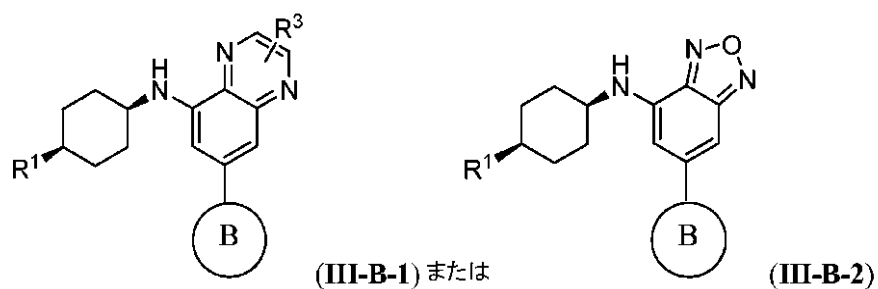
を有する、請求項 17 ~ 19 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 26】

50

次式

【化 1 1 7】



10

を有する、請求項 2 5 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 2 7】

R^1 が、 $-C_0-4$ アルキル - NHR^4 または $-OR^4$ である、請求項 2 5 または 2 6 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 2 8】

R^1 が、 $-NHR^4$ である、請求項 2 7 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

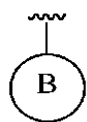
【請求項 2 9】

R^1 が、 $-OR^4$ である、請求項 2 7 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

20

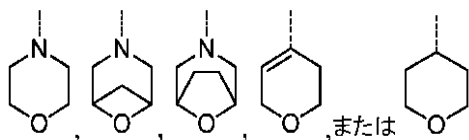
【請求項 3 0】

【化 1 1 8】



が

【化 1 1 9】

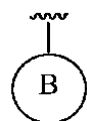


30

である、請求項 1 7 ~ 2 9 のいずれか 1 項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 3 1】

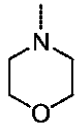
【化 1 2 0】



40

が

【化 1 2 1】



である、請求項 3 0 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 3 2】

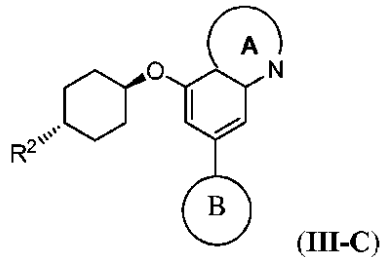
X が - O - である、請求項 1 7 または 1 8 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

10

【請求項 3 3】

次式

【化 1 2 2】



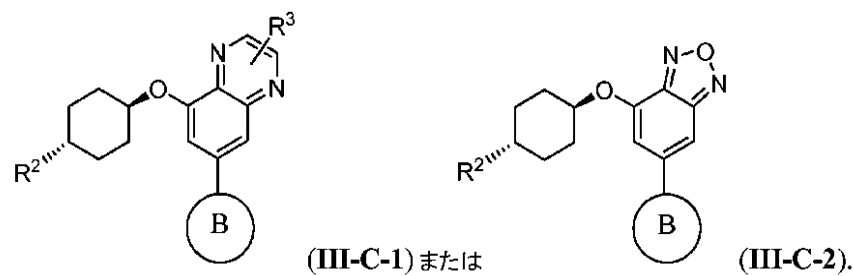
20

を有する、請求項 1 7、1 8、または 3 2 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 3 4】

次式

【化 1 2 3】



30

を有する、請求項 3 3 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 3 5】

R^2 が、 $-C_0 - 4$ アルキル - NHR^4 または $-OR^4$ である、請求項 3 3 または 3 4 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 3 6】

40

R^2 が、 $-NHR^4$ である、請求項 3 5 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

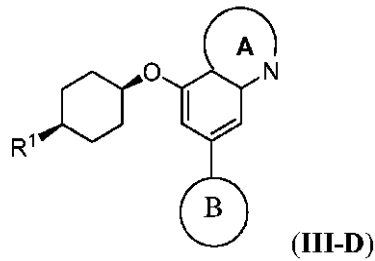
【請求項 3 7】

R^2 が、 $-OR^4$ である、請求項 3 5 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 3 8】

次式

【化 1 2 4】



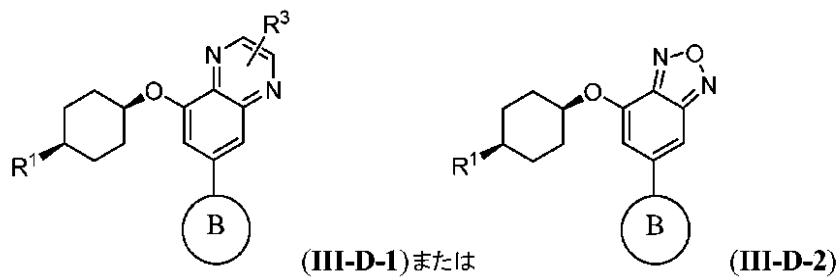
10

を有する、請求項 1 7、1 8、または 3 2 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 3 9】

次式

【化 1 2 5】



20

を有する、請求項 3 8 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 4 0】

R^1 が、 $-C_0 - 4$ アルキル - NHR^4 または $-OR^4$ である、請求項 3 8 または 3 9 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 4 1】

R^1 が、 $-NHR^4$ である、請求項 4 0 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

30

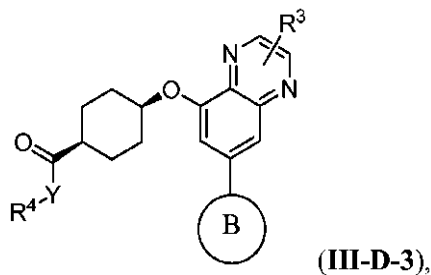
【請求項 4 2】

R^1 が、 $-OR^4$ である、請求項 4 0 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 4 3】

次式

【化 1 2 6】



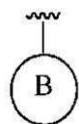
40

(式中、Y は $-O-$ または $-NH-$ である)

を有する、請求項 3 8 または 3 9 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

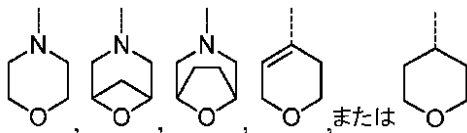
【請求項 4 4】

【化 1 2 7】



が

【化 1 2 8】

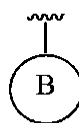


10

である、請求項 3 2 ~ 4 3 のいずれか 1 項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 4 5】

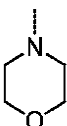
【化 1 2 9】



20

が

【化 1 3 0】



である、請求項 4 4 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

30

【請求項 4 6】

R^3 が、水素、 $C_{1 \sim 4}$ アルキル、 $OC_{1 \sim 2}$ アルキル、 $C(O)NH_2$ 、または $C(O)H$ であり、ここでは、前記 R^3 アルキルのそれぞれが、 OH で任意選択で置換されている、請求項 1 7 ~ 4 5 のいずれか 1 項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 4 7】

R^3 が、水素である、請求項 4 6 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 4 8】

R^4 が、水素、 $C_{1 \sim 4}$ アルキル、 $C_{2 \sim 4}$ アルケニル、 $C_{2 \sim 4}$ アルキニル、 $C_{3 \sim 5}$ シクロアルキル、またはフェニルであり、ここでは、前記 R^4 基のそれぞれが、最大 4 個までの Br 、 Cl 、 F 、または $C_{1 \sim 4}$ アルキル、最大 3 個までの、 CN 、 NO_2 、 $C_{2 \sim 4}$ アルケニル、 $C_{2 \sim 4}$ アルキニル、 $C_{3 \sim 6}$ シクロアルキル、 $C_{0 \sim 4}$ アルキル - $C_{3 \sim 5}$ シクロアルキル、 $C_{0 \sim 4}$ アルキル - $O - C_{1 \sim 4}$ アルキル、 $C_{0 \sim 4}$ アルキル - $O - C_{0 \sim 4}$ アルキル - $C_{3 \sim 5}$ シクロアルキル、 $C(O)OC_{1 \sim 4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0 \sim 4}$ アルキル - $C_{3 \sim 5}$ シクロアルキル、 $C_{0 \sim 4}$ アルキル - $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHC_{1 \sim 4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1 \sim 4} \text{ アルキル})_2$ 、 $C(O)NH(C_{0 \sim 4} \text{ アルキル} - C_{3 \sim 5} \text{ シクロアルキル})$ 、 CH_2OR^5 、 $C_{0 \sim 4}$ アルキル - $C(O)R^5$ 、 $C_{0 \sim 4}$ アルキル - $C(O)N(R^5)_2$ 、 $C_{0 \sim 4}$ アルキル - $C(O)OR^5$ 、 $C_{0 \sim 4}$ アルキル - $NHC(O)R^5$ 、 $C_{0 \sim 4}$ アルキル - $N(R^5)_2$ 、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、

40

50

モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、およびピペラジンから選択される)、ヘテロアリアル環系(フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、およびテトラゾールから選択される)あるいは最大2個までのOR⁵で任意選択で置換されており、ここでは、前記任意選択のR⁴置換基のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までのC₁~4アルキル基、最大2個までのOH基、最大2個までのOC₁~4アルキル基、最大2個までのSC₁~4アルキル基、C(O)C₁~4アルキル、C(O)OC₁~4アルキル、またはC(O)OC₀~4アルキル-C₃~5シクロアルキルで任意選択で置換されており;および各R⁵が、独立に、水素、C₁~4アルキル、5~6員のヘテロアリアル(イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、およびピリミジンから選択される)、4~6員のヘテロシクリル(オキセタン、テトラヒドロフラン、およびテトラヒドロピランから選択される)であり、かつ各R⁵基が、クロロ、最大3個までのフッ素原子、最大2個までのC₁~2アルキル、CH₂OH、CN、最大2個までのOH、最大2個までのOC₁~2アルキル、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換されている、または2個のR⁵基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、請求項17~47のいずれか1項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

10

【請求項49】

R⁴が、5~10員の単環または二環のヘテロアリアル環(ピロール、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、ピリジン、ピリミジン、ピリミジノン、ピラジン、ピリダジン、およびキノリンから選択される)であり、ここでは、前記R⁴基のそれぞれは、最大4個までのBr、Cl、F、またはC₁~4アルキル、最大3個までの、CN、NO₂、C₂~4アルケニル、C₂~4アルキニル、C₃~6シクロアルキル、C₀~4アルキル-C₃~5シクロアルキル、C₀~4アルキル-O-C₁~4アルキル、C₀~4アルキル-O-C₀~4アルキル-C₃~5シクロアルキル、C(O)OC₁~4アルキル、C(O)OC₀~4アルキル-C₃~5シクロアルキル、C₀~4アルキル-C(O)NH₂、C(O)NH(C₁~4アルキル)、C(O)N(C₁~4アルキル)₂、C(O)NH(C₀~4アルキル-C₃~5シクロアルキル)、CH₂OR⁵、C₀~4アルキル-C(O)R⁵、C₀~4アルキル-C(O)N(R⁵)₂、C₀~4アルキル-C(O)OR⁵、C₀~4アルキル-NHC(O)R⁵、C₀~4アルキル-N(R⁵)₂、複素環系(オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、およびピペラジンから選択される)、ヘテロアリアル環系(フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、およびテトラゾールから選択される)あるいは最大2個までのOR⁵で任意選択で置換されており、ここでは、前記任意選択のR⁴置換基のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までのC₁~4アルキル基、最大2個までのOH基、最大2個までのOC₁~4アルキル基、最大2個までのSC₁~4アルキル基、C(O)C₁~4アルキル、C(O)OC₁~4アルキル、またはC(O)OC₀~4アルキル-C₃~5シクロアルキルで任意選択で置換されており;および

20

30

40

各R⁵が、独立に、水素、C₁~4アルキル、5~6員のヘテロアリアル(イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、およびピリミジンから選択される)、4~6員のヘテロシクリル(オキセタン、テトラヒドロフラン、およびテトラヒドロピランから選択される)であり、かつ各R⁵基は、クロロ、最大3個までのフッ素原子、最大2個までのC₁~2アルキル、CH₂OH、CN、最大2個までのOH、最大2個までのOC₁~2アルキル、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換されている、または2個のR⁵基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、請求項17~47のいずれか1項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項50】

50

R⁴ が、最大 4 個までの Br、Cl、F、または C₁ ~ 4 アルキル、最大 3 個までの、CN、NO₂、C₂ ~ 4 アルケニル、C₂ ~ 4 アルキニル、C₃ ~ 6 シクロアルキル、C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C₀ ~ 4 アルキル - O - C₁ ~ 4 アルキル、C₀ ~ 4 アルキル - O - C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C(O)OC₁ ~ 4 アルキル、C(O)OC₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)NH₂、C(O)NHC₁ ~ 4 アルキル、C(O)N(C₁ ~ 4 アルキル)₂、C(O)NH(C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル)、CH₂OR⁵、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)R⁵、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)N(R⁵)₂、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)OR⁵、C₀ ~ 4 アルキル - NHC(O)R⁵、C₀ ~ 4 アルキル - N(R⁵)₂、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、およびピペラジンから選択される）、ヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、およびテトラゾールから選択される）あるいは最大 2 個までの OR⁵ で任意選択で置換されており、ここでは、前記任意選択の R⁴ 置換基のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C₁ ~ 4 アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの OC₁ ~ 4 アルキル基、最大 2 個までの SC₁ ~ 4 アルキル基、C(O)C₁ ~ 4 アルキル、C(O)OC₁ ~ 4 アルキル、または C(O)OC₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキルで任意選択で置換された、ピリジンまたはピリミジンであり、

10

各 R⁵ が、独立に、水素、C₁ ~ 4 アルキル、5 ~ 6 員のヘテロアリール（イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、およびピリミジンから選択される）、4 ~ 6 員のヘテロシクリル（オキセタン、テトラヒドロフラン、およびテトラヒドロピランから選択される）であり、かつ各 R⁵ 基は、クロロ、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C₁ ~ 2 アルキル、CH₂OH、CN、最大 2 個までの OH、最大 2 個までの OC₁ ~ 2 アルキル、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換されている、または 2 個の R⁵ 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、請求項 4 9 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

20

【請求項 5 1】

R⁴ が、4 ~ 10 員の単環または二環のヘテロシクリル環（オキセタン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロピラン、ジヒドロイソオキサゾール、ピリミジン - 2, 4 (1H, 3H) - ジオン、ジヒドロフロピリミジン、ジヒドロピラノピリミジン、ジヒドロピロロピリミジン、テトラヒドロプテリジン、およびテトラヒドロピリドピリミジンから選択される）であり、ここでは、前記 R⁴ 基のそれぞれは、最大 4 個までの Br、Cl、F、または C₁ ~ 4 アルキル、最大 3 個までの、CN、NO₂、C₂ ~ 4 アルケニル、C₂ ~ 4 アルキニル、C₃ ~ 6 シクロアルキル、C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C₀ ~ 4 アルキル - O - C₁ ~ 4 アルキル、C₀ ~ 4 アルキル - O - C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C(O)OC₁ ~ 4 アルキル、C(O)OC₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)NH₂、C(O)NHC₁ ~ 4 アルキル、C(O)N(C₁ ~ 4 アルキル)₂、C(O)NH(C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル)、CH₂OR⁵、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)R⁵、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)N(R⁵)₂、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)OR⁵、C₀ ~ 4 アルキル - NHC(O)R⁵、C₀ ~ 4 アルキル - N(R⁵)₂、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、およびピペラジンから選択される）、ヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、およびテトラゾールから選択される）あるいは最大 2 個までの OR⁵ で任意選択で置換されており、ここでは、前記任意選択の R⁴ 置換基のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C₁ ~ 4 アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの OC₁ ~ 4 アルキル基、最大 2 個までの SC₁ ~ 4 アルキル基、C(O)C₁ ~ 4 アルキル、C(O)OC₁ ~ 4 アルキル、C(O)OC₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキルで任意選択で置換された、ピリジンまたはピリミジンであり、

30

40

50

O) OC₁₋₄ アルキル、または C(O)OC₀₋₄ アルキル - C₃₋₅ シクロアルキルで任意選択で置換されており；および

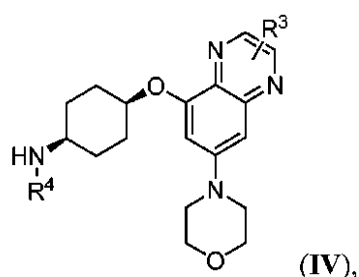
各 R⁵ は、独立に、水素、C₁₋₄ アルキル、5～6 員のヘテロアリール（イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、およびピリミジンから選択される）、4～6 員のヘテロシクリル（オキセタン、テトラヒドロフラン、およびテトラヒドロピランから選択される）であり、かつ各 R⁵ 基は、クロロ、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C₁₋₂ アルキル、CH₂OH、CN、最大 2 個までの OH、最大 2 個までの OC₁₋₂ アルキル、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換されている、または 2 個の R⁵ 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ペリジン環、またはピペラジン環を形成する、請求項 17～47 のいずれか 1 項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

10

【請求項 52】

式：

【化 131】



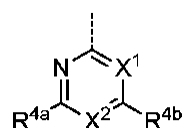
20

(式中、

R³ は、水素、-C₁₋₄ アルキル、フルオロ、クロロ、-OC₁₋₂ アルキル、-C(O)NH₂、-C(O)H、または-CNであり、ここでは、前記 R³ アルキルのそれぞれは、OH または最大 3 個までのフッ素原子で任意選択で置換されており；

R⁴ は、

【化 132】



30

であり、

X¹ は、N、CH、CF、CCl、または、CC₁₋₂ アルキル（最大 3 個までのフッ素原子で任意選択で置換されている）であり；

X² は、N または CR^{4c} であり、ここでは、X¹ と X² は、同時に N ではあり得ず；

R^{4a}、R^{4b}、および R^{4c} のそれぞれは、独立に、水素、F、Cl、Br、CN、NO₂、C₁₋₄ アルキル、C₀₋₄ アルキル - C₃₋₅ シクロアルキル、C₀₋₄ アルキル - O - C₁₋₄ アルキル、C₀₋₄ アルキル - O - C₀₋₄ アルキル - C₃₋₅ シクロアルキル、C₂₋₄ アルケニル、C₂₋₄ アルキニル、C(O)OC₁₋₄ アルキル、C(O)OC₀₋₄ アルキル - C₃₋₅ シクロアルキル、C(O)NH₂、C(O)NHC₁₋₄ アルキル、C(O)N(C₁₋₄ アルキル)₂、C(O)NH(C₀₋₄ アルキル - C₃₋₅ シクロアルキル)、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、およびピペラジンから選択される）、またはヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、およびテトラゾールから選択される）である、または、R^{4c}、R^{4a}、および介在する原子は、ジヒドロフラン、ジヒドロピラン、またはテトラヒドロピペリジン複素環系を形成し；

40

50

ここでは、前記 R^{4a} 、 R^{4b} 、および R^{4c} 複素環およびヘテロアリール環系のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までの C_{1-4} アルキル、最大2個までのOH基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換されており；および前記 R^{4a} 、 R^{4b} 、および R^{4c} アルキルおよびシクロアルキルのそれぞれは、最大2個までのジェミナルではないOH基または最大3個までのフッ素原子で任意選択で置換されている)

を有する、請求項32に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項53】

R^3 が、水素、 $-C_{1-4}$ アルキル、 $-OC_{1-2}$ アルキル、または $-C(O)NH_2$ 、または $-C(O)H$ 、であり、ここでは、前記 R^3 アルキルのそれぞれが、OHで任意選択で置換されている、請求項52に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

10

【請求項54】

R^3 が、水素である、請求項52または53に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項55】

X^1 および X^2 のそれぞれが、独立に、CHまたはNであり、ここでは、 X^1 と X^2 は、同時にNではあり得ない、請求項52～54のいずれか1項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項56】

20

R^{4a} および R^{4b} のそれぞれが、独立に、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、およびピペラジンから選択される）であり、ここでは、前記 R^{4a} および R^{4b} 複素環およびヘテロアリール環系のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までの C_{1-4} アルキル、最大2個までのOH基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換されており；かつ、前記 R^{4a} および R^{4b} アルキルおよびシクロアルキルのそれぞれは、最大2個までのジェミナルではないOH基または最大3個までのフッ素原子で任意選択で置換されている、請求項52～55のいずれか1項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

30

【請求項57】

R^{4a} および R^{4b} のそれぞれが、独立に、ヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、およびテトラゾールから選択される）であり、ここでは、前記 R^{4a} および R^{4b} 複素環およびヘテロアリール環系のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までの C_{1-4} アルキル、最大2個までのOH基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換されており；かつ、前記 R^{4a} および R^{4b} アルキルおよびシクロアルキルのそれぞれは、最大2個までのジェミナルではないOH基または最大3個までのフッ素原子で任意選択で置換されている、請求項52～55のいずれか1項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

40

【請求項58】

R^{4a} および R^{4b} のそれぞれが、独立に、水素、F、Cl、Br、CN、 NO_2 、 C_{1-4} アルキル、 C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{1-4} アルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NH C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1-4} \text{ アルキル})_2$ 、または $C(O)NH(C_{0-4} \text{ アルキル} - C_{3-5} \text{ シクロアルキル})$ であり、ここでは、前記 R^{4a} および R^{4b} 複素環およびヘテロアリール環系のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までの C_{1-4} アルキル、最大2個までのOH基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、

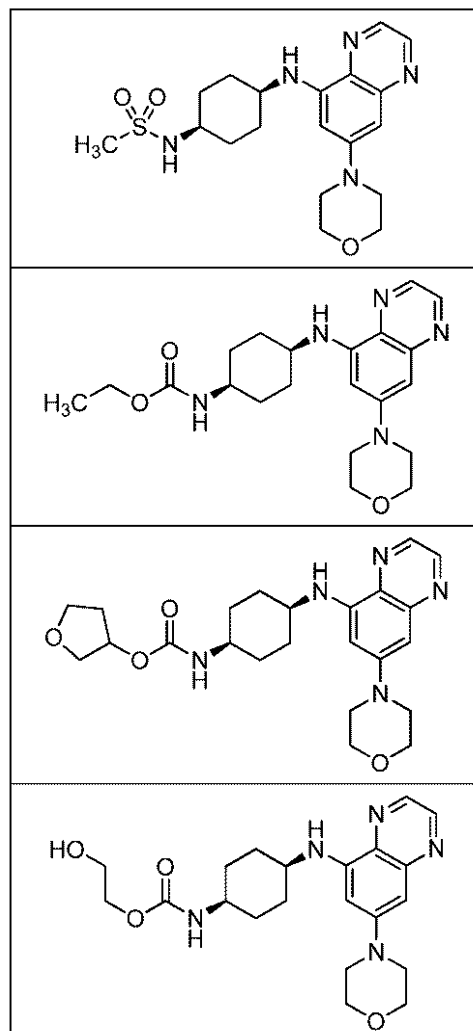
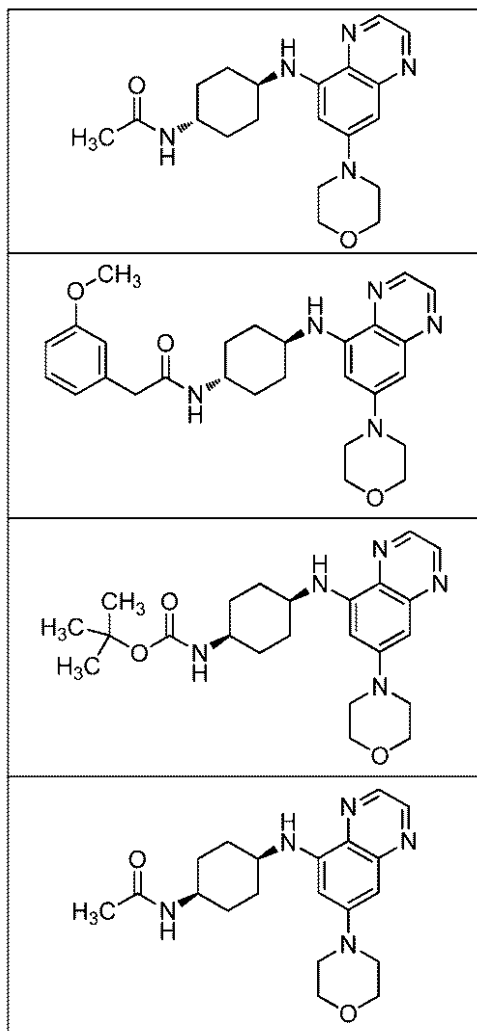
50

または $C(O)OC_{0 \sim 4}$ アルキル - $C_{3 \sim 5}$ シクロアルキルで任意選択で置換されており；かつ、前記 R^{4a} および R^{4b} アルキルおよびシクロアルキルのそれぞれは、最大 2 個までのジェミナルではない OH 基または最大 3 個までのフッ素原子で任意選択で置換されている、請求項 52 ~ 55 のいずれか 1 項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 59】

以下：

【化 152】

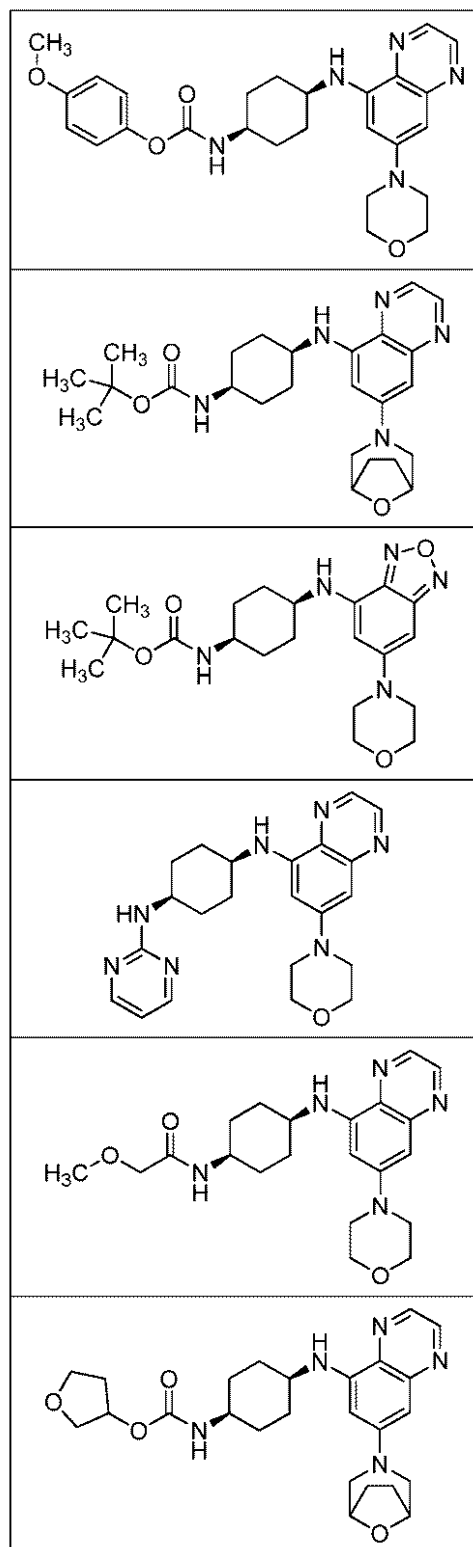
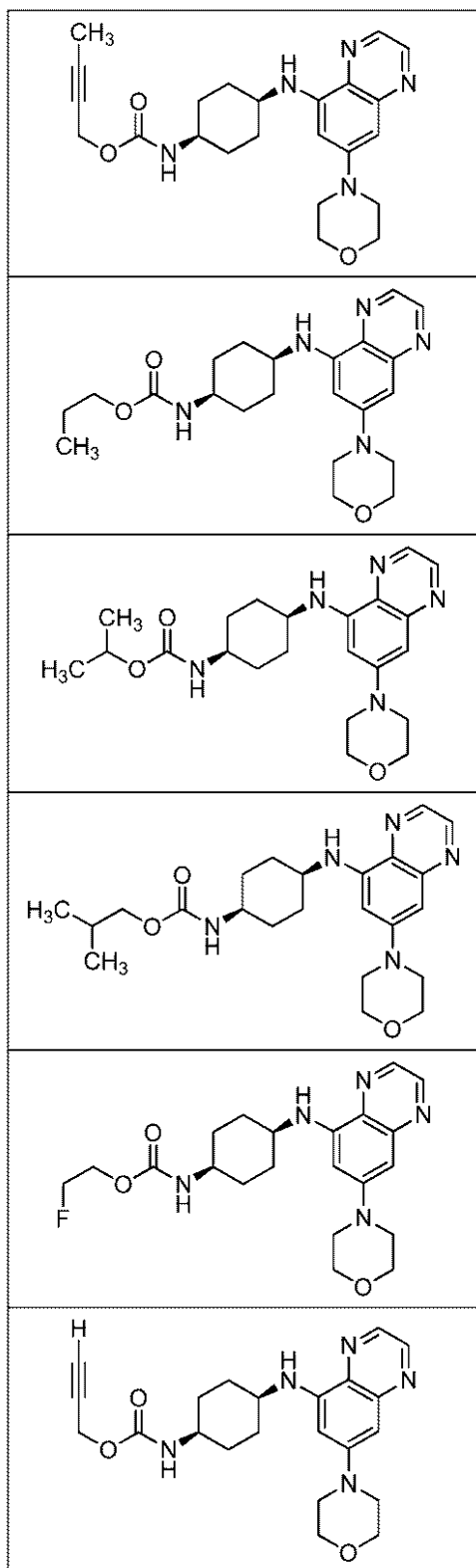


10

20

30

【化 1 5 3】



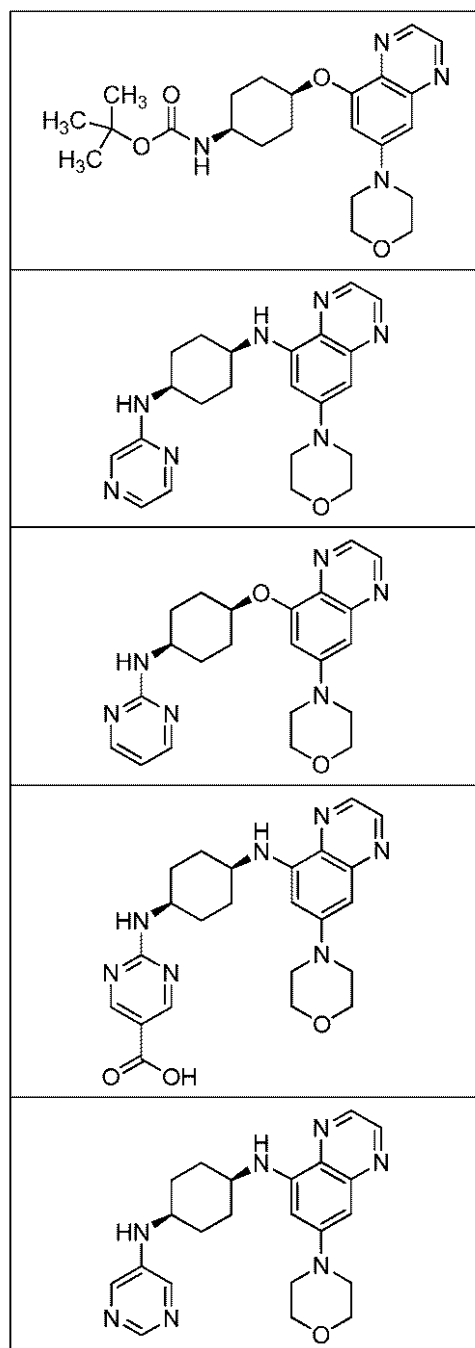
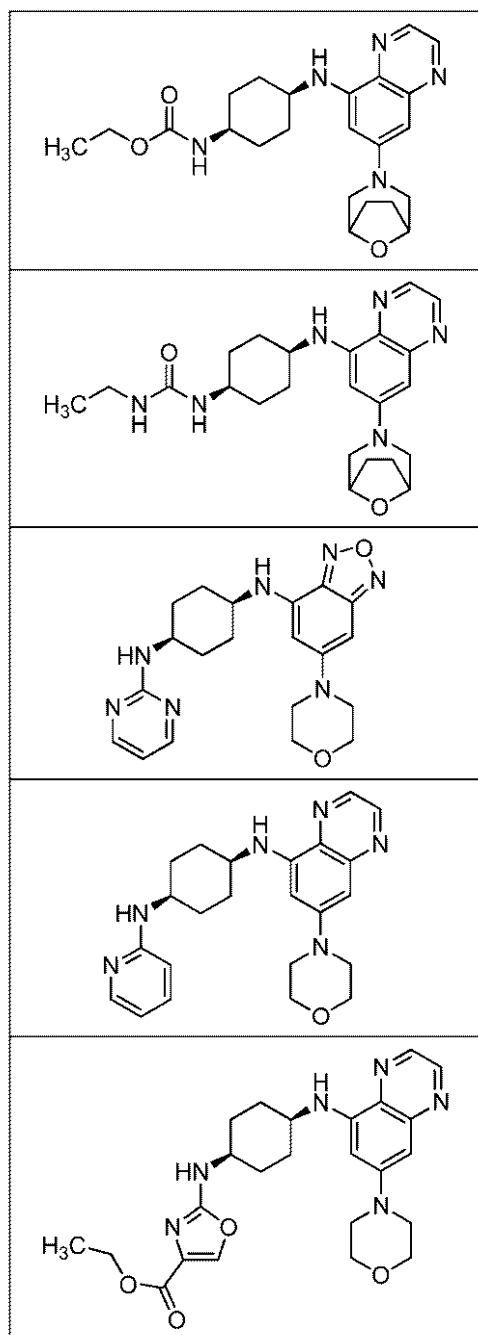
10

20

30

40

【化 1 5 4】

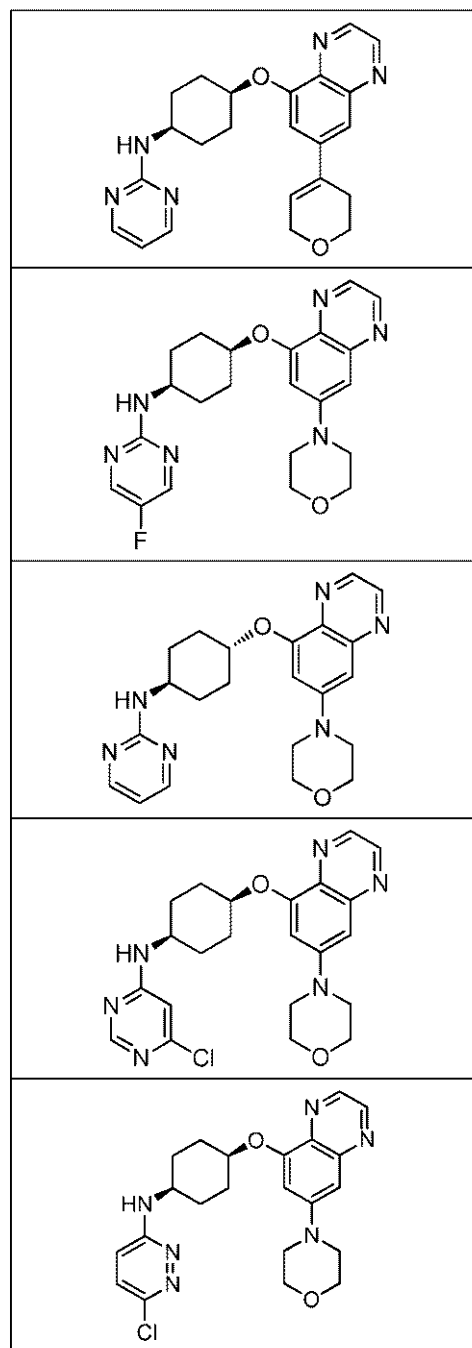
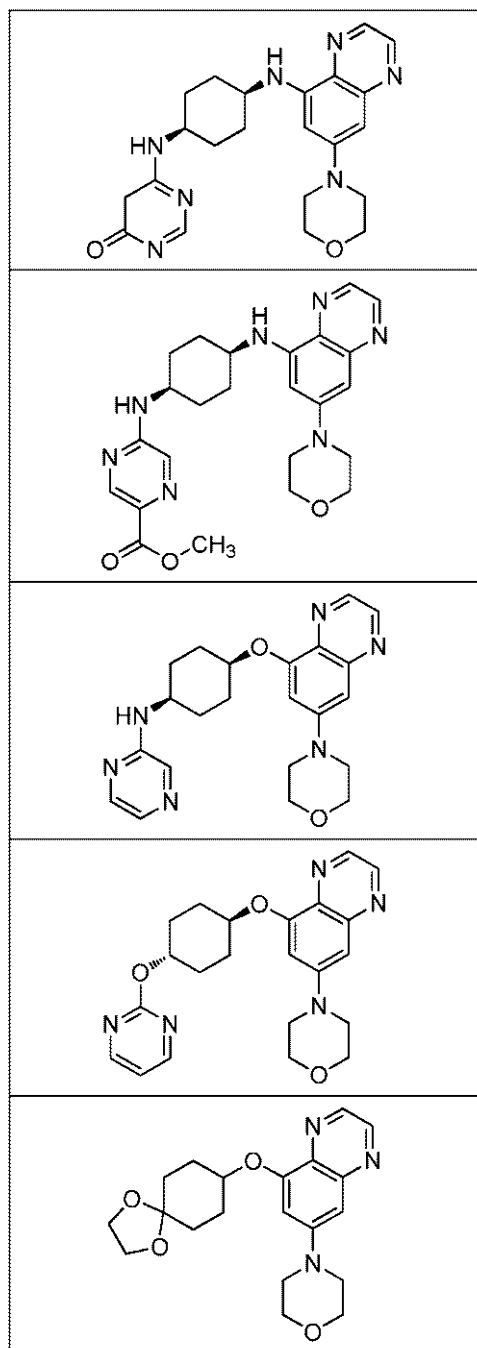


10

20

30

【化 1 5 5】

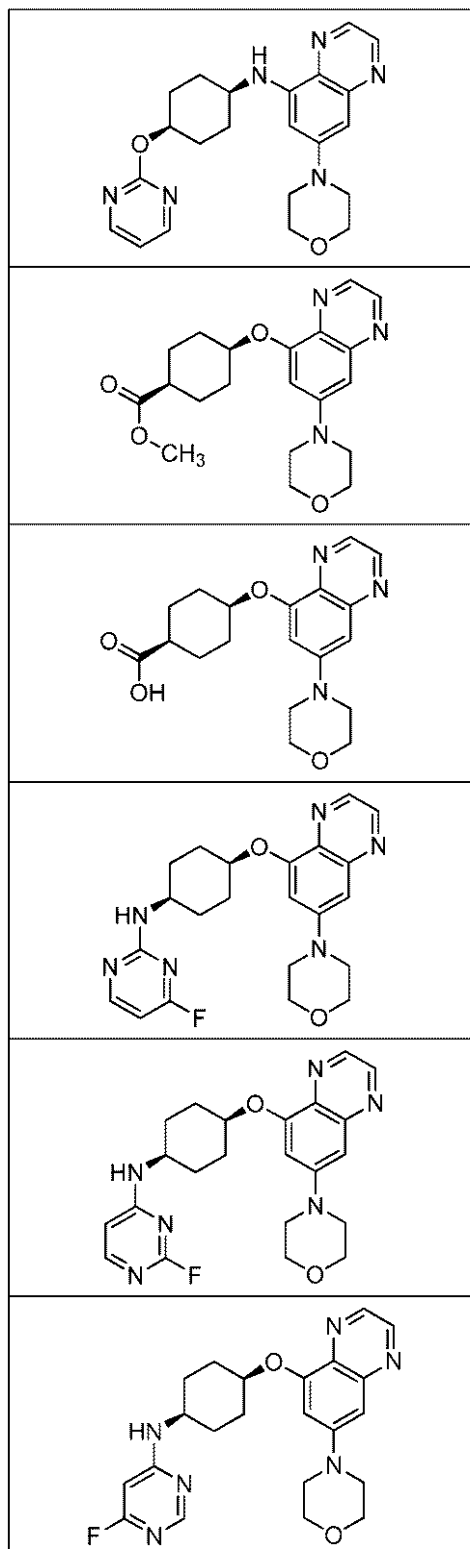
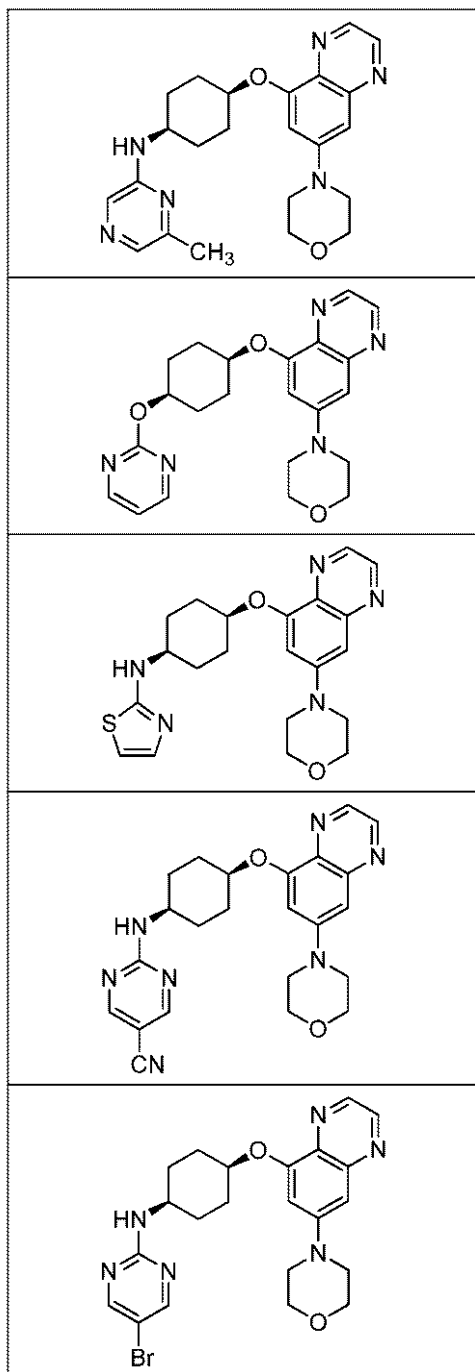


10

20

30

【化 1 5 6】



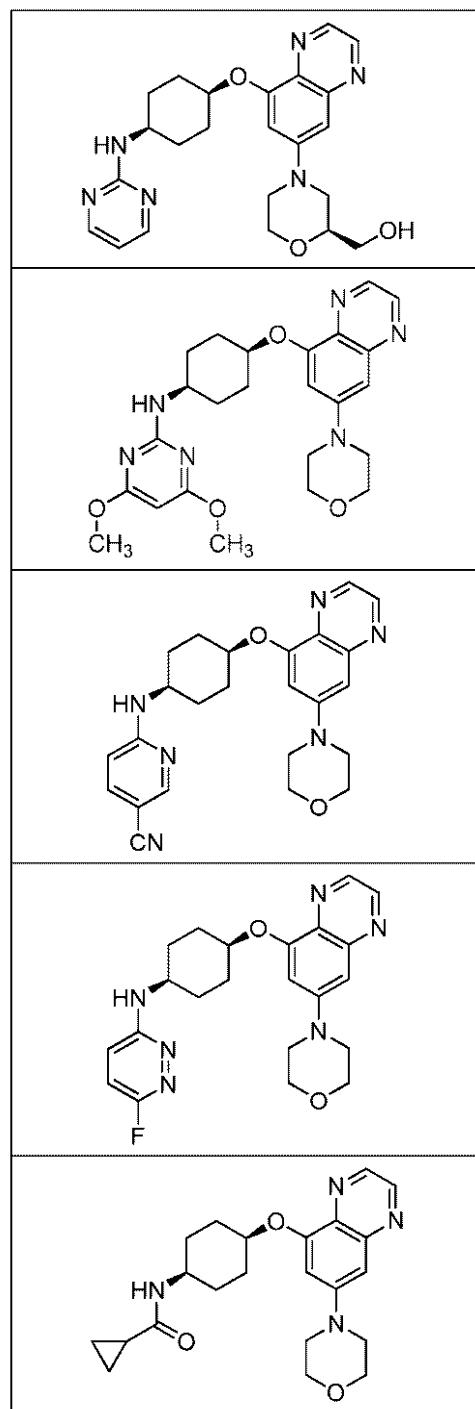
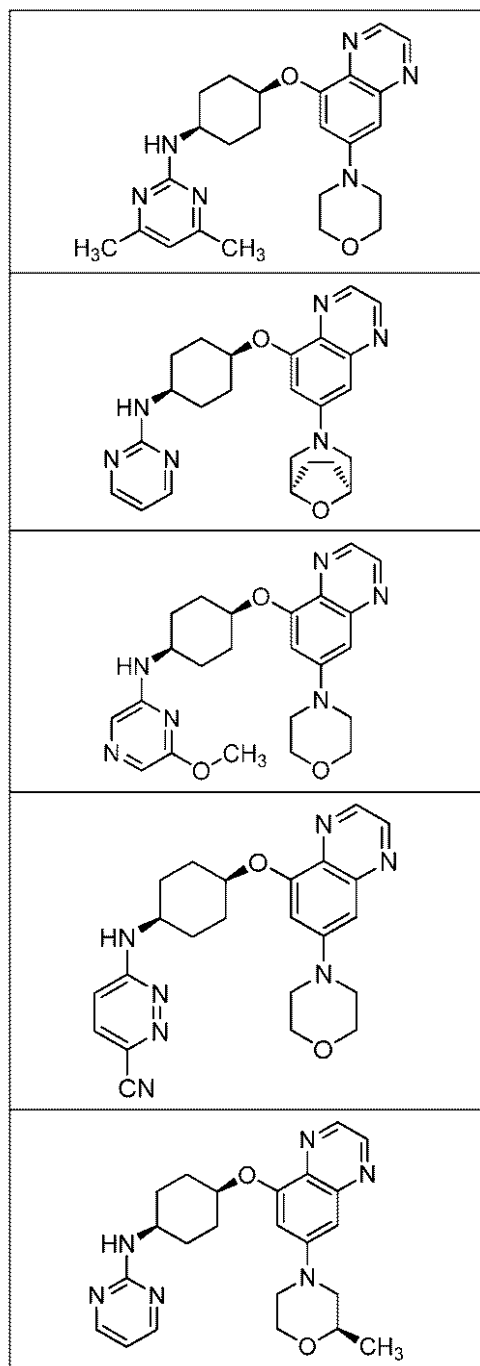
10

20

30

40

【化 1 5 7】

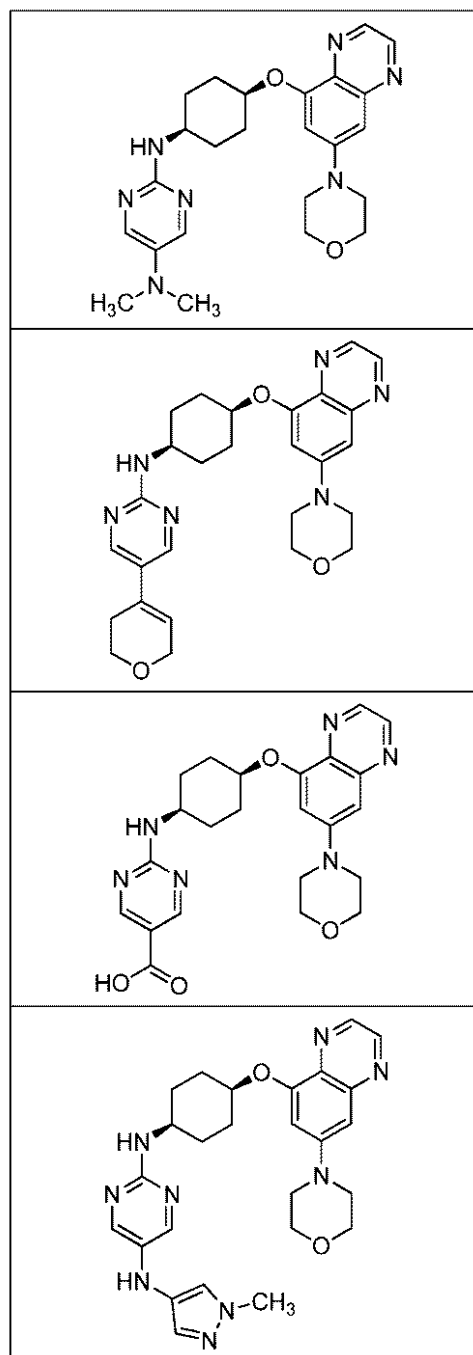
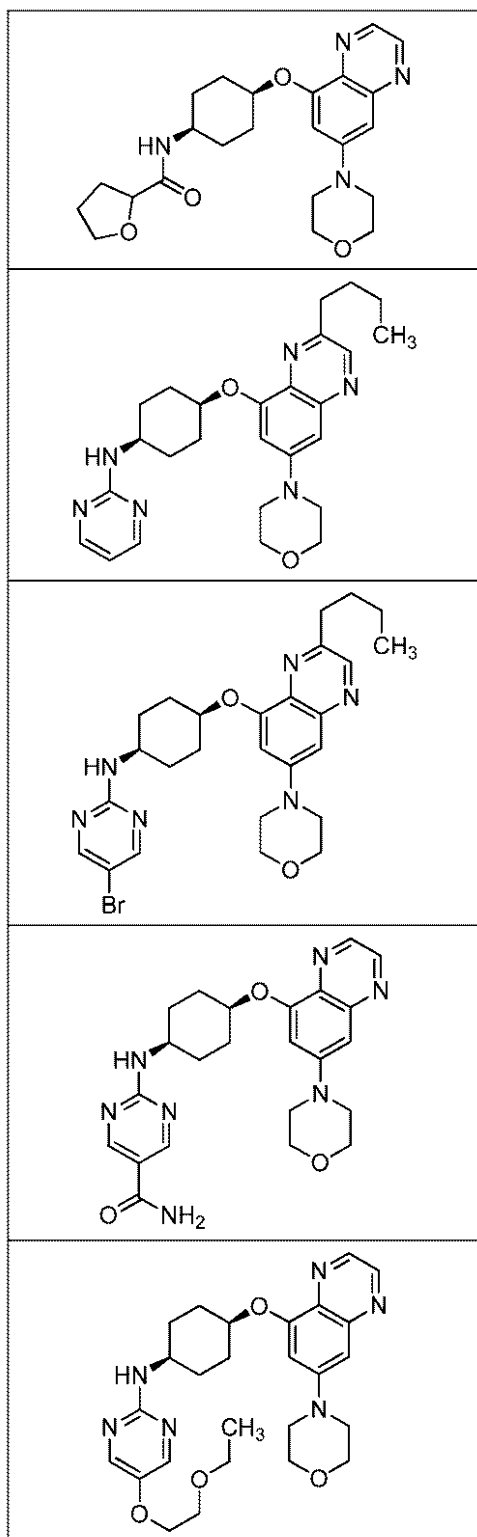


10

20

30

【化 1 5 8】



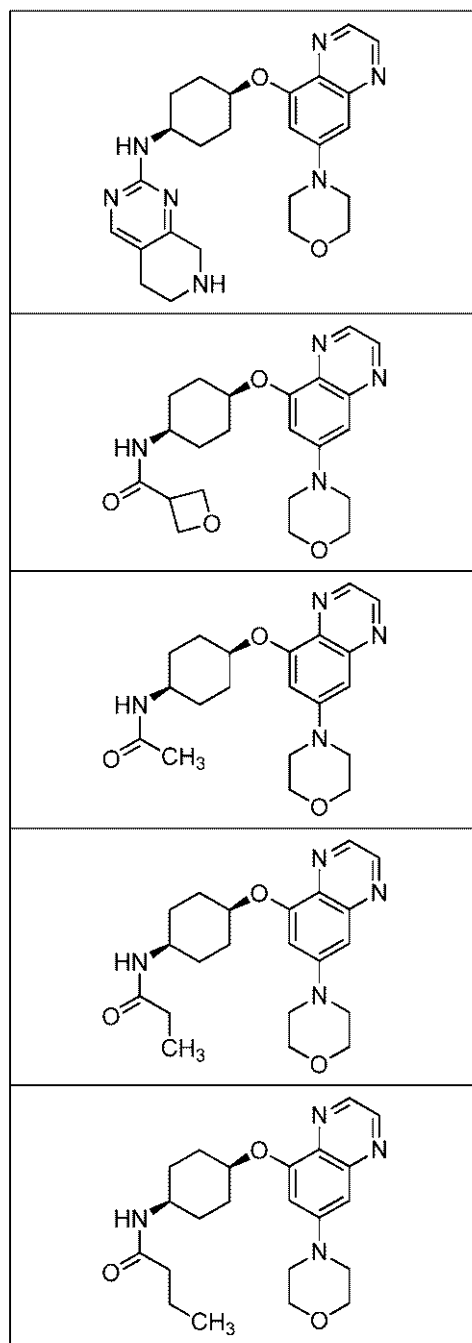
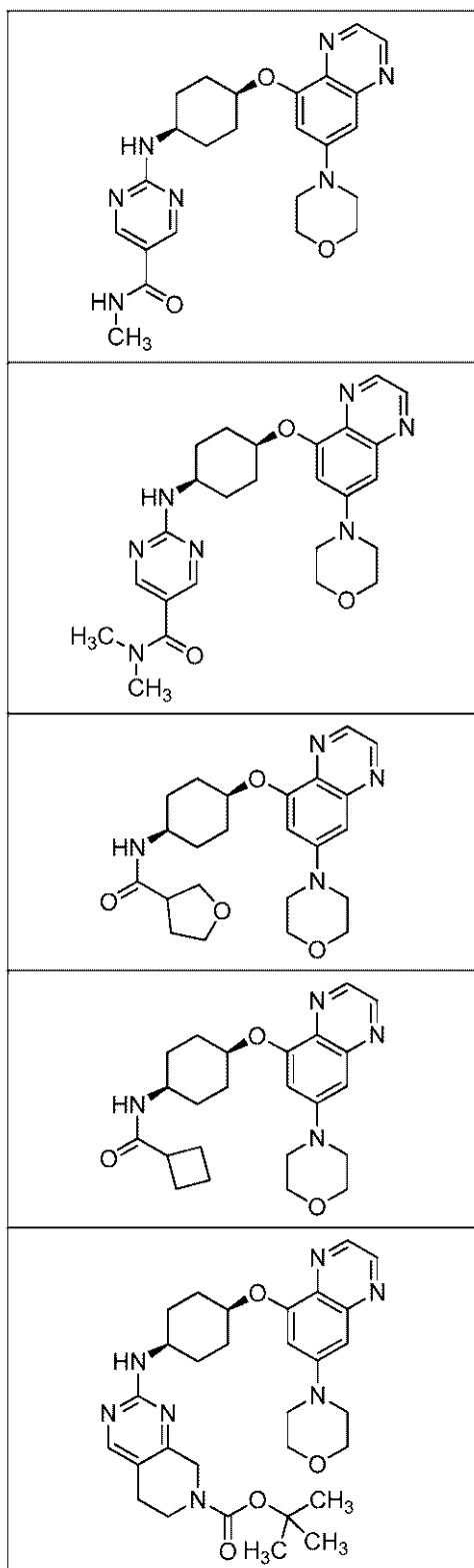
10

20

30

40

【化 1 5 9】



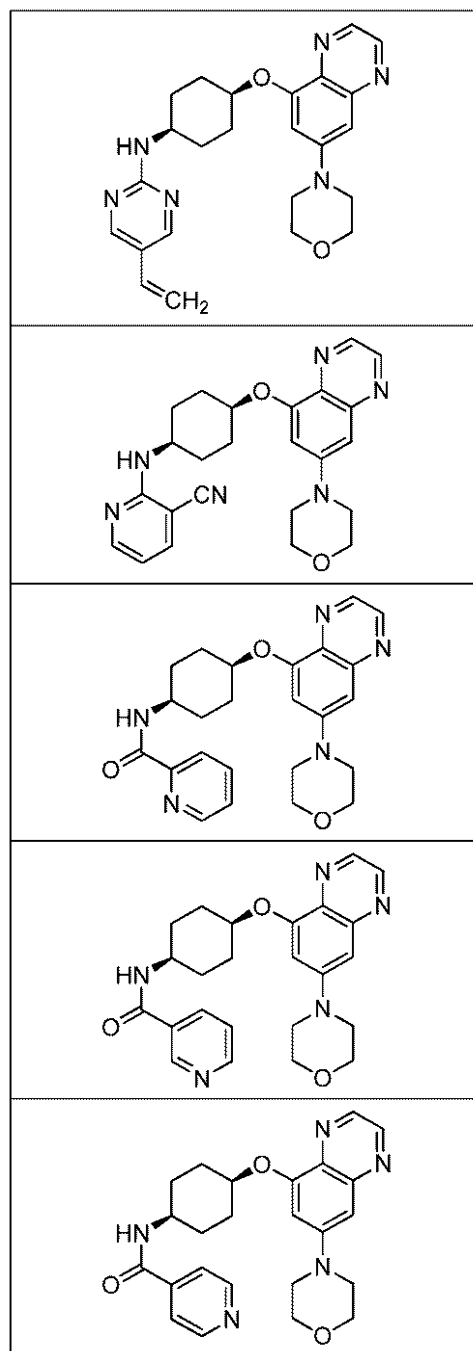
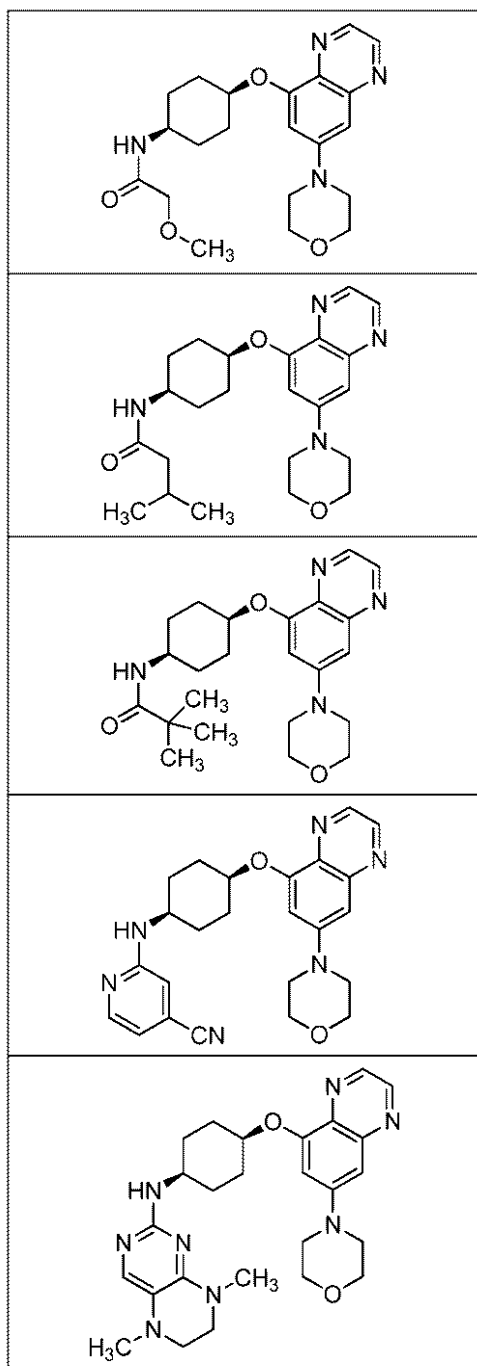
10

20

30

40

【化 160】

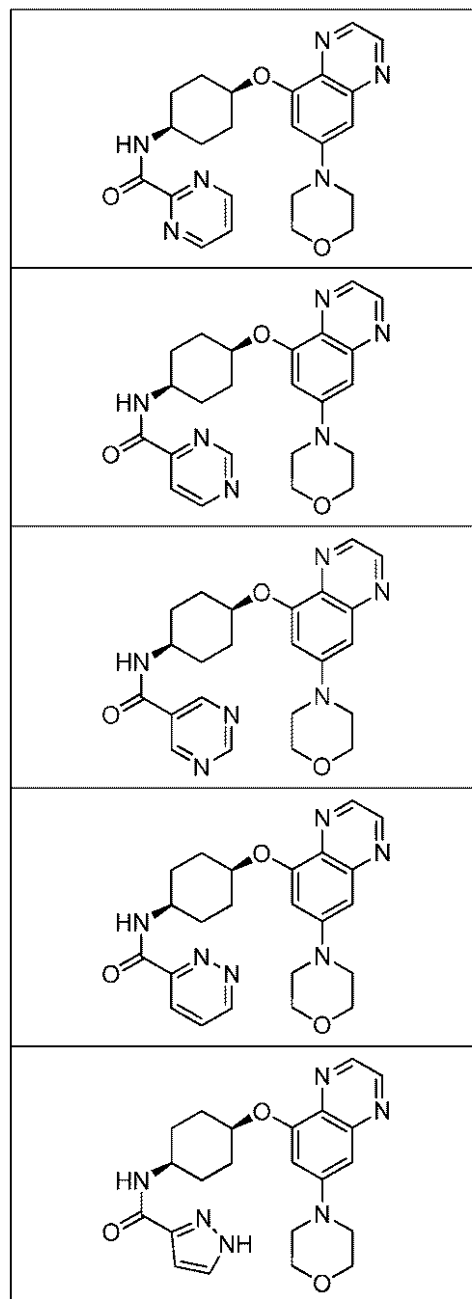
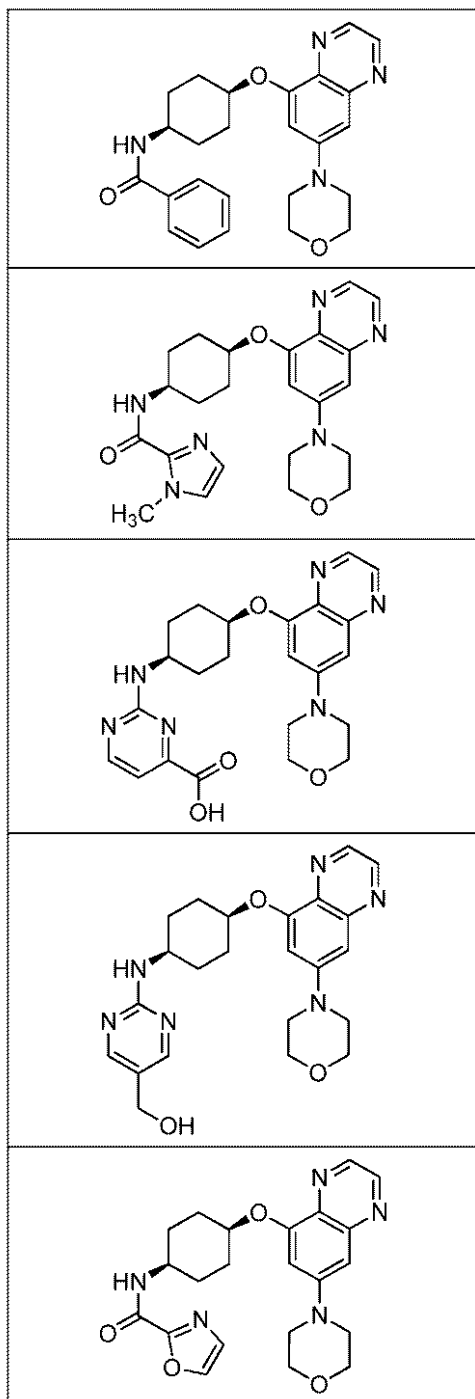


10

20

30

【化 1 6 1】

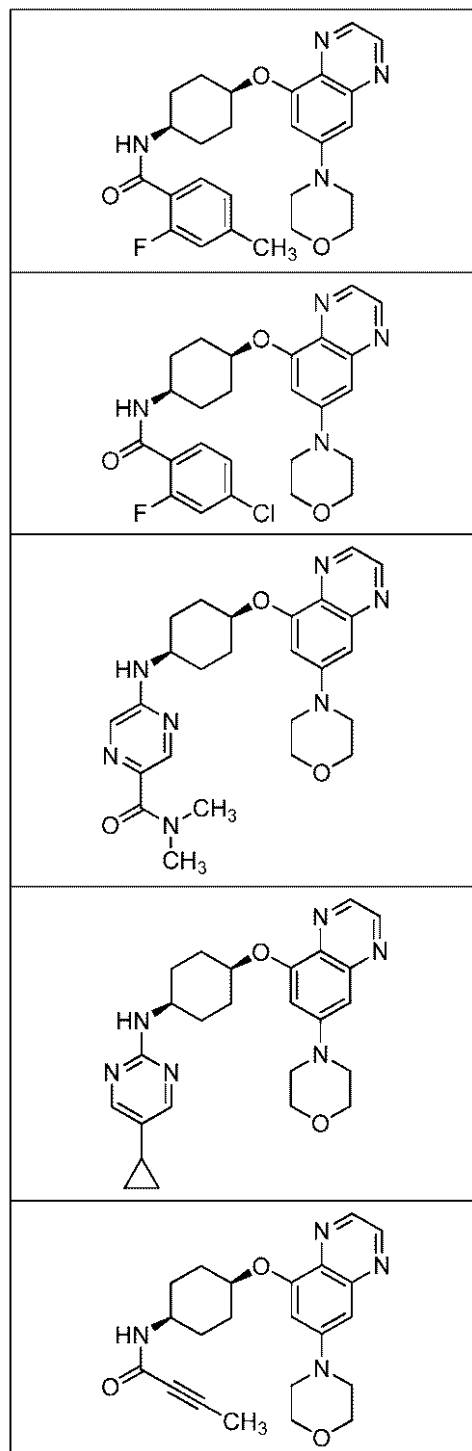
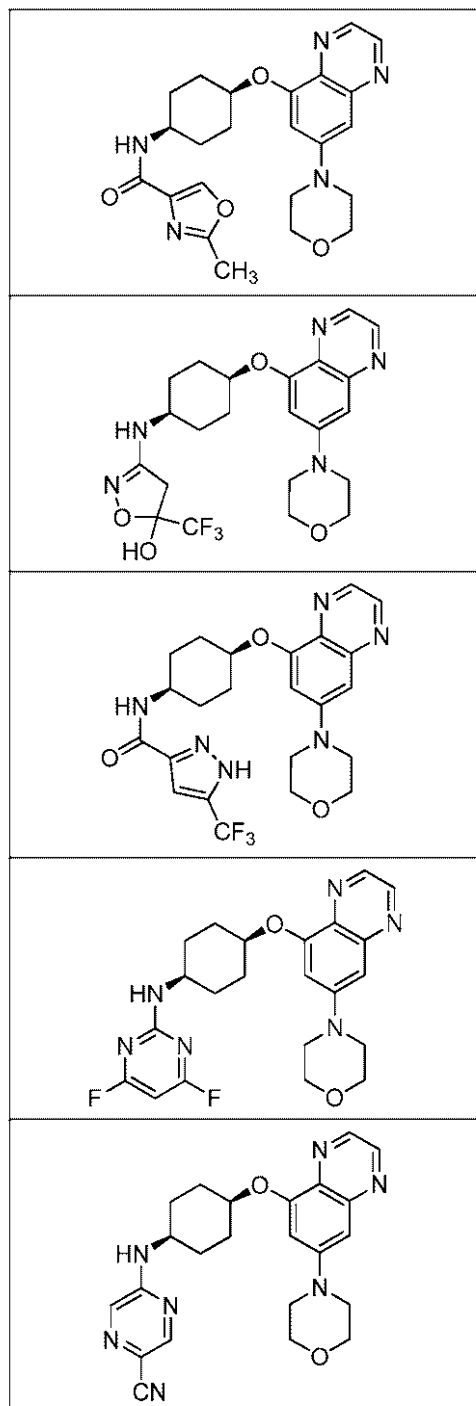


10

20

30

【化 1 6 2】



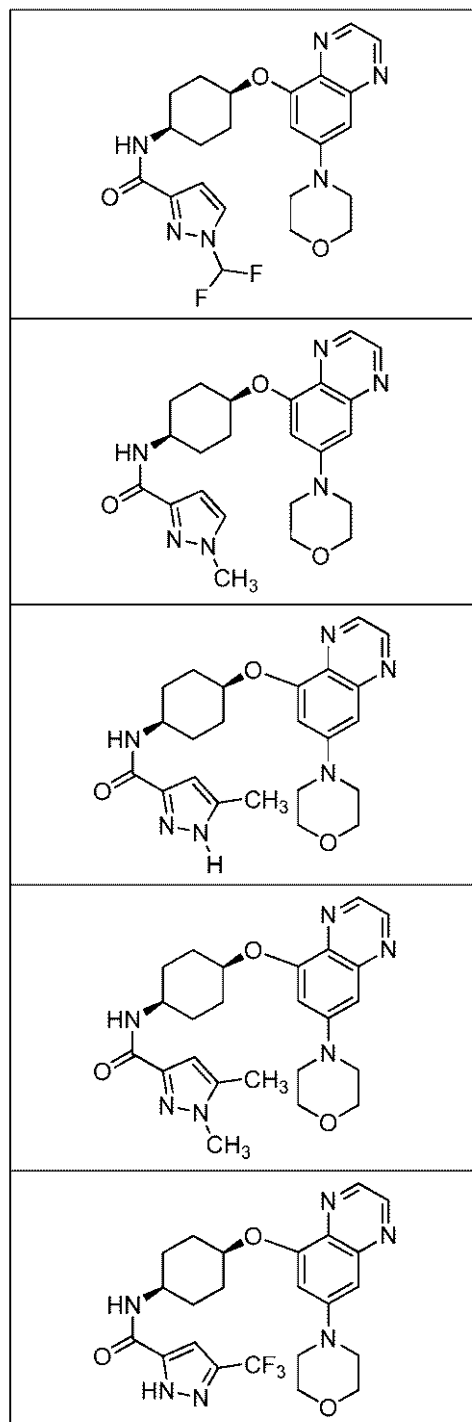
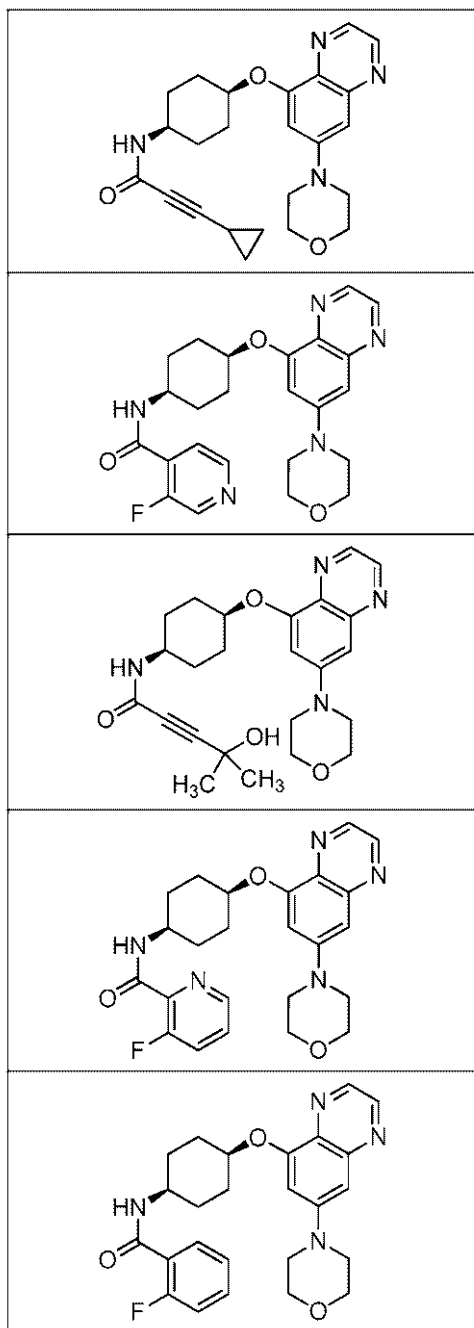
10

20

30

40

【化 1 6 3】

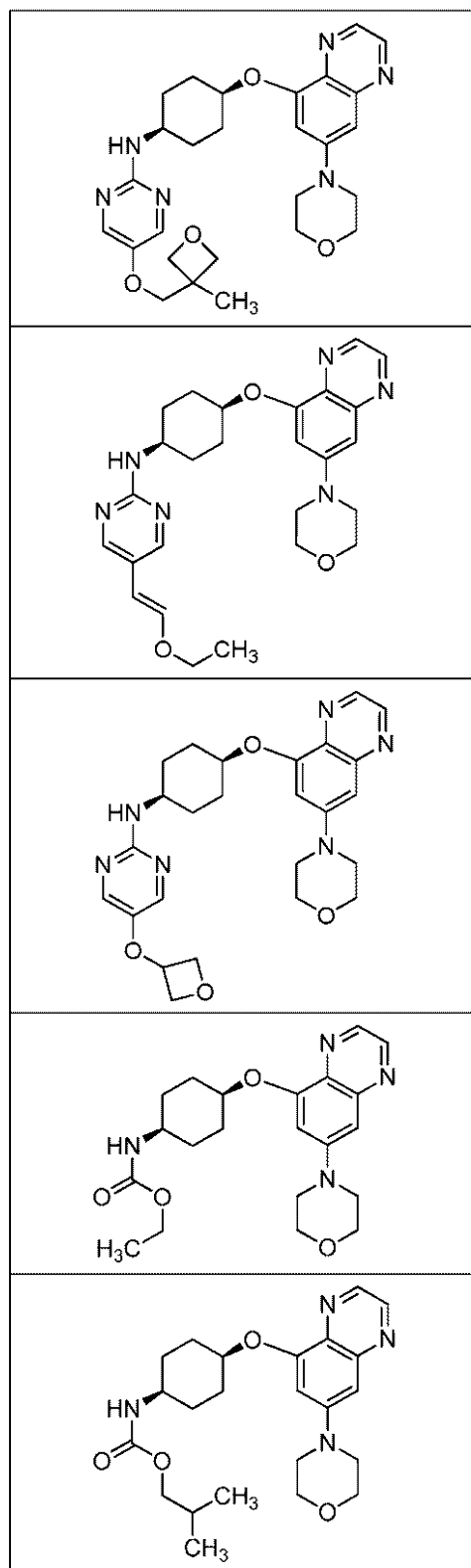
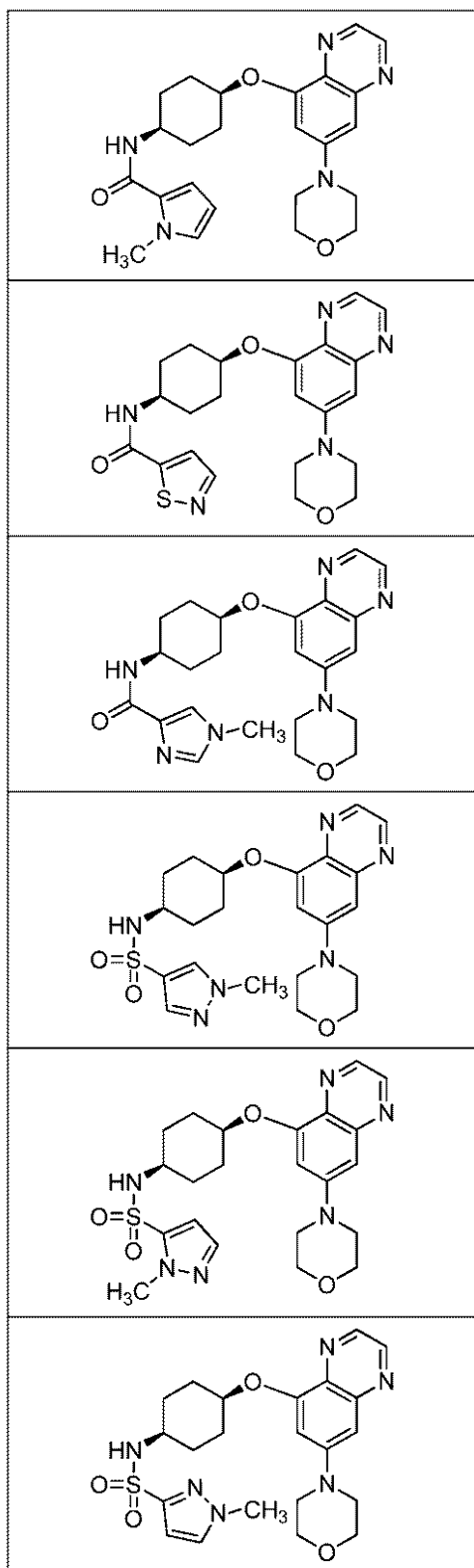


10

20

30

【化 1 6 4】



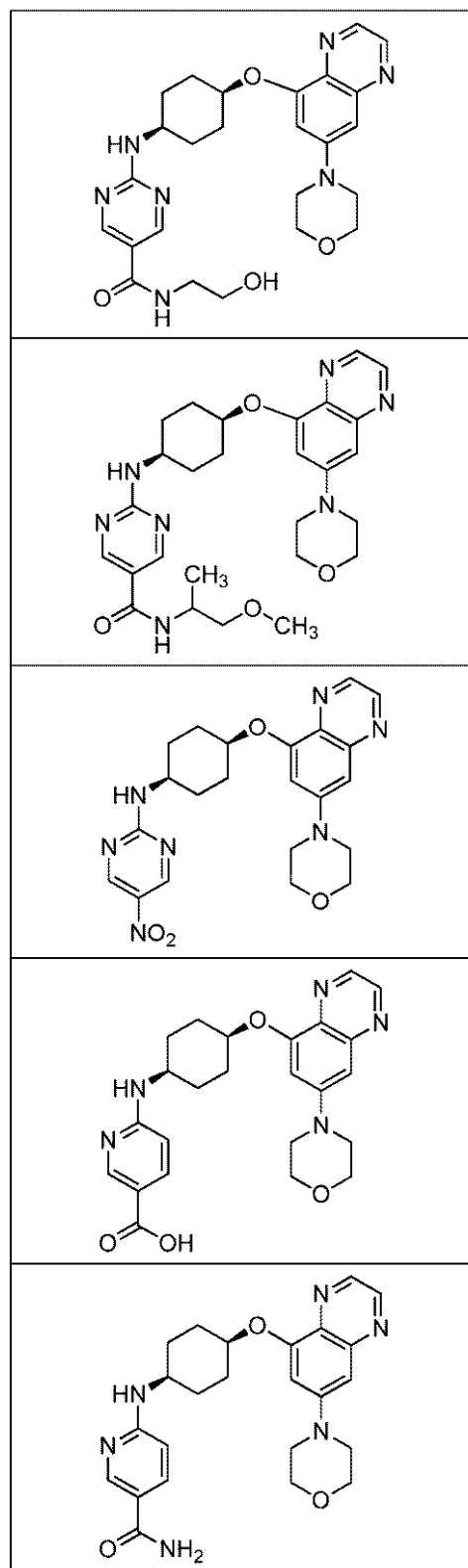
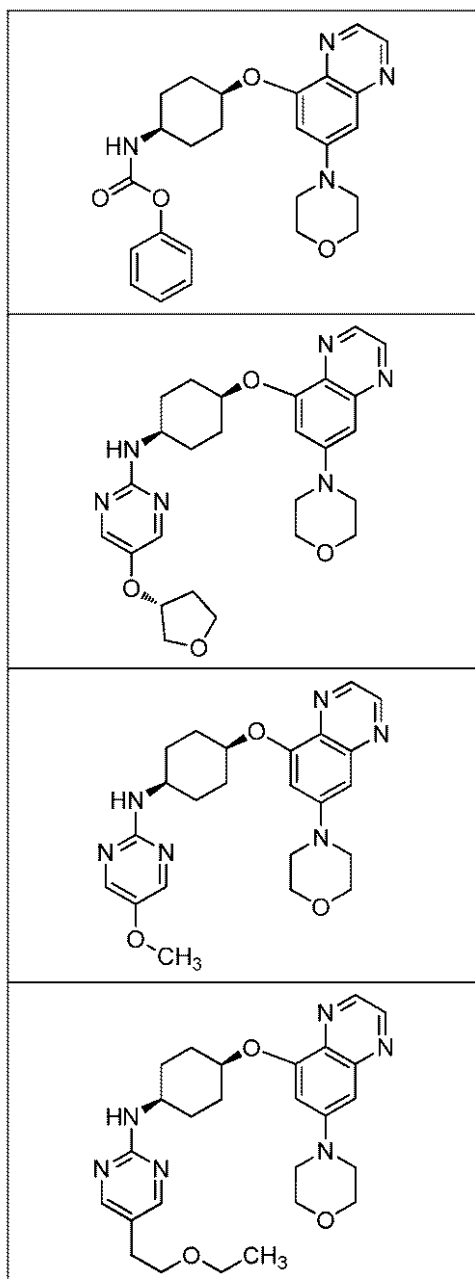
10

20

30

40

【化 1 6 5】



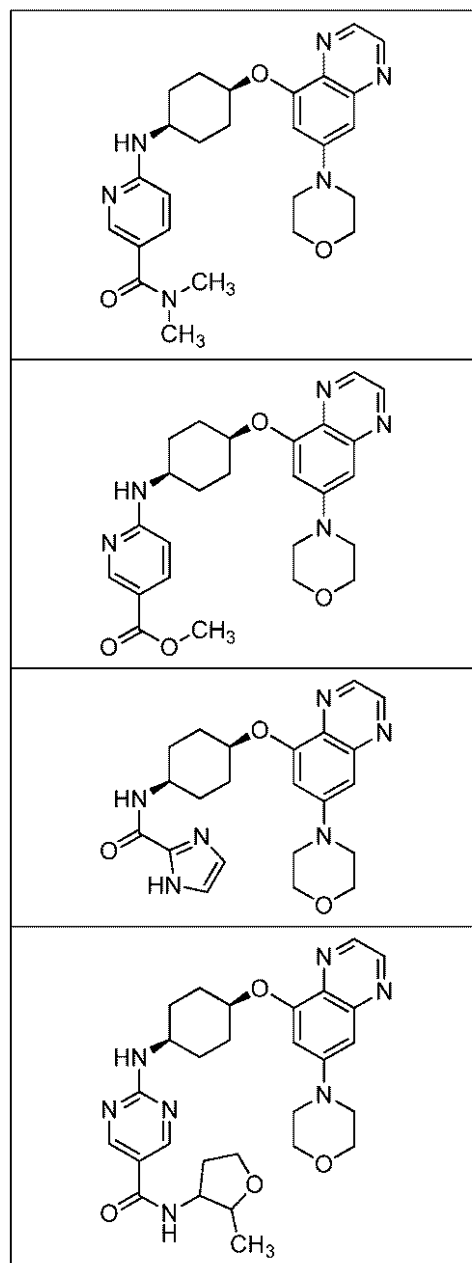
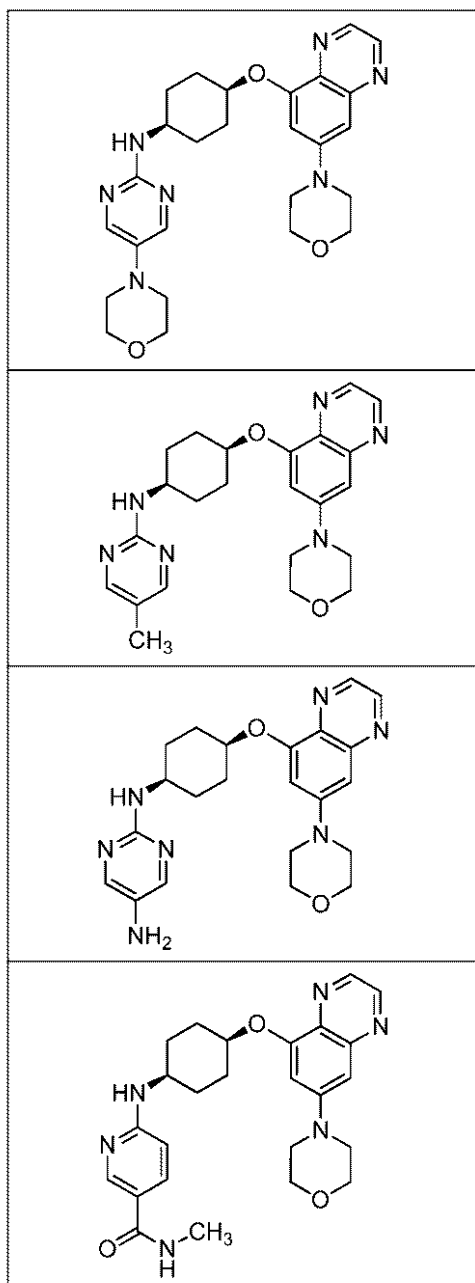
10

20

30

40

【化 1 6 6】

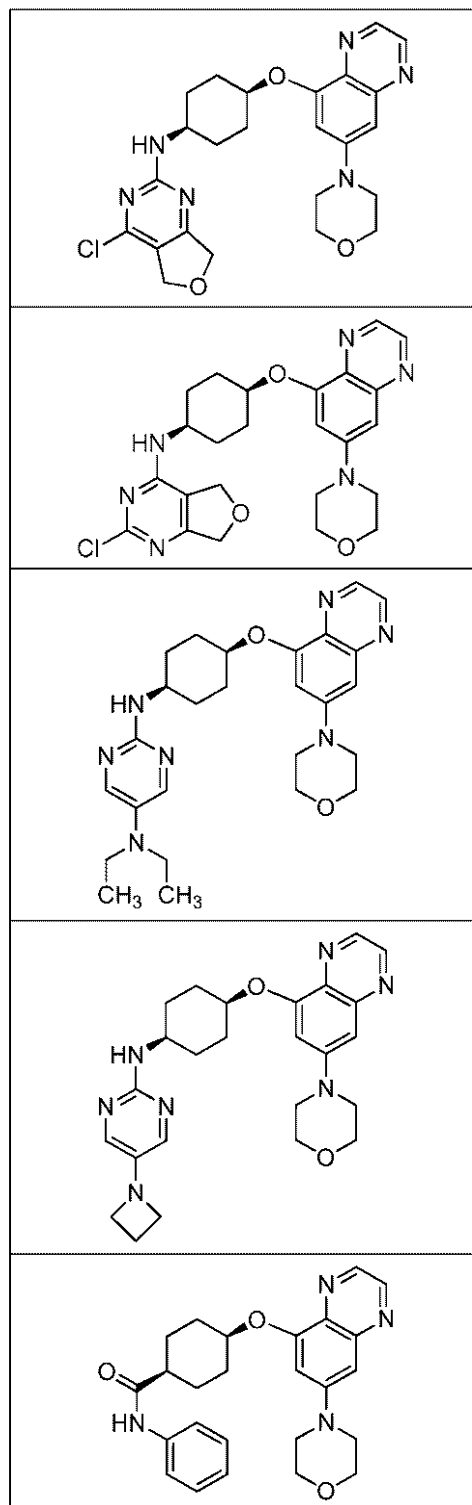
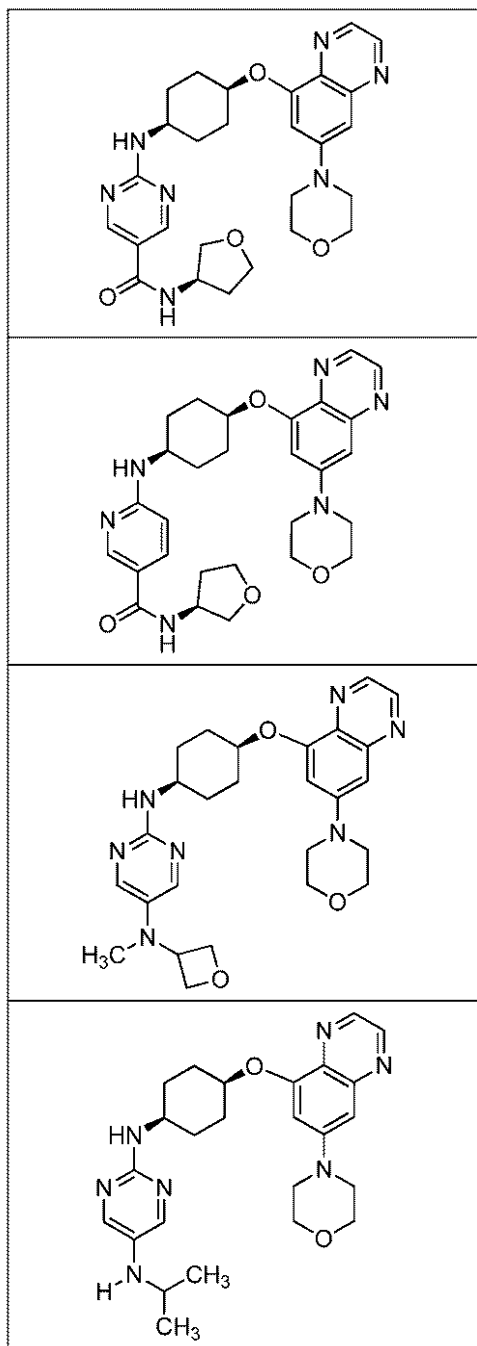


10

20

30

【化 1 6 7】



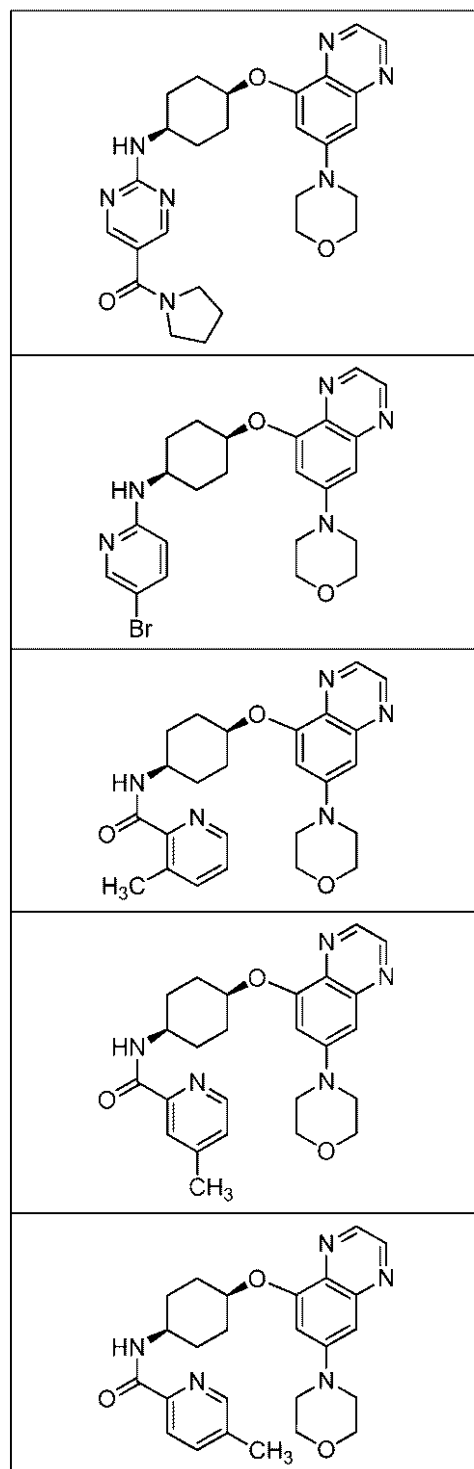
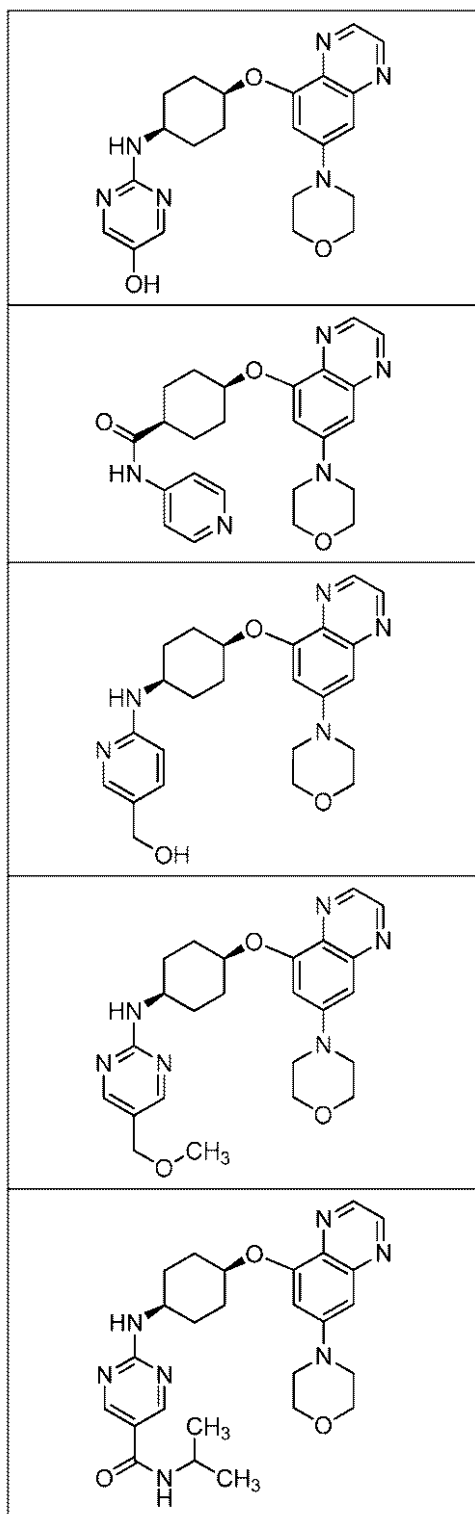
10

20

30

40

【化 1 6 8】



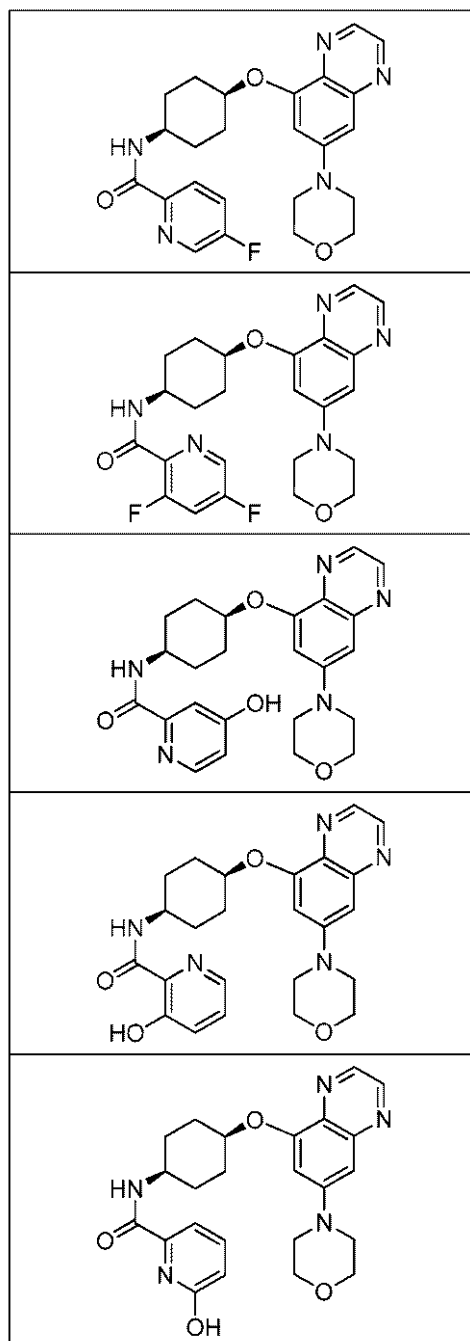
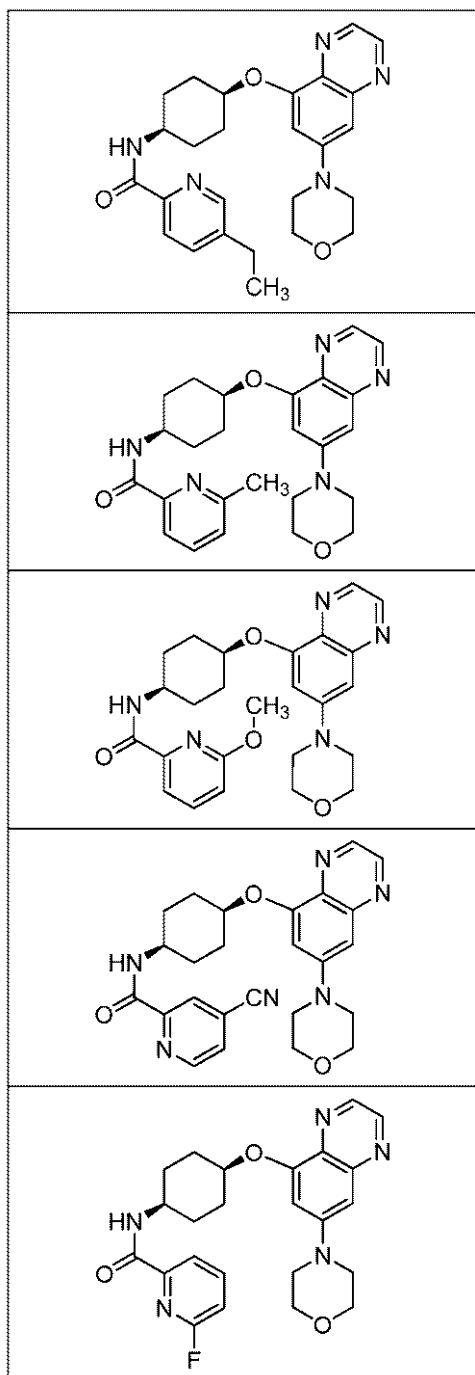
10

20

30

40

【化 1 6 9】

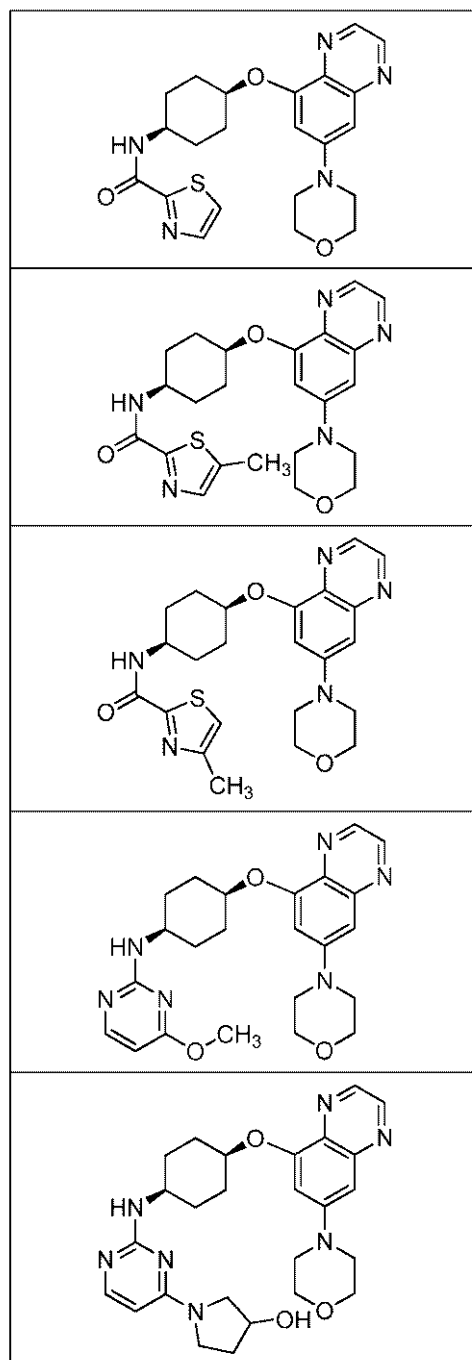
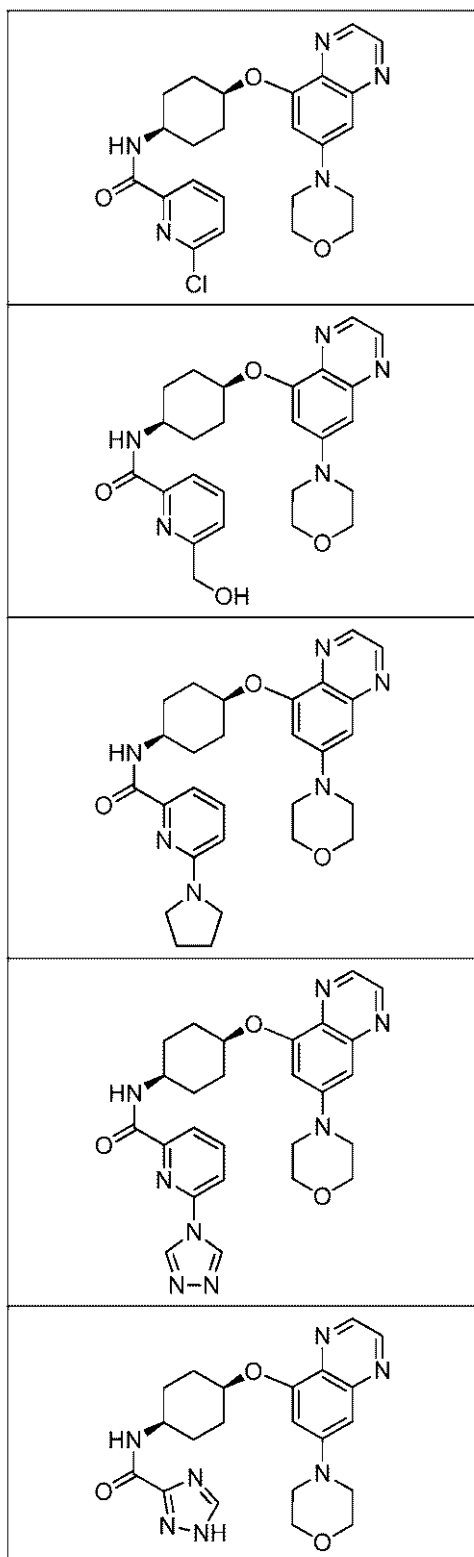


10

20

30

【化 170】



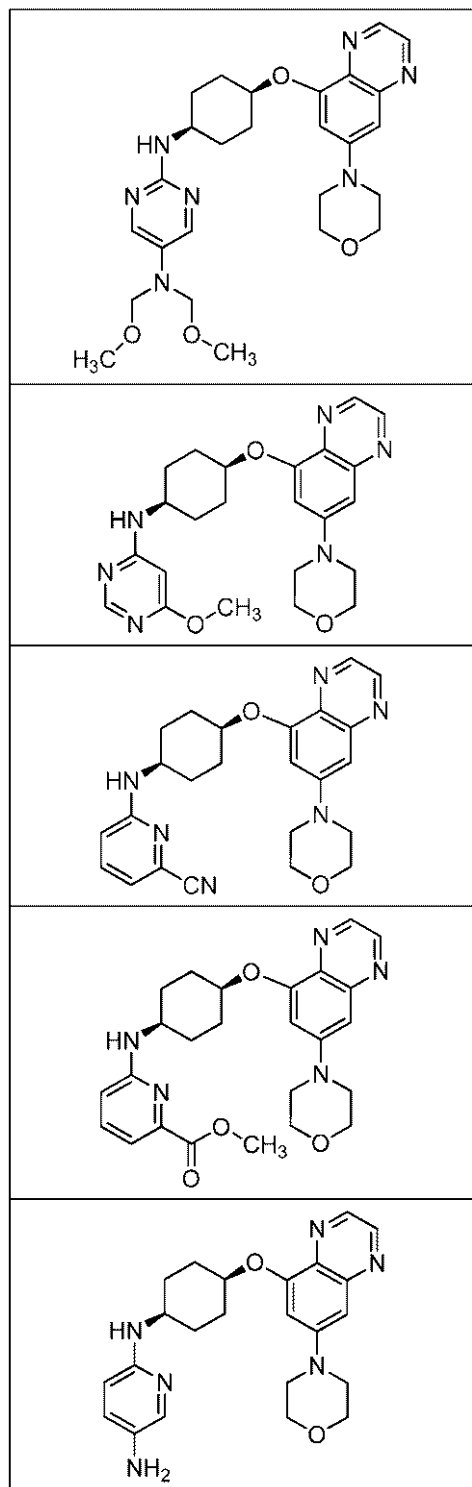
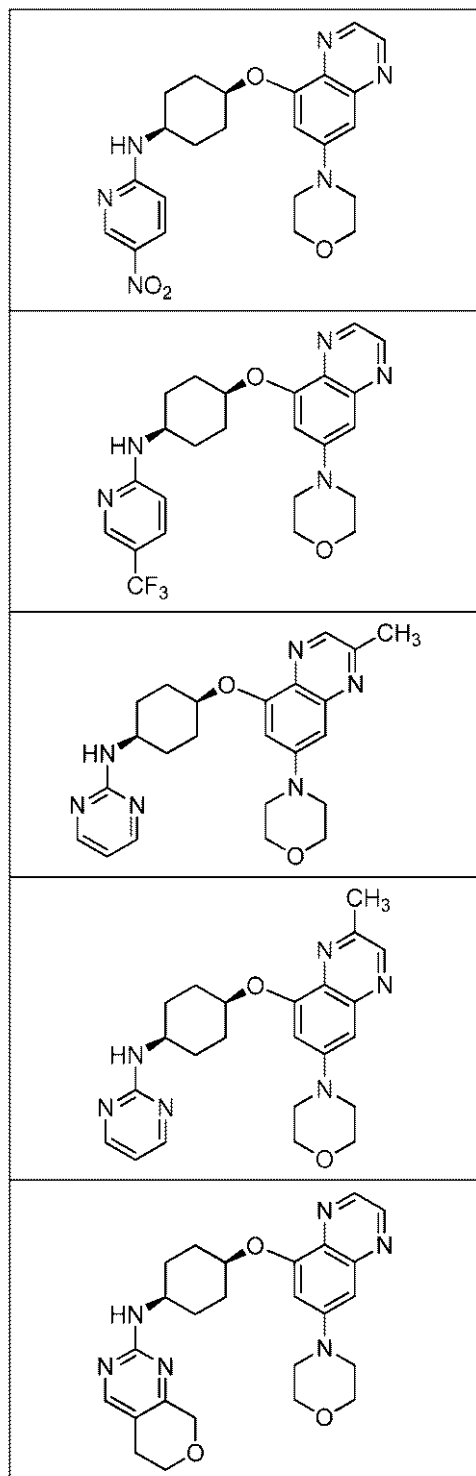
10

20

30

40

【化 1 7 1】



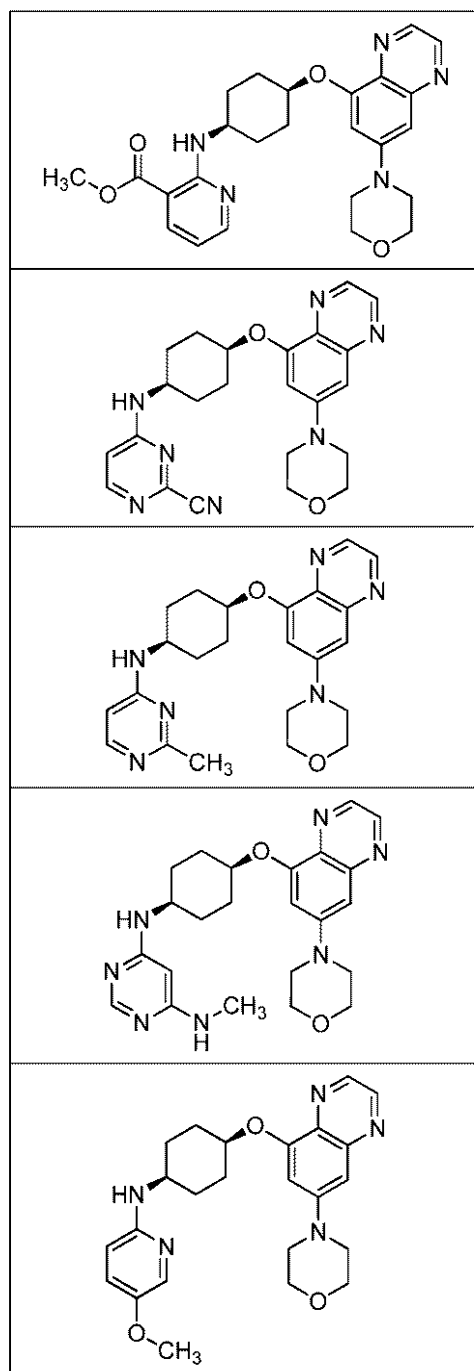
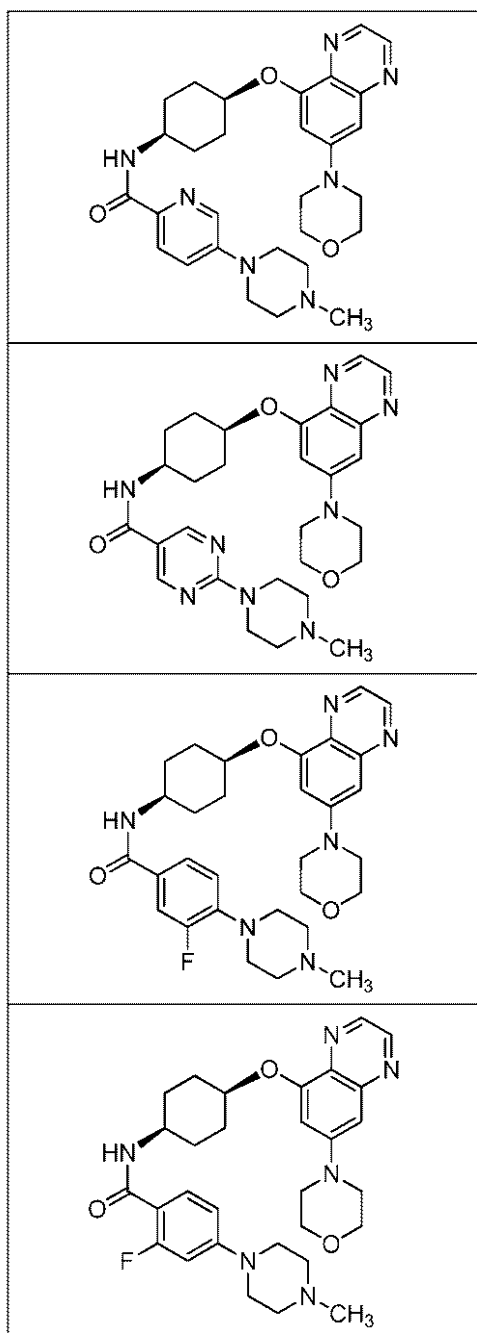
10

20

30

40

【化 1 7 2】

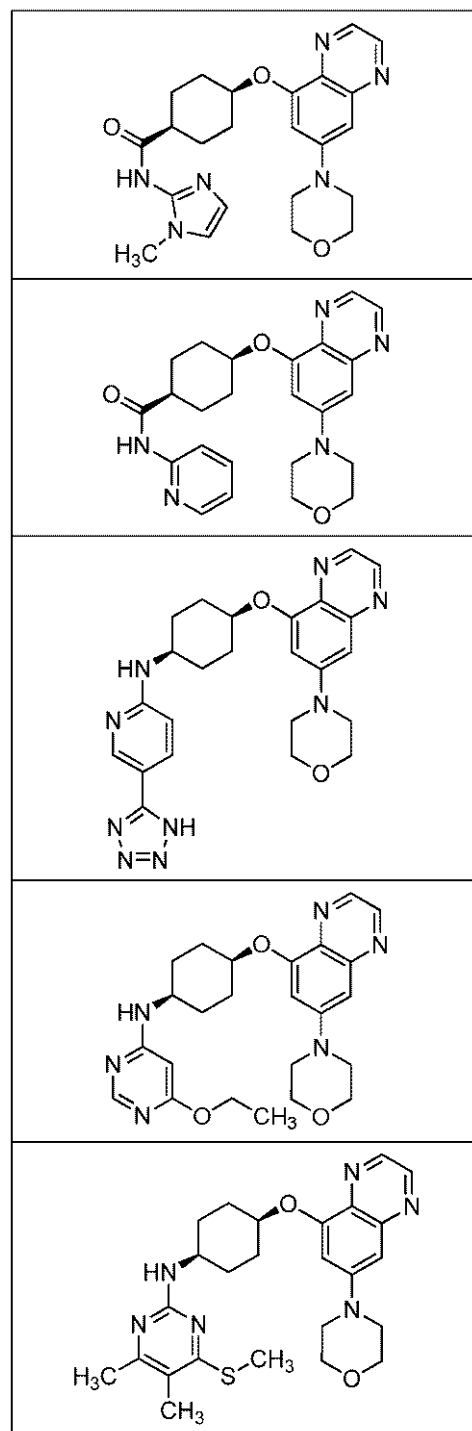
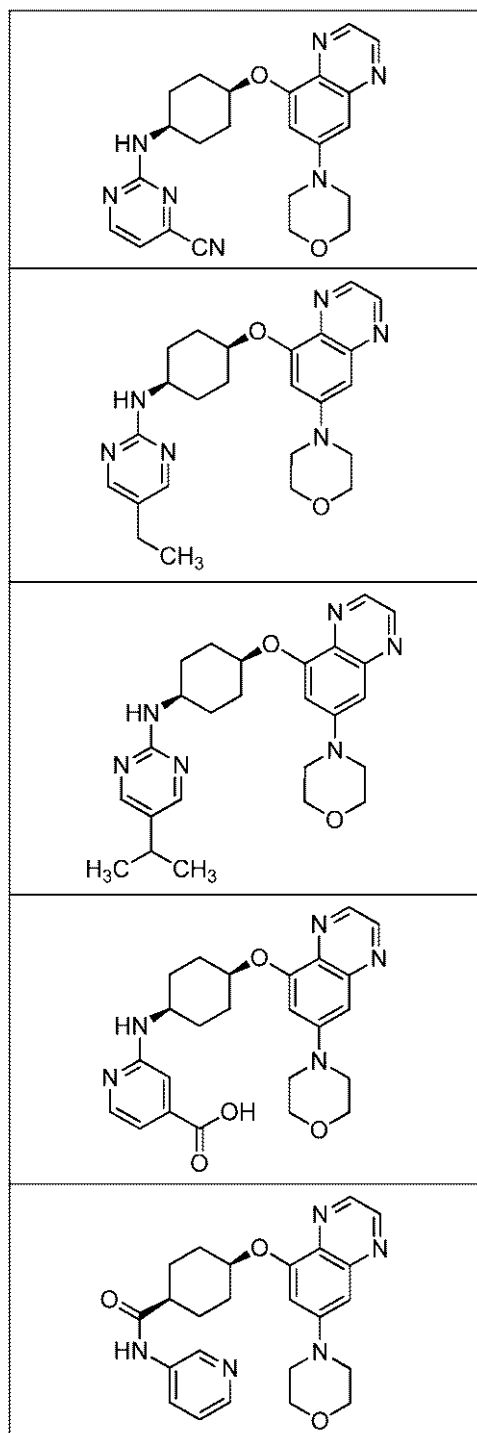


10

20

30

【化 1 7 3】

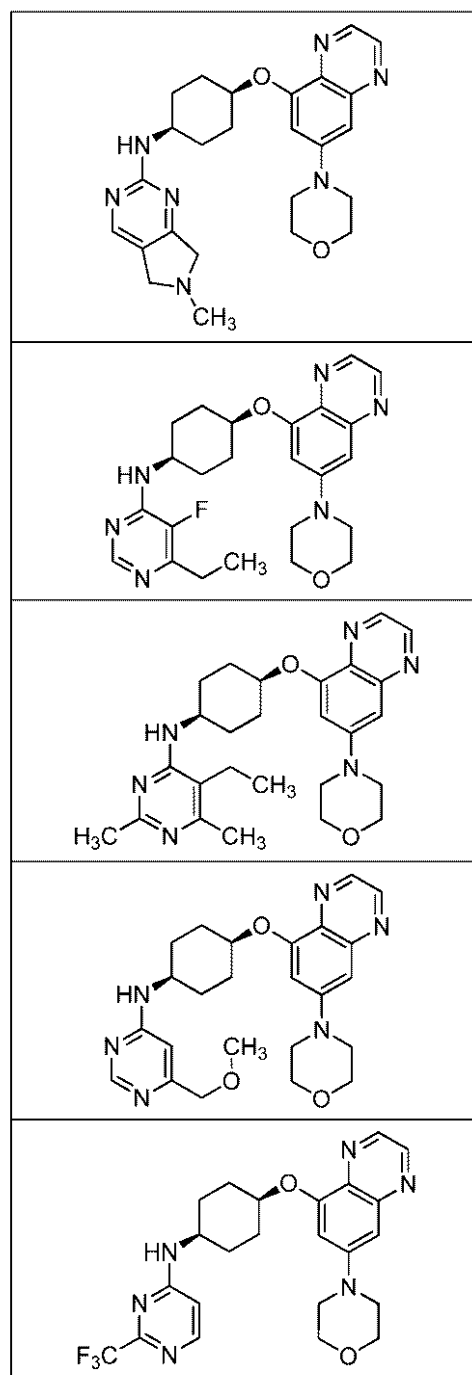
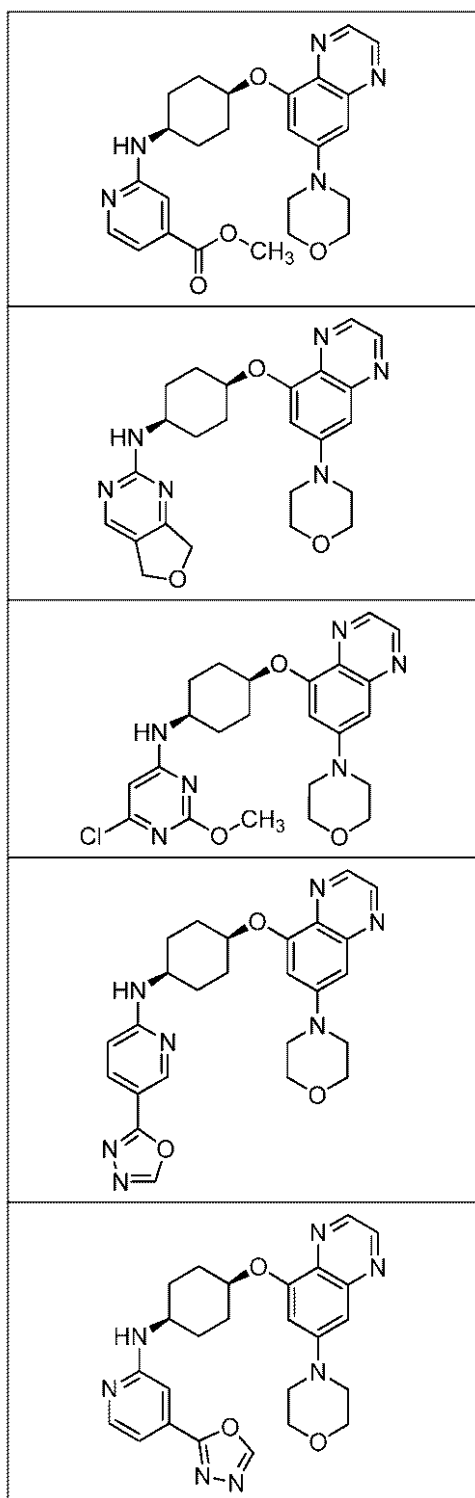


10

20

30

【化 1 7 4】



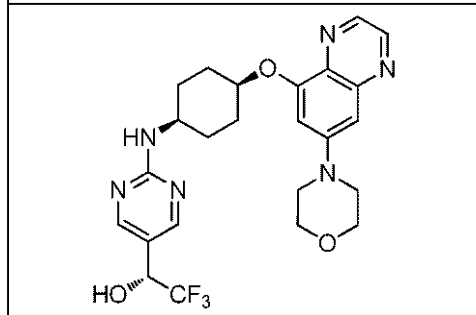
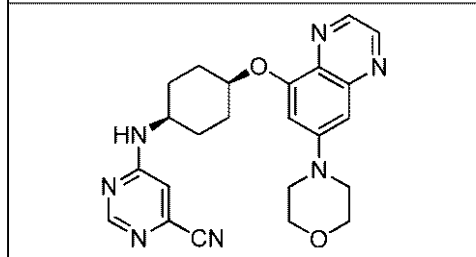
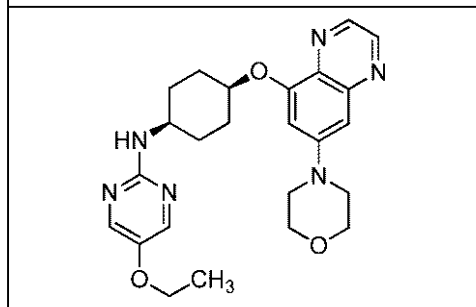
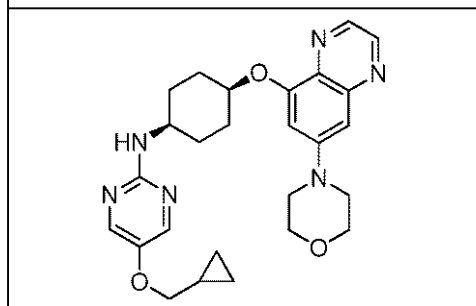
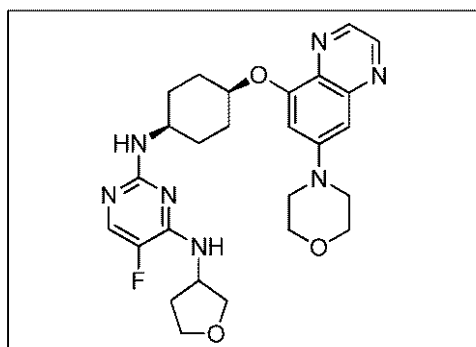
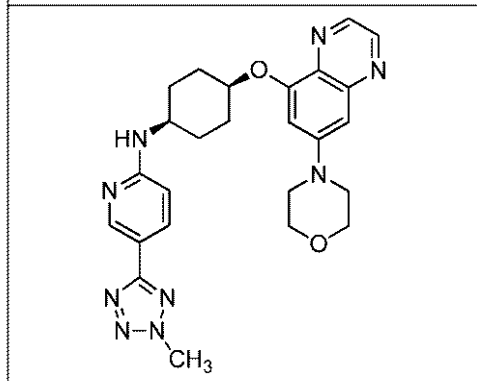
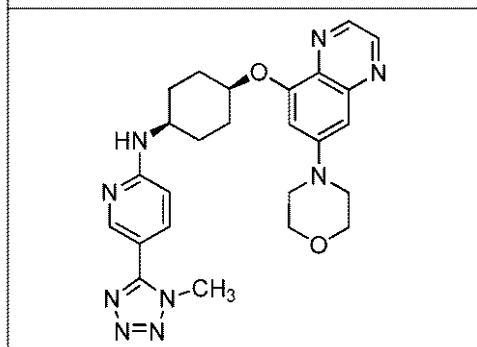
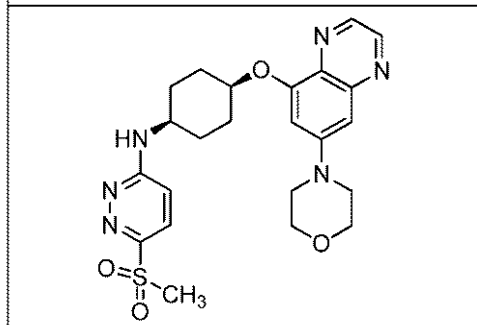
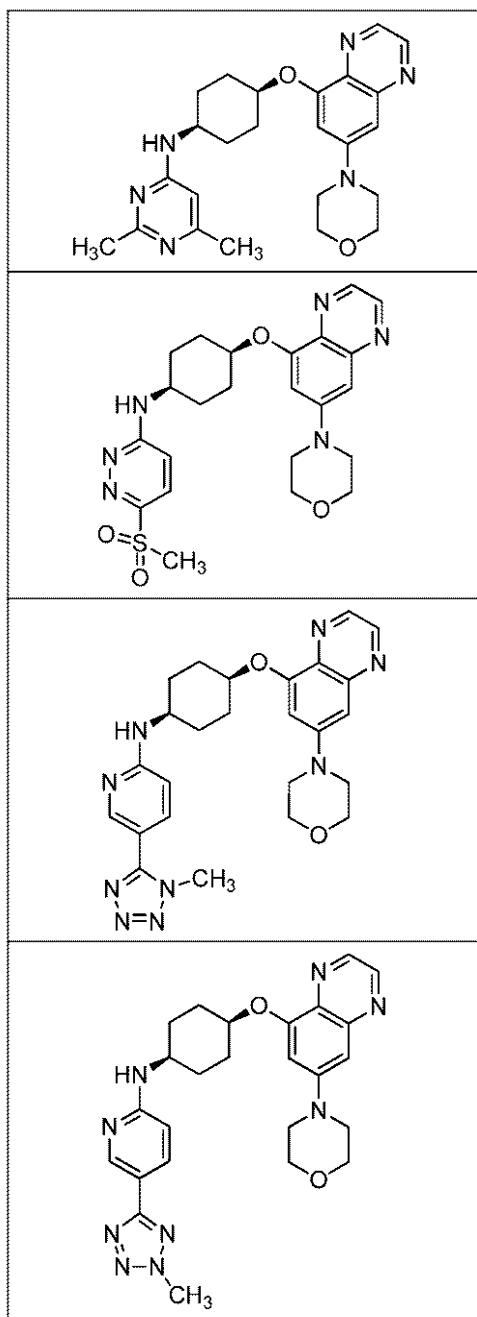
10

20

30

40

【化 1 7 5】



10

20

30

40

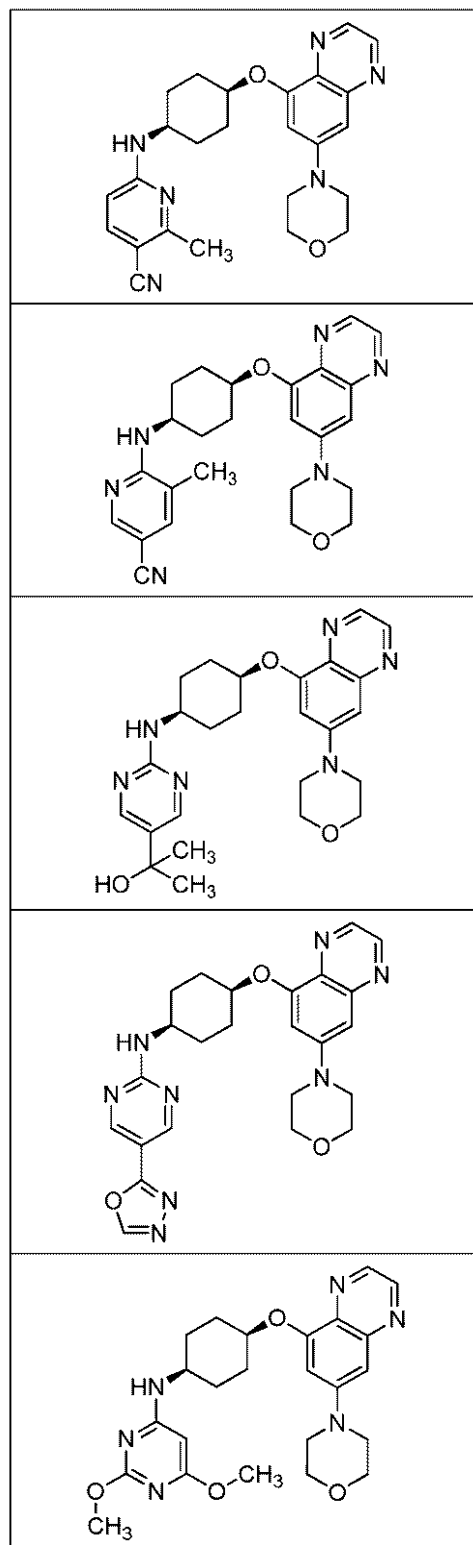
Chemical structures of four compounds (1-4) showing a 4-morpholinyl-2-quinazolinyl ether linked to a cyclohexyl ring, which is further linked to a pyrimidin-2-yl ring. The cyclohexyl ring also has a substituent at the 1-position.

Compound 1: 2-hydroxy-2-(trifluoromethyl)ethyl group.

Compound 2: 2-hydroxypropyl group.

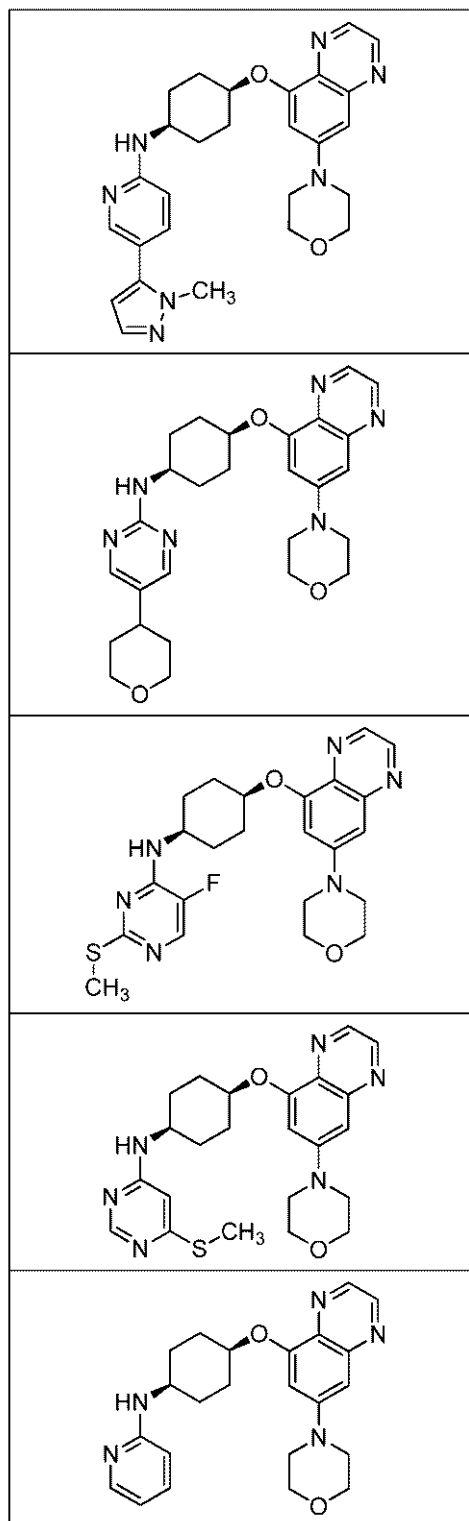
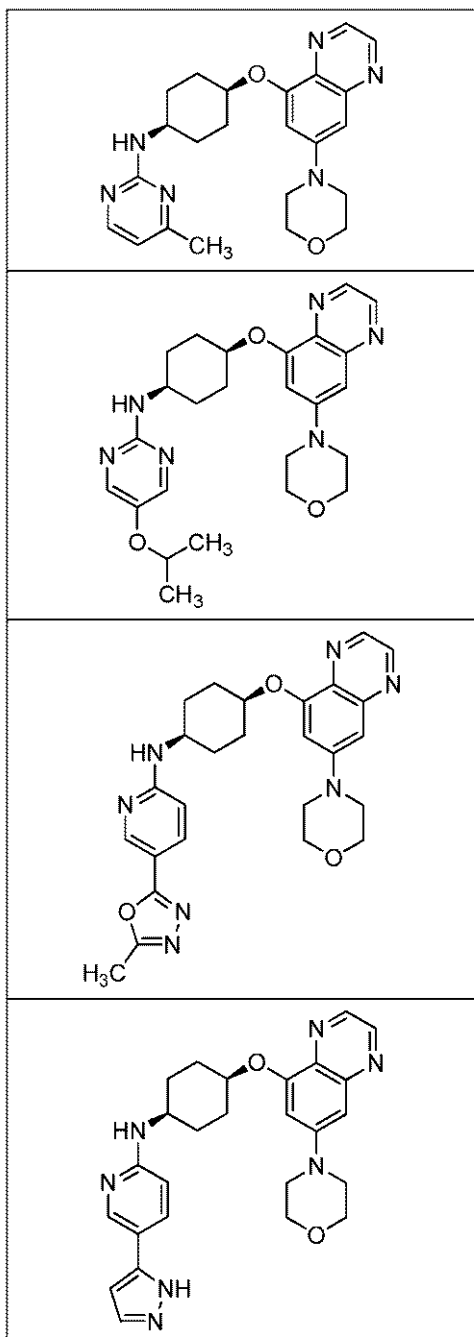
Compound 3: 2-oxaspiro[3.3]hept-2-ylmethyl group.

Compound 4: 2-oxaspiro[3.3]hept-2-ylmethyl group.

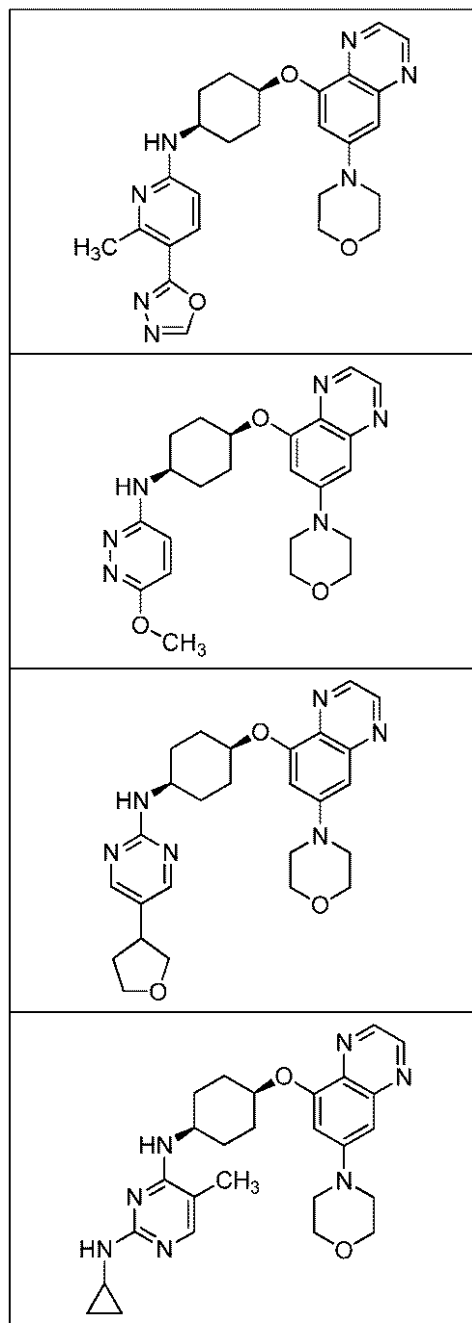
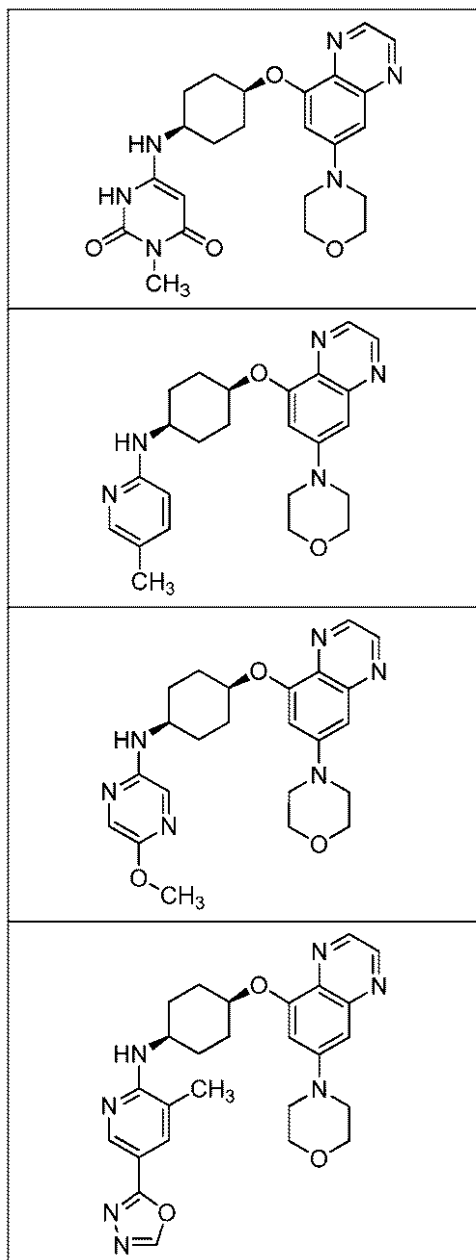


40

【化 177】



【化 1 7 8】

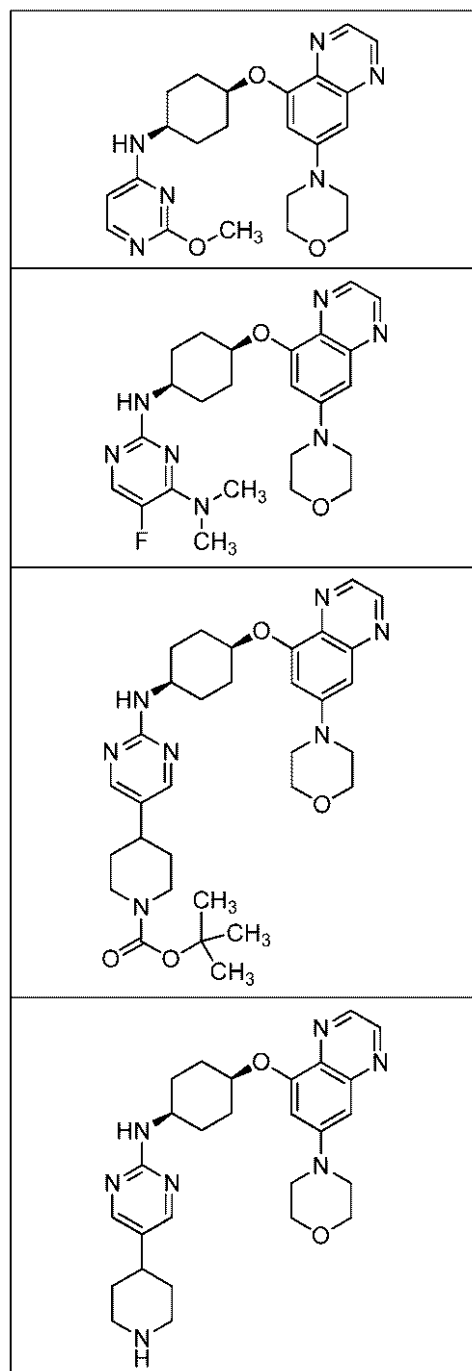
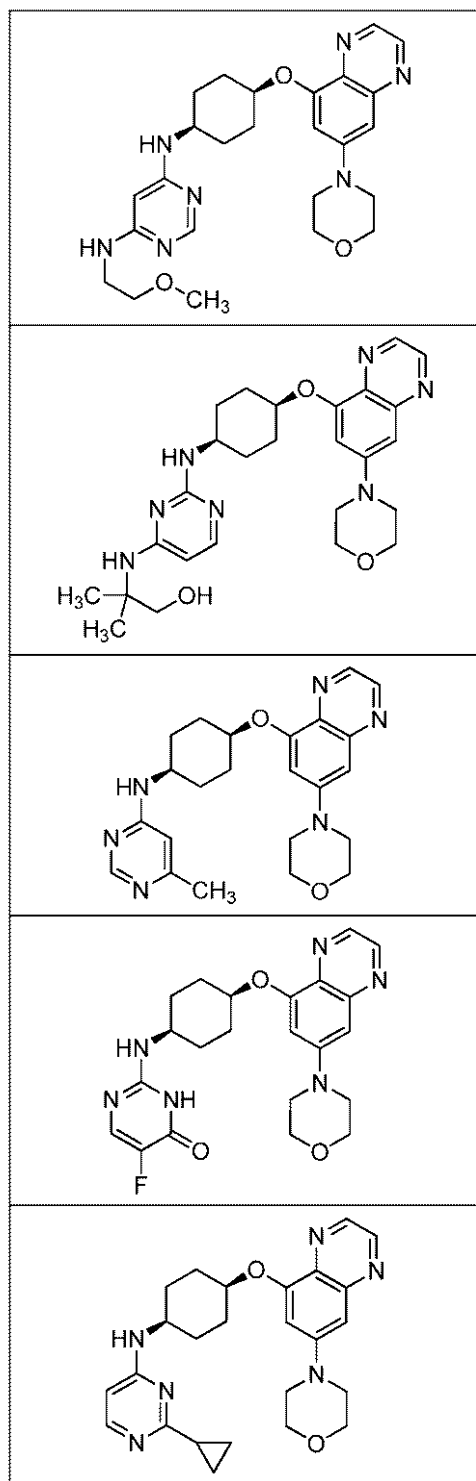


10

20

30

【化 1 7 9】



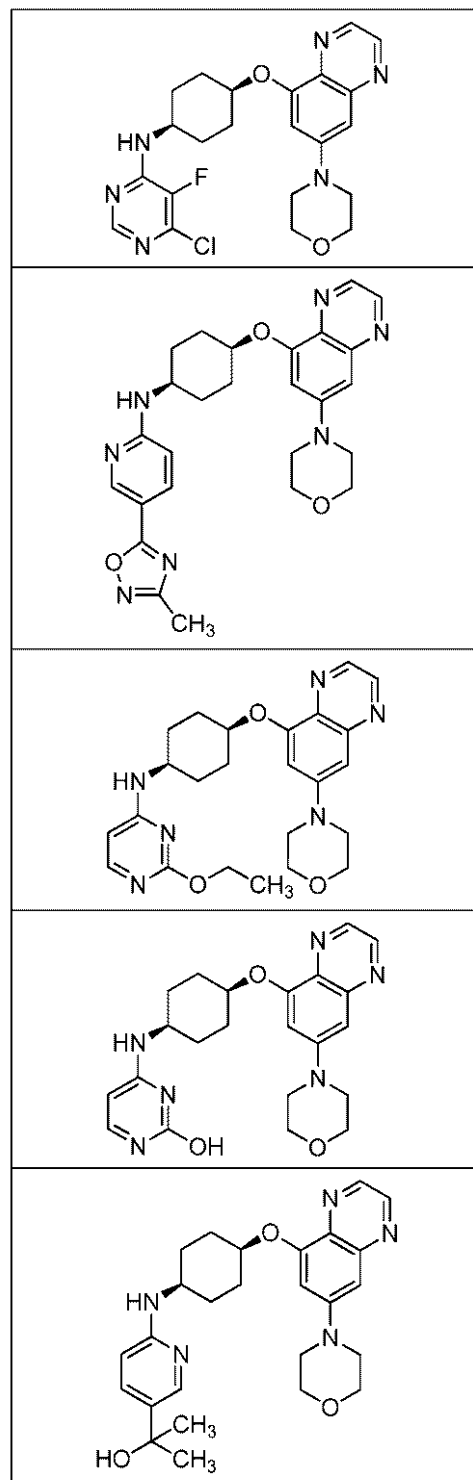
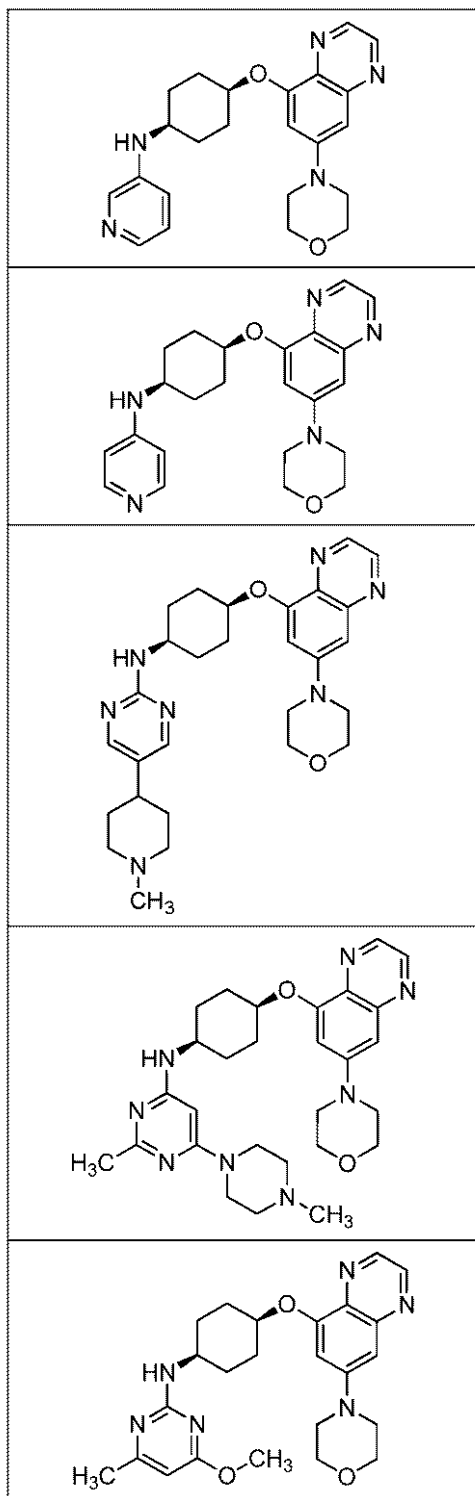
10

20

30

40

【化 180】



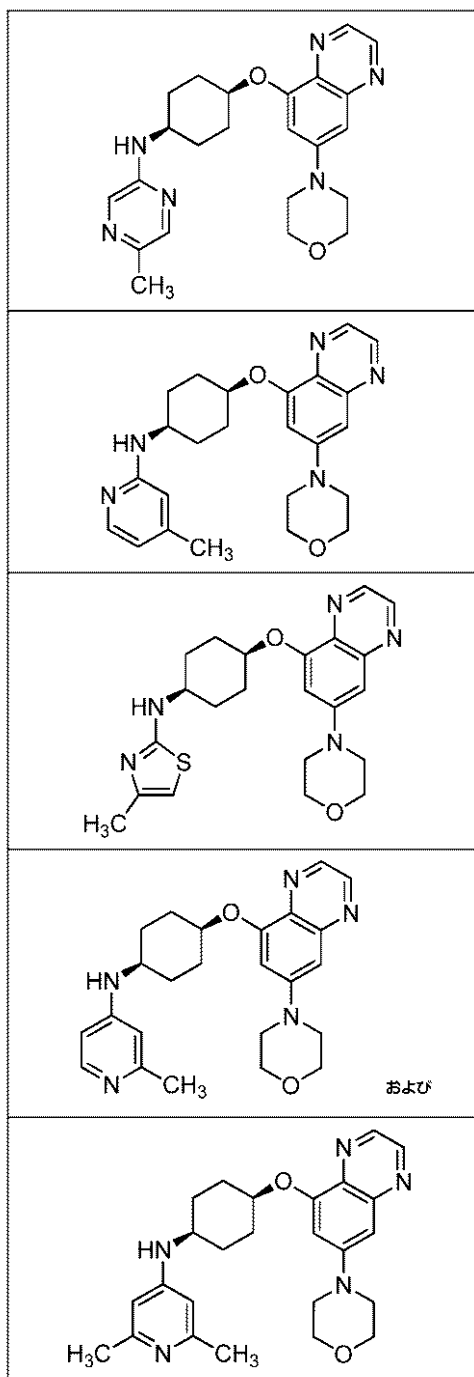
10

20

30

40

【化 1 8 1】



からなる群から選択される化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 6 0】

以下：

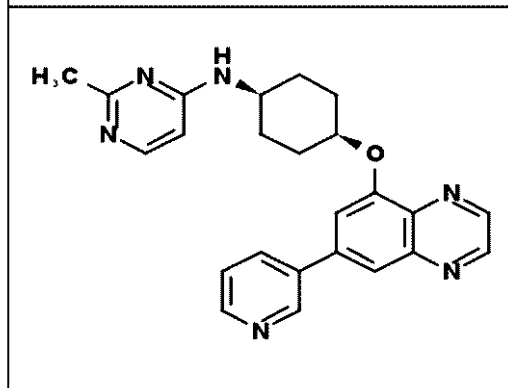
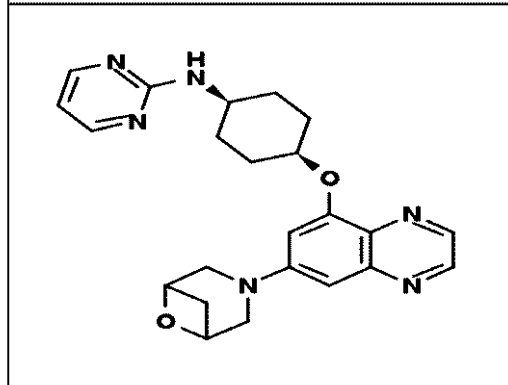
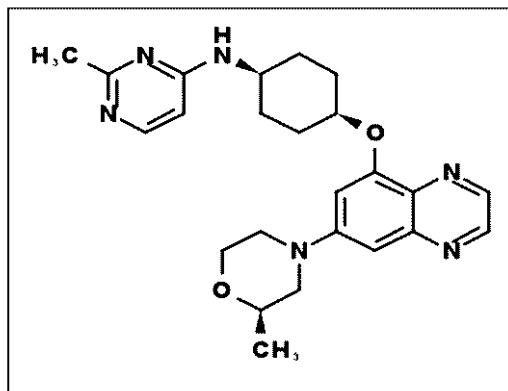
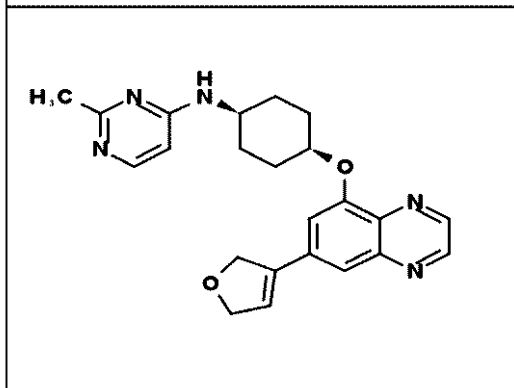
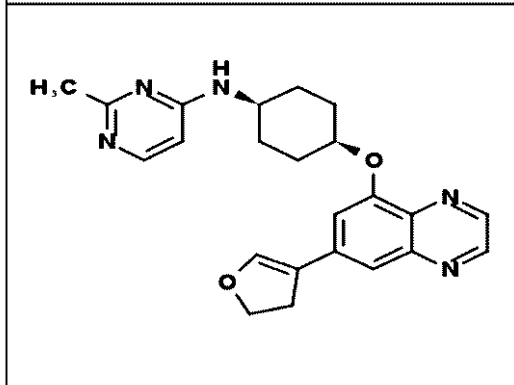
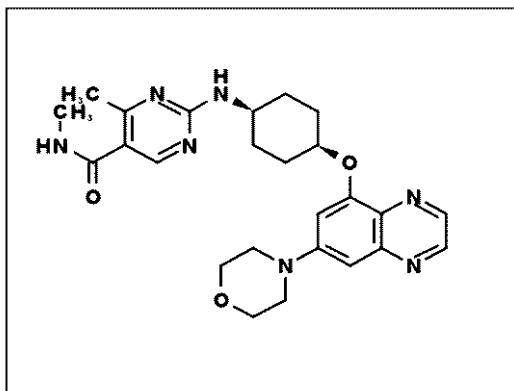
10

20

30

40

【化 1 8 2】

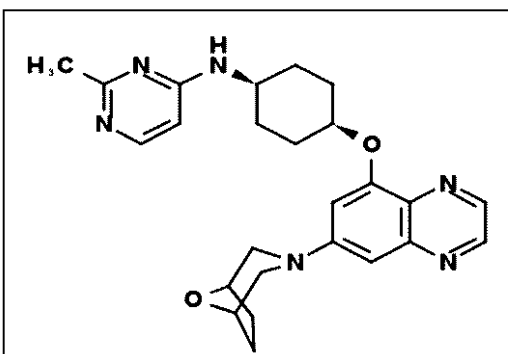
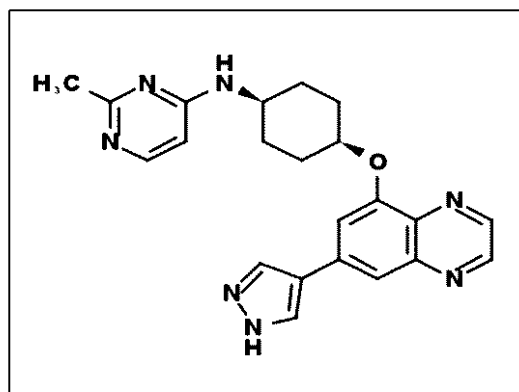


10

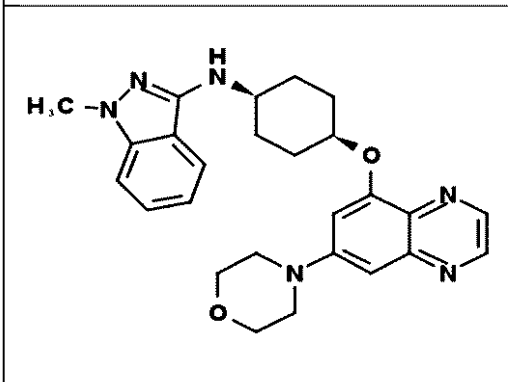
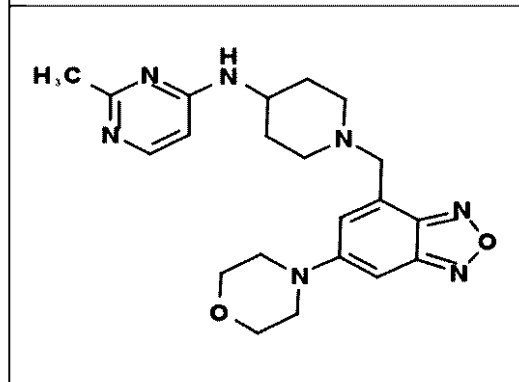
20

30

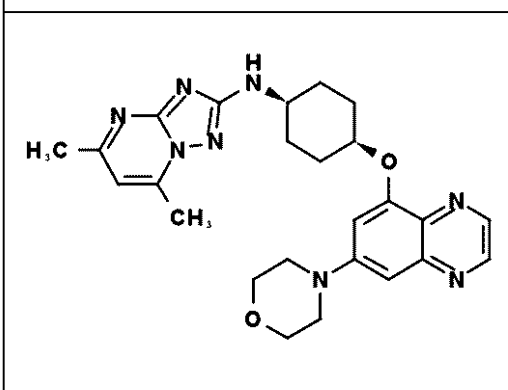
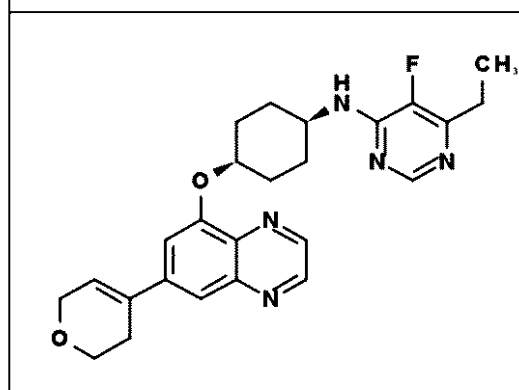
【化 1 8 3】



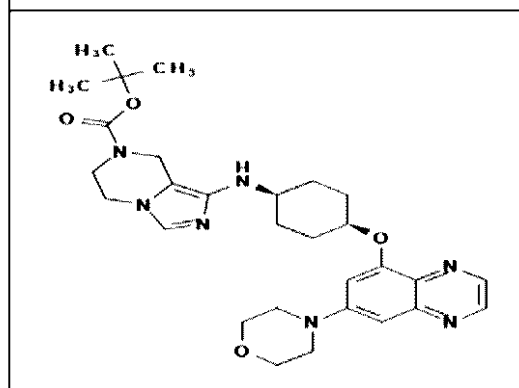
10



20

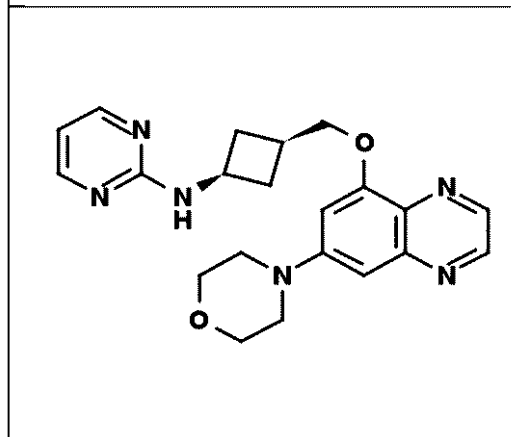
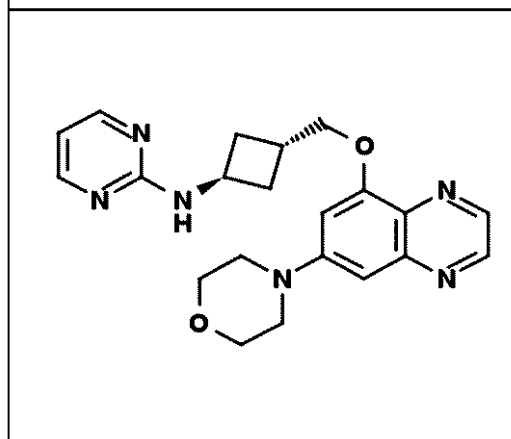
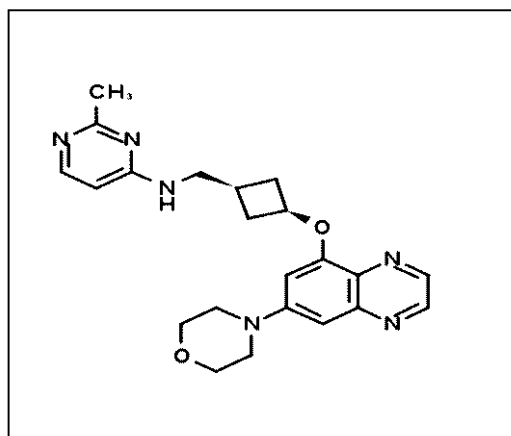
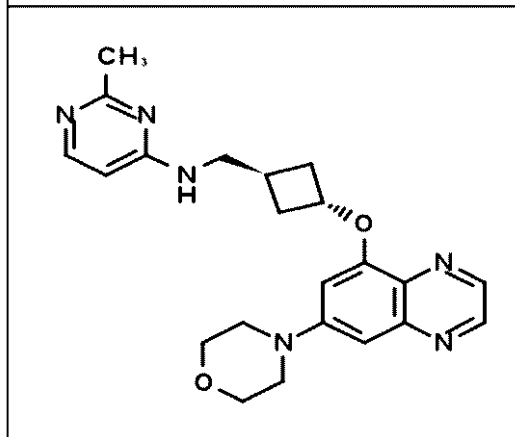
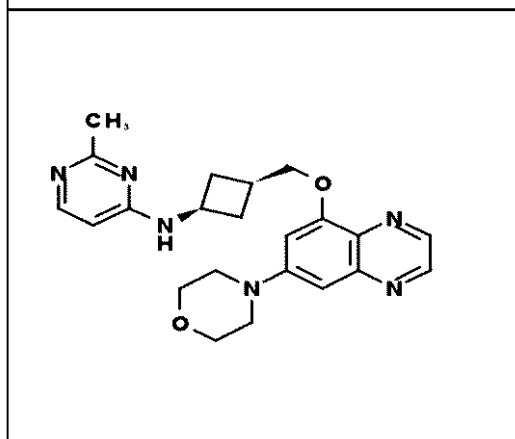
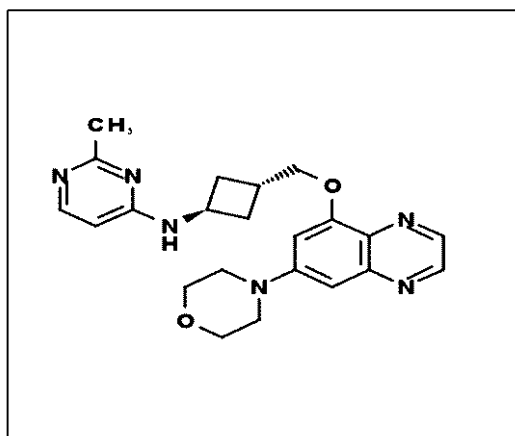


30



40

【化 1 8 4】

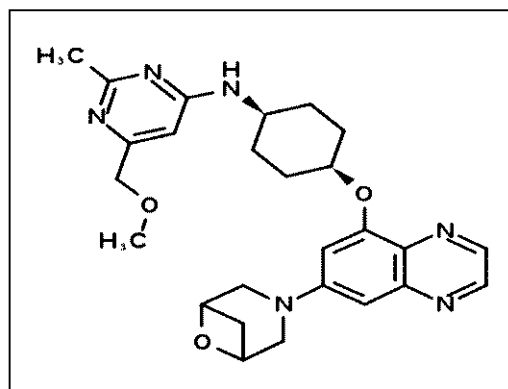
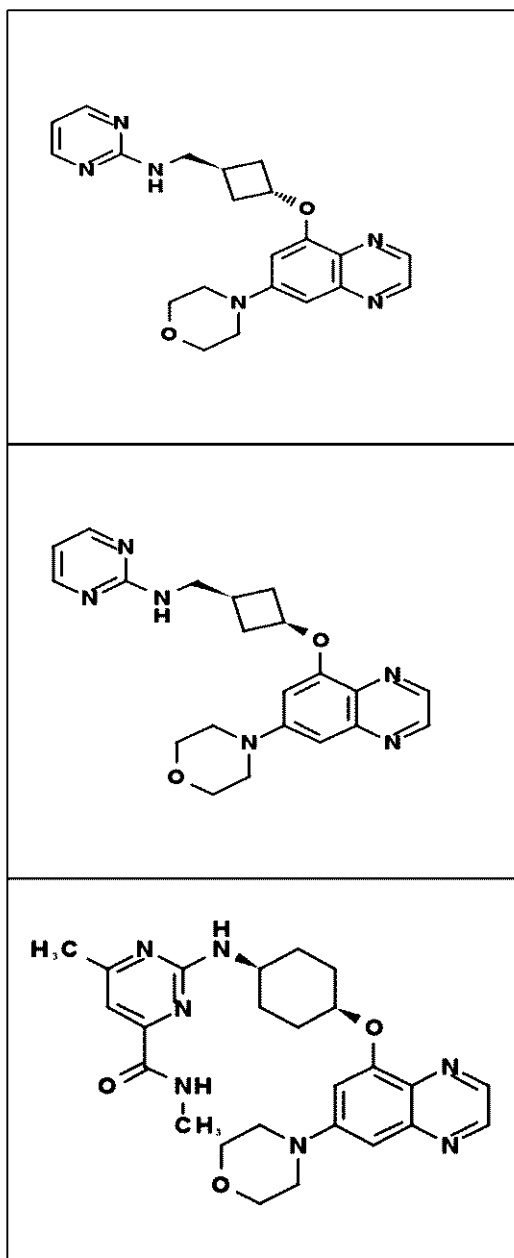


10

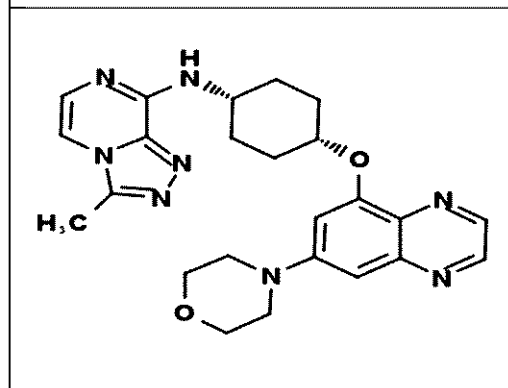
20

30

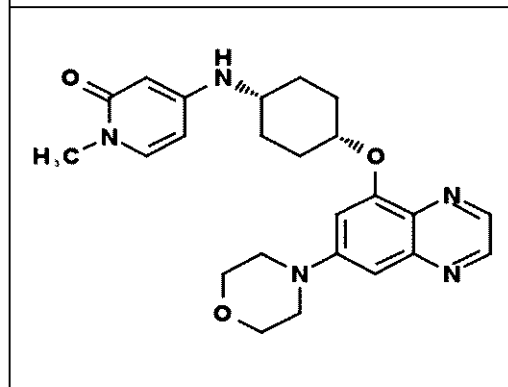
【化 1 8 5】



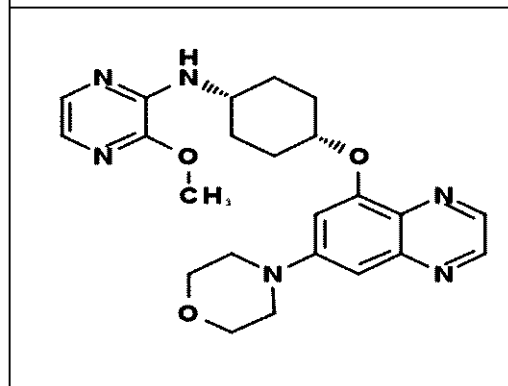
10



20

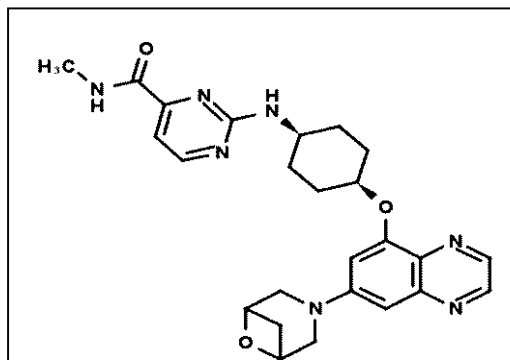
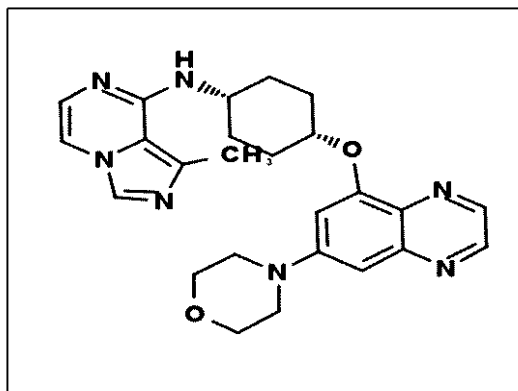


30

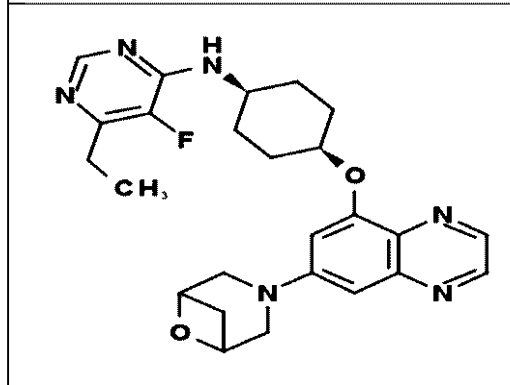
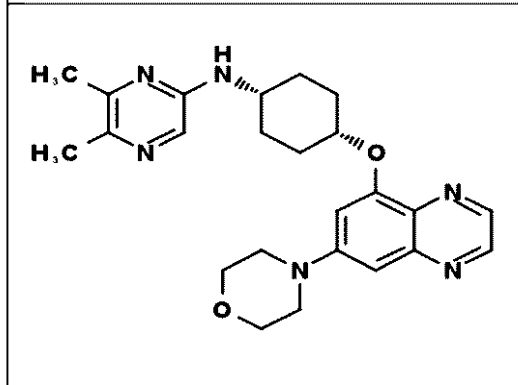


40

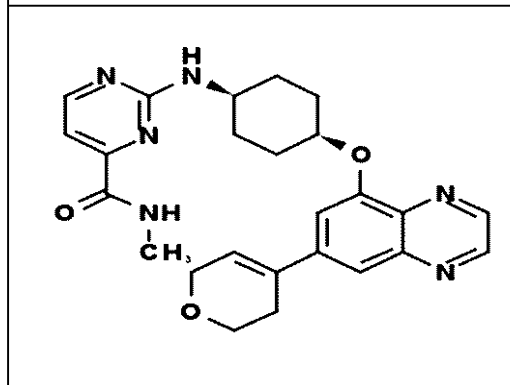
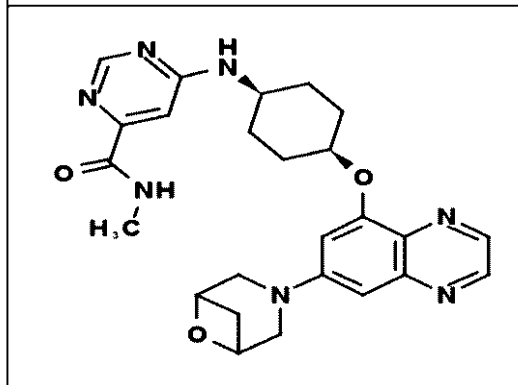
【化 1 8 6】



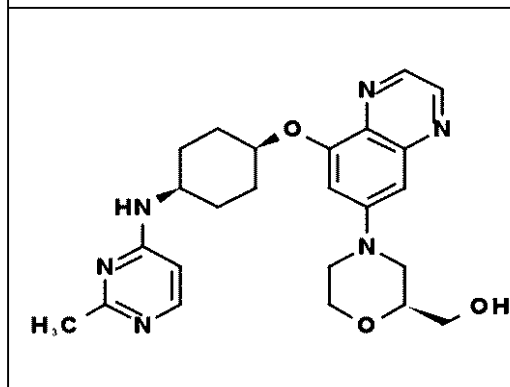
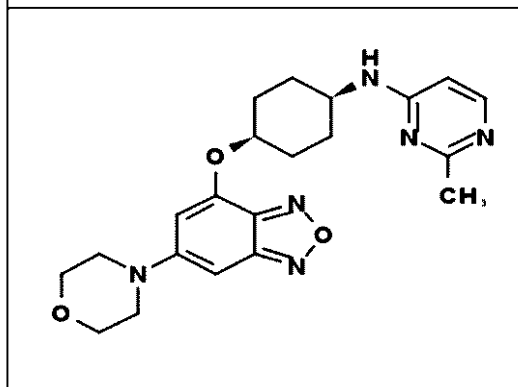
10



20

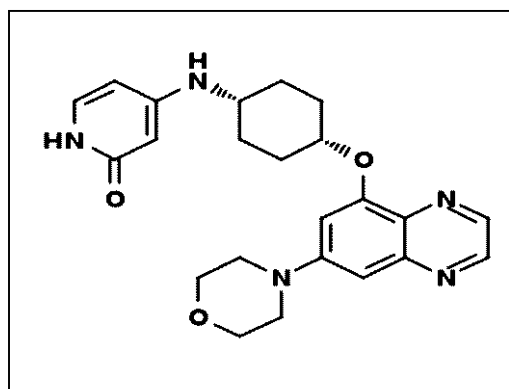
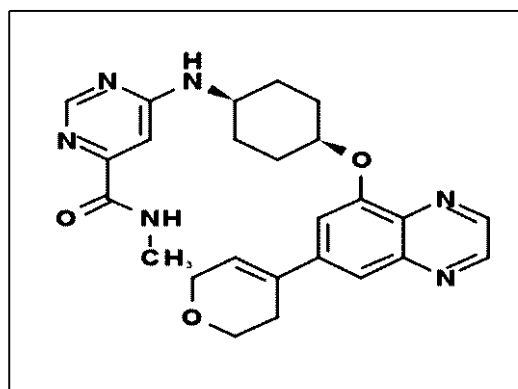


30

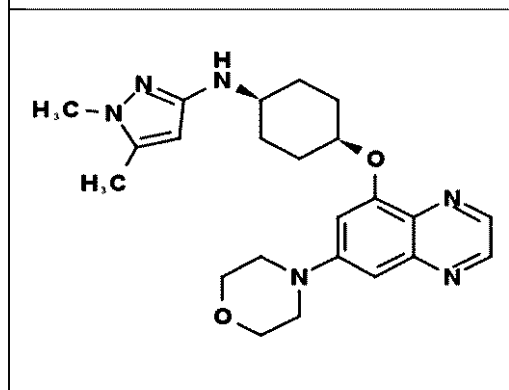
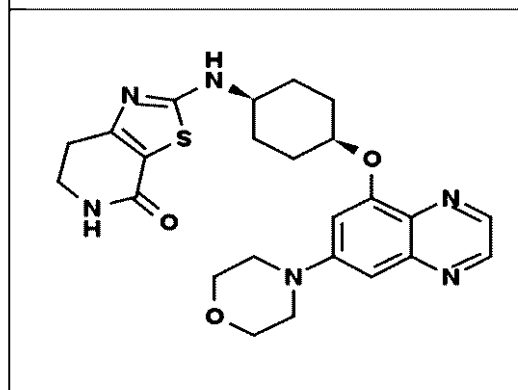


40

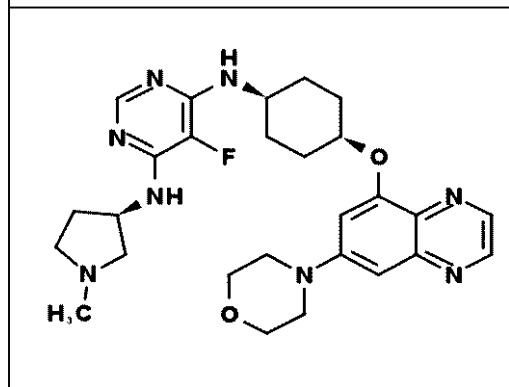
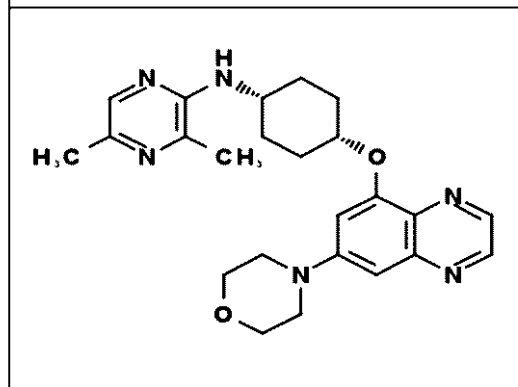
【化 1 8 7】



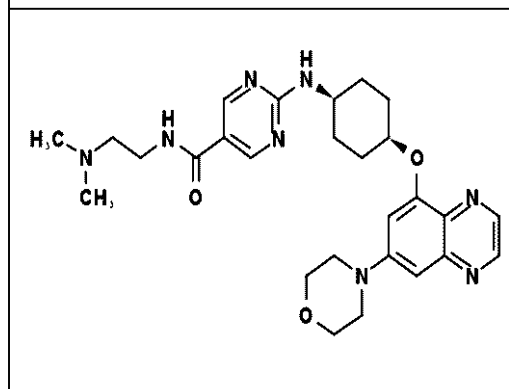
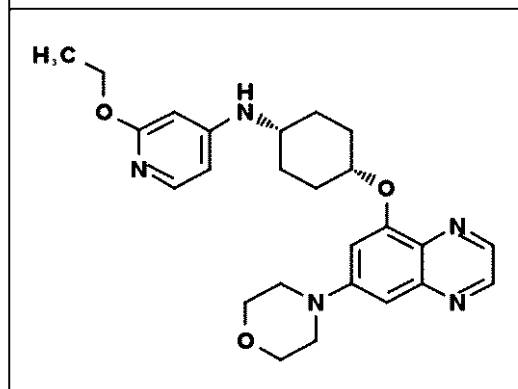
10



20

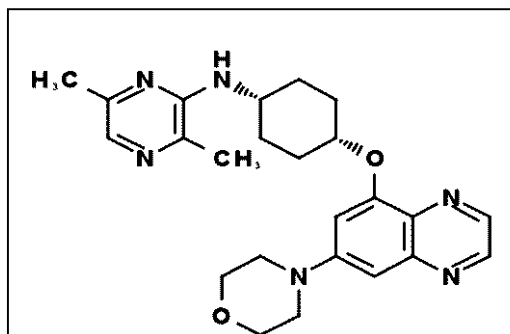
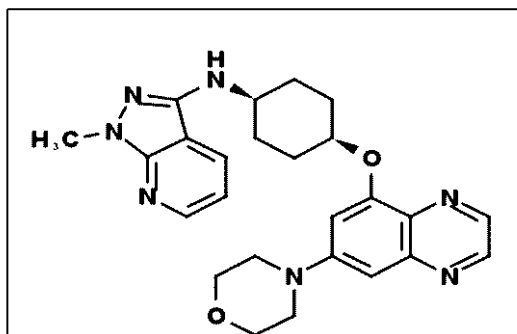


30

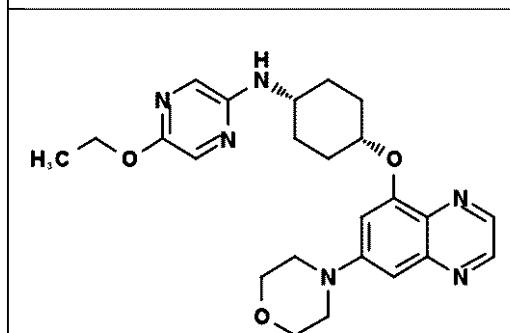
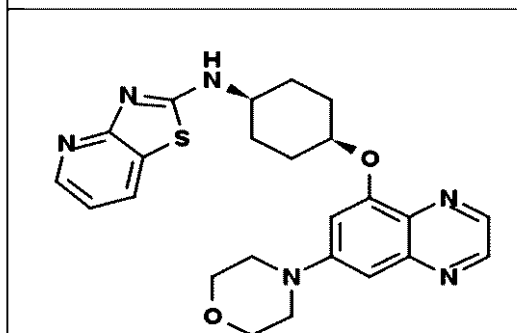


40

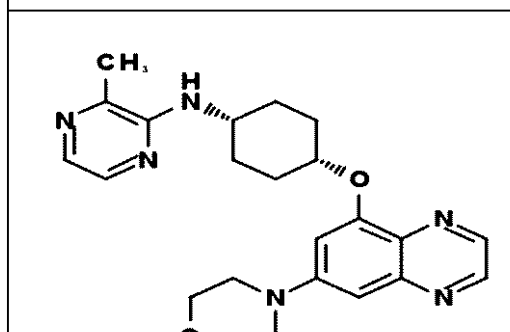
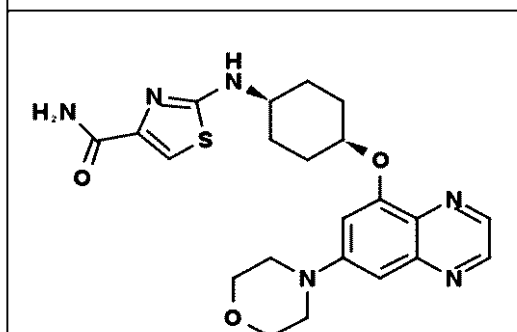
【化 1 8 8】



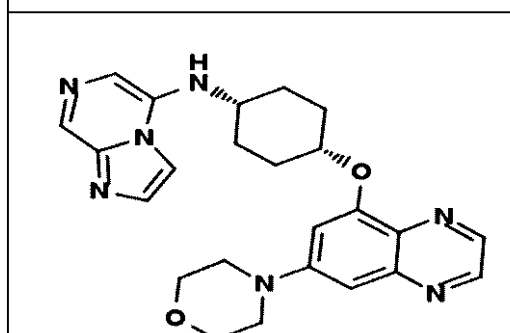
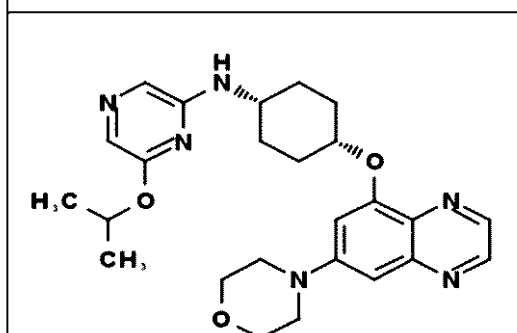
10



20

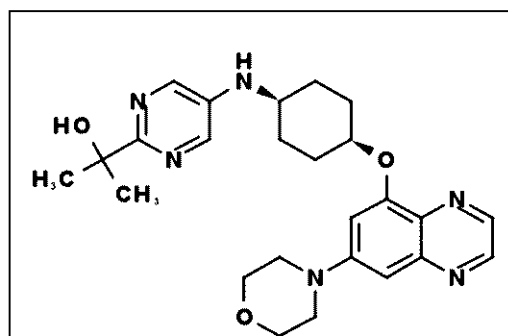
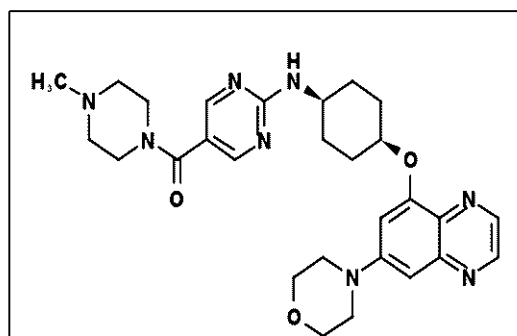


30

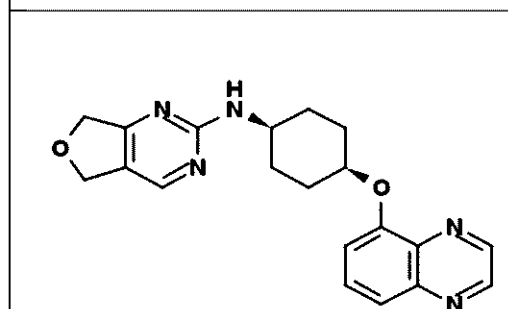
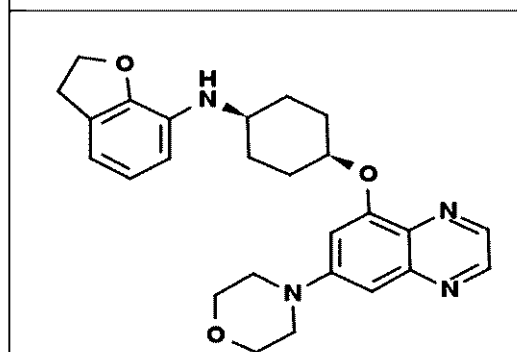


40

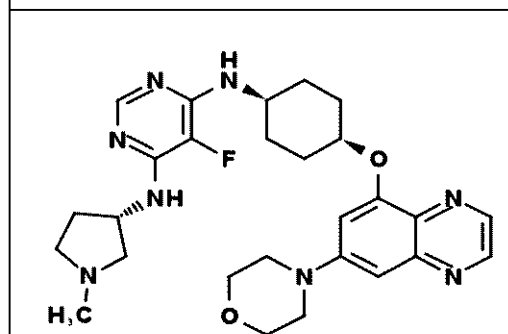
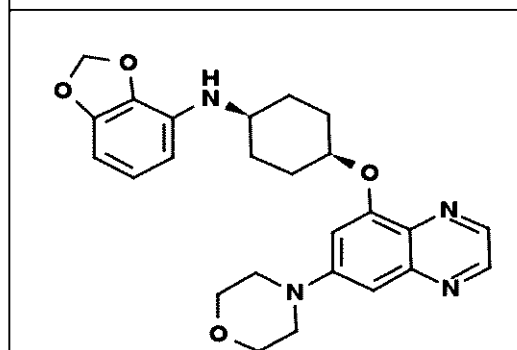
【化 1 8 9】



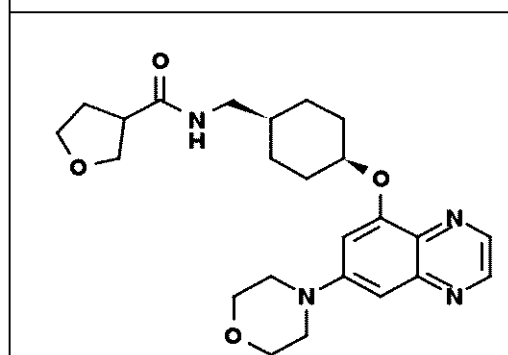
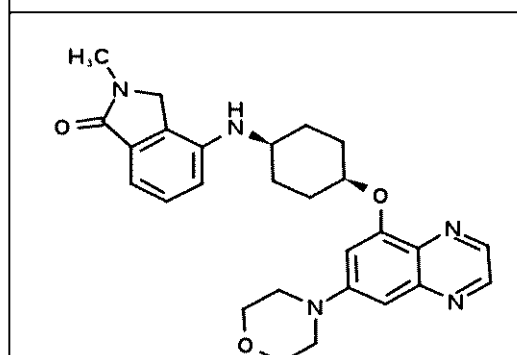
10



20

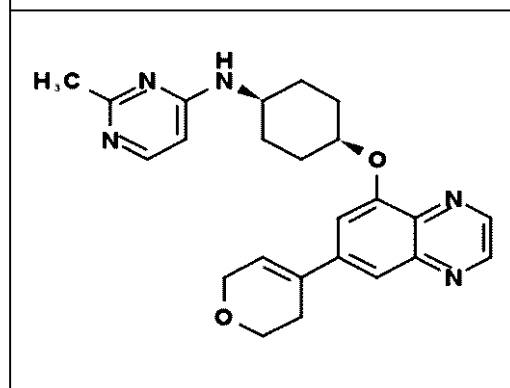
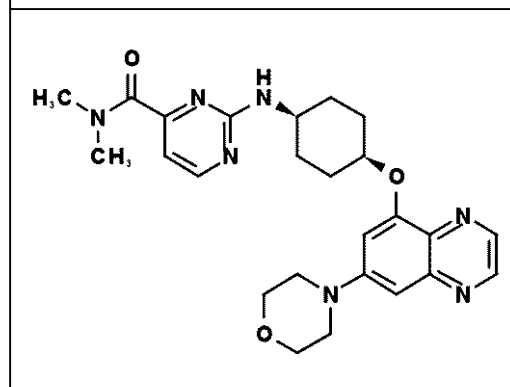
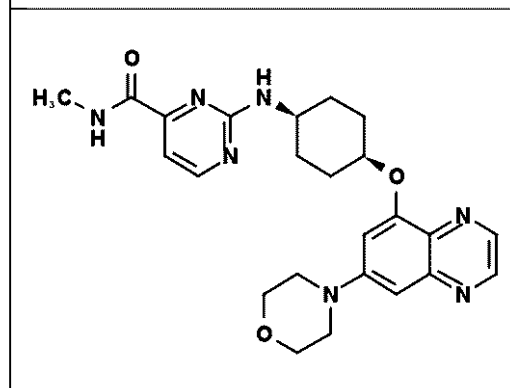
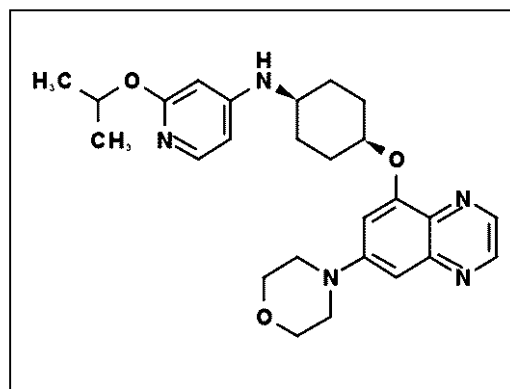
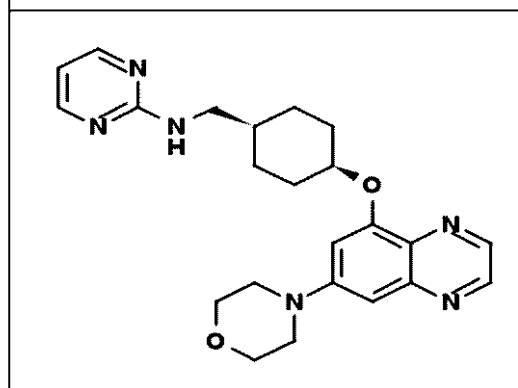
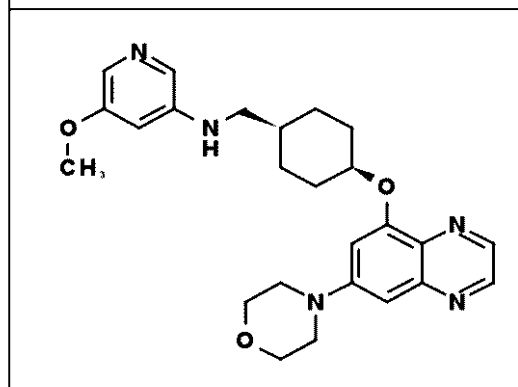
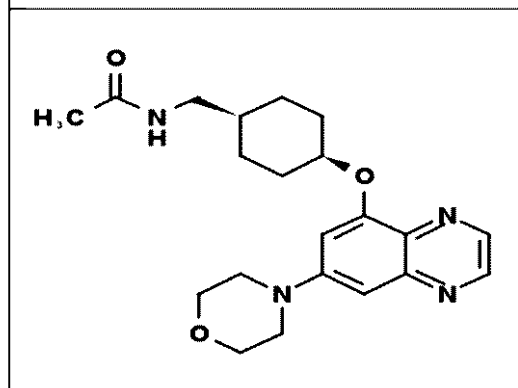
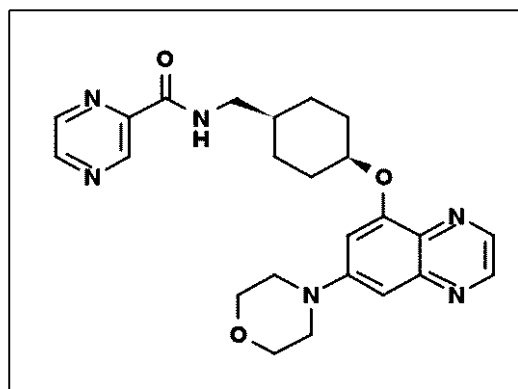


30



40

【化 190】



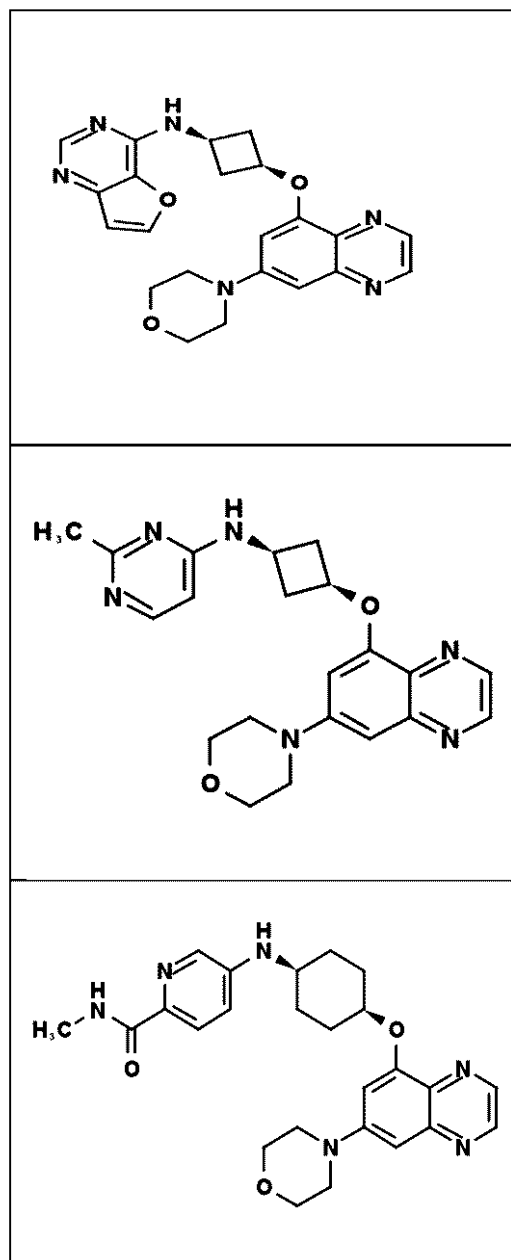
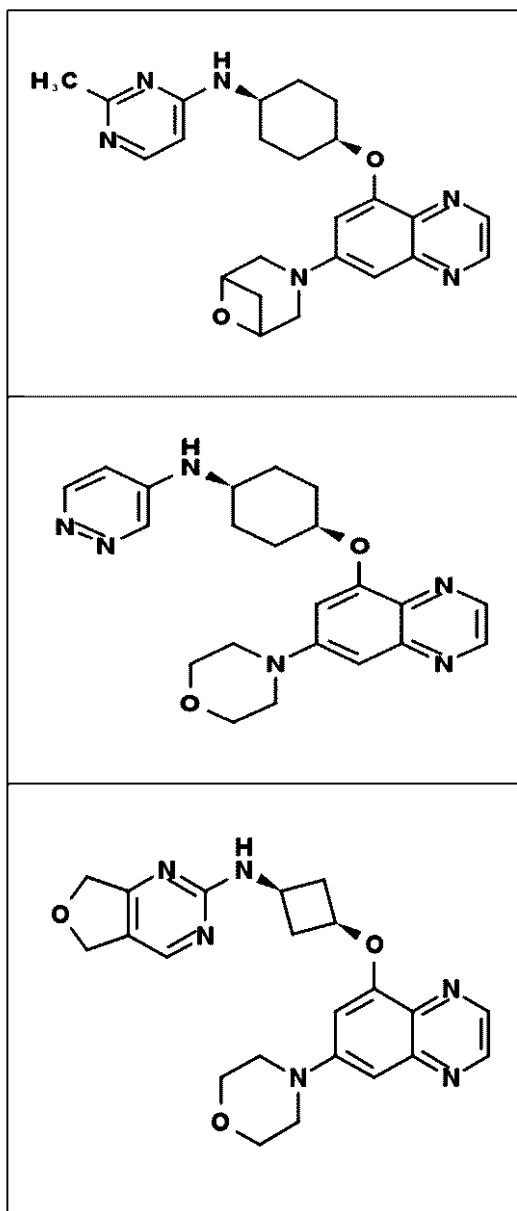
10

20

30

40

【化 1 9 1】

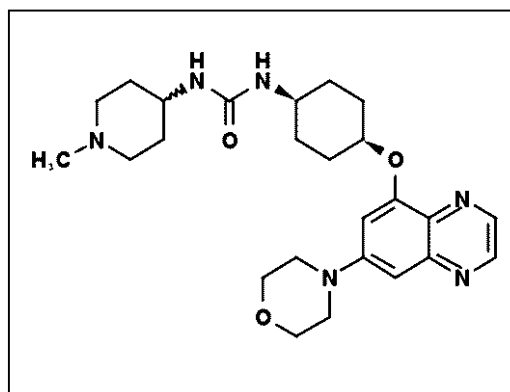
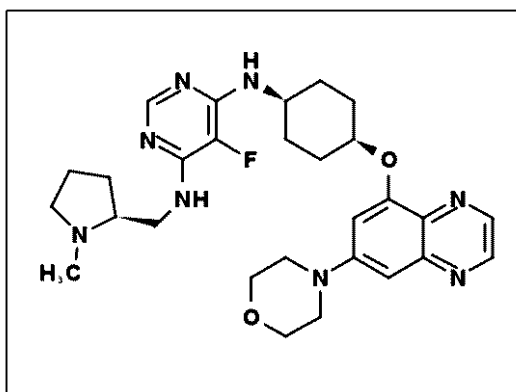


10

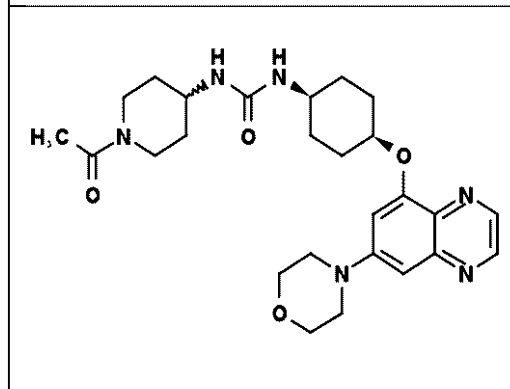
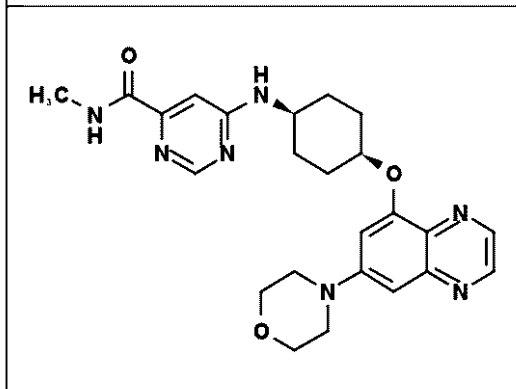
20

30

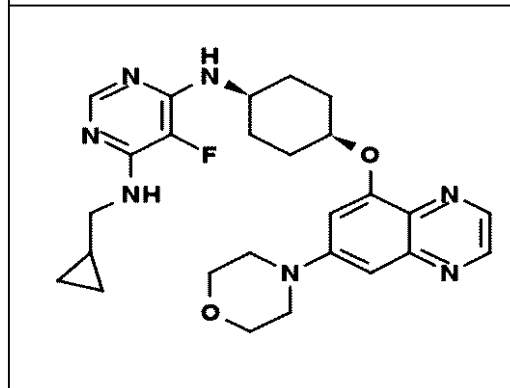
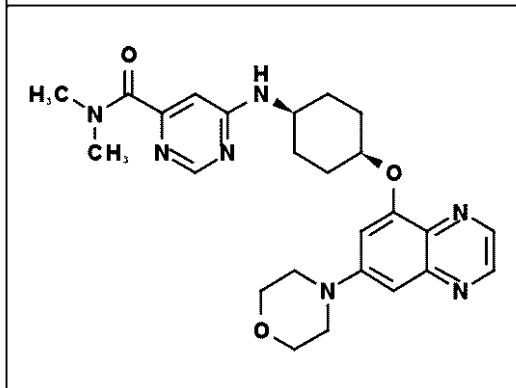
【化 1 9 2】



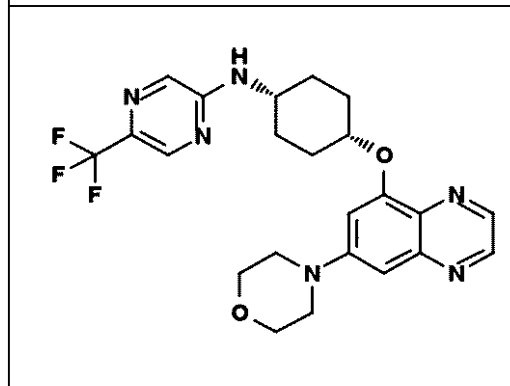
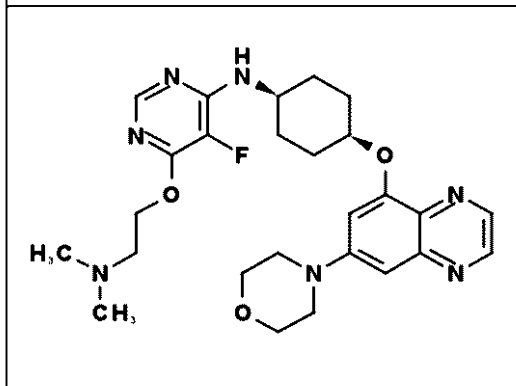
10



20

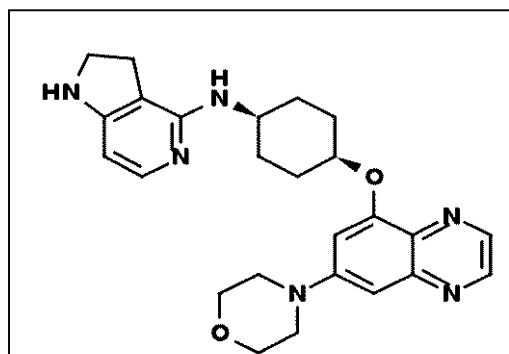
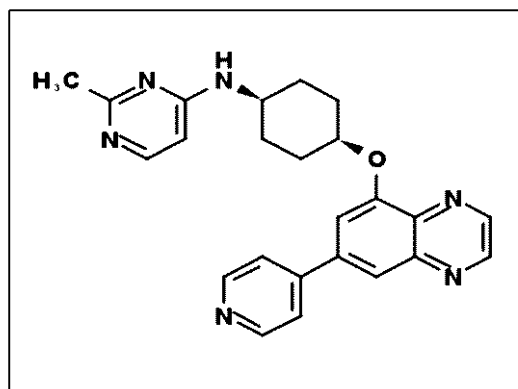


30

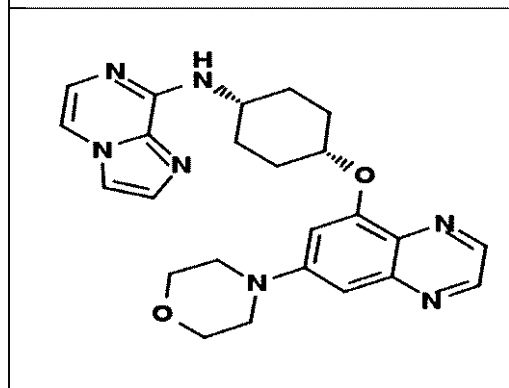
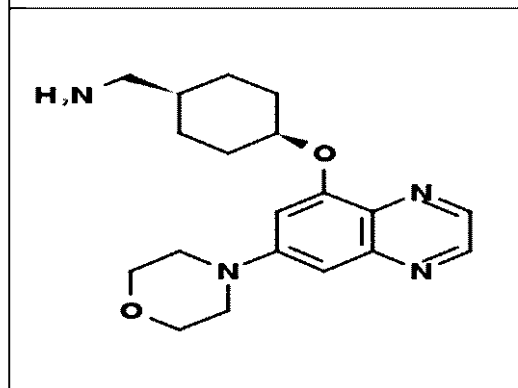


40

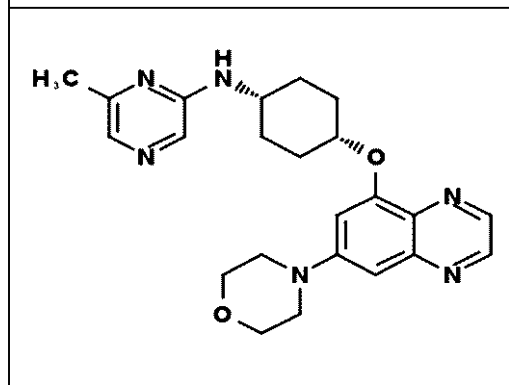
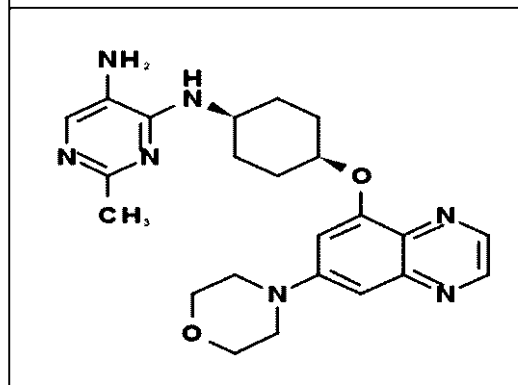
【化 1 9 3】



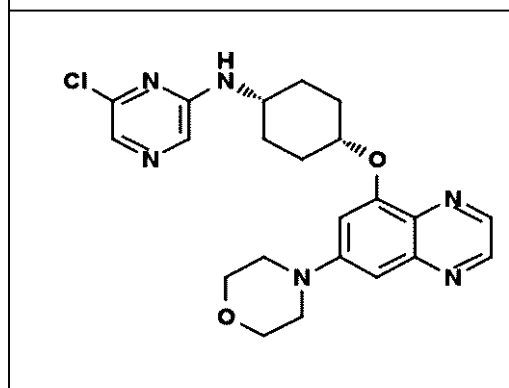
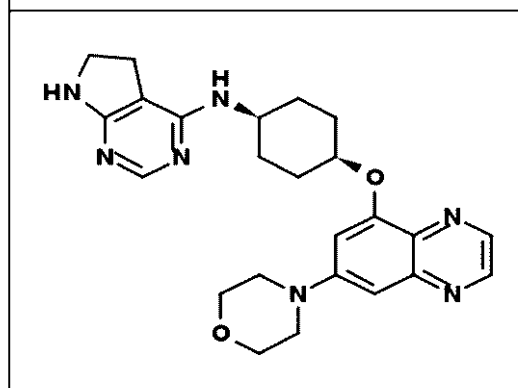
10



20

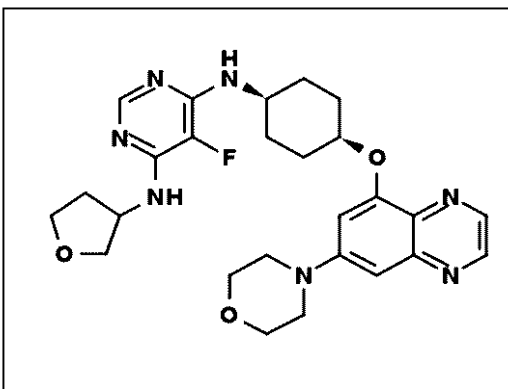
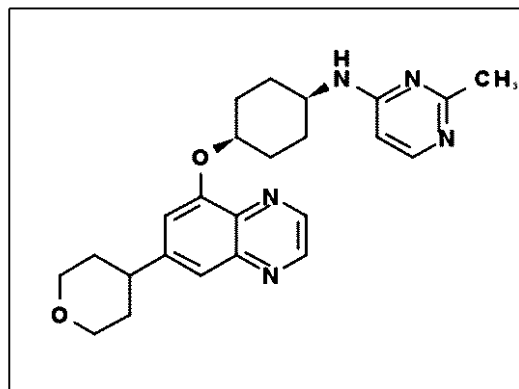


30

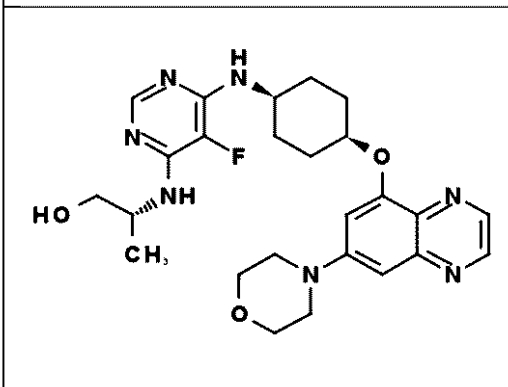
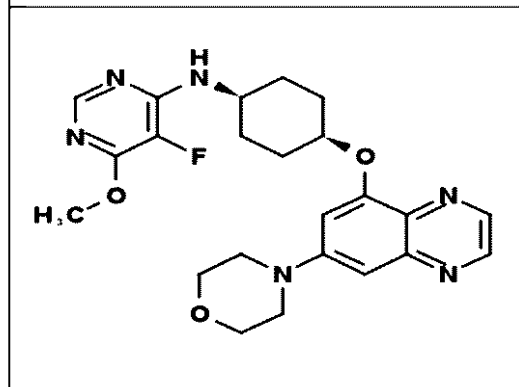


40

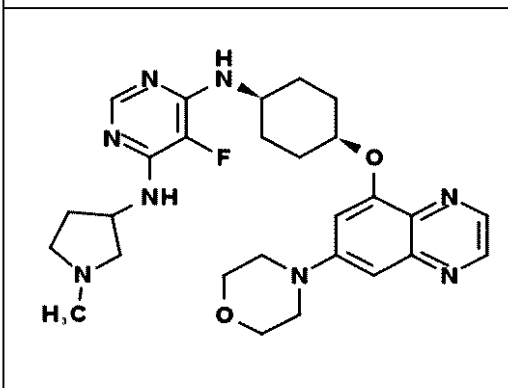
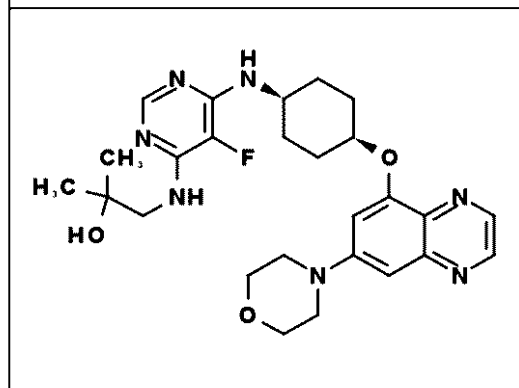
【化 1 9 4】



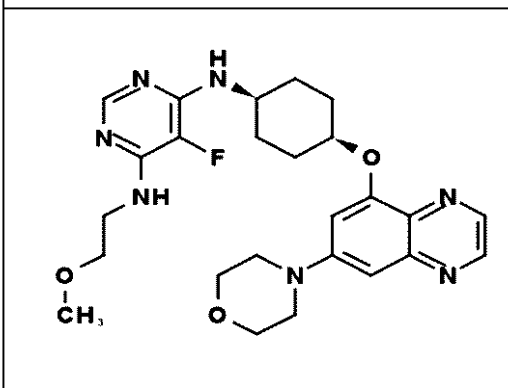
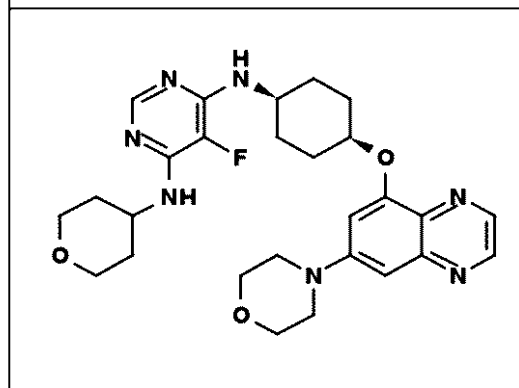
10



20

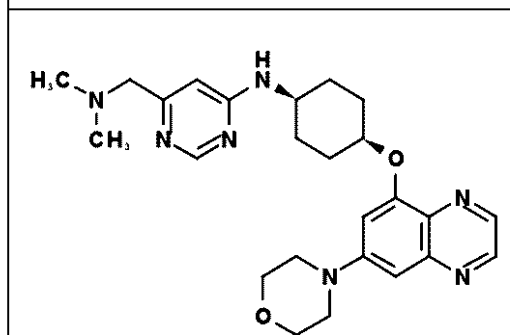
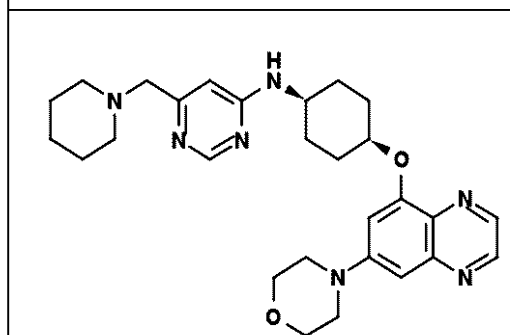
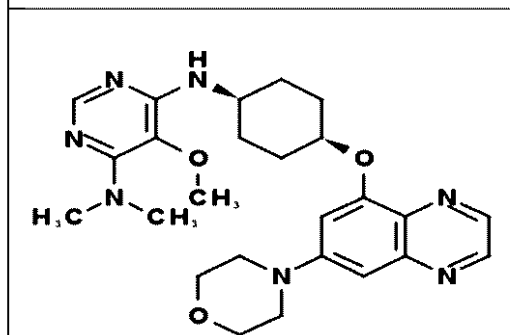
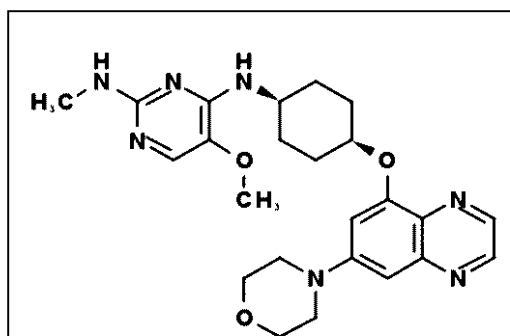
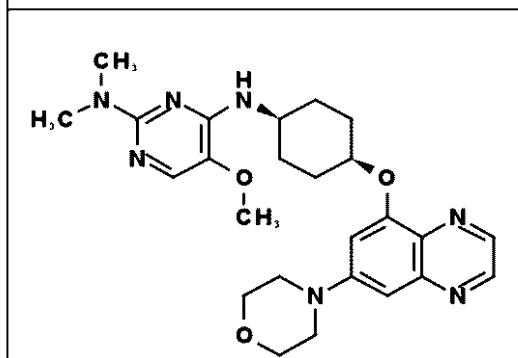
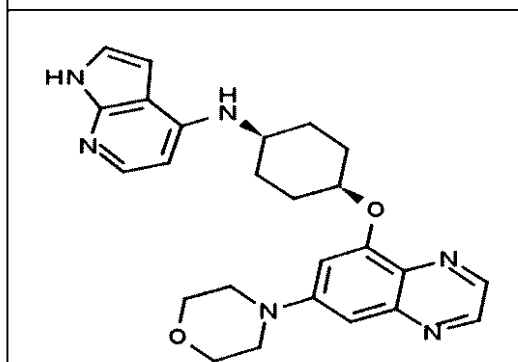
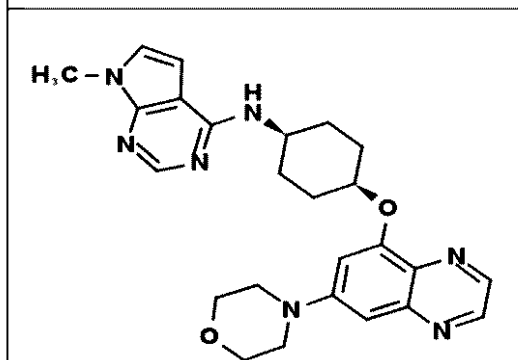
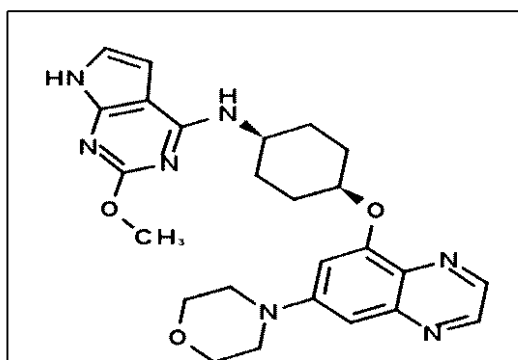


30



40

【化 1 9 5】



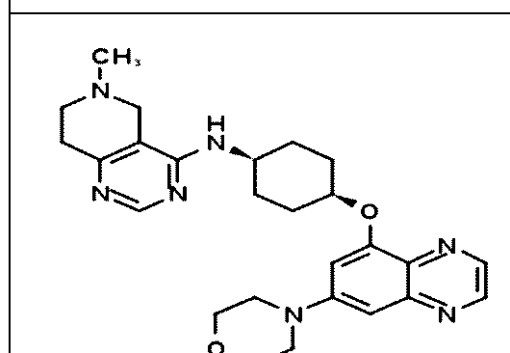
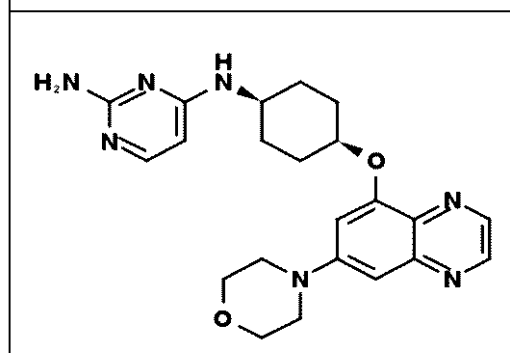
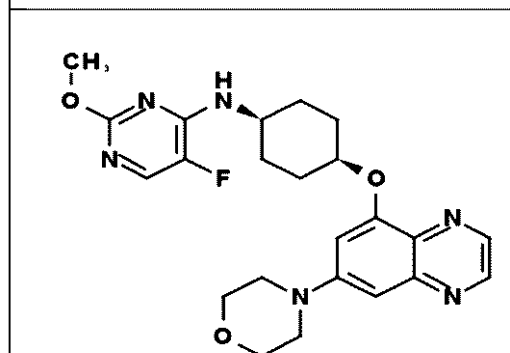
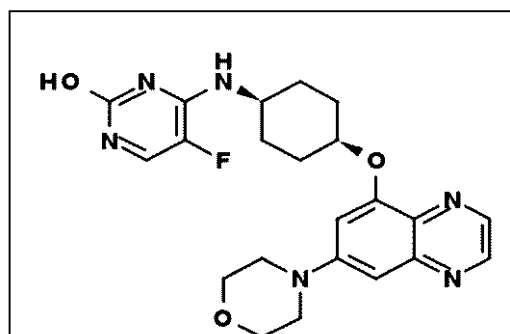
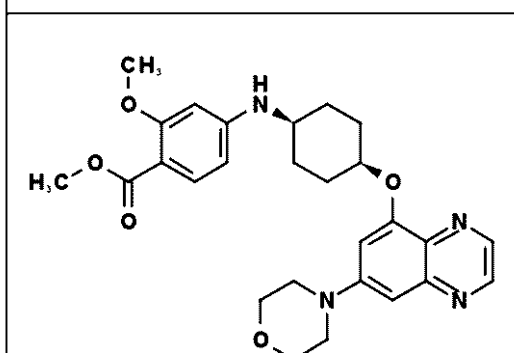
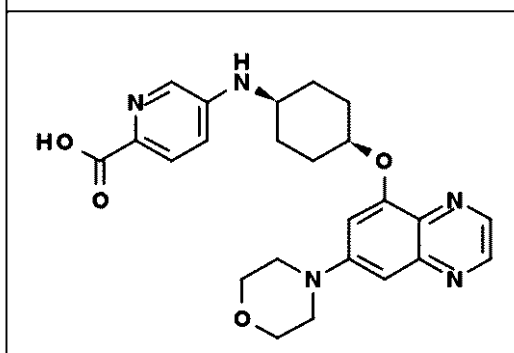
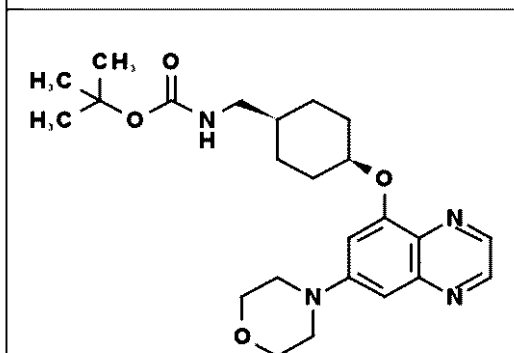
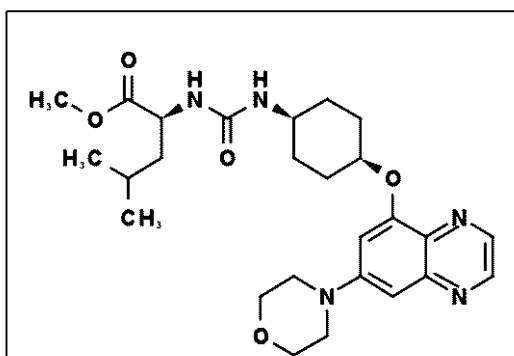
10

20

30

40

【化 1 9 6】



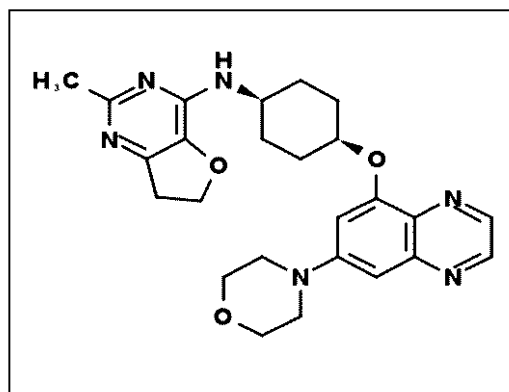
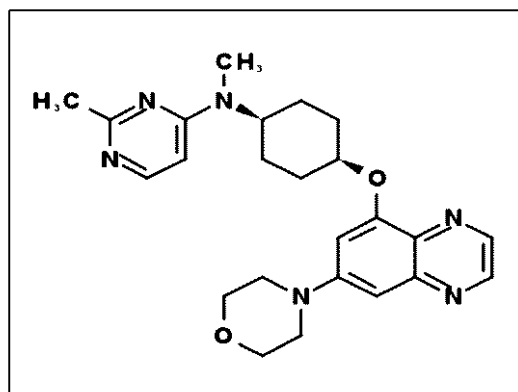
10

20

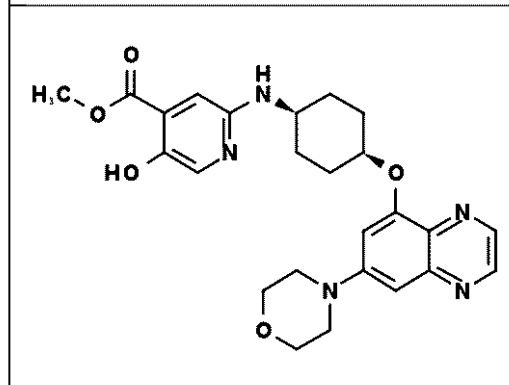
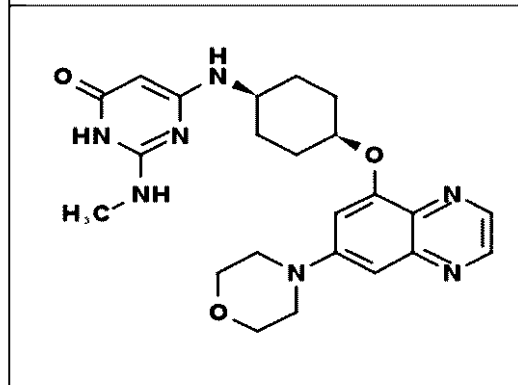
30

40

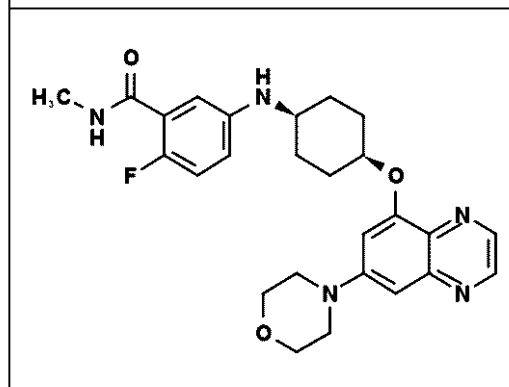
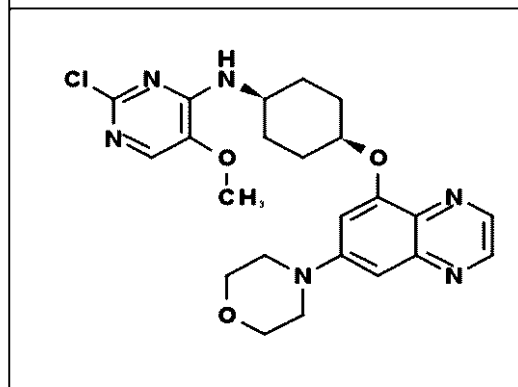
【化 1 9 7】



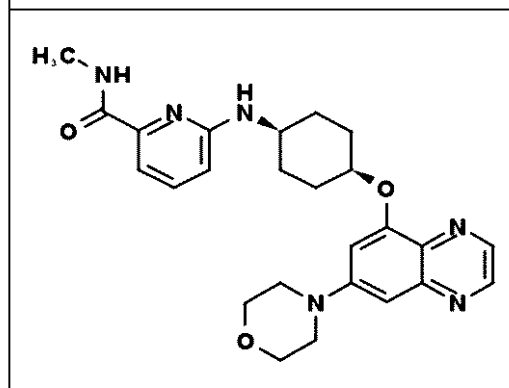
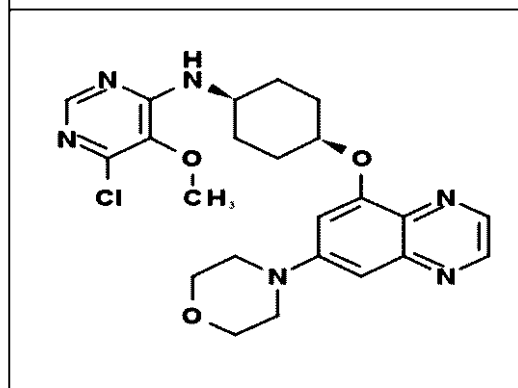
10



20

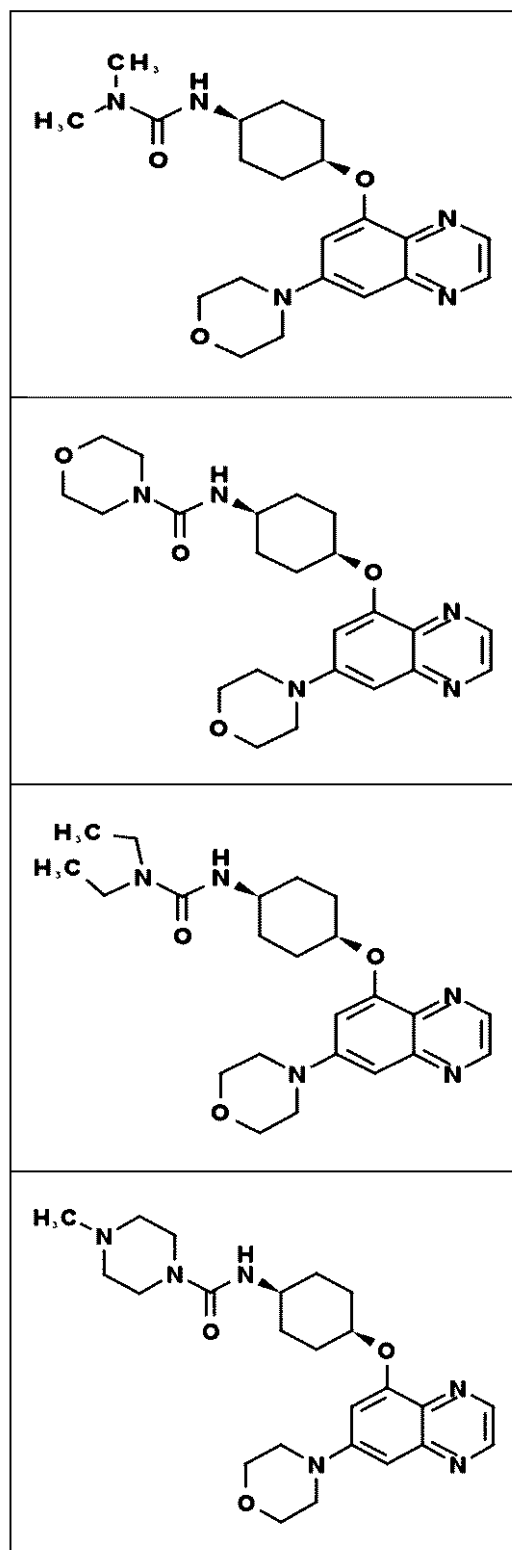
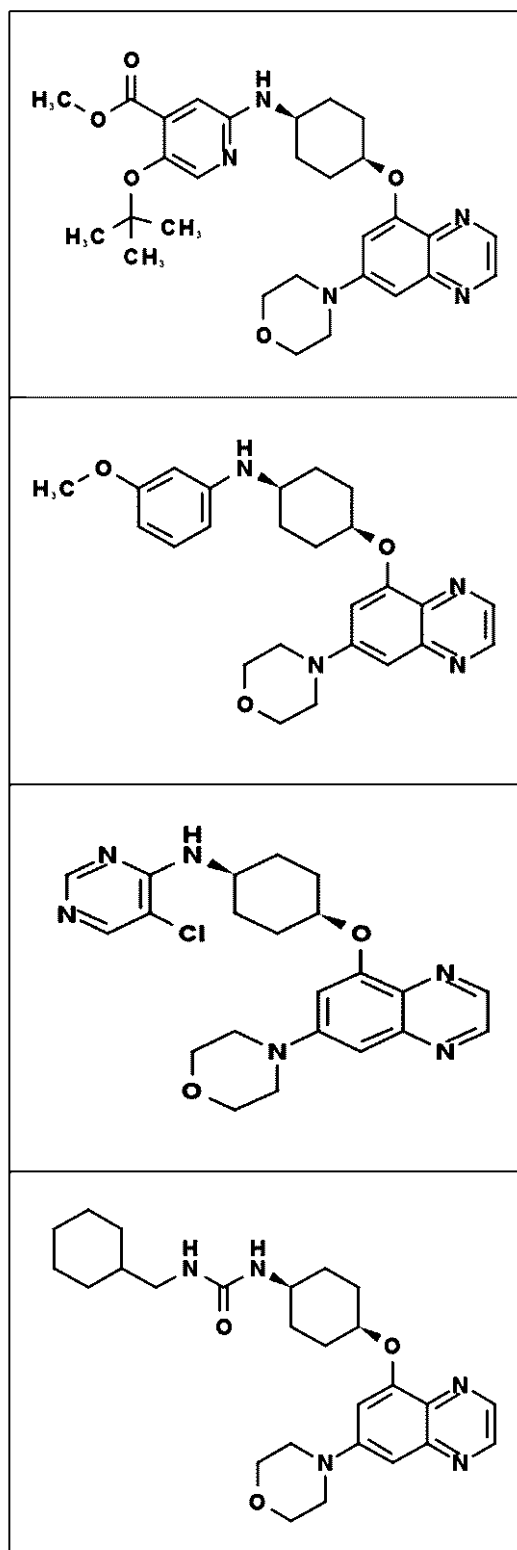


30



40

【化 1 9 8】



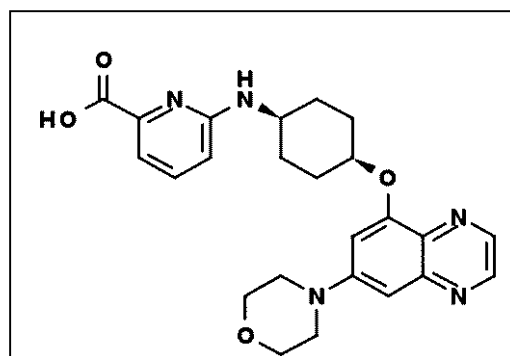
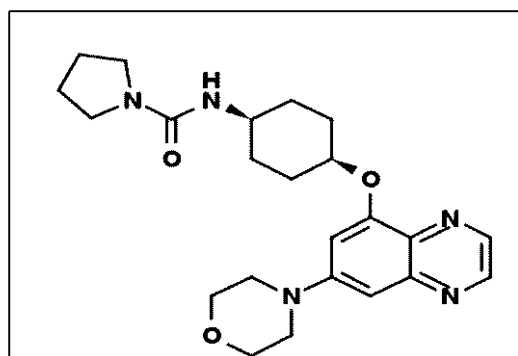
10

20

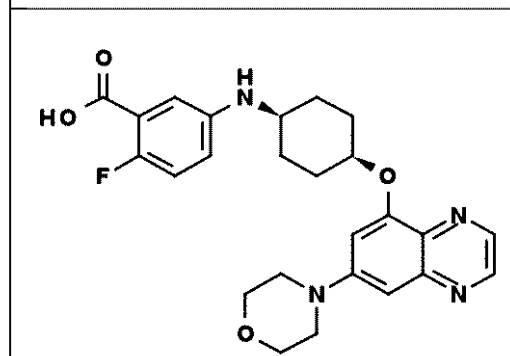
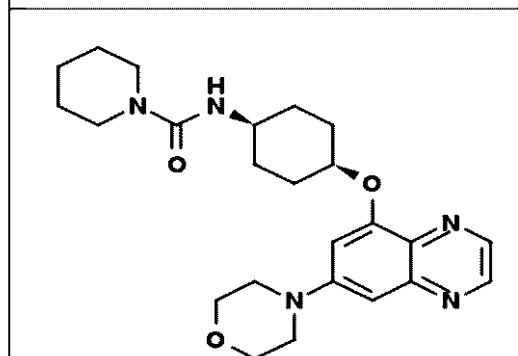
30

40

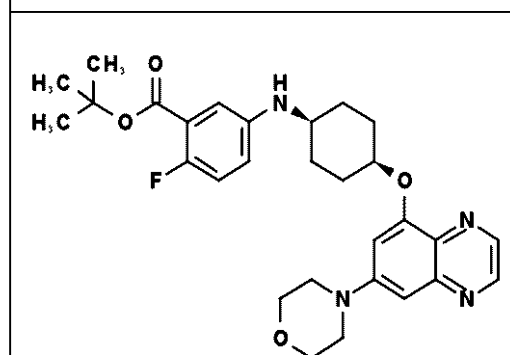
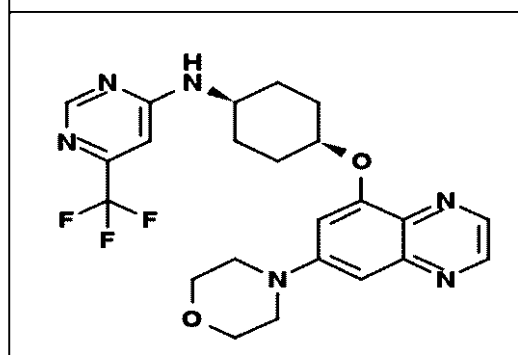
【化 1 9 9】



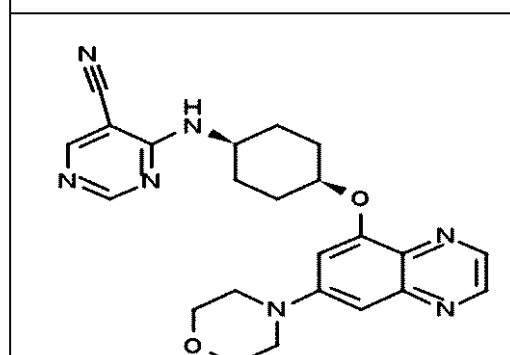
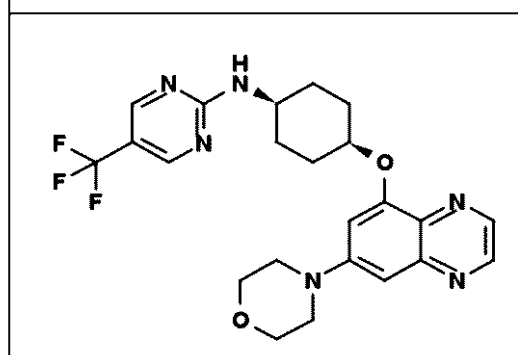
10



20

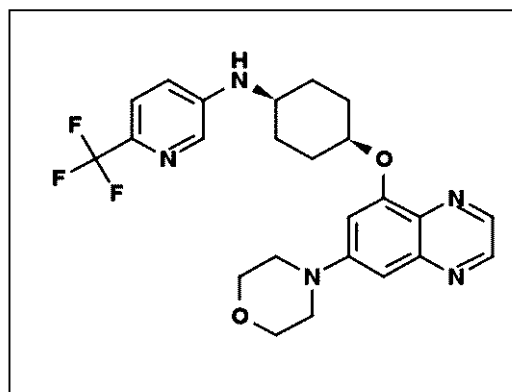
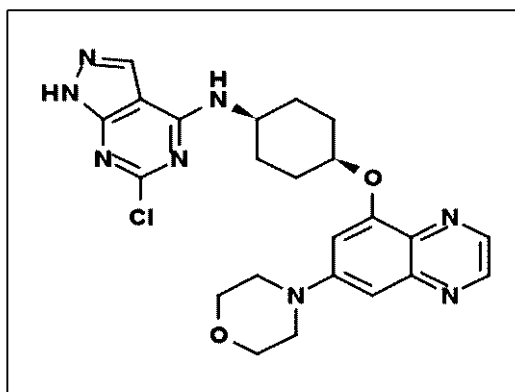


30

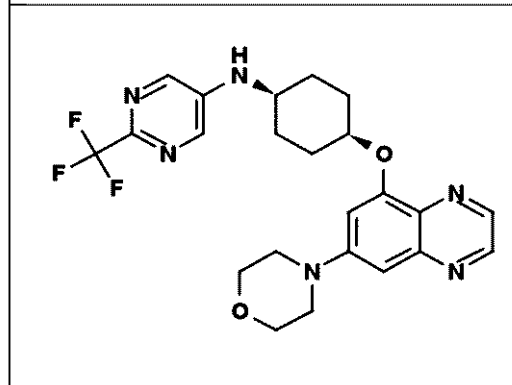
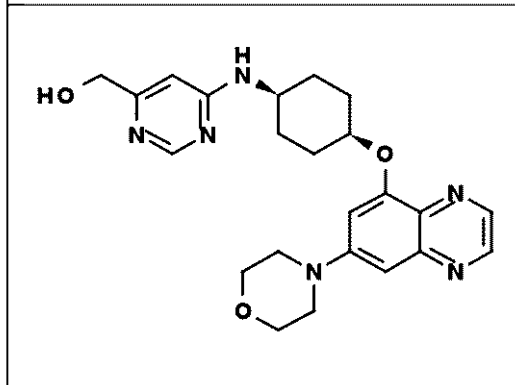


40

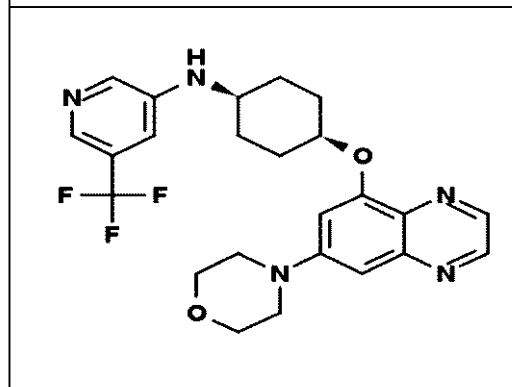
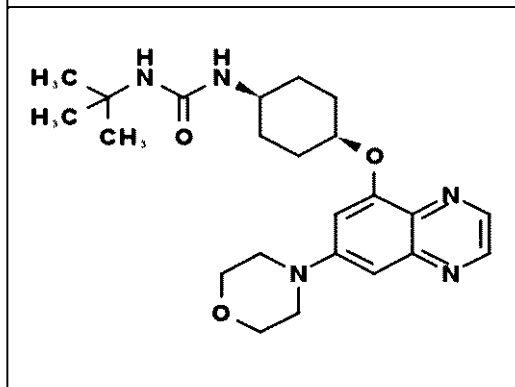
【化 200】



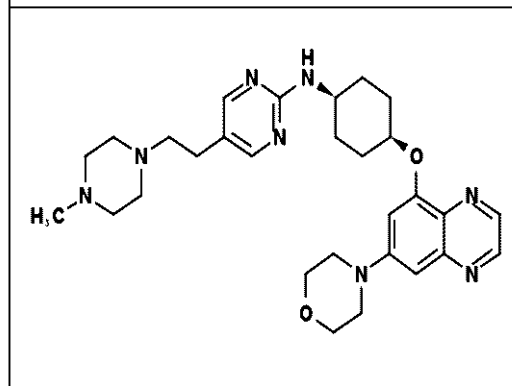
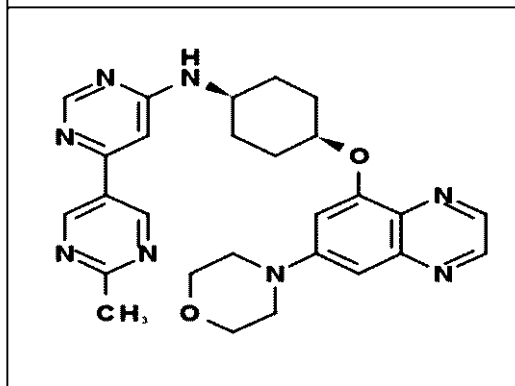
10



20

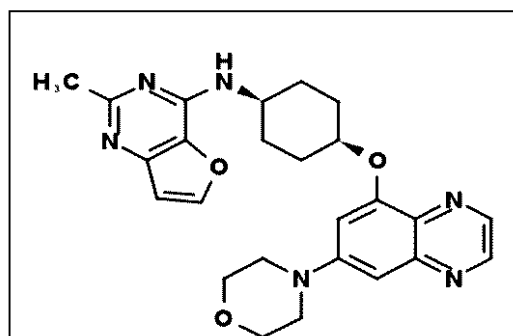
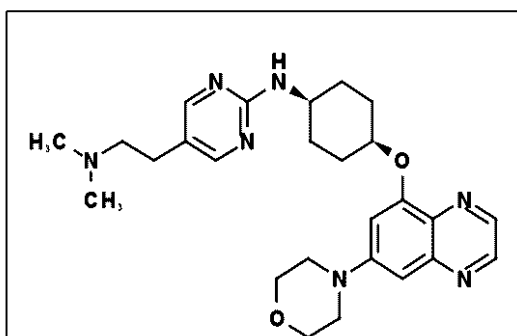


30

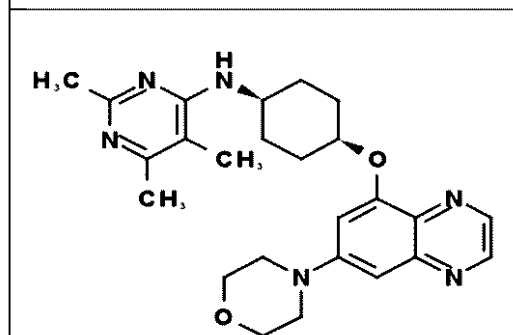
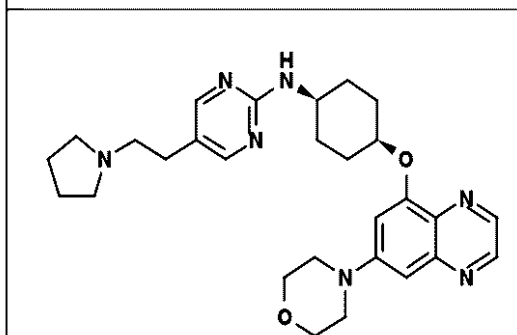


40

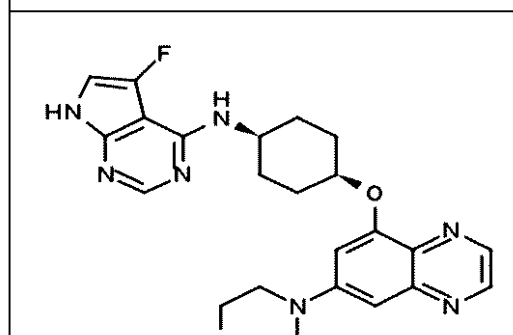
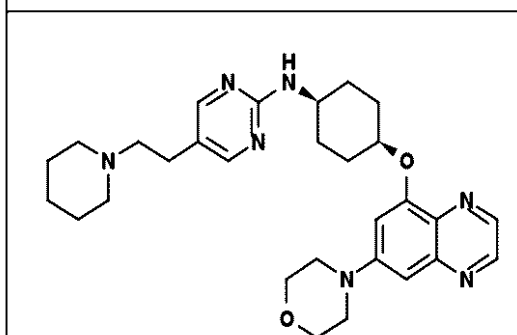
【化 2 0 1】



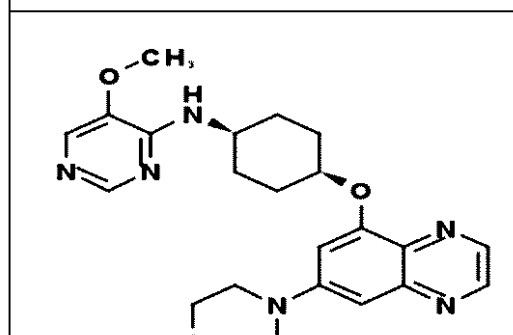
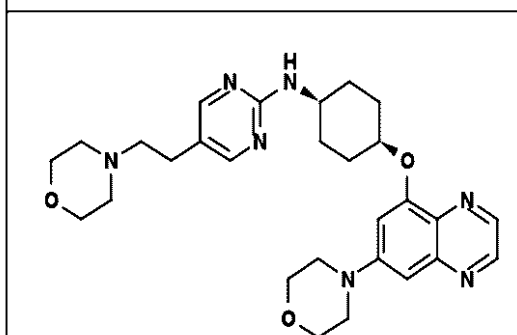
10



20

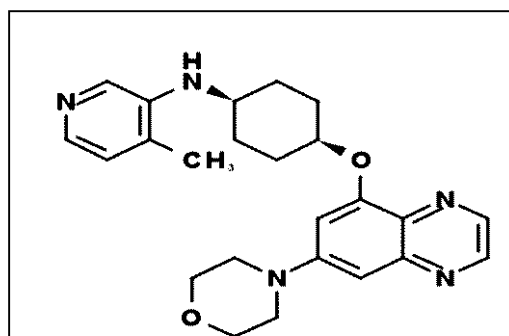
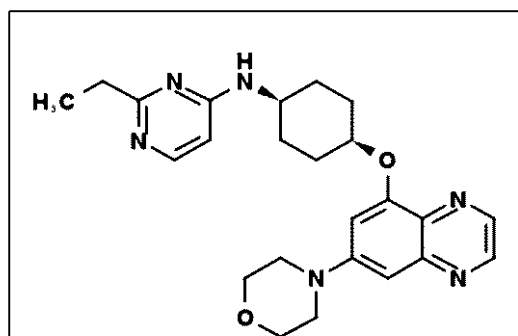


30

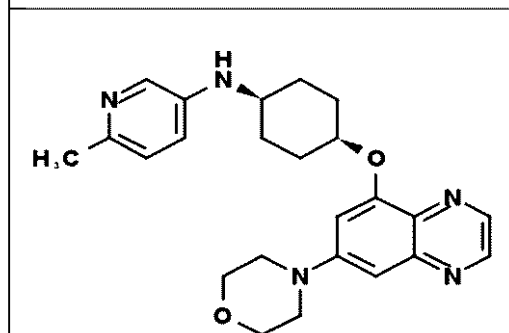
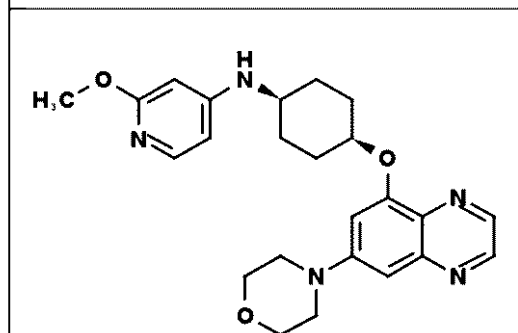


40

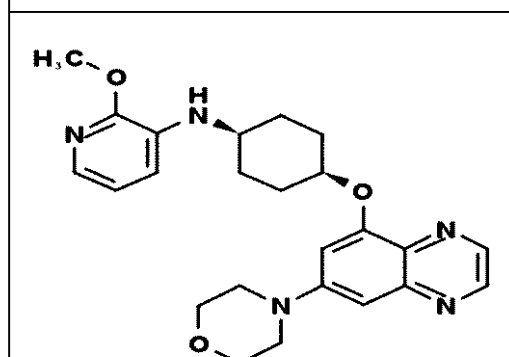
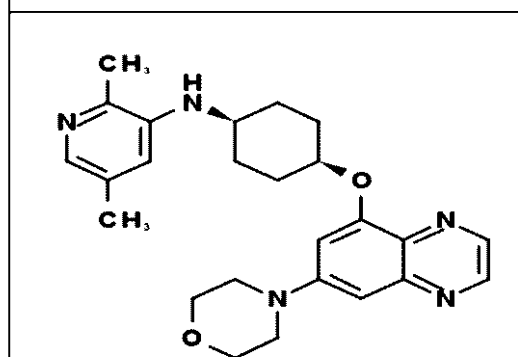
【化 2 0 2】



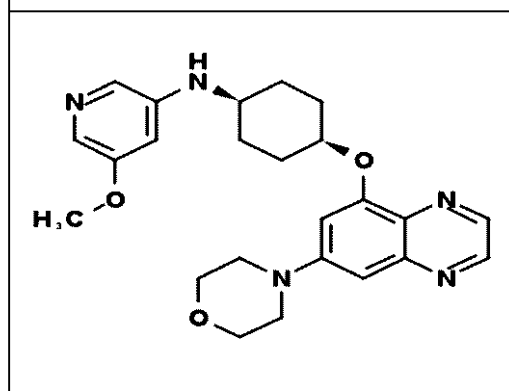
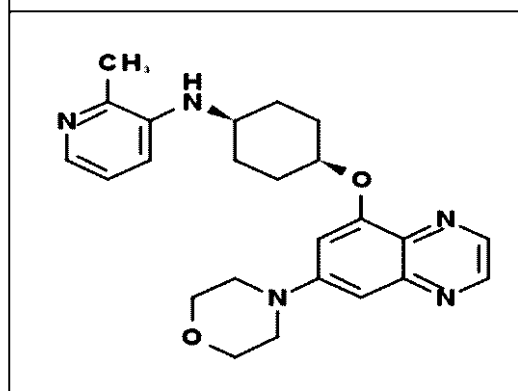
10



20

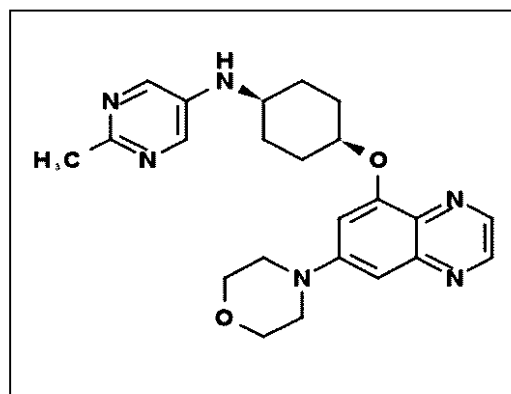
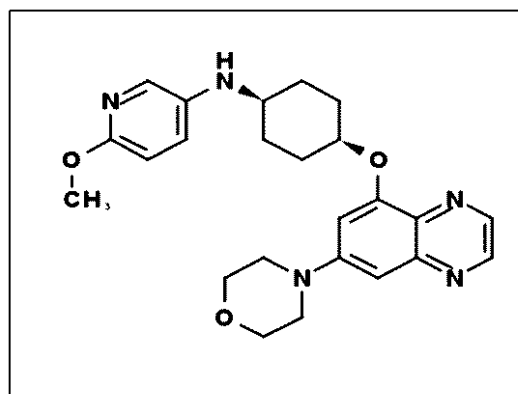


30

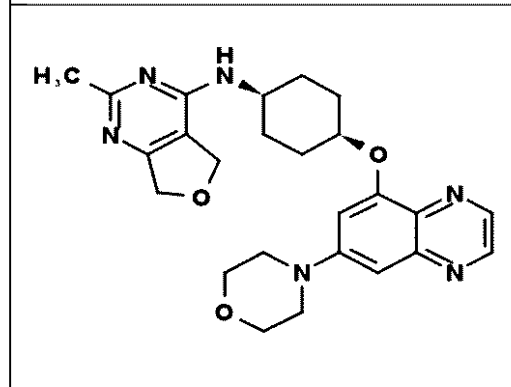
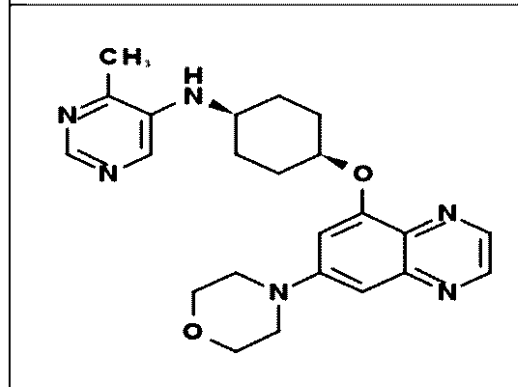


40

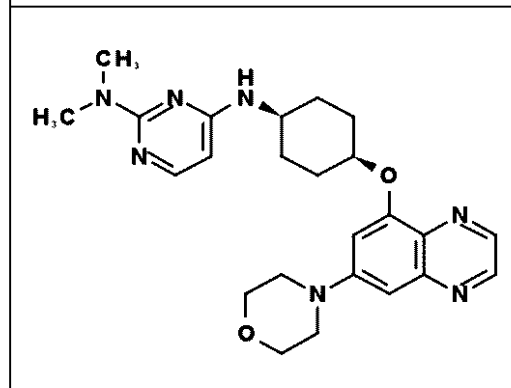
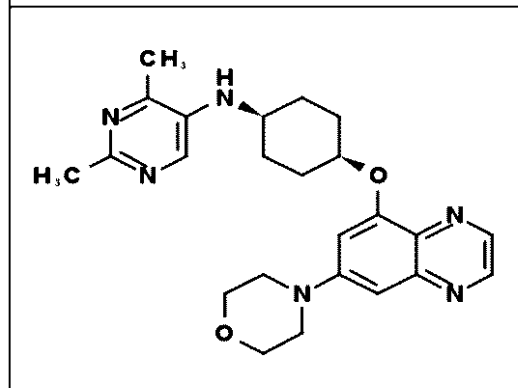
【化 2 0 3】



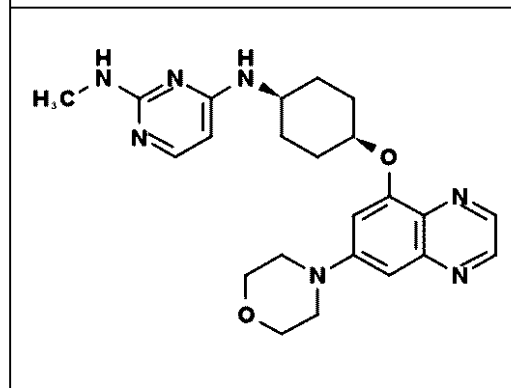
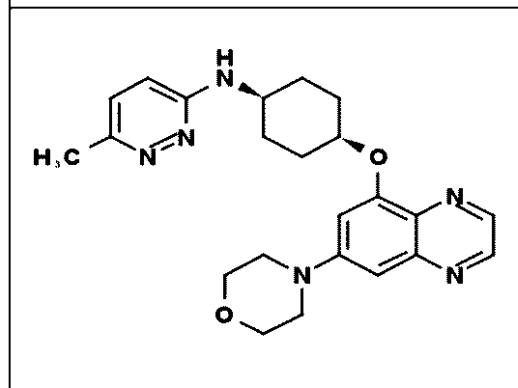
10



20

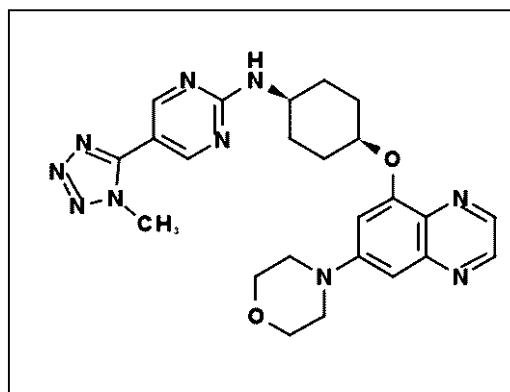
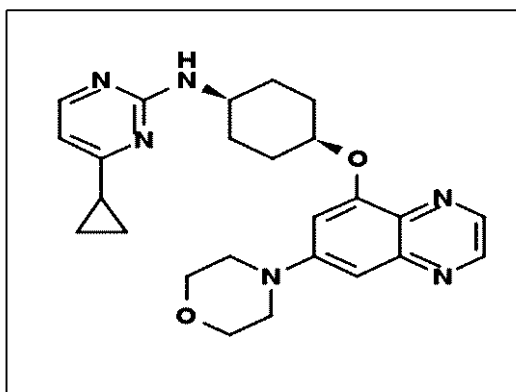


30

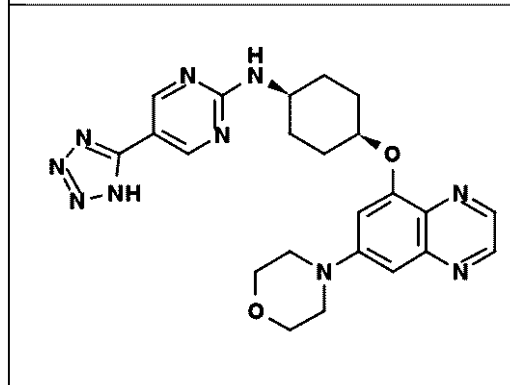
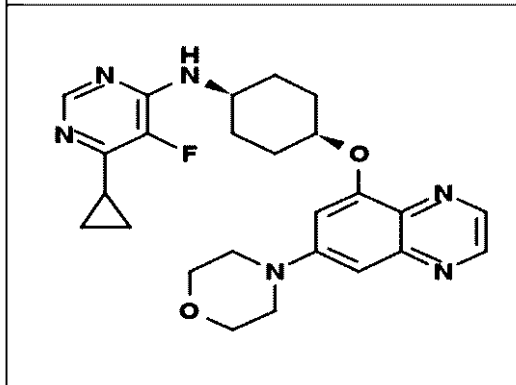


40

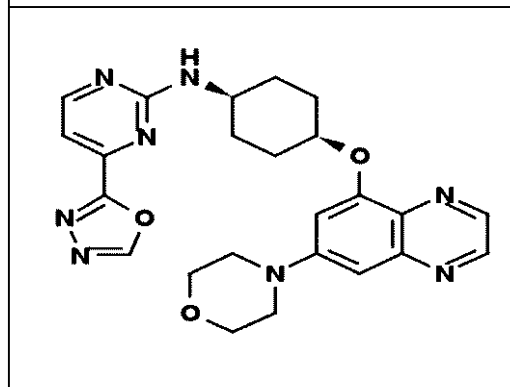
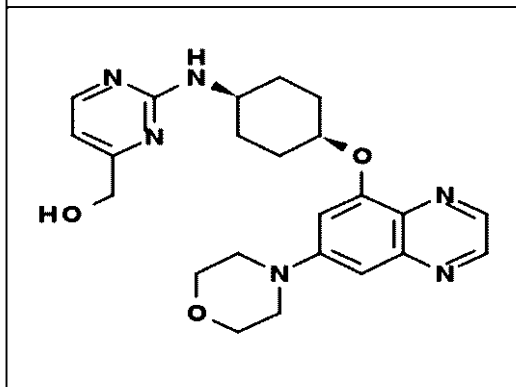
【化 2 0 4】



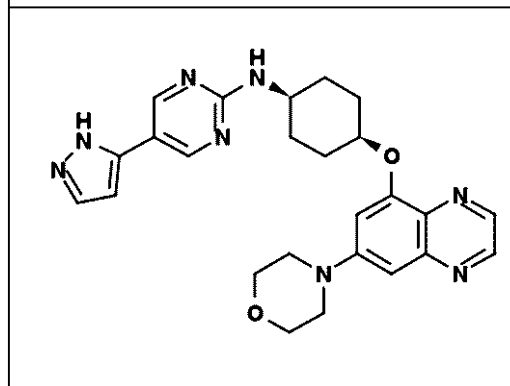
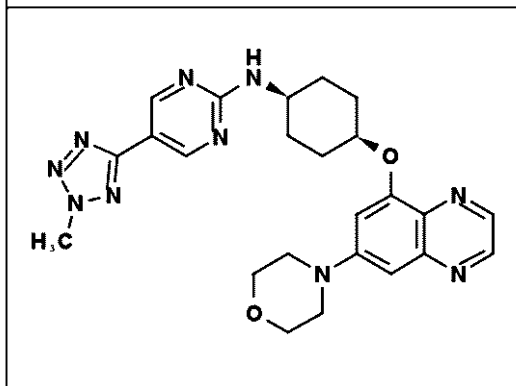
10



20

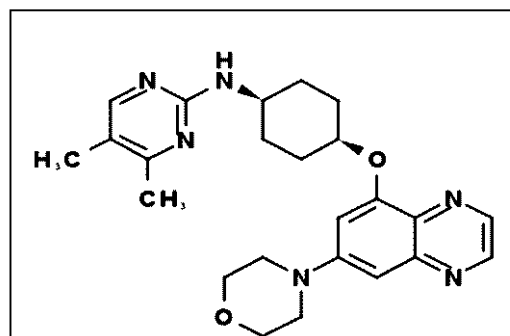
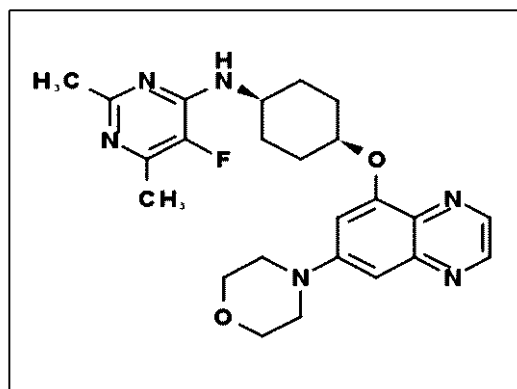


30

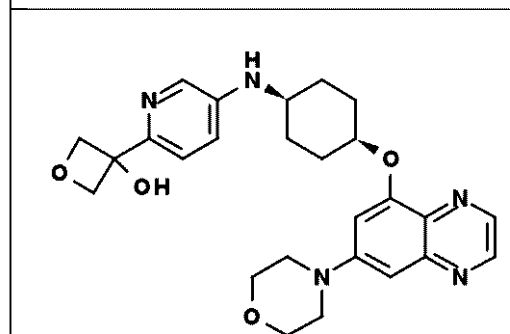
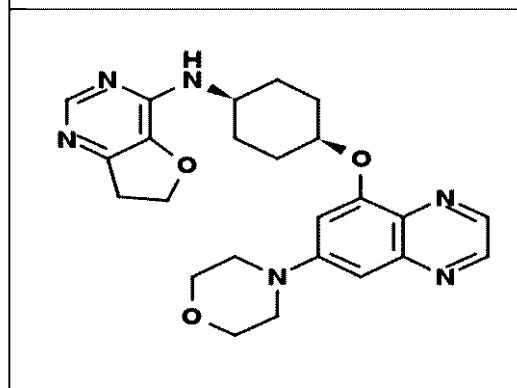


40

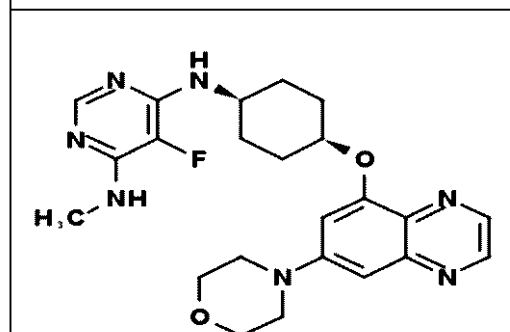
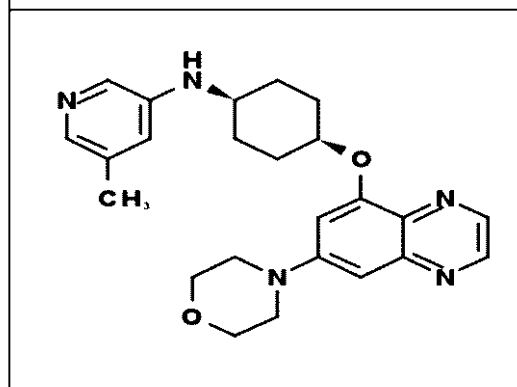
【化 2 0 5】



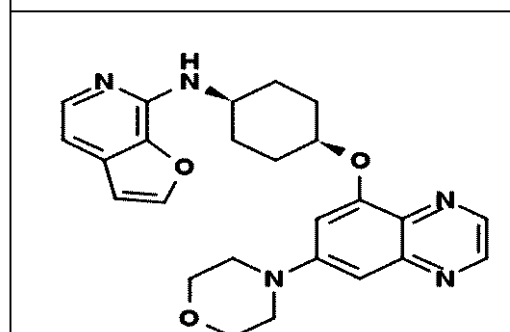
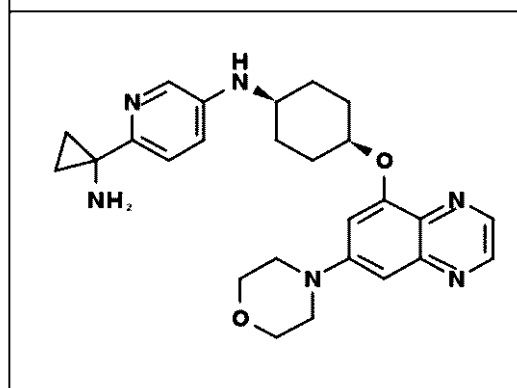
10



20

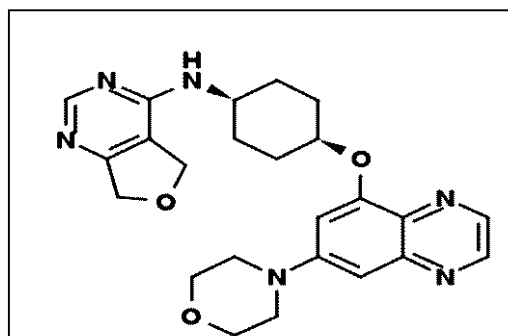
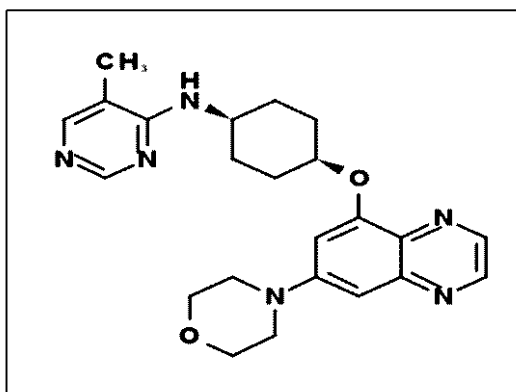


30

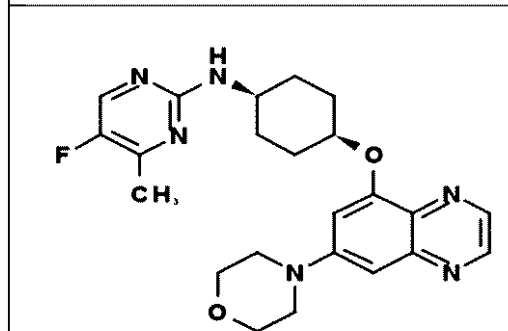
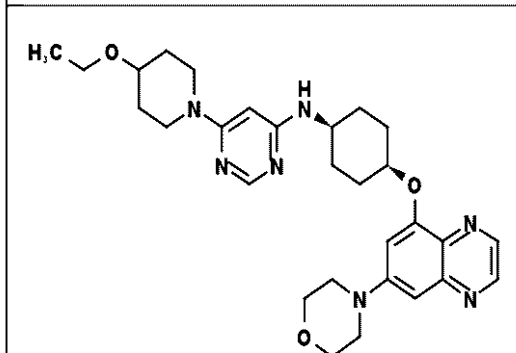


40

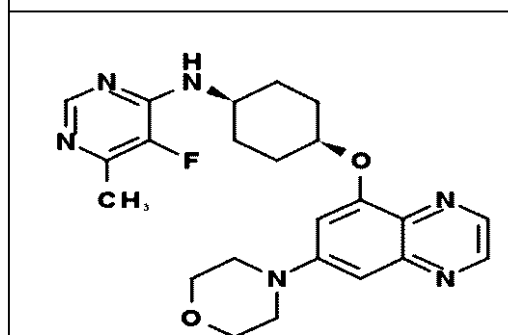
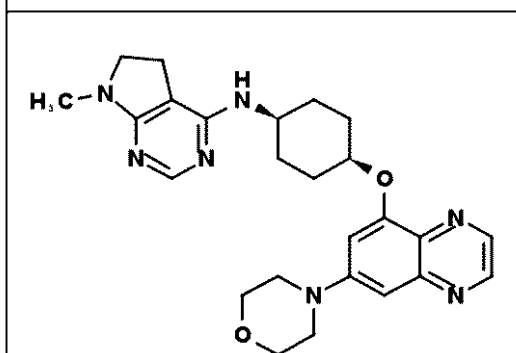
【化 2 0 6】



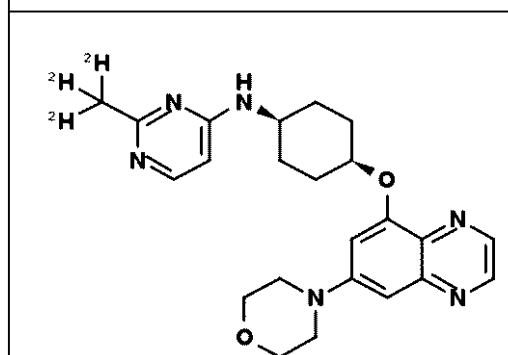
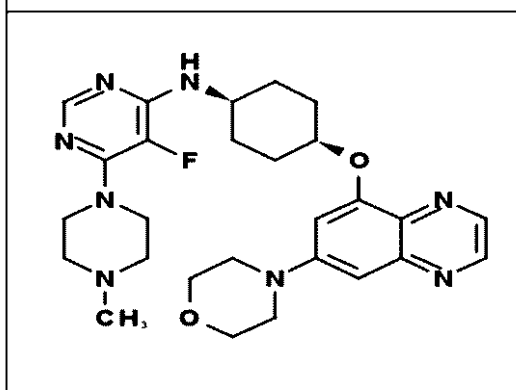
10



20

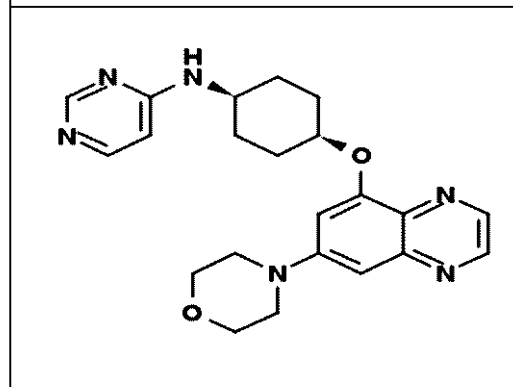
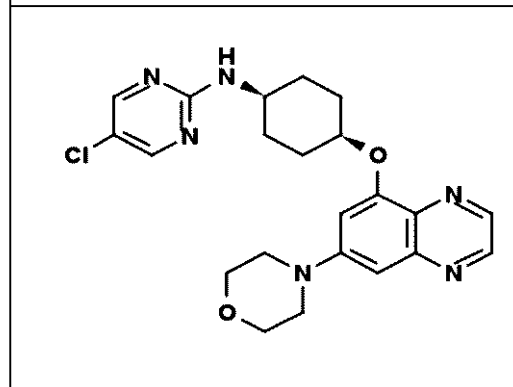
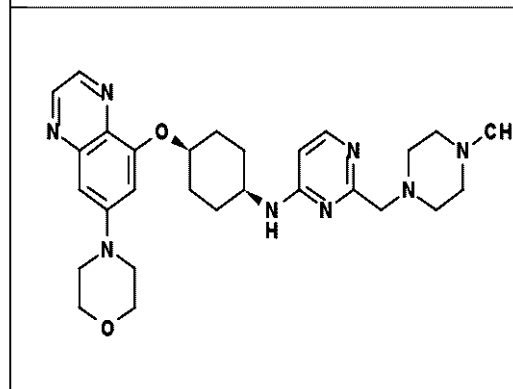
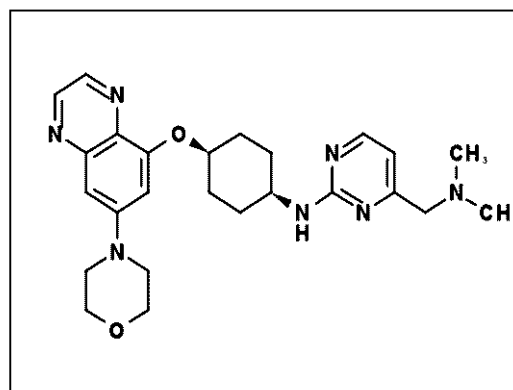
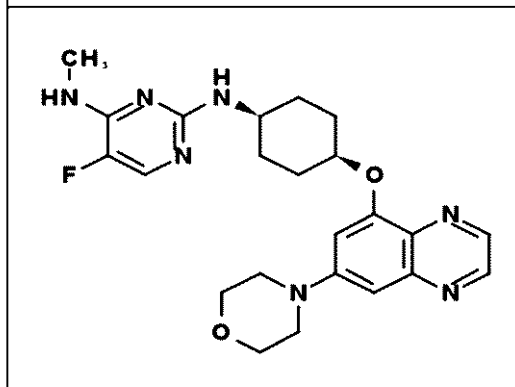
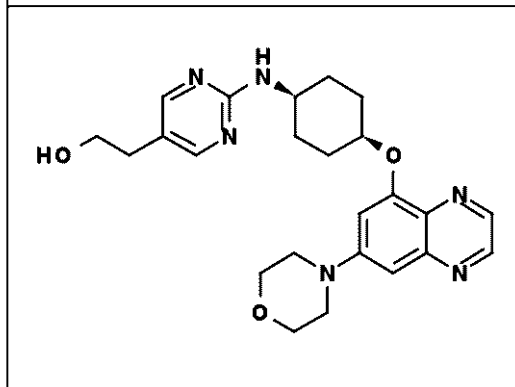
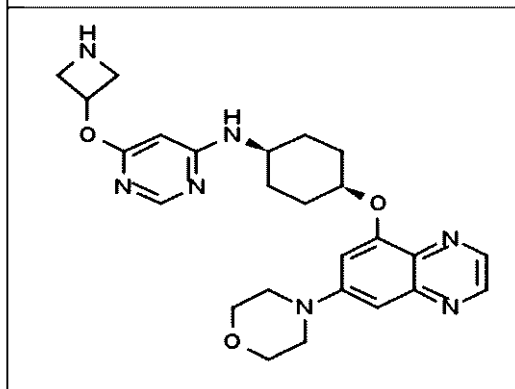
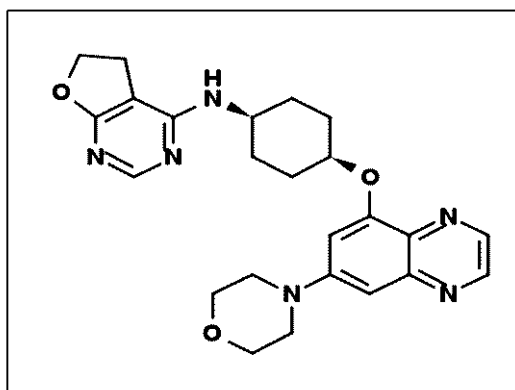


30



40

【化 2 0 7】



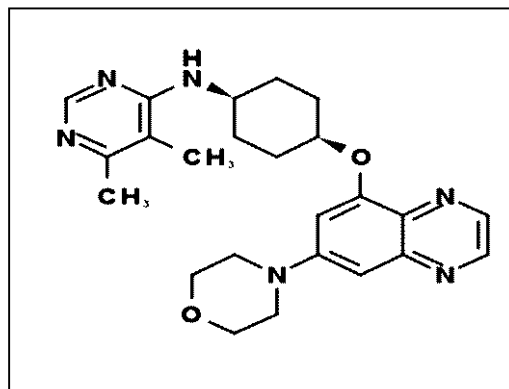
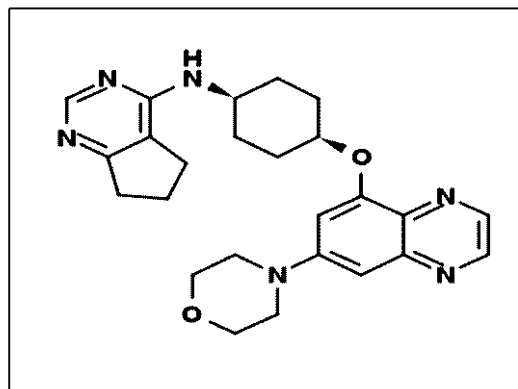
10

20

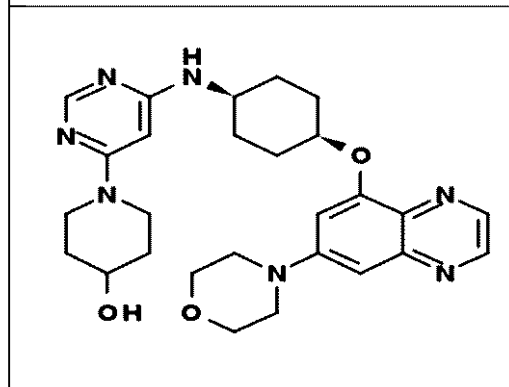
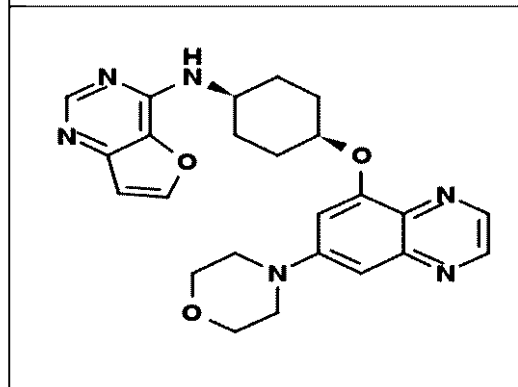
30

40

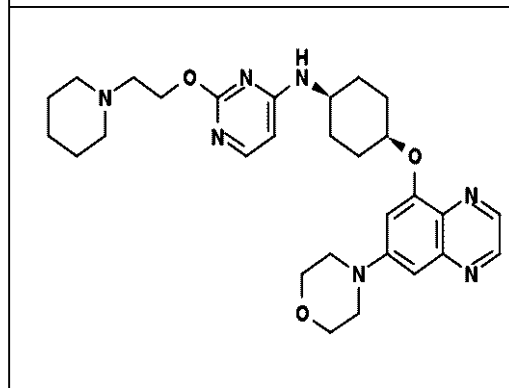
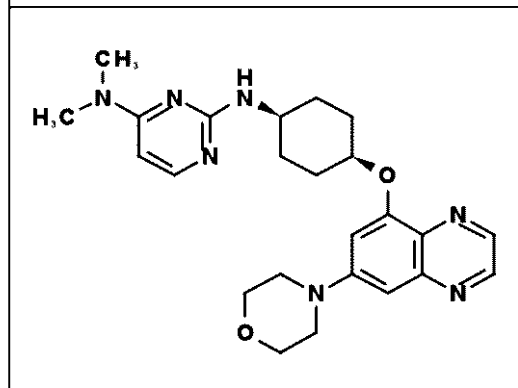
【化 2 0 8】



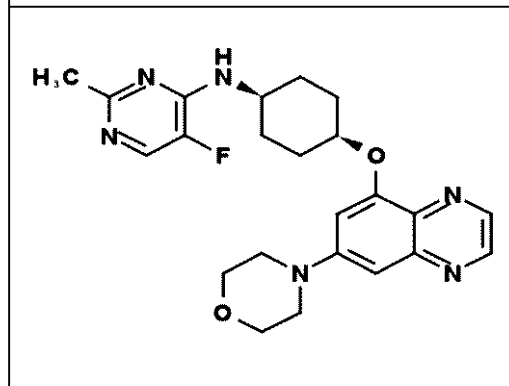
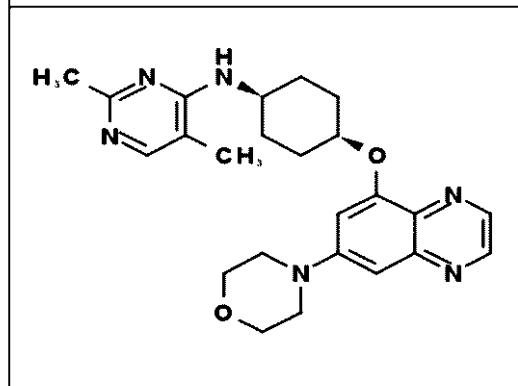
10



20

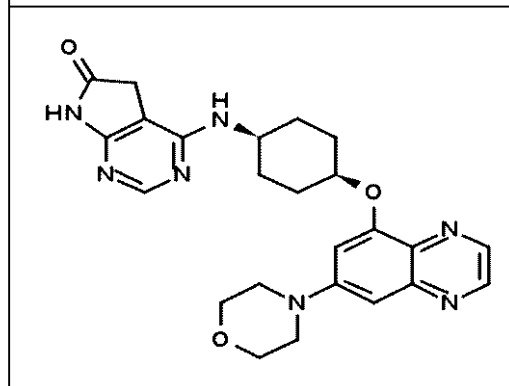
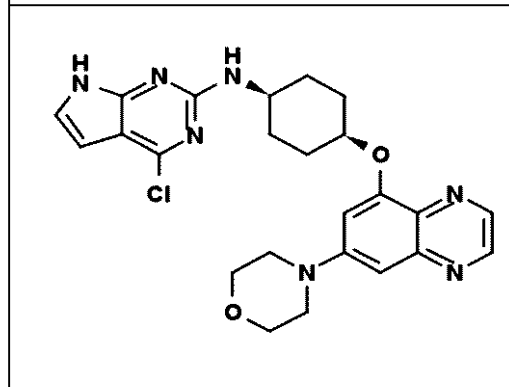
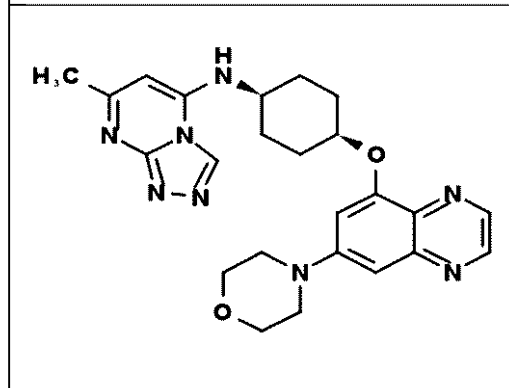
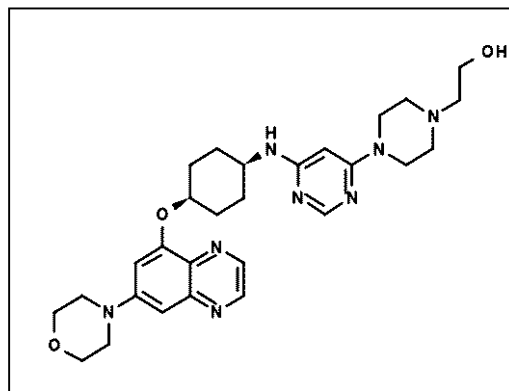
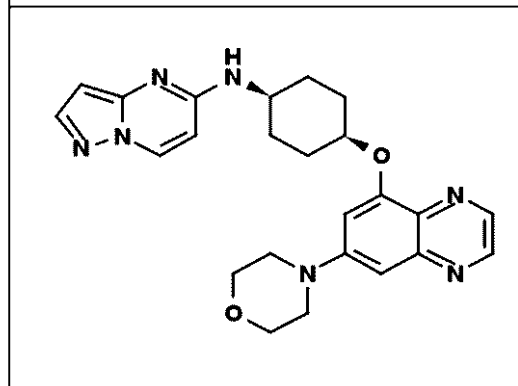
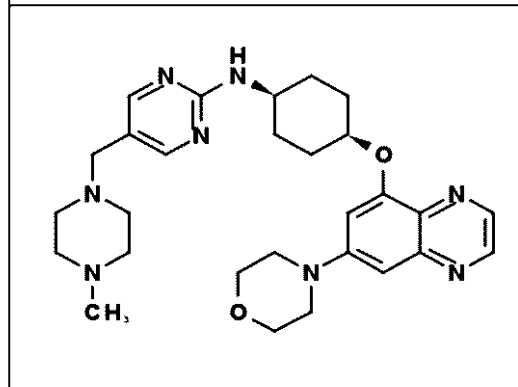
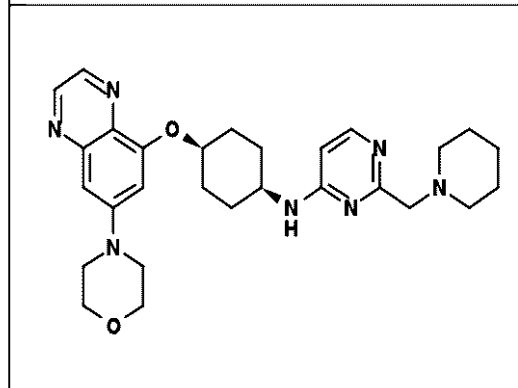
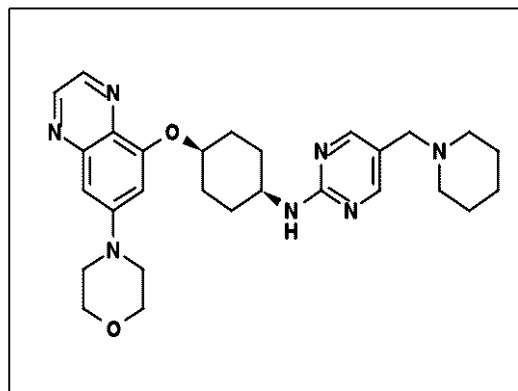


30



40

【化 2 0 9】



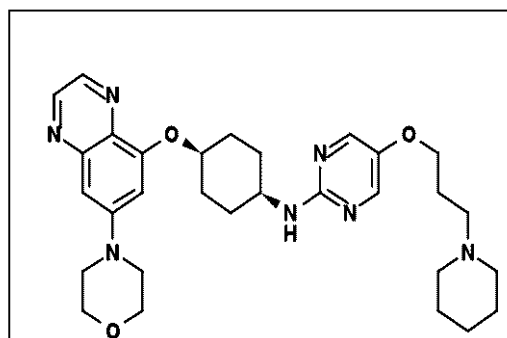
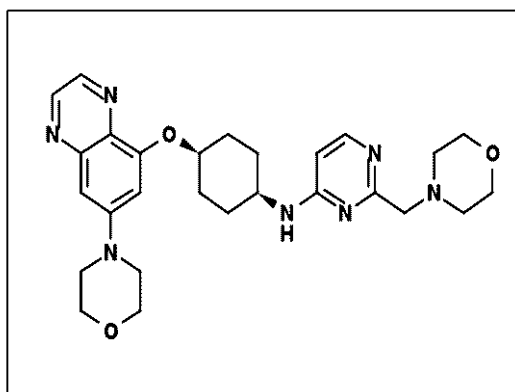
10

20

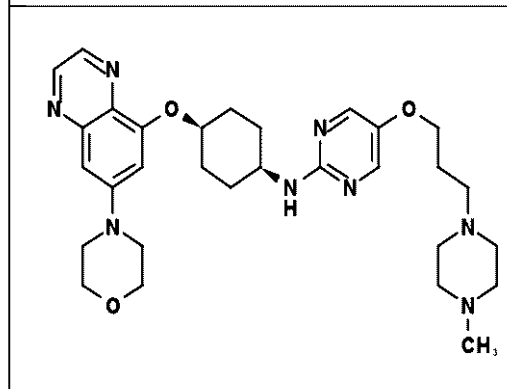
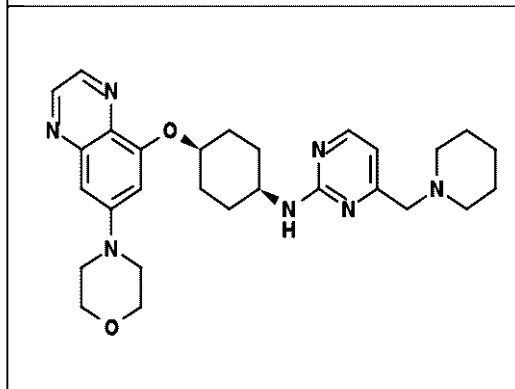
30

40

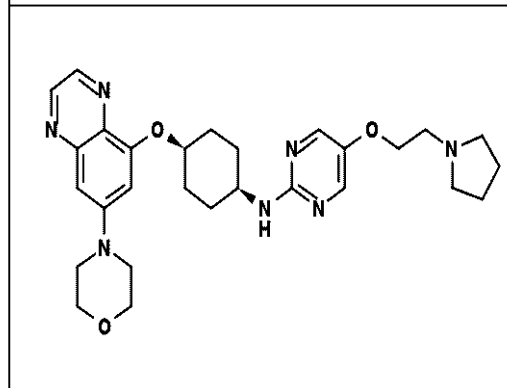
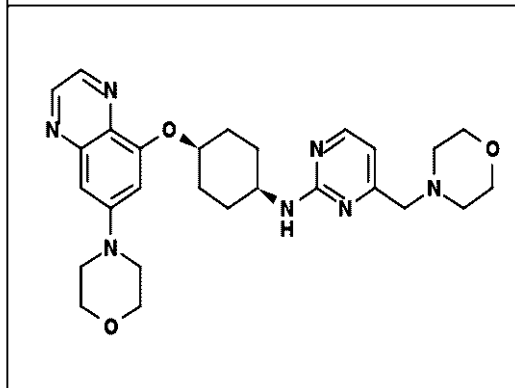
【化 2 1 0】



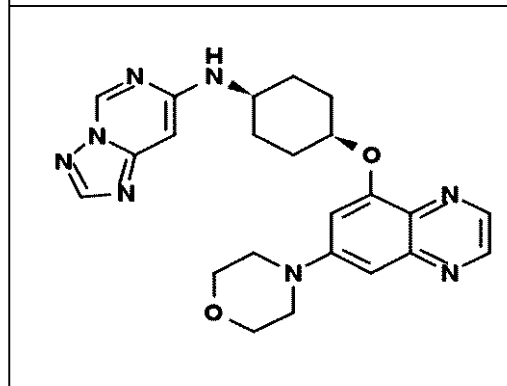
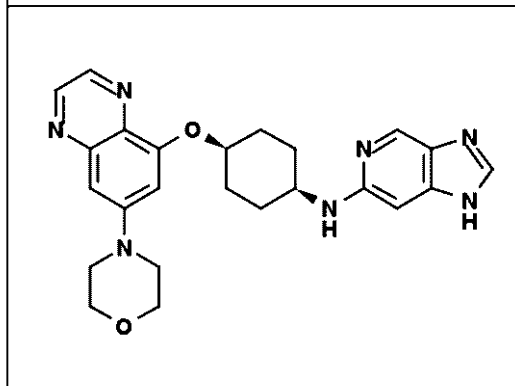
10



20

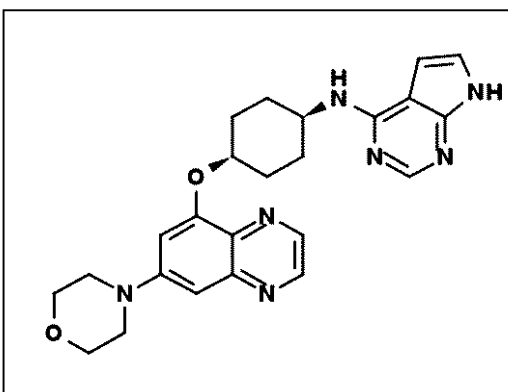
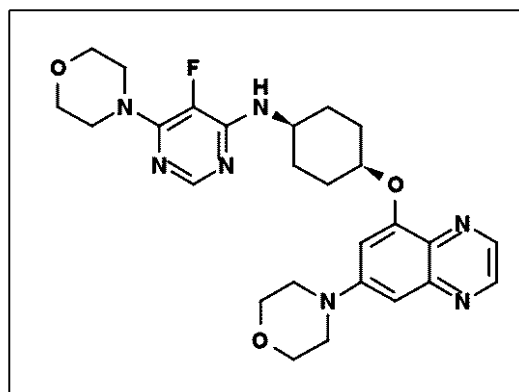


30

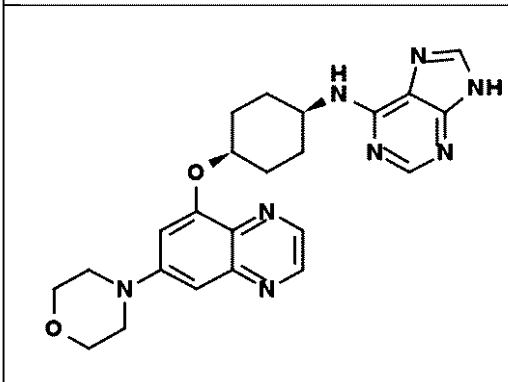
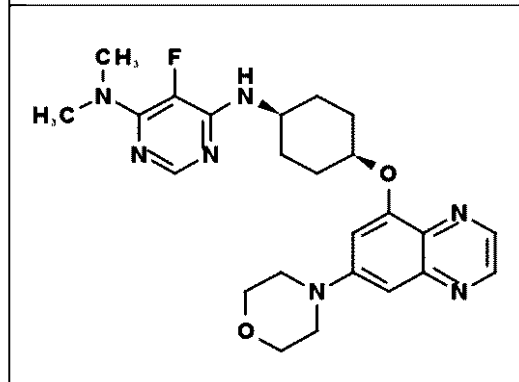


40

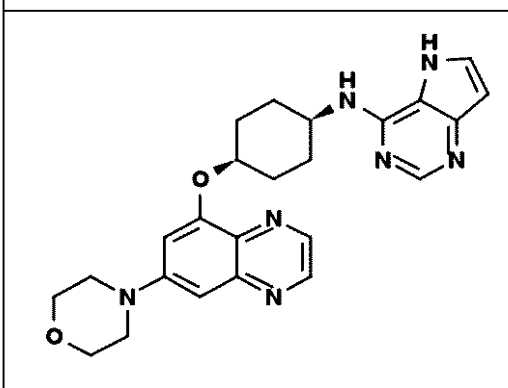
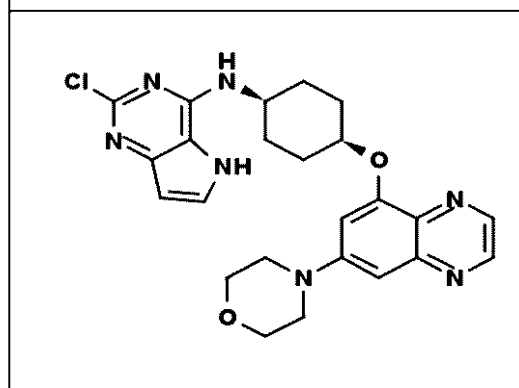
【化 2 1 1】



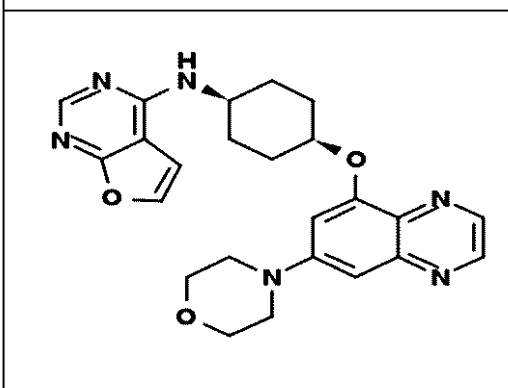
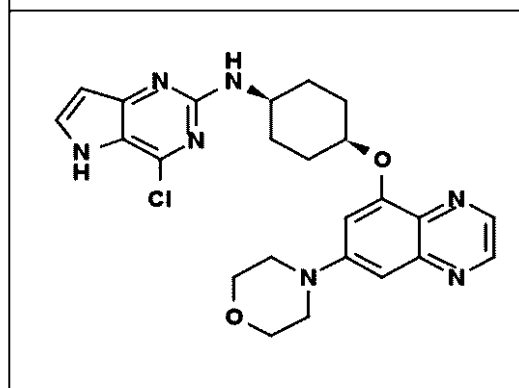
10



20

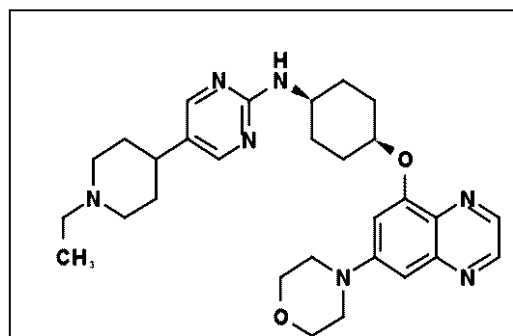
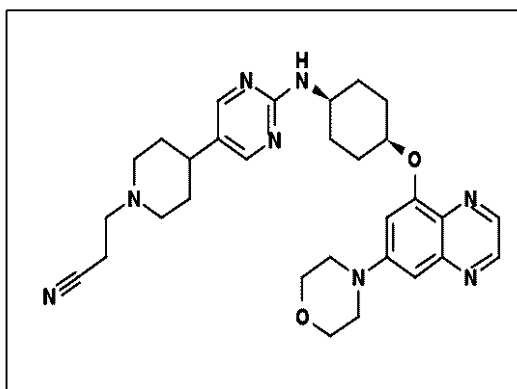


30

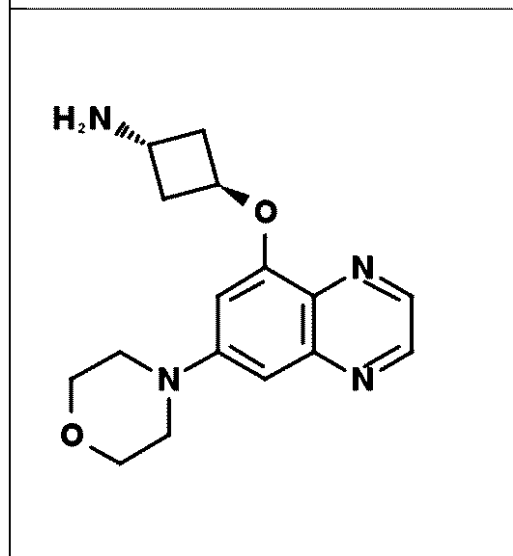
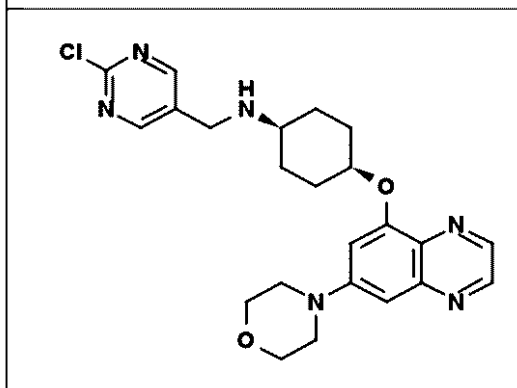


40

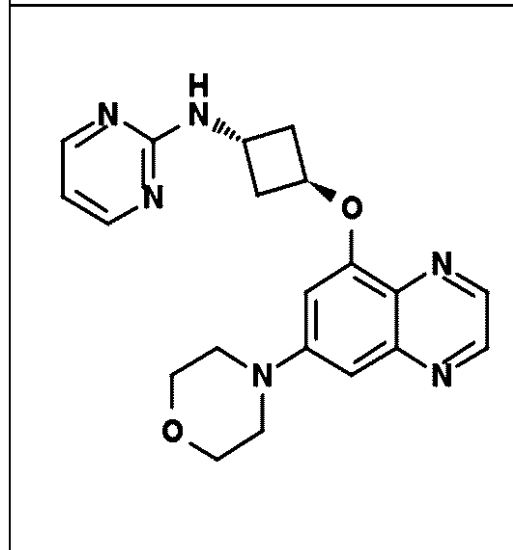
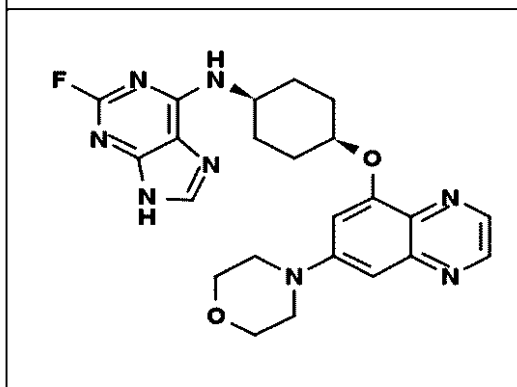
【化 2 1 2】



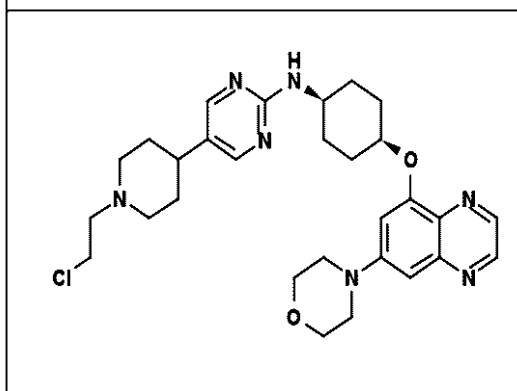
10



20

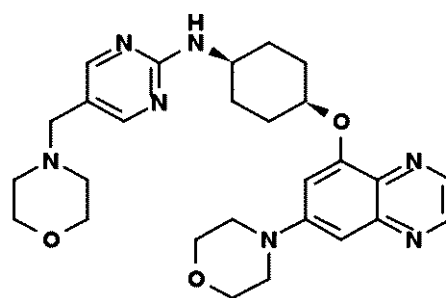
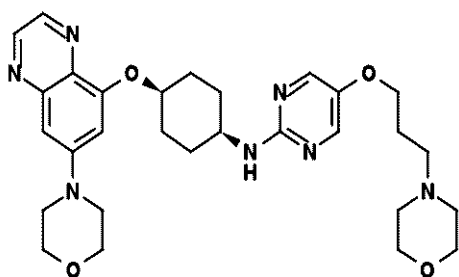


30

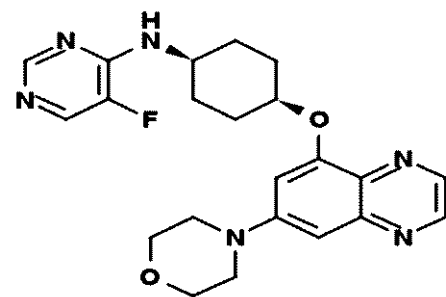
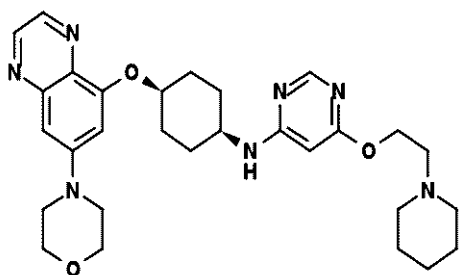


40

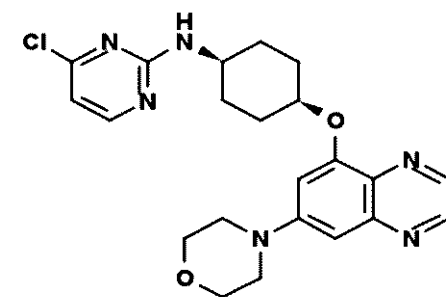
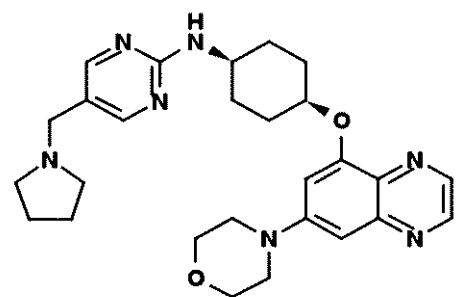
【化 2 1 3】



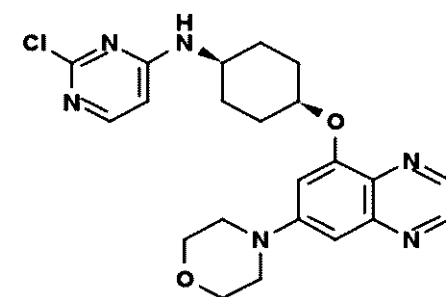
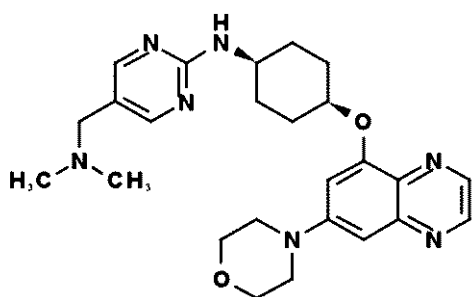
10



20

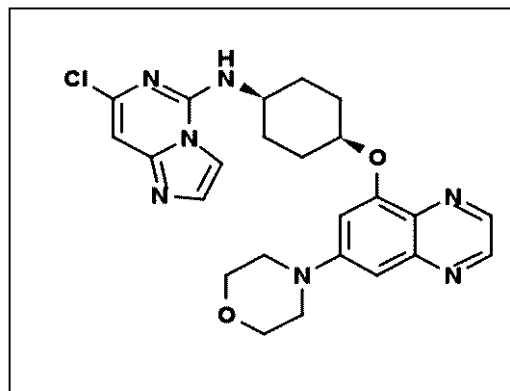
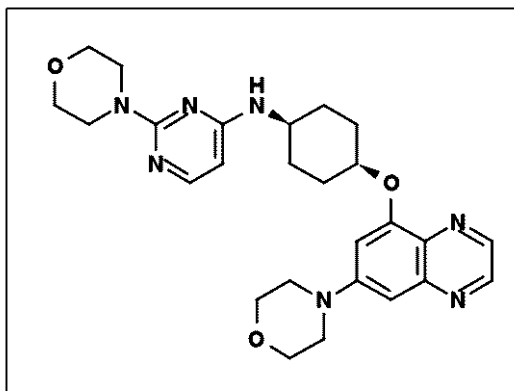


30

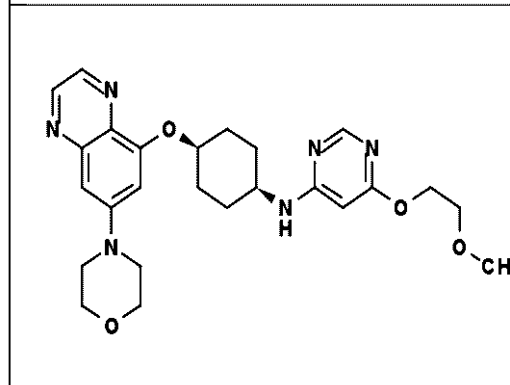
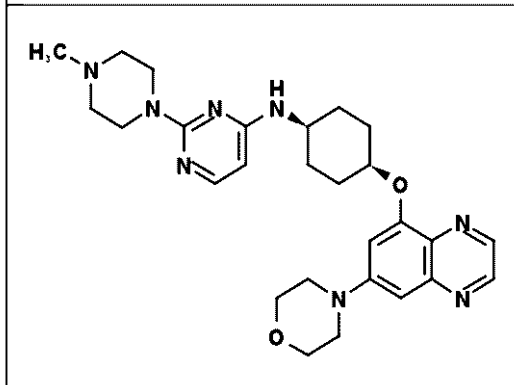


40

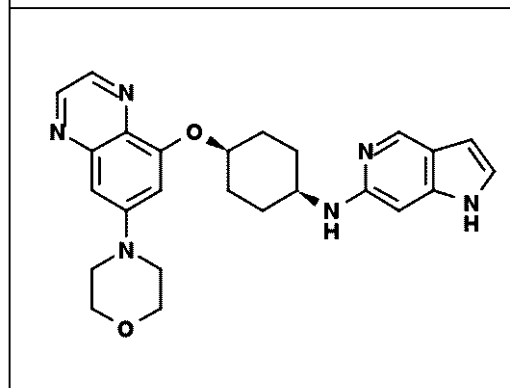
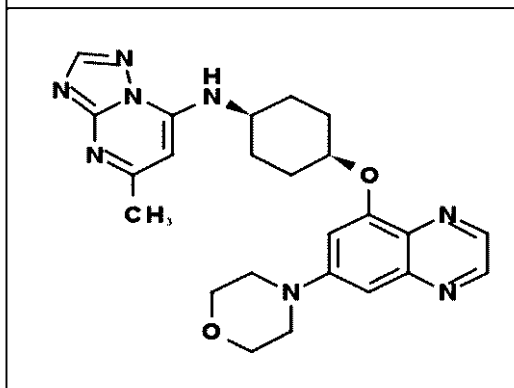
【化 2 1 4】



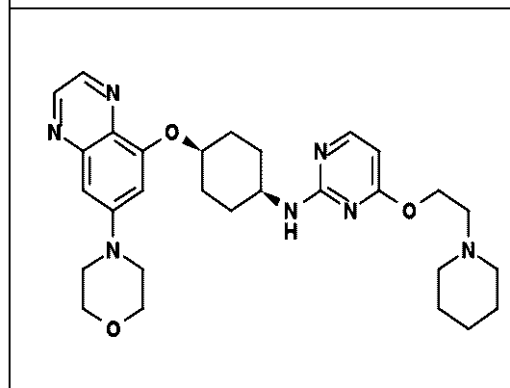
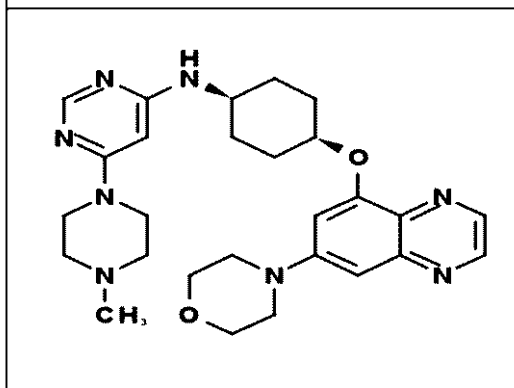
10



20

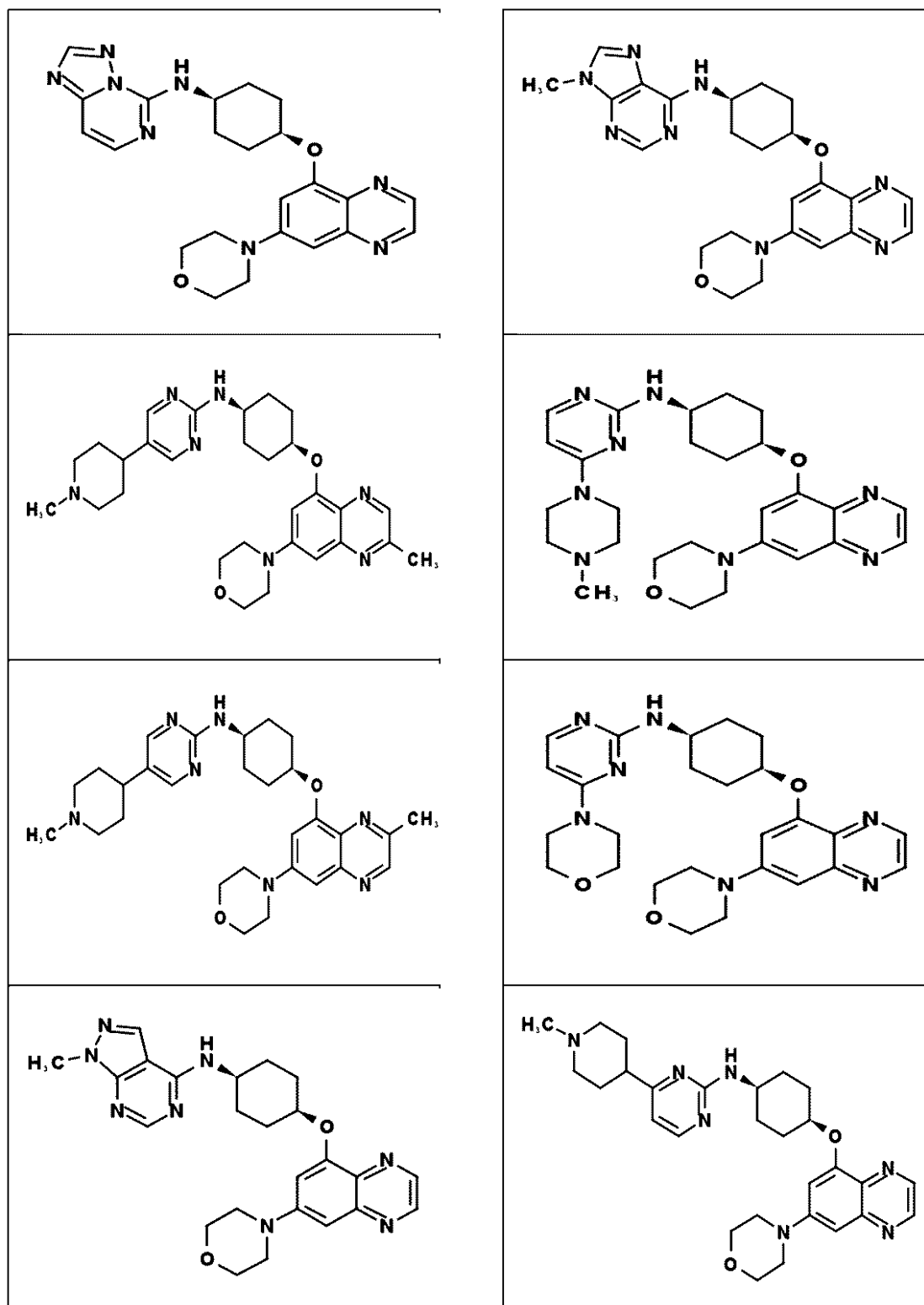


30

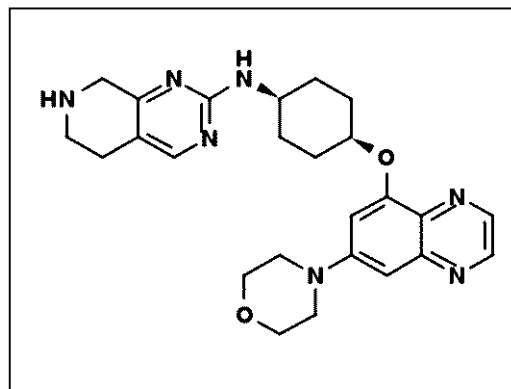
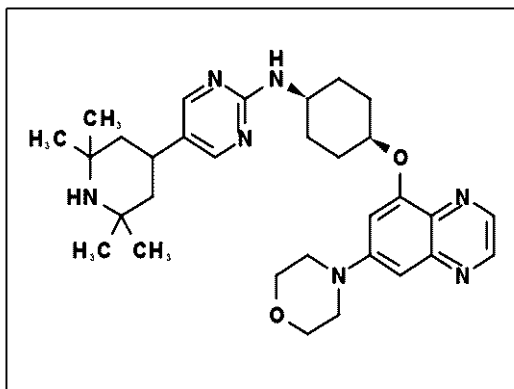


40

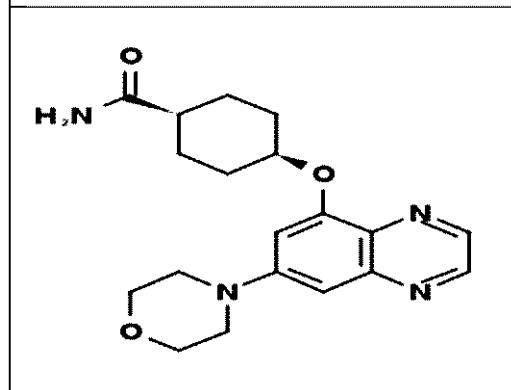
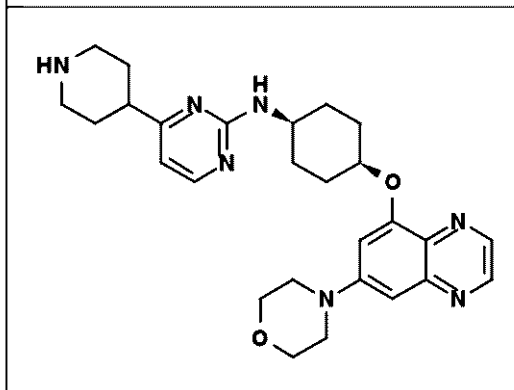
【化 2 1 5】



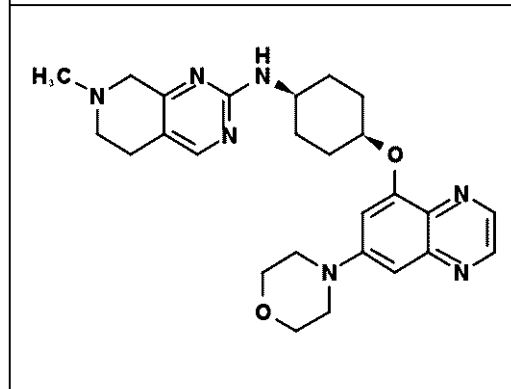
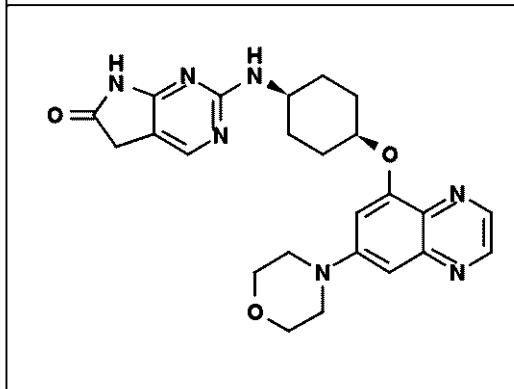
【化 2 1 6】



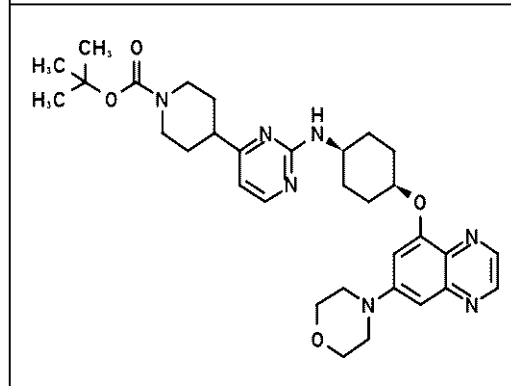
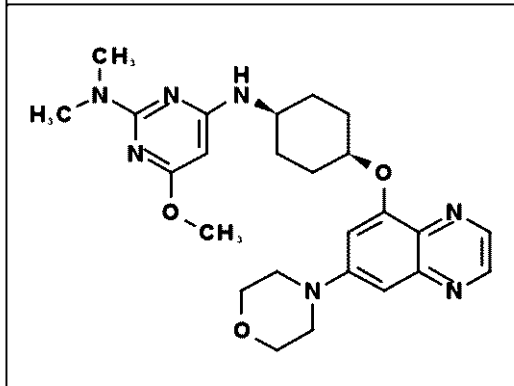
10



20

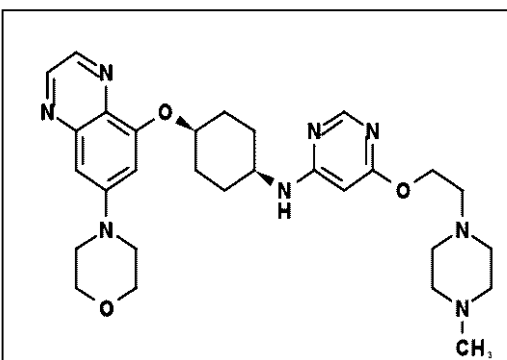
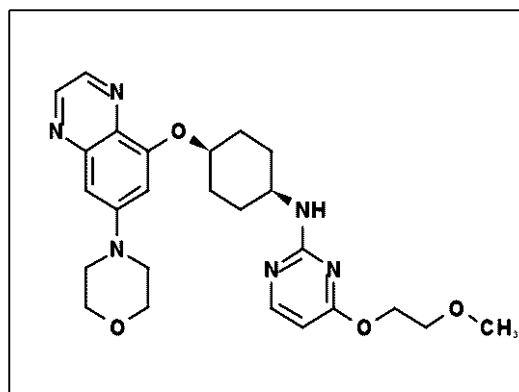


30

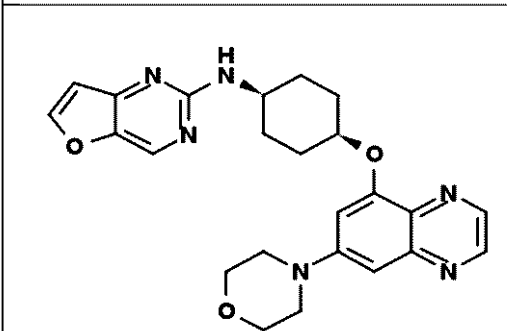
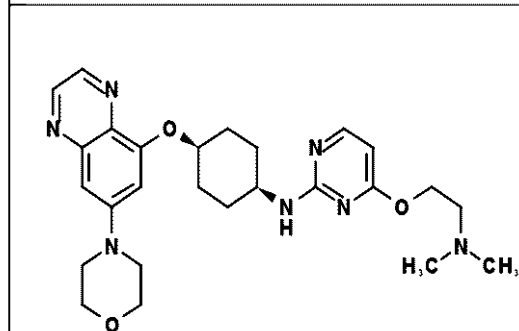


40

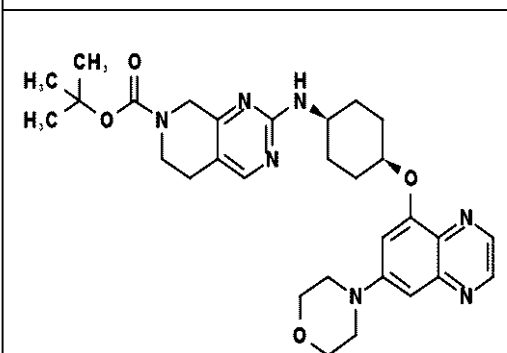
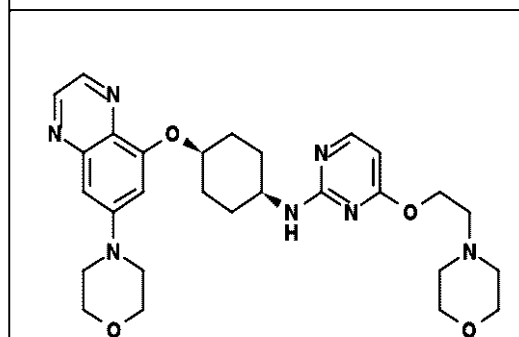
【化 2 1 7】



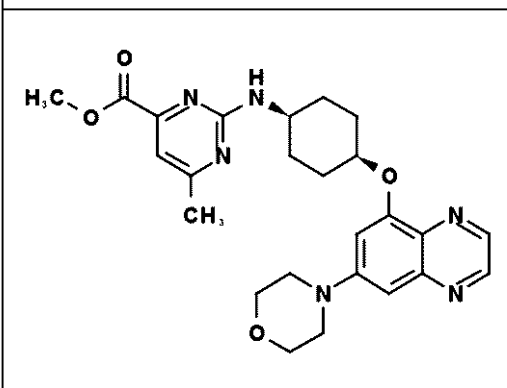
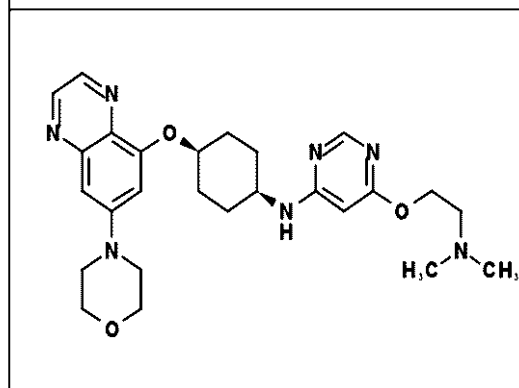
10



20

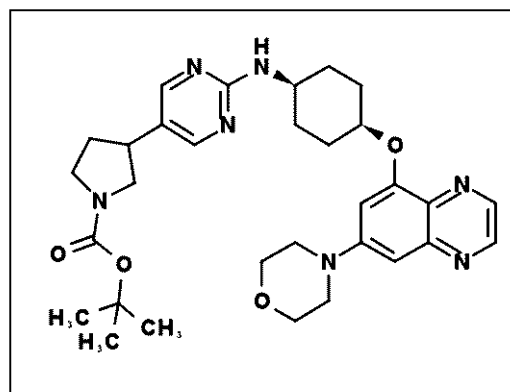
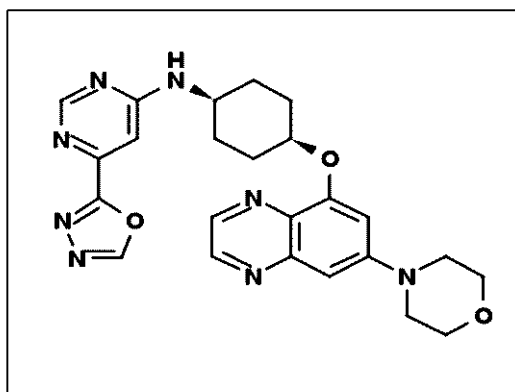


30

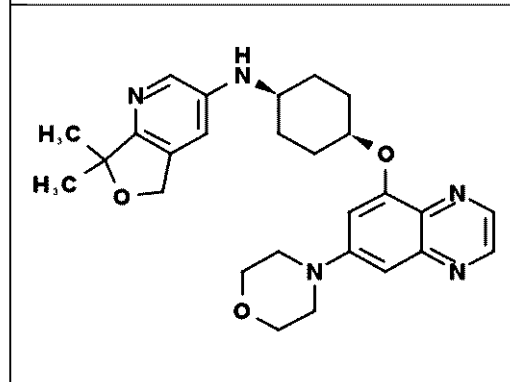
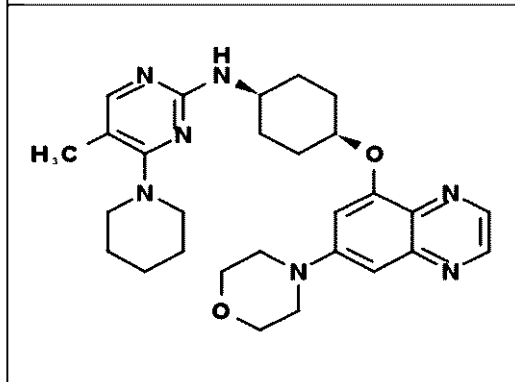


40

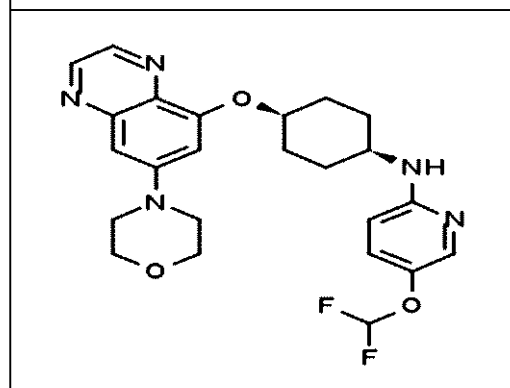
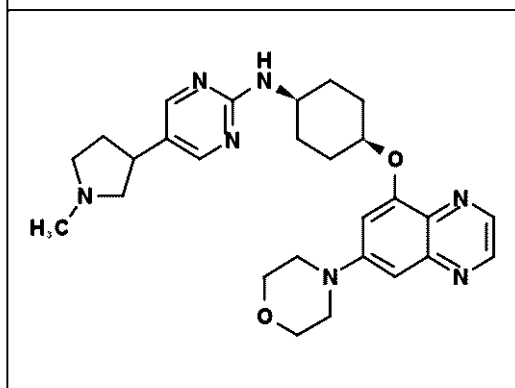
【化 2 1 8】



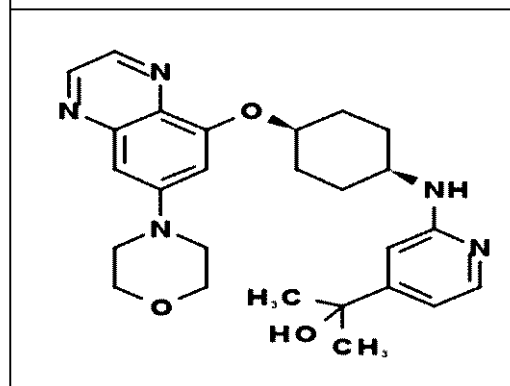
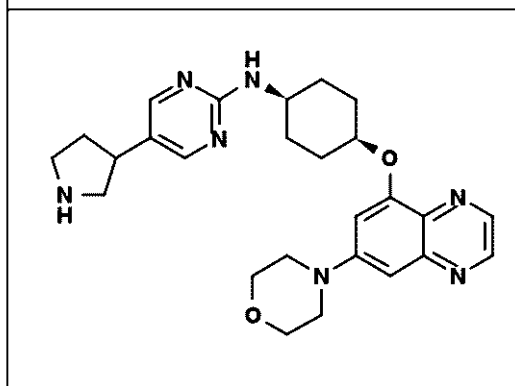
10



20

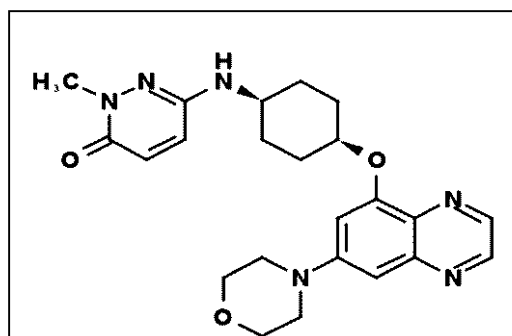
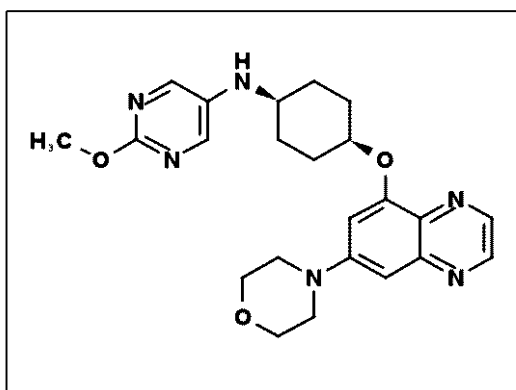


30

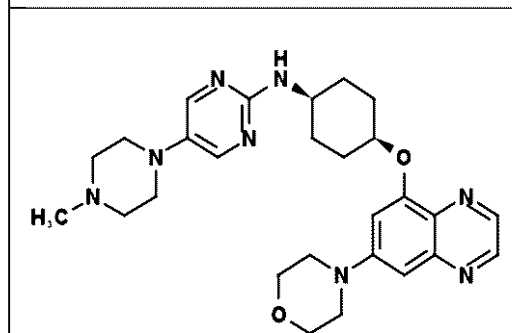
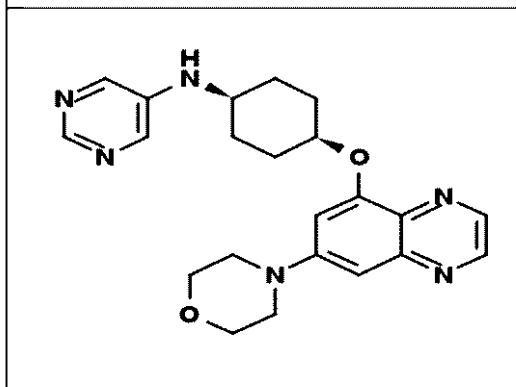


40

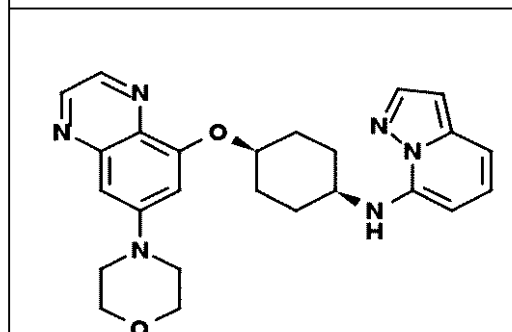
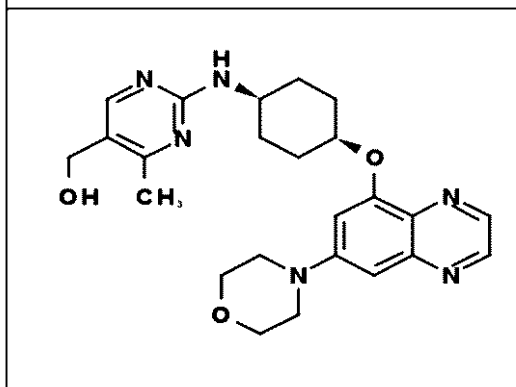
【化 2 1 9】



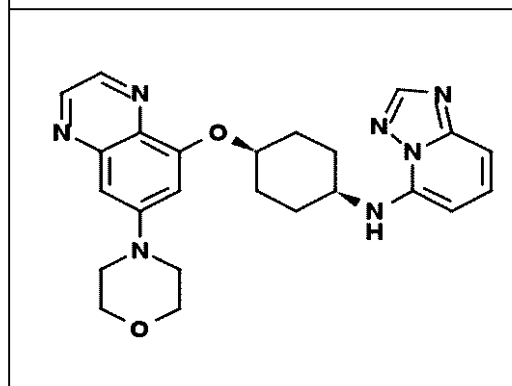
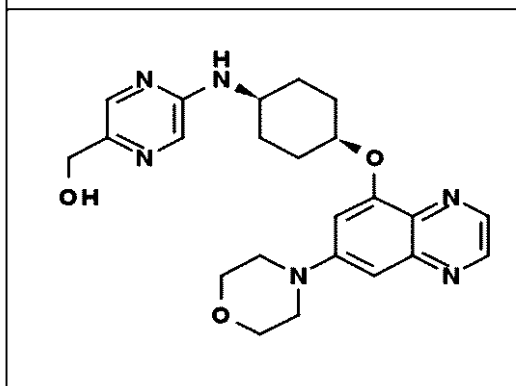
10



20

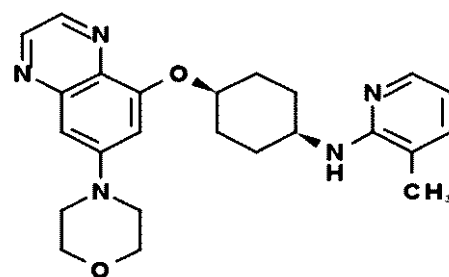
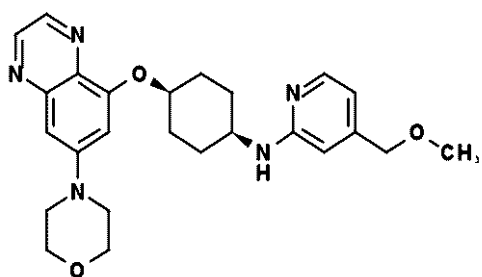


30

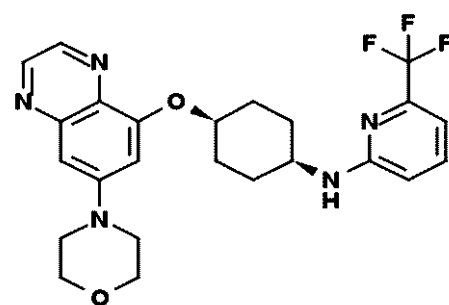
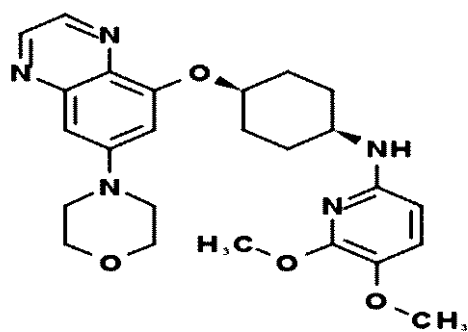


40

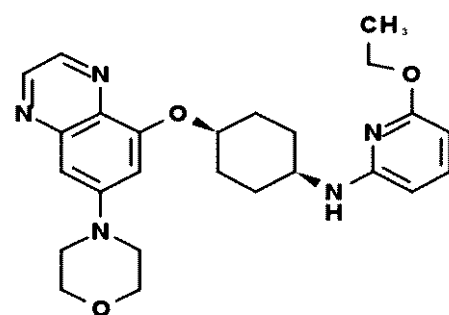
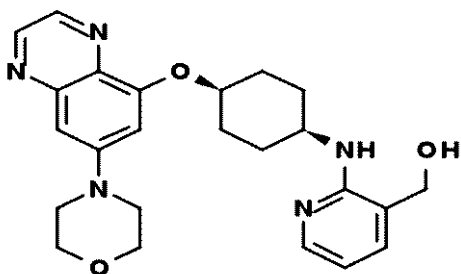
【化 2 2 0】



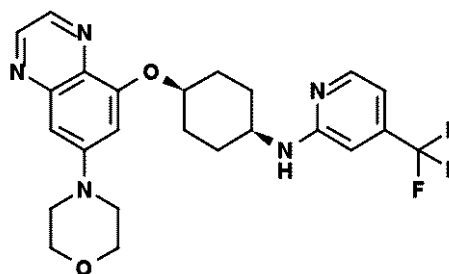
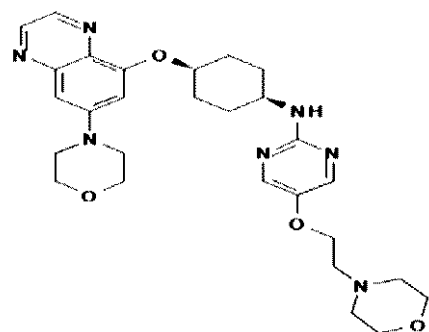
10



20

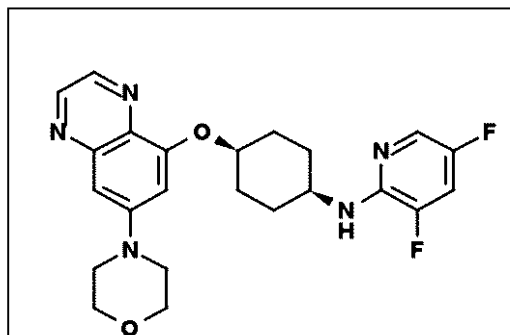
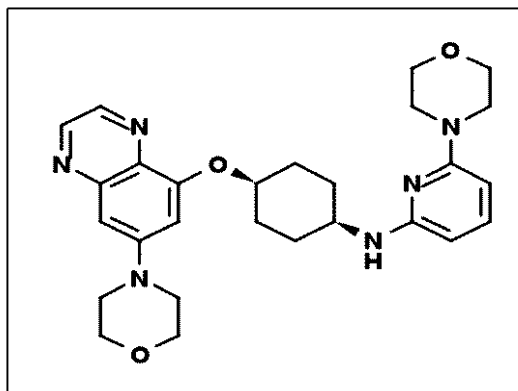


30

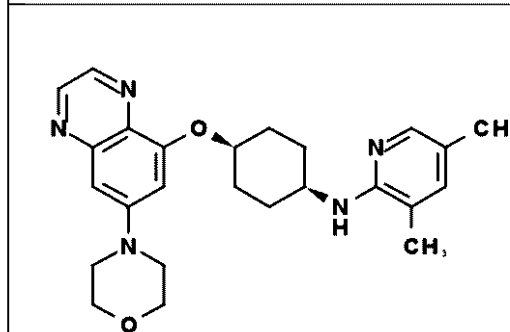
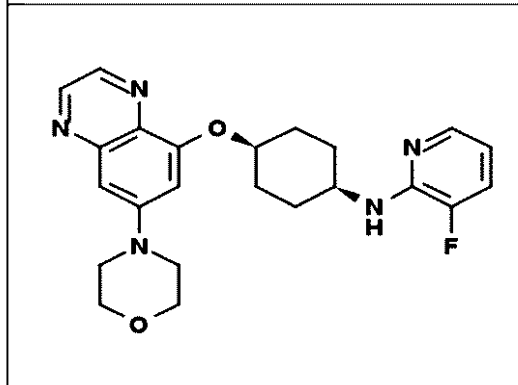


40

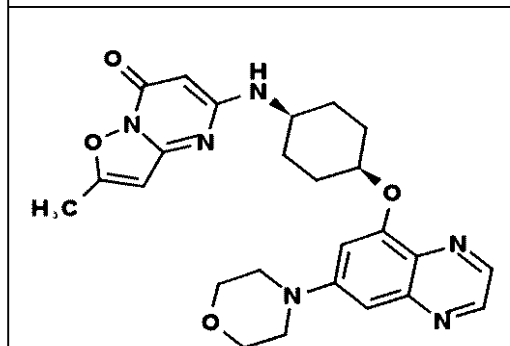
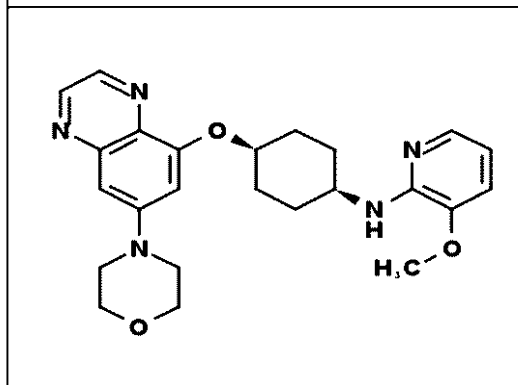
【化 2 2 1】



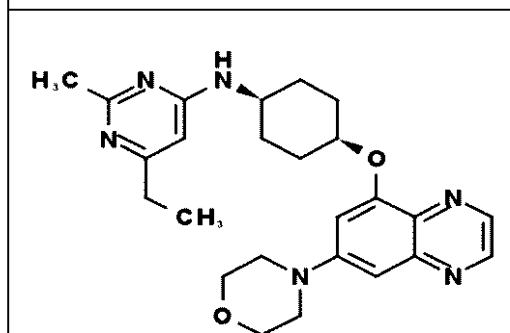
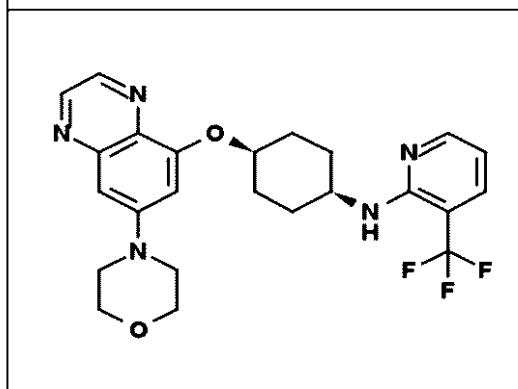
10



20

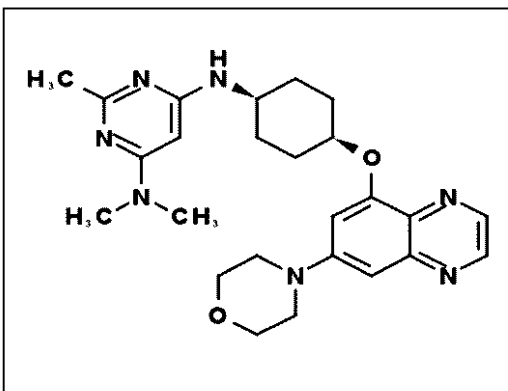
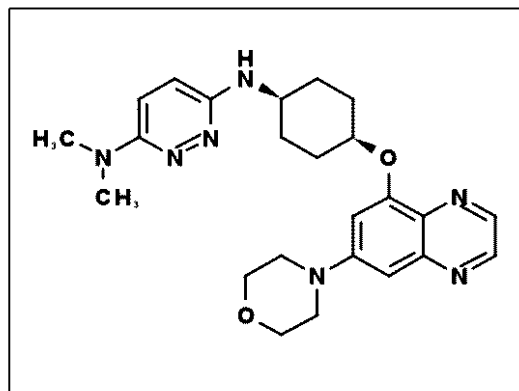


30

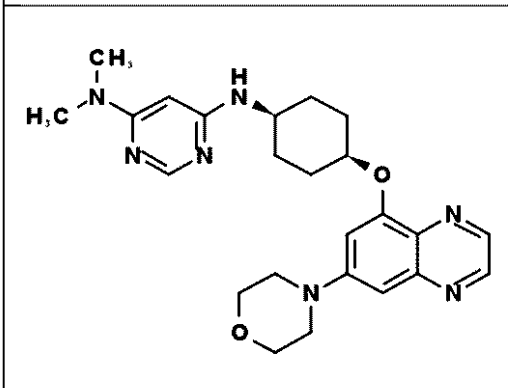
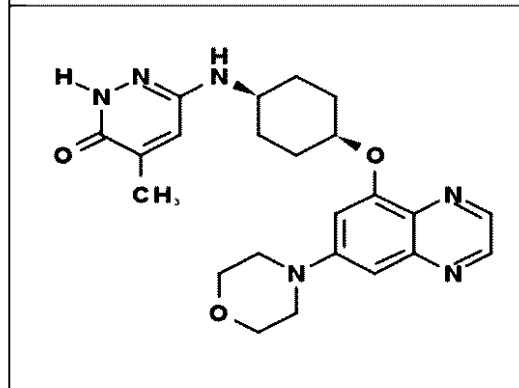


40

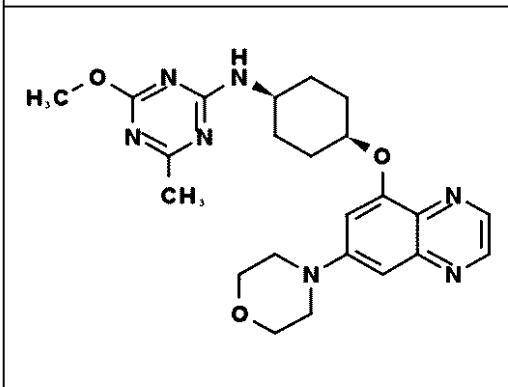
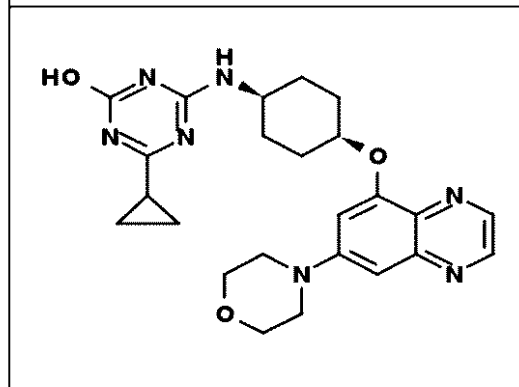
【化 2 2 2】



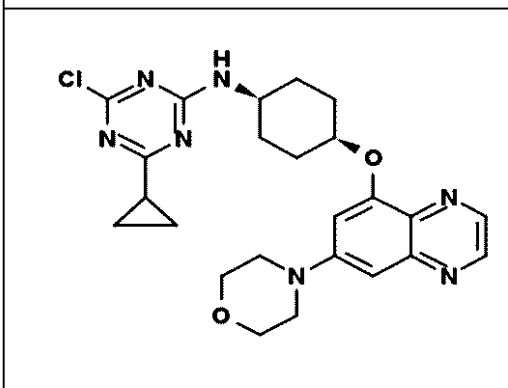
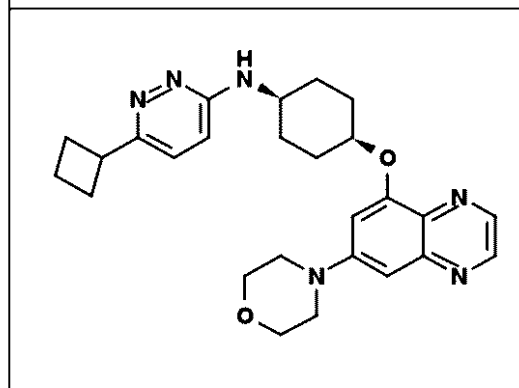
10



20

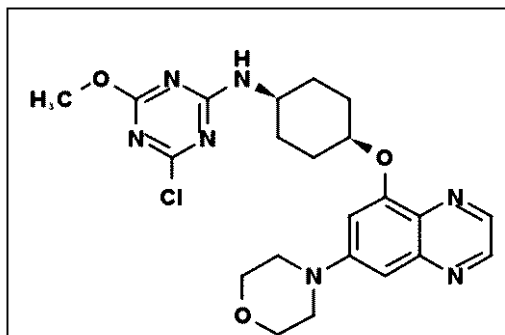
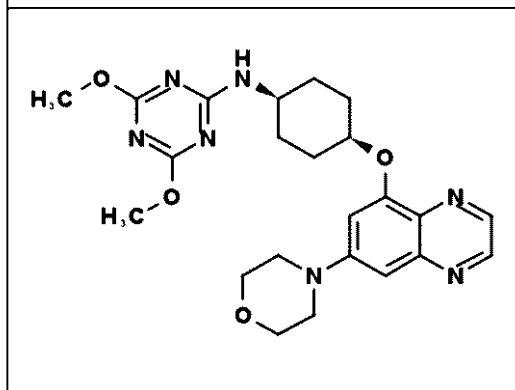
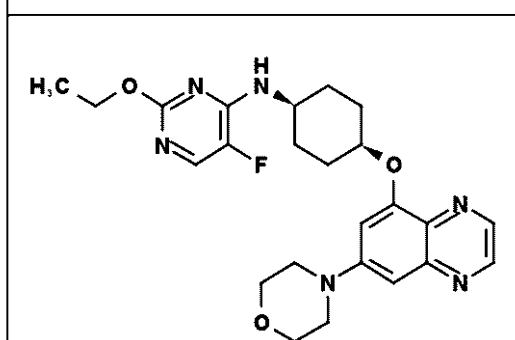
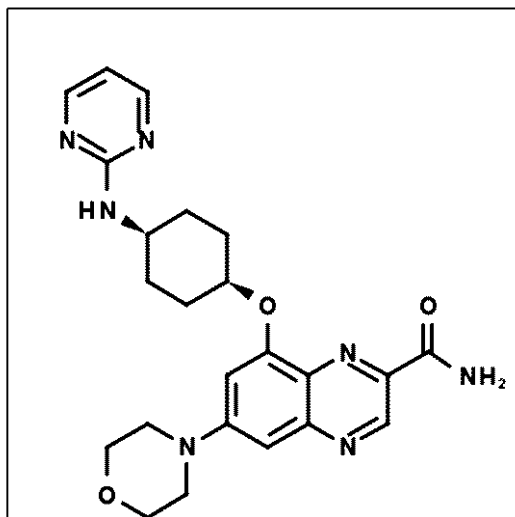


30

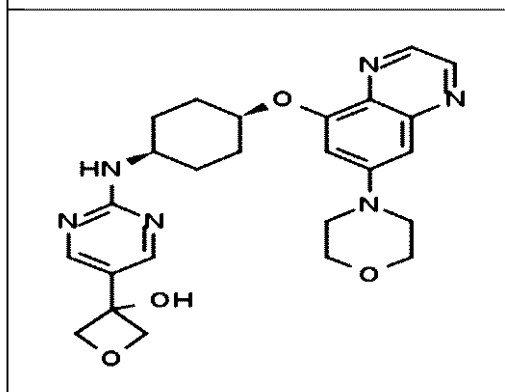


40

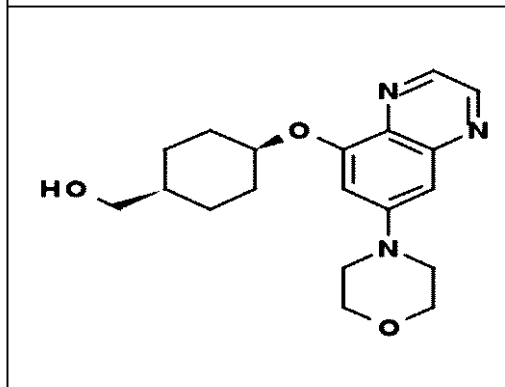
【化 2 2 3】



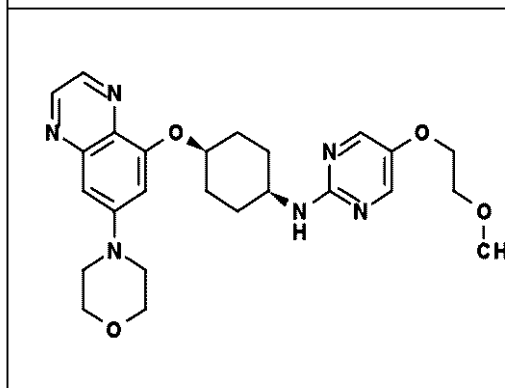
10



20

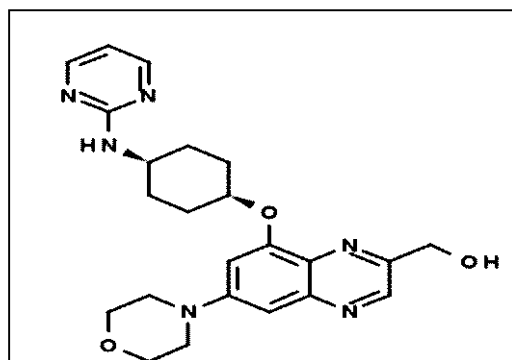
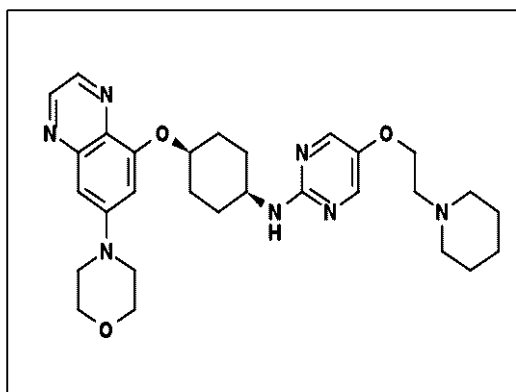


30

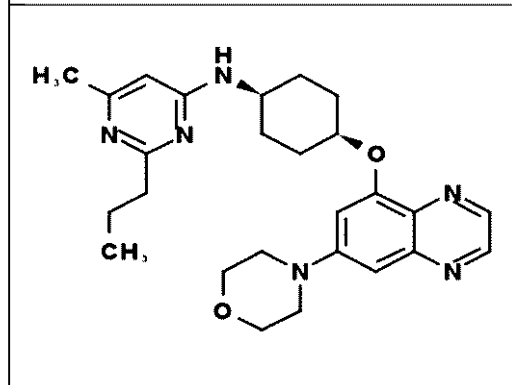
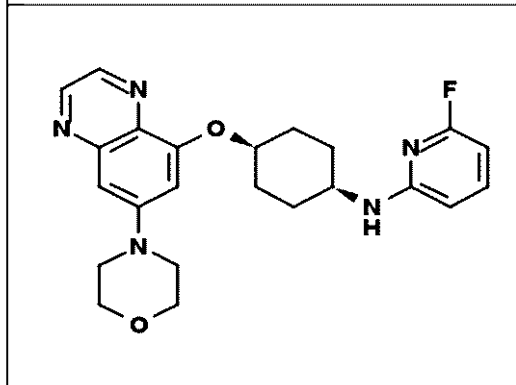


40

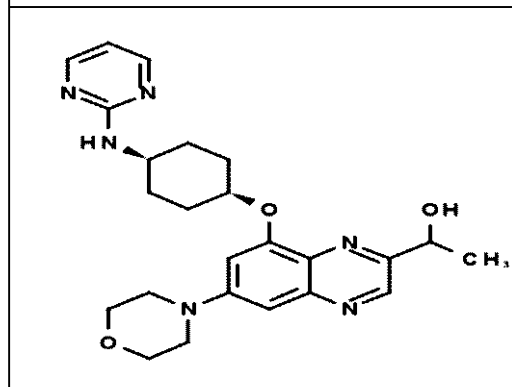
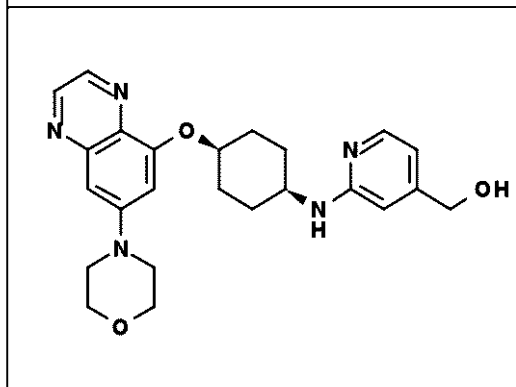
【化 2 2 4】



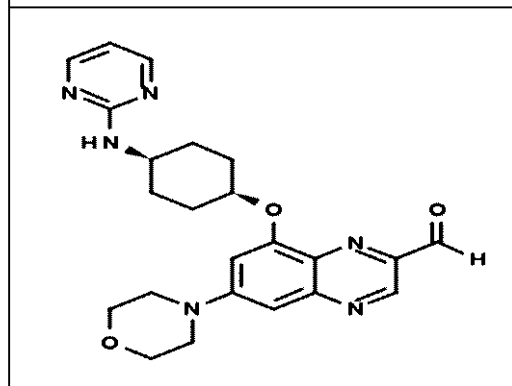
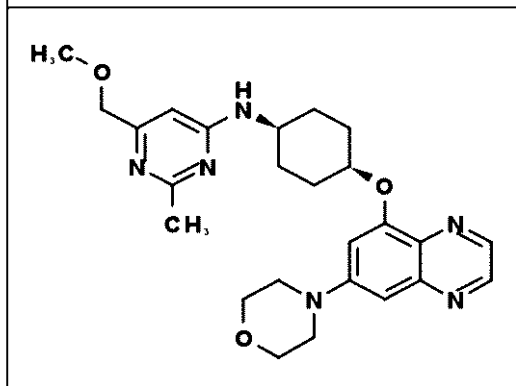
10



20

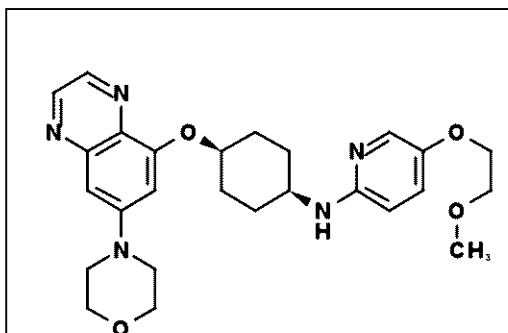
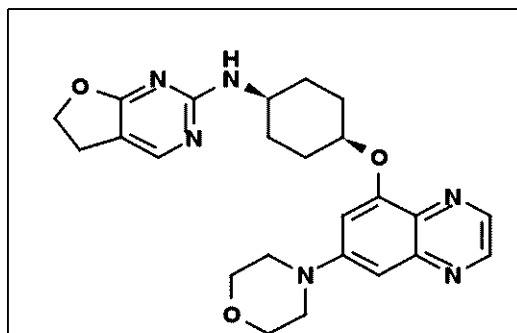


30

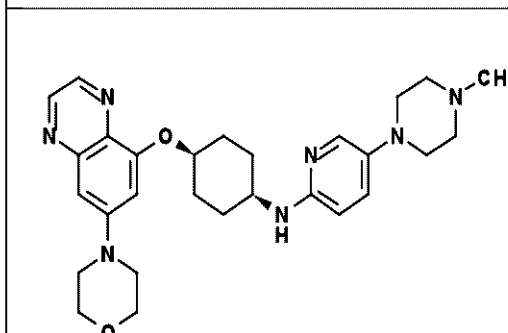
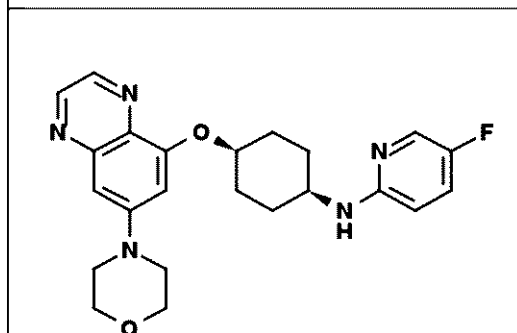


40

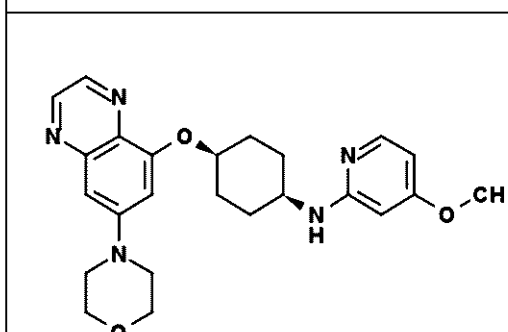
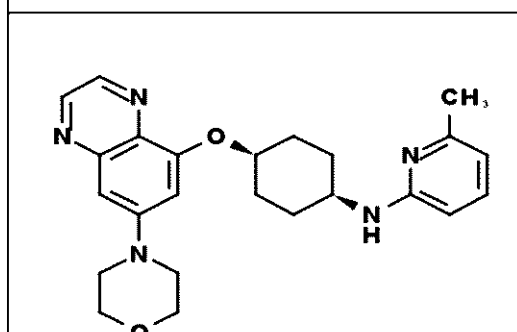
【化 2 2 5】



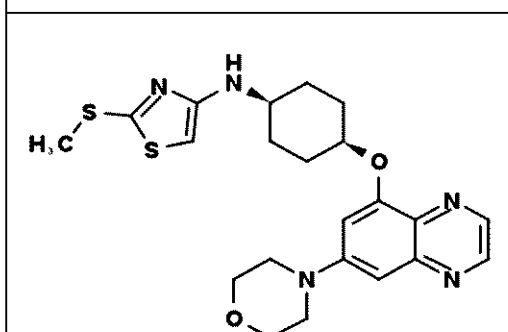
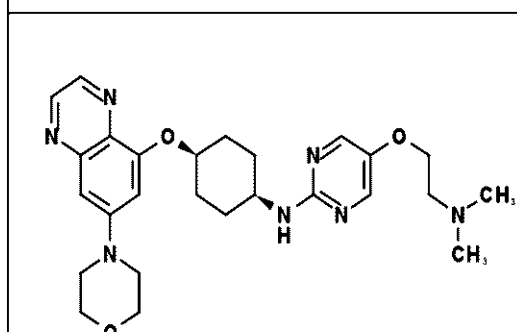
10



20

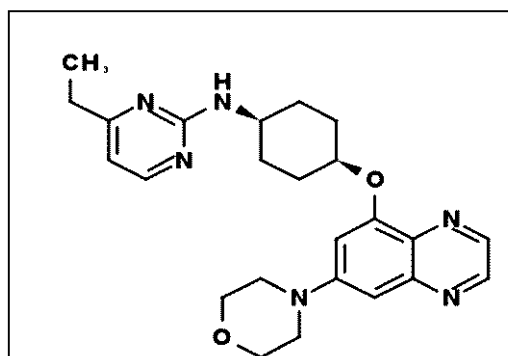
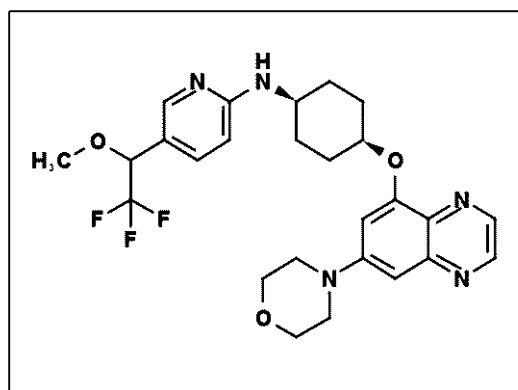


30

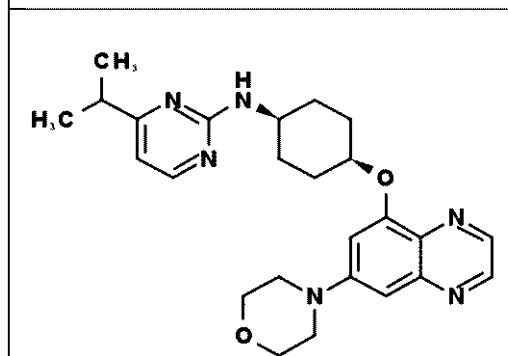
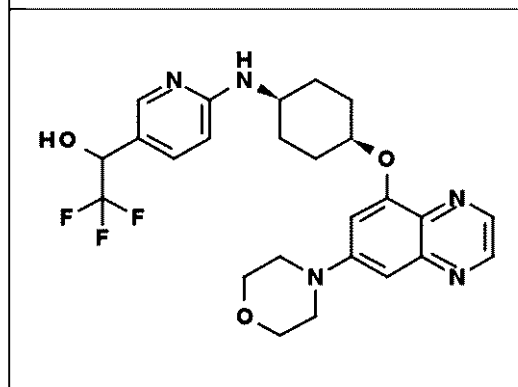


40

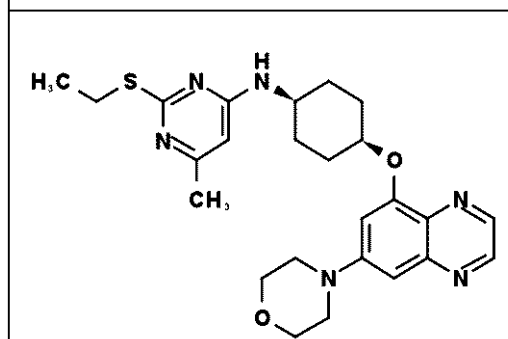
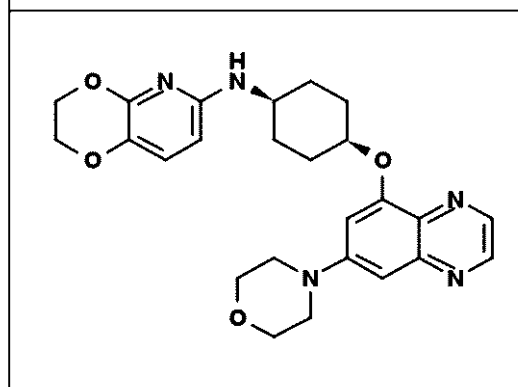
【化 2 2 6】



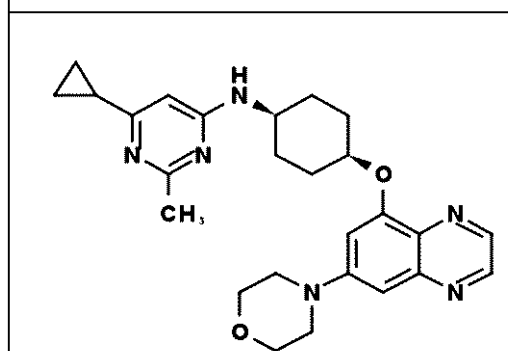
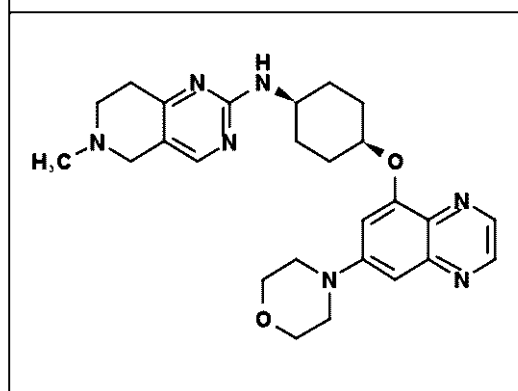
10



20

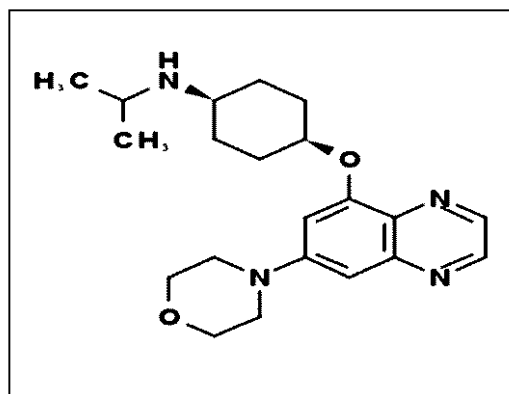
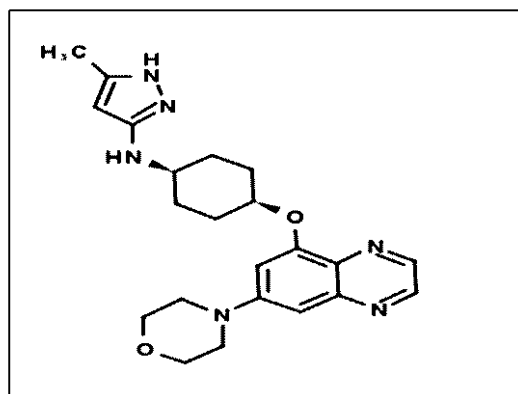


30

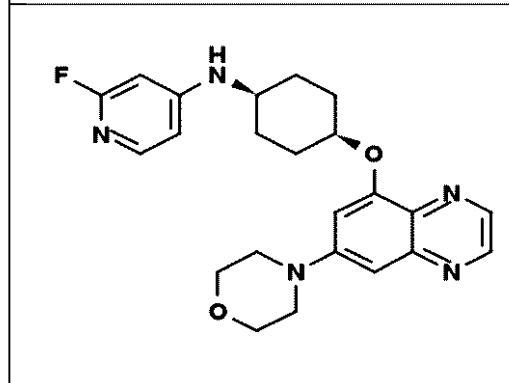
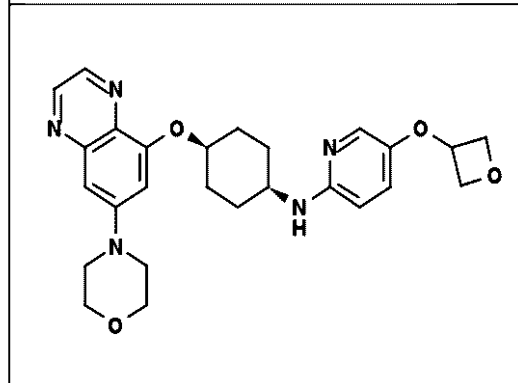


40

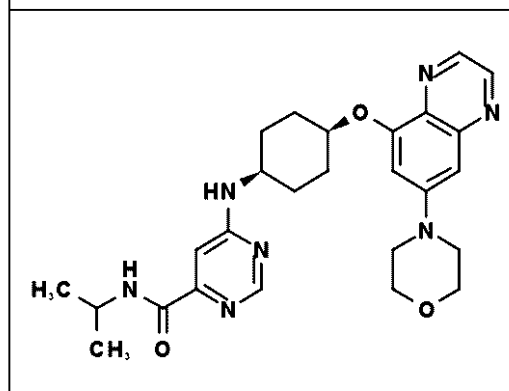
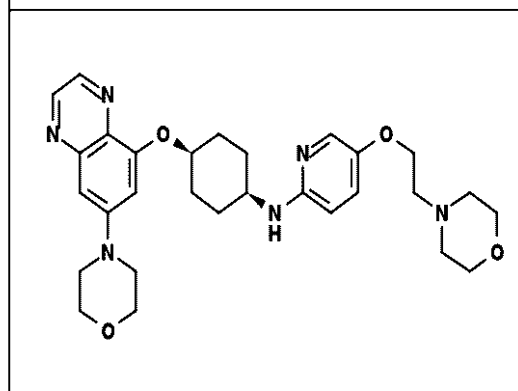
【化 2 2 7】



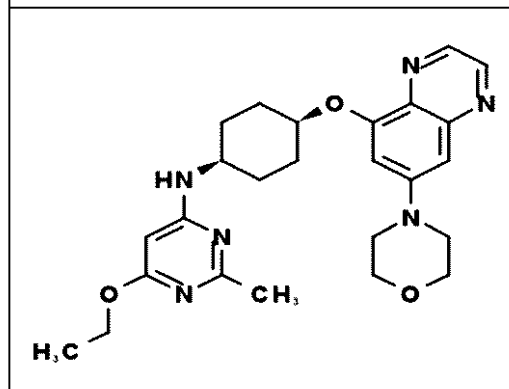
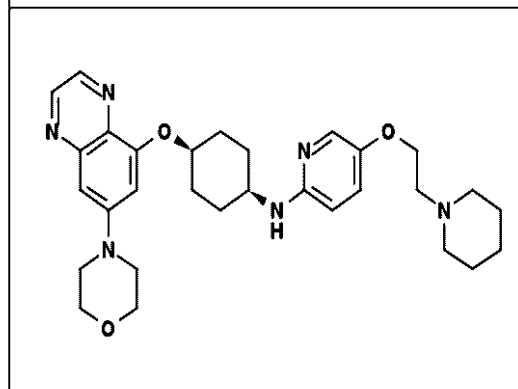
10



20

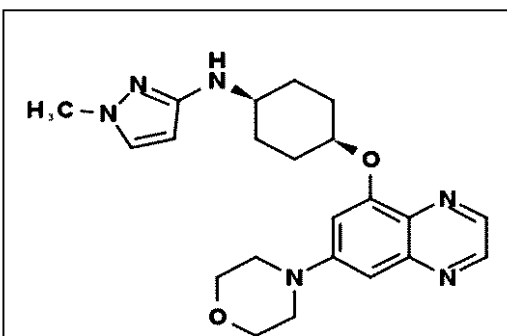
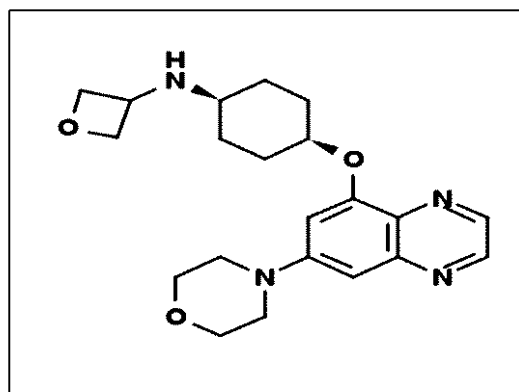


30

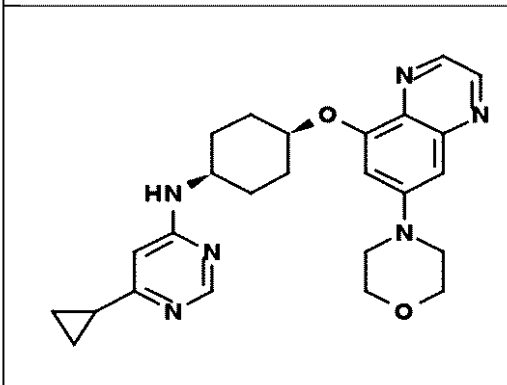
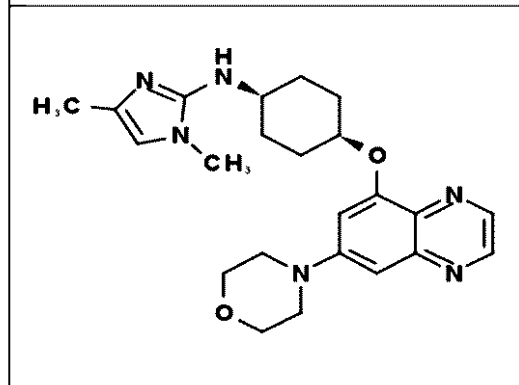


40

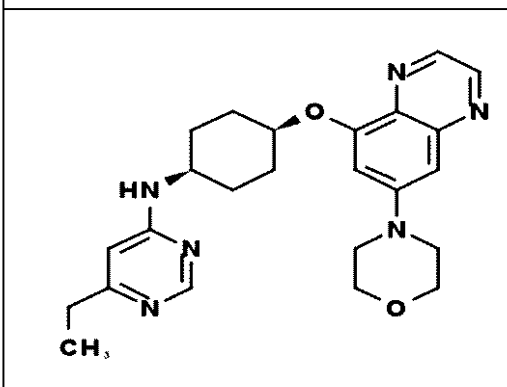
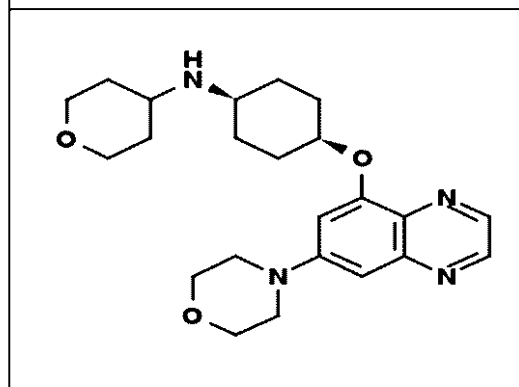
【化 2 2 8】



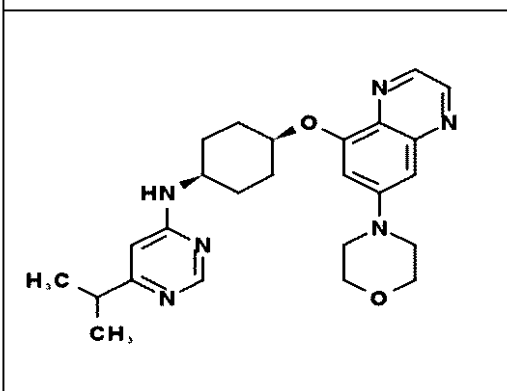
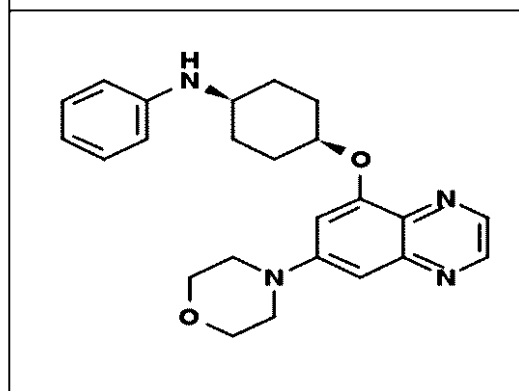
10



20

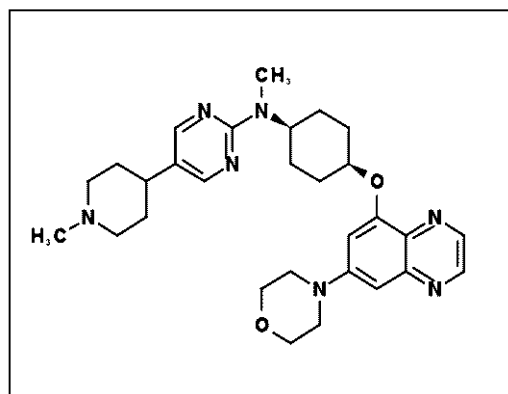
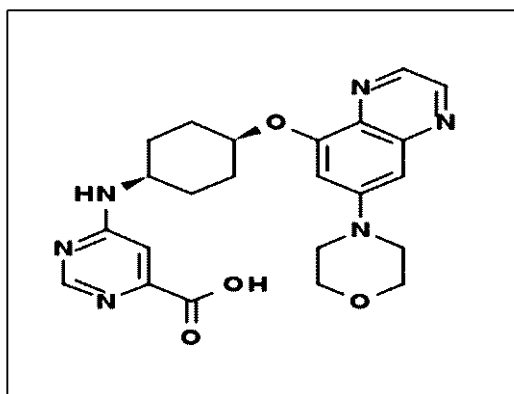


30

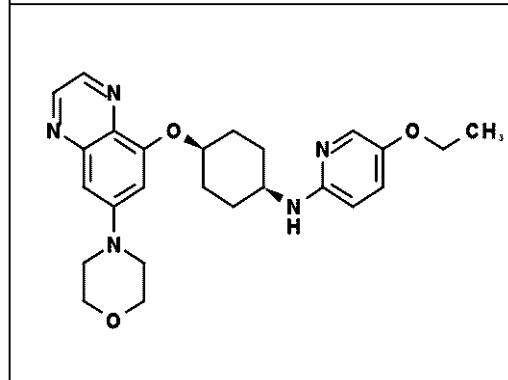
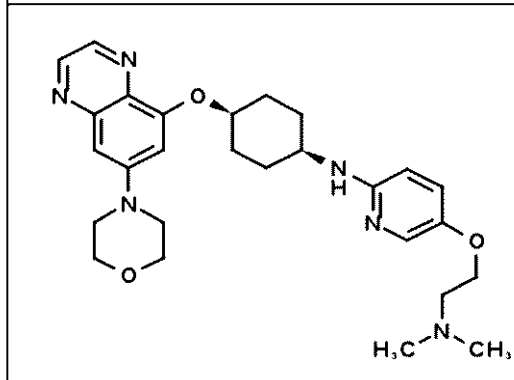


40

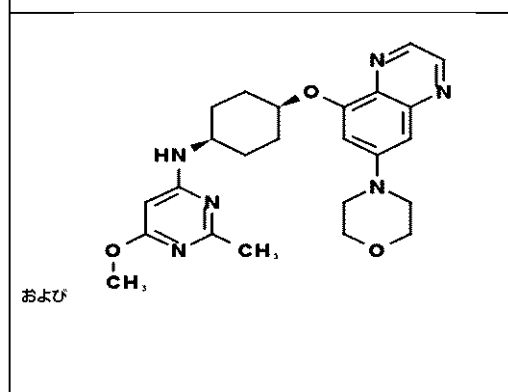
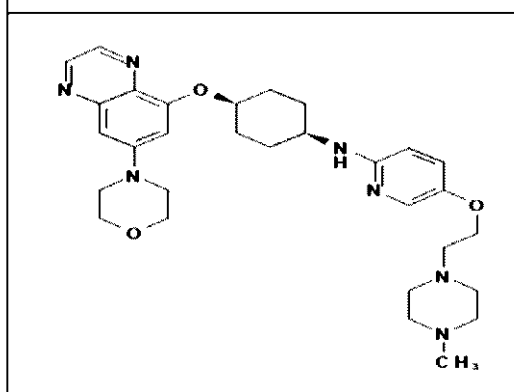
【化 2 2 9】



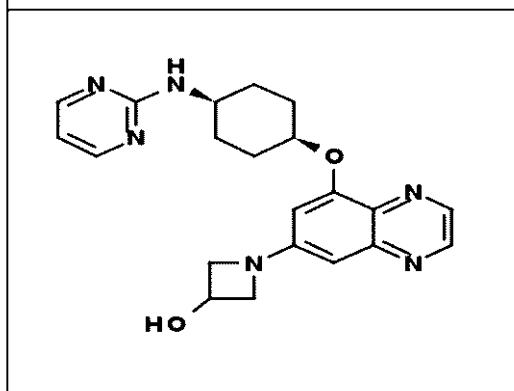
10



20



30



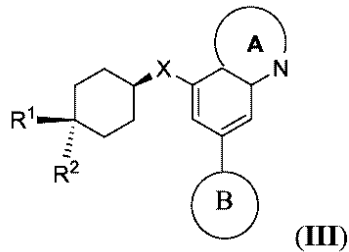
40

からなる群から選択される化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 6 1】

式：

【化 1 3 3】



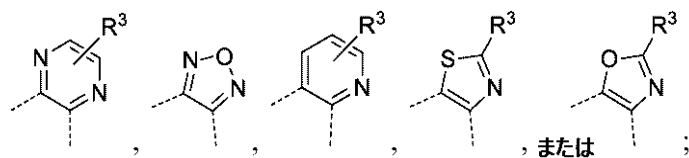
10

を有する化合物

(式中、

環 A は、

【化 1 3 4】

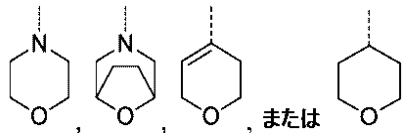


20

であり ;

環 B は、

【化 1 3 5】



であり ;

環 B は、最大 4 個までのフッ素原子、または最大 2 個までの C_{1-4} アルキル (これは、
最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの OH、または最大 2 個までの OC_{1-2} アル
キル基で任意選択で置換されている) で任意選択で置換されており、

30

X は、 $-NH-$ 、または $-O-$ であり ;

R^1 および R^2 のそれぞれは、独立に、水素、 $-C(O)NHR^4$ 、 $-C(O)OR^4$ 、
 $-NHC(O)R^4$ 、 $-NHC(O)OR^4$ 、 $-NHC(O)NHR^4$ 、 $-NHS(O)_2R^4$ 、 $-NHR^4$ 、または $-OR^4$ であり、ここでは、 R^1 および R^2 は、同時に水素
ではあり得ず、かつ、 R^1 および R^2 および介在する炭素原子は、ジオキサンまたはジオ
キソラン環を形成することができ ;

R^3 は、水素、 $-C_{1-4}$ アルキル、フルオロ、クロロ、 $-OC_{1-2}$ アルキル、 $-C(O)OH$ 、 $-C(O)OC_{1-2}$ アルキル、 $-CN$ 、 $-C(O)NHC_{1-2}$ アルキル、
または $-C(O)NH_2$ であり、ここでは、該 R^3 アルキルのそれぞれは、最大 3 個まで
のフッ素原子、最大 2 個までの OH、または最大 2 個までの OC_{1-2} アルキル基で任意
選択で置換されており ;

40

R^4 は、水素、 C_{1-4} アルキル、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-5}
シクロアルキル、フェニル、5 ~ 10 員の単環または二環のヘテロアリール環 (ピロール
、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾー
ル、ピリジン、ピリミジン、ピリミジノン、ピラジン、ピリダジン、およびキノリンから
選択される)、または 4 ~ 10 員の単環または二環のヘテロシクリル環 (オキセタン、テ
トラヒドロフラン、テトラヒドロピラン、ジヒドロイソオキサゾール、ピリミジン - 2 ,
4 (1H, 3H) - ジオン、ジヒドロフロピリミジン、ジヒドロピラノピリミジン、ジヒ

50

ドロピロロピリミジン、テトラヒドロプテリジン、およびテトラヒドロピリドピリミジンから選択される)であり、ここでは、該 R^4 基のそれぞれは、Br、Cl、最大3個までのフッ素原子、最大3個までの、 C_{1-4} アルキル、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-6} シクロアルキル、オキセタン環、テトラヒドロフラン環、ジヒドロピラン環、テトラヒドロピラン環、ピロリジン環、ピラゾール環、トリアゾール環、テトラゾール環、オキサジアゾール環、CN、 CH_2OR^5 、 $C(O)R^5$ 、 $C(O)N(R^5)_2$ 、 $C(O)OR^5$ 、 NO_2 、 $NHC(O)R^5$ 、 $N(R^5)_2$ 、または最大2個までの OR^5 で任意選択で置換されており、ここでは、該任意選択の R^4 置換基のそれぞれは、最大3個までのフッ素原子、最大2個までの C_{1-4} アルキル基、最大2個までのOH基、最大2個までの OC_{1-4} アルキル基、または最大2個までの SC_{1-4} アルキル基で任意選択で置換されており；および

10

各 R^5 は、独立に、水素、 C_{1-4} アルキル、5～6員のヘテロアリール(イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、およびピリミジンから選択される)、4～6員のヘテロシクリル(オキセタン、テトラヒドロフラン、およびテトラヒドロピランから選択される)であり、かつ各 R^5 基は、クロロ、最大3個までのフッ素原子、最大2個までの C_{1-2} アルキル、 CH_2OH 、CN、最大2個までのOH、最大2個までの OC_{1-2} アルキル、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換されている、または2個の R^5 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する)。

20

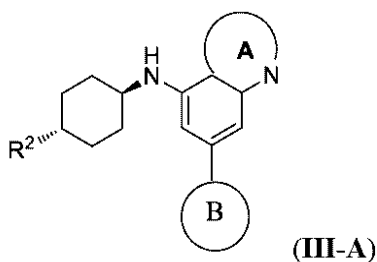
【請求項62】

XがNHである、請求項61に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項63】

次式

【化136】



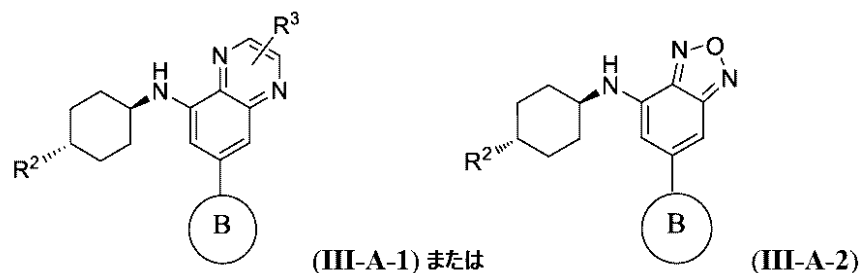
30

を有する、請求項62に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項64】

次式

【化137】



40

(式中、 R^2 が NHR^4 である)

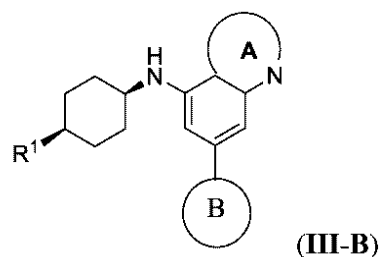
を有する、請求項63に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項65】

次式

50

【化 1 3 8】



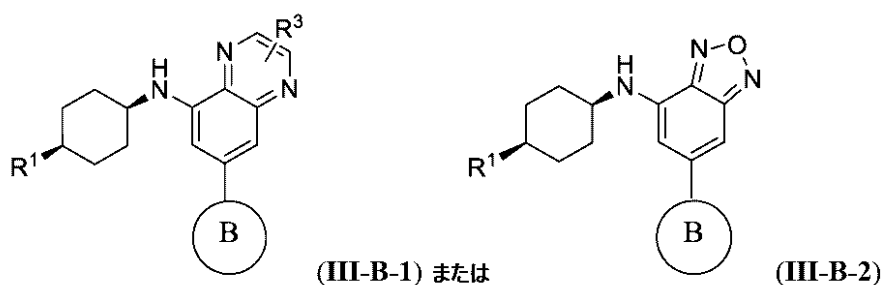
10

を有する、請求項 6 2 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 6 6】

次式

【化 1 3 9】



20

(式中、 R^1 が NHR^4 である)

を有する、請求項 6 5 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 6 7】

R^3 は、水素、 C_{1-4} アルキル、フルオロ、クロロ、 $-OC_{1-2}$ アルキル、 $-C(O)OH$ 、 $-C(O)OC_{1-2}$ アルキル、 $-CN$ 、 $-C(O)NHC_{1-2}$ アルキル、または $-C(O)NH_2$ であり、ここでは、該 R^3 アルキルのそれぞれは、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの OH 、または最大 2 個までの OC_{1-2} アルキル基で任意選

30

択で置換されており；
 R^4 は、水素、 C_{1-4} アルキル、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-5} シクロアルキル、フェニル、5 ~ 10 員の単環または二環のヘテロアリール環（ピロール、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、ピリジン、ピリミジン、ピリミジノン、ピラジン、ピリダジン、およびキノリンから選択される）、または 4 ~ 10 員の単環または二環のヘテロシクリル環（オキセタン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロピラン、ジヒドロイソオキサゾール、ピリミジン - 2, 4 (1H, 3H) - ジオン、ジヒドロフロピリミジン、ジヒドロピラノピリミジン、ジヒドロピロロピリミジン、テトラヒドロプテリジン、およびテトラヒドロピリドピリミジンから選択される）であり、ここでは、該 R^4 基のそれぞれは、 Br 、 Cl 、最大 3 個までのフッ素原子、最大 3 個までの、 C_{1-4} アルキル、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-6} シクロアルキル、オキセタン環、テトラヒドロフラン環、ジヒドロピラン環、テトラヒドロピラン環、ピロリジン環、ピラゾール環、トリアゾール環、テトラゾール環、オキサジアゾール環、 CN 、 CH_2OR^5 、 $C(O)R^5$ 、 $C(O)N(R^5)_2$ 、 $C(O)OR^5$ 、 NO_2 、 $NHC(O)R^5$ 、 $N(R^5)_2$ 、または最大 2 個までの OR^5 で任意選択で置換されており、ここでは、該任意選択の R^4 置換基のそれぞれは、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの OC_{1-4} アルキル基、または最大 2 個までの SC_{1-4} アルキル基で任意選択で置換されており；および

40

各 R^5 は、独立に、水素、 C_{1-4} アルキル、5 ~ 6 員のヘテロアリール（イミダゾール

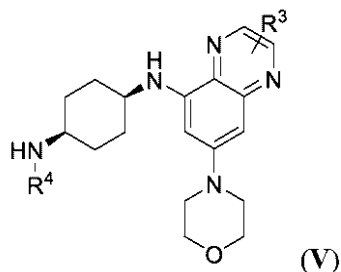
50

、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、およびピリミジンから選択される)、4~6員のヘテロシクリル(オキセタン、テトラヒドロフラン、およびテトラヒドロピランから選択される)であり、かつ各 R^5 基は、クロロ、最大3個までのフッ素原子、最大2個までの C_{1-2} アルキル、 CH_2OH 、 CN 、最大2個までの OH 、最大2個までの OC_{1-2} アルキル、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換されている、または2個の R^5 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、請求項66に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項68】

式

【化140】



を有する、請求項66または67に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

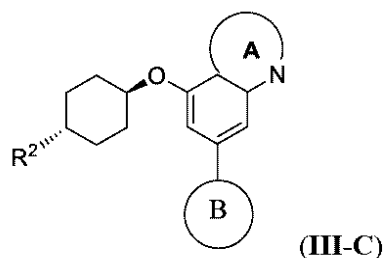
【請求項69】

XがOである、請求項61に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項70】

次式

【化141】

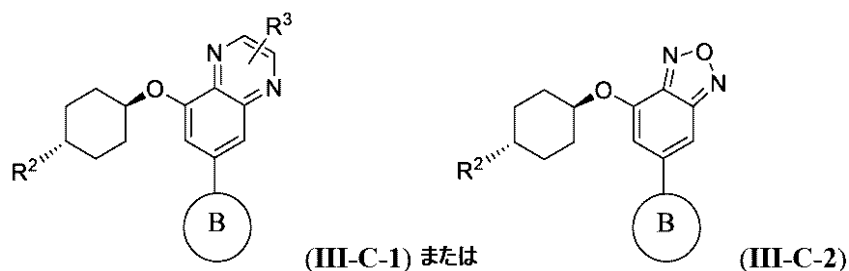


を有する、請求項69に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項71】

次式

【化142】



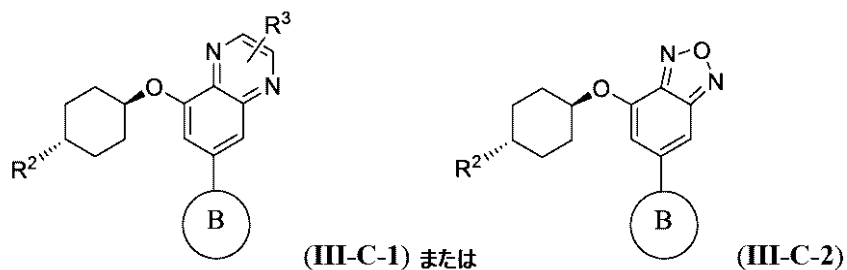
(式中、 R^2 は $-OR^4$ である)

を有する、請求項70に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 7 2】

次式

【化 1 4 3】



10

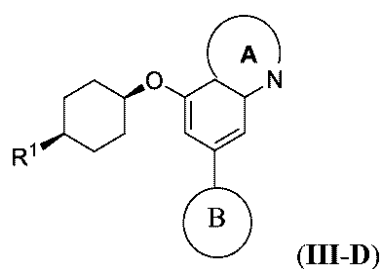
(式中、 R^2 は NHR^4 である)

を有する、請求項 7 0 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 7 3】

次式

【化 1 4 4】



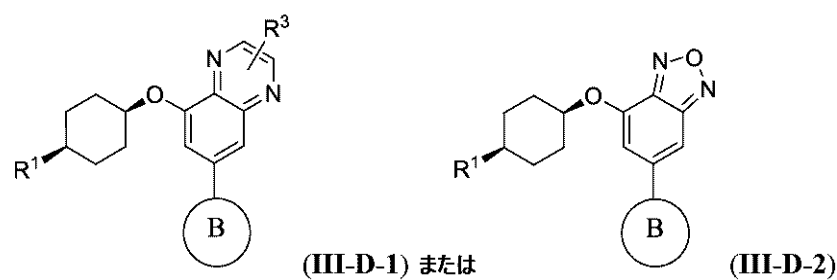
20

を有する、請求項 6 9 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 7 4】

次式

【化 1 4 5】



30

(式中、 R^1 は $-OR^4$ である)

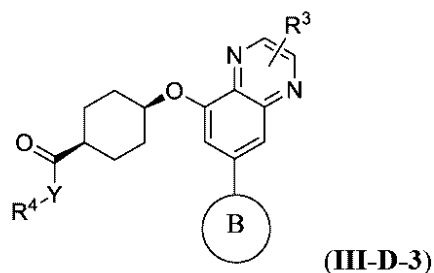
を有する、請求項 7 3 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 7 5】

次式

40

【化 1 4 6】



10

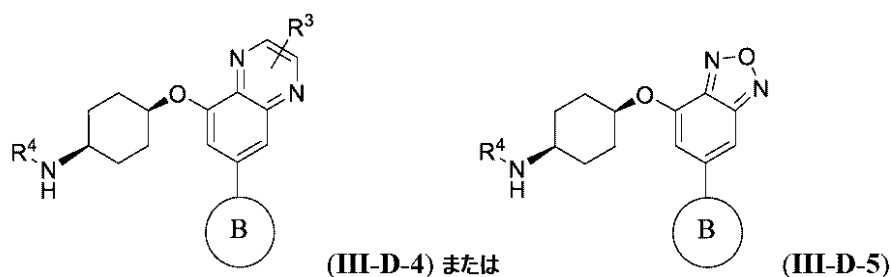
(式中、Yは - O - または - NH - である)

を有する、請求項 7 3 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 7 6】

次式

【化 1 4 7】



20

を有する、請求項 7 3 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 7 7】

R³ は、水素、-C₁~₄アルキル、フルオロ、クロロ、-OC₁~₂アルキル、-C(O)OH、-C(O)OC₁~₂アルキル、-CN、-C(O)NHC₁~₂アルキル、または-C(O)NH₂であり、ここでは、該 R³ アルキルのそれぞれは、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの OH、または最大 2 個までの OC₁~₂アルキル基で任意選択で置換されており；

30

R⁴ は、水素、C₁~₄アルキル、C₂~₄アルケニル、C₂~₄アルキニル、C₃~₅シクロアルキル、フェニル、ヘテロアリール環系（ピロール、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、ピリジン、ピリミジン、ピリミジノン、ピラジン、ピリダジン、およびキノリンから選択される）、または複素環（オキセタン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロピラン、ジヒドロイソオキサゾール、ピリミジン-2,4(1H,3H)-ジオン、ジヒドロフロピリミジン、ジヒドロピラノピリミジン、ジヒドロピロピリミジン、テトラヒドロプテリジン、およびテトラヒドロピリドピリミジンから選択される）であり、ここでは、該 R⁴ 基のそれぞれは、Br、Cl、最大 3 個までのフッ素原子、最大 3 個までの、C₁~₄アルキル、C₂~₄アルケニル、C₂~₄アルキニル、C₃~₆シクロアルキル、CN、NO₂、C(O)R⁵、C(O)N(R⁵)₂、C(O)OR⁵、NHC(O)R⁵、N(R⁵)₂、または最大 2 個までの OR⁵、複素環系（オキセタン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、およびピロリジンから選択される）、ヘテロ芳香環系（ピラゾール、トリアゾール、テトラゾール、およびオキサジアゾールから選択される）で任意選択で置換されており、ここでは、該任意選択の R⁴ 置換基のそれぞれは、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C₁~₄アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの OC₁~₄アルキル基、または最大 2 個までの SC₁~₄アルキル基で任意選択で置換されており；および

40

各 R⁵ は、独立に、水素、C₁~₄アルキル、5~6 員のヘテロアリール（イミダゾール

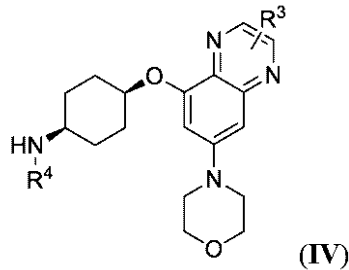
50

、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、およびピリミジンから選択される)、4～6員のヘテロシクリル(オキセタン、テトラヒドロフラン、およびテトラヒドロピランから選択される)であり、かつ各 R^5 基は、クロロ、最大3個までのフッ素原子、最大2個までの C_{1-2} アルキル、 CH_2OH 、 CN 、最大2個までの OH 、最大2個までの OC_{1-2} アルキル、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換されている、または2個の R^5 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、請求項76に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項78】

式

【化148】



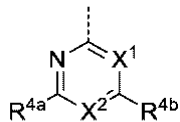
を有する化合物、または薬学的に受容可能なその塩

(式中、

R^3 は、水素、 $-C_{1-4}$ アルキル、フルオロ、クロロ、 $-OC_{1-2}$ アルキル、または $-CN$ であり、ここでは、該 R^3 アルキルのそれぞれは、最大3個までのフッ素原子で任意選択で置換されており；

R^4 は、

【化149】



であり、

X^1 は、 N 、 CH 、 CF 、 CCl 、または、 CC_{1-2} アルキル(最大3個までのフッ素原子で任意選択で置換されている)であり；

X^2 は、 N または CR^{4c} であり；

R^{4a} 、 R^{4b} 、および R^{4c} のそれぞれは、独立に、水素、 F 、 Cl 、 Br 、 CN 、 NO_2 、 C_{1-4} アルキル、 C_{0-4} アルキル- C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル- $O-C_{1-4}$ アルキル、 C_{0-4} アルキル- $O-C_{0-4}$ アルキル- C_{3-5} シクロアルキル、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0-4}$ アルキル- C_{3-5} シクロアルキル、 $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1-4}アルキル)_2$ 、 $C(O)NH(C_{0-4}アルキル-C_{3-5}シクロアルキル)$ 、複素環系(オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、およびピペラジンから選択される)、またはヘテロアリール環系(フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、およびテトラゾールから選択される)である、または、 R^{4c} 、 R^{4a} 、および介在する原子は、ジヒドロフラン、ジヒドロピラン、またはテトラヒドロピペリジン複素環系を形成し；

ここでは、前記 R^{4a} 、 R^{4b} 、および R^{4c} 複素環およびヘテロアリール環系のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までの C_{1-4} アルキル、 $C(O)C_{1-4}$

10

20

30

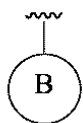
40

50

アルキル、 $C(O)OC_{1\sim4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0\sim4}$ アルキル - $C_{3\sim5}$ シクロアルキルで任意選択で置換されており；および
 前記 R^{4a} 、 R^{4b} 、および R^{4c} アルキルおよびシクロアルキルのそれぞれは、最大 2 個までのジェミナルではない OH 基または最大 3 個までのフッ素原子で任意選択で置換されている）。

【請求項 79】

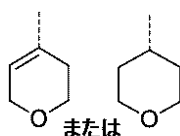
【化 150】



10

が

【化 151】



である、

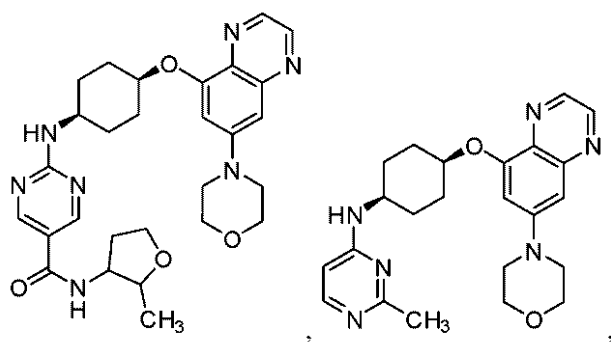
20

請求項 61 ~ 67 および 69 ~ 77 に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

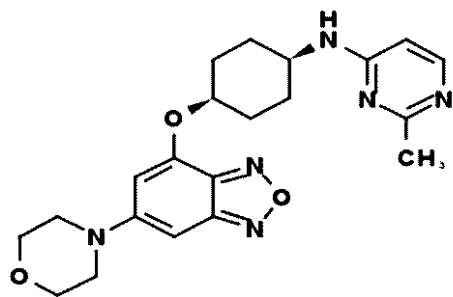
【請求項 80】

式：

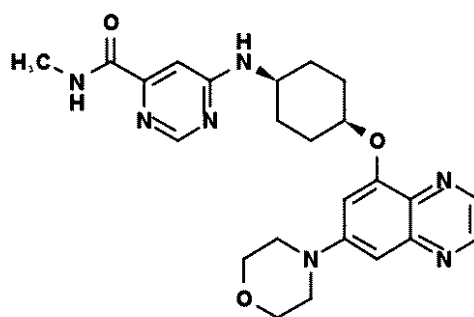
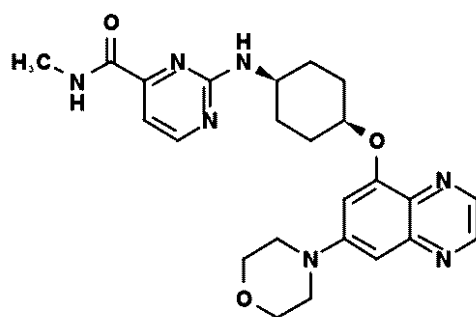
【化 2 3 0】



10

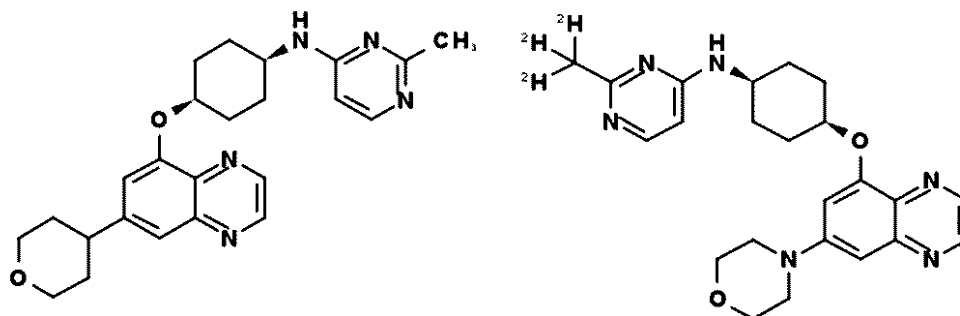


20

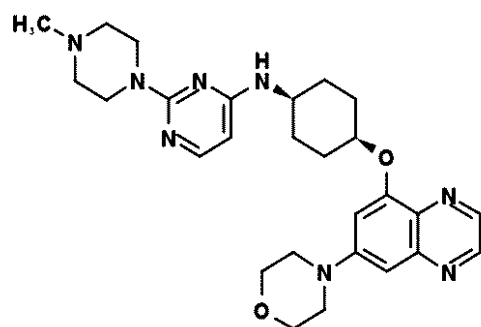


30

【化 2 3 1】



10



20

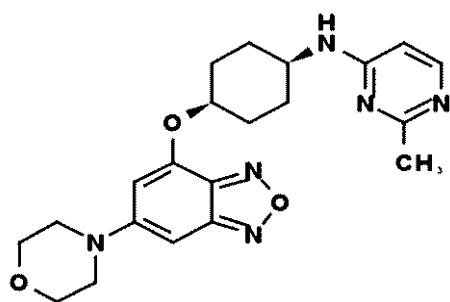
または

の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 8 1】

式：

【化 2 3 2】



30

の化合物、または薬学的に受容可能なその塩。

【請求項 8 2】

請求項 1 ~ 8 1 のいずれか 1 項に記載の化合物、または薬学的に受容可能なその塩と、薬学的に受容可能な賦形剤とを含む薬学的組成物。

40

【請求項 8 3】

治療薬または DNA 損傷を誘発する疾患状態に対して細胞の感受性を高めるための薬学的組成物であって、該薬学的組成物は、請求項 1 ~ 8 1 のいずれか 1 項に記載の化合物もしくは薬学的に受容可能なその塩、または請求項 8 2 に記載の薬学的組成物を含み、該薬学的組成物は該細胞と接触させられることを特徴とする、薬学的組成物。

【請求項 8 4】

患者における癌の処置のための治療レジメンを増強するための薬学的組成物であって、請求項 1 ~ 8 1 のいずれか 1 項に記載の有効量の化合物、または薬学的に受容可能なその塩を含む、薬学的組成物。

【請求項 8 5】

50

患者における癌を処置するまたは癌細胞成長を抑制するための薬学的組成物であって、請求項 1 ~ 8 1 のいずれか 1 項に記載の有効量の化合物、または薬学的に受容可能なその塩を含み、該薬学的組成物は、単独で、または 1 つもしくは複数の追加の治療薬と組み合わせるのいずれかで投与されることを特徴とする、薬学的組成物。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本願は、その全体が参考として援用される、2013年3月12日に出願された、米国仮特許出願第 61 / 777 , 816 号に対する利益を主張する。

【0002】

10

発明の属する技術分野

本発明は、DNA 依存性プロテインキナーゼ (DNA - PK) の阻害剤として有用な化合物に関する。本発明はまた、本発明の化合物を含む薬学的に受容可能な組成物、および癌の処置において該組成物を使用する方法を提供する。

【背景技術】

【0003】

発明の背景

電離放射線 (IR) は、様々な DNA 傷害 (その中では二本鎖切断 (DSB) が最も細胞毒性が高い) を誘発する。これらの DSB は、迅速かつ完全に修復されなければ、アポトーシスおよび / または分裂期細胞死を経て、細胞死をもたらす得る。IR の他に、トポ

イソメラーゼ II 阻害剤、ブレオマイシン、およびドキシソルピシンを含めた、ある種の化学療法薬も、DSB を引き起こす。これらの DNA 損傷は、傷害を受けた DNA を修復し、細胞の生存能力およびゲノム安定性を維持するために機能する DNA 傷害応答ネットワークを介して、一連の複雑なシグナルのトリガーとなる。哺乳類細胞では、DSB に対する優勢な修復経路は、非相同末端結合経路 (Non - Homologous End Joining Pathway) (NHEJ) である。この経路は、細胞周期の期にかかわらず機能し、切断された DNA 端を再び連結するための鋳型を必要としない。NHEJ は、多くのタンパク質とシグナル経路との協調を必要とする。中心となる NHEJ 機構は、共に活性な DNA - PK 酵素複合体を含む、Ku70 / 80 ヘテロ二量体と、DNA 依存性プロテインキナーゼの触媒サブユニット (DNA - PKcs) とからなる。DNA - PKcs は、セリン / トレオニンプロテインキナーゼのホスファチジルイノシトール 3 - キナーゼ関連キナーゼ (PIKK) ファミリー (これには、ataxia telangiectasia mutated (ATM)、ataxia telangiectasia and Rad3 - related (ATR)、mTOR、および 4 つの PI3 K アイソフォームも含まれる) のメンバーである。しかし、DNA - PKcs は、ATM および ATR と同じプロテインキナーゼファミリーにあるが、これらの後者のキナーゼは、相対的組み換え (Homologous Recombination) (HR) 経路を通して DNA 傷害を修復するために機能し、細胞周期の S および G₂ 期に限られる。ATM はまた、DSB の部位に動員 (recruited) されるのに対し、ATR は、一本鎖 DNA 切断の部位に動員される。

20

30

40

【0004】

NHEJ は、3 つの主要な工程: DSB の認識; 連結可能ではない末端、または終端での他の形態の傷害を除去するための DNA プロセッシング; および最後に、DNA 端の連結; を通して進行すると考えられている。DSB の認識は、Ku ヘテロ二量体の不規則な (ragged) DNA 端への結合によって行われ、その後、DSB の隣接側への DNA - PKcs の 2 つの分子の動員が続く; これは、追加のプロセッシング酵素が動員されるまで、切断された終端を保護するために働く。最近のデータは、DNA - PKcs が、プロセッシング酵素すなわち Artemis、ならびに DNA - PKcs 自体をリン酸化して、追加のプロセッシングのための DNA 端を調製するという仮説を裏付けている。場合によっては、連結工程の前に新しい末端を合成するために、DNA ポリメラーゼが必要とされる可

50

能性がある。DNA - PKcsの自己リン酸化は、中央のDNA結合キャビティを開く構造的変化を誘発し、DNAからDNA - PKcsを放出し、DNA端の最終的な再連結を容易にすると考えられている。

【0005】

DNA - PKcsマウスが、IRの影響に対して過敏であること、また、DNA - PKcsのいくつかの非選択的低分子阻害剤が、一連の広範な遺伝的背景全体にわたる様々な腫瘍細胞型の放射線感受性を高めることができることが、かなりの間公知であった。DNA - PKの阻害が、ある程度、正常細胞の放射線感受性を高めるであろうことが予想されるが、これは、腫瘍細胞よりも低い程度で観察されている。これは、おそらく、腫瘍細胞が、より高い基礎レベルの内在性の複製ストレスを有し、かつ、DNA傷害（発癌遺伝子誘発性の複製ストレス）およびDNA修復機構が、腫瘍細胞において効率が低いという事実に起因する。最も重要なことには、DNA - PK阻害剤と、画像誘導RT（IGRT）および強度変調RT（IMRT）を含めた集束型IRの正確な送達の最近の進歩との組み合わせから、正常な組織の、より優れた温存（sparing）を伴う、治療域の改善が与えられることとなる。

【0006】

DNA - PK活性の阻害は、周期細胞と非周期細胞との両方における効果を誘導する。これは、非常に有意である。なぜなら、固形腫瘍における細胞の大多数は、いかなる瞬間でも活発には複製しておらず、これによって、細胞周期を標的にする多くの薬剤の有効性が制限されるからである。同様に興味深いのは、NHEJ経路の阻害と、従来放射線抵抗性の癌幹細胞（CSC）を死滅させる能力との間の強い関連性を示唆する最近の報告である。いくつかの腫瘍細胞において、休眠状態のCSCにおけるDSBが、NHEJ経路を介するDNA修復を主に活性化することが示されている；CSCは、通常、細胞周期の静止期にあると考えられている。これによって、なぜ、癌患者の半分以上が、現在の戦略が、CSCを効果的に標的にすることができないので、処置にもかかわらず、局所または遠隔腫瘍再発を経験する可能性があるということを説明し得る。DNA - PK阻害剤は、これらの潜在的に転移性の前駆細胞の、IRの効果に対する感受性を高める、また、DSB誘導化学療法薬を選択する能力を有することができる。

【0007】

DNA修復プロセスにおけるDNA - PKの関与を考慮すれば、特定のDNA - PK阻害薬の適用が、癌の化学療法と放射線療法の両方の有効性を高めることとなる薬剤として作用するであろう。したがって、DNA - PKの阻害剤として有用な化合物を開発することが望ましいであろう。

【発明の概要】

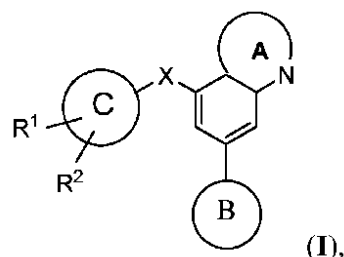
【課題を解決するための手段】

【0008】

発明の概要

本発明の化合物、および薬学的に受容可能なその組成物が、DNA - PKの阻害剤として有効であることが判明した。したがって、本発明は、一般式：

【化1】



（式中、R¹、R²、X、環A、環B、および環Cのそれぞれは、本明細書で定義する通りである）を有する化合物、または薬学的に受容可能なその塩を特徴とする。

【 0 0 0 9 】

本発明はまた、式 I の化合物と、薬学的に受容可能な担体、補助剤、またはビヒクルを含む薬学的組成物を提供する。これらの化合物および薬学的組成物は、癌を処置するまたは癌の重症度を軽減するのに有用である。

【 0 0 1 0 】

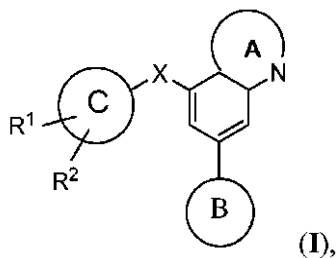
本発明によって提供される化合物および組成物はまた、生物学および病理学的現象における DNA - PK の研究；こうしたキナーゼによって媒介される細胞内シグナル伝達経路の研究；および新規キナーゼ阻害剤の比較評価にも有用である。

本発明は、例えば、以下の項目を提供する。

(項目 1)

式：

【 化 1 0 1 】

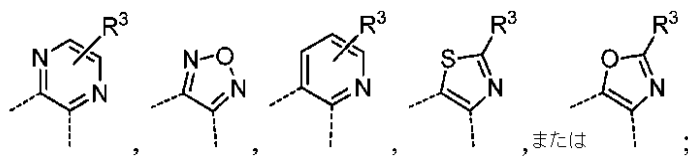


を有する化合物

(式中、

環 A は、

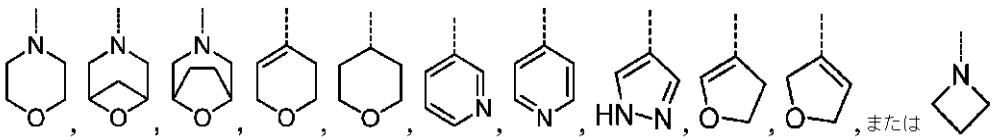
【 化 1 0 2 】



から選択される環系であり；

環 B は、

【 化 1 0 3 】



から選択される環系であり；

環 B は、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの OH、または最大 2 個までの C₁₋₄ アルキル（これは、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの OH、または最大 2 個までの OC₁₋₂ アルキル基で任意選択で置換されている）で任意選択で置換され、
環 C は、シクロヘキサンまたはシクロブタン環であり；

X は、- NH -、- O -、または - OC₁₋₄ アルキル - であり；

R¹ および R² のそれぞれは、独立に、水素、- C (O) NHR⁴、- C (O) OR⁴、
- NH C (O) R⁴、- NH C (O) OR⁴、- NH C (O) NHR⁴、- NH S (O)
R⁴、- C₀₋₄ アルキル - NHR⁴、または - OR⁴ であり、ここでは、R¹ および
R² は、同時に水素ではあり得ず、かつ、R¹ および R² および介在する炭素原子は、ジ
オキサンまたはジオキソラン環を形成することができ；

10

20

30

40

50

R^3 は、水素、 $-C_{1-4}$ アルキル、フルオロ、クロロ、 $-OC_{1-2}$ アルキル、 $-C(O)H$ 、 $-C(O)OH$ 、 $-C(O)OC_{1-2}$ アルキル、 $-CN$ 、 $-C(O)NHC_{1-2}$ アルキル、または $-C(O)NH_2$ であり、ここでは、該 R^3 アルキルのそれぞれは、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの OH 、または最大 2 個までの OC_{1-2} アルキル基で任意選択で置換されており；

R^4 は、水素、 C_{1-4} アルキル、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-5} シクロアルキル、フェニル、5 ~ 10 員の単環または二環のヘテロアリール環（ピロール、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、ピリジン、ピリミジン、ピリミジノン、ピラジン、ピリダジン、またはキノリンから選択される）、または 4 ~ 10 員の単環または二環のヘテロシクリル環（オキセタン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロピラン、ジヒドロイソオキサゾール、ピリミジン - 2, 4 (1H, 3H) - ジオン、ジヒドロフロピリミジン、ジヒドロピラノピリミジン、ジヒドロピロロピリミジン、テトラヒドロプテリジン、またはテトラヒドロピリドピリミジンから選択される）であり、ここでは、該 R^4 基のそれぞれは、最大 4 個までの Br 、 Cl 、 F 、または C_{1-4} アルキル、最大 3 個までの、 CN 、 NO_2 、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-6} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - $O - C_{1-4}$ アルキル、 C_{0-4} アルキル - $O - C_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1-4} \text{ アルキル})_2$ 、 $C(O)NH(C_{0-4} \text{ アルキル} - C_{3-5} \text{ シクロアルキル})$ 、 CH_2OR^5 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)N(R^5)_2$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)OR^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $NHC(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $N(R^5)_2$ 、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、またはピペラジンから選択される）、ヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、またはテトラゾールから選択される）あるいは最大 2 個までの OR^5 で任意選択で置換され、ここでは、該任意選択の R^4 置換基のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの OC_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの SC_{1-4} アルキル基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換され；および

各 R^5 は、独立に、水素、 C_{1-4} アルキル、5 ~ 6 員のヘテロアリール（イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、またはピリミジンから選択される）、4 ~ 6 員のヘテロシクリル（オキセタン、テトラヒドロフラン、またはテトラヒドロピランから選択される）であり、かつ各 R^5 基は、クロロ、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-2} アルキル、 CH_2OH 、 CN 、最大 2 個までの OH 、最大 2 個までの OC_{1-2} アルキル、スピロオキセタン、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換される、または 2 個の R^5 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する）。

（項目 2）

環 C がシクロブタンである、項目 1 に記載の化合物。

（項目 3）

次式

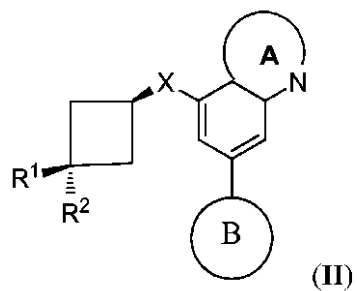
10

20

30

40

【化 1 0 4】



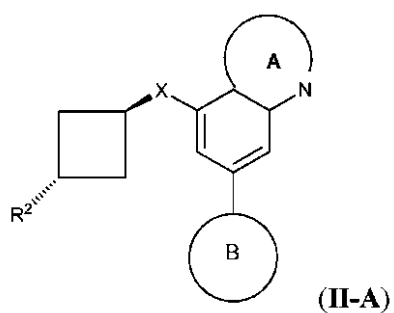
10

を有する、項目 2 に記載の化合物。

(項目 4)

次式

【化 1 0 5】



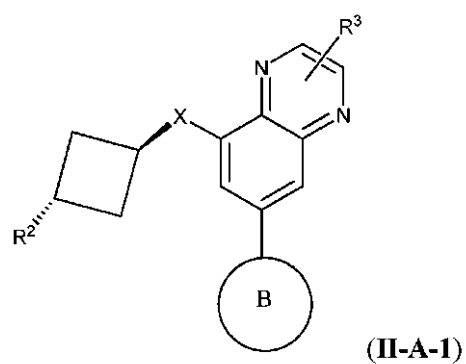
20

を有する、項目 3 に記載の化合物。

(項目 5)

次式

【化 1 0 6】



30

を有する、項目 4 に記載の化合物。

(項目 6)

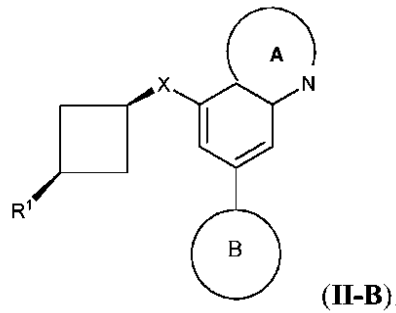
R^2 が、 $-C_{0-4}$ アルキル - NHR^4 である、項目 4 または 5 に記載の化合物。

(項目 7)

次式

40

【化 1 0 7】



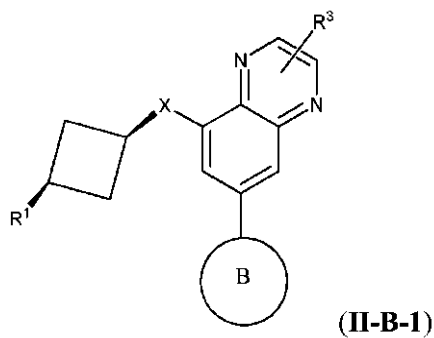
10

を有する、項目 3 に記載の化合物。

(項目 8)

次式

【化 1 0 8】



20

を有する、項目 7 に記載の化合物。

(項目 9)

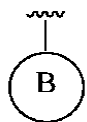
R^1 が、 $-C_{0-4}$ アルキル - NHR^4 である、項目 7 または 8 に記載の化合物。

(項目 1 0)

X が、 $-O-$ または $-OC_{1-4}$ アルキル - である、項目 2 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項目 1 1)

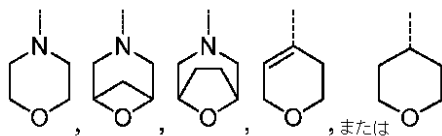
【化 1 0 9】



30

が

【化 1 1 0】

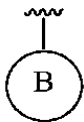


40

である、項目 2 ~ 1 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

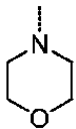
(項目 1 2)

【化 1 1 1】



が

【化 1 1 2】



10

である、項目 1 1 に記載の化合物。

(項目 1 3)

R^3 が水素である、項目 2 ~ 1 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項目 1 4)

R^4 が、水素、 C_{1-4} アルキル、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-5} シクロアルキル、フェニルであり、ここでは、前記 R^4 基のそれぞれが、最大 4 個までの Br、Cl、F、または C_{1-4} アルキル、最大 3 個までの、CN、 NO_2 、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-6} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{1-4} アルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NH C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1-4} \text{ アルキル})_2$ 、 $C(O)NH(C_{0-4} \text{ アルキル} - C_{3-5} \text{ シクロアルキル})$ 、 CH_2OR^5 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)N(R^5)_2$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)OR^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $NHC(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $N(R^5)_2$ 、複素環系（オキサタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、またはピペラジンから選択される）、ヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、またはテトラゾールから選択される）あるいは最大 2 個までの OR^5 で任意選択で置換され、ここでは、前記任意選択の R^4 置換基のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの OC_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの SC_{1-4} アルキル基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換され；および

20

30

各 R^5 が、独立に、水素、 C_{1-4} アルキル、5 ~ 6 員のヘテロアリール（イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、またはピリミジンから選択される）、4 ~ 6 員のヘテロシクリル（オキサタン、テトラヒドロフラン、またはテトラヒドロピランから選択される）であり、かつ各 R^5 基が、クロロ、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-2} アルキル、 CH_2OH 、CN、最大 2 個までの OH、最大 2 個までの OC_{1-2} アルキル、スピロオキサタン、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換される、または 2 個の R^5 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、項目 2 ~ 1 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

(項目 1 5)

R^4 が、5 ~ 10 員の単環または二環のヘテロアリール環（ピロール、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、ピリジン、ピリミジン、ピリミジノン、ピラジン、プリダジン、またはキノリンから選択される）であり

50

、ここでは、前記 R^4 基のそれぞれは、最大 4 個までの Br 、 Cl 、 F 、または C_{1-4} アルキル、最大 3 個までの、 CN 、 NO_2 、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-6} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - $O - C_{1-4}$ アルキル、 C_{0-4} アルキル - $O - C_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1-4} \text{ アルキル})_2$ 、 $C(O)NH(C_{0-4} \text{ アルキル} - C_{3-5} \text{ シクロアルキル})$ 、 CH_2OR^5 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)N(R^5)_2$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)OR^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $NHC(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $N(R^5)_2$ 、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、またはピペラジンから選択される）、ヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、またはテトラゾールから選択される）あるいは最大 2 個までの OR^5 で任意選択で置換され、ここでは、前記任意選択の R^4 置換基のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの OC_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの SC_{1-4} アルキル基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換され；および

10

各 R^5 が、独立に、水素、 C_{1-4} アルキル、5 ~ 6 員のヘテロアリール（イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、またはピリミジンから選択される）、4 ~ 6 員のヘテロシクリル（オキセタン、テトラヒドロフラン、またはテトラヒドロピランから選択される）であり、かつ各 R^5 基は、クロロ、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-2} アルキル、 CH_2OH 、 CN 、最大 2 個までの OH 、最大 2 個までの OC_{1-2} アルキル、スピロオキセタン、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換される、または 2 個の R^5 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、項目 2 ~ 13 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

（項目 16）

R^4 が、4 ~ 10 員の単環または二環のヘテロシクリル環（オキセタン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロピラン、ジヒドロイソオキサゾール、ピリミジン - 2, 4 (1H, 3H) - ジオン、ジヒドロフロピリミジン、ジヒドロピラノピリミジン、ジヒドロピロピリミジン、テトラヒドロプテリジン、またはテトラヒドロピリドピリミジンから選択される）であり、ここでは、前記 R^4 基のそれぞれは、最大 4 個までの Br 、 Cl 、 F 、または C_{1-4} アルキル、最大 3 個までの、 CN 、 NO_2 、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-6} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - $O - C_{1-4}$ アルキル、 C_{0-4} アルキル - $O - C_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1-4} \text{ アルキル})_2$ 、 $C(O)NH(C_{0-4} \text{ アルキル} - C_{3-5} \text{ シクロアルキル})$ 、 CH_2OR^5 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)N(R^5)_2$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)OR^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $NHC(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $N(R^5)_2$ 、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、またはピペラジンから選択される）、ヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、またはテトラゾールから選択される）あるいは最大 2 個までの OR^5 で任意選択で置換され、ここでは、前記任意選択の R^4 置換基のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの OC_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの SC_{1-4} アルキル基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)O$

30

40

50

C₁ ~ 4 アルキル、または C (O) O C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキルで任意選択で置換され；および
各 R⁵ は、独立に、水素、C₁ ~ 4 アルキル、5 ~ 6 員のヘテロアリール（イミダゾール、
トリアゾール、チアゾール、ピリジン、またはピリミジンから選択される）、4 ~ 6 員
のヘテロシクリル（オキセタン、テトラヒドロフラン、またはテトラヒドロピランから選
択される）であり、かつ各 R⁵ 基は、クロロ、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個まで
の C₁ ~ 2 アルキル、C H₂ O H、C N、最大 2 個までの O H、最大 2 個までの O C₁ ~
2 アルキル、スピロオキセタン、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換され
る、または 2 個の R⁵ 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピ
ロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、項目 2 ~ 13 のいずれか
1 項に記載の化合物。

10

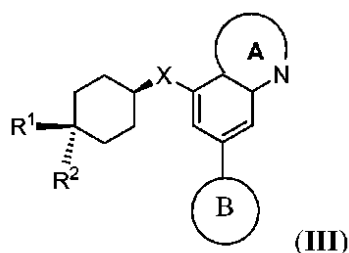
(項目 17)

環 C がシクロヘキサンである、項目 1 に記載の化合物。

(項目 18)

次式

【化 113】



20

を有する、項目 17 に記載の化合物。

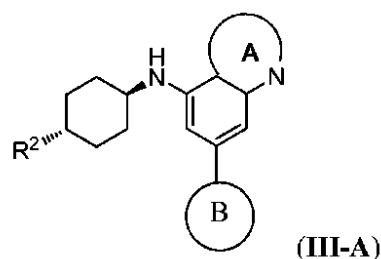
(項目 19)

X が - N H - である、項目 17 または 18 に記載の化合物。

(項目 20)

次式

【化 114】



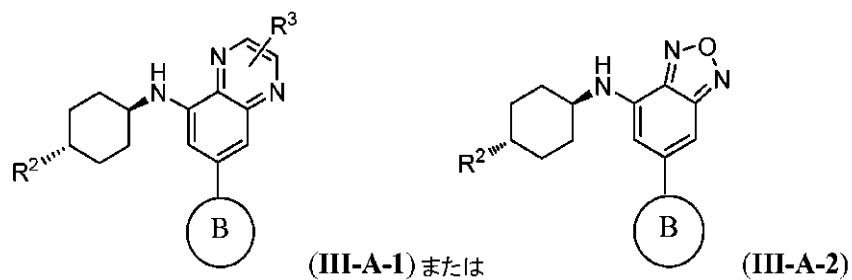
40

を有する、項目 17 ~ 19 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項目 21)

次式

【化 1 1 5】



10

を有する、項目 2 0 に記載の化合物。

(項目 2 2)

R^2 が、 $-C_0 - 4$ アルキル - NHR^4 または $-OR^4$ である、項目 2 0 または 2 1 に記載の化合物。

(項目 2 3)

R^2 が、 $-NHR^4$ である、項目 2 2 に記載の化合物。

(項目 2 4)

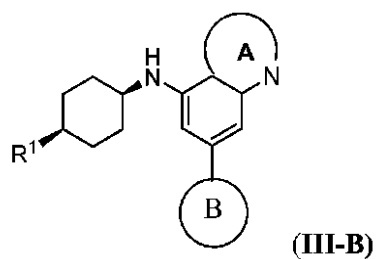
R^2 が、 $-OR^4$ である、項目 2 2 に記載の化合物。

(項目 2 5)

次式

20

【化 1 1 6】



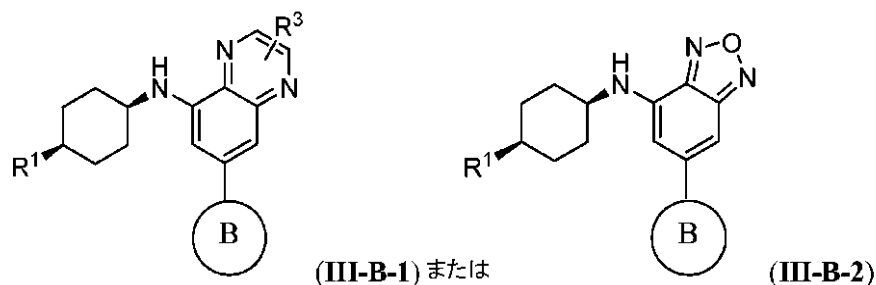
30

を有する、項目 1 7 ~ 1 9 に記載の化合物。

(項目 2 6)

次式

【化 1 1 7】



40

を有する、項目 2 5 に記載の化合物。

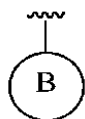
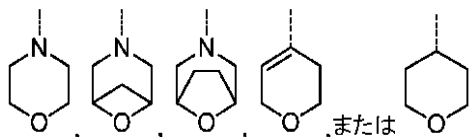
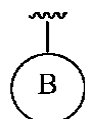
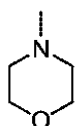
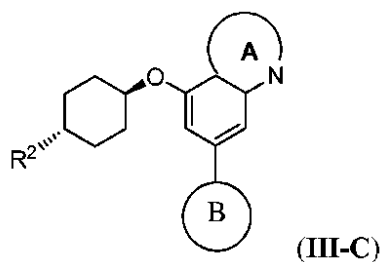
(項目 2 7)

R^1 が、 $-C_0 - 4$ アルキル - NHR^4 または $-OR^4$ である、項目 2 5 または 2 6 に記載の化合物。

(項目 2 8)

R^1 が、 $-NHR^4$ である、項目 2 7 に記載の化合物。

50

(項目 2 9)R¹ が、 - O R⁴ である、項目 2 7 に記載の化合物。(項目 3 0)【化 1 1 8】が【化 1 1 9】である、項目 1 7 ~ 2 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。(項目 3 1)【化 1 2 0】が【化 1 2 1】である、項目 3 0 に記載の化合物。(項目 3 2)X が - O - である、項目 1 7 または 1 8 に記載の化合物。(項目 3 3)次式【化 1 2 2】を有する、項目 1 7、1 8、または 3 2 に記載の化合物。(項目 3 4)次式

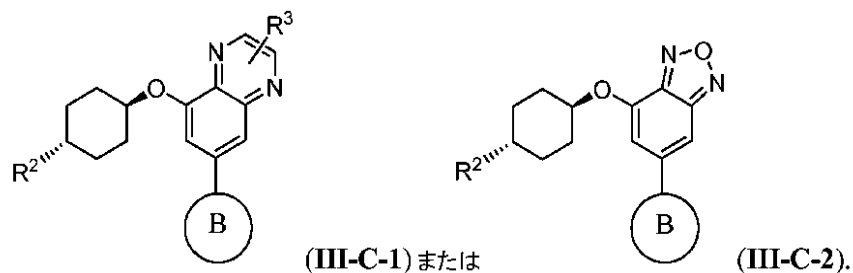
10

20

30

40

【化 1 2 3】



10

を有する、項目 3 3 に記載の化合物。

(項目 3 5)

R^2 が、 $-C_0 - 4$ アルキル - NHR^4 または $-OR^4$ である、項目 3 3 または 3 4 に記載の化合物。

(項目 3 6)

R^2 が、 $-NHR^4$ である、項目 3 5 に記載の化合物。

(項目 3 7)

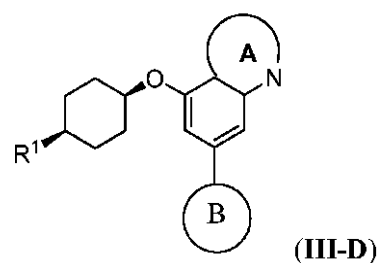
R^2 が、 $-OR^4$ である、項目 3 5 に記載の化合物。

(項目 3 8)

次式

20

【化 1 2 4】



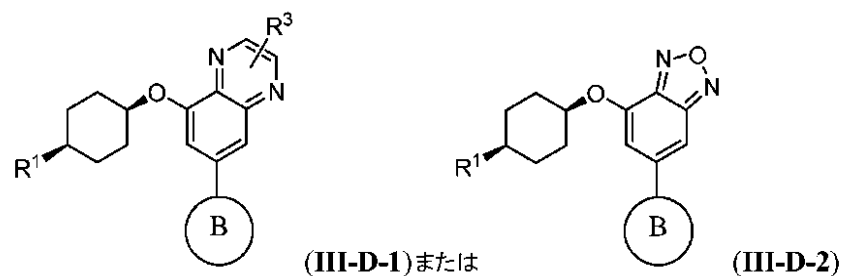
30

を有する、項目 1 7、1 8、または 3 2 に記載の化合物。

(項目 3 9)

次式

【化 1 2 5】



40

を有する、項目 3 8 に記載の化合物。

(項目 4 0)

R^1 が、 $-C_0 - 4$ アルキル - NHR^4 または $-OR^4$ である、項目 3 8 または 3 9 に記載の化合物。

(項目 4 1)

R^1 が、 $-NHR^4$ である、項目 4 0 に記載の化合物。

(項目 4 2)

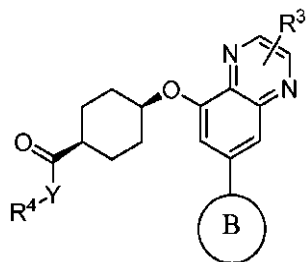
50

R^1 が、 $-OR^4$ である、項目 40 に記載の化合物。

(項目 43)

次式

【化 126】



(III-D-3),

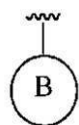
10

(式中、Y は $-O-$ または $-NH-$ である)

を有する、項目 38 または 39 に記載の化合物。

(項目 44)

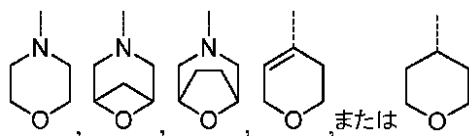
【化 127】



20

が

【化 128】

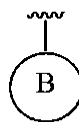


である、項目 32 ~ 43 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

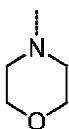
(項目 45)

【化 129】



が

【化 130】



40

である、項目 44 に記載の化合物。

(項目 46)

R^3 が、水素、 C_{1-4} アルキル、 $-OC_{1-2}$ アルキル、または $-C(O)NH_2$ 、または $-C(O)H$ であり、ここでは、前記 R^3 アルキルのそれぞれが、OH で任意選択で置換されている、項目 17 ~ 45 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項目 47)

50

R^3 が、水素である、項目 46 に記載の化合物。

(項目 48)

R^4 が、水素、 C_{1-4} アルキル、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-5} シクロアルキル、フェニルであり、ここでは、前記 R^4 基のそれぞれが、最大 4 個までの Br、Cl、F、または C_{1-4} アルキル、最大 3 個までの、CN、 NO_2 、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-6} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{1-4} アルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NH C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1-4} \text{ アルキル})_2$ 、 $C(O)NH(C_{0-4} \text{ アルキル} - C_{3-5} \text{ シクロアルキル})$ 、 CH_2OR^5 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)N(R^5)_2$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)OR^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $NHC(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $N(R^5)_2$ 、複素環系 (オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、またはピペラジンから選択される)、ヘテロアリール環系 (フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、またはテトラゾールから選択される) あるいは最大 2 個までの OR^5 で任意選択で置換され、ここでは、前記任意選択の R^4 置換基のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの OC_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの SC_{1-4} アルキル基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換され；および

各 R^5 が、独立に、水素、 C_{1-4} アルキル、5 ~ 6 員のヘテロアリール (イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、またはピリミジンから選択される)、4 ~ 6 員のヘテロシクリル (オキセタン、テトラヒドロフラン、またはテトラヒドロピランから選択される) であり、かつ各 R^5 基が、クロロ、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-2} アルキル、 CH_2OH 、CN、最大 2 個までの OH、最大 2 個までの OC_{1-2} アルキル、スピロオキセタン、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換される、または 2 個の R^5 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、項目 17 ~ 47 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項目 49)

R^4 が、5 ~ 10 員の単環または二環のヘテロアリール環 (ピロール、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、ピリジン、ピリミジン、ピリミジノン、ピラジン、ピリダジン、またはキノリンから選択される) であり、ここでは、前記 R^4 基のそれぞれは、最大 4 個までの Br、Cl、F、または C_{1-4} アルキル、最大 3 個までの、CN、 NO_2 、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-6} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{1-4} アルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NH C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1-4} \text{ アルキル})_2$ 、 $C(O)NH(C_{0-4} \text{ アルキル} - C_{3-5} \text{ シクロアルキル})$ 、 CH_2OR^5 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)N(R^5)_2$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)OR^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $NHC(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $N(R^5)_2$ 、複素環系 (オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、またはピペラジンから選択される)、ヘテロアリール環系 (フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、またはテトラゾールから選択される) あるいは最大 2 個までの OR^5 で任意選択で置換され、ここでは、前記任意選択の R^4 置換基のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの

10

20

30

40

50

C_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの OC_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの SC_{1-4} アルキル基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換され；および

各 R^5 が、独立に、水素、 C_{1-4} アルキル、5 ~ 6 員のヘテロアリール（イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、またはピリミジンから選択される）、4 ~ 6 員のヘテロシクリル（オキセタン、テトラヒドロフラン、またはテトラヒドロピランから選択される）であり、かつ各 R^5 基は、クロロ、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-2} アルキル、 CH_2OH 、 CN 、最大 2 個までの OH、最大 2 個までの OC_{1-2} アルキル、スピロオキセタン、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換される、または 2 個の R^5 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、項目 17 ~ 47 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

（項目 50）

R^4 が、最大 4 個までの Br、Cl、F、または C_{1-4} アルキル、最大 3 個までの、 CN 、 NO_2 、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-6} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{1-4} アルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1-4} \text{ アルキル})_2$ 、 $C(O)NH(C_{0-4} \text{ アルキル} - C_{3-5} \text{ シクロアルキル})$ 、 CH_2OR^5 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)N(R^5)_2$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)OR^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $NHC(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $N(R^5)_2$ 、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、またはピペラジンから選択される）、ヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、またはテトラゾールから選択される）あるいは最大 2 個までの OR^5 で任意選択で置換され、ここでは、前記任意選択の R^4 置換基のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの OC_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの SC_{1-4} アルキル基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換された、ピリジンまたはピリミジンであり、

20

30

各 R^5 が、独立に、水素、 C_{1-4} アルキル、5 ~ 6 員のヘテロアリール（イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、またはピリミジンから選択される）、4 ~ 6 員のヘテロシクリル（オキセタン、テトラヒドロフラン、またはテトラヒドロピランから選択される）であり、かつ各 R^5 基は、クロロ、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-2} アルキル、 CH_2OH 、 CN 、最大 2 個までの OH、最大 2 個までの OC_{1-2} アルキル、スピロオキセタン、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換される、または 2 個の R^5 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、項目 49 に記載の化合物。

40

（項目 51）

R^4 が、4 ~ 10 員の単環または二環のヘテロシクリル環（オキセタン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロピラン、ジヒドロイソオキサゾール、ピリミジン - 2, 4 (1H, 3H) - ジオン、ジヒドロフロピリミジン、ジヒドロピラノピリミジン、ジヒドロピロピリミジン、テトラヒドロプテリジン、またはテトラヒドロピリドピリミジンから選択される）であり、ここでは、前記 R^4 基のそれぞれは、最大 4 個までの Br、Cl、F、または C_{1-4} アルキル、最大 3 個までの、 CN 、 NO_2 、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-6} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{1-4} アルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{0-4} アルキル - C_{3-5}

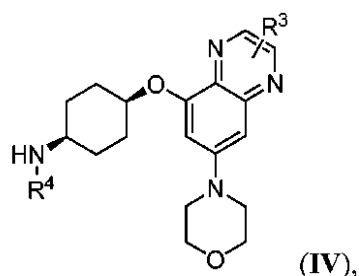
50

~ 5 シクロアルキル、 $C(O)OC_{1\sim 4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0\sim 4}$ アルキル - $C_{3\sim 5}$ シクロアルキル、 $C_{0\sim 4}$ アルキル - $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHC_{1\sim 4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1\sim 4}$ アルキル) $_2$ 、 $C(O)NH(C_{0\sim 4}$ アルキル - $C_{3\sim 5}$ シクロアルキル)、 CH_2OR^5 、 $C_{0\sim 4}$ アルキル - $C(O)R^5$ 、 $C_{0\sim 4}$ アルキル - $C(O)N(R^5)_2$ 、 $C_{0\sim 4}$ アルキル - $C(O)OR^5$ 、 $C_{0\sim 4}$ アルキル - $NHC(O)R^5$ 、 $C_{0\sim 4}$ アルキル - $N(R^5)_2$ 、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、またはピペラジンから選択される）、ヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、またはテトラゾールから選択される）あるいは最大 2 個までの OR^5 で任意選択で置換され、ここでは、前記任意選択の R^4 置換基のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの $C_{1\sim 4}$ アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの $OC_{1\sim 4}$ アルキル基、最大 2 個までの $SC_{1\sim 4}$ アルキル基、 $C(O)C_{1\sim 4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1\sim 4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0\sim 4}$ アルキル - $C_{3\sim 5}$ シクロアルキルで任意選択で置換され；および
 各 R^5 は、独立に、水素、 $C_{1\sim 4}$ アルキル、5～6 員のヘテロアリール（イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、またはピリミジンから選択される）、4～6 員のヘテロシクリル（オキセタン、テトラヒドロフラン、またはテトラヒドロピランから選択される）であり、かつ各 R^5 基は、クロロ、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの $C_{1\sim 2}$ アルキル、 CH_2OH 、 CN 、最大 2 個までの OH 、最大 2 個までの $OC_{1\sim 2}$ アルキル、スピロオキセタン、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換される、または 2 個の R^5 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する、項目 17～47 のいずれか 1 項に記載の化合物。

（項目 52）

式：

【化 131】

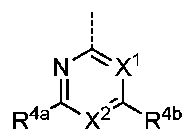


（式中、

R^3 は、水素、 $-C_{1\sim 4}$ アルキル、フルオロ、クロロ、 $-OC_{1\sim 2}$ アルキル、または $-C(O)NH_2$ 、 $-C(O)H$ 、または $-CN$ であり、ここでは、前記 R^3 アルキルのそれぞれは、 OH または最大 3 個までのフッ素原子で任意選択で置換され；

R^4 は、

【化 132】



であり、

X^1 は、 N 、 CH 、 CF 、 CCl 、または、 $CC_{1\sim 2}$ アルキル（最大 3 個までのフッ素原子で任意選択で置換されている）であり；

X^2 は、 N または CR^{4c} であり、ここでは、 X^1 と X^2 は、同時に N ではあり得ず；
 R^{4a} 、 R^{4b} 、および R^{4c} のそれぞれは、独立に、水素、 F 、 Cl 、 Br 、 CN 、 NO_2 、 C_{1-4} アルキル、 C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{1-4} アルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1-4}$ アルキル) $_2$ 、 $C(O)NH(C_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル)、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、またはピペラジンから選択される）、またはヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、またはテトラゾールから選択される）である、または、 R^{4c} 、 R^{4a} 、および介在する原子は、ジヒドロフラン、ジヒドロピラン、またはテトラヒドロピペリジン複素環系を形成し；

ここでは、前記 R^{4a} 、 R^{4b} 、または R^{4c} 複素環またはヘテロアリール環系のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-4} アルキル、最大 2 個までの OH 基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換され；および
 前記 R^{4a} 、 R^{4b} 、または R^{4c} アルキルまたはシクロアルキルのそれぞれは、最大 2 個までのジェミナルではない OH 基または最大 3 個までのフッ素原子で任意選択で置換される）

を有する、項目 3 2 に記載の化合物。

（項目 5 3）

R^3 が、水素、 $-C_{1-4}$ アルキル、 $-OC_{1-2}$ アルキル、または $-C(O)NH_2$ 、または $-C(O)H$ 、であり、ここでは、前記 R^3 アルキルのそれぞれが、 OH で任意選択で置換されている、項目 5 2 に記載の化合物。

（項目 5 4）

R^3 が、水素である、項目 5 2 または 5 3 に記載の化合物。

（項目 5 5）

X^1 および X^2 のそれぞれが、独立に、 CH または N であり、ここでは、 X^1 と X^2 は、同時に N ではあり得ない、項目 5 2 ~ 5 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

（項目 5 6）

R^{4a} および R^{4b} のそれぞれが、独立に、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、またはピペラジンから選択される）であり、ここでは、前記 R^{4a} または R^{4b} 複素環またはヘテロアリール環系のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-4} アルキル、最大 2 個までの OH 基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換され；かつ、前記 R^{4a} または R^{4b} アルキルまたはシクロアルキルのそれぞれは、最大 2 個までのジェミナルではない OH 基または最大 3 個までのフッ素原子で任意選択で置換される、項目 5 2 ~ 5 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

（項目 5 7）

R^{4a} および R^{4b} のそれぞれが、独立に、ヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、またはテトラゾールから選択される）であり、ここでは、前記 R^{4a} または R^{4b} 複素環またはヘテロアリール環系のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-4} アルキル、最大 2 個までの OH 基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換され；かつ、前記 R^{4a} または R^{4b} アルキルまたはシクロアルキルのそれぞれは、最大 2 個までのジェミナルではない OH 基または最大 3 個までのフッ素原子で任意選択で置換される、項目 5 2 ~ 5 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項目 5 8)

R^{4 a} および R^{4 b} のそれぞれが、独立に、水素、F、Cl、Br、CN、NO₂、C₁ ~ 4 アルキル、C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C₀ ~ 4 アルキル - O - C₁ ~ 4 アルキル、C₀ ~ 4 アルキル - O - C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C₂ ~ 4 アルケニル、C₂ ~ 4 アルキニル、C(O)OC₁ ~ 4 アルキル、C(O)OC₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C(O)NH₂、C(O)NHC₁ ~ 4 アルキル、C(O)N(C₁ ~ 4 アルキル)₂、または C(O)NH(C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル) であり、ここでは、前記 R^{4 a} もしくは R^{4 b} 複素環またはヘテロアリール環系のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C₁ ~ 4 アルキル、最大 2 個までの OH 基、C(O)C₁ ~ 4 アルキル、C(O)OC₁ ~ 4 アルキル、または C(O)OC₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキルで任意選択で置換され；かつ、前記 R^{4 a} または R^{4 b} アルキルまたはシクロアルキルのそれぞれは、最大 2 個までのジェミナルではない OH 基または最大 3 個までのフッ素原子で任意選択で置換される、項目 5 2 ~ 5 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項目 5 9)

表 1 中の化合物のリストから選択される化合物。

(項目 6 0)

表 2 中の化合物のリストから選択される化合物。

(項目 6 1)

項目 1 ~ 6 0 のいずれか 1 項に記載の化合物と、薬学的に受容可能な賦形剤とを含む薬学的組成物。

20

(項目 6 2)

治療薬または DNA 損傷を誘発する疾患状態に対して細胞の感受性を高める方法であって、該細胞を、項目 1 ~ 6 0 のいずれか 1 項に記載の化合物、または前記化合物を含む薬学的組成物と接触させる工程を含む、方法。

(項目 6 3)

患者における癌の処置のための治療レジメンを増強する方法であって、前記患者に、項目 1 ~ 6 0 のいずれか 1 項に記載の有効量の化合物、または前記化合物を含む薬学的組成物を投与する工程を含む、方法。

(項目 6 4)

患者における癌を処置するまたは癌細胞成長を抑制する方法であって、前記患者に、項目 1 ~ 6 0 のいずれか 1 項に記載の有効量の化合物、または前記化合物を含む薬学的組成物を、単独で、または 1 つもしくは複数の追加の治療薬と組み合わせてのいずれかで投与することを含む、方法。

30

【 発明を実施するための形態 】**【 0 0 1 1 】**

発明の詳細な説明

定義および一般的用語法

本明細書で使用する場合、別段の指示がない限り、以下の定義が適用されるものとする。本発明の目的では、化学元素は、Periodic Table of the Elements、CAS version、および Handbook of Chemistry and Physics、第 75 版、1994 に従って特定される。さらに、有機化学の一般原理は、「Organic Chemistry」、Thomas Sorrell、University Science Books、Sausalito：1999、および「March's Advanced Organic Chemistry」第 5 版、Smith, M. B. および March, J. 編、John Wiley & Sons、New York：2001（これらの内容全体を、参照により本明細書に組み込む）に記載されている。

40

【 0 0 1 2 】

本明細書に記載する通り、本発明の化合物は、上に概して例示したものなどの、または

50

、本発明の特定のクラス、サブクラス、および種によって例示した通りの、1つまたは複数の置換基で任意選択で置換することができる。「任意選択で置換された」という表現は、「置換されたまたは非置換の」という表現と互換的に使用されるということを理解されたい。一般に、用語「置換された」は、用語「任意選択で」が先行するかどうかにかかわらず、所与の構造における1つまたは複数の水素ラジカルの、特定の置換基のラジカルとの置き換えを指す。別段の指示がない限り、任意選択で置換された基は、その基の各置換可能位置での置換基を有することができる。所与の構造における1つを超える位置が、特定の基から選択される1つを超える置換基で置換可能である場合、置換基は、各位置で、同じまたは異なるかのいずれかであり得る。

【0013】

本明細書に記載する通り、用語「任意選択で置換された」が、リストに先行する場合、前記用語は、そのリストの後続の置換可能な基のすべてを指す。例えば、Xが、ハロゲン；任意選択で置換された $C_1 \sim 3$ アルキルまたはフェニルである場合；Xは、任意選択で置換されたアルキルまたは任意選択で置換されたフェニルのいずれかであり得る。同様に、用語「任意選択で置換された」が、リストに後続する場合、前記用語はまた、別段の指示がない限り、先述のリスト内の置換可能な基のすべてを指す。例えば、Xが、ハロゲン、 $C_1 \sim 3$ アルキル、またはフェニルであり、ここでは、Xが、 J^x によって任意選択で置換されている場合、 $C_1 \sim 3$ アルキルとフェニルとの両方が、 J^x によって任意選択で置換され得る。当業者には明らかである通り、H、ハロゲン、 NO_2 、CN、 NH_2 、OH、または OCF_3 などの基は、置換可能な基ではないので、包含されないことになる。また、当業者には明らかである通り、NH基を含有するヘテロアリアルまたは複素環は、水素原子を置換基と交換することによって任意選択で置換されていてもよい。置換基ラジカルまたは構造が、「任意選択で置換された」と特定または定義されていない場合、その置換基ラジカルまたは構造は、非置換である。

【0014】

本発明によって想定される置換基の組み合わせは、安定なまたは化学的に実行可能な化合物の形成をもたらすものであることが好ましい。用語「安定な」は、本明細書で使用する場合、本明細書に開示する1以上の目的のための化合物の生成、検出、ならびに、好ましくは、化合物の回収、精製、および使用を可能にする条件に供された場合に、実質的に変化しない化合物を指す。いくつかの実施態様では、安定な化合物または化学的に実行可能な化合物は、水分または他の化学的に反応性の条件の非存在下で、少なくとも1週間、40℃またはそれ未満の温度で維持された場合に、実質的に変化しないものである。

【0015】

用語「アルキル」または「アルキル基」は、本明細書で使用する場合、完全に飽和した直鎖（すなわち、枝分かれしていない）または分枝の置換または非置換の炭化水素鎖を意味する。別段の指定がない限り、アルキル基は、1～8個の炭素原子を含有する。いくつかの実施態様では、アルキル基は、1～6個の炭素原子を含有し、さらに他の実施態様では、アルキル基は、1～4個の炭素原子（「 $C_1 \sim 4$ アルキル」として表される）を含有する。他の実施態様では、アルキル基は、共有結合または $C_1 \sim 4$ アルキル鎖のいずれかを表す「 $C_0 \sim 4$ アルキル」と特徴付けられる。アルキル基の例としては、メチル、エチル、プロピル、ブチル、イソプロピル、イソブチル、sec-ブチル、およびtert-ブチルが挙げられる。用語「アルキレン」は、本明細書で使用する場合、飽和した二価の直鎖または分枝鎖の炭化水素基を表し、メチレン、エチレン、イソプロピルレンなどによって例示される。用語「アルキリデン」は、本明細書で使用する場合、二価の直鎖アルキル連結基を表す。用語「アルケニル」は、本明細書で使用する場合、1つまたは複数の炭素-炭素二重結合を含有する、一価の直鎖または分枝鎖炭化水素基を表す。用語「アルキニル」は、本明細書で使用する場合、1つまたは複数の炭素-炭素三重結合を含有する一価の直鎖または分枝鎖炭化水素基を表す。

【0016】

用語「シクロアルキル」（または「炭素環」）は、完全に飽和し、かつ、分子の残部へ

10

20

30

40

50

の単一の付着点を有する、単環の $C_3 \sim C_8$ 炭化水素または二環の $C_8 \sim C_{12}$ 炭化水素（ここでは、前記二環系の任意の個々の環は、3～7員である）を指す。適切なシクロアルキル基としては、限定はされないが、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、およびシクロヘプチルが挙げられる。

【0017】

用語「ヘテロサイクル」、「ヘテロシクリル」、「ヘテロシクロアルキル」、または「複素環式」は、本明細書で使用する場合、系内の少なくとも1つの環が、同一であるまたは異なる1つまたは複数のヘテロ原子を含有し、かつ、完全に飽和している、または不飽和の1つまたは複数の単位を含有するが、芳香族ではなく、かつ、分子の残部への単一の付着点を有する、単環、二環、または三環の環系を指す。いくつかの実施態様では、「ヘテロサイクル」、「ヘテロシクリル」、「ヘテロシクロアルキル」、または「複素環式」基は、1つまたは複数の環員が、酸素、硫黄、窒素、またはリンから独立に選択されたヘテロ原子であり、系内の各環が、3から8個の環員を含有する、3から14個の環員を有する。

【0018】

複素環の例としては、限定はされないが、次の単環：2-テトラヒドロフラニル、3-テトラヒドロフラニル、2-テトラヒドロチオフェニル、3-テトラヒドロチオフェニル、2-モルホリノ、3-モルホリノ、4-モルホリノ、2-チオモルホリノ、3-チオモルホリノ、4-チオモルホリノ、1-ピロリジニル、2-ピロリジニル、3-ピロリジニル、1-テトラヒドロピペラジニル、2-テトラヒドロピペラジニル、3-テトラヒドロピペラジニル、1-ピペリジニル、2-ピペリジニル、3-ピペリジニル、1-ピラゾリニル、3-ピラゾリニル、4-ピラゾリニル、5-ピラゾリニル、1-ピペリジニル、2-ピペリジニル、3-ピペリジニル、4-ピペリジニル、2-チアゾリジニル、3-チアゾリジニル、4-チアゾリジニル、1-イミダゾリジニル、2-イミダゾリジニル、4-イミダゾリジニル、5-イミダゾリジニル；および次の二環：3-1H-ベンズイミダゾール-2-オン、3-(1-アルキル)-ベンズイミダゾール-2-オン、インドリニル、テトラヒドロキノリニル、テトラヒドロイソキノリニル、ベンゾチオラン (benzothiolane)、ベンゾジチアン (benzodithiane)、および1,3-ジヒドロ-イミダゾール-2-オンが挙げられる。

【0019】

用語「ヘテロ原子」は、任意の酸化型の窒素、硫黄、またはリン；四級化型の任意の塩基性窒素；あるいは複素環の置換可能な窒素、例えばN(3,4-ジヒドロ-2H-ピロリルにおけるような)、（ピロリジニルにおけるような）、または NR^+ （N-置換型ピロリジニルにおけるような）を含めた、1つまたは複数の酸素、硫黄、窒素、またはリンを意味する。

【0020】

用語「不飽和」は、本明細書で使用する場合、ある部分が、不飽和の1つまたは複数の単位を有することを意味する。

【0021】

用語「アルコキシ」または「チオアルキル」は、本明細書で使用する場合、酸素（「アルコキシ」）または硫黄（「チオアルキル」）原子を介して炭素主鎖と付着した、先に定義した通りのアルキル基を指す。

【0022】

用語「ハロアルキル」、「ハロアルケニル」、および「ハロアルコキシ」は、1または複数のハロゲン原子で場合により置換され得るアルキル、アルケニル、またはアルコキシを意味する。用語「ハロゲン」は、F、Cl、Br、またはIを意味する。

【0023】

単独で使用される、または「アラルキル」、「アラルコキシ」、または「アリーロキシアルキル」におけるような大きな部分の一部としての、用語「アリール」は、合計で6から14個の環員を有する、単環、二環、または三環の炭素環系（ここでは、前記環系は

、分子の残部への単一の付着点を有し、該系中の少なくとも1つの環は、芳香族であり、該系中の各環は、4から7個の環員を含有する)を指す。用語「アリール」は、用語「アリール環」と互換的に使用することができる。アリール環の例としては、フェニル、ナフチル、およびアントラセンが挙げられる。

【0024】

単独で使用される、または「ヘテロアラルキル」または「ヘテロアリールアルコキシ」中におけるような大きな部分の一部としての、用語「ヘテロアリール」は、合計で5から14個の環員を有する、単環、二環、および三環の環系(ここでは、前記環系は、分子の残部への単一の付着点を有し、該系中の少なくとも1つの環は、芳香族であり、該系中の少なくとも1つの環は、窒素、酸素、硫黄、またはリンから独立に選択される1つまたは複数のヘテロ原子を含有し、該系中の各環は、4から7個の環員を含有する)を指す。用語「ヘテロアリール」は、用語「ヘテロアリール環」または用語「ヘテロ芳香族」と互換的に使用することができる。

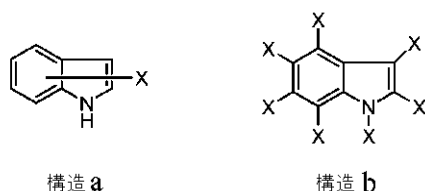
【0025】

ヘテロアリール環のさらなる例としては、次の単環: 2-フラニル、3-フラニル、N-イミダゾリル、2-イミダゾリル、4-イミダゾリル、5-イミダゾリル、3-イソオキサゾリル、4-イソオキサゾリル、5-イソオキサゾリル、2-オキサゾリル、4-オキサゾリル、5-オキサゾリル、N-ピロリル、2-ピロリル、3-ピロリル、2-ピリジル、3-ピリジル、4-ピリジル、2-ピリミジニル、4-ピリミジニル、5-ピリミジニル、ピリダジニル(例えば3-ピリダジニル)、2-チアゾリル、4-チアゾリル、5-チアゾリル、テトラゾリル(例えば5-テトラゾリル)、トリアゾリル(例えば、2-トリアゾリルおよび5-トリアゾリル)、2-チエニル、3-チエニル、ピラゾリル(例えば2-ピラゾリル)、イソチアゾリル、1,2,3-オキサジアゾリル、1,2,5-オキサジアゾリル、1,2,4-オキサジアゾリル、1,2,3-トリアゾリル、1,2,3-チアジアゾリル、1,3,4-チアジアゾリル、1,2,5-チアジアゾリル、ピラジニル、1,3,5-トリアジニル、および次の二環: ベンズイミダゾリル、ベンゾフリル、ベンゾチオフェニル、インドリル(例えば2-インドリル)、プリニル、キノリニル(例えば、2-キノリニル、3-キノリニル、4-キノリニル)、およびイソキノリニル(例えば、1-イソキノリニル、3-イソキノリニル、または4-イソキノリニル)が挙げられる。

【0026】

本明細書に記載する通り、置換基から多環系内の1つの環の中心へと引かれた結合(下に示す通り)は、多環系内の任意の環における任意の置換可能位置での置換基の置換を表す。例えば、構造aは、構造bにおいて示される位置のいずれかにおける、可能な置換を表す。

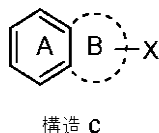
【化2】



【0027】

これは、任意選択の環系(これは、点線によって表される)と融合した多環系にも適用される。例えば、構造cにおいては、Xは、環Aと環Bの両方に対する任意選択の置換基である。

【化 3】

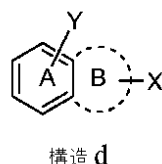


【0028】

しかし、多環系における2つの環がそれぞれ、各環の中心から引かれる異なる置換基を有する場合、別段の指定がない限り、各置換基は、それが付着した環上の置換基のみを表す。例えば、構造 d においては、Y は、環 A のみのための任意選択の置換基であり、X は、B のみのための任意選択の置換基である。

10

【化 4】



【0029】

用語「保護基」は、本明細書で使用する場合、例えば、アルコール、アミン、カルボキシル、カルボニルなどの官能基を、合成手順中の望ましくない反応から保護することを目的とする基を表す。通常使用される保護基は、参照により本明細書に組み込まれる、GreeneおよびWuts、Protective Groups In Organic Synthesis、第3版(John Wiley & Sons、New York、1999)に開示されている。窒素保護基の例としては、アシル、アロイル、またはカルバミル基、例えばホルミル、アセチル、プロピオニル、ピバロイル、t-ブチルアセチル、2-クロロアセチル、2-ブロモアセチル、トリフルオロアセチル、トリクロロアセチル、フタリル、o-ニトロフェノキシアセチル、-クロロブチリル、ベンゾイル、4-クロロベンゾイル、4-ブロモベンゾイル、4-ニトロベンゾイル、およびキラル補助基、例えば保護または無保護のD、LまたはD、L-アミノ酸(アラニン、ロイシン、フェニルアラニンなど)など；スルホニル基、例えばベンゼンスルホニル、p-トルエンスルホニルなど；カルバメート基、例えばベンジルオキシカルボニル、p-クロロベンジルオキシカルボニル、p-メトキシベンジルオキシカルボニル、p-ニトロベンジルオキシカルボニル、2-ニトロベンジルオキシカルボニル、p-ブロモベンジルオキシカルボニル、3,4-ジメトキシベンジルオキシカルボニル、3,5-ジメトキシベンジルオキシカルボニル、2,4-ジメトキシベンジルオキシカルボニル、4-メトキシベンジルオキシカルボニル、2-ニトロ-4,5-ジメトキシベンジルオキシカルボニル、3,4,5-トリメトキシベンジルオキシカルボニル、1-(p-ビフェニル)-1-メチルエトキシカルボニル、-ジメチル-3,5-ジメトキシベンジルオキシカルボニル、ベンズヒドリルオキシカルボニル、t-ブチルオキシカルボニル、ジイソプロピルメトキシカルボニル、イソプロピルオキシカルボニル、エトキシカルボニル、メトキシカルボニル、アリルオキシカルボニル、2,2,2-トリクロロエトキシカルボニル、フェノキシカルボニル、4-ニトロフェノキシカルボニル、フルオレニル-9-メトキシカルボニル、シクロペンチルオキシカルボニル、アダマンチルオキシカルボニル、シクロヘキシルオキシカルボニル、フェニルチオカルボニルなど、アリーラルアルキル基、例えばベンジル、トリフェニルメチル、ベンジルオキシメチルなど、およびシリル基、例えばトリメチルシリルなどが挙げられる。好ましいN-保護基は、ホルミル、アセチル、ベンゾイル、ピバロイル、t-ブチルアセチル、アラニル、フェニルスルホニル、ベンジル、t-ブチルオキシカルボニル(Boc)、およびベンジルオキシカルボニル(Cbz)である。ヒドロキシル保護基の例としては、エーテル、例えばテトラヒドロピラニル、tert-ブチル、ベンジル、アリルなど；シリルエーテル、例えばトリメチルシリル、トリエチルシリル、

20

30

40

50

トリイソプロピルシリル、tert-ブチルジフェニルシリルなど；エステル、例えばアセチル、トリフルオロアセチルなど；および炭酸エステルが挙げられる。ヒドロキシル保護基には、フェノールの保護に適したものも含まれる。

【0030】

別段の描写または記述がない限り、本明細書に挙げた構造は、すべての異性体（例えば、鏡像異性体、ジアステレオマー、および幾何異性体（または配座異性体））型の構造；例えば、各不斉中心に対するRおよびS立体配置、(Z)および(E)二重結合異性体、ならびに(Z)および(E)配座異性体を含むことが意図される。したがって、本発明の化合物の単一の立体化学的異性体、ならびに鏡像異性体、ジアステレオマー、および幾何異性体（または配座異性体）の混合物は、本発明の範囲内である。通常、細かい平行線

10

【化4-2】

(.....)

または太線

【化4-3】

(—)

の使用を通して、定義された立体化学中心と共に描かれている化合物は、立体化学的に純粋であるが、絶対立体化学は、まだ定義されていない。こうした化合物は、RまたはS立体配置を有することができる。絶対立体配置が決定されている場合、キラル中心（1つまたは複数）は、図において(R)または(S)と表示される。

20

【0031】

別段の記述のない限り、本発明の化合物のすべての互変異性型が、本発明の範囲内である。さらに、別段の記述のない限り、本明細書に描写する構造はまた、同位体が濃縮された1つまたは複数の原子の存在のみが異なる化合物も含むことが意図される。例えば、重水素もしくは三重水素による水素の置き換え、または¹³Cもしくは¹⁴Cが濃縮された炭素による炭素の置き換えを除く、本発明の構造を有する化合物は、本発明の範囲内である。こうした化合物は、例えば、生物学的分析における分析ツール、プローブとして、または向上した治療プロファイルを有するDNA-PK阻害剤として有用である。

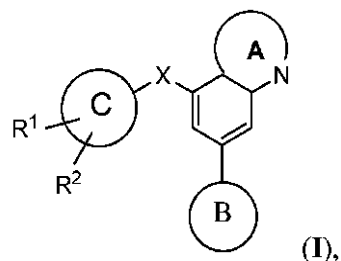
【0032】

30

本発明の化合物の説明

一態様では、本発明は、式：

【化5】



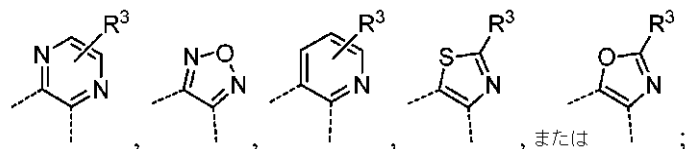
40

を有する化合物

(式中、

環Aは、

【化6】

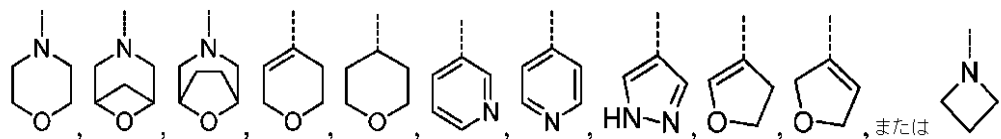


50

から選択される環系であり；

環 B は、

【化 7】



から選択される環系であり；

環 B は、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの OH、または最大 2 個までの C_{1-4} アルキル（これは、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの OH、または最大 2 個までの OC_{1-2} アルキル基で任意選択で置換されている）で任意選択で置換され、

環 C は、シクロヘキサンまたはシクロブタン環であり；

X は、 $-NH-$ 、 $-O-$ 、または $-OC_{1-4}$ アルキル - であり；

R^1 および R^2 のそれぞれは、独立に、水素、 $-C(O)NHR^4$ 、 $-C(O)OR^4$ 、 $-NHC(O)R^4$ 、 $-NHC(O)OR^4$ 、 $-NHC(O)NHR^4$ 、 $-NHS(O)_2R^4$ 、 $-C_{0-4}$ アルキル - NHR^4 、または $-OR^4$ であり、ここでは、 R^1 および R^2 は、同時に水素ではあり得ず、かつ、 R^1 および R^2 および介在する炭素原子は、ジオキサンまたはジオキソラン環を形成することができ；

R^3 は、水素、 $-C_{1-4}$ アルキル、フルオロ、クロロ、 $-OC_{1-2}$ アルキル、 $-C(O)H$ 、 $-C(O)OH$ 、 $-C(O)OC_{1-2}$ アルキル、 $-CN$ 、 $-C(O)NHC_{1-2}$ アルキル、または $-C(O)NH_2$ であり、ここでは、前記 R^3 アルキルのそれぞれは、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの OH、または最大 2 個までの OC_{1-2} アルキル基で任意選択で置換されており；

R^4 は、水素、 C_{1-4} アルキル、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-5} シクロアルキル、フェニル、5 ~ 10 員の単環または二環のヘテロアリール環（ピロール、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、ピリジン、ピリミジン、ピリミジノン、ピラジン、ピリダジン、またはキノリンから選択される）、または 4 ~ 10 員の単環または二環のヘテロシクリル環（オキセタン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロピラン、ジヒドロイソオキサゾール、ピリミジン - 2, 4 (1H, 3H) - ジオン、ジヒドロフロピリミジン、ジヒドロピラノピリミジン、ジヒドロピロピリミジン、テトラヒドロプテリジン、またはテトラヒドロピリドピリミジンから選択される）であり、ここでは、前記 R^4 基のそれぞれは、最大 4 個までの Br、Cl、F、または C_{1-4} アルキル、最大 3 個までの、 CN 、 NO_2 、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 C_{3-6} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - $O - C_{1-4}$ アルキル、 C_{0-4} アルキル - $O - C_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1-4} \text{ アルキル})_2$ 、 $C(O)NH(C_{0-4} \text{ アルキル} - C_{3-5} \text{ シクロアルキル})$ 、 CH_2OR^5 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)N(R^5)_2$ 、 C_{0-4} アルキル - $C(O)OR^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $NHC(O)R^5$ 、 C_{0-4} アルキル - $N(R^5)_2$ 、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、またはピペラジンから選択される）、ヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、またはテトラゾールから選択される）あるいは最大 2 個までの OR^5 で任意選択で置換され、ここでは、前記任意選択の R^4 置換基のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの C_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの OC_{1-4} アルキル基、最大 2 個までの SC_{1-4} アルキル基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換され；および

10

20

30

40

50

各 R^5 は、独立に、水素、 $C_1 \sim 4$ アルキル、5～6員のヘテロアリール（イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、またはピリミジンから選択される）、4～6員のヘテロシクリル（オキセタン、テトラヒドロフラン、またはテトラヒドロピランから選択される）であり、かつ各 R^5 基は、クロロ、最大3個までのフッ素原子、最大2個までの $C_1 \sim 2$ アルキル、 CH_2OH 、 CN 、最大2個までの OH 、最大2個までの $OC_1 \sim 2$ アルキル、スピロオキセタン、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換される、または2個の R^5 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する）を特徴とする。

【0033】

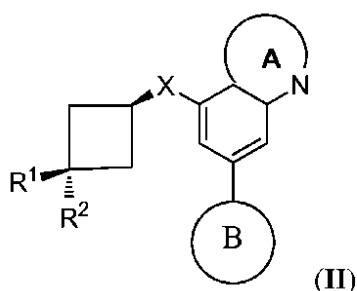
10

一実施態様では、環Cは、シクロブタンである。

【0034】

別の態様では、本発明は、式：

【化8】



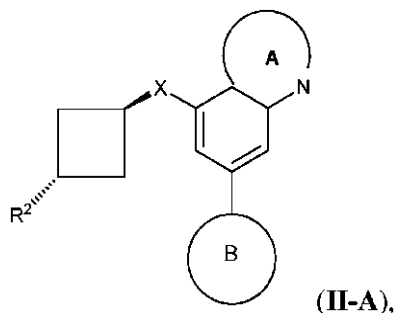
20

を有する化合物（式中、 R^1 および R^2 は、式 I の化合物について定義した通りである）を特徴とする。

【0035】

別の態様では、本発明は、式：

【化9】



30

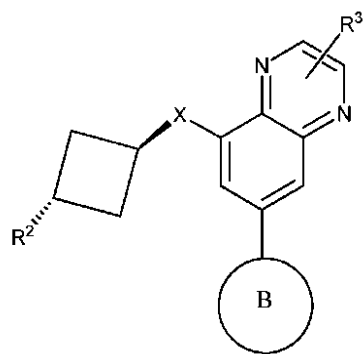
を有する化合物（式中、 R^2 は、式 I の化合物について定義した通りである）を特徴とする。

【0036】

別の態様では、本発明は、式：

40

【化 1 0】



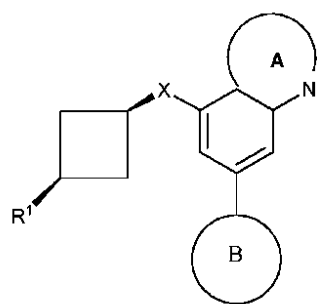
10

を有する化合物（式中、 R^2 は、式 I の化合物について定義した通りである）を特徴とする。

【0037】

別の態様では、本発明は、式：

【化 1 1】



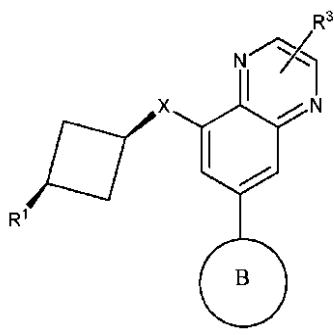
20

を有する化合物（式中、 R^1 は、式 I の化合物について定義した通りである）を特徴とする。

【0038】

別の態様では、本発明は、式：

【化 1 2】



30

を有する化合物（式中、 R^1 は、式 I の化合物について定義した通りである）を特徴とする。

40

【0039】

一実施態様では、 R^1 は、 $-C_0 - 4$ アルキル - NHR^4 である。

【0040】

別の実施態様では、X は、 $-O-$ または $-OC_1 - 4$ アルキル - である。

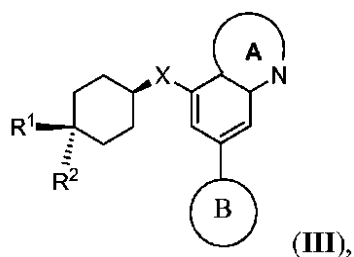
【0041】

一実施態様では、環 C は、シクロヘキサンである。

【0042】

別の態様では、本発明は、式：

【化 1 3】



を有する化合物（式中、 R^1 は、式 I の化合物について定義した通りである）を特徴とする。

10

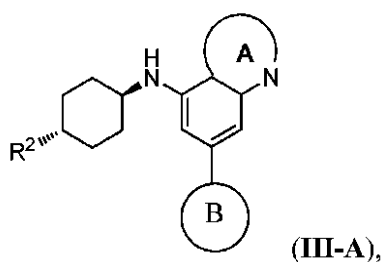
【0043】

一実施態様では、X は、 $-NH-$ である。

【0044】

別の態様では、本発明は、式：

【化 1 4】



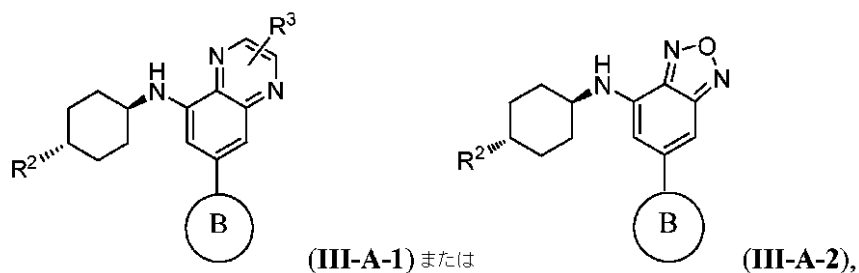
20

を有する化合物（式中、 R^2 は、式 I の化合物について定義した通りである）を特徴とする。

【0045】

別の態様では、本発明は、式：

【化 1 5】



30

を有する化合物（式中、 R^2 は、式 I の化合物について定義した通りである）を特徴とする。

【0046】

一実施態様では、 R^2 は、 $-C_0 - 4$ アルキル $-NHR^4$ または $-OR^4$ である。

40

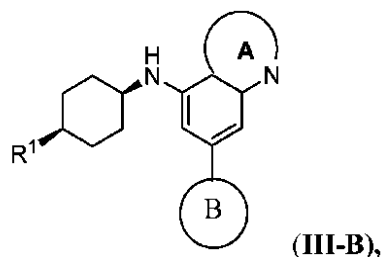
【0047】

別の実施態様では、 R^2 は、 $-NHR^4$ または $-OR^4$ である。

【0048】

別の態様では、本発明は、式：

【化 1 6】



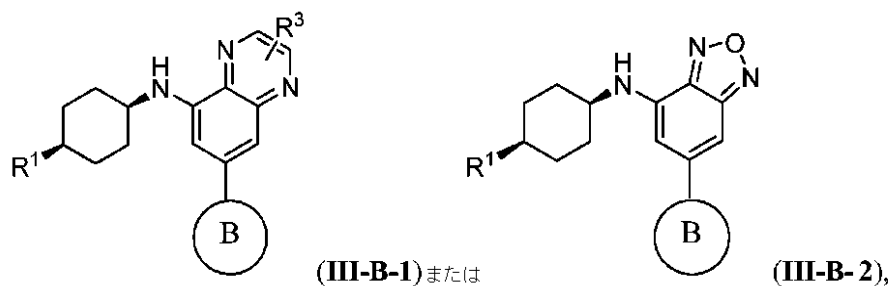
を有する化合物（式中、 R^1 は、式 I の化合物について定義した通りである）を特徴とする。

10

【0049】

別の態様では、本発明は、式：

【化 1 7】



20

を有する化合物（式中、 R^1 は、式 I の化合物について定義した通りである）を特徴とする。

【0050】

一実施態様では、 R^1 は、 $-C_0-4$ アルキル - NHR^4 または $-OR^4$ である。

【0051】

別の実施態様では、 R^1 は、 $-NHR^4$ または $-OR^4$ である。

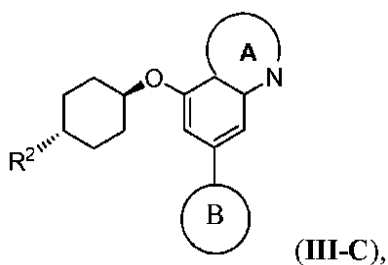
【0052】

別の実施態様では、 X は、 $-O-$ である。

【0053】

別の態様では、本発明は、式：

【化 1 8】



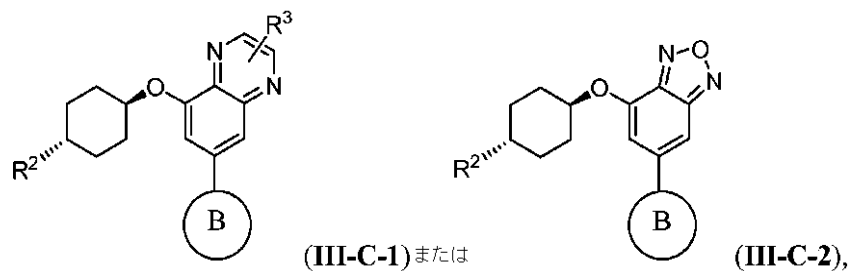
40

を有する化合物（式中、 R^2 は、式 I の化合物について定義した通りである）を特徴とする。

【0054】

別の態様では、本発明は、式：

【化 19】

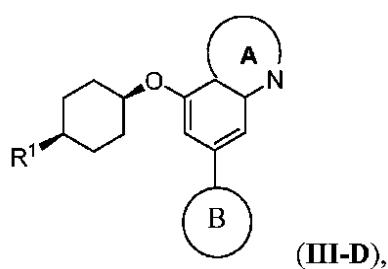


を有する化合物（式中、 R^2 は、式 I の化合物について定義した通りである）を特徴とする。 10

【0055】

別の態様では、本発明は、式：

【化 20】

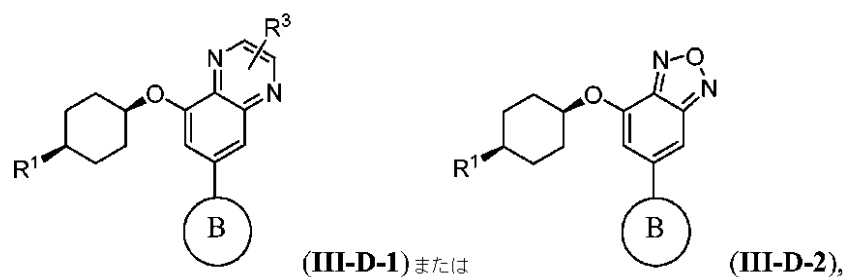


を有する化合物（式中、 R^1 は、式 I の化合物について定義した通りである）を特徴とする。 20

【0056】

別の態様では、本発明は、式：

【化 21】



を有する化合物（式中、 R^1 は、式 I の化合物について定義した通りである）を特徴とする。 30

【0057】

一実施態様では、 R^1 は、 $-C_0 - 4$ アルキル - NHR^4 または $-OR^4$ である。

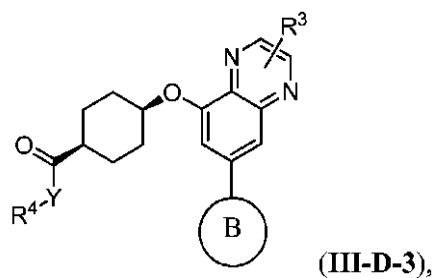
【0058】

別の実施態様では、 R^1 は、 $-NHR^4$ または $-OR^4$ である。 40

【0059】

別の態様では、本発明は、式：

【化 2 2】



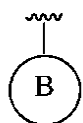
を有する化合物（式中、Yは、-O-または-NH-である）を特徴とする。

10

【0060】

式I、II、II-A、II-A-1、II-B、II-B-1、III、III-A、III-A-1、III-A-2、III-B、III-B-1、III-B-2、III-C、III-C-1、III-C-2、III-D、III-D-1、III-D-2、またはIII-D-3を有する化合物の一実施態様では、

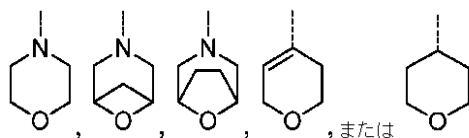
【化 2 3】



20

は、

【化 2 4】



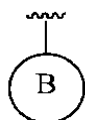
である。

【0061】

別の実施態様では、

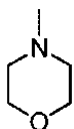
30

【化 2 5】



は、

【化 2 6】



40

である。

【0062】

別の実施態様では、R³は、水素である。

【0063】

別の実施態様では、R⁴は、水素、C₁~₄アルキル、C₂~₄アルケニル、C₂~₄アルキニル、C₃~₅シクロアルキル、フェニルであり、ここでは、前記R⁴基のそれぞれは、最大4個までのBr、Cl、F、またはC₁~₄アルキル、最大3個までの、CN、NO₂、C₂~₄アルケニル、C₂~₄アルキニル、C₃~₆シクロアルキル、C₀~₄アルキル-C₃~₅シクロアルキル、C₀~₄アルキル-O-C₁~₄アルキル、C₀

50

~ 4 アルキル - O - C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C(O)OC₁ ~ 4 アルキル、C(O)OC₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)NH₂、C(O)NHC₁ ~ 4 アルキル、C(O)N(C₁ ~ 4 アルキル)₂、C(O)NH(C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル)、CH₂OR⁵、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)R⁵、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)N(R⁵)₂、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)OR⁵、C₀ ~ 4 アルキル - NHC(O)R⁵、C₀ ~ 4 アルキル - N(R⁵)₂、複素環系(オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、またはピペラジンから選択される)、ヘテロアリアル環系(フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、またはテトラゾールから選択される)、あるいは最大2個までのOR⁵で任意選択で置換され、ここでは、前記任意選択のR⁴置換基のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までのC₁ ~ 4 アルキル基、最大2個までのOH基、最大2個までのOC₁ ~ 4 アルキル基、最大2個までのSC₁ ~ 4 アルキル基、C(O)C₁ ~ 4 アルキル、C(O)OC₁ ~ 4 アルキル、またはC(O)OC₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキルで任意選択で置換され；および
 各R⁵は、独立に、水素、C₁ ~ 4 アルキル、5～6員のヘテロアリアル(イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、またはピリミジンから選択される)、4～6員のヘテロシクリル(オキセタン、テトラヒドロフラン、またはテトラヒドロピランから選択される)であり、かつ各R⁵基は、クロロ、最大3個までのフッ素原子、最大2個までのC₁ ~ 2 アルキル、CH₂OH、CN、最大2個までのOH、最大2個までのOC₁ ~ 2 アルキル、スピロオキセタン、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換される、または2個のR⁵基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する。

【0064】

別の実施態様では、R⁴は、5～10員の単環または二環のヘテロアリアル環(ピロール、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、ピリジン、ピリミジン、ピリミジノン、ピラジン、ピリダジン、またはキノリンから選択される)であり、ここでは、前記R⁴基のそれぞれは、最大4個までのBr、Cl、F、またはC₁ ~ 4 アルキル、最大3個までの、CN、NO₂、C₂ ~ 4 アルケニル、C₂ ~ 4 アルキニル、C₃ ~ 6 シクロアルキル、C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C₀ ~ 4 アルキル - O - C₁ ~ 4 アルキル、C₀ ~ 4 アルキル - O - C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C(O)OC₁ ~ 4 アルキル、C(O)OC₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)NH₂、C(O)NHC₁ ~ 4 アルキル、C(O)N(C₁ ~ 4 アルキル)₂、C(O)NH(C₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキル)、CH₂OR⁵、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)R⁵、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)N(R⁵)₂、C₀ ~ 4 アルキル - C(O)OR⁵、C₀ ~ 4 アルキル - NHC(O)R⁵、C₀ ~ 4 アルキル - N(R⁵)₂、複素環系(オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、またはピペラジンから選択される)、ヘテロアリアル環系(フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、またはテトラゾールから選択される)、あるいは最大2個までのOR⁵で任意選択で置換され、ここでは、前記任意選択のR⁴置換基のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までのC₁ ~ 4 アルキル基、最大2個までのOH基、最大2個までのOC₁ ~ 4 アルキル基、最大2個までのSC₁ ~ 4 アルキル基、C(O)C₁ ~ 4 アルキル、C(O)OC₁ ~ 4 アルキル、またはC(O)OC₀ ~ 4 アルキル - C₃ ~ 5 シクロアルキルで任意選択で置換され；および

各R⁵は、独立に、水素、C₁ ~ 4 アルキル、5～6員のヘテロアリアル(イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、またはピリミジンから選択される)、4～6員のヘテロシクリル(オキセタン、テトラヒドロフラン、またはテトラヒドロピランから選択される)であり、かつ各R⁵基は、クロロ、最大3個までのフッ素原子、最大2個まで

10

20

30

40

50

の $C_1 \sim 2$ アルキル、 CH_2OH 、 CN 、最大 2 個までの OH 、最大 2 個までの $OC_1 \sim 2$ アルキル、スピロオキセタン、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換される、または 2 個の R^5 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する。

【0065】

さらに別の実施態様では、 R^4 は、最大 4 個までの Br 、 Cl 、 F 、または $C_1 \sim 4$ アルキル、最大 3 個までの、 CN 、 NO_2 、 $C_2 \sim 4$ アルケニル、 $C_2 \sim 4$ アルキニル、 $C_3 \sim 6$ シクロアルキル、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $C_3 \sim 5$ シクロアルキル、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $O - C_1 \sim 4$ アルキル、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $O - C_0 \sim 4$ アルキル - $C_3 \sim 5$ シクロアルキル、 $C(O)OC_1 \sim 4$ アルキル、 $C(O)OC_0 \sim 4$ アルキル - $C_3 \sim 5$ シクロアルキル、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHC_1 \sim 4$ アルキル、 $C(O)N(C_1 \sim 4 \text{ アルキル})_2$ 、 $C(O)NH(C_0 \sim 4 \text{ アルキル} - C_3 \sim 5 \text{ シクロアルキル})$ 、 CH_2OR^5 、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $C(O)R^5$ 、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $C(O)N(R^5)_2$ 、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $C(O)OR^5$ 、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $NHC(O)R^5$ 、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $N(R^5)_2$ 、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、またはピペラジンから選択される）、ヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、またはテトラゾールから選択される）、あるいは最大 2 個までの OR^5 で任意選択で置換され、ここでは、前記任意選択の R^4 置換基のそれぞれは、最大 4 個までのフッ素原子、最大 2 個までの $C_1 \sim 4$ アルキル基、最大 2 個までの OH 基、最大 2 個までの $OC_1 \sim 4$ アルキル基、最大 2 個までの $SC_1 \sim 4$ アルキル基、 $C(O)C_1 \sim 4$ アルキル、 $C(O)OC_1 \sim 4$ アルキル、または $C(O)OC_0 \sim 4$ アルキル - $C_3 \sim 5$ シクロアルキルで任意選択で置換された、ピリジンまたはピリミジンであり；および

各 R^5 は、独立に、水素、 $C_1 \sim 4$ アルキル、5 ～ 6 員のヘテロアリール（イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、またはピリミジンから選択される）、4 ～ 6 員のヘテロシクリル（オキセタン、テトラヒドロフラン、またはテトラヒドロピランから選択される）であり、かつ各 R^5 基は、クロロ、最大 3 個までのフッ素原子、最大 2 個までの $C_1 \sim 2$ アルキル、 CH_2OH 、 CN 、最大 2 個までの OH 、最大 2 個までの $OC_1 \sim 2$ アルキル、スピロオキセタン、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換される、または 2 個の R^5 基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する。

【0066】

別の実施態様では、 R^4 は、4 ～ 10 員の単環または二環のヘテロシクリル環（オキセタン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロピラン、ジヒドロイソオキサゾール、ピリミジン - 2, 4 (1H, 3H) - ジオン、ジヒドロフロピリミジン、ジヒドロピラノピリミジン、ジヒドロピロロピリミジン、テトラヒドロプテリジン、またはテトラヒドロピリドピリミジンから選択される）であり、ここでは、前記 R^4 基のそれぞれは、最大 4 個までの Br 、 Cl 、 F 、または $C_1 \sim 4$ アルキル、最大 3 個までの、 CN 、 NO_2 、 $C_2 \sim 4$ アルケニル、 $C_2 \sim 4$ アルキニル、 $C_3 \sim 6$ シクロアルキル、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $C_3 \sim 5$ シクロアルキル、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $O - C_1 \sim 4$ アルキル、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $O - C_0 \sim 4$ アルキル - $C_3 \sim 5$ シクロアルキル、 $C(O)OC_1 \sim 4$ アルキル、 $C(O)OC_0 \sim 4$ アルキル - $C_3 \sim 5$ シクロアルキル、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHC_1 \sim 4$ アルキル、 $C(O)N(C_1 \sim 4 \text{ アルキル})_2$ 、 $C(O)NH(C_0 \sim 4 \text{ アルキル} - C_3 \sim 5 \text{ シクロアルキル})$ 、 CH_2OR^5 、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $C(O)R^5$ 、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $C(O)N(R^5)_2$ 、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $C(O)OR^5$ 、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $NHC(O)R^5$ 、 $C_0 \sim 4$ アルキル - $N(R^5)_2$ 、複素環系（オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、またはピペラジンから選択される）、ヘテロアリール環系（フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、

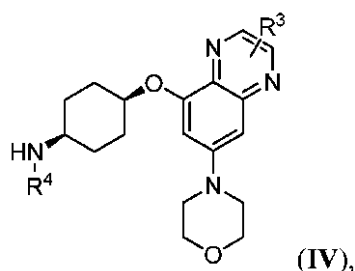
オキサジアゾール、またはテトラゾールから選択される)、あるいは最大2個までのOR⁵で任意選択で置換され、ここでは、前記任意選択のR⁴置換基のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までのC₁~4アルキル基、最大2個までのOH基、最大2個までのOC₁~4アルキル基、最大2個までのSC₁~4アルキル基、C(O)C₁~4アルキル、C(O)OC₁~4アルキル、またはC(O)OC₀~4アルキル-C₃~5シクロアルキルで任意選択で置換され; および

各R⁵は、独立に、水素、C₁~4アルキル、5~6員のヘテロアリール(イミダゾール、トリアゾール、チアゾール、ピリジン、またはピリミジンから選択される)、4~6員のヘテロシクリル(オキセタン、テトラヒドロフラン、またはテトラヒドロピランから選択される)であり、かつ各R⁵基は、クロロ、最大3個までのフッ素原子、最大2個までのC₁~2アルキル、CH₂OH、CN、最大2個までのOH、最大2個までのOC₁~2アルキル、スピロオキセタン、ピロリジン、またはトリアゾールで任意選択で置換される、または2個のR⁵基が、介在する窒素原子と共に、モルホリン環、アゼチジン環、ピロリジン環、ピペリジン環、またはピペラジン環を形成する。

【0067】

別の態様では、本発明は、式:

【化27】



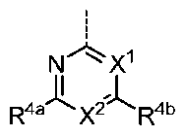
を有する化合物

(式中、

R³は、水素、C₁~4アルキル、フルオロ、クロロ、-OC₁~2アルキル、または-C(O)NH₂、-C(O)H、または-CNであり、ここでは、前記R³アルキルのそれぞれは、OHまたは最大3個までのフッ素原子で任意選択で置換され;

R⁴は、

【化28】



であり、

X¹は、N、CH、CF、CCl、または、CC₁~2アルキル(最大3個までのフッ素原子で任意選択で置換されている)であり;

X²は、NまたはCR^{4c}であり; ここでは、X¹とX²は、同時にNではあり得ず、R^{4a}、R^{4b}、およびR^{4c}のそれぞれは、独立に、水素、F、Cl、Br、CN、NO₂、C₁~4アルキル、C₀~4アルキル-C₃~5シクロアルキル、C₀~4アルキル-O-C₁~4アルキル、C₀~4アルキル-O-C₀~4アルキル-C₃~5シクロアルキル、C₂~4アルケニル、C₂~4アルキニル、C(O)OC₁~4アルキル、C(O)OC₀~4アルキル-C₃~5シクロアルキル、C(O)NH₂、C(O)NHC₁~4アルキル、C(O)N(C₁~4アルキル)₂、C(O)NH(C₀~4アルキル-C₃~5シクロアルキル)、複素環系(オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、またはピペラジンから選択される)、またはヘテロアリール環系(フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、またはテトラゾールから選択され

る)である、または、 R^{4c} 、 R^{4a} 、および介在する原子は、ジヒドロフラン、ジヒドロピラン、またはテトラヒドロピペリジン複素環系を形成し；

ここでは、前記 R^{4a} 、 R^{4b} 、または R^{4c} 複素環またはヘテロアリアル環系のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までの C_{1-4} アルキル、最大2個までのOH基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換され；および

前記 R^{4a} 、 R^{4b} 、または R^{4c} アルキルまたはシクロアルキルのそれぞれは、最大2個までのジェミナルではないOH基または最大3個までのフッ素原子で任意選択で置換される)

を特徴とする。

10

【0068】

一実施態様では、 R^3 は、水素である。

【0069】

別の実施態様では、 X^1 および X^2 のそれぞれは、独立に、CHまたはNである。

【0070】

別の実施態様では、 R^{4a} および R^{4b} のそれぞれは、独立に、複素環系(オキセタン、アゼチジン、テトラヒドロフラン、ジヒドロピラン、テトラヒドロピラン、モルホリン、ピペリジン、またはピペラジンから選択される)であり、ここでは、前記 R^{4a} または R^{4b} 複素環またはヘテロアリアル環系のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までの C_{1-4} アルキル、最大2個までのOH基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換され；かつ、前記 R^{4a} または R^{4b} アルキルまたはシクロアルキルのそれぞれは、最大2個までのジェミナルではないOH基または最大3個までのフッ素原子で任意選択で置換される。

20

【0071】

別の実施態様では、 R^{4a} および R^{4b} のそれぞれは、独立に、ヘテロアリアル環系(フラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ピロール、ピラゾール、トリアゾール、またはテトラゾールから選択される)であり、ここでは、前記 R^{4a} または R^{4b} 複素環またはヘテロアリアル環系のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までの C_{1-4} アルキル、最大2個までのOH基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換され；かつ、前記 R^{4a} または R^{4b} アルキルまたはシクロアルキルのそれぞれは、最大2個までのジェミナルではないOH基または最大3個までのフッ素原子で任意選択で置換される。

30

【0072】

別の実施態様では、 R^{4a} および R^{4b} のそれぞれは、独立に、水素、F、Cl、Br、CN、 NO_2 、 C_{1-4} アルキル、 C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{1-4} アルキル、 C_{0-4} アルキル - O - C_{0-4} アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 C_{2-4} アルケニル、 C_{2-4} アルキニル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキル、 $C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHC_{1-4}$ アルキル、 $C(O)N(C_{1-4}アルキル)_2$ 、または $C(O)NH(C_{0-4}アルキル - C_{3-5}シクロアルキル)$ であり、ここでは、前記 R^{4a} または R^{4b} 複素環またはヘテロアリアル環系のそれぞれは、最大4個までのフッ素原子、最大2個までの C_{1-4} アルキル、最大2個までのOH基、 $C(O)C_{1-4}$ アルキル、 $C(O)OC_{1-4}$ アルキル、または $C(O)OC_{0-4}$ アルキル - C_{3-5} シクロアルキルで任意選択で置換され；かつ、前記 R^{4a} または R^{4b} アルキルまたはシクロアルキルのそれぞれは、最大2個までのジェミナルではないOH基または最大3個までのフッ素原子で任意選択で置換される。

40

【0073】

別の実施態様では、本発明は、表1に列挙した化合物の群から選択される化合物を特徴

50

とする。

【 0 0 7 4 】

別の実施態様では、本発明は、表 2 に列挙した化合物の群から選択される化合物を特徴とする。

【 0 0 7 5 】

本発明の化合物の組成、製剤、および投与

別の実施態様では、本発明は、本明細書に記載した式のいずれかの化合物と、薬学的に受容可能な賦形剤とを含む薬学的組成物を提供する。さらなる実施態様では、本発明は、表 1 の化合物を含む薬学的組成物を提供する。さらなる実施態様では、該組成物は、追加の治療薬をさらに含む。

10

【 0 0 7 6 】

別の実施態様によれば、本発明は、本発明の化合物、または薬学的に受容可能なその誘導体と、薬学的に受容可能な担体、補助剤、またはビヒクルとを含む組成物を提供する。一実施態様では、本発明の組成物中の化合物の量は、生体試料中のまたは患者における DNA - PK を測定できる程度に阻害するために有効であるような量である。別の実施態様では、本発明の組成物中の化合物の量は、DNA - PK を測定できる程度に阻害するために有効であるような量である。一実施態様では、本発明の組成物は、こうした組成物を必要とする患者への投与のために製剤化される。さらなる実施態様では、本発明の組成物は、患者への経口投与のために製剤化される。

【 0 0 7 7 】

用語「患者」は、本明細書で使用する場合、動物、好ましくは哺乳類、もっとも好ましくはヒトを意味する。

20

【 0 0 7 8 】

本発明のある種の化合物は、処置のための遊離の形で、または、必要に応じて薬学的に受容可能なその誘導体として、存在することができることも理解されるであろう。本発明によれば、薬学的に受容可能な誘導体としては、限定はされないが、必要とする患者への投与時に、本明細書に別に記載した通りの化合物またはその代謝産物もしくは残基を直接的または間接的に提供することが可能である、薬学的に受容可能なプロドラッグ、塩、エステル、このようなエステルの塩、または任意の他の付加物もしくは誘導体が挙げられる。本明細書で使用する場合、用語「阻害活性のあるその代謝産物もしくは残基」は、その代謝産物もしくは残基も、DNA - PK の阻害剤であることを意味する。

30

【 0 0 7 9 】

本明細書で使用する場合、用語「薬学的に受容可能な塩」は、適切な医学的判断の範囲内で、過度の毒性、刺激性、アレルギー反応などなしに、ヒトおよび下等動物の組織と接触して使用するのに適した塩を指す。

【 0 0 8 0 】

薬学的に受容可能な塩は、当技術分野で周知である。例えば、S . M . B e r g e r は、参照により本明細書に組み込まれる J . P h a r m a c e u t i c a l S c i e n c e s , 6 6 : 1 - 1 9 , 1 9 7 7 に、薬学的に受容可能な塩を詳細に記載している。本発明の化合物の薬学的に受容可能な塩としては、適切な無機および有機の酸および塩基から誘導されるものが挙げられる。薬学的に受容可能な非毒性の酸付加塩の例は、塩酸、臭化水素酸、リン酸、硫酸、および過塩素酸などの無機酸を用いて、または酢酸、シュウ酸、マレイン酸、酒石酸、クエン酸、コハク酸、もしくはマロン酸などの有機酸を用いて、または当技術分野で使用される他の方法、例えばイオン交換などを使用することによって形成されるアミノ基の塩である。他の薬学的に受容可能な塩としては、アジピン酸塩、アルギン酸塩、アスコルビン酸塩、アスパラギン酸塩、ベンゼンスルホン酸塩、安息香酸塩、重硫酸塩、ホウ酸塩、酪酸塩、樟脳酸塩、カンファースルホン酸塩、クエン酸塩、シクロペンタンプロピオン酸塩、ジグルコン酸塩、ドデシル硫酸塩、エタンスルホン酸塩、ギ酸塩、フマル酸塩、グルコヘプトン酸塩、グリセロリン酸塩、グルコン酸塩、ヘミ硫酸塩、ヘプタン酸塩、ヘキサン酸塩、ヨウ化水素酸塩、2 - ヒドロキシ - エタンスルホン酸塩、

40

50

ラク トピオン酸塩、乳酸塩、ラウリン酸塩、ラウリル硫酸塩、リンゴ酸塩、マレイン酸塩、マロン酸塩、メタンスルホン酸塩、2-ナフタレンスルホン酸塩、ニコチン酸塩、硝酸塩、オレイン酸塩、シュウ酸塩、パルミチン酸塩、パモ酸塩、ペクチニン酸塩、過硫酸塩、3-フェニルプロピオン酸塩、リン酸塩、ピクリン酸塩、ピバル酸塩、プロピオン酸塩、ステアリン酸塩、コハク酸塩、硫酸塩、酒石酸塩、チオシアン酸塩、p-トルエンスルホン酸塩、ウンデカン酸塩、吉草酸塩などが挙げられる。適切な塩基から誘導される塩としては、アルカリ金属、アルカリ土類金属、アンモニウム、および $N^+(C_1 \sim 4 \text{ アルキル})_4$ 塩が挙げられる。本発明はまた、本発明に開示する化合物の任意の塩基性窒素含有基の四級化を想定する。こうした四級化によって、水または油に可溶性のまたは分散可能な生成物を得ることができる。代表的なアルカリまたはアルカリ土類金属塩としては、ナトリウム、リチウム、カリウム、カルシウム、マグネシウムなどが挙げられる。さらなる薬学的に受容可能な塩としては、適切な場合、非毒性のアンモニウム、第四級アンモニウム、およびアミンカチオン（ハロゲン化物、水酸化物、などの対イオンを使用して形成される）カルボン酸塩、硫酸塩、リン酸塩、硝酸塩、 $C_1 \sim 8$ スルホン酸塩、およびアールスルホン酸塩が挙げられる。

10

【0081】

上に記載した通り、本発明の薬学的に受容可能な組成物は、薬学的に受容可能な担体、補助剤、またはビヒクル（本明細書で使用する場合、これには、所望される特定の剤形に適している、任意のかつすべての溶媒、希釈剤、または他の液体のビヒクルが含まれる）、分散または懸濁助剤、界面活性剤、等張剤、増粘剤もしくは乳化剤、保存剤、固体結合剤、滑沢剤などをさらに含む。Remington: The Science and Practice of Pharmacy、第21版、2005年、D.B.Troy編、Lippincott Williams & Wilkins社、Philadelphia、およびEncyclopedia of Pharmaceutical Technology、J.SwarbrickおよびJ.C.Boylan編、1988-1999、Marcel Dekker、New York（これらのそれぞれの内容を、参照によって本明細書に組み込む）には、薬学的に受容可能な組成物を製剤化するのに使用される様々な担体、およびその調製のための公知の技術が開示されている。いずれの従来の分散媒も、本発明の化合物と適合しない（例えば、任意の望ましくない生物学的影響を生じる、または薬学的に受容可能な組成物の任意の他の成分（1種または複数）と有害な様式で相互作用することによって）場合を除いて、その使用は、本発明の範囲内であると意図される。

20

30

【0082】

薬学的に受容可能な担体として働くことができる材料のいくつかの例としては、限定はされないが、イオン交換体、アルミナ、ステアリン酸アルミニウム、レシチン、血清タンパク質、例えばヒト血清アルブミン、緩衝物質、例えばリン酸塩、グリシン、ソルビン酸またはソルビン酸カリウム、飽和野菜脂肪酸の部分グリセリド混合物、水、塩または電解質、例えば硫酸プロタミン、リン酸水素二ナトリウム、リン酸水素カリウム、塩化ナトリウム、亜鉛塩、コロイドシリカ、三ケイ酸マグネシウム、ポリビニルピロリドン、ポリアクリレート、ワックス、ポリエチレン-ポリオキシプロピレン-ブロックポリマー、羊毛脂、糖、例えばラクトース、グルコース、およびスクロース；デンプン、例えばトウモロコシデンプンおよびバレイショデンプン；セルロースおよびその誘導体、例えばカルボキシメチルセルロースナトリウム、エチルセルロース、および酢酸セルロース；粉末状のトラガカント；麦芽；ゼラチン；タルク；賦形剤、例えばカカオ脂および座剤ワックス；油、例えばラッカセイ油、綿実油；サフラワー油；ゴマ油；オリーブ油；トウモロコシ油、およびダイズ油；グリコール；例えばプロピレングリコールまたはポリエチレングリコール；エステル、例えばオレイン酸エチルおよびラウリン酸エチル；寒天；緩衝薬、例えば水酸化マグネシウムおよび水酸化アルミニウム；アルギン酸；パイロジェンフリー水；等張食塩水；リンゲル液；エチルアルコール、およびリン酸緩衝液、ならびに他の非毒性の適合性のある滑沢剤、例えばラウリル硫酸ナトリウムおよびステアリン酸マグネシウム

40

50

が挙げられ、また、着色剤、放出剤、コーティング剤、甘味料、香味および着香剤、保存剤、および酸化防止剤も、製剤者の判断に従って、組成物中に存在することができる。

【0083】

本発明の組成物は、経口的に、非経口的に、吸入スプレーによって、局所的に、直腸内に、経鼻的に、口腔内に、腔内に、または埋め込み型リザーバーを介して投与することができる。用語「非経口」には、本明細書で使用する場合、皮下、静脈内、筋肉内、関節内、関節滑液嚢内、胸骨内、くも膜下腔内、眼内、肝臓内、病巣内、硬膜外、脊髄内、および頭蓋内注射または注入技術が含まれる。好ましくは、該組成物は、経口的に、腹腔内に、または静脈内に投与される。無菌の注射可能形態の本発明の組成物は、水性または油性の懸濁剤であり得る。これらの懸濁剤は、適切な分散または湿潤剤および懸濁化剤を使用して、当技術分野で公知の技術に従って製剤化することができる。無菌の注射可能調製物はまた、非毒性の非経口的に許容し得る希釈剤または溶媒中の、無菌の注射可能溶液または懸濁液、例えば、1, 3 - ブタンジオール中の溶液であり得る。用いることができる許容し得るビヒクルおよび溶媒は、水、リンゲル液、および等張性の塩化ナトリウム溶液である。さらに、無菌の不揮発性油を、溶媒または懸濁媒として慣例的に用いることができる。

10

【0084】

この目的のために、合成のモノまたはジグリセリドを含めた、任意の無刺激性の不揮発性油を用いることができる。オリーブ油またはヒマシ油などの天然の薬学的に受容可能な油、特にそのポリオキシエチル化された形、ように、オレイン酸およびそのグリセリド誘導体などの脂肪酸が、注射可能物質の調製において有用である。これらの油溶液または懸濁液はまた、カルボキシメチルセルロースなどの長鎖アルコール希釈剤または分散剤、あるいは、エマルジョンおよび懸濁液を含めた薬学的に受容可能な剤形の製剤において一般的に使用される類似の分散剤を含有することができる。薬学的に受容可能な固体、液体、または他の剤形の製造において一般的に使用される、T w e e n、S p a n、および他の乳化剤、または生物学的利用能促進剤などの、他の一般的に使用される界面活性剤も、製剤の目的で使用することができる。

20

【0085】

本発明の薬学的に受容可能な組成物は、限定はされないが、カプセル、錠剤、水性の懸濁剤または液剤を含めて、任意の経口的に許容し得る剤形に入れて、経口的に投与することができる。経口使用のための錠剤の場合、一般的に使用される担体としては、ラクトースおよびトウモロコシデンプンが挙げられる。ステアリン酸マグネシウムなどの潤滑剤も、通常、添加される。カプセル剤型での経口投与のためには、有用な希釈剤としては、ラクトースおよび乾燥トウモロコシデンプンが挙げられる。経口使用のために、水性の懸濁液が必要とされる場合、活性成分が、乳化剤および懸濁化剤と合わせられる。所望される場合、ある種の甘味料、香味剤、または着色剤も添加することができる。

30

【0086】

あるいは、本発明の薬学的に受容可能な組成物を、直腸内投与のための座剤の形態で投与することができる。これは、薬剤を、室温で固体であるが、直腸内では液体であり、したがって、直腸内で溶けて薬物を放出することとなる、適切な非刺激性の賦形剤と混合することによって調製することができる。こうした材料としては、カカオ脂、ミツロウ、およびポリエチレングリコールが挙げられる。

40

【0087】

本発明の薬学的に受容可能な組成物はまた、特に、処置の標的が、眼、皮膚、または下部消化管の疾患を含めて、局所適用によって直ちに到達可能である部位または器官を含む場合、局所的に投与することができる。適切な局所用製剤は、これらの部位または器官のそれぞれのために、容易に調製される。

【0088】

下部消化管に対する局所適用は、直腸内座剤製剤（上を参照）で、または適切な浣腸製剤で実施することができる。局所的経皮貼付剤も、使用することができる。

50

【0089】

局所適用については、薬学的に受容可能な組成物は、1種または複数の担体中に懸濁または溶解させた活性な成分を含有する、適切な軟膏に製剤化することができる。本発明の化合物の局所投与のための担体としては、限定はされないが、鉱油、流動ワセリン、白色ワセリン、プロピレングリコール、ポリオキシエチレン、ポリオキシプロピレン化合物、乳化ワックス、および水が挙げられる。あるいは、薬学的に受容可能な組成物は、1種または複数の薬学的に受容可能な担体中に懸濁または溶解させた活性な成分を含有する適切なローションまたはクリームに製剤化することができる。適切な担体としては、限定はされないが、鉱油、モノステアリン酸ソルビタン、ポリソルベート60、セチルエステルワックス、セテアリルアルコール、2-オクチルドデカノール、ベンジルアルコール、および水が挙げられる。

10

【0090】

眼部使用については、薬学的に受容可能な組成物は、例えば、塩化ベンジルアルコニウムなどの保存剤を含むまたは含まない、等張性のpH調整した無菌食塩水または他の水溶液中の微粉化懸濁液として、または、好ましくは、等張性のpH調整した無菌食塩水または他の水溶液中の溶液として、製剤化することができる。あるいは、眼部使用については、薬学的に受容可能な組成物は、ワセリンなどの軟膏に製剤化することができる。本発明の薬学的に受容可能な組成物はまた、経鼻エアロゾルまたは吸入によって投与することもできる。こうした組成物は、医薬製剤の技術分野で周知の技術に従って調製され、また、ベンジルアルコールもしくは他の適切な保存剤、生物学的利用能を高めるための吸収促進剤、フルオロカーボン、および/または他の従来の可溶化もしくは分散剤を用いて、生理食塩水中の溶液として調製することができる。

20

【0091】

最も好ましくは、本発明の薬学的に受容可能な組成物は、経口投与のために製剤化される。

【0092】

経口投与のための液体剤形としては、限定はされないが、薬学的に受容可能なエマルジョン、マイクロエマルジョン、液剤、懸濁剤、シロップ、およびエリキシルが挙げられる。液体剤形は、活性な化合物に加えて、例えば、水または他の溶媒、可溶化剤、および乳化剤、例えばエチルアルコール、イソプロピルアルコール、炭酸エチル、酢酸エチル、ベンジルアルコール、安息香酸ベンジル、プロピレングリコール、1,3-ブチレングリコール、ジメチルホルムアミド、油（具体的には、綿実、ラッカセイ、トウモロコシ、胚芽、オリーブ、ヒマシ、およびゴマ油）、グリセロール、テトラヒドロフルフリルアルコール、ポリエチレングリコール、およびソルビタンの脂肪酸エステル、ならびにこれらの混合物などの、当技術分野で一般的に使用される不活性な希釈剤を含有することができる。経口用組成物は、不活性な希釈剤に加えて、湿潤剤、乳化および懸濁化剤、甘味料、香味および着香剤などの補助剤を含むことができる。

30

【0093】

注射可能調製物、例えば、無菌の注射可能な水性または油性の懸濁液は、適切な分散または湿潤剤および懸濁化剤を使用して、公知の技術に従って製剤化することができる。無菌の注射可能な調製物はまた、非毒性の非経口的に許容し得る希釈剤または溶媒中の、無菌の注射可能な溶液、懸濁液、またはエマルジョン、例えば、1,3-ブタンジオール中の溶液であり得る。用いることができる許容し得るビヒクルおよび溶媒は、水、リンゲル液、U.S.P.および等張性の塩化ナトリウム溶液である。さらに、無菌の不揮発性油を、溶媒または懸濁媒として慣例的に用いることができる。この目的のために、合成のモノまたはジグリセリドを含めた、任意の無刺激性の不揮発性油を用いることができる。さらに、オレイン酸などの脂肪酸が、注射可能物質の調製において使用される。

40

【0094】

注射可能製剤は、例えば、細菌保持フィルターでの濾過によって、または、使用前に滅菌水または他の無菌の注射可能媒体に溶解または分散させることができる無菌の固体組成

50

物の形態の滅菌剤を組み込むことによって、滅菌することができる。

【0095】

本発明の化合物の効果を延長させるために、皮下または筋肉内注射からの化合物の吸収を遅くすることがしばしば望ましい。これは、水溶性に乏しい結晶性または非結晶性材料の液体懸濁液の使用によって実現することができる。化合物の吸収の速度は、ひいては、その溶解の速度に依存し、これは、同様に、結晶サイズおよび結晶の形に依存し得る。あるいは、化合物を、油ビヒクルに溶解または懸濁させることによって、非経口的に投与された化合物剤型の吸収の遅延が実現される。注射可能デポー剤型は、化合物をポリラクチド-ポリグリコリド (polyglycolide) などの生分解性ポリマーに入れたマイクロカプセル化 (microencapsule) マトリクスを形成することによって作製される。ポリマーに対する化合物の比、および、用いられる特定のポリマーの性質に応じて、化合物放出の速度を制御することができる。他の生分解性ポリマーの例としては、ポリ(オルトエステル)およびポリ(無水物)が挙げられる。デポー注射可能製剤はまた、化合物を、生体組織と適合性のあるリポソームまたはマイクロエマルジョンに封入することによって調製される。

10

【0096】

直腸内または腔内投与のための組成物は、好ましくは、座剤であり、これは、本発明の化合物を、周囲温度では固体であるが体温では液体であり、したがって、直腸または腔内で溶けて活性な化合物を放出する、カカオ脂、ポリエチレングリコール、または座剤ワックスなどの、適切な非刺激性の賦形剤または担体と混合することによって調製することができる。

20

【0097】

経口投与のための固体剤形としては、カプセル、錠剤、丸剤、散剤、および顆粒剤が挙げられる。こうした固体剤形では、活性な化合物は、クエン酸ナトリウムまたはリン酸ニカルシウムなどの薬学的に受容可能な少なくとも1種の不活性な賦形剤または担体、および/または a) 充填剤または増量剤、例えばデンプン、ラクトース、スクロース、グルコース、マンニトール、およびケイ酸、b) 結合剤、例えばカルボキシメチルセルロース、アルギナート、ゼラチン、ポリビニルピロリジノン、スクロース、およびアカシア、c) 湿潤剤、例えばグリセロール、d) 崩壊剤、例えば寒天、炭酸カルシウム、ジャガイモもしくはタピオカデンプン、アルギン酸、ある種のケイ酸塩、および炭酸ナトリウム、e) 溶解遅延剤 (solution retarding agent)、例えばパラフィン、f) 吸収促進剤、例えば第四級アンモニウム化合物、g) 湿潤剤、例えばセチルアルコールおよびモノステアリン酸グリセロール、h) 吸収剤、例えばカオリンおよびベントナイト粘土、および i) 滑沢剤、例えばタルク、ステアリン酸カルシウム、ステアリン酸マグネシウム、固体のポリエチレングリコール、ラウリル硫酸ナトリウム、ならびにこれらの混合物と混合される。カプセル、錠剤、および丸剤の場合、剤形はまた、緩衝薬を含むことができる。

30

【0098】

類似の型の固体組成物はまた、ラクトースまたは乳糖ならびに高分子量ポリエチレングリコールなどの賦形剤を使用するソフトおよびハード充填ゼラチンカプセル中の充填剤として用いることができる。錠剤、糖衣錠、カプセル、丸剤、および顆粒剤の固体剤形は、腸溶コーティングおよび医薬製剤技術で周知の他のコーティングなどのコーティングおよびシェルを用いて調製することができる。これらは、乳白剤を任意選択で含有することができ、また、場合によっては遅延方式で、腸管のある部分において、活性成分(1種または複数)のみをまたは優先的に放出する組成物の充填剤であり得る。使用することができる埋め込み組成物の例としては、ポリマー物質およびワックスが挙げられる。類似の型の固体組成物はまた、ラクトースまたは乳糖ならびに高分子量ポリエチレングリコールなどの賦形剤を使用するソフトおよびハード充填ゼラチンカプセル中の充填剤として用いることができる。

40

【0099】

50

活性な化合物はまた、上に記述した通りの１種または複数の賦形剤を含む、マイクロカプセル化された形態であり得る。錠剤、糖衣錠、カプセル、丸剤、および顆粒剤の固体剤形は、腸溶コーティング、放出制御コーティング、および医薬製剤技術で周知の他のコーティングなどのコーティングおよびシェルを用いて調製することができる。こうした固体剤形では、活性な化合物は、スクロース、ラクトース、またはデンプンなどの少なくとも１種の不活性な希釈剤と混合することができる。こうした剤形はまた、通常の慣行と同様に、不活性な希釈剤以外の追加の物質、例えば、ステアリン酸マグネシウムおよび微結晶セルロースなどの、製錠滑沢剤および他の製錠助剤を含むことができる。カプセル、錠剤、および丸剤の場合、剤形はまた、緩衝薬を含むことができる。これらは、乳白剤を任意選択で含有することができ、また、場合によっては遅延方式で、腸管のある部分において、活性成分（１種または複数）のみをまたは優先的に放出する組成物の充填剤であり得る。使用することができる埋め込み組成物の例としては、ポリマー物質およびワックスが挙げられる。

10

【０１００】

本発明の化合物の局所または経皮投与のための剤形としては、軟膏、泥膏、クリーム、ローション、ゲル、パウダー、液剤、スプレー剤、吸入薬、または貼付剤が挙げられる。活性な成分は、無菌条件下で、薬学的に受容可能な担体と、必要とされる場合、任意の必要とされる保存剤または緩衝液と混合される。眼部用製剤、点耳剤、および点眼剤も、本発明の範囲内であると意図される。さらに、本発明は、化合物の身体への制御送達を提供するという付加的な利点を有する経皮貼付剤の使用を意図する。こうした剤形は、化合物を適切な媒体に溶解または分配させることによって作製することができる。皮膚を通した化合物の流入を増大させるために、吸収促進剤も使用することができる。その速度は、速度制御膜を提供することによって、または化合物をポリマーマトリクスまたはゲルに分配させることによって制御することができる。

20

【０１０１】

本発明の化合物は、投与の容易さおよび投薬の均一性のために、単位剤形に製剤化されることが好ましい。「単位剤形」という表現は、本明細書で使用する場合、処置されることとなる患者に適した、薬剤の物理的に不連続な単位を指す。しかし、本発明の化合物および組成物の総１日使用量は、適切な医学的判断の範囲内で、担当医によって決定されることとなることが理解されよう。任意の特定の患者または生物のための具体的な有効な投与レベルは、処置される障害および障害の重さ；用いられる具体的な化合物の活性；用いられる具体的な組成物；患者の年齢、体重、全身健康状態、性別、および栄養；用いられる具体的な化合物の投与の時間、投与経路、および排出速度；処置の期間；用いられる具体的な化合物と組み合わせるまたは同時に使用される薬物、ならびに医療技術で周知である類似の要因を含めた様々な要因に依存することとなる。

30

【０１０２】

組成物を単一剤形に生成するための担体材料と組み合わせることができる本発明の化合物の量は、処置される受容者、投与の特定の様式に応じて変動することとなる。好ましくは、組成物は、 $0.01 \sim 100 \text{ mg/kg}$ （体重）/日の投薬量の阻害剤を、これらの組成物を受ける患者に投与することができるように製剤化されるべきである。

40

【０１０３】

処置されることとなる特定の増殖状態または癌に応じて、その状態を処置または予防するために通常投与される追加の治療薬も、本発明の組成物中に存在することができる。本明細書で使用する場合、特定の増殖状態または癌を処置または予防するために通常投与される追加の治療薬は、「処置される疾患または状態に適した」ものとして公知である。追加の治療薬の例は、下に提供する。

【０１０４】

本発明の組成物中に存在する追加の治療薬の量は、多くとも、唯一の活性な薬剤としてその治療薬を含む組成物において通常投与されるであろう量となる。好ましくは、本明細書に開示する組成物中の追加の治療薬の量は、治療活性のある唯一の薬剤としてその薬剤

50

を含む組成物中に通常存在する量の約 50 % から 100 % までの範囲となる。

【0105】

本発明の化合物および組成物の使用

一実施態様では、本発明は、治療薬または DNA 損傷を誘発する疾患状態に対して細胞の感受性を高める方法であって、細胞を、式 I、II、もしくは III、またはこれらの亜式 (subformula) (例えば、式 I - A、I - A - 1、I - A - 2、I - B、I - B - 1、I - B - 2、I - C、I - C - 1、I - C - 2、I - C - 3、I - C - 4、I - D、I - D - 1、I - D - 2、I - D - 3、I - D - 4、または I - D - 5) の 1 種または複数の DNA - PK 阻害剤と接触させる工程を含む方法を提供する。

【0106】

本発明は、癌の処置のための治療レジメンを増強する方法であって、その必要のある個体に、式 I、II、もしくは III、またはこれらの亜式の有効量の DNA - PK 阻害剤を投与する工程を含む方法をさらに提供する。一態様では、癌の処置のための治療レジメンとして、放射線療法が挙げられる。

【0107】

本発明の化合物は、放射線療法がこうした処置の治療効果を高めるために適応される場合に有用である。さらに、放射線療法はしばしば、癌の処置における手術に対する補助 (adjuvant) として適応される。補助療法としての放射線療法の目標は、原発性腫瘍がコントロールされている場合に、再発のリスクを低下させる、および無病生存率を高めることである。補助放射線療法は、下に記載する通りの、結腸癌、直腸癌、肺癌、胃・食道癌、および乳癌を含めたいくつかの疾患に適応される。

【0108】

本発明はまた、放射線療法を含むまたは含まない癌の処置の治療レジメンに、本発明の化合物と共に、別の抗癌化学療法薬を含めることによって実施することができる。本発明の DNA - PK 阻害剤化合物と、こうした薬剤との組み合わせは、化学療法プロトコルを増強することができる。例えば、本発明の阻害剤化合物は、エトボシドまたはブレオマイシン、すなわち DNA 鎖切断を引き起こすことが公知である薬剤と共に投与することができる。

【0109】

本発明は、さらに、式 I、II、もしくは III、またはこれらの亜式の化合物を利用して、腫瘍細胞の放射性感受性を高めることに関する。好ましい化合物は、本発明の薬学的組成物について記載した通りのものである。細胞の「放射性感受性を高める」ことができる化合物は、本明細書で使用する場合、電磁放射線に対する細胞の感受性を増大させるために、および/または電磁放射線 (例えば X 線) を用いて処置可能である疾患の処置を促進するために、治療有効量で動物に投与される分子、好ましくは低分子量の分子と定義される。電磁放射線を用いて処置可能である疾患としては、新生物疾患、良性および悪性腫瘍、ならびに癌細胞が挙げられる。

【0110】

本発明はまた、動物における癌を処置する方法であって、動物に、有効量の DNA - PK 阻害剤、例えば本発明の化合物などを投与することを含む方法を提供する。本発明はさらに、生物系における、癌細胞成長 (細胞増殖のプロセスを含めて)、侵襲性、および転移を抑制する方法を対象とする。方法は、癌細胞成長の阻害剤としての本発明の化合物の使用を含む。好ましくは、該方法は、哺乳類などの生きている動物において、癌細胞成長、侵襲性、転移、または腫瘍発生を抑制するまたは低下させるために用いられる。本発明の化合物は、癌を処置すること、または癌細胞成長を抑制することにおいて、単独で、または IR もしくは 1 つもしくは複数の化学療法薬の使用と組み合わせてのいずれかで使用することができる。本発明の方法はまた、分析系、例えば、癌細胞の成長およびその特性を分析すること、ならびに癌細胞成長に影響を与える化合物を特定することなどにおける使用に容易に適応可能である。

【0111】

腫瘍または新生物は、その細胞の増殖が制御できず、かつ進行性である、組織細胞の成長を含む。いくつかのこうした成長は、良性であるが、それ以外のものは、「悪性」と呼ばれ、生物の死をもたらす可能性がある。悪性新生物または「癌」は、侵襲性の細胞増殖を呈することに加えて、周辺組織に侵入し、転移する可能性があるという点で、良性の成長と区別される。さらに、悪性新生物は、互いに、およびその周辺組織と比較して、分化およびその組織化の、より大きな喪失（より大きな「脱分化」）を示すことを特徴とする。この性質は、「退形成」とも呼ばれる。

【 0 1 1 2 】

本発明によって処置可能な新生物には、固形腫瘍、すなわち癌腫および肉腫も含まれる。癌腫としては、周辺組織に浸潤（侵入）し、転移を引き起こす、上皮細胞由来の悪性新生物が挙げられる。腺癌は、腺組織から、または認識可能な腺構造を形成する組織由来の癌腫である。別の広義のカテゴリの癌としては、その細胞が線維または均質物質様の胚性結合組織中に埋め込まれた腫瘍である、肉腫が挙げられる。本発明はまた、白血病、リンパ腫、および、通常、腫瘍塊として現れないが、血管またはリンパ細網系に分散される他の癌を含めた、骨髄またはリンパ系の癌の処置を可能にする。

【 0 1 1 3 】

DNA - PK 活性は、例えば、成人および小児の腫瘍学、固形腫瘍 / 悪性腫瘍の成長、粘液性および円形細胞癌腫、局所進行腫瘍、転移性の癌、ヒト軟部組織肉腫（Ewing 肉腫を含めて）、癌転移（リンパ行性転移を含めて）、扁平上皮癌（特に頭頸部の）、食道扁平上皮癌、口腔癌腫、血液細胞悪性腫瘍（多発性骨髄腫を含めて）、白血病（急性リンパ性白血病、急性非リンパ性白血病、慢性リンパ性白血病、慢性骨髄性白血病、およびヘアリー細胞白血病を含めて）、滲出液リンパ腫（体腔性（body cavity based）リンパ腫）、胸腺リンパ腫、肺癌（小細胞肺癌腫を含めて）、皮膚T細胞リンパ腫、ホジキンリンパ腫、非ホジキンリンパ腫、副腎皮質の癌、ACTH産生腫瘍、非小細胞癌、乳癌（小細胞癌腫および乳管癌腫を含めて）、消化管癌（胃癌、結腸癌、結腸直腸癌、結腸直腸新生物と関連するポリープを含めて）、膵臓癌、肝臓癌、泌尿器癌（原発性表在性膀胱腫瘍、膀胱の浸潤性移行細胞癌、および筋層浸潤性膀胱癌を含めた膀胱癌を含めて）、前立腺癌、女性生殖管の悪性腫瘍（卵巢癌腫、原発性腹膜上皮性腫瘍、子宮頸癌腫、子宮体癌、陰癌、外陰の癌、子宮癌、および卵胞における固形腫瘍を含めて）、男性生殖管の悪性腫瘍（精巣癌および陰茎癌を含めて）、腎臓癌（腎細胞癌を含めて）、脳癌（内在性脳腫瘍、神経芽細胞腫、星状細胞脳腫瘍、神経膠腫を含めて）、中枢神経系における転移性の腫瘍細胞浸潤、骨癌（骨腫および骨肉腫を含めて）、皮膚癌（悪性黒色腫、ヒト皮膚ケラチノサイトの腫瘍進行、扁平上皮癌を含めて）、甲状腺癌、網膜芽細胞腫、神経芽細胞腫、腹水、悪性胸水、中皮腫、ウィルムス腫瘍、胆嚢癌、絨毛性腫瘍、血管外皮腫、およびカポジ肉腫における、様々な形態の癌と関連し得る。これらのおよび他の形態の癌の処置を増強する方法は、本発明に包含される。

【 0 1 1 4 】

本発明は、生体試料におけるDNA - PK活性を阻害する方法であって、該生体試料を、本発明の化合物または組成物と接触させることを含む方法を提供する。用語「生体試料」は、本明細書で使用する場合、生きている生物の外部の試料を意味し、限定はされないが、細胞培養物またはその抽出物；哺乳類から得られた生検材料またはその抽出物；および血液、唾液、尿、便、精液、涙、または他の体液もしくはその抽出物が挙げられる。生体試料におけるキナーゼ活性、特にDNA - PK活性の阻害は、当業者に公知である様々な目的のために有用である。こうした目的の例としては、限定はされないが生体標本保管および生物学的分析が挙げられる。一実施態様では、生体試料におけるDNA - PK活性を阻害する方法は、非治療的方法に限定される。

【 0 1 1 5 】

本発明の化合物の調製

本明細書で使用する場合、すべての略語、記号、および規約は、現在の科学文献内で使用されているものと一致している。例えば、Janet S. Dodd 編、The AC

10

20

30

40

50

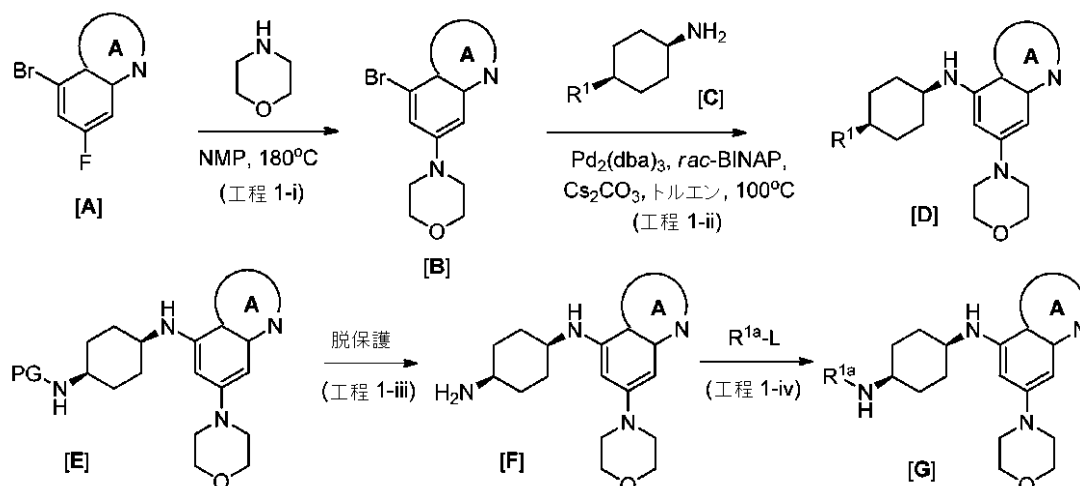
S Style Guide: A Manual for Authors and Editors、第2版、Washington, D.C.: American Chemical Society, 1997を参照のこと。次の定義は、本明細書で使用する用語および略語を説明する:

BPin	ボロン酸ピナコールエステル	
Brine	飽和NaCl水溶液	
DCM	ジクロロメタン	
DIAD	アゾジカルボン酸ジイソプロピル	
DEA	ジイソプロピルエチルアミン	
DMA	ジメチルアセトアミド	10
DMF	ジメチルホルムアミド	
DMSO	メチルスルホキシド	
DTT	ジチオトレイトール	
ESMS	エレクトロスプレー質量分析	
Et ₂ O	エチルエーテル	
EtOAc	酢酸エチル	
EtOH	エチルアルコール	
HEPES	4 - (2 - ヒドロキシエチル) - 1 - ピペラジンエタンスルホン酸	
HPLC	高速液体クロマトグラフィー	
IPA	イソプロパノール	20
LAH	水素化アルミニウムリチウム	
LC - MS	液体クロマトグラフィー - 質量分析	
LDA	リチウムジイソプロピルエチルアミド	
Me	メチル	
MeOH	メタノール	
MsCl	塩化メタンスルホニル	
MTBE	メチル t - ブチルエーテル	
NMP	N - メチルピロリジン	
Pd ₂ (dba) ₃	トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0)	
Pd (dppf) Cl ₂	1 , 1 ' ビス (ジフェニルホスフィノ) - フェロセンジクロロ - パラジウム	30
PG	保護基	
Ph	フェニル	
(rac) - BINAP	ラセミ 2 , 2 ' - ビス (ジフェニルホスフィノ) - 1 , 1 ' ビナフチル	
RockPhos	ジ - tert - ブチル (2 ' , 4 ' , 6 ' - トリイソプロピル - 3 , 6 - ジメトキシ - [1 , 1 ' ビフェニル] - 2 - イル) ホスフィン	
RTまたはrt	室温	
SFC	超臨界流体クロマトグラフィー	
SPhos	2 - ジシクロヘキシルホスフィノ - 2 ' , 6 ' - ジメトキシビフェニル	40
TBAI	ヨウ化テトラブチルアンモニウム	
tBu	三級ブチル	
THF	テトラヒドロフラン	
TEA	トリエチルアミン	
TMEDA	テトラメチルエチレンジアミン	
VPhos	[3 - (2 - ジシクロヘキシルホスファニルフェニル) - 2 , 4 - ジメトキシ - フェニル] スルホニルオキシナトリウム	
【0116】		
一般合成手順		
一般に、本発明の化合物は、本明細書に記載する方法によって、または、当業者に公知		50

他の方法によって調製することができる。

実施例 1 . 式 G の化合物の一般的調製

【化 2 9】



スキーム 1

【 0 1 1 7】

X¹ が NH である式 I の化合物（すなわち、式 I - A の化合物）は、下のスキーム 1 で概要を示した通りに調製することができる。したがって、スキーム 1 の工程 1 - i に示した通り、式 A のヘテロアリール化合物を、モルホリンまたはモルホリン類似体と、極性の非プロトン溶媒中で混合物を加熱することによって反応させて、式 B の化合物を生成することができる。スキーム 1 の工程 1 - ii に示した通り、パラジウム触媒による、ホスフィン配位子によるブッフバルト/ハートウィッグ（Buchwald/Hartwig）型カップリングを利用して、式 B の化合物を、式 C のアミノシクロヘキサンと反応させて、式 D の化合物を生成することができる（ここでは、R¹ および R² は、本明細書の他の場所に記載した通りである）。一実施例では、式 E のモノ保護（monoprotected）meso シクロヘキサン - 1, 4 - ジアミンが調製される場合、スキーム 1 の工程 1 - iii に示した通り、保護基の除去によって、式 F の化合物が形成される。次いで、得られた遊離のアミンを、アミンとの反応性がある様々な部分（例えば、R^{1a} - L（式中、L は、クロロ、ブロモ、ヨード、トルエンスルホン酸エステル、メタンスルホン酸エステル、またはトリフルオロメタンスルホン酸エステルなどの脱離基である、または、L は、活性なエステルまたはイソシアナト基などの、反応性のカルボニル含有基である））と反応させて、スキーム I の工程 1 - iv に示した通り、式 G の化合物を生成することができる。

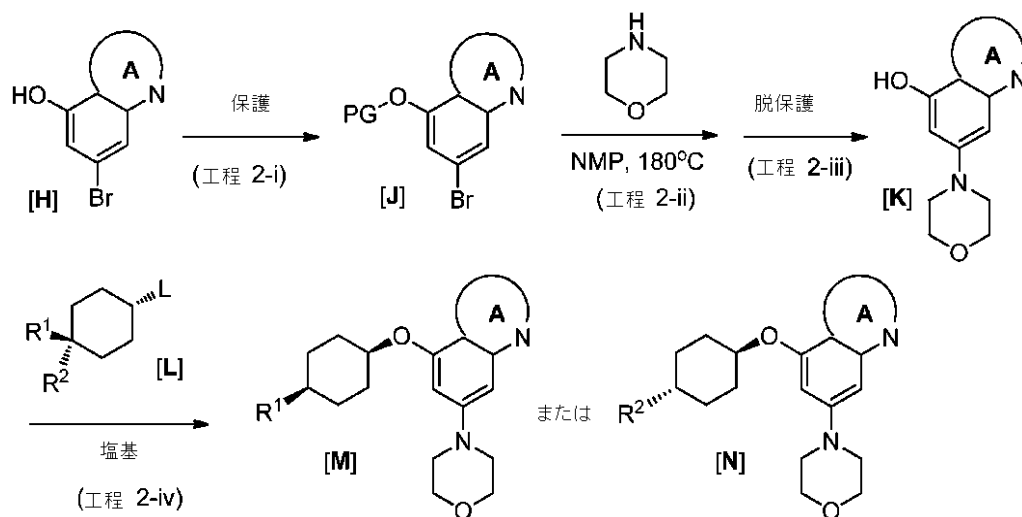
実施例 2 . 式 M、N、R、および S の化合物の一般的調製

10

20

30

【化 3 0】



スキーム 2a

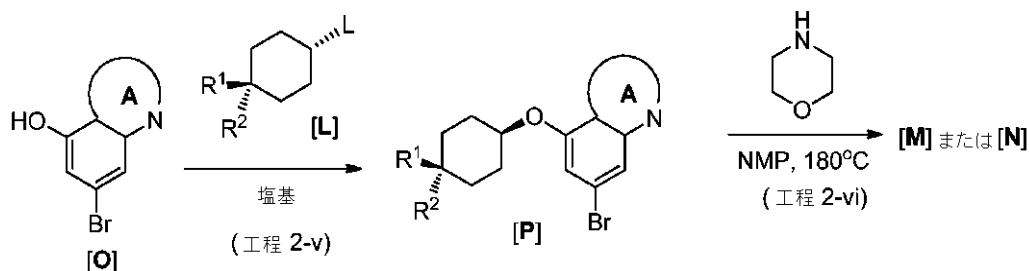
【 0 1 1 8】

X¹ が O である式 I の化合物は、下のスキーム 2 a および 2 b で概要を示した通りに調製することができる。したがって、スキーム 2 a の工程 2 - i に示した通り、式 H のヘテロアリール化合物のヒドロキシル基を保護して、式 J の化合物を生成することができ、次いで、スキーム 2 a の工程 2 - i i および 2 - i i i に示した通り、これを、モルホリンまたはモルホリン類似体と、極性の非プロトン溶媒中で混合物を加熱することによって反応させて、保護基の除去後に、式 K の化合物を生成することができる。続いて、スキーム 2 a の工程 2 - i v に示した通り、式 K の化合物を式 L の化合物（例えば、ここでは、L は、クロロ、プロモ、ヨード、トルエンスルホン酸エステル、メタンスルホン酸エステル、またはトリフルオロメタンスルホン酸エステルなどの脱離基である）と、その脱離基の S_N2 置換に作用するのに十分な条件下で反応させて、式 M または式 N の化合物（R¹ または R² のどちらが水素かに応じて）を生成することができる。R¹ または R² が、保護された窒素または酸素部分である場合、本発明の化合物は、保護基の除去、およびそれに続く得られた遊離のアミン / アルコールの合成操作によって生成することができる。

【 0 1 1 9】

あるいは、スキーム 2 b に示す通り、式 O の化合物のヒドロキシル基を、式 L の化合物と反応させて、式 P の縮合した臭化ピシクロヘテロアリールを生成することができ、続いてこれを、モルホリンまたはモルホリン類似体と反応させて、式 M または式 N の化合物を生成することができる。

【化 3 1】



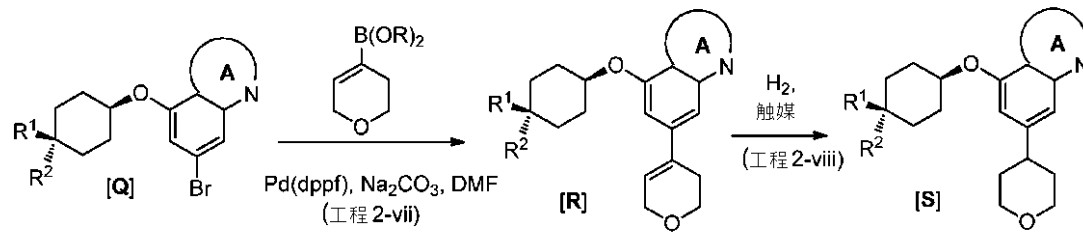
スキーム 2b

【 0 1 2 0】

あるいは、スキーム 2 c に示す通り、環 B がジヒドロピラン環である本発明の化合物は、式 Q の化合物をジアルキル（3, 6 - ジヒドロ - 2 H - ピラン - 4 - イル）ボロナート

と反応させて、式 R の化合物を生成することによって調製することができる。次いで、式 R の化合物を、続いて還元して、式 S の化合物を形成することができる。

【化 3 2】

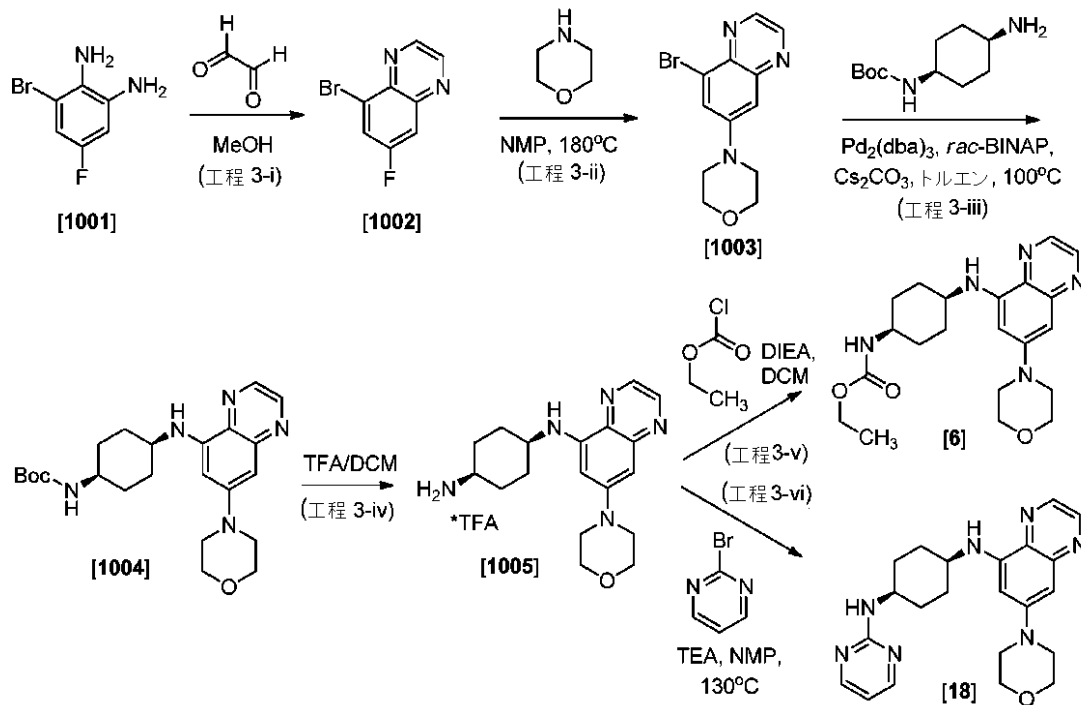


10

スキーム 2c

実施例 3 . (4 - ((7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) アミノ) シクロヘキシル) カルバミン酸エチル (化合物 6) および N¹ - (7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) N⁴ - (ピリミジン - 2 - イル) シクロヘキサン - 1 , 4 - ジアミン (化合物 18) の調製

【化 3 3】



20

30

スキーム 3

40

【 0 1 2 1 】

スキーム 3 の工程 3 - i に示す通り、3 - ブロモ - 5 - フルオロ - ベンゼン - 1 , 2 - ジアミン (化合物 1001、1.11 g、5.41 mmol) のメタノール (11 mL) 溶液に、オキサアルデヒド (40 % w / v の 1.57 mL、10.8 mmol) を添加した。この反応混合物を、窒素下で室温で撹拌した。2 時間後、黄色固体が沈殿した。反応混合物を、水 (20 mL) で希釈し、さらに 5 分撹拌し、濾過し、集めた固体を高真空中で乾燥させて、5 - ブロモ - 7 - フルオロキノキサリン (化合物 1002、868 mg、収率 70.6 %) を生成した：

【数 1】

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, DMSO- d_6) δ 9.06 (s, 2H),
8.36 (dd, $J = 8.5, 2.7$ Hz, 1H), 8.00 (dd, $J = 9.2, 2.7$ Hz, 1H); ESMS ($M+H^+$) = 227.14.

【0122】

スキーム 3 の工程 3 - i i に示す通り、5 - ブロモ - 7 - フルオロキノキサリン (4 . 5 g、19 . 8 mmol) の NMP (67 . 5 mL) 溶液に、モルホリン (3 . 1 mL、35 . 6 mmol) を添加した。この反応混合物を、140 に加熱し、15 時間撹拌した。冷却した後、混合物を水 (200 mL) に注ぎ、酢酸エチル (2 × 100 mL) で抽出し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、減圧下で蒸発させ、中圧シリカゲルクロマトグラフィー (10 から 80 % の EtOAc / ヘキサングラジエント) によって精製して、黄色固体として 4 - (8 - ブロモキノキサリン - 6 - イル) モルホリン (化合物 1003、3 . 86 g、収率 66 %) を得た：

10

【数 2】

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, DMSO- d_6) δ 8.82 (d, $J = 1.6$ Hz, 1H), 8.73 (d, $J = 1.6$ Hz, 1H), 8.12 (d, $J = 2.5$ Hz, 1H), 7.27 (d, $J = 2.4$ Hz, 1H), 3.87-3.69 (m, 4H), 3.44-3.34 (m, 4H); ESMS ($M+H^+$) = 227.14.

【0123】

スキーム 3 の工程 3 - i i i に示す通り、4 - (8 - ブロモキノキサリン - 6 - イル) モルホリン (1 . 57 g、5 . 34 mmol) と、tert - ブチル - N - (4 - アミノシクロヘキシル) カルバメート (1 . 37 g、6 . 40 mmol) と、(rac) - BINAP (664 mg、1 . 07 mmol) と、炭酸セシウム (5 . 22 g、16 . 0 mmol) と、Pd₂(dba)₃ (489 mg、0 . 534 mmol) との混合物のトルエン (50 mL) 溶液を、100 で 12 時間加熱した。冷却した後、この混合物を、酢酸エチル (150 mL) および水 (25 mL) で希釈し、次いで、珪藻土で濾過し、続いて、酢酸エチルで洗浄した。合わせた有機物を、ブラインで洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させ、減圧下で濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー (0 から 60 % の EtOAc / ヘキサングラジエント) によって精製して、(-4 - ((7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) アミノ) シクロヘキシル) カルバミン酸 tert - ブチル (化合物 1004、1 . 83 g、収率 83 . 2 %) を得た：

20

30

【数 3】

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl₃) δ 8.65 (d, $J = 2.0$ Hz, 1H), 8.35 (d, $J = 2.0$ Hz, 1H), 6.60 (d, $J = 2.4$ Hz, 1H), 6.34 (d, $J = 2.4$ Hz, 1H), 6.11 (d, $J = 7.8$ Hz, 1H), 4.60 (s, 1H), 3.97-3.86 (m, 4H), 3.67 (s, 2H), 3.41-3.25 (m, 4H), 1.85 (d, $J = 3.0$ Hz, 5H), 1.74-1.57 (m, 3H), 1.45 (s, 9H).

【0124】

スキーム 3 の工程 3 - i v に示す通り、(-4 - ((7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) アミノ) シクロヘキシル) カルバミン酸 tert - ブチル (900 mg、2 . 00 mmol) のジクロロメタン (16 mL) 溶液に、トリフルオロ酢酸 (3 mL、38 . 9 mmol) を添加した。得られた黒色の反応混合物を、窒素雰囲気下で、室温で 2 時間撹拌した。飽和炭酸水素ナトリウム水溶液 (150 mL) を、色が黒色から橙色に変わるまで、ゆっくりと添加した。この混合物を、ジクロロメタン (2 × 100 mL) で抽出し、合わせた有機物を、ブライン (50 mL) で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させ、減圧下で濃縮して、-N¹ - (7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) シクロヘキサ - 1 . 4 - ジアミン、トリフルオロ酢酸 (化合物 1005) を得た：

40

【数 4】

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 8.64 (d, $J = 1.9$ Hz, 1H), 8.36 (d, $J = 1.9$ Hz, 1H), 6.59 (d, $J = 2.3$ Hz, 1H), 6.34 (d, $J = 2.3$ Hz, 1H), 6.20 (d, $J = 7.9$ Hz, 1H), 3.95-3.84 (m, 4H), 3.69 (s, 1H), 3.41-3.25 (m, 4H), 2.93 (d, $J = 8.9$ Hz, 1H), 2.09-1.87 (m, 2H), 1.90-1.68 (m, 6H), 1.58 (dd, $J = 11.2, 8.7$ Hz, 2H); ESMS ($\text{M}+\text{H}^+$) = 328.34.

この化合物は、さらなる精製を行わずに、そのまま使用した。

【0125】

スキーム 3 の工程 3 - v に示す通り、 N^1 - (7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) シクロヘキサン - 1, 4 - ジアミン (25 mg、0.07 mmol) とジイソプロピルエチルアミン (18.0 mg、24.3 μL 、0.14 mmol) とのジクロロメタン (750 μL) 溶液に、クロロギ酸エチル (11.4 mg、10.0 μL 、0.105 mmol) を添加した。この反応混合物を、12 時間攪拌し、ジクロロメタン (10 mL) で希釈し、飽和炭酸水素ナトリウム水溶液 (5 mL) で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させ、減圧下で濃縮した。得られた残渣を、溶離液として 10 ~ 90 % のアセトニトリル / 水 (0.1 % TFA) グラジエントを使用する HPLC 分取クロマトグラフィーによって精製して、(4 - ((7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) アミノ) シクロヘキシル) カルバミン酸エチル (化合物 6、14 mg、収率 50 %) を得た：

【数 5】

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 8.65 (d, $J = 2.0$ Hz, 1H), 8.36 (d, $J = 2.0$ Hz, 1H), 6.61 (d, $J = 2.4$ Hz, 1H), 6.35 (d, $J = 2.4$ Hz, 1H), 6.10 (d, $J = 7.6$ Hz, 1H), 4.72 (s, 1H), 4.12 (q, $J = 7.0$ Hz, 2H), 3.96-3.82 (m, 4H), 3.68 (s, 2H), 3.42-3.23 (m, 4H), 1.93-1.78 (m, 6H), 1.69 (dd, $J = 15.0, 6.3$ Hz, 2H), 1.25 (t, $J = 7.1$ Hz, 3H); ESMS ($\text{M}+\text{H}^+$) = 400.17.

【0126】

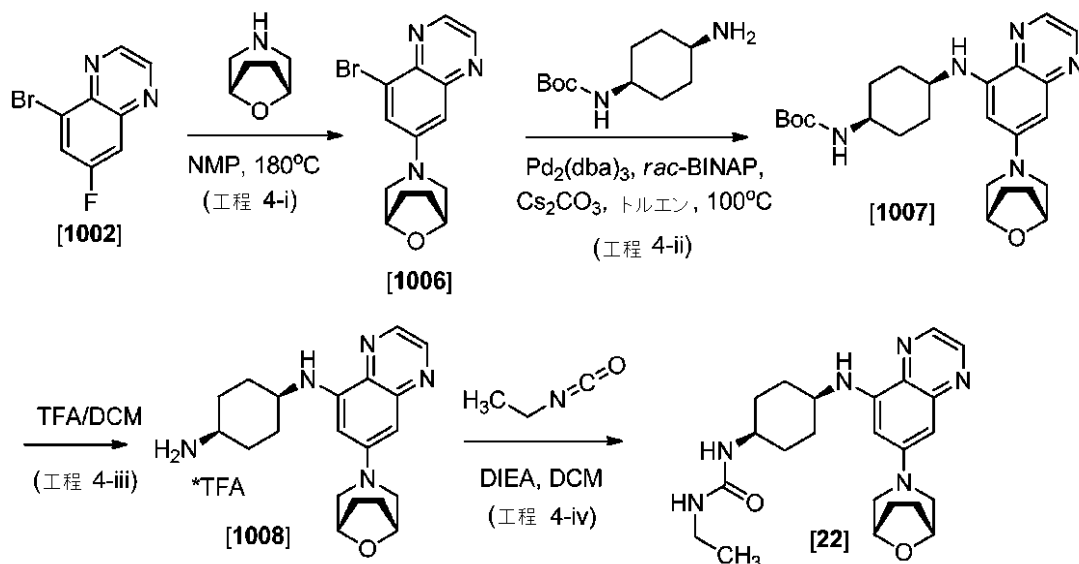
スキーム 3 の工程 3 - vi に示す通り、 N^1 - (7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) シクロヘキサン - 1, 4 - ジアミン (185 mg、0.56 mmol) と、2 - プロモピリミジン (93 mg、0.58 mmol) と、トリエチルアミン (143 mg、197 μL 、1.41 mmol) との混合物の 1 - メチルピロリジン - 2 - オン (3 mL) 溶液を、130 に加熱し、15 時間攪拌した。室温に冷却した後、この混合物を、酢酸エチル (70 mL) とメチル tert - ブチルエーテル (20 mL) で希釈し、水 (3 x 20 mL) で洗浄し、ブライン (15 mL) で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させ、減圧下で濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー (10 から 100 % の EtOAc / ヘキサン グラジエント) によって精製して、 1 - (7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) - N^4 - (ピリミジン - 2 - イル) シクロヘキサン - 1, 4 - ジアミン (化合物 18、102 mg、収率 45 %) を得た：

【数 6】

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 8.65 (d, $J = 2.0$ Hz, 1H), 8.37 (d, $J = 2.0$ Hz, 1H), 8.27 (d, $J = 4.8$ Hz, 2H), 6.60 (d, $J = 2.4$ Hz, 1H), 6.51 (t, $J = 4.8$ Hz, 1H), 6.36 (d, $J = 2.4$ Hz, 1H), 6.15 (d, $J = 7.8$ Hz, 1H), 5.20 (d, $J = 7.7$ Hz, 1H), 4.04 (d, $J = 7.9$ Hz, 1H), 3.96-3.82 (m, 4H), 3.70 (s, 1H), 3.39-3.24 (m, 4H), 1.94 (dd, $J = 13.7, 4.4$ Hz, 6H), 1.78 (dt, $J = 28.8, 16.1$ Hz, 2H); ESMS ($\text{M}+\text{H}^+$) = 328.34.

実施例 4 . 1 - (4 - ((7 - (8 - オキサ - 3 - アザビシクロ [3.2.1] オクタン - 3 - イル) キノキサリン - 5 - イル) アミノ) シクロヘキシル) - 3 - エチル尿素 (化合物 22) の調製

【化 3 4】



スキーム 4

【 0 1 2 7 】

スキーム 4 の工程 4 - i に示す通り、5 - ブロモ - 7 - フルオロキノキサリン (化合物 1002、150 mg、0.66 mmol) の NMP (2.3 mL) 溶液に、8 - オキサ - 3 - アザビシクロ [3.2.1] オクタン (178 mg、1.2 mmol) を、RT で添加した。この反応混合物を、マイクロ波バイアルに入れて密閉し、180 で 20 分間加熱した。RT に冷却して水に注いだ後、水相を、EtOAc (3 ×) で抽出した。合わせた抽出液を、 MgSO_4 で乾燥させ、濾過し、減圧下で濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー (0 から 100 % の EtOAc / ヘキサングラジエント) によって精製して、濃い橙色の油として 3 - (8 - ブロモキノキサリン - 6 - イル) - 8 - オキサ - 3 - アザビシクロ [3.2.1] オクタン (化合物 1006、87 mg、収率 41 %) を得た：ESMS ($\text{M} + \text{H}^+$) = 320.07。

【 0 1 2 8 】

スキーム 4 の工程 4 - ii に示す通り、3 - (8 - ブロモキノキサリン - 6 - イル) - 8 - オキサ - 3 - アザビシクロ [3.2.1] オクタン (261 mg、0.815 mmol) と、N - (4 - アミノシクロヘキシル) カルバミン酸 tert - ブチル (210 mg、0.98 mmol) と、*rac*-BINAP (102 mg、0.163 mmol) と、 CS_2CO_3 (797 mg、2.45 mmol) と、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (75 mg、0.0815 mmol) とのトルエン (10.5 mL) 脱気溶液を、密封したマイクロ波チューブにて 100 (油浴温) で 15 時間加熱した。冷却した後、混合物を、クロマトグラフィーカラムに直接的に適用し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー (0 から 100 % の EtOAc / ヘキサングラジエント) によって精製して、白色固体として (4 - ((7 - (8 - オキサ - 3 - アザビシクロ [3.2.1] オクタン - 3 - イル) キノキサリン - 5 - イル) アミノ) シクロヘキシル) カルバミン酸 tert - ブチル (化合物 1007、141 mg、収率 36 %) を得た：

【数 7】

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 8.49 (s, 1H), 8.23 (d, $J = 1.5$ Hz, 1H), 6.48 (s, 1H), 6.18 (d, $J = 1.9$ Hz, 1H), 6.06 (s, 1H), 4.52 (s, 1H), 4.47 (s, 2H), 3.60 (s, 2H), 3.45 (d, $J = 11.6$ Hz, 2H), 3.14-3.12 (m, 2H), 1.96-1.84 (m, 4H), 1.79 (s, 5H), 1.54 (s, 3H) and 1.38 (s, 9H) ppm; ESMS ($\text{M} + \text{H}^+$) = 453.96.

【0129】

スキーム4の工程4 - i i i に示す通り、化合物1007 (141 mg、0.295 mmol) の CH_2Cl_2 (2.5 mL) 溶液に、RTでTFA (656 mg、443 μL 、5.75 mmol) を添加した。得られた黒色の溶液を、2時間攪拌し、次いで、黒色が橙色に徐々に変化するまで飽和 NaHCO_3 を添加することによって、反応を停止させた。反応混合物を、 CH_2Cl_2 (3x) で抽出し、合わせた有機抽出物を、 Na_2SO_4 で乾燥させ、乾燥するまで蒸発させて、 N^1 - (7 - (8 - オキサ - 3 - アザビシクロ [3.2.1] オクタン - 3 - イル) キノキサリン - 5 - イル) シクロヘキサン - 1, 4 - ジアミン、トリフルオロ酢酸 (化合物1008) を得た: $\text{ESMS} (\text{M} + \text{H}^+) = 354.20$ 。この材料を、任意のさらなる精製を行わずに、その後の反応に使用した。

10

【0130】

スキーム4の工程4 - i v に示す通り、化合物1008 (45 mg、0.071 mmol) とDIEA (36.5 mg、49.0 μL 、0.28 mmol) との CH_2Cl_2 (1.4 mL) 溶液に、RTでイソシアン酸エチル (20 mg、0.28 mmol) を添加した。この溶液を、この温度で15時間攪拌し、次いで、クロマトグラフィーカラムに直接的に適用し、中圧シリカゲルクロマトグラフ (0から100%の EtOAc / ヘキサン グラジエント) によって精製して、白色固体として1 - (4 - ((7 - (8 - オキサ - 3 - アザビシクロ [3.2.1] オクタン - 3 - イル) キノキサリン - 5 - イル) アミノ) シクロヘキシル) - 3 - エチル尿素 (化合物22、8 mg、収率27%) を得た:

20

【数8】

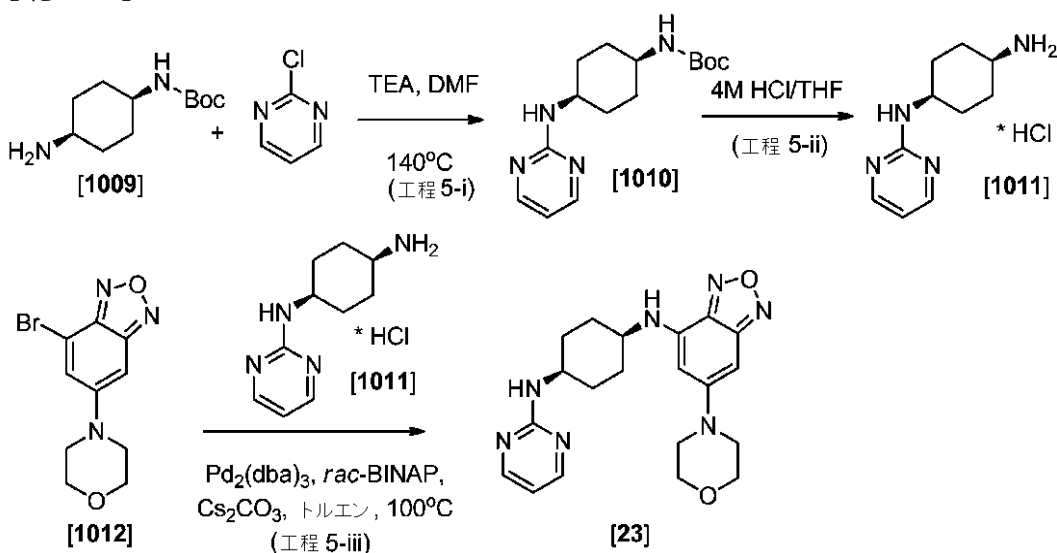
 $^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3)

δ 8.54 (s, 1H), 8.22 (s, 1H), 6.43 (s, 1H), 6.19 (s, 1H), 6.02 (s, 1H), 4.47 (s, 2H), 4.38 (d, J = 5.2 Hz, 1H), 4.28 (s, 1H), 3.74 (s, 1H), 3.60 (s, 1H), 3.42 (s, 4H), 3.14-3.09 (m, 4H), 2.05-1.87 (m, 3H), 1.79 (s, 3H), 1.55 (d, J = 7.1 Hz, 2H) and 1.21-1.05 (m, 5H) ppm;
 $\text{ESMS} (\text{M} + \text{H}^+) = 425.35$.

実施例5. N^1 - (6 - モルホリノベンゾ [c] [1.2, 5] オキサジアゾール - 4 - イル) - N^4 - (ピリジン - 2 - イル) シクロヘキサン - 1, 4 - ジアミン (化合物23) の調製

30

【化35】



40

スキーム 5

【0131】

スキーム5の工程5 - i に示す通り、((cis) - 4 - アミノシクロヘキシル)カル

50

バミン酸 *tert*-ブチル (化合物 1009、490 mg、2.3 mmol) と、2-クロロピリミジン (262 mg、2.3 mmol) と、TEA (463 mg、637 μ L、4.6 mmol) との混合物の DMF (10 mL) 溶液を、150 で 20 分間、マイクロ波照射にかけた。この反応混合物を、EtOAc で希釈し、H₂O で洗浄し、Na₂SO₄ で乾燥させ、減圧下で濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー (0 から 50 % の EtOAc / ヘキサングラジエント) によって精製して、白色固体として ((*cis*)-4-(ピリミジン-2-イルアミノ)シクロヘキシル)カルバミン酸 *tert*-ブチル (化合物 1010) を得た：

【数 9】

¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 8.28 (d, *J* = 4.8 Hz,

10

2H), 6.53 (t, *J* = 4.8 Hz, 1H), 5.12 (s, 1H), 4.56 (s, 1H), 3.99 (dq, *J* = 7.0, 3.5 Hz, 1H),

3.65 (s, 1H), 1.83 (tq, *J* = 10.2, 3.6 Hz, 5H), 1.66 (s, 8H), 8.13–7.91 (m, 3H), 1.47 (s, 9H).

【0132】

スキーム 5 の工程 5 - i i に示す通り、HCl (3 mL、4 M (THF 中)、12 mmol) を、化合物 1010 に添加した。この混合物を、30 分間攪拌し、減圧下で濃縮して、塩酸 ((*cis*)-N¹-(ピリミジン-2-イル)シクロヘキサン-1,4-ジアミン (化合物 1011) を生成した。この材料を、さらなる精製を行わずに、そのまま、その後の反応に使用した。

【0133】

20

スキーム 5 の工程 5 - i i i に示す通り、4-ブロモ-6-モルホリノベンゾ[*c*][1.2,5]オキサジアゾール (化合物 1012、147 mg、0.5 mmol) と、塩酸 ((*cis*)-N¹-(ピリミジン-2-イル)シクロヘキサン-1,4-ジアミン (120 mg、0.6 mmol) と、(rac)-BINAP (32 mg、0.05 mmol) と、Pd₂(dba)₃ (24 mg、0.026 mmol) と、炭酸セシウム (506 mg、1.55 mmol) との混合物のトルエン (5 mL) 溶液を、窒素ガスで洗い流し、窒素の雰囲気下で、90 で一晩攪拌した。この混合物を、珪藻土の層で濾過し、減圧下で濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー (0 から 80 % の EtOAc / ヘキサングラジエント) によって精製して、橙色固体として ((*cis*)-N¹-(6-モルホリノベンゾ[*c*][1.2,5]オキサジアゾール-4-イル)-N⁴-(ピリミジン-2-イル)シクロヘキサン-1,4-ジアミン (化合物 23) を得た：

30

【数 10】

¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 8.20 (d, *J* = 4.9

Hz, 2H), 6.46 (t, *J* = 4.8 Hz, 1H), 6.05 (d, *J* = 1.6 Hz, 1H), 5.82 (s, 1H), 5.24 (s, 1H), 4.82

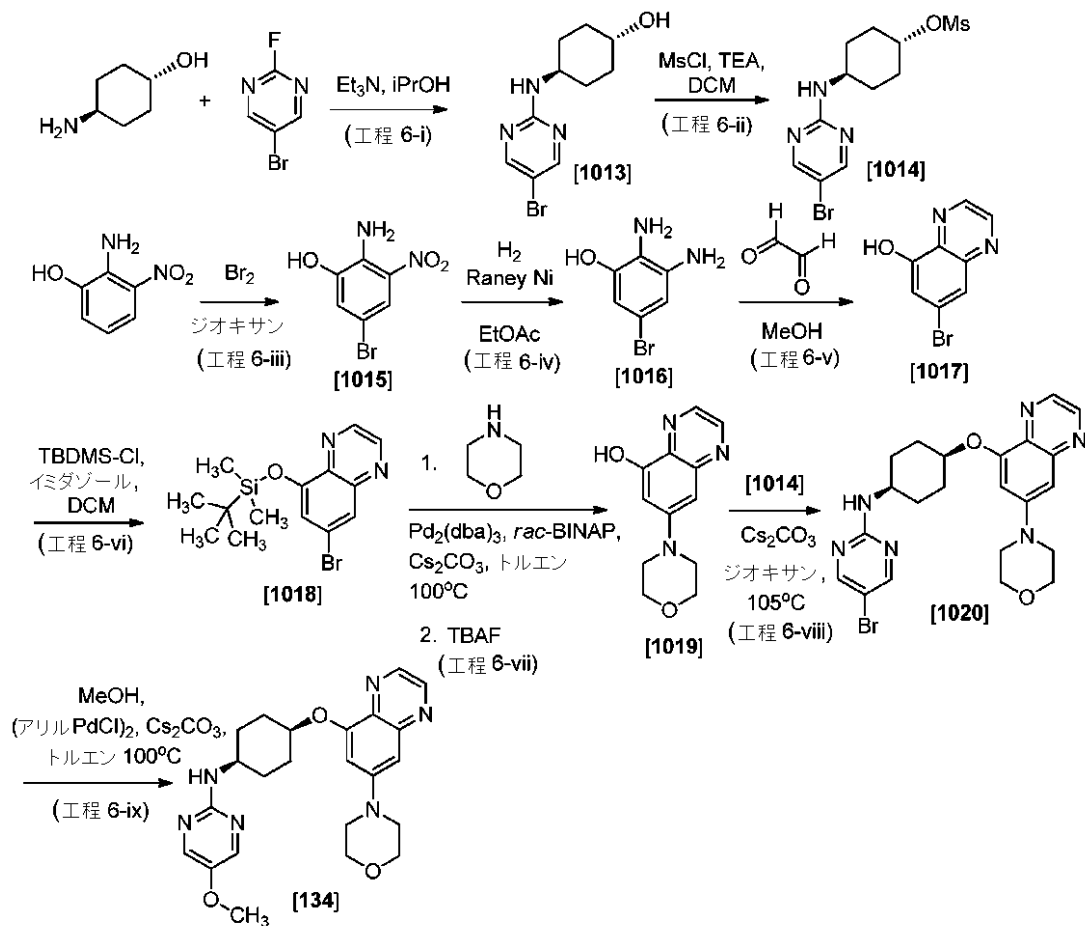
(d, *J* = 7.0 Hz, 1H), 3.98 (s, 1H), 3.85–3.72 (m, 4H), 3.60 (s, 1H), 3.23–3.06 (m, 4H), 1.95–

1.62 (m, 8H).

実施例 6 . 5 - メトキシ-N-((*cis*)-4-((7-モルホリノキノキサリン-5-イル)オキシ)シクロヘキシル)ピリミジン-2-アミン (化合物 134) の調製

40

【化 3 6】



スキーム 6

【0134】

スキーム 6 の工程 6 - i に示す通り、5 - プロモ - 2 - フルオロ - ピリミジン (1 g、5.651 mmol) 混合物の $i\text{PrOH}$ (10 mL) 溶液に、 TEA (1.143 g、1.574 mL、11.30 mmol) と $\text{trans-4-amino-1-cyclohexanol}$ (650.8 mg、5.651 mmol) を添加した。この混合物を、150 で 20 分間、マイクロ波照射し、減圧下で濃縮し、 EtOAc で希釈し、水で洗浄し、 Na_2SO_4 で乾燥させた。減圧下での揮発性物質の除去後、残渣を中圧シリカゲルクロマトグラフィー (0 ~ 80 % の EtOAc / ヘキサングラジエント) によって精製して、(trans) - 4 - ((5 - プロモピリミジン - 2 - イル) アミノ) シクロヘキサノール (化合物 1013、1.2 g) を得た：

【数 1 1】

 $^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 8.28 (s,

2H), 5.03 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H), 3.91-3.49 (m, 2H), 2.31-1.90 (m, 4H), 1.56-1.19 (m, 4H)..

【0135】

スキーム 6 の工程 6 - ii に示す通り、化合物 1013 (1.2 g、4.41 mmol) の DCM (20 mL) 溶液に、 TEA (1.134 g、1.84 mL、13.2 mmol) と MsCl (505 mg、341 μL 、4.41 mmol) を添加した。この反応混合物を、1 時間攪拌し、減圧下で濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー (0 から 80 % の EtOAc / ヘキサングラジエント) によって精製して、メタンスルホン酸 $\text{trans-4-((5-pro-moprimidin-2-yl) amino) cyclohexyl}$ (化合物 1014) を得た：

【数 1 2】

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 8.29 (s, 2H), 5.03 (d, $J = 7.8$ Hz, 1H), 4.70 (tt, $J = 10.6, 3.9$ Hz, 1H), 3.80 (dtt, $J = 11.2, 7.6, 3.7$ Hz, 1H), 3.04 (s, 3H), 2.30-2.12 (m, 4H), 1.93-1.69 (m, 2H), 1.51-1.33 (m, 2H).

【0 1 3 6】

スキーム 6 の工程 6 - i i i に示す通り、2 - アミノ - 3 - ニトロフェノール (5.00 g、32.4 mmol) のジオキサン (50 mL) 溶液に、臭素 (6.22 g、2.01 mL、38.9 mmol) を添加した。この混合物を、2 時間攪拌し、沈殿を形成させ、これを回収して、ジオキサンとエーテルで洗浄した。得られた黄色固体を、飽和 NaHCO_3 溶液で処理し、 EtOAc (3x) で抽出した。合わせた有機物を、 Na_2SO_4 で乾燥させ、濾過し、減圧下で濃縮して、褐色固体としての 2 - アミノ - 5 - ブロモ - 3 - ニトロフェノール (化合物 1015) を得た。この材料を、さらなる精製を行わずに、その後の反応に、そのまま継続使用した。

10

【0 1 3 7】

スキーム 6 の工程 6 - i v に示す通り、2 - アミノ - 5 - ブロモ - 3 - ニトロフェノール (7.5 g、31.8 mmol) の酢酸エチル (60 mL) 溶液に、Raney nickel (商標) (1.90 g、214 μL 、32.4 mmol) を添加し、反応混合物を、30 p.s.i. の H_2 の雰囲気下で 2 時間振盪させた (shaken)。濾過および Na_2SO_4 での乾燥後、混合物を減圧下で濃縮して、2, 3 - ジアミノ - 5 - ブロモフェノール (化合物 1016) を得、これを、さらなる精製を行わずに、その後の反応に、そのまま使用した。

20

【0 1 3 8】

スキーム 6 の工程 6 - v に示す通り、2, 3 - ジアミノ - 5 - ブロモフェノール (6.0 g、29.5 mmol) を、メタノールに溶解し、この溶液に、グリオキサール (3.77 g、2.98 mL、64.9 mmol) を添加して、一晩攪拌した。この反応混合物を、減圧下で最小体積まで濃縮し、得られた黄褐色固体を、濾過によって回収し、高真空中で乾燥させて、7 - ブロモキノキサリン - 5 - オール (化合物 1017) を生成し、これを、さらなる精製を行わずに、その後の反応に、そのまま使用した。

【0 1 3 9】

30

スキーム 6 の工程 6 - v i に示す通り、7 - ブロモキノキサリン - 5 - オール (2.0 g、8.89 mmol) の DCM (20 mL) 溶液に、イミダゾール (1.82 g、26.7 mmol) と塩化 *tert* - ブチルジメチルシリル (1.34 g、1.65 mL、8.89 mmol) を添加した。この反応混合物を、RTで一晩攪拌し、減圧下で濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー (0 から 20 % の EtOAc / ヘキサングラジエント) によって精製して、無色の油として 7 - ブロモ - 5 - ((*tert* - ブチルジメチルシリル) オキシ) キノキサリン (化合物 1018) を得た：

【数 1 3】

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 8.69 (q, $J = 1.8$ Hz, 2H), 7.80 (d, $J = 2.1$ Hz, 1H), 7.22 (d, $J = 2.1$ Hz, 1H), 0.96 (s, 9H), 0.81 (s, 7H).

40

【0 1 4 0】

スキーム 6 の工程 6 - v i i に示す通り、7 - ブロモ - 5 - ((*tert* - ブチルジメチルシリル) オキシ) キノキサリン (700 mg、2.06 mmol) と、モルホリン (270 mg、270 μL 、3.09 mmol) と、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (94.50 mg、0.1032 mmol) と、(*rac*) - BINAP (129 mg、0.206 mmol) と、炭酸セシウム (2.02 g、6.19 mmol) との混合物のトルエン (7 mL) 溶液を、10 分間、窒素で洗い流した。次いで、この混合物を、100 で一晩加熱した。冷却した後、反応混合物を、 EtOAc で希釈し、珪藻土の層で濾過し、減圧下で濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー (0 から 30 % の EtOAc / ヘキサングラジ

50

エント)によって精製して、7-モルホリノキノキサリン-5-オールを得た。この化合物(450mg、1.3mmol)を、THF(20mL)に溶解し、フッ化tetra-n-ブチルアンモニウム(539mg、2.06mmol)を添加した。この反応混合物を、0.5時間攪拌し、減圧下で濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー(0から100%のEtOAc/ヘキサングラジエント)によって精製して、黄色固体として7-モルホリノキノキサリン-5-オール(化合物1019)を得た：

【数14】

¹H-NMR (300 MHz,

CDCl₃) δ 8.75 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.46 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.70 (d, J = 41.8 Hz, 1H), 7.01 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.12-3.78 (m, 4H), 3.51-3.24 (m, 4H).

10

【0141】

スキーム6の工程6-viiiに示す通り、7-モルホリノキノキサリン-5-オール(100mg、0.432mmol)と、メタンスルホン酸(trans)-4-((5-プロモピリミジン-2-イル)アミノ)シクロヘキシル(化合物1014、303mg、0.865mmol)と、CsCO₃(282mg、0.865mmol)との、ジオキサン(1.0mL)溶液を、105℃で16時間攪拌した。冷却した後、この反応混合物を、EtOAcで希釈し、珪藻土で濾過し、減圧下で濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー(0から5%のMeOH/DCMグラジエント)によって精製して、黄色の泡として5-プロモ-N-((cis)-4-((7-モルホリノキノキサリン-5-イル)オキシ)シクロヘキシル)ピリミジン-2-アミン(化合物1020、110mg)を生成した：

20

【数15】

¹H-

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.70 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.29 (s, 2H), 6.98 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.29 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.04-3.84 (m, 4H), 3.42-3.31 (m, 4H), 2.22 (s, 2H), 1.92 (d, J = 4.9 Hz, 6H).

【0142】

30

スキーム6の工程6-ixに示す通り、5-プロモ-N-((cis)-4-((7-モルホリノキノキサリン-5-イル)オキシ)シクロヘキシル)ピリミジン-2-アミン(75mg、0.155mmol)と、炭酸セシウム(101mg、0.309mmol)と、塩化アリルパラジウム(II)二量体(0.28mg、0.0015mmol)と、RockPhos(2.17mg、0.0046mmol)と、MeOH(9.9mg、12.5μL、0.31mmol)との混合物のトルエン(2mL)溶液を、窒素ガスで洗い流し、100℃で18時間加熱した。この反応混合物を、EtOAcで希釈し(iluted)、珪藻土の層で濾過し、減圧下で濃縮した。中圧シリカゲルクロマトグラフィー(0~8%のMeOH/DCMグラジエント)による精製によって、5-メトキシ-N-((cis)-4-((7-モルホリノキノキサリン-5-イル)オキシ)シクロヘキシル)ピリミジン-2-アミン(化合物134、43mg)を得た：

40

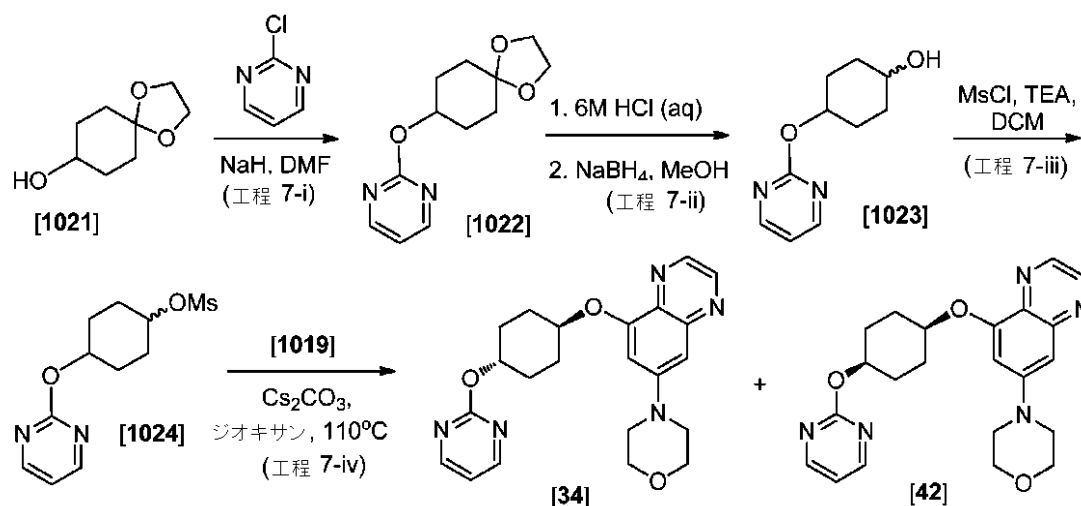
【数16】

¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.07 (s, 2H), 6.96 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.01 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.80 (q, J = 5.6, 4.2 Hz, 1H), 4.03-3.87 (m, 5H), 3.80 (s, 3H), 3.42-3.27 (m, 4H), 2.29-2.10 (m, 2H), 1.99-1.82 (m, 6H).

実施例7.4-((trans)-4-((ピリミジン-2-イルオキシ)シクロヘキシル)オキシ)キノキサリン-6-イル)モルホリン(化合物34)および4-((8

50

- (((c i s) - 4 - (ピリミジン - 2 - イルオキシ) シクロヘキシル) オキシ) - キノキサリン - 6 - イル) モルホリン (化合物 4 2) の調製
【化 3 7】



スキーム 7

【 0 1 4 3 】

スキーム 7 の工程 7 - i に示す通り、1, 4 - ジオキサスピロ [4 . 5] デカン - 8 - オール (化合物 1 0 2 1 、 1 . 0 g 、 6 . 3 2 m m o l) の DMF (1 0 m L) 溶液に、NaH (3 7 0 m g 、 9 . 2 5 m m o l) を添加した。この反応混合物を、2 0 分間攪拌し、その後、2 - クロロピリミジン (8 6 9 m g 、 7 . 5 9 m m o l) を添加した。この混合物を、RT で 3 0 分間攪拌し、次いで、1 0 0 に 9 時間加熱した。冷却した後、混合物を EtOAc で希釈し、H₂O で洗浄し、Na₂SO₄ で乾燥させ、減圧下で濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー (0 ~ 4 0 % の EtOAc / ヘキサン) によって精製して、無色の油として 2 - (1 , 4 - ジオキサスピロ [4 . 5] デカン - 8 - イルオキシ) ピリミジン (化合物 1 0 2 2) を生成した：

【 数 1 7 】

¹H NMR

(300 MHz, Chloroform-d) δ 8.52 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.92 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 5.15 (ddd, J = 10.7, 6.5, 4.2 Hz, 1H), 4.05-3.87 (m, 4H), 2.14-1.85 (m, 6H), 1.79-1.65 (m, 2H); ESMS (M + H ⁺) = 237.12.

【 0 1 4 4 】

スキーム 7 の工程 7 - i i に示す通り、2 - (1 , 4 - ジオキサスピロ [4 . 5] デカン - 8 - イルオキシ) ピリミジン (6 2 0 m g 、 2 . 6 2 4 m m o l) に、HCl (6 M のものを 4 . 0 m L 、 8 . 8 6 m m o l) を添加し、この反応混合物を、2 時間攪拌した。この混合物の pH を、飽和 NaHCO₃ (水溶液) で中和し (with with)、混合物を、メタノール共沸混合物として、減圧下で濃縮した。残渣に DCM (3 0 m L) を添加して沈殿を生成し、それに続いて、さらに 2 0 分間攪拌した。固体を濾過して取り除き、母液を減圧下で濃縮した。得られた残渣を、メタノールに溶解し、水素化ホウ素ナトリウム (1 5 1 m g 、 3 . 9 9 m m o l) を固体として添加した。混合物を 1 時間攪拌し、反応を、HCl (6 M 、 0 . 7 0 m L) で停止させた。ガス発生が終わるまで、攪拌を継続した。混合物の pH を、1 N 水酸化ナトリウムで約 8 に調整し、EtOAc (2 0 m L) で抽出した。有機物を硫酸ナトリウムで乾燥させ、減圧下で濃縮して、(cis) - 異性体と (trans) - 異性体の混合物として、4 - (ピリミジン - 2 - イルオキシ) シクロヘキサノール (化合物 1 0 2 3 、 2 4 8 m g 、 収率 6 4 %) を生成した。試料の 1 2 m g 分量を、HPLC 分取逆相クロマトグラフィー (1 0 ~ 9 0 % の CH₃CN / 水

グラジエント、0.1% TFAを含有)によって精製して、異性体を分離した:

(trans)-4-ピリミジン-2-イルオキシシクロヘキサノール

【数18】

¹H NMR

(300 MHz, Chloroform-d) δ 8.54 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.95 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 5.05 (tt, J = 9.4, 4.0 Hz, 1H), 3.91-3.75 (m, 1H), 2.26-1.99 (m, 4H), 1.76-1.41 (m, 4H); ESMS (M+H⁺) = 195.07,

(cis)-4-ピリミジン-2-イルオキシシクロヘキサノール

10

【数19】

¹H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ

8.62 (d, J = 4.9 Hz, 2H), 7.04 (t, J = 4.9 Hz, 1H), 5.21 (tt, J = 5.3, 2.6 Hz, 1H), 4.56 (s, 1H), 3.85 (p, J = 5.9 Hz, 1H), 2.17-2.02 (m, 2H), 1.88-1.67 (m, 6H); ESMS (M+H⁺) = 195.07.

残った材料を、cis/trans混合物として、その後の反応に使用した。

【0145】

スキーム7の工程7-iiiに示す通り、4-ピリミジン-2-イルオキシシクロヘキサノール(244 mg、1.256 mmol)のcis/trans混合物とトリエチルアミン(350 μL、2.51 mmol)のジクロロメタン(5 mL)溶液に、塩化メタンスルホニル(145 μL、1.87 mmol)を添加した。この反応混合物を、2時間攪拌し、減圧下で濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー(0~20%のEtOAc/ジクロロメタングラジエント)によって精製して、cis/trans異性体の混合物として、メタンスルホン酸(4-ピリミジン-2-イルオキシシクロヘキシル)(化合物1024、239 mg、収率70%)を得た:

20

【数20】

¹H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.51 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.93 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 5.13 (dq, J = 9.9, 3.0 Hz, 1H), 4.87 (p, J = 3.8 Hz, 1H), 3.04 (d, J = 2.4 Hz, 3H), 2.28-1.99 (m, 4H), 1.99-1.74 (m, 4H); ESMS (M+H⁺) = 273.52.

30

【0146】

スキーム7の工程7-ivに示す通り、メタンスルホン酸(4-ピリミジン-2-イルオキシシクロヘキシル)(105 mg、0.386 mmol)と、7-モルホリノキノキサリン-5-オール(178.3 mg、0.7712 mmol)と、CS₂CO₃(125.6 mg、0.3856 mmol)との混合物のジオキサン(1.5 mL)溶液を、5 mLマイクロ波チューブに入れて密閉し、油浴を使用して、110℃で14時間加熱した。この反応混合物を、室温に冷却し、EtOAcで希釈し、珪藻土で濾過し、続いてこれを、酢酸エチルで洗浄した。濾液を減圧下で濃縮し、残渣を分取逆相HPLC(10~90%のCH₃CN/水グラジエント、0.1% TFAを含有)によって精製した。cisおよびtrans異性体の混合物を含有する分画を、キラルOJカラムを使用するSFCによってさらに精製し、40% MeOH(CO₂中)で溶出して、21 mgの4-(8-((trans)-4-(ピリミジン-2-イルオキシ)シクロヘキシル)オキシ)キノキサリン-6-イル)モルホリン(化合物34):

40

【数 2 1】

¹H NMR

(300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (dd, J = 3.4, 1.9 Hz, 1H), 8.62 (dd, J = 3.6, 1.9 Hz, 1H), 8.51 (dd, J = 4.8, 2.2 Hz, 2H), 7.01-6.83 (m, 3H), 5.18 (tt, J = 7.0, 3.4 Hz, 1H), 4.79 (tt, J = 6.9, 3.1 Hz, 1H), 4.00-3.85 (m, 4H), 3.34 (dq, J = 4.8, 2.6 Hz, 4H), 2.44-2.16 (m, 4H), 1.92 (tdd, J = 16.4, 7.7, 2.8 Hz, 4H); ESMS (M+H⁺) = 408.56,

および 22 mg の 4 - (8 - ((c i s) - 4 - (ピリミジン - 2 - イルオキシ) シクロヘキシル) オキシ) - キノキサリン - 6 - イル) モルホリン (化合物 42) :

10

【数 2 2】

¹H

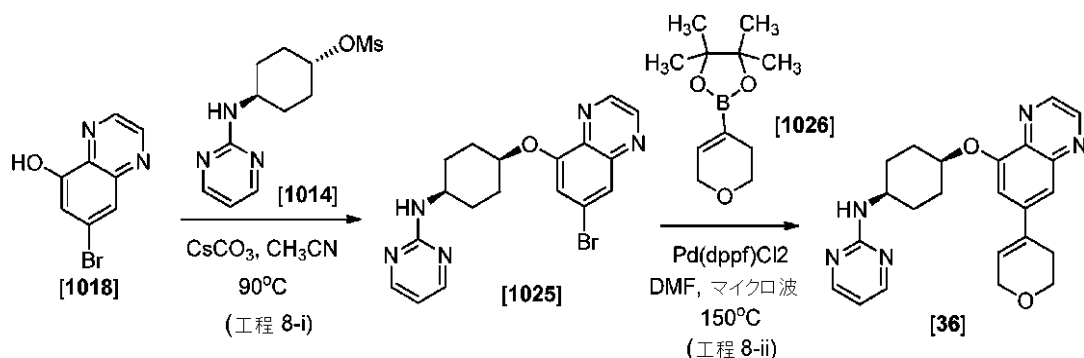
NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.52 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 7.01-6.87 (m, 3H), 5.17 (ddt, J = 8.7, 6.7, 3.4 Hz, 1H), 4.76-4.58 (m, 1H), 4.00-3.87 (m, 4H), 3.40-3.27 (m, 4H), 2.43-2.22 (m, 4H), 2.05-1.87 (m, 2H), 1.86-1.71 (m, 2H); ESMS (M+H⁺) = 408.56.

を得た。

実施例 8. N - [(c i s) - 4 - [7 - (3 , 6 - ジヒドロ - 2 H - ピラン - 4 - イル) キノキサリン - 5 - イル] オキシシクロヘキシル] ピリミジン - 2 - アミン (化合物 36)

20

【化 3 8】



30

スキーム 8

【 0 1 4 7 】

スキーム 8 の工程 8 - i に示す通り、7 - ブロモキノキサリン - 5 - オール (化合物 1018、200 mg、0.89 mmol) と、炭酸セシウム (579 mg、1.78 mmol) との混合物の NMP (4.0 mL) 溶液に、メタンスルホン酸 (trans) - 4 - (ピリミジン - 2 - イルアミノ) シクロヘキシル (化合物 1014、241.1 mg、0.8887 mmol) を添加した。この混合物を、90 で 18 時間攪拌し、その時点で、追加の 0.5 当量の化合物 1014 (241 mg、0.89 mmol) を添加した。90 でさらに 6 時間攪拌した後、この反応混合物を EtOAc で希釈し、H₂O で洗浄し、Na₂SO₄ で乾燥させ、濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー (0 ~ 5 % の MeOH / DCM) によって精製して、N - ((c i s) - 4 - ((7 - ブロモキノキサリン - 5 - イル) オキシ) シクロヘキシル) ピリミジン - 2 - アミン (化合物 1025) を得た :

40

【数 2 3】

¹H-NMR

(300 MHz, CDCl₃) δ 9.01-8.77 (m, 2H), 8.29 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 7.89 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.25 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.53 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 5.43-5.22 (m, 1H), 4.79 (td, J = 5.2, 2.5 Hz, 1H), 4.18-3.95 (m, 1H), 3.51 (s, 1H), 2.22 (td, J = 10.2, 9.6, 5.4 Hz, 2H), 2.09-1.86 (m, 6H).

【0 1 4 8】

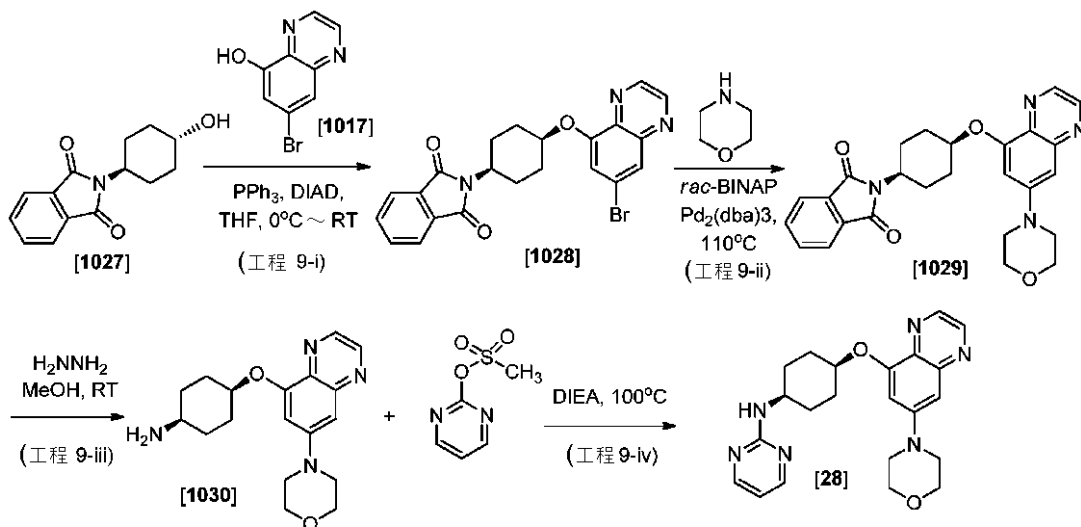
スキーム 8 の工程 8 - i i に示す通り、N - ((c i s) - 4 - ((7 - ブロモキノキサリン - 5 - イル) オキシ) シクロヘキシル) ピリミジン - 2 - アミン (化合物 1 0 2 5 、 5 2 m g 、 0 . 1 2 9 9 m m o l) と、Pd (d p p f) C l ₂ (1 0 . 6 1 m g 、 0 . 0 1 2 9 9 m m o l) と、2 - (3 , 6 - ジヒドロ - 2 H - ピラン - 4 - イル) - 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン (化合物 1 0 2 6 、 2 7 . 3 m g 、 0 . 1 3 m m o l) と、Na₂CO₃ (2 M (a q) 溶液のものを 1 9 5 μ L 、 0 . 3 9 m m o l) との混合物の DMF (1 m L) 溶液を、窒素ガスで 1 0 分間洗い流した。この混合物を、1 5 0 °C で 2 0 分間、マイクロ波照射に供した。冷却後、この混合物を EtOAc で希釈し、H₂O で洗浄し、Na₂SO₄ で乾燥させ、減圧下で濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー (0 ~ 5 % の MeOH / DCM) によって精製して、オフホワイトの固体として、N - [(c i s) - 4 - [7 - (3 , 6 - ジヒドロ - 2 H - ピラン - 4 - イル) キノキサリン - 5 - イル] オキシシクロヘキシル] ピリミジン - 2 - アミン (化合物 3 6) を得た：

【数 2 4】

¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 8.94-8.76 (m, 2H), 8.29 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 7.67 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 6.53 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 6.37 (tt, J = 3.1, 1.5 Hz, 1H), 5.30 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.87 (dt, J = 7.5, 3.6 Hz, 1H), 4.43 (q, J = 2.8 Hz, 2H), 4.02 (t, J = 5.5 Hz, 3H), 2.68 (dq, J = 6.0, 3.4, 3.0, 1.8 Hz, 2H), 2.35-2.11 (m, 2H), 2.07-1.84 (m, 6H); ESMS (M+H)⁺ = 404.2.

実施例 9 . N - ((c i s) - 4 - ((7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) オキシ) シクロヘキシル) ピリミジン - 2 - アミン (化合物 2 8)

【化 3 9】



スキーム 9

10

20

30

40

50

【 0 1 4 9 】

スキーム 9 の工程 9 - i に示す通り、7 - プロモキノキサリン - 5 - オール (化合物 1017、5.4 g、24.0 mmol) と、2 - ((trans) - 4 - ヒドロキシシクロヘキシル) イソインドリン - 1, 3 - ジオン (5.607 g、22.86 mmol) と、トリフェニルホスフィン (8.994 g、7.945 mL、34.29 mmol) とを、無水 THF に溶解し、フラスコを氷浴中で冷却した。DIAD (6.93 g、6.64 mL、34.3 mmol) を滴下し、この反応物を 0 で 5 分間攪拌し、次いで、室温まで温め、18 時間攪拌した。反応混合物を、減圧下で濃縮し、残渣を Et₂O で処理し、RT で 0.5 時間攪拌し、沈殿を濾過して取り除き、濾液を減圧下で濃縮し、残渣を中圧シリカゲルクロマトグラフィー (0 ~ 50 % の EtOAc / ヘキサングラジエント) によって精製して、2 - [(cis) - 4 - (7 - プロモキノキサリン - 5 - イル) オキシシクロヘキシル] イソインドリン - 1, 3 - ジオン (化合物 1028、6.2 g、収率 60 %) を生成した：

【 数 2 5 】

¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 8.95 (d, J = 1.8

Hz, 1H), 8.86 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 7.91 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.88-7.80 (m, 2H), 7.77-7.68 (m, 2H), 7.31 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 4.96 (t, J = 2.9 Hz, 1H), 4.29 (tt, J = 12.5, 3.8 Hz, 1H), 2.88 (qd, J = 12.9, 3.6 Hz, 2H), 2.54-2.32 (m, 2H), 1.94-1.61 (m, 4H).

【 0 1 5 0 】

スキーム 9 の工程 9 - i i に示す通り、冷却装置を取り付けた丸底フラスコ中で、2 - [4 - (7 - プロモキノキサリン - 5 - イル) オキシシクロヘキシル] イソインドリン - 1, 3 - ジオン (6.2 g、12.34 mmol) と、モルホリン (1.61 g、1.62 mL、18.5 mmol) と、CS₂CO₃ (12.06 g、37.0 mmol) との混合物の無水トルエン (73 mL) 溶液を、rac - BINAP (768.4 mg、1.234 mmol) および Pd₂(dba)₃ (565 mg、0.617 mmol) で処理した。この反応混合物を、110 で 18 時間加熱した。室温に冷却した後、この混合物を、珪藻土で濾過し、減圧下で濃縮した。残渣を Et₂O で粉碎し、濾過によって固体を回収し、Et₂O で洗浄して、黄色固体として、2 - ((cis) - 4 - ((7 - モルホリノキサリン - 5 - イル) オキシシクロヘキシル) イソインドリン - 1, 3 - ジオン (化合物 1029、4.2 g) を生成した。濾液を、減圧下で濃縮し、中圧シリカゲルクロマトグラフィー (0 ~ 100 % の EtOAc / ヘキサングラジエント) によって精製し、さらなる 300 mg の化合物 1029 を生成した：

【 数 2 6 】

¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 8.76-

8.63 (m, 2H), 7.85 (dd, J = 5.4, 3.1 Hz, 2H), 7.79-7.60 (m, 2H), 7.09 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 6.99 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.06 (t, J = 2.8 Hz, 1H), 4.27 (tt, J = 12.3, 3.8 Hz, 1H), 4.02-3.85 (m, 4H), 3.49-3.27 (m, 4H), 3.03-2.75 (m, 2H), 2.37 (d, J = 14.0 Hz, 2H), 1.83-1.56 (m, 4H).

【 0 1 5 1 】

スキーム 9 の工程 9 - i i i に示す通り、2 - [(cis) - 4 - (7 - モルホリノキサリン - 5 - イル) オキシシクロヘキシル] イソインドリン - 1, 3 - ジオン (2.3 g、5.02 mmol) の MeOH (25 mL) 懸濁液に、ヒドラジン (321 mg、315 μL、10.0 mmol) を添加し、反応混合物を、RT で 18 時間攪拌し、この時間をかけて、最初の懸濁液は均一 (homogeneous) になり、それに続いて沈殿が発生した。Et₂O (30 mL) を添加し、反応混合物をさらに 30 分攪拌した。沈殿を濾過して取り除き、濾液を減圧下で濃縮し、残渣を DCM (30 mL) で処理し、

いずれの残留固体も濾過によって除去した。濾液を減圧下で濃縮して、(cis)-4-(7-モルホリノキノキサリン-5-イル)オキシシクロヘキサンアミン(化合物1030)を得、これを、その後の反応に、そのまま使用した：

【数27】

¹H-NMR (300 MHz,

CDCl₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.90

(d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.00-4.67 (m, 3H), 4.03-3.81 (m, 4H), 3.49 (s, 1H), 3.43-3.25 (m, 4H),

2.88 (q, J = 6.2 Hz, 2H), 2.36-1.96 (m, 6H).

10

【0152】

スキーム9の工程9-ivに示す通り、(cis)-4-(7-モルホリノキノキサリン-5-イル)オキシシクロヘキサンアミン(415mg、1.264mmol)と2-メチルスルホニルピリミジン(400mg、2.53mmol)の溶液(solution so)に、DIEA(490mg、661μL、3.79mmol)を添加し、反応混合物を、容器に入れて密閉し、100℃に16時間加熱した。この時間の後、揮発性物質を窒素ガス流下で除去し、粗製の残渣を最小量のDCMに溶解した。中圧シリカゲルクロマトグラフィー(0~10%のMeOH/DCM、1% Et₃N]による精製によって、不純物として塩酸トリエチルアミンを含有するN-((cis)-4-(7-モルホリノキノキサリン-5-イル)オキシ)シクロヘキシル)ピリミジン-2-アミンを生成した。生成物をDCMに溶解し、シリカ-担持アミン(Silabond amine(登録商標)40~63μm)で攪拌した。捕集混合物を濾過し、減圧下で濃縮し、高真空中で乾燥させて、N-((cis)-4-(7-モルホリノキノキサリン-5-イル)オキシ)シクロヘキシル)ピリミジン-2-アミン(化合物28、435mg)を得た：

20

【数28】

¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H),

8.27 (s, 1H), 8.26 (s, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.50 (t, J = 4.8

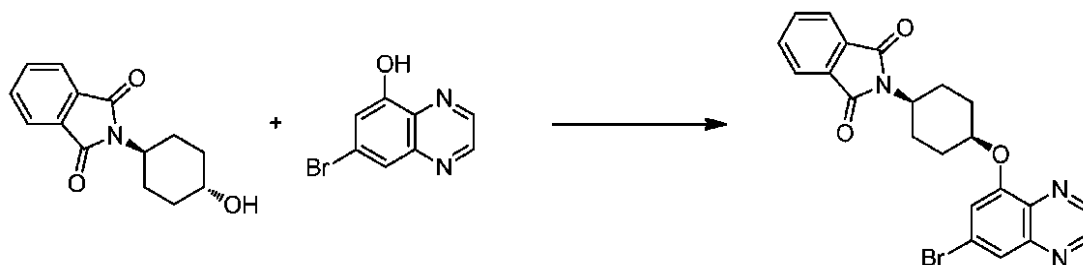
Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.08 - 3.97 (m, 1H), 3.94 - 3.86 (m, 4H), 3.37 - 3.28 (m, 4H), 2.20

(d, J = 9.1 Hz, 2H), 1.95 - 1.85 (m, 6H).

30

実施例10．N-[4-[7-(6-オキサ-3-アザビシクロ[3.1.1]ヘプタン-3-イル)キノキサリン-5-イル]オキシシクロヘキシル)ピリミジン-2-アミン(化合物291)の調製

【化40】



40

スキーム10a

【0153】

7-プロモキノキサリン-5-オール(47.53g、211.2mmol)と、2-(4-ヒドロキシシクロヘキシル)イソインドリン-1,3-ジオン(52.41g、213.7mmol)と、PPh₃(87.31g、332.9mmol)との混合物の21のTHF(740mL)溶液に、(NZ)-N-tert-ブトキシカルボニルイミ

50

ノカルバミン酸 *tert*-ブチル (DTBAD) (79.51 g、328.0 mmol) を、30 未満の温度が維持されるように、40 分かけて何度かに分けて添加し、生じた反応混合物を、室温でさらに20時間撹拌した。

【0154】

この反応物を、真空中で蒸発させた。残留した赤褐色の粘性の油を、CH₂Cl₂に溶解し、適用される空気圧を使用して、ガラスカラム内のシリカのプラグで濾過した(プラグは、CH₂Cl₂に懸濁させた乾燥(dry)シリカ(1 L)で作られた)。プラグをCH₂Cl₂で溶出し、分画を合わせ、真空中で蒸発させて、赤褐色の粘性の油/泡を得、次いで、これを、700 mLのMeOHに溶解し、その後沈殿させた。この混合物を、室温で1時間撹拌し、濾過し、冷MeOH(500 mL)およびEt₂O(100 mL)で洗浄し、次いで、真空中で乾燥させて、黄褐色固体を得、これを、300 mL MeOHに懸濁させて、10分間還流させた。この懸濁液を、室温に冷却し、濾過し、さらなるMeOHおよびEt₂O(4:1)で洗浄し、真空中で乾燥させて、2-[4-(7-ブ

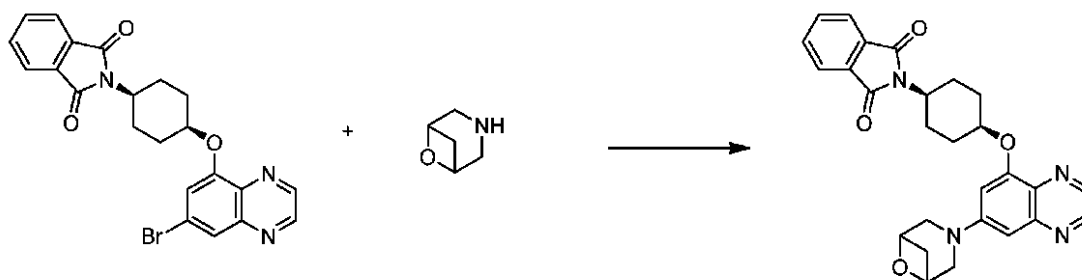
10

【数29】

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.96 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.86 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 7.91 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.89 - 7.82 (m, 2H), 7.78 - 7.67 (m, 2H), 7.30 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 4.95 (s, 1H), 4.29 (tt, J = 12.5, 3.7 Hz, 1H), 2.87 (qd, J = 13.1, 3.5 Hz, 2H), 2.44 (d, J = 15.2 Hz, 2H), 1.80 (t, J = 14.1 Hz, 2H), 1.67 (d, 2H). ESI-MS m/z calc. 451.05316, found 452.19 (M+1)⁺; Retention time: 0.92 minutes.

20

【化41】



30

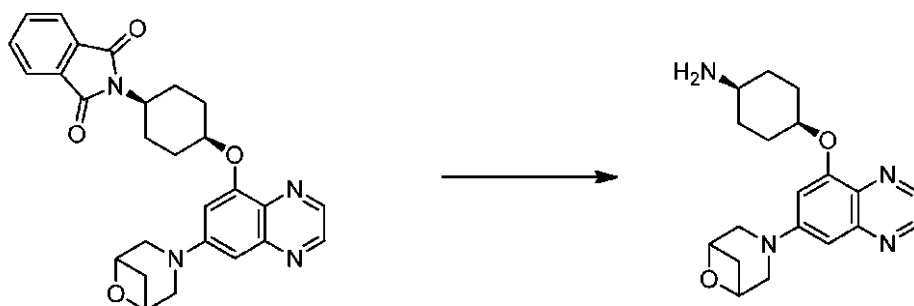
スキーム 10b

【0155】

2-[4-(7-ブromoキノキサリン-5-イル)オキシシクロヘキシル]イソインドリン-1,3-ジオン(1 g、2.211 mmol)と、6-オキサ-3-アザビシクロ[3.1.1]ヘプタンHCl(180 mg、1.328 mmol)と、炭酸セシウム(2.161 g、6.633 mmol)と、Pd₂(dba)₃(202.5 mg、0.2211 mmol)と、rac-BINAP(275.3 mg、0.4422 mmol)との混合物のジオキサン(5 mL)溶液を、70 で一晩撹拌し、次いで、マイクロ波反応器内で150 で15分間加熱した。次いで、この反応物を、塩化メチレンで希釈し、Celiteで濾過し、濃縮した。シリカゲルフラッシュカラムクロマトグラフィー(0~5%のMeOH/DCM)によって、黄色固体として、2-[4-[7-(6-オキサ-3-アザビシクロ[3.1.1]ヘプタン-3-イル)キノキサリン-5-イル]オキシシクロヘキシル]イソインドリン-1,3-ジオン(750 mg、72.1%)を得、これを、次の反応に継続使用した。

40

【化 4 2】



スキーム 10c

10

【 0 1 5 6 】

2 - [4 - [7 - (6 - オキサ - 3 - アザビシクロ [3 . 1 . 1] ヘプタン - 3 - イル) キノキサリン - 5 - イル] オキシシクロヘキシル] イソインドリン - 1 , 3 - ジオン (8 0 0 m g 、 1 . 7 0 0 m m o l) の E t O H (1 0 m L) 溶液に、ヒドラジン - 水和物 (8 5 . 1 0 m g 、 8 3 . 3 5 μ L 、 1 . 7 0 0 m m o l) を添加し、この反応物を一晩、還流撹拌し、次いで、濃縮し、DCMで希釈し、濾過した。濾液を濃縮し、0 ~ 5 0 % (2 0 % N H ₃ / M e O H) を含む 4 0 g シリカゲルカートリッジで精製して、黄色固体として、4 - [7 - (6 - オキサ - 3 - アザビシクロ [3 . 1 . 1] ヘプタン - 3 - イル) キノキサリン - 5 - イル] オキシシクロヘキサンアミン (4 5 0 m g 、 7 7 . 8 %) をもたらした。

20

【数 3 0】

¹H NMR (300 MHz,Chloroform-d) δ 8.65 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.83 (q, J = 2.6 Hz,

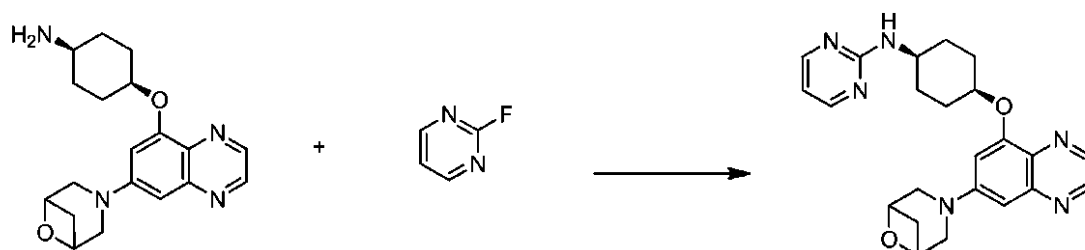
2H), 4.83 (t, J = 6.0 Hz, 4H), 3.87 - 3.60 (m, 5H), 3.34 (dt, J = 8.7, 6.6 Hz, 1H), 3.01 -

2.83 (m, 1H), 2.23 (dq, J = 11.3, 5.8, 4.8 Hz, 2H), 2.07 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 1.92 - 1.62 (m,

6H).

30

【化 4 3】



スキーム 10d

40

【 0 1 5 7 】

4 - [7 - (6 - オキサ - 3 - アザビシクロ [3 . 1 . 1] ヘプタン - 3 - イル) キノキサリン - 5 - イル] オキシシクロヘキサンアミン (1 9 0 m g 、 0 . 5 5 8 1 m m o l) と、2 - フルオロピリミジン (6 0 m g 、 0 . 6 1 1 8 m m o l) と、D I E A (2 0 0 μ L 、 1 . 1 4 8 m m o l) との混合物の 2 - プロパノール (2 m L) 溶液を、マイクロ波反応器内で 1 5 0 で 2 0 分間加熱した。この反応混合物を、濃縮し、次いで、0 ~ 6 % の M e O H / D C M を含む 1 2 g シリカゲルカートリッジから精製して、黄色固体として、N - [4 - [7 - (6 - オキサ - 3 - アザビシクロ [3 . 1 . 1] ヘプタン - 3 -

50

イル)キノキサリン-5-イル]オキシシクロヘキシル]ピリミジン-2-アミン(120.2mg、48.9%)を得た。Mass + 1: 419.23; 保持時間: 0.72; NMR 注釈

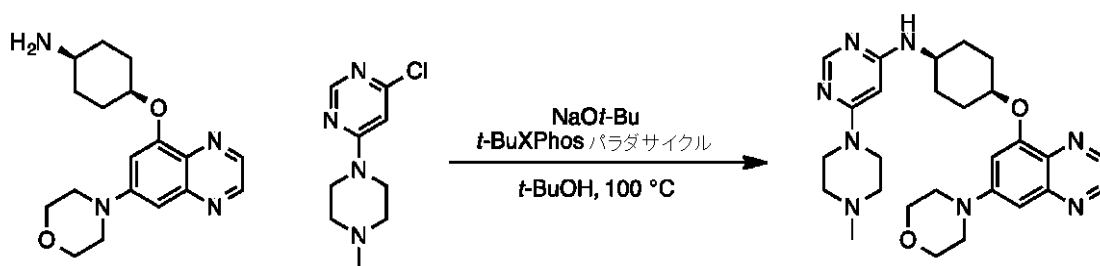
【数31】

¹H NMR (400 MHz, Chloroform-d) δ 8.42 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.30 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.04 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.65 - 6.56 (m, 2H), 6.28 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 4.99 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.60 (d, J = 6.5 Hz, 3H), 3.79 (dd, J = 8.2, 4.0 Hz, 0H), 3.62 - 3.38 (m, 4H), 3.17 - 3.03 (m, 1H), 2.07 - 1.90 (m, 2H), 1.89 - 1.59 (m, 7H).

10

実施例 11. 6 - (4 - メチルピペラジン - 1 - イル) - N - ((1s, 4s) - 4 - ((7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) オキシ) シクロヘキシル) ピリミジン - 4 - アミン (化合物 537) の調製

【化44】



20

スキーム 11

【0158】

4 - (7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) オキシシクロヘキサンアミン (500 mg、1.52 mmol) と、4 - クロロ - 6 - (4 - メチルピペラジン - 1 - イル) ピリミジン (324 mg、1.52 mmol) と、NaOt - Bu (440 mg、4.58 mmol) との t - BuOH (10.1 mL) 懸濁液を、10 分間、この混合物を通して N₂ をバブリングすることによって、脱気した。t - BuXPhos パラダサイクル (53 mg、0.077 mmol) を添加し、この反応混合物を密閉し、油浴内で 100 で 2 時間加熱した。溶媒を真空中で除去し、粗製の残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (40 g Isco gold カラム、リニアグラジエント 0% 10% の MeOH / CH₂Cl₂ [+ 0.1% Et₃N]) によって精製して、黄色固体として、6 - (4 - メチルピペラジン - 1 - イル) - N - ((1s, 4s) - 4 - ((7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) オキシ) シクロヘキシル) ピリミジン - 4 - アミンを得た (654.7 mg、収率 83.5%)。

30

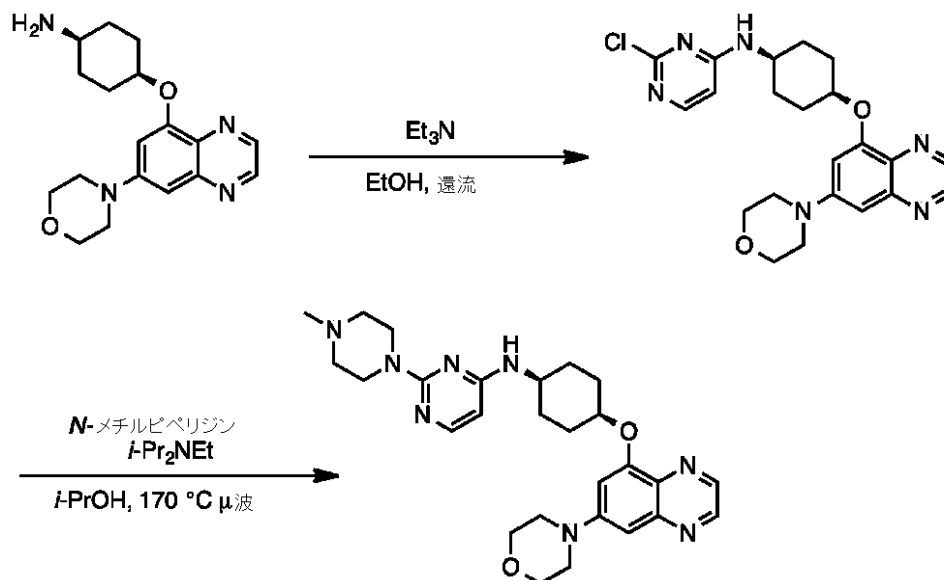
【数32】

¹H NMR (400 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.19 (s, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 5.42 (s, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.70 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.83 (s, 1H), 3.64 - 3.50 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.53 - 2.42 (m, 4H), 2.34 (s, 3H), 2.19 (d, J = 9.2 Hz, 2H), 1.97 - 1.77 (m, 6H). ESI-MS m/z calc. 504.2961, found 505.44 (M+1)⁺; Retention time: 0.5 minutes.

40

実施例 12. 2 - (4 - メチルピペラジン - 1 - イル) - N - ((1s, 4s) - 4 - ((7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) オキシ) シクロヘキシル) ピリミジン - 4 - アミン (化合物 535) の調製

【化 4 5】



スキーム 12

【 0 1 5 9】

4 - (7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) オキシシクロヘキサンアミン (5 0 0 mg、1 . 5 2 2 mmol) と Et_3N (2 1 2 μL 、1 . 5 2 2 mmol) との EtOH (7 . 2 5 mL) 溶液に、2 , 4 - ジクロロピリミジン (2 1 6 . 0 mg、1 . 4 5 0 mmol) を添加した。生じた反応溶液を、5 時間加熱還流し、次いで、室温に冷却した。溶媒を真空中で除去し、粗製の残渣を、シリカゲルクロマトグラフィー (4 0 g $\text{Isco} \text{ } \text{gold}$ カラム、リニアグラジエント 0 % - 1 0 % の $\text{MeOH} / \text{CH}_2\text{Cl}_2$ [+ 0 . 1 % Et_3N]) によって精製して、黄色固体として、2 - クロロ - *N* - [4 - (7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) オキシシクロヘキシル] ピリミジン - 4 - アミンを得た (4 8 5 mg、収率 7 5 %) :

【数 3 3】

$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, $J = 2.0$ Hz, 1H), 8.60 (d, $J = 2.0$ Hz, 1H), 8.00 (d, $J = 4.8$ Hz, 1H), 6.96 (d, $J = 2.5$ Hz, 1H), 6.89 (d, $J = 2.5$ Hz, 1H), 6.23 (d, $J = 5.9$ Hz, 1H), 5.18 (d, $J = 5.7$ Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 3.99 - 3.84 (m, 4H), 3.42 - 3.21 (m, 4H), 2.32 - 2.08 (m, 2H), 2.05 - 1.73 (m, 6H). ESI-MS m/z calc. 440.17276, found 441.25 ($\text{M}+1$)⁺; Retention time: 0.69 minutes.

【 0 1 6 0】

2 - クロロ - *N* - [4 - (7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) オキシシクロヘキシル] ピリミジン - 4 - アミン (2 3 6 mg、0 . 5 3 5 2 mmol) と、1 - メチルピペラジン (1 9 0 μL 、1 . 7 1 1 mmol) と、*Hunig* 塩基 (3 1 5 μL 、1 . 8 0 8 mmol) との $i\text{-PrOH}$ (3 . 6 mL) 溶液を、マイクロ波で 1 7 0 で 1 時間加熱した。溶媒を真空中で除去した。粗製の残渣を、シリカゲルクロマトグラフィー (4 0 g $\text{Isco} \text{ } \text{gold}$ カラム、リニアグラジエント 0 % - 1 0 % の $\text{MeOH} / \text{CH}_2\text{Cl}_2$ [+ 0 . 1 % Et_3N]) によって精製して、黄色固体として、2 - (4 - メチルピペラジン - 1 - イル) - *N* - ((1 s , 4 s) - 4 - ((7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) オキシ) シクロヘキシル) ピリミジン - 4 - アミンを得た (2 1 9 mg、収率 7 9 %) 。

【数 3 4】

¹H NMR (400 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, $J = 1.9$ Hz, 1H), 8.61 (d, $J = 1.9$ Hz, 1H), 7.88 (d, $J = 5.7$ Hz, 1H), 6.95 (d, $J = 2.4$ Hz, 1H), 6.89 (d, $J = 2.4$ Hz, 1H), 5.67 (d, $J = 5.8$ Hz, 1H), 4.84 - 4.63 (m, 2H), 3.99 - 3.83 (m, 5H), 3.82 - 3.73 (m, 4H), 3.37 - 3.27 (m, 4H), 2.49 - 2.40 (m, 4H), 2.33 (s, 3H), 2.23 - 2.11 (m, 2H), 1.96 - 1.82 (m, 6H). ESI-MS m/z calc. 504.2961, found 505.35 ($M+1$)⁺; Retention time: 0.51 minutes.

実施例 13 . N - メチル - 6 - (((1 s , 4 s) - 4 - ((7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) オキシ) シクロヘキシル) アミノ) ピリミジン - 4 - カルボキサミド (化

10

【化 4 6】



スキーム 13a

20

【0161】

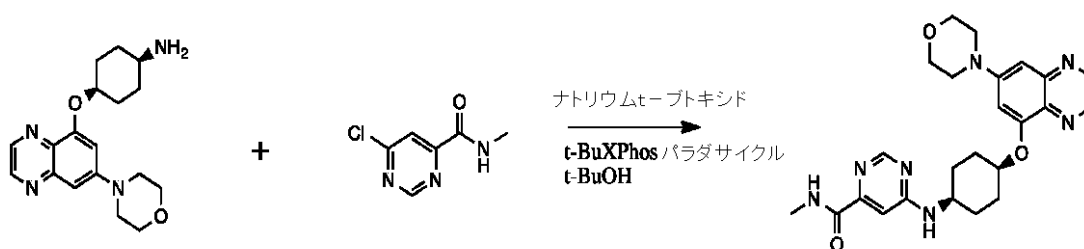
塩化オキサリル (186 . 2 g、256 . 0 mmol) と DMF (1 . 7 mL、21 . 96 mmol) との溶液に、6 - クロロピリミジン - 4 - カルボン酸 (9 . 1 g、57 . 40 mmol) のジクロロメタン (300 mL) 懸濁液を、滴下漏斗を介して 20 分かけて滴下した。2 時間攪拌し、この酸塩化物を減圧下で濃縮した。酸塩化物をジクロロメタン (250 mL) に溶解し、これに、メチルアミン (40 % w / v のものを 30 . 71 mL、395 . 5 mmol) を水および NaHCO₃ (1 . 2 M のものを 188 . 3 mL、226 . 0 mmol) に入れた溶液を滴下した。反応混合物を、一晚攪拌した。層を分離し、ジクロロメタン (200 mL) で水性層を抽出した。合わせた有機物をブラインで洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させ、減圧下で濃縮した。溶離液として 0 ~ 50 % の EtOAc / ヘプタンを使用して、120 g シリカゲルを通してクロマトグラフ分析した。白色固体として 4 . 356 g (収率 44 . 94 %) の 6 - クロロ - N - メチルピリミジン - 4 - カルボキサミドを得た。

30

【数 3 5】

¹H NMR (400 MHz, Chloroform-d) δ 8.99 (d, $J = 1.1$ Hz, 1H), 8.16 (d, $J = 1.1$ Hz, 1H), 7.90 (s, 1H), 3.06 (d, $J = 5.2$ Hz, 3H).

【化 4 7】



スキーム 13b

40

【0162】

4 - (7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) オキシシクロヘキサンアミン (7 . 593 g、23 . 12 mmol) と、6 - クロロ - N - メチル - ピリミジン - 4 - カルボキ

50

サミド (4.35 g、25.35 mmol) と、*t*-BuXPhos パラダサイクル (1.519 g、2.333 mmol) との *t*BuOH (100 mL) 溶液を、ナトリウム *t*-ブトキシド (2 M のものを 25.5 mL、51.00 mmol) に添加した。N₂ 下一晩、室温で撹拌した。この反応物をジクロロメタン (100 mL) で希釈し、ジクロロメタン洗浄液を用いて Celite で濾過した。濾液を減圧下で濃縮し、溶離液として 0.14 % のメタノール / DCM を使用して、330 g シリカゲルを通してクロマトグラフ分析した。得られた生成物を、少量のエタノール (15 mL) に溶解し、生成物を 1 時間沈殿させた。冷エタノール洗浄液を用いて濾過して黄色固体を得た。この固体を、50 で 48 時間かけて真空中で乾燥させて、黄色固体として、*N*-メチル-6-((1*s*, 4*s*)-4-((7-モルホリノキノキサリン-5-イル)オキシ)シクロヘキシル)アミノ)ピリミジン-4-カルボキサミド (2.58 g) を得た。

10

【数 36】

¹H NMR (300 MHz, Chloroform-*d*) δ 8.70 (d, *J* = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, *J* = 1.9 Hz, 1H), 8.53 - 8.44 (m, 1H), 8.00 (d, *J* = 5.6 Hz, 1H), 7.20 (d, *J* = 1.2 Hz, 1H), 6.96 (d, *J* = 2.5 Hz, 1H), 6.90 (d, *J* = 2.5 Hz, 1H), 5.50 (s, 1H), 4.83 (dt, *J* = 4.8, 2.5 Hz, 1H), 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 3.01 (d, *J* = 5.1 Hz, 3H), 2.31 - 2.19 (m, 2H), 2.06 - 1.70 (m, 6H). ESI-MS *m/z* calc. 463.2332, found 464.25 (M+1)⁺; Retention time: 0.59 minutes.

20

実施例 14. *N*-メチル-2-((1*s*, 4*s*)-4-((7-モルホリノキノキサリン-5-イル)オキシ)シクロヘキシル)アミノ)ピリミジン-4-カルボキサミド (化合物 350) の調製

【化 48】



スキーム 14a

30

【0163】

2-クロロピリミジン-4-カルボン酸 (4.425 g、27.91 mmol) の DMF (35.40 mL) 溶液を、室温で、1-ヒドロキシベンゾトリアゾール (水 (1)) (2.982 g、19.47 mmol) および EDCI (塩酸 (1)) (6.372 g、33.24 mmol) に添加した。10 分間撹拌した後、この混合物に、メチルアミンのテトラヒドロフラン溶液 (2 M のものを 20.93 mL、41.86 mmol) を添加して、2 時間撹拌した。この反応物を、酢酸エチルで希釈し、水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させ、次いで、濃縮した。得られた残渣を、シリカゲルカラム (0 ~ 30 % の酢酸エチル / ヘキサン) から精製して、白色固体として、2-クロロ-*N*-メチルピリミジン-4-カルボキサミドを得た。

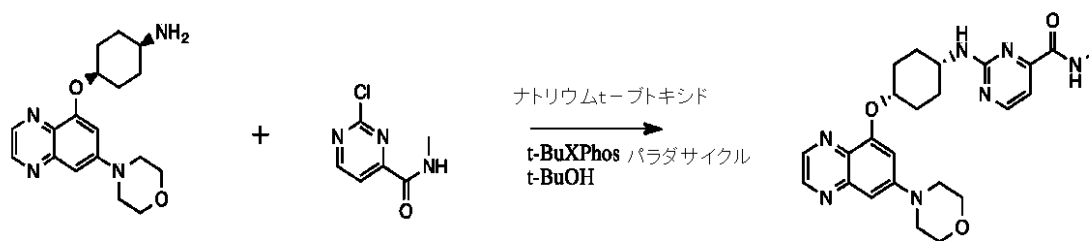
40

【数 37】

¹H NMR (300 MHz, Chloroform-*d*) δ

8.85 (d, *J* = 4.9 Hz, 1H), 8.07 (d, *J* = 4.9 Hz, 1H), 7.82 (s, 1H), 7.27 (s, 0H), 3.06 (d, *J* = 5.2 Hz, 3H).

【化 4 9】



スキーム 14b

10

【 0 1 6 4】

4 - (7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) オキシシクロヘキサンアミン (6 . 0 1 3 g 、 1 8 . 3 1 m m o l) と、 2 - クロロ - N - メチル - ピリミジン - 4 - カルボキサミド (3 . 4 1 g 、 1 9 . 8 7 m m o l) と、 t - B u X P h o s パラダサイクル (1 . 2 2 0 g 、 1 . 8 7 3 m m o l) との t B u O H (1 0 0 m L) 溶液を、ナトリウム t - ブトキシド (2 M のものを 2 0 . 5 2 m L 、 4 1 . 0 4 m m o l) に添加した。N₂ 下で一晩、r t で撹拌した。ジクロロメタン (1 0 0 m L) で r x n 希釈し、セライトで濾過し、濾液を減圧下で濃縮した。得られた残渣を、0 1 4 % のメタノール / ジクロロメタン (d i c h l o m e t h a n e) を使用して、2 2 0 g シリカゲルを通してクロマトグラフ分析した。生成物を、エタノール (4 0 m L) で、7 0 ° で 2 時間粉碎し、濾過し、5 0 ° で一晩、真空中で乾燥させて、細かい黄色粉末として、N - メチル - 2 - (((1 s , 4 s) - 4 - ((7 - モルホリノキノキサリン - 5 - イル) オキシ) シクロヘキシル) アミノ) ピリミジン - 4 - カルボキサミド (5 . 0 3 g 、 収率 6 2 %) を得た。

20

【数 3 8】

1H NMR (300 MHz,

Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.48 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 7.75 (s, 1H), 7.32 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.30 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.85 - 4.73 (m, 1H), 4.07 (dd, J = 8.5, 4.7 Hz, 1H), 3.99 - 3.82 (m, 4H), 3.41 - 3.20 (m, 4H), 3.01 (d, J = 5.1 Hz, 3H), 2.20 (q, J = 6.0 Hz, 2H), 2.06 - 1.82 (m, 6H). ESI-MS m/z calc. 463.2332, found 464.31 (M+1)⁺; Retention time: 0.71 minutes

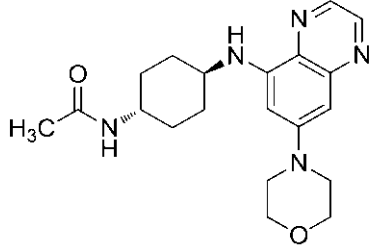
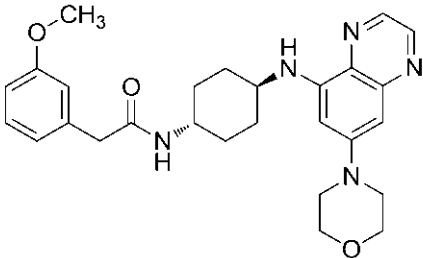
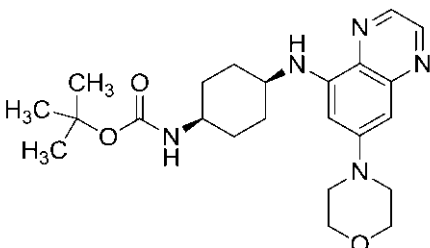
30

【 0 1 6 5】

表 1 および表 2 は、式 I のある種の化合物についての、分析による特徴付けデータを提供する (空白セルは、試験が実施されなかったことを示す) 。

【表 1 - 1】

表 1.

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
1		370.52	(CDCl ₃) δ 8.64 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.36 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.61 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.34 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.90 (s, 1H), 5.40 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 3.98 - 3.76 (m, 5H), 3.51 - 3.24 (m, 5H), 2.33 - 2.08 (m, 4H), 1.99 (s, 3H), 1.58 - 1.31 (m, 4H)
2		476.61	(CDCl ₃) δ 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.34 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.17 (d, J = 8.6 Hz, 2H), 6.90 (d, J = 8.5 Hz, 2H), 6.59 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 6.29 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 5.86 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 5.29 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 3.96 - 3.75 (m, 8H), 3.52 (s, 2H), 3.39 - 3.22 (m, 5H), 2.19 (d, J = 11.7 Hz, 2H), 2.12 - 1.89 (m, 2H), 1.43 (td, J = 13.0, 2.4 Hz, 2H), 1.32 - 1.15 (m, 2H)
3		428.49	(CDCl ₃) δ 8.65 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.35 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.60 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.34 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.11 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.60 (s, 1H), 3.97 - 3.86 (m, 4H), 3.67 (s, 2H), 3.41 - 3.25 (m, 4H), 1.85 (d, J = 3.0 Hz, 5H), 1.74 - 1.57 (m, 3H), 1.45 (s, 9H)

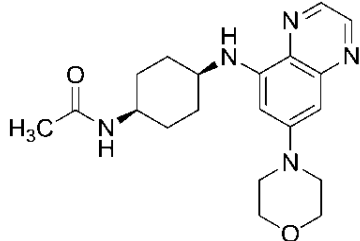
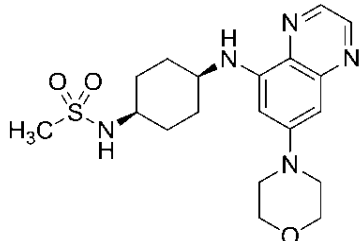
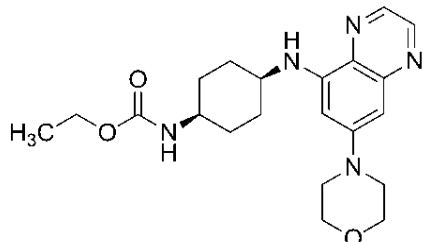
10

20

30

40

【表 1 - 2】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
4		370.46	(CDCl ₃) δ 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.34 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.61 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 6.35 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.12 (br s, 1H), 5.56 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 4.11 - 3.81 (m, 5H), 3.70 (m, 1H), 3.42 - 3.24 (m, 4H), 1.99 (s, 3H), 1.86 (m, 6H), 1.75 - 1.51 (m, 2H)
5		406.12	(CDCl ₃) δ 8.65 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.36 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.62 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.34 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.09 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.68 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 3.97 - 3.82 (m, 4H), 3.76 - 3.47 (m, 2H), 3.40 - 3.23 (m, 4H), 3.01 (s, 3H), 2.04 - 1.65 (m, 8H)
6		400.17	(CDCl ₃) δ 8.65 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.36 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.61 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.35 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.10 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.72 (s, 1H), 4.12 (q, J = 7.0 Hz, 2H), 3.96 - 3.82 (m, 4H), 3.68 (s, 2H), 3.42 - 3.23 (m, 4H), 1.93 - 1.78 (m, 6H), 1.69 (dd, J = 15.0, 6.3 Hz, 2H), 1.25 (t, J = 7.1 Hz, 3H)

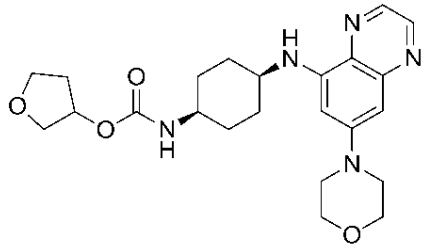
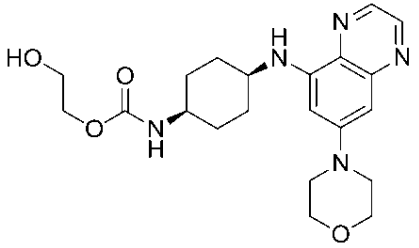
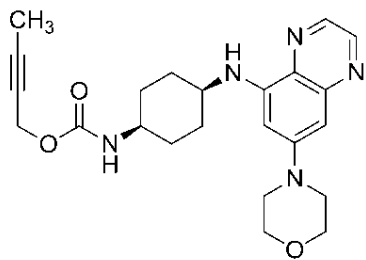
10

20

30

40

【表 1 - 3】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
7		442.14	(CDCl ₃) δ 8.65 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.35 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.61 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.35 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.10 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 5.26 (s, 1H), 4.85 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 4.03 - 3.79 (m, 8H), 3.68 (s, 2H), 3.41 - 3.24 (m, 4H), 2.16 (dd, J = 13.9, 6.0 Hz, 1H), 2.08 - 1.93 (m, 1H), 1.86 (d, J = 3.5 Hz, 6H), 1.76 - 1.54 (m, 2H)
8		416.42	(CDCl ₃) δ 8.65 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.36 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.61 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.35 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.10 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.88 (d, J = 6.3 Hz, 1H), 4.21 (d, J = 4.1 Hz, 2H), 3.95 - 3.88 (m, 4H), 3.87 - 3.59 (m, 4H), 3.40 - 3.26 (m, 4H), 1.95 - 1.52 (m, 9H)
9		424.42	(CDCl ₃) δ 8.65 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.37 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.61 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.34 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.09 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.66 (s, 2H), 4.01 - 3.86 (m, 4H), 3.65 (s, 2H), 3.42 - 3.24 (m, 4H), 1.87 (t, J = 2.3 Hz, 5H), 1.64 (d, J = 26.9 Hz, 6H)

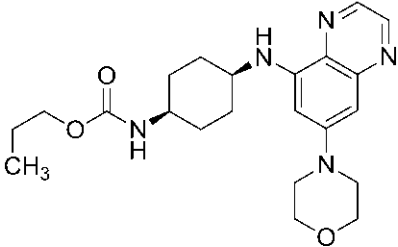
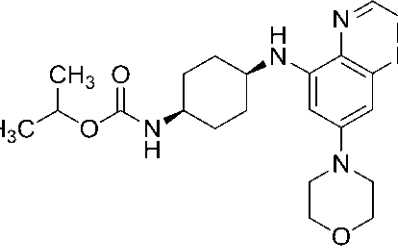
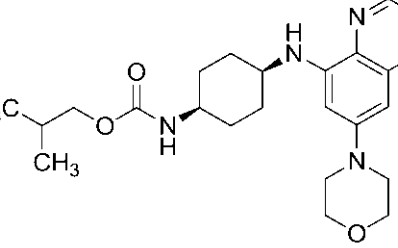
10

20

30

40

【表 1 - 4】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
10		414.44	(CDCl ₃) δ 8.65 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.36 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.61 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.35 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.10 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 4.72 (s, 1H), 4.02 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.95 - 3.82 (m, 4H), 3.68 (s, 2H), 3.43 - 3.26 (m, 4H), 1.87 (d, J = 3.7 Hz, 6H), 1.78 - 1.50 (m, 4H), 0.94 (t, J = 7.4 Hz, 3H)
11		414.44	(CDCl ₃) δ 8.65 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.35 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.60 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.35 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.10 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 4.91 (dt, J = 12.5, 6.2 Hz, 1H), 4.69 (s, 1H), 4.01 - 3.81 (m, 4H), 3.68 (s, 2H), 3.46 - 3.24 (m, 4H), 1.93 - 1.76 (m, 6H), 1.78 - 1.56 (m, 2H), 1.25 (t, J = 9.6 Hz, 6H)
12		428.2	(CDCl ₃) δ 8.65 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.35 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.61 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.35 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.11 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.74 (s, 1H), 3.99 - 3.79 (m, 6H), 3.68 (s, 2H), 3.40 - 3.24 (m, 4H), 1.87 (d, J = 3.5 Hz, 7H), 1.78 - 1.52 (m, 2H), 0.93 (d, J = 6.7 Hz, 6H)

10

20

30

40

【表 1 - 6】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
16		453.96	(CDCl ₃) δ 8.49 (s, 1H), 8.23 (d, J = 1.5 Hz, 1H), 6.48 (s, 1H), 6.18 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.06 (s, 1H), 4.52 (s, 1H), 4.47 (s, 2H), 3.60 (s, 2H), 3.45 (d, J = 11.6 Hz, 2H), 3.14 - 3.12 (m, 2H), 1.96 - 1.84 (m, 4H), 1.79 (s, 5H), 1.54 (s, 3H) and 1.38 (s, 9H) ppm
17		418.4	(CDCl ₃) δ 6.13 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 5.89 (d, J = 1.4 Hz, 1H), 4.87 (d, J = 7.0 Hz, 1H), 4.59 (s, 1H), 3.26 (dd, J = 9.2, 4.3 Hz, 4H), 1.98 - 1.74 (m, 6H), 1.65 (dd, J = 15.9, 7.3 Hz, 3H), 1.47 (s, 9H)
18		406.48	(CDCl ₃) δ 8.65 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.37 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.27 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.60 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.51 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 6.36 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.15 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 5.20 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 4.04 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 3.96 - 3.82 (m, 4H), 3.70 (s, 1H), 3.39 - 3.24 (m, 4H), 1.94 (dd, J = 13.7, 4.4 Hz, 6H), 1.78 (dt, J = 28.8, 16.1 Hz, 2H)

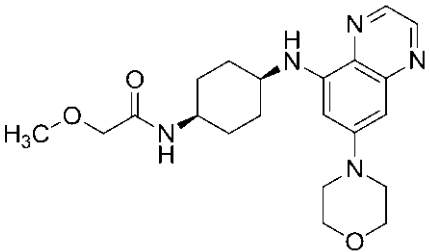
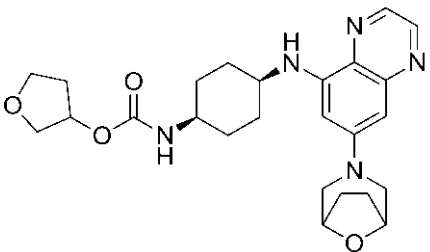
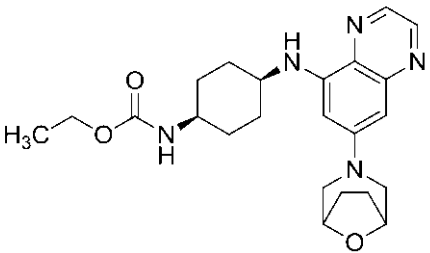
10

20

30

40

【表 1 - 7】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
19		400.46	(CDCl ₃) δ 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.35 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.58 (t, J = 5.1 Hz, 2H), 6.34 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.10 (d, J = 7.3 Hz, 1H), 4.03 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 3.88 (t, J = 4.7 Hz, 6H), 3.68 (s, 1H), 3.42 (s, 3H), 3.37 - 3.23 (m, 4H), 1.98 - 1.78 (m, 6H), 1.69 (dd, J = 15.8, 7.5 Hz, 2H)
20		468.23	(400.0 MHz, CDCl ₃) δ 8.52 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 8.23 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 6.47 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.19 (s, 1H), 6.03 (s, 1H), 5.19 (s, 1H), 4.76 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.47 (s, 2H), 3.87 - 3.76 (m, 4H), 3.60 (s, 2H), 3.45 (d, J = 11.6 Hz, 2H), 3.13 - 3.10 (m, 2H), 2.61 (s, 1H), 2.13 - 2.04 (m, 1H), 1.95 - 1.85 (m, 5H), 1.79 (s, 5H) and 1.62 - 1.58 (m, 2H)
21		426.31	

10

20

30

40

【表 1 - 8】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、δ 値として示す
22		425.35	(400.0 MHz, CDCl ₃) δ 8.54 (s, 1H), 8.22 (s, 1H), 6.43 (s, 1H), 6.19 (s, 1H), 6.02 (s, 1H), 4.47 (s, 2H), 4.38 (d, J = 5.2 Hz, 1H), 4.28 (s, 1H), 3.74 (s, 1H), 3.60 (s, 1H), 3.42 (s, 4H), 3.14 - 3.09 (m, 4H), 2.05 - 1.87 (m, 3H), 1.79 (s, 3H), 1.55 (d, J = 7.1 Hz, 2H) and 1.21 - 1.05 (m, 5H)
23		396.2	(CDCl ₃) δ 8.20 (d, J = 4.9 Hz, 2H), 6.46 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 6.05 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 5.82 (s, 1H), 5.24 (s, 1H), 4.82 (d, J = 7.0 Hz, 1H), 3.98 (s, 1H), 3.85 - 3.72 (m, 4H), 3.60 (s, 1H), 3.23 - 3.06 (m, 4H), 1.95 - 1.62 (m, 8H). [2]
24		405.59	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.65 (s, 1H), 8.37 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.08 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 7.41 (t, J = 7.7 Hz, 1H), 6.61 (s, 1H), 6.58 - 6.53 (m, 1H), 6.46 - 6.30 (m, 2H), 6.15 (d, J = 7.3 Hz, 1H), 4.56 (s, 1H), 3.98 - 3.78 (m, 5H), 3.76 - 3.61 (m, 1H), 3.42 - 3.24 (m, 4H), 1.97 (d, J = 29.6 Hz, 6H), 1.86 - 1.66 (m, 2H)

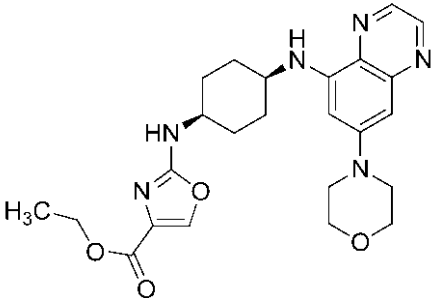
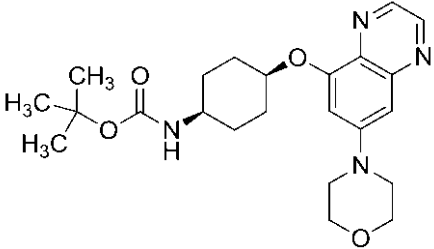
10

20

30

40

【表 1 - 9】

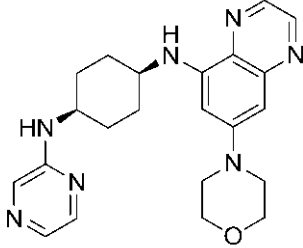
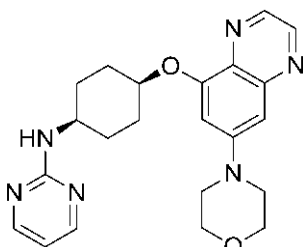
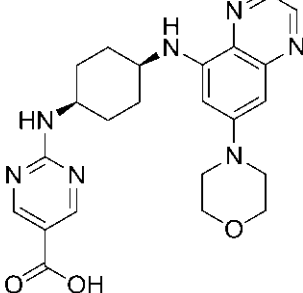
化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
25		467.57	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.42 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.26 (s, 1H), 7.14 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 6.64 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.38 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.24 (d, J = 6.8 Hz, 1H), 4.31 (q, J = 7.1 Hz, 2H), 3.97 - 3.81 (m, 5H), 3.41 - 3.24 (m, 4H), 2.22 (d, J = 7.5 Hz, 2H), 1.90 (dd, J = 22.4, 10.3 Hz, 6H), 1.35 (t, J = 7.1 Hz, 3H)
26		429.62	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.88 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.82 ? 4.60 (m, 2H), 4.00 ? 3.88 (m, 4H), 3.69 (d, J = 6.8 Hz, 1H), 3.42 ? 3.28 (m, 4H), 2.15 (p, J = 6.7, 5.6 Hz, 2H), 1.94 ? 1.75 (m, 6H), 1.46 (s, 9H)

10

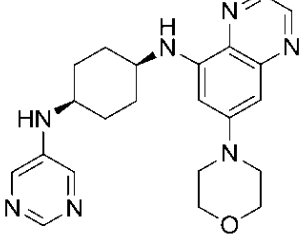
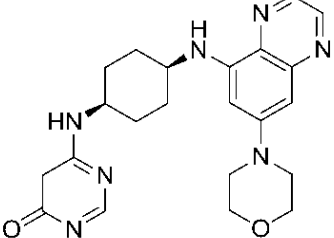
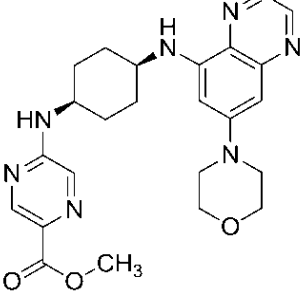
20

30

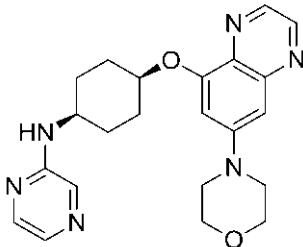
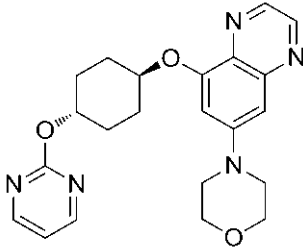
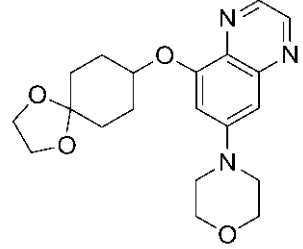
【表 1 - 10】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
27		406.58	(CDCl ₃) δ 8.65 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.36 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.98 (dd, J = 2.8, 1.5 Hz, 1H), 7.88 (d, J = 1.5 Hz, 1H), 7.79 (d, J = 2.8 Hz, 1H), 6.62 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.37 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.17 (s, 1H), 8.69 - 8.61 (m, 1H), 4.60 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 4.08 - 3.83 (m, 5H), 8.71 - 8.57 (m, 1H), 3.73 (t, J = 6.9 Hz, 1H), 3.40 - 3.25 (m, 4H), 1.96 (h, J = 4.9 Hz, 6H), 1.77 (q, J = 7.4, 6.1 Hz, 2H)
28		407.3	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.77 - 8.59 (m, 2H), 8.29 (d, J = 4.9 Hz, 2H), 7.01 - 6.87 (m, 2H), 6.61 - 6.48 (m, 1H), 4.82 (s, 1H), 4.05 (s, 1H), 3.93 (t, J = 4.8 Hz, 4H), 3.35 (t, J = 4.8 Hz, 4H), 2.23 (d, J = 13.1 Hz, 2H), 2.05 - 1.82 (m, 6H)
29		450.61	(DMSO-d ₆) δ 12.65 (s, 1H), 8.69 (d, J = 2.0 Hz, 2H), 8.43 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.00 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 6.54 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.48 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.17 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.06 (s, 1H), 3.77 (dd, J = 5.9, 3.8 Hz, 4H), 3.29 (s, 5H), 2.04 - 1.46 (m, 8H)

【表 1 - 1 1】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
30		406.52	(CDCl ₃) δ 8.66 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.58 (s, 1H), 8.37 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.13 (s, 2H), 6.63 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.37 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.14 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 3.96 - 3.86 (m, 4H), 3.76 (d, J = 7.7 Hz, 2H), 3.54 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.02 - 1.86 (m, 6H), 1.76 (q, J = 8.9, 8.3 Hz, 2H)
31		422.49	(CDCl ₃) δ 12.88 - 12.45 (m, 1H), 8.66 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.37 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.81 (s, 1H), 6.62 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.36 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.12 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 5.27 (s, 1H), 5.05 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.02 - 3.83 (m, 4H), 3.63 (d, J = 47.6 Hz, 2H), 3.44 - 3.22 (m, 4H), 1.91 (q, J = 4.8, 4.3 Hz, 6H), 1.82-1.69 (m, 2H)
32		464.6	(CDCl ₃) δ 8.78 (d, J = 1.3 Hz, 1H), 8.66 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.37 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.91 (d, J = 1.3 Hz, 1H), 6.62 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.37 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.16 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 5.13 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.10 (s, 1H), 3.99 - 3.86 (m, 7H), 3.76 (s, 1H), 3.39 - 3.28 (m, 4H), 1.98 (h, J = 4.8 Hz, 6H), 1.80 (t, J = 8.7 Hz, 2H)

【表 1 - 1 2】

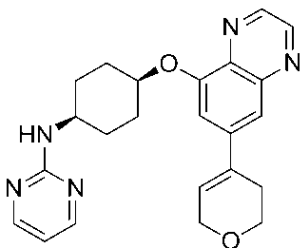
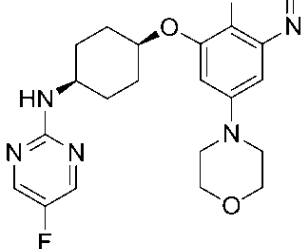
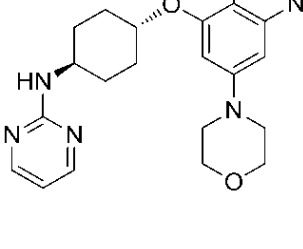
化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
33		407.3	(CDCl ₃) δ 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.99 (dd, J = 2.8, 1.5 Hz, 1H), 7.94 - 7.85 (m, 1H), 7.79 (d, J = 2.8 Hz, 1H), 7.14 (d, J = 1.0 Hz, 1H), 7.03 - 6.87 (m, 2H), 4.82 (d, J = 5.7 Hz, 1H), 4.70 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.03 - 3.86 (m, 4H), 3.51 (s, 1H), 3.43 - 3.30 (m, 4H), 2.35 - 1.81 (m, 8H)
34		408.5	(CDCl ₃) δ 8.69 (dd, J = 3.4, 1.9 Hz, 1H), 8.62 (dd, J = 3.6, 1.9 Hz, 1H), 8.51 (dd, J = 4.8, 2.2 Hz, 2H), 7.01 - 6.83 (m, 3H), 5.18 (tt, J = 7.0, 3.4 Hz, 1H), 4.79 (tt, J = 6.9, 3.1 Hz, 1H), 4.00 - 3.85 (m, 4H), 3.34 (dq, J = 4.8, 2.6 Hz, 4H), 2.44 - 2.16 (m, 4H), 1.92 (tdd, J = 16.4, 7.7, 2.8 Hz, 4H)
35		372.23	(CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.99 - 6.85 (m, 2H), 4.70 (dq, J = 7.3, 3.5 Hz, 1H), 4.05 - 3.84 (m, 8H), 3.40 - 3.25 (m, 4H), 2.19 - 1.93 (m, 6H), 1.77 - 1.64 (m, 2H)

10

20

30

【表 1 - 1 3】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
36		404.2	(CDCl ₃) δ 8.94 - 8.76 (m, 2H), 8.29 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 7.67 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 6.53 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 6.37 (tt, J = 3.1, 1.5 Hz, 1H), 5.30 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.87 (dt, J = 7.5, 3.6 Hz, 1H), 4.43 (q, J = 2.8 Hz, 2H), 4.02 (t, J = 5.5 Hz, 3H), 2.68 (dq, J = 6.0, 3.4, 3.0, 1.8 Hz, 2H), 2.35 - 2.11 (m, 2H), 2.07 - 1.84 (m, 6H)
37		425.25	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.18 (dd, J = 3.7, 0.8 Hz, 2H), 7.01 - 6.85 (m, 2H), 5.37 - 5.20 (m, 1H), 4.79 (d, J = 5.5 Hz, 1H), 4.02 - 3.85 (m, 4H), 3.43 - 3.29 (m, 4H), 2.31 - 2.15 (m, 2H), 2.02 - 1.85 (m, 6H)
38		407.25	(CDCl ₃) δ 8.61 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.55 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.20 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.87 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.81 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.46 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 4.95 (s, 1H), 4.45 (tt, J = 10.7, 3.6 Hz, 1H), 3.95 - 3.77 (m, 5H), 3.32 - 3.19 (m, 4H), 2.34 - 2.10 (m, 4H), 1.82 (dt, J = 12.9, 10.0 Hz, 2H), 1.45 - 1.20 (m, 2H)

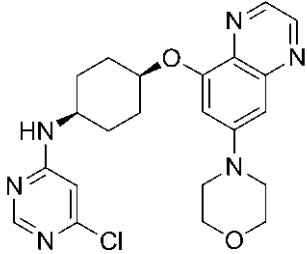
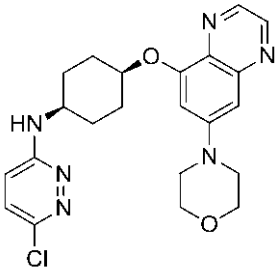
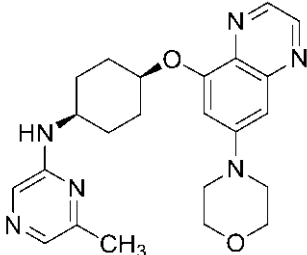
10

20

30

40

【表 1 - 1 4】

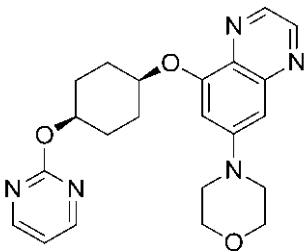
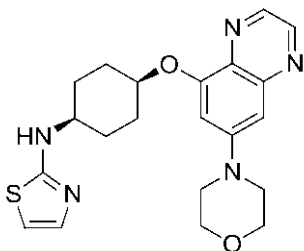
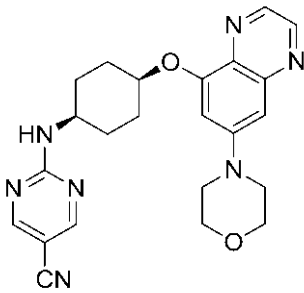
化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
39		441.28	(CDCl ₃) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.37 (s, 1H), 6.98 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.36 (d, J = 1.0 Hz, 1H), 4.91 - 4.76 (m, 1H), 4.00 - 3.88 (m, 4H), 3.45 - 3.24 (m, 4H), 2.34 - 2.17 (m, 2H), 2.03 - 1.84 (m, 6H)
40		441.3	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.15 (d, J = 9.3 Hz, 1H), 7.00 - 6.87 (m, 2H), 6.64 (d, J = 9.3 Hz, 1H), 4.89 - 4.76 (m, 2H), 4.11 - 4.03 (m, 1H), 4.00 - 3.83 (m, 4H), 3.40 - 3.24 (m, 4H), 2.23 (dq, J = 12.9, 6.3, 5.6 Hz, 2H), 2.02 - 1.79 (m, 6H)
41		421.43	(CDCl ₃) δ 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.55 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.58 (d, J = 23.6 Hz, 2H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.84 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.73 (s, 2H), 3.93 - 3.72 (m, 5H), 3.34 - 3.18 (m, 4H), 2.29 (s, 3H), 2.15 (m, 2H), 1.84 (m, 6H)

10

20

30

【表 1 - 1 5】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
42		408.56	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.52 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 7.01 - 6.87 (m, 3H), 5.17 (ddt, J = 8.7, 6.7, 3.4 Hz, 1H), 4.76 - 4.58 (m, 1H), 4.00 - 3.87 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.43 - 2.22 (m, 4H), 2.05 - 1.87 (m, 2H), 1.86 - 1.71 (m, 2H)
43		412.48	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.36 (s, 1H), 7.12 (d, J = 3.6 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.48 (d, J = 3.6 Hz, 1H), 5.18 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.79 (td, J = 5.4, 2.7 Hz, 1H), 3.97 - 3.85 (m, 4H), 3.70 (q, J = 6.8 Hz, 1H), 3.39 - 3.25 (m, 4H), 2.29 - 2.12 (m, 2H), 2.07 - 1.77 (m, 6H)
44		432.6	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 2.9 Hz, 1H), 8.47 (d, J = 3.0 Hz, 1H), 6.99 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.81 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 4.84 (dt, J = 5.3, 2.8 Hz, 1H), 4.13 - 4.05 (m, 1H), 4.00 - 3.84 (m, 4H), 3.43 - 3.30 (m, 4H), 2.32 - 2.17 (m, 2H), 2.02 - 1.85 (m, 6H)

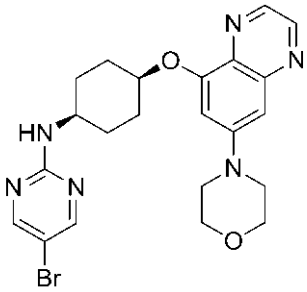
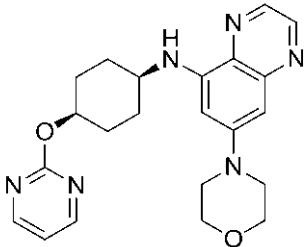
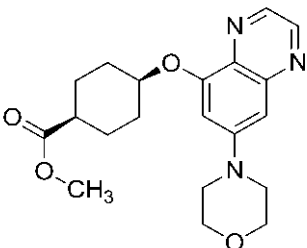
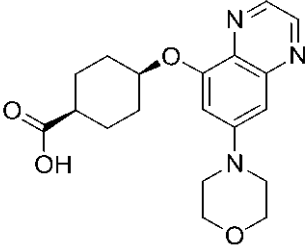
10

20

30

40

【表 1 - 1 6】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
45		485.26	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.29 (s, 2H), 6.98 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.29 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.04 - 3.84 (m, 4H), 3.42 - 3.31 (m, 4H), 2.22 (s, 2H), 1.92 (d, J = 4.9 Hz, 6H)
46		407.57	(CDCl ₃) δ 8.63 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.52 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 8.37 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.92 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 6.62 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.38 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.16 (s, 1H), 5.27 (s, 1H), 4.06 - 3.78 (m, 4H), 3.64 (s, 1H), 3.48 - 3.20 (m, 4H), 2.14 (s, 2H), 2.04 - 1.80 (m, 4H)
47		372.16	(CDCl ₃) δ 8.66 (dd, J = 20.5, 1.9 Hz, 2H), 6.93 (dd, J = 17.3, 2.5 Hz, 2H), 4.87 - 4.65 (m, 1H), 4.04 - 3.83 (m, 4H), 3.72 (s, 3H), 3.46 - 3.22 (m, 4H), 2.72 - 2.40 (m, 1H), 2.35 - 1.99 (m, 4H), 1.99 - 1.51 (m, 4H)
48		358.64	(DMSO-d ₆) δ 12.13 (s, 1H), 8.72 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 8.58 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 7.13 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 4.94 - 4.84 (m, 1H), 3.91 - 3.68 (m, 4H), 3.51 - 3.19 (m, 4H), 2.47 - 2.33 (m, 1H), 2.04 - 1.82 (m, 4H), 1.82 - 1.60 (m, 4H)

10

20

30

40

【表 1 - 17】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
49		425.39	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.99 (s, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.20 (s, 1H), 5.19 (bs, 1H), 4.81 (bs, 1H), 3.96 - 3.84 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.29 - 2.14 (m, 2H), 1.99 - 1.81 (m, 6H)
50		425.39	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.30 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.84 (s, 1H), 5.42 (s, 1H), 4.81 (s, 1H), 3.99 - 3.82 (m, 4H), 3.39 - 3.24 (m, 4H), 2.31 - 2.19 (m, 2H), 2.08 - 1.72 (m, 8H)
51		425.33	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.30 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.84 (s, 1H), 5.42 (s, 1H), 4.81 (s, 1H), 3.99 - 3.82 (m, 4H), 3.39 - 3.24 (m, 4H), 2.31 - 2.19 (m, 2H), 2.08 - 1.72 (m, 8H)

10

20

30

40

【表 1 - 1 8】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
52		435.19	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.4 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.5 Hz, 1H), 6.93 (s, 1H), 6.90 (s, 1H), 6.28 (s, 1H), 5.06 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.06 (bs, 1H), 3.97 - 3.84 (m, 4H), 3.38 - 3.25 (m, 4H), 2.27 (s, 6H), 2.18 - 2.09 (m, 2H), 1.94 - 1.83 (m, 7H)
53		433.25	(CDCl ₃) δ 9 Hz, 1H), 8.28 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.85 (t, J = 1.9 Hz, 2H), 6.51 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 5.29 (d, J = 6.3 Hz, 1H), 4.80 (dq, J = 5.5, 2.8 Hz, 1H), 4.57 (d, J = 3.9 Hz, 2H), 4.02 (t, J = 6.2 Hz, 1H), 3.54 - 3.43 (m, 2H), 3.19 (dd, J = 11.6, 2.6 Hz, 2H), 2.27 - 2.14 (m, 2H), 2.08 - 1.85 (m, 10H)
54		437.27	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.45 (d, J = 7.8 Hz, 2H), 7.02 - 6.81 (m, 2H), 4.78 (ddd, J = 7.3, 5.6, 3.1 Hz, 1H), 4.66 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.01 - 3.78 (m, 7H), 3.41 - 3.25 (m, 4H), 2.30 - 2.08 (m, 2H), 1.94 (h, J = 8.8, 8.2 Hz, 6H)

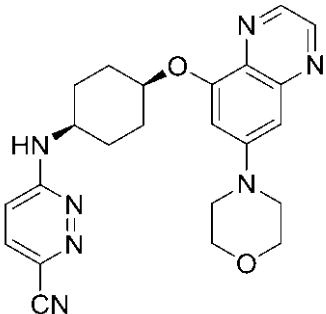
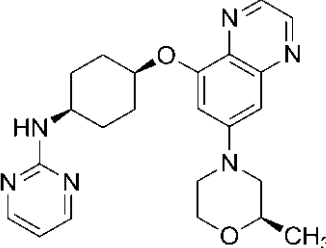
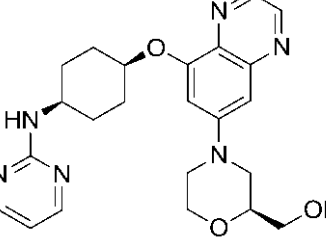
10

20

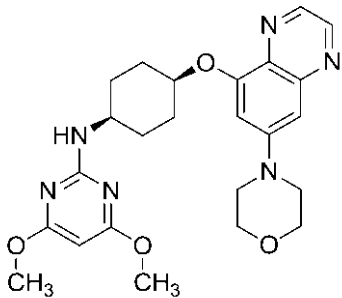
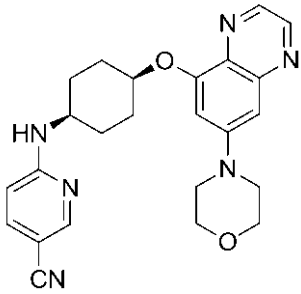
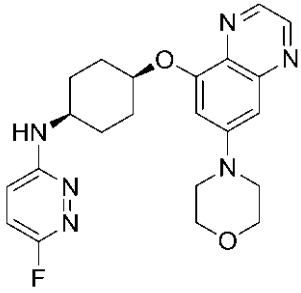
30

40

【表 1 - 1 9】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
55		432.3	(CDCl ₃) δ 8.73 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.42 (d, J = 9.3 Hz, 1H), 6.96 (dd, J = 19.6, 2.5 Hz, 2H), 6.65 (d, J = 9.3 Hz, 1H), 5.40 (s, 1H), 4.86 (s, 1H), 3.94 (dd, J = 5.9, 3.8 Hz, 4H), 3.37 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 4H), 2.27 (d, J = 12.7 Hz, 2H), 2.05 - 1.80 (m, 6H)
56		421.47	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.28 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.98 - 6.86 (m, 2H), 6.53 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 5.39 (s, 1H), 4.89 - 4.75 (m, 1H), 4.18 - 3.93 (m, 2H), 3.93 - 3.72 (m, 2H), 3.70 - 3.52 (m, 2H), 3.00 (td, J = 12.0, 3.5 Hz, 1H), 2.66 (dd, J = 12.1, 10.3 Hz, 1H), 2.21 (d, J = 8.9 Hz, 2H), 1.93 (d, J = 6.7 Hz, 6H), 1.30 (d, J = 6.2 Hz, 3H)
57		437.49	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.28 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 7.02 - 6.86 (m, 2H), 6.53 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 5.40 (s, 1H), 4.82 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 4.20 - 3.95 (m, 2H), 3.94 - 3.53 (m, 6H), 3.03 (td, J = 12.0, 3.5 Hz, 1H), 2.86 (dd, J = 12.1, 10.4 Hz, 1H), 2.20 (d, J = 9.2 Hz, 2H), 2.11 - 1.80 (m, 7H)

【表 1 - 2 0】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
58		467.16	(400 MHz, methanol-d ₄) δ 8.69 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.56 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.12 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.36 (s, 1H), 3.97 (s, 1H), 3.91 - 3.86 (m, 4H), 3.84 (s, 6H), 3.43 - 3.35 (m, 4H), 2.23 - 2.10 (m, 2H), 2.00 - 1.81 (m, 6H)
59		431.19	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.36 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 7.54 (dd, J = 8.8, 2.2 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.37 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 5.11 (s, 1H), 4.80 (s, 1H), 3.94 (s, 1H), 3.94 - 3.79 (m, 4H), 3.38 - 3.25 (m, 4H), 2.32 - 2.12 (m, 2H), 2.02 - 1.78 (m, 6H)
60		425.23	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.06 - 6.88 (m, 3H), 6.80 (dd, J = 9.4, 6.3 Hz, 1H), 4.97 - 4.71 (m, 2H), 4.14 (q, J = 7.1 Hz, 1H), 4.01 - 3.85 (m, 4H), 3.44 - 3.24 (m, 4H), 2.23 (d, J = 10.7 Hz, 2H), 1.96 (dt, J = 11.0, 7.6 Hz, 6H)

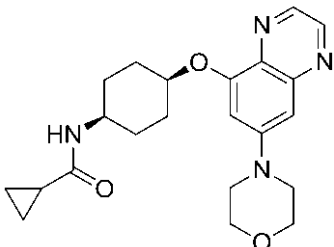
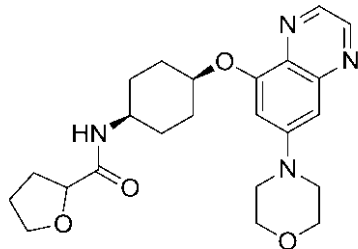
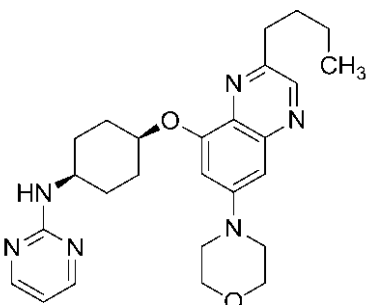
10

20

30

40

【表 1 - 2 1】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
61		397.15	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.87 (s, 1H), 5.78 - 5.64 (m, 1H), 4.73 (s, 1H), 4.01 (s, 1H), 3.97 - 3.78 (m, 4H), 3.43 - 3.18 (m, 4H), 2.26 - 2.05 (m, 2H), 1.98 - 1.73 (m, 6H), 1.36 - 1.26 (m, 1H), 1.01 - 0.92 (m, 2H), 0.78 - 0.67 (m, 2H)
62		427.23	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 6.79 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.73 (s, 1H), 4.34 (dd, J = 8.3, 5.9 Hz, 1H), 4.04 - 3.84 (m, 7H), 3.40 - 3.28 (m, 4H), 2.35 - 2.24 (m, 1H), 2.23 - 2.11 (m, 2H), 2.09 - 1.98 (m, 1H), 1.97 - 1.76 (m, 8H)
63		463.54	(CDCl ₃) δ 8.53 (s, 1H), 8.29 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.85 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.52 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 5.25 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.07 (d, J = 20.4 Hz, 1H), 3.98 - 3.85 (m, 4H), 3.43 - 3.21 (m, 4H), 3.05 - 2.83 (m, 2H), 2.30 - 2.14 (m, 1H), 2.03 - 1.71 (m, 7H), 1.45 (dq, J = 14.5, 7.3 Hz, 2H), 0.98 (t, J = 7.3 Hz, 3H)

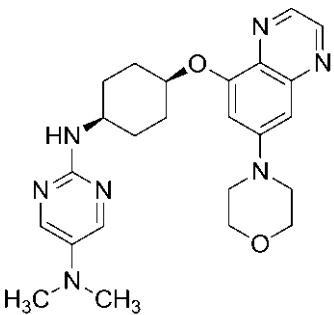
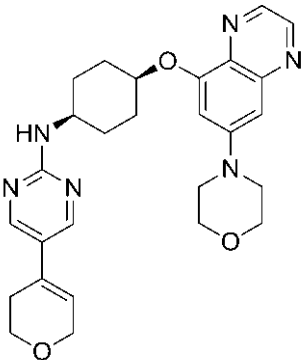
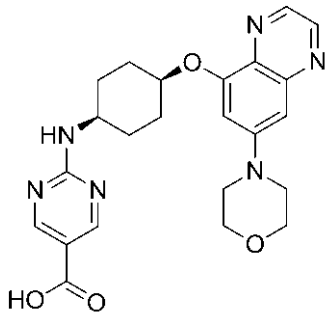
10

20

30

40

【表 1 - 2 3】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、δ 値として示す
67		450.3	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.02 (s, 1H), 6.94 (dd, J = 12.2, 2.5 Hz, 2H), 5.32 (s, 2H), 4.87 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.01 - 3.86 (m, 4H), 3.36 (q, J = 5.4, 4.7 Hz, 4H), 2.83 (s, 6H), 2.19 (s, 2H), 1.92 (d, J = 4.8 Hz, 6H)
68		489.24	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.34 (s, 2H), 7.02 - 6.86 (m, 2H), 6.00 (tt, J = 3.0, 1.5 Hz, 1H), 5.41 - 5.21 (m, 1H), 4.81 (dt, J = 7.2, 3.6 Hz, 1H), 4.31 (q, J = 2.8 Hz, 2H), 4.03 (dd, J = 7.8, 4.4 Hz, 1H), 4.00 - 3.82 (m, 6H), 3.42 - 3.25 (m, 4H), 2.44 (tdd, J = 5.7, 2.9, 1.7 Hz, 2H), 2.22 (dq, J = 11.2, 6.6, 6.0 Hz, 2H), 2.02 - 1.83 (m, 6H)
69		451.21	(CDCl ₃) δ 9.05 (s, 1H), 8.88 - 8.71 (m, 3H), 8.49 (s, 1H), 7.06 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.85 (s, 1H), 4.17 (s, 1H), 3.93 (t, J = 4.8 Hz, 4H), 3.42 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 2.25 - 2.10 (m, 2H), 1.95 (d, J = 11.9 Hz, 4H)

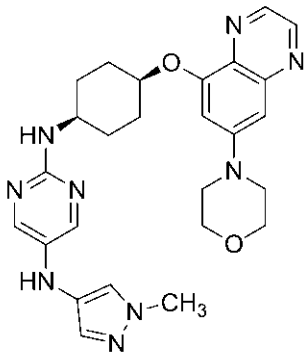
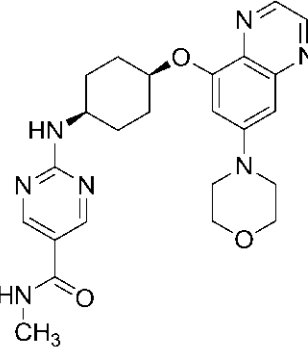
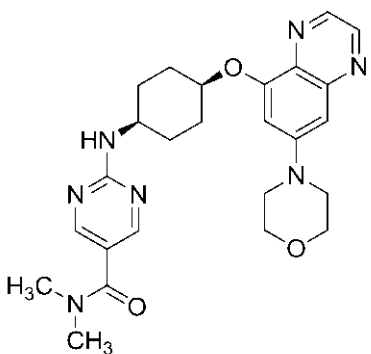
10

20

30

40

【表 1 - 2 4】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
70		409.45	(methanol- d_4) δ 8.69 (s, 1H), 8.56 (s, 1H), 7.20 (s, 1H), 7.10 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 6.88 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.93 (d, J = 14.3 Hz, 2H), 3.95 - 3.76 (m, 7H), 3.42 - 3.32 (m, 4H), 3.09 (d, J = 7.3 Hz, 1H), 2.21 - 2.09 (m, 2H), 1.85 (dd, J = 10.8, 5.6 Hz, 6H)
71		464.4	(CDCl ₃) δ 8.79 - 8.64 (m, 3H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.99 - 6.88 (m, 2H), 6.19 (q, J = 4.7 Hz, 1H), 5.90 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.81 (dq, J = 5.3, 2.7 Hz, 1H), 4.08 (qd, J = 8.2, 6.5, 2.3 Hz, 1H), 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.93 (d, J = 4.8 Hz, 3H), 2.27 - 2.14 (m, 2H), 2.06 - 1.79 (m, 6H)
72		478.39	(CDCl ₃) δ 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 3.10 (s, 6H), 2.22 (dt, J = 11.3, 5.1 Hz, 2H), 1.94 (dd, J = 8.3, 3.9 Hz, 6H), 4.12 - 4.01 (m, 1H), 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.46 (s, 2H), 7.00 - 6.87 (m, 2H), 5.57 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.81 (dq, J = 5.1, 2.4 Hz, 1H)

10

20

30

40

【表 1 - 2 5】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
73		427.2	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.2 Hz, 1H), 8.57 (d, J = 21.7 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 6.86 (s, 1H), 5.75 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 4.74 (s, 1H), 4.03 - 3.87 (m, 8H), 3.81 (dd, J = 15.2, 7.5 Hz, 1H), 3.37 - 3.25 (m, 4H), 2.96 - 2.76 (m, 1H), 2.23 - 2.07 (m, 4H), 1.84 - 1.78 (m, 6H)
74		411.25	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.42 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.72 (s, 1H), 3.98 (s, 1H), 3.95 - 3.86 (m, 4H), 3.40 - 3.26 (m, 4H), 3.05 - 2.87 (m, 1H), 2.32 - 2.21 (m, 2H), 2.21 - 2.07 (m, 4H), 2.03 - 1.90 (m, 1H), 1.90 - 1.77 (m, 7H)
75		562.34	(CDCl ₃) δ 8.72 - 8.51 (m, 2H), 7.01 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.84 (s, 1H), 4.40 (s, 2H), 3.99 (s, 1H), 3.83 (dd, J = 5.9, 3.8 Hz, 4H), 3.65 (s, 2H), 3.35 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 2.87 (s, 2H), 2.27 - 1.91 (m, 4H), 1.90 - 1.59 (m, 2H), 1.41 (s, 9H)

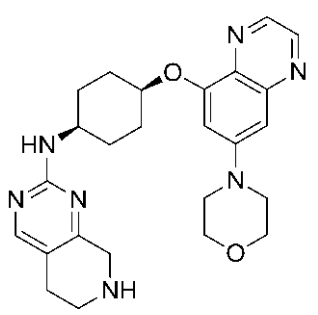
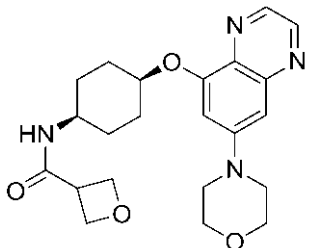
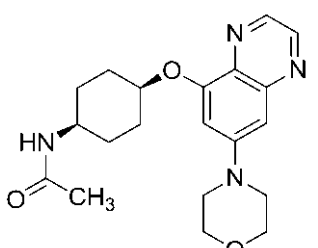
10

20

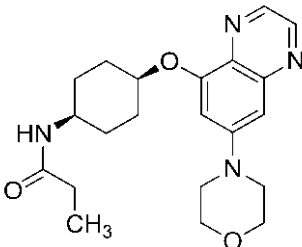
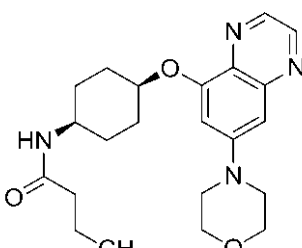
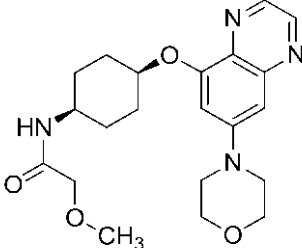
30

40

【表 1 - 2 6】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
76		462.23	<p>(CDCl₃) δ 8.70 (t, J = 2.2 Hz, 1H), 8.63 (dd, J = 2.7, 1.9 Hz, 1H), 7.97 (s, 1H), 7.00 - 6.86 (m, 2H), 5.05 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.02 (s, 1H), 3.93 (t, J = 4.7 Hz, 4H), 3.86 (s, 1H), 3.35 (t, J = 4.8 Hz, 4H), 3.17 (t, J = 6.0 Hz, 1H), 2.89 (d, J = 5.5 Hz, 1H), 2.71 (t, J = 6.0 Hz, 1H), 2.21 (dd, J = 9.2, 4.9 Hz, 2H), 1.91 (d, J = 5.5 Hz, 3H), 1.75 (d, J = 5.6 Hz, 4H)</p>
77		413.19	<p>(400 MHz, CDCl₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 - 8.54 (m, 1H), 6.93 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 5.76 - 5.55 (m, 1H), 4.93 - 4.67 (m, 4H), 3.99 (d, J = 26.0 Hz, 1H), 3.95 - 3.81 (m, 4H), 3.77 - 3.55 (m, 2H), 3.39 - 3.28 (m, 4H), 2.21 - 2.09 (m, 2H), 1.90 - 1.75 (m, 6H)</p>
78		371.18	<p>(400 MHz, CDCl₃) δ 8.69 (s, 1H), 8.60 (s, 1H), 6.94 (s, 1H), 6.86 (s, 1H), 5.59 (s, 1H), 4.74 (s, 1H), 4.11 - 3.81 (m, 5H), 3.42 - 3.23 (m, 4H), 2.28 - 2.09 (m, 2H), 1.98 (s, 3H), 1.90 - 1.78 (m, 6H)</p>

【表 1 - 2 7】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
79		385.18	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 5.52 (d, J = 7.3 Hz, 1H), 4.73 (s, 1H), 3.99 (s, 1H), 3.96 - 3.87 (m, 4H), 3.38 - 3.30 (m, 4H), 2.24 - 2.08 (m, 4H), 1.88 - 1.79 (m, 6H), 1.16 (t, J = 7.6 Hz, 3H)
80		399.23	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 5.53 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 4.73 (s, 1H), 4.00 (s, 1H), 3.95 - 3.84 (m, 4H), 3.39 - 3.25 (m, 4H), 2.22 - 2.06 (m, 4H), 1.88 - 1.76 (m, 6H), 1.70 - 1.61 (m, 2H), 0.94 (t, J = 7.4 Hz, 3H)
81		401.21	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 6.65 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 4.72 (s, 1H), 4.06 (s, 1H), 3.96 - 3.85 (m, 6H), 3.43 (s, 3H), 3.38 - 3.28 (m, 4H), 2.24 - 2.09 (m, 2H), 1.95 - 1.76 (m, 6H)

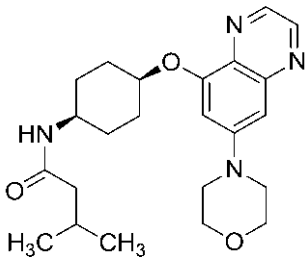
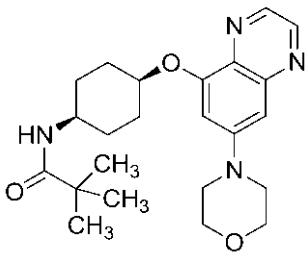
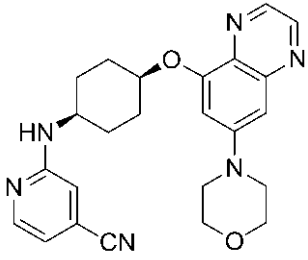
10

20

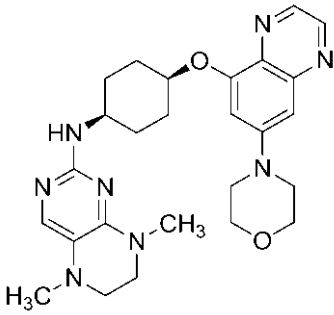
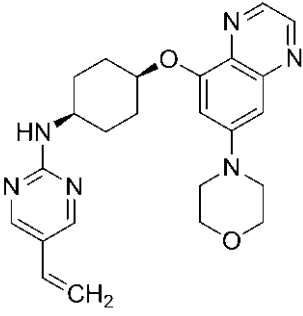
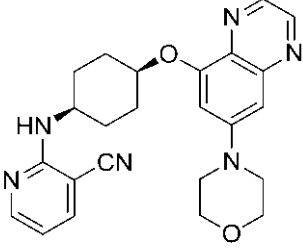
30

40

【表 1 - 2 8】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
82		413.27	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 5.53 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.72 (s, 1H), 4.01 (s, 1H), 3.96 - 3.81 (m, 4H), 3.37 - 3.24 (m, 4H), 2.24 - 2.06 (m, 3H), 2.01 (d, J = 7.0 Hz, 2H), 1.87 - 1.76 (m, 6H), 0.94 (d, J = 6.5 Hz, 6H)
83		413.23	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.55 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.80 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 5.62 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 4.64 (s, 1H), 3.99 - 3.76 (m, 5H), 3.37 - 3.14 (m, 4H), 2.21 - 1.95 (m, 2H), 1.87 - 1.63 (m, 6H), 1.13 (s, 9H)
84		431.19	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.19 (d, J = 4.8 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.70 (dd, J = 5.1, 1.2 Hz, 1H), 6.56 (s, 1H), 4.87 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 3.96 - 3.88 (m, 4H), 3.85 (s, 1H), 3.38 - 3.28 (m, 4H), 2.28 - 2.14 (m, 2H), 2.00 - 1.85 (m, 6H)

【表 1 - 2 9】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
85		491.3	(CDCl ₃) δ 8.67 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.05 - 6.95 (m, 2H), 6.72 (s, 1H), 4.88 (s, 1H), 3.98 - 3.82 (m, 4H), 3.64 (t, J = 5.1 Hz, 2H), 3.41 - 3.31 (m, 4H), 3.24 (s, 3H), 3.09 (t, J = 5.2 Hz, 2H), 2.68 (s, 3H), 2.30 - 1.99 (m, 4H), 1.86 (d, J = 9.0 Hz, 4H)
86		433.2	(CDCl ₃) δ 9.68 (s, 1H), 8.76 - 8.58 (m, 2H), 7.00 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.41 (dd, J = 17.7, 11.1 Hz, 1H), 5.65 (d, J = 17.7 Hz, 1H), 5.33 (d, J = 11.1 Hz, 1H), 4.85 (q, J = 3.6 Hz, 1H), 4.01 (s, 1H), 3.94 - 3.70 (m, 4H), 3.47 - 3.19 (m, 4H), 2.27 - 1.94 (m, 4H), 1.93 - 1.63 (m, 4H)
87		431.2	(CDCl ₃) δ 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.57 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.20 (dd, J = 5.0, 1.9 Hz, 1H), 7.57 (dd, J = 7.6, 1.9 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.85 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.51 (dd, J = 7.6, 4.9 Hz, 1H), 5.12 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 4.83 - 4.71 (m, 0H), 4.24 - 4.03 (m, 1H), 3.92 - 3.77 (m, 4H), 3.35 - 3.19 (m, 4H), 2.28 - 2.10 (m, 2H), 1.88 (td, J = 8.3, 6.8, 3.9 Hz, 6H)

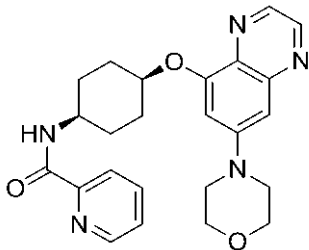
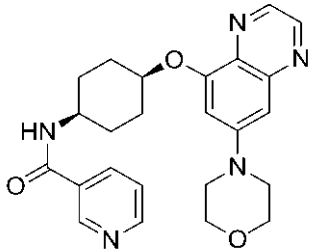
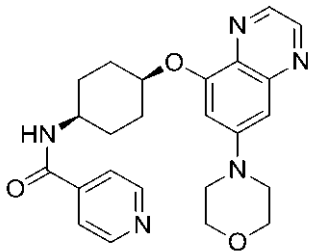
10

20

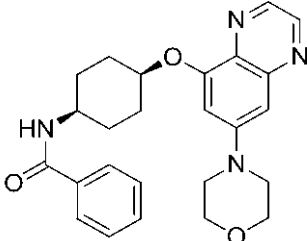
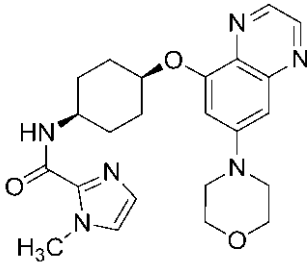
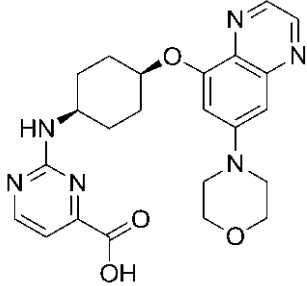
30

40

【表 1 - 3 0】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、δ 値として示す
88		434.25	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (s, 1H), 8.63 (s, 1H), 8.57 (s, 1H), 8.30 - 8.12 (m, 2H), 7.85 (t, J = 7.1 Hz, 1H), 7.50 - 7.37 (m, 1H), 6.94 (s, 1H), 6.89 (s, 1H), 4.89 - 4.63 (m, 1H), 4.35 - 4.13 (m, 1H), 4.01 - 3.78 (m, 4H), 3.43 - 3.19 (m, 4H), 2.37 - 2.15 (m, 2H), 2.12 - 1.82 (m, 6H)
89		434.22	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.99 (s, 1H), 8.73 (d, J = 3.4 Hz, 1H), 8.70 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 8.11 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 7.40 (dd, J = 7.6, 4.8 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 6.90 (s, 1H), 6.30 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.22 (s, 1H), 3.97 - 3.85 (m, 4H), 3.41 - 3.23 (m, 4H), 2.32 - 2.17 (m, 2H), 2.01 - 1.84 (m, 6H)
90		434.22	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.75 (dd, J = 4.4, 1.7 Hz, 2H), 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.62 (dd, J = 4.4, 1.7 Hz, 2H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.33 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.27 - 4.16 (m, 1H), 3.96 - 3.87 (m, 4H), 3.38 - 3.31 (m, 4H), 2.30 - 2.16 (m, 2H), 2.00 - 1.86 (m, 6H)

【表 1 - 3 1】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
91		433.21	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 - 8.58 (m, 1H), 7.77 (dd, J = 5.2, 3.2 Hz, 2H), 7.54 - 7.40 (m, 3H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.23 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.31 - 4.13 (m, 1H), 3.95 - 3.87 (m, 4H), 3.38 - 3.27 (m, 4H), 2.31 - 2.17 (m, 2H), 1.97 - 1.85 (m, 6H)
92		437.24	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.47 (d, J = 8.9 Hz, 1H), 7.00 (d, J = 1.0 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 0.7 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.07 (d, J = 12.3 Hz, 4H), 3.98 - 3.85 (m, 4H), 3.41 - 3.24 (m, 4H), 2.34 - 2.12 (m, 2H), 2.06 - 1.83 (m, 6H)
93		451.21	(methanol-d ₄) δ 8.69 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 7.19 (d, J = 5.0 Hz, 1H), 7.15 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.95 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 4.10 (s, 1H), 3.95 - 3.82 (m, 4H), 3.47 - 3.37 (m, 4H), 2.20 (d, J = 10.1 Hz, 2H), 2.04 - 1.81 (m, 6H)

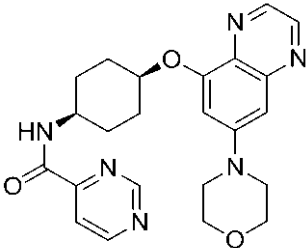
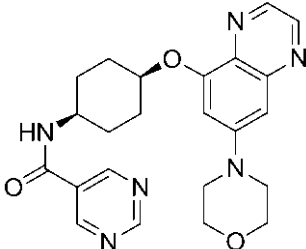
10

20

30

40

【表 1 - 3 3】

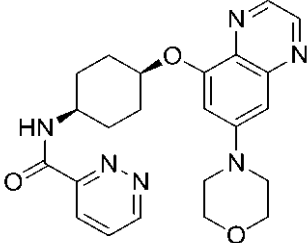
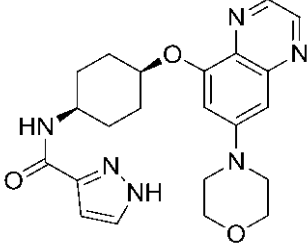
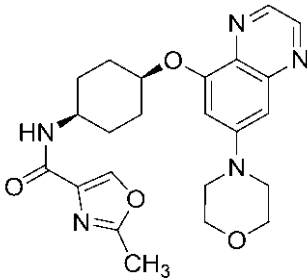
化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
97		435.19	(400 MHz, CDCl ₃) δ 9.25 (d, J = 1.4 Hz, 1H), 8.97 (d, J = 5.0 Hz, 1H), 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.22 - 8.04 (m, 2H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.81 - 4.72 (m, 1H), 4.26 - 4.15 (m, 1H), 3.96 - 3.86 (m, 4H), 3.38 - 3.29 (m, 4H), 2.28 - 2.17 (m, 2H), 2.06 - 1.86 (m, 6H)
98		435.19	(400 MHz, CDCl ₃) δ 9.33 (s, 1H), 9.12 (s, 2H), 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.57 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.44 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.83 (s, 1H), 4.23 (qd, J = 9.2, 4.7 Hz, 1H), 3.96 - 3.87 (m, 4H), 3.38 - 3.30 (m, 4H), 2.32 - 2.18 (m, 2H), 2.01 - 1.88 (m, 6H)

10

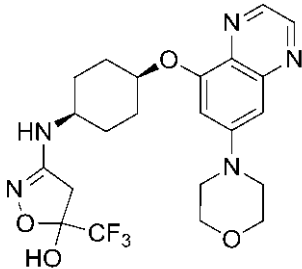
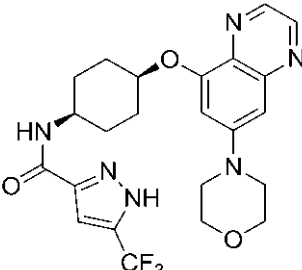
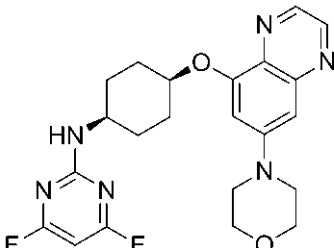
20

30

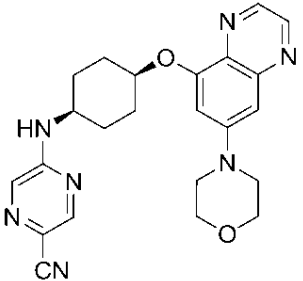
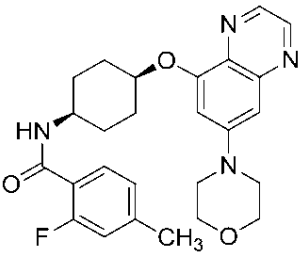
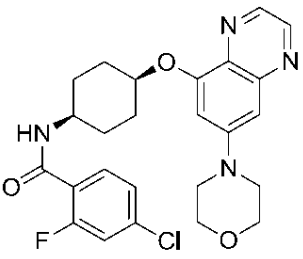
【表 1 - 3 4】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
99		435.19	(400 MHz, CDCl ₃) δ 9.29 (dd, J = 5.0, 1.7 Hz, 1H), 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.33 (dd, J = 8.4, 1.7 Hz, 2H), 7.67 (dd, J = 8.4, 5.0 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.85 (s, 1H), 4.29 - 4.13 (m, 1H), 3.98 - 3.85 (m, 4H), 3.40 - 3.26 (m, 4H), 2.32 - 2.16 (m, 2H), 2.12 - 1.98 (m, 2H), 1.99 - 1.87 (m, 4H)
100		423.13	(400 MHz, CDCl ₃) δ 11.83 (s, 1H), 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.55 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 7.05 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.87 (dd, J = 4.7, 2.3 Hz, 1H), 6.84 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.74 (s, 1H), 4.18 (s, 1H), 3.96 - 3.88 (m, 4H), 3.38 - 3.29 (m, 4H), 2.17 - 2.09 (m, 2H), 1.94 - 1.81 (m, 6H)
101		438.18	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.07 (s, 1H), 7.01 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.88 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.76 (s, 1H), 4.23 - 4.09 (m, 1H), 3.98 - 3.84 (m, 4H), 3.40 - 3.26 (m, 4H), 2.48 (s, 3H), 2.28 - 2.12 (m, 2H), 1.99 - 1.82 (m, 6H)

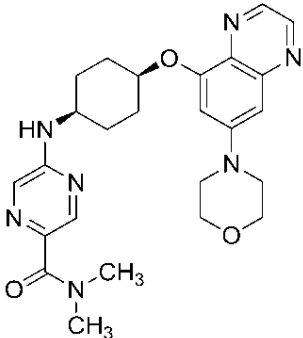
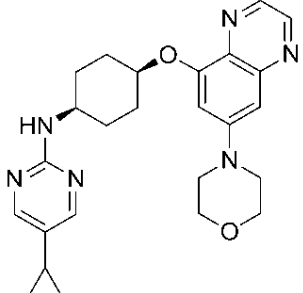
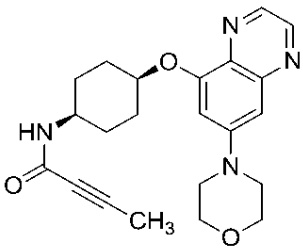
【表 1 - 3 5】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
102		482.36	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.73 (d, J = 5.7 Hz, 1H), 4.18 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 3.93 (dd, J = 5.9, 3.8 Hz, 4H), 3.69 - 3.55 (m, 1H), 3.46 (d, J = 16.5 Hz, 1H), 3.41 - 3.28 (m, 4H), 3.08 (d, J = 16.4 Hz, 1H), 2.17 (d, J = 11.6 Hz, 2H), 2.00 - 1.75 (m, 6H)
103		463.36	(CDCl ₃) δ 8.72 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.99 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.74 (s, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.02 - 3.87 (m, 4H), 3.36 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 2.19 (s, 2H), 2.08 - 1.79 (m, 6H)
104		443.38	(CDCl ₃) δ 8.73 (s, 1H), 8.68 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.99 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.85 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.69 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.76 (s, 1H), 3.84 (dd, J = 5.9, 3.9 Hz, 4H), 3.38 (dd, J = 6.0, 3.9 Hz, 4H), 2.15 (d, J = 11.1 Hz, 2H), 1.96 - 1.67 (m, 6H)

【表 1 - 3 6】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
105		432.4	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.30 (d, J = 1.3 Hz, 1H), 7.89 (d, J = 1.4 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 18.4, 2.5 Hz, 2H), 5.52 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.83 (tt, J = 4.8, 2.7 Hz, 1H), 4.19 - 4.01 (m, 1H), 3.96 - 3.87 (m, 4H), 3.39 - 3.26 (m, 4H), 2.31 - 2.14 (m, 2H), 2.09 - 1.78 (m, 6H)
106		465.14	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.88 (dd, J = 7.4, 2.1 Hz, 1H), 7.02 (dd, J = 11.9, 8.3 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.83 (dd, J = 12.4, 7.6 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.25 (s, 1H), 4.03 - 3.85 (m, 4H), 3.44 - 3.23 (m, 4H), 2.38 (s, 3H), 2.30 - 2.13 (m, 2H), 2.06 - 1.88 (m, 6H)
107		485.12	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.73 - 8.66 (m, 1H), 8.65 - 8.59 (m, 1H), 8.05 (dd, J = 6.6, 2.8 Hz, 1H), 7.46 - 7.36 (m, 1H), 7.08 (dd, J = 11.1, 8.8 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.84 - 6.66 (m, 1H), 4.76 (bs, 1H), 4.22 (bs, 1H), 3.96 - 3.87 (m, 4H), 3.37 - 3.28 (m, 4H), 2.28 - 2.10 (m, 2H), 2.01 - 1.86 (m, 6H)

【表 1 - 3 7】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
108		478.26	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.49 (d, J = 1.4 Hz, 1H), 7.77 (d, J = 1.4 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 16.1, 2.5 Hz, 2H), 5.03 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.81 (td, J = 5.3, 2.6 Hz, 1H), 4.09 - 3.98 (m, 1H), 3.98 - 3.87 (m, 4H), 3.39 - 3.26 (m, 4H), 3.19 (s, 3H), 3.12 (s, 3H), 2.22 (dt, J = 11.2, 4.9 Hz, 2H), 2.02 - 1.82 (m, 6H)
109		447.02	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.10 (d, J = 0.5 Hz, 2H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.13 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.06 - 3.86 (m, 5H), 3.35 (dd, J = 5.9, 3.8 Hz, 4H), 2.27 - 2.14 (m, 2H), 1.92 (d, J = 5.1 Hz, 6H), 1.79 - 1.44 (m, 6H), 1.28 (t, J = 7.1 Hz, 1H), 1.03 - 0.83 (m, 2H), 0.68 - 0.51 (m, 2H)
110		395.19	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 - 8.54 (m, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.06 - 5.78 (m, 1H), 4.79 - 4.68 (m, 1H), 4.11 - 3.96 (m, 1H), 3.96 - 3.86 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.13 (dd, J = 11.0, 5.2 Hz, 2H), 1.94 (s, 3H), 1.90 - 1.78 (m, 6H)

【表 1 - 3 8】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
111		421.19	
112		452.18	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.66 - 8.53 (m, 3H), 7.93 (dd, J = 6.4, 5.0 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.78 (s, 1H), 4.78 (bs, 1H), 4.23 (bs, 1H), 3.97 - 3.85 (m, 4H), 3.38 - 3.27 (m, 4H), 2.30 - 2.15 (m, 2H), 2.02 - 1.86 (m, 6H)
113		439.24	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (s, 1H), 8.60 (s, 1H), 6.94 (s, 1H), 6.87 (s, 1H), 5.99 (d, J = 6.8 Hz, 1H), 4.75 (bs, 1H), 4.03 (bs, 1H), 3.99 - 3.83 (m, 4H), 3.43 - 3.21 (m, 4H), 2.33 (s, 1H), 2.24 - 2.04 (m, 2H), 1.94 - 1.74 (m, 6H), 1.56 (s, 6H)

10

20

30

【表 1 - 3 9】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
114		452.15	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.40 (dt, J = 4.3, 1.3 Hz, 1H), 8.01 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 7.58 - 7.52 (m, 1H), 7.51 - 7.46 (m, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.74 (s, 1H), 4.29 - 4.17 (m, 1H), 3.97 - 3.88 (m, 4H), 3.39 - 3.30 (m, 4H), 2.25 - 2.16 (m, 2H), 2.06 - 1.88 (m, 6H)
115		451.16	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.09 (dd, J = 7.9, 6.1 Hz, 1H), 7.47 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.13 (dd, J = 11.8, 7.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.82 (s, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.24 (s, 1H), 3.96 - 3.88 (m, 4H), 3.38 - 3.30 (m, 4H), 2.27 - 2.14 (m, 2H), 2.01 - 1.87 (m, 6H)
116		473.17	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.83 (d, J = 2.7 Hz, 1H), 7.19 - 6.93 (m, 4H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.75 (s, 1H), 4.21 (s, 1H), 3.95 - 3.89 (m, 4H), 3.38 - 3.30 (m, 4H), 2.26 - 2.13 (m, 2H), 2.03 - 1.86 (m, 6H)

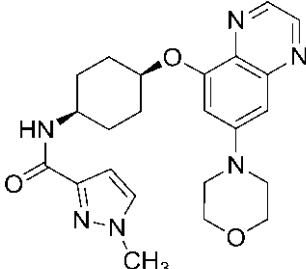
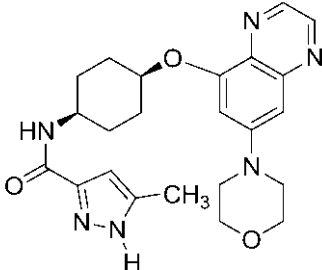
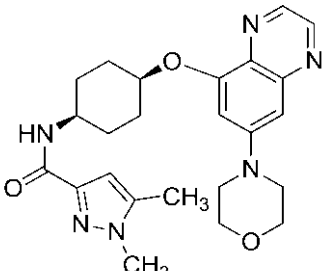
10

20

30

40

【表 1 - 4 0】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
117		437.17	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.35 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 6.99 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.88 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.78 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.73 (s, 1H), 4.26 - 4.14 (m, 1H), 3.96 - 3.87 (m, 7H), 3.36 - 3.29 (m, 4H), 2.23 - 2.12 (m, 2H), 2.01 - 1.82 (m, 6H)
118		437.21	(400 MHz, CDCl ₃) δ 10.00 (s, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.93 (s, 1H), 6.87 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.81 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.50 (s, 1H), 4.69 (s, 1H), 4.15 - 4.05 (m, 1H), 3.92 - 3.77 (m, 4H), 3.35 - 3.19 (m, 4H), 2.27 (d, J = 0.5 Hz, 3H), 2.18 - 2.04 (m, 2H), 1.95 - 1.74 (m, 6H)
119		451.25	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (s, 1H), 8.63 (s, 1H), 6.99 - 6.50 (m, 3H), 4.76 (d, J = 20.7 Hz, 1H), 4.19 (s, 1H), 4.13 - 3.74 (m, 7H), 3.41 - 3.21 (m, 4H), 2.37 - 2.08 (m, 5H), 2.03 - 1.79 (m, 6H)

10

20

30

40

【表 1 - 4 1】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR（別段の指定がない限り 300 MHz） NMRピークは、δ値として示す
120	 <chem>Cc1cc(C(F)(F)F)n[nH]1C(=O)N[C@H]2CCCC[C@@H]2Oc3ccc4ncnc4c3</chem>	491.18	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.73 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.58 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.93 (s, 1H), 6.88 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.53 (s, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.24 - 4.15 (m, 1H), 3.96 - 3.86 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.22 - 2.15 (m, 2H), 1.94 - 1.82 (m, 6H)
121	 <chem>Cn1cccc1C(=O)N[C@H]2CCCC[C@@H]2Oc3ccc4ncnc4c3</chem>	436.18	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.71 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 6.54 (dd, J = 3.9, 1.7 Hz, 1H), 6.09 (dd, J = 3.9, 2.6 Hz, 1H), 5.94 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.76 (s, 1H), 4.11 (s, 1H), 3.98 - 3.86 (m, 7H), 3.39 - 3.27 (m, 4H), 2.27 - 2.14 (m, 2H), 1.95 - 1.83 (m, 6H)
122	 <chem>c1cc([nH])sc1C(=O)N[C@H]2CCCC[C@@H]2Oc3ccc4ncnc4c3</chem>	440.18	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (s, 1H), 8.61 (s, 1H), 8.51 (s, 1H), 7.50 (s, 1H), 6.95 (s, 1H), 6.89 (s, 1H), 6.16 (d, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.18 (s, 1H), 4.01 - 3.78 (m, 4H), 3.44 - 3.23 (m, 4H), 2.33 - 2.16 (m, 2H), 1.91 (d, J = 25.1 Hz, 6H)

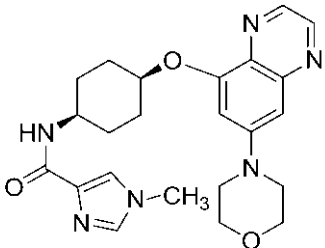
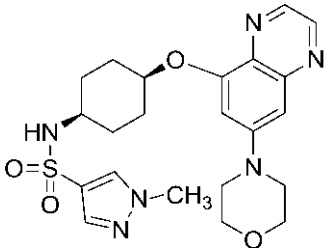
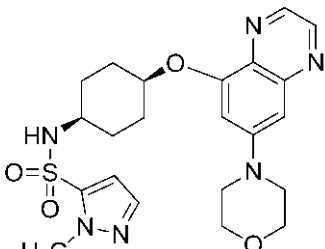
10

20

30

40

【表 1 - 4 2】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
123		437.21	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.50 (d, J = 1.2 Hz, 1H), 7.36 (d, J = 1.0 Hz, 1H), 7.16 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.88 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.20 - 4.09 (m, 1H), 3.95 - 3.87 (m, 4H), 3.73 (s, 3H), 3.38 - 3.28 (m, 4H), 2.25 - 2.14 (m, 2H), 2.00 - 1.82 (m, 6H)
124		473.2	(CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.58 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.85 - 7.72 (m, 2H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.89 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 4.71 (dq, J = 5.5, 2.7 Hz, 1H), 4.00 - 3.85 (m, 7H), 3.47 - 3.27 (m, 5H), 2.19 - 2.07 (m, 2H), 1.97 - 1.65 (m, 6H)
125		473.25	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.55 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.46 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.81 (dd, J = 22.5, 2.3 Hz, 2H), 5.65 - 5.56 (m, 1H), 4.73 (p, J = 2.5 Hz, 1H), 4.10 (s, 3H), 3.95 - 3.85 (m, 4H), 3.47 (d, J = 15.3 Hz, 1H), 3.36 - 3.27 (m, 4H), 2.23 - 2.08 (m, 2H), 1.98 - 1.62 (m, 6H)

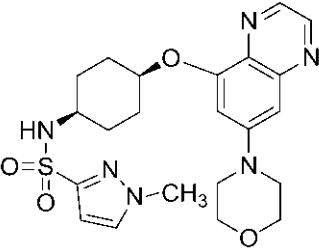
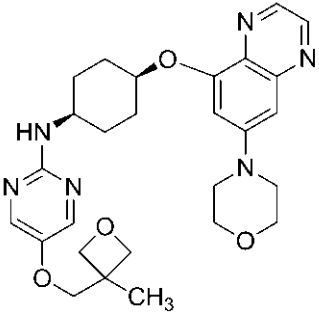
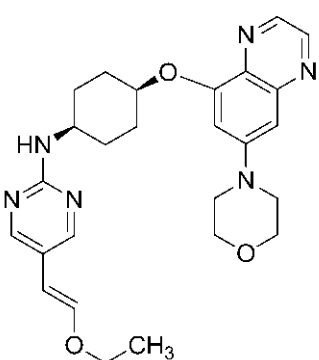
10

20

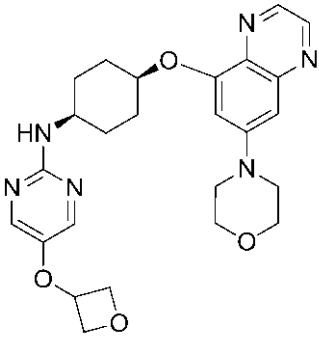
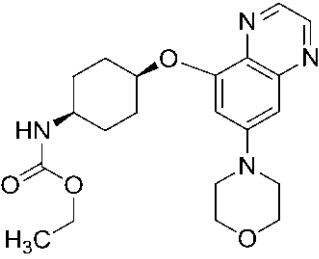
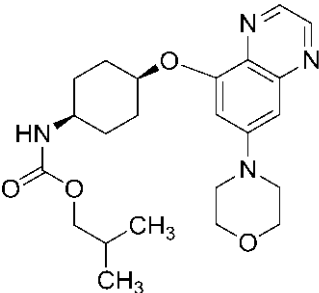
30

40

【表 1 - 4 3】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
126		473.25	(CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.58 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.41 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.69 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.95 (d, J = 7.3 Hz, 1H), 4.72 (h, J = 2.6 Hz, 1H), 4.02 - 3.82 (m, 7H), 3.52 (d, J = 9.0 Hz, 1H), 3.37 - 3.27 (m, 4H), 2.12 (dt, J = 16.1, 5.7 Hz, 2H), 1.97 - 1.65 (m, 6H)
127		507.2	(CDCl ₃) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.01 (s, 2H), 6.88 (s, 1H), 6.83 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.93 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.72 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 4.53 (d, J = 6.0 Hz, 2H), 4.38 (d, J = 6.0 Hz, 2H), 3.89 - 3.75 (m, 4H), 3.35 - 3.13 (m, 4H), 2.10 (s, 3H), 1.95 - 1.72 (m, 6H), 1.36 (s, 3H)
128		477.2	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.56 (s, 2H), 7.04 - 6.87 (m, 2H), 6.19 (d, J = 6.8 Hz, 1H), 5.15 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 5.01 (d, J = 6.8 Hz, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.11 - 3.85 (m, 6H), 3.43 - 3.22 (m, 4H), 2.21 (d, J = 9.5 Hz, 2H), 1.94 (t, J = 3.9 Hz, 6H), 1.36 (t, J = 7.1 Hz, 3H)

【表 1 - 4 4】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、δ 値として示す
129		478.93	(CDCl ₃) δ 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.81 (s, 2H), 6.91 - 6.75 (m, 2H), 5.08 - 4.89 (m, 2H), 4.89 - 4.77 (m, 2H), 4.67 (ddd, J = 8.2, 4.7, 1.9 Hz, 3H), 3.94 - 3.72 (m, 5H), 3.34 - 3.17 (m, 4H), 2.21 - 2.00 (m, 2H), 1.91 - 1.69 (m, 6H)
130		401.24	(400 MHz, methanol-d ₄) δ 8.69 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.55 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.10 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.85 - 4.82 (m, 1H), 4.07 (q, J = 6.9 Hz, 2H), 3.95 - 3.81 (m, 4H), 3.64 - 3.53 (m, 1H), 3.42 - 3.35 (m, 4H), 2.20 - 2.02 (m, 2H), 1.94 - 1.66 (m, 6H), 1.24 (t, J = 7.1 Hz, 3H)
131		429.21	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.73 - 8.65 (m, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.90 - 4.58 (m, 2H), 3.97 - 3.88 (m, 4H), 3.83 (d, J = 6.3 Hz, 2H), 3.72 (s, 1H), 3.39 - 3.27 (m, 4H), 2.20 - 2.06 (m, 2H), 1.95 - 1.76 (m, 7H), 0.93 (d, J = 6.7 Hz, 6H)

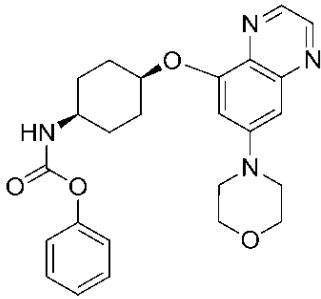
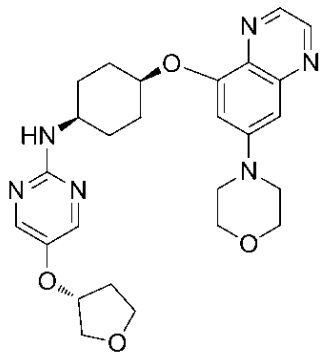
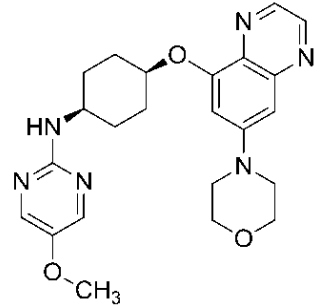
10

20

30

40

【表 1 - 4 5】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
132		449.16	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 7.36 (t, J = 7.6 Hz, 2H), 7.19 (t, J = 7.3 Hz, 1H), 7.13 (d, J = 7.7 Hz, 2H), 6.96 (s, 1H), 6.89 (s, 1H), 5.12 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 4.77 (s, 1H), 3.98 - 3.85 (m, 4H), 3.79 (s, 1H), 3.39 - 3.28 (m, 4H), 2.29 - 2.11 (m, 2H), 1.98 - 1.79 (m, 6H)
133		493.25	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.04 (s, 2H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.7 Hz, 1H), 4.79 (s, 2H), 4.07 - 3.83 (m, 6H), 3.42 - 3.25 (m, 4H), 2.29 - 2.02 (m, 2H), 1.92 (d, J = 4.6 Hz, 6H), 1.36 - 1.12 (m, 3H)
134		437.3	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.07 (s, 2H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 4.99 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.81 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 3.93 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 5H), 3.81 (s, 3H), 3.45 - 3.24 (m, 4H), 2.21 (d, J = 8.6 Hz, 2H), 2.05 - 1.78 (m, 6H)

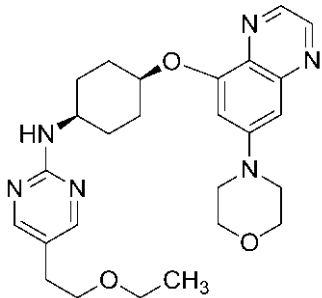
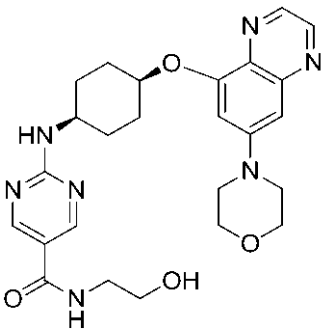
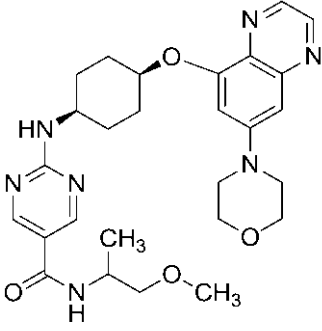
10

20

30

40

【表 1 - 4 6】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
135		479.2	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.19 (s, 2H), 6.96 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.12 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.81 (d, J = 5.6 Hz, 1H), 4.09 - 3.85 (m, 5H), 3.63 - 3.41 (m, 4H), 3.43 - 3.26 (m, 4H), 2.69 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 2.33 - 2.13 (m, 2H), 2.03 - 1.83 (m, 6H), 1.21 (t, J = 7.0 Hz, 3H)
136		494.24	(methanol-d ₄) δ 8.77 - 8.65 (m, 3H), 8.56 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.11 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.92 (s, 1H), 4.02 (dd, J = 8.4, 4.3 Hz, 1H), 3.93 - 3.83 (m, 4H), 3.69 (t, J = 5.7 Hz, 2H), 3.47 (t, J = 5.8 Hz, 2H), 3.42 - 3.33 (m, 5H), 2.26 - 2.15 (m, 2H), 2.08 - 1.78 (m, 6H)
137		522.23	(CDCl ₃) δ 8.73 - 8.58 (m, 4H), 7.01 - 6.87 (m, 2H), 6.12 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 5.57 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.39 - 4.28 (m, 1H), 4.10 (d, J = 6.9 Hz, 1H), 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.54 - 3.29 (m, 9H), 2.21 (d, J = 9.9 Hz, 2H), 2.08 - 1.84 (m, 6H), 1.28 (d, J = 6.8 Hz, 3H)

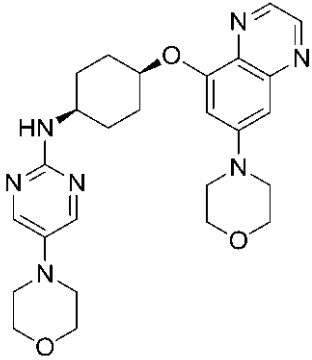
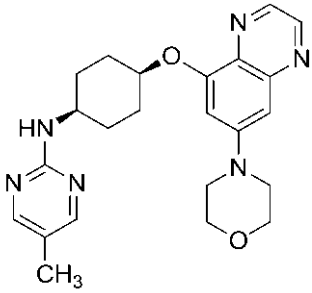
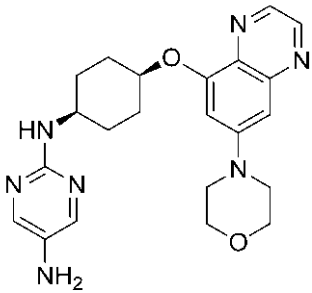
10

20

30

40

【表 1 - 4 8】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
141		492.17	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.09 (s, 2H), 7.01 - 6.86 (m, 2H), 4.88 - 4.75 (m, 1H), 4.08 - 3.80 (m, 9H), 3.43 - 3.27 (m, 4H), 3.09 - 2.96 (m, 4H), 2.31 - 2.15 (m, 2H), 2.05 - 1.81 (m, 6H)
142		421.2	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.14 (d, J = 0.8 Hz, 2H), 7.01 - 6.90 (m, 2H), 4.81 (td, J = 5.6, 2.7 Hz, 1H), 4.08 - 3.84 (m, 5H), 3.43 - 3.26 (m, 4H), 2.25 - 2.10 (m, 5H), 2.02 - 1.83 (m, 6H)
143		422.25	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.02 (s, 2H), 6.95 (dd, J = 11.8, 2.5 Hz, 2H), 4.81 (s, 2H), 4.08 - 3.85 (m, 5H), 3.41 - 3.30 (m, 4H), 2.20 (d, J = 10.1 Hz, 2H), 1.95 (d, J = 19.7 Hz, 6H), 1H NMR (300 MHz, Methanol-d ₄) ? 8.68 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.56 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 7.93 (s, 2H), 7.11 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.88 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 3.96 - 3.71 (m, 5H), 3.37 (dd, J = 5.8, 3.9 Hz, 4H), 2.27 - 2.04 (m, 2H), 1.98 - 1.74 (m, 6H). [2]

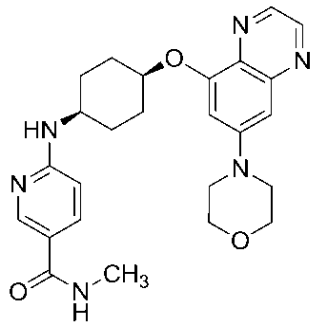
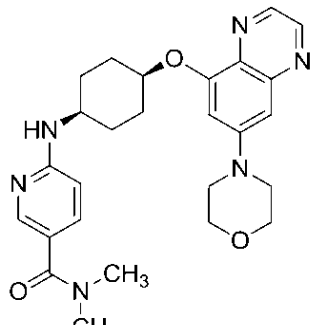
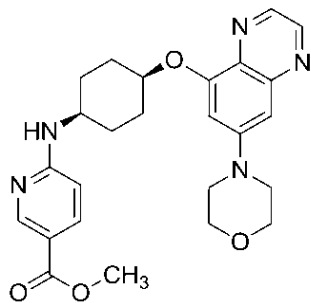
10

20

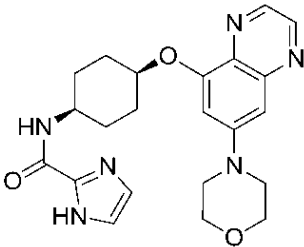
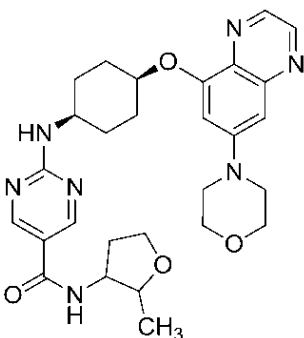
30

40

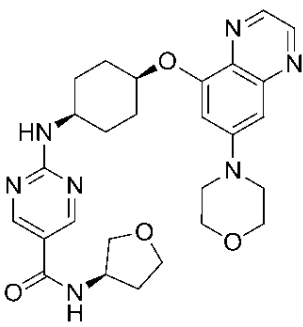
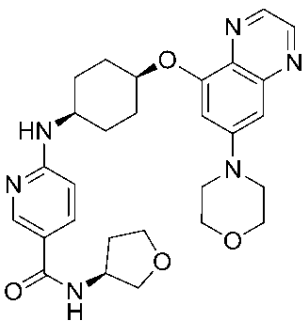
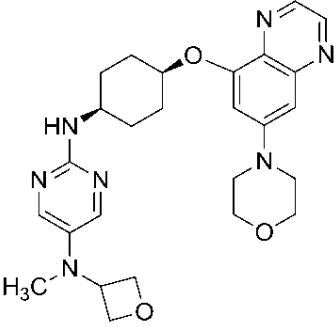
【表 1 - 4 9】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
144		463.2	<p>(400 MHz, CDCl₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.47 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 7.84 (dd, J = 8.7, 2.4 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.37 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 5.94 (d, J = 3.9 Hz, 1H), 4.92 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.79 (s, 1H), 3.98 - 3.84 (m, 5H), 3.39 - 3.26 (m, 4H), 2.98 (d, J = 4.8 Hz, 3H), 2.27 - 2.12 (m, 2H), 1.97 - 1.83 (m, 6H)</p>
145		477.2	<p>(400 MHz, CDCl₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.20 (s, 1H), 7.61 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.43 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.81 (s, 1H), 3.98 - 3.81 (m, 5H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 3.09 (s, 6H), 2.27 - 2.15 (m, 2H), 1.99 - 1.83 (m, 6H)</p>
146		464.17	<p>(CDCl₃) δ 8.76 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.99 (dd, J = 8.8, 2.2 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.38 (d, J = 8.9 Hz, 1H), 5.13 (s, 1H), 4.82 (s, 1H), 4.11 - 3.73 (m, 8H), 3.44 - 3.27 (m, 4H), 2.30 - 2.17 (m, 2H), 2.07 - 1.79 (m, 6H)</p>

【表 1 - 5 0】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
147		423.2	(400 MHz, CDCl ₃) δ 10.77 - 10.42 (m, 1H), 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.30 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 7.15 (d, J = 5.7 Hz, 2H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.83 (s, 1H), 4.19 - 4.05 (m, 1H), 3.99 - 3.84 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.31 - 2.15 (m, 2H), 2.06 - 1.93 (m, 2H), 1.93 - 1.79 (m, 4H)
148		534.28	(DMSO-d ₆) δ 8.73 (d, J = 1.5 Hz, 3H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.12 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 7.84 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 7.14 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.84 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.93 (s, 1H), 4.51 (ddd, J = 13.3, 8.2, 5.2 Hz, 1H), 4.01 - 3.74 (m, 6H), 3.55 (q, J = 8.0 Hz, 1H), 3.38 - 3.27 (m, 4H), 2.33 - 2.15 (m, 1H), 2.06 (d, J = 11.1 Hz, 2H), 1.96 - 1.67 (m, 8H), 1.02 (d, J = 6.3 Hz, 3H)

【表 1 - 5 1】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
149		520.33	(DMSO-d ₆) δ 8.76 - 8.67 (m, 3H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.32 (d, J = 6.5 Hz, 1H), 7.84 (d, J = 7.3 Hz, 1H), 7.14 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.84 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.93 (s, 1H), 4.49 - 4.37 (m, 1H), 3.96 - 3.63 (m, 9H), 3.55 (dd, J = 8.9, 4.2 Hz, 1H), 3.38 - 3.27 (m, 4H), 2.23 - 2.00 (m, 4H), 1.95 - 1.71 (m, 6H)
150		520.33	(DMSO-d ₆) δ 8.76 - 8.67 (m, 3H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.32 (d, J = 6.5 Hz, 1H), 7.84 (d, J = 7.3 Hz, 1H), 7.14 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.84 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.93 (s, 1H), 4.49 - 4.37 (m, 1H), 3.96 - 3.63 (m, 9H), 3.55 (dd, J = 8.9, 4.2 Hz, 1H), 3.38 - 3.27 (m, 4H), 2.23 - 2.00 (m, 4H), 1.95 - 1.71 (m, 6H)
151			(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.93 (s, 2H), 7.02 - 6.90 (m, 2H), 4.82 (t, J = 6.7 Hz, 3H), 4.66 (t, J = 6.4 Hz, 2H), 4.14 (q, J = 7.1 Hz, 1H), 4.08 - 3.89 (m, 5H), 3.42 - 3.25 (m, 4H), 2.80 (s, 3H), 2.22 (s, 2H), 2.05 - 1.79 (m, 6H)

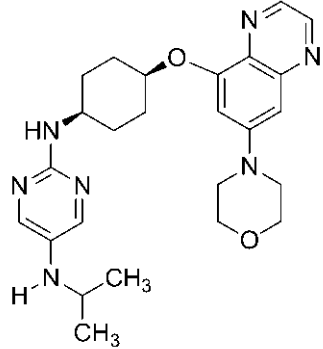
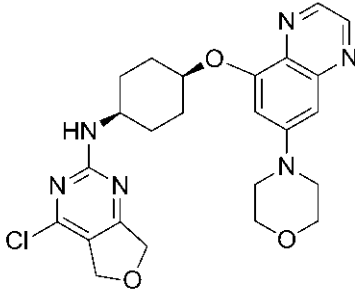
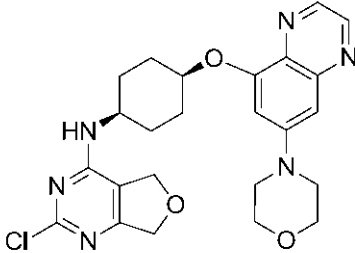
10

20

30

40

【表 1 - 5 2】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
152		464.21	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.94 (s, 2H), 6.99 - 6.90 (m, 2H), 4.82 (s, 1H), 4.05 - 3.87 (m, 5H), 3.44 (q, J = 6.3 Hz, 1H), 3.39 - 3.26 (m, 4H), 2.23 (d, J = 12.4 Hz, 2H), 2.03 - 1.82 (m, 6H), 1.23 (d, J = 6.3 Hz, 6H)
153		483.1	(CDCl ₃) δ 8.64 - 8.49 (m, 2H), 6.93 (d, J = 3.9 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.27 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.94 (t, J = 1.9 Hz, 2H), 4.81 (t, J = 1.9 Hz, 2H), 4.72 (s, 1H), 3.96 (s, 1H), 3.89 - 3.78 (m, 4H), 3.37 - 3.25 (m, 4H), 2.11 (s, 2H), 1.82 (d, J = 5.1 Hz, 6H)
154		483.1	(CDCl ₃) δ 8.68 (dd, J = 8.7, 2.0 Hz, 1H), 8.56 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.84 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.92 (t, J = 2.7 Hz, 2H), 4.82 (t, J = 2.7 Hz, 2H), 4.75 (s, 1H), 3.94 - 3.81 (m, 4H), 3.35 - 3.15 (m, 4H), 2.14 (d, J = 12.0 Hz, 2H), 1.82 (d, J = 17.3 Hz, 6H)

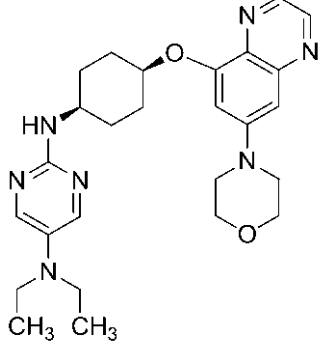
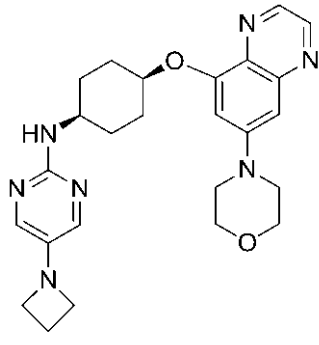
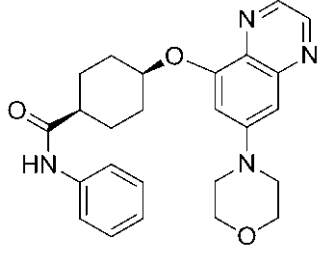
10

20

30

40

【表 1 - 5 3】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
155		478.3	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.02 - 6.89 (m, 2H), 4.83 (s, 1H), 4.08 - 3.87 (m, 5H), 3.44 - 3.33 (m, 4H), 3.27 (d, J = 26.0 Hz, 4H), 2.23 (d, J = 9.8 Hz, 2H), 2.05 - 1.80 (m, 6H), 1.14 (s, 6H)
156		462.23	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.72 (s, 2H), 6.96 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.03 (s, 1H), 4.80 (q, J = 4.4 Hz, 1H), 4.03 - 3.89 (m, 4H), 3.83 (t, J = 7.1 Hz, 4H), 3.44 - 3.29 (m, 4H), 2.41 (dq, J = 8.6, 7.1 Hz, 2H), 2.20 (q, J = 5.9 Hz, 2H), 1.99 - 1.81 (m, 6H)
157		433.2	

10

20

30

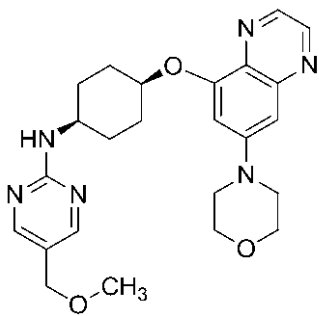
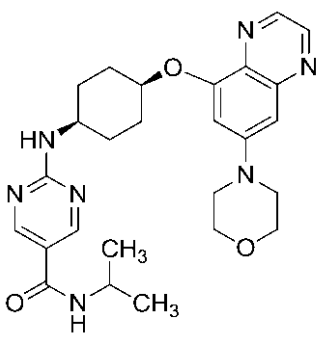
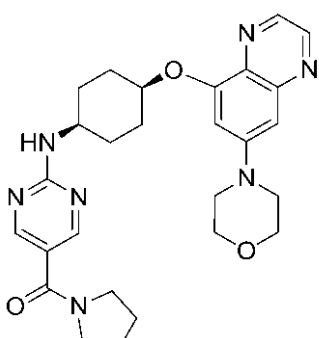
【表 1 - 5 4】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMRピークは、δ 値として示す
158			(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.41 (s, 2H), 6.97 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.32 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.82 (s, 1H), 4.07 (s, 1H), 4.00 - 3.88 (m, 4H), 3.43 - 3.29 (m, 4H), 2.22 (s, 2H), 2.06 - 1.81 (m, 6H)
159		434.24	
160		436.2	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.05 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 7.46 (dd, J = 8.5, 2.3 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.39 (d, J = 8.6 Hz, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.53 (s, 2H), 3.95 - 3.87 (m, 5H), 3.36 - 3.32 (m, 4H), 2.25 - 2.12 (m, 2H), 1.90 (d, J = 4.4 Hz, 6H)

20

30

【表 1 - 5 5】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
161		451.28	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.26 (s, 2H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 5.23 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.80 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 4.26 (s, 2H), 4.03 (s, 1H), 3.97 - 3.85 (m, 4H), 3.44 - 3.21 (m, 7H), 2.32 - 2.09 (m, 2H), 2.06 - 1.70 (m, 6H)
162		492.29	(DMSO-d ₆) δ 8.81 - 8.64 (m, 3H), 8.58 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.99 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 7.76 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 7.14 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.84 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.92 (s, 1H), 3.98 - 3.84 (m, 1H), 4.05 (dq, J = 13.5, 6.7 Hz, 1H), 3.79 (d, J = 9.6 Hz, 4H), 3.32 (d, J = 8.2 Hz, 4H), 2.06 (d, J = 11.8 Hz, 2H), 1.96 - 1.66 (m, 6H), 1.14 (d, J = 6.6 Hz, 6H)
163		504.26	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.65 - 8.53 (m, 3H), 6.93 (dd, J = 14.6, 2.5 Hz, 2H), 5.48 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.81 (d, J = 6.1 Hz, 1H), 4.19 - 4.03 (m, 1H), 3.92 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 4H), 3.65 - 3.54 (m, 4H), 3.34 (dd, J = 5.9, 3.7 Hz, 4H), 2.27 - 2.15 (m, 2H), 2.08 - 1.81 (m, 10H)

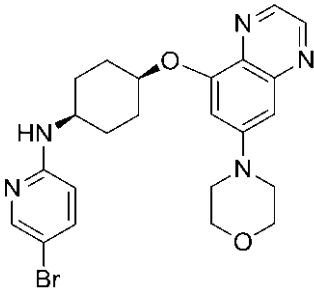
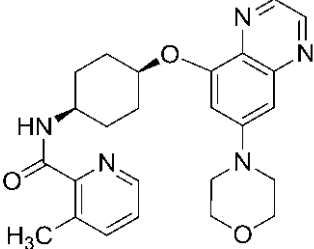
10

20

30

40

【表 1 - 5 6】

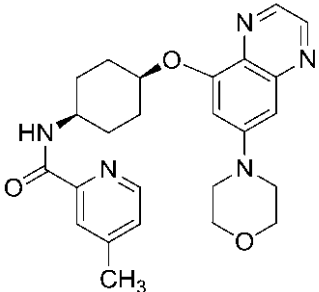
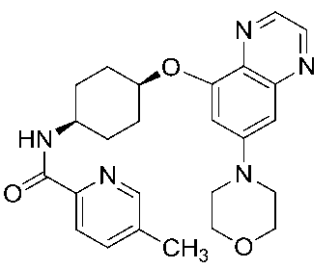
化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
164		484.12	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.52 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.01 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 7.35 (dd, J = 8.8, 2.5 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.80 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.20 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 4.68 (s, 1H), 4.47 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 3.92 - 3.80 (m, 4H), 3.74 (s, 1H), 3.34 - 3.14 (m, 4H), 2.18 - 2.02 (m, 2H), 1.94 - 1.67 (m, 6H)
165		448.15	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.44 - 8.37 (m, 1H), 8.33 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.58 (dd, J = 7.8, 0.9 Hz, 1H), 7.31 (dd, J = 7.7, 4.6 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.75 (s, 1H), 4.25 - 4.10 (m, 1H), 3.97 - 3.85 (m, 4H), 3.41 - 3.26 (m, 4H), 2.75 (s, 3H), 2.29 - 2.13 (m, 2H), 2.06 - 1.85 (m, 6H)

10

20

30

【表 1 - 5 7】

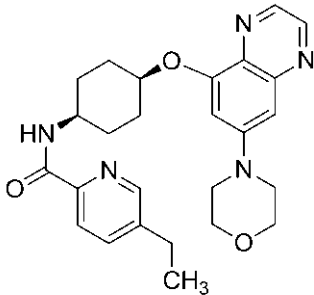
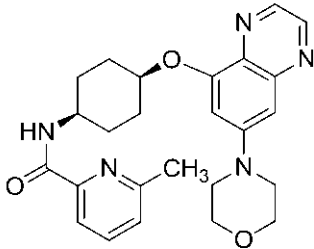
化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
166		448.19	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.41 (d, J = 4.5 Hz, 1H), 8.21 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 8.08 - 7.98 (m, 1H), 7.25 - 7.22 (m, 1H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.76 (s, 1H), 4.27 - 4.15 (m, 1H), 3.98 - 3.86 (m, 4H), 3.40 - 3.29 (m, 4H), 2.43 (s, 3H), 2.29 - 2.16 (m, 2H), 2.07 - 1.86 (m, 6H)
167		448.19	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.37 (dd, J = 1.4, 0.7 Hz, 1H), 8.16 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 8.09 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.66 - 7.61 (m, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.75 (s, 1H), 4.29 - 4.16 (m, 1H), 3.97 - 3.86 (m, 4H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.41 (s, 3H), 2.28 - 2.15 (m, 2H), 2.04 - 1.84 (m, 6H)

10

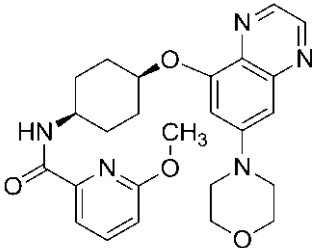
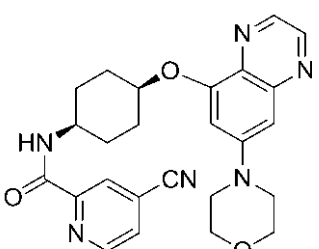
20

30

【表 1 - 5 8】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
168		462.16	<p>(400 MHz, CDCl₃) δ 8.69 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.39 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 8.17 (d, J = 8.6 Hz, 1H), 8.11 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.66 (dd, J = 7.9, 2.0 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.76 (s, 1H), 4.31 - 4.14 (m, 1H), 4.00 - 3.85 (m, 4H), 3.42 - 3.25 (m, 4H), 2.73 (q, J = 7.6 Hz, 2H), 2.30 - 2.14 (m, 2H), 1.99 (ddd, J = 34.6, 19.6, 10.3 Hz, 7H), 1.29 (t, J = 7.6 Hz, 3H)</p>
169		448.19	<p>(400 MHz, CDCl₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.24 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 8.01 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 7.72 (t, J = 7.7 Hz, 1H), 7.27 (d, J = 6.6 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.82 - 4.68 (m, 1H), 4.27 - 4.13 (m, 1H), 3.98 - 3.86 (m, 4H), 3.41 - 3.28 (m, 4H), 2.60 (s, 3H), 2.30 - 2.18 (m, 2H), 2.09 - 1.88 (m, 6H)</p>

【表 1 - 5 9】

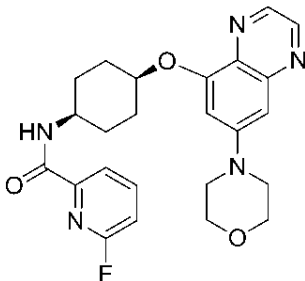
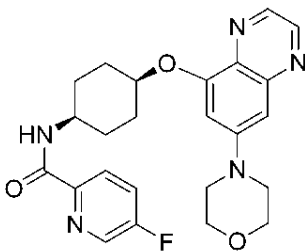
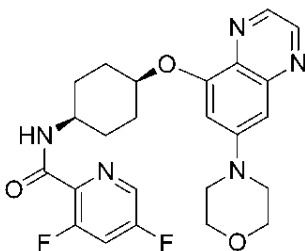
化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
170		464.17	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.90 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 7.83 - 7.78 (m, 1H), 7.76 - 7.69 (m, 1H), 6.96 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.94 - 6.86 (m, 2H), 4.77 (s, 1H), 4.17 (s, 1H), 4.00 (s, 3H), 3.95 - 3.86 (m, 4H), 3.40 - 3.29 (m, 4H), 2.30 - 2.17 (m, 2H), 2.06 - 1.88 (m, 6H)
171		459.17	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.76 (dd, J = 4.9, 0.8 Hz, 1H), 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.48 - 8.38 (m, 1H), 8.09 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.67 (dd, J = 4.9, 1.6 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.76 (s, 1H), 4.31 - 4.14 (m, 1H), 4.01 - 3.83 (m, 4H), 3.43 - 3.26 (m, 4H), 2.31 - 2.15 (m, 2H), 2.08 - 1.87 (m, 6H)

10

20

30

【表 1 - 6 0】

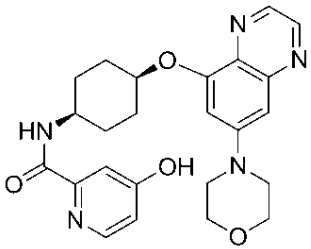
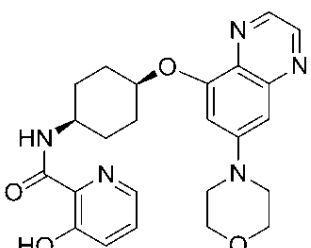
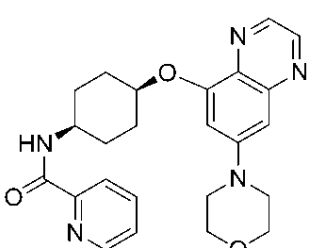
化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、δ 値として示す
172		452.22	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.11 (dd, J = 7.4, 1.4 Hz, 1H), 7.96 (dd, J = 15.6, 7.7 Hz, 1H), 7.82 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 7.09 (dd, J = 8.1, 1.8 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.26 - 4.09 (m, 1H), 3.99 - 3.86 (m, 4H), 3.41 - 3.25 (m, 4H), 2.31 - 2.17 (m, 2H), 2.05 - 1.86 (m, 6H)
173		452.22	
174		470.22	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.30 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 7.80 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 7.32 (ddd, J = 10.3, 8.1, 2.3 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.74 (s, 1H), 4.27 - 4.15 (m, 1H), 4.00 - 3.86 (m, 4H), 3.41 - 3.27 (m, 4H), 2.27 - 2.13 (m, 2H), 2.08 - 1.86 (m, 6H)

20

30

40

【表 1 - 6 1】

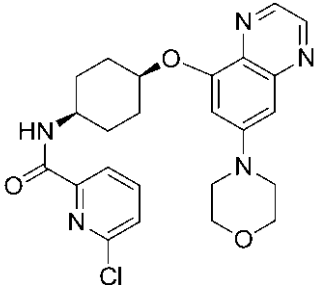
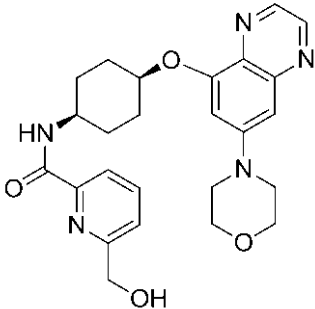
化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
175		450.13	
176		450.2	(400 MHz, CDCl ₃) δ 12.21 (s, 1H), 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.17 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 8.07 (dd, J = 4.2, 1.5 Hz, 1H), 7.33 (ddd, J = 10.0, 8.5, 2.9 Hz, 2H), 6.97 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.83 - 4.74 (m, 1H), 4.24 - 4.11 (m, 1H), 3.99 - 3.86 (m, 4H), 3.41 - 3.26 (m, 4H), 2.30 - 2.18 (m, 2H), 2.08 - 1.87 (m, 6H)
177		450.17	(400 MHz, CDCl ₃) δ 11.13 (s, 1H), 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.64 - 7.39 (m, 2H), 7.07 (d, J = 6.8 Hz, 1H), 7.02 - 6.79 (m, 3H), 4.76 (s, 1H), 4.32 - 4.15 (m, 1H), 3.96 - 3.85 (m, 4H), 3.42 - 3.24 (m, 4H), 2.39 - 2.14 (m, 2H), 2.10 - 1.82 (m, 6H)

10

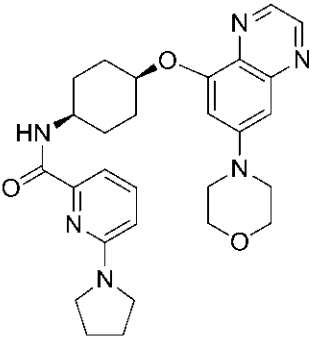
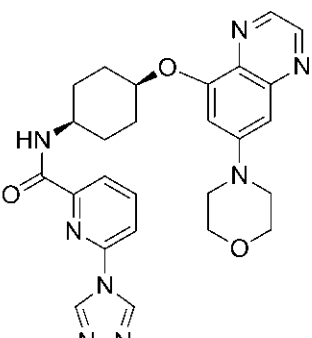
20

30

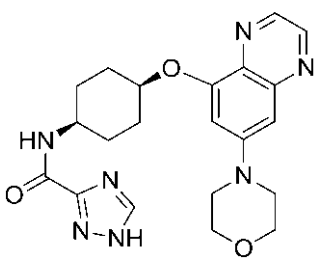
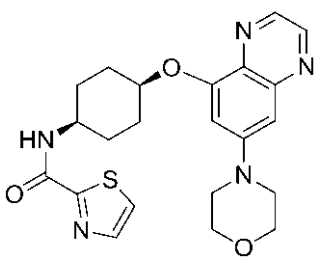
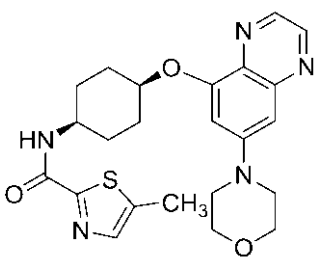
【表 1 - 6 2】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
178		468.17	<p>(400 MHz, CDCl₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.14 (dd, J = 7.6, 0.7 Hz, 1H), 7.91 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.81 (t, J = 7.8 Hz, 1H), 7.46 (dd, J = 7.9, 0.7 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.24 - 4.08 (m, 1H), 3.99 - 3.83 (m, 4H), 3.41 - 3.26 (m, 4H), 2.33 - 2.18 (m, 2H), 2.11 - 1.98 (m, 2H), 1.98 - 1.87 (m, 4H)</p>
179		464.28	<p>(400 MHz, CDCl₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.13 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 8.02 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 7.86 (t, J = 7.7 Hz, 1H), 7.48 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.85 (s, 2H), 4.79 (s, 1H), 4.28 - 4.15 (m, 1H), 4.00 - 3.87 (m, 4H), 3.41 - 3.27 (m, 4H), 2.88 (s, 1H), 2.33 - 2.16 (m, 2H), 2.07 - 1.88 (m, 6H)</p>

【表 1 - 6 3】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
180		503.27	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.16 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 7.56 (dd, J = 8.4, 7.3 Hz, 1H), 7.43 (d, J = 6.7 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.50 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.74 (s, 1H), 4.21 - 4.07 (m, 1H), 3.97 - 3.86 (m, 4H), 3.54 - 3.48 (m, 4H), 3.40 - 3.29 (m, 4H), 2.26 - 2.14 (m, 2H), 2.07 - 1.88 (m, 10H)
181		501.25	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.91 (s, 2H), 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.30 (dd, J = 7.7, 0.7 Hz, 1H), 8.11 (t, J = 7.9 Hz, 1H), 7.74 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 7.57 (dd, J = 8.0, 0.7 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.82 (s, 1H), 4.27 - 4.11 (m, 1H), 3.99 - 3.85 (m, 4H), 3.42 - 3.27 (m, 4H), 2.34 - 2.20 (m, 2H), 2.12 - 2.00 (m, 2H), 2.00 - 1.84 (m, 4H)

【表 1 - 6 4】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
182		424.21	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.15 (s, 1H), 7.43 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.82 (s, 1H), 4.24 - 4.13 (m, 1H), 3.98 - 3.86 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.30 - 2.16 (m, 2H), 2.05 - 1.78 (m, 6H)
183		440.12	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.86 (d, J = 3.1 Hz, 1H), 7.57 (d, J = 3.1 Hz, 1H), 7.38 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.25 - 4.09 (m, 1H), 3.97 - 3.88 (m, 4H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.28 - 2.17 (m, 2H), 2.07 - 1.96 (m, 2H), 1.96 - 1.85 (m, 4H)
184		454.09	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.50 (d, J = 1.1 Hz, 1H), 7.28 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.23 - 4.07 (m, 1H), 3.99 - 3.87 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.53 (d, J = 1.0 Hz, 3H), 2.28 - 2.14 (m, 2H), 2.04 - 1.95 (m, 2H), 1.95 - 1.84 (m, 4H)

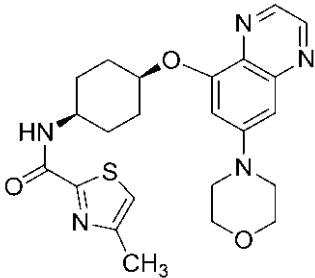
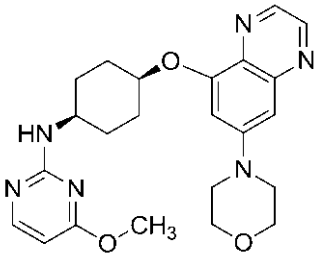
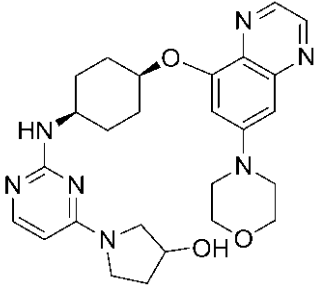
10

20

30

40

【表 1 - 6 5】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
185		454.13	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (t, J = 5.6 Hz, 1H), 8.61 (dd, J = 12.5, 1.9 Hz, 1H), 7.35 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.11 (d, J = 0.9 Hz, 1H), 7.01 - 6.92 (m, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.85 - 4.70 (m, 1H), 4.26 - 4.11 (m, 1H), 3.90 (dd, J = 15.3, 10.4 Hz, 4H), 3.42 - 3.25 (m, 4H), 2.49 (d, J = 0.9 Hz, 3H), 2.30 - 2.16 (m, 2H), 2.12 - 1.84 (m, 6H)
186		437.2	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.01 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 7.00 - 6.86 (m, 2H), 6.03 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 4.80 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 4.07 (s, 1H), 3.97 - 3.83 (m, 7H), 3.41 - 3.28 (m, 4H), 2.20 (dd, J = 12.3, 5.6 Hz, 2H), 1.95 (dh, J = 11.8, 5.6, 4.7 Hz, 6H)
187		492.26	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.70 (s, 1H), 6.96 (q, J = 2.6 Hz, 2H), 5.75 (d, J = 6.5 Hz, 1H), 4.82 (s, 1H), 4.65 (s, 1H), 3.93 (dd, J = 5.9, 3.8 Hz, 4H), 3.63 (s, 4H), 3.36 (dd, J = 6.1, 3.7 Hz, 4H), 2.14 (s, 2H), 1.95 (d, J = 31.2 Hz, 6H)

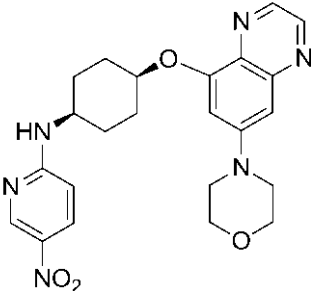
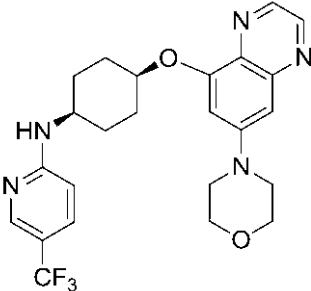
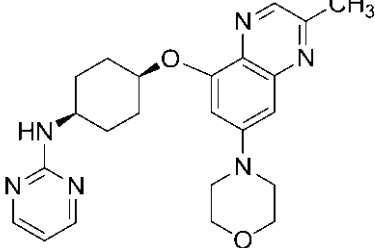
10

20

30

40

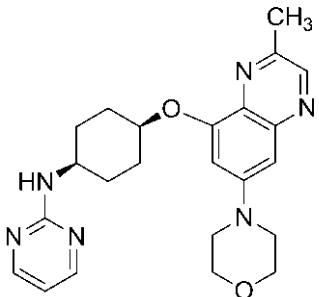
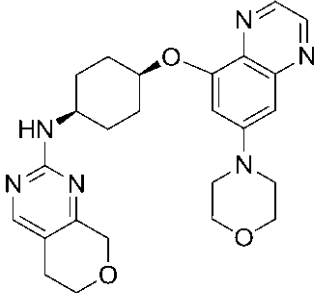
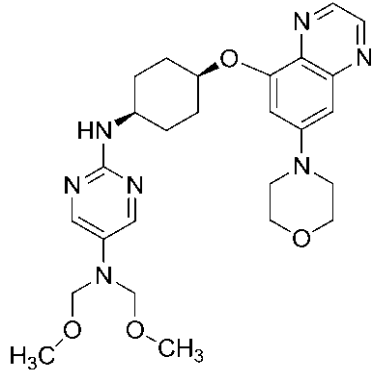
【表 1 - 6 6】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、δ 値として示す
188		451.14	(400 MHz, CDCl ₃) δ 9.02 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.17 (dd, J = 9.3, 2.6 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.36 (d, J = 9.3 Hz, 1H), 5.37 (s, 1H), 4.82 (s, 1H), 4.04 (s, 1H), 3.96 - 3.87 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.31 - 2.18 (m, 2H), 2.03 - 1.84 (m, 6H)
189		474.147	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 8.32 (s, 1H), 7.56 (d, J = 6.7 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.40 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 4.96 (s, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.01 - 3.84 (m, 5H), 3.42 - 3.24 (m, 4H), 2.21 (d, J = 8.4 Hz, 2H), 1.92 (d, J = 6.4 Hz, 6H)
190			(CDCl ₃) δ 8.52 (s, 1H), 8.29 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.85 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.52 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 5.36 (s, 1H), 4.79 (dq, J = 5.6, 2.9 Hz, 1H), 4.04 (dp, J = 8.0, 3.8 Hz, 1H), 3.97 - 3.85 (m, 4H), 3.38 - 3.26 (m, 4H), 2.70 (s, 3H), 2.29 - 2.11 (m, 2H), 2.00 - 1.78 (m, 6H)

20

40

【表 1 - 6 7】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
191		421.24	(CDCl ₃) δ 8.52 (s, 1H), 8.29 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.85 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.53 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 5.42 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.80 (dq, J = 5.9, 2.9 Hz, 1H), 4.11 - 3.98 (m, 1H), 3.91 (dd, J = 5.9, 3.8 Hz, 4H), 3.42 - 3.21 (m, 4H), 2.71 (s, 3H), 2.31 - 2.07 (m, 2H), 2.04 - 1.77 (m, 6H)
192		463.2	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.97 (s, 1H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.36 (s, 1H), 4.80 (d, J = 6.2 Hz, 1H), 4.65 (d, J = 0.9 Hz, 2H), 4.02 (t, J = 5.8 Hz, 3H), 3.98 - 3.82 (m, 4H), 3.42 - 3.30 (m, 4H), 2.80 (t, J = 5.8 Hz, 2H), 2.29 - 2.11 (m, 2H), 2.03 - 1.77 (m, 7H)
193		524.21	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.95 (s, 2H), 7.05 - 6.88 (m, 2H), 4.92 (s, 1H), 4.79 (s, 1H), 3.93 (t, J = 4.8 Hz, 5H), 3.60 - 3.44 (m, 4H), 3.37 (d, J = 10.5 Hz, 9H), 2.20 (d, J = 6.9 Hz, 2H), 1.91 (d, J = 4.6 Hz, 6H)

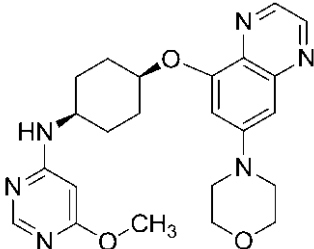
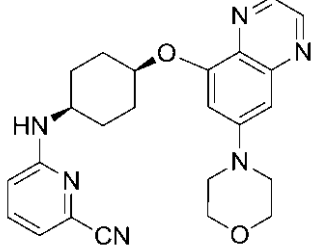
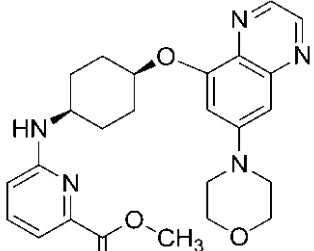
10

20

30

40

【表 1 - 6 8】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、δ 値として示す
194		437.23	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.28 (d, J = 0.9 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.74 - 5.58 (m, 1H), 5.16 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.82 (dq, J = 5.4, 2.7 Hz, 1H), 4.06 - 3.85 (m, 7H), 3.70 (d, J = 14.0 Hz, 1H), 3.42 - 3.28 (m, 4H), 2.30 - 2.16 (m, 2H), 1.99 - 1.75 (m, 6H)
195		431.22	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.43 (dd, J = 8.6, 7.2 Hz, 1H), 7.02 - 6.86 (m, 3H), 6.55 (dd, J = 8.6, 0.8 Hz, 1H), 4.80 (d, J = 6.6 Hz, 2H), 4.10 - 3.81 (m, 5H), 3.47 - 3.25 (m, 4H), 2.30 - 2.11 (m, 2H), 1.99 - 1.81 (m, 6H)
196		463.27	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.61 (d, J = 9.4 Hz, 1H), 7.41 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 7.05 - 6.87 (m, 2H), 6.65 (s, 1H), 4.86 (s, 1H), 4.04 - 3.87 (m, 7H), 3.74 (s, 1H), 3.43 - 3.27 (m, 4H), 2.21 (d, J = 10.8 Hz, 2H), 1.98 (d, J = 23.5 Hz, 6H)

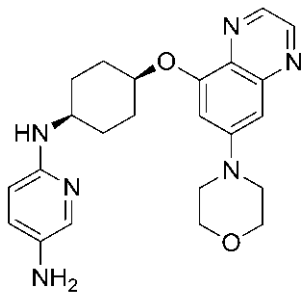
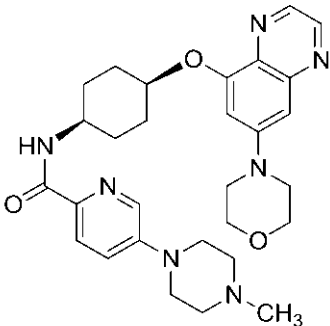
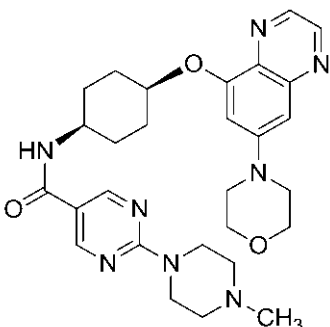
10

20

30

40

【表 1 - 6 9】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
197		421.69	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.13 - 8.04 (m, 1H), 7.67 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.99 - 6.93 (m, 2H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.33 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 4.77 (s, 1H), 3.99 - 3.65 (m, 7H), 3.39 - 3.27 (m, 4H), 2.25 - 2.10 (m, 2H), 1.96 - 1.82 (m, 6H)
198		532.11	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 8.57 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 7.89 (dd, J = 8.9, 2.3 Hz, 1H), 6.95 (s, 1H), 6.90 (s, 1H), 6.62 (d, J = 9.0 Hz, 1H), 5.99 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.18 (s, 1H), 4.03 - 3.81 (m, 4H), 3.76 - 3.60 (m, 4H), 3.42 - 3.25 (m, 4H), 2.62 - 2.44 (m, 4H), 2.36 (s, 3H), 2.29 - 2.14 (m, 2H), 1.99 - 1.84 (m, 6H)
199		533.01	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.73 - 8.65 (m, 3H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.93 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.23 - 4.09 (m, 1H), 3.97 - 3.88 (m, 8H), 3.40 - 3.25 (m, 4H), 2.53 - 2.42 (m, 4H), 2.34 (s, 3H), 2.26 - 2.18 (m, 2H), 1.97 - 1.83 (m, 6H)

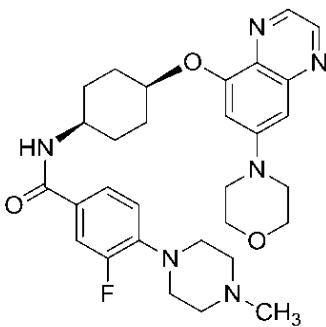
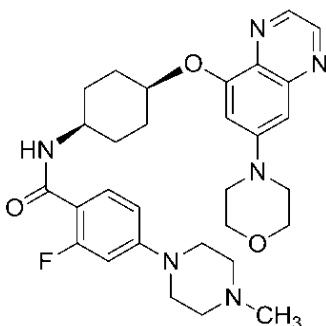
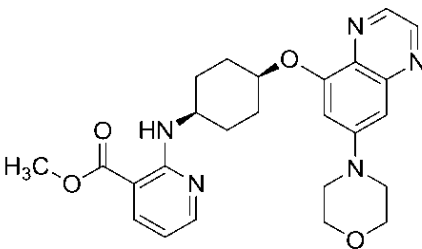
10

20

30

40

【表 1 - 7 0】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
200		549.17	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.51 - 7.42 (m, 2H), 6.98 - 6.85 (m, 3H), 6.07 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.25 - 4.11 (m, 1H), 3.99 - 3.85 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 3.26 - 3.14 (m, 4H), 2.67 - 2.52 (m, 4H), 2.36 (s, 3H), 2.28 - 2.13 (m, 2H), 1.98 - 1.84 (m, 6H)
201		549.1	(400 MHz, CDCl ₃) δ 9.47 (s, 1H), 8.68 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 8.56 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 8.21 - 8.11 (m, 1H), 6.97 - 6.85 (m, 4H), 4.82 (s, 1H), 4.23 - 4.07 (m, 1H), 3.96 - 3.87 (m, 4H), 3.38 - 3.29 (m, 4H), 3.03 (s, 4H), 2.65 (s, 4H), 2.37 - 2.25 (m, 5H), 2.02 - 1.84 (m, 6H)
202		464.13	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.27 (dd, J = 4.7, 1.9 Hz, 1H), 8.19 (s, 1H), 8.11 (d, J = 6.8 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.51 (dd, J = 7.4, 4.9 Hz, 1H), 4.76 (s, 1H), 4.30 (s, 1H), 4.02 - 3.90 (m, 4H), 3.88 (s, 3H), 3.41 - 3.26 (m, 4H), 2.29 - 2.11 (m, 2H), 2.11 - 1.85 (m, 6H)

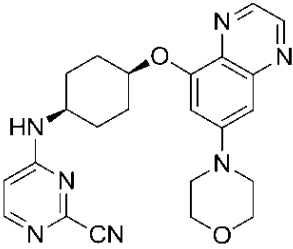
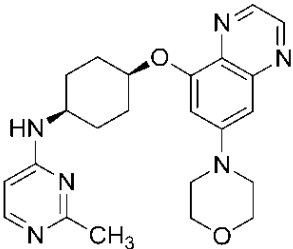
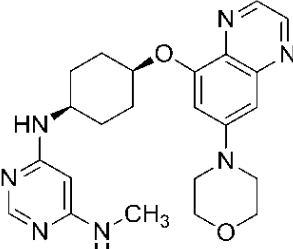
10

20

30

40

【表 1 - 7 1】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
203		432.58	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.15 (s, 1H), 6.93 (dd, J = 17.9, 2.5 Hz, 2H), 6.43 (d, J = 6.1 Hz, 1H), 5.20 (s, 1H), 4.82 (s, 1H), 4.00 - 3.82 (m, 4H), 3.44 - 3.25 (m, 4H), 2.23 (d, J = 11.2 Hz, 2H), 1.91 (s, 6H)
204		421.65	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.09 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 16.1, 2.5 Hz, 2H), 6.15 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 5.10 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.81 (td, J = 5.5, 2.7 Hz, 1H), 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.49 (s, 1H), 3.39 - 3.27 (m, 4H), 2.49 (s, 3H), 2.27 - 2.14 (m, 2H), 2.03 - 1.80 (m, 6H)
205		436.63	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (dd, J = 5.3, 1.9 Hz, 1H), 8.19 - 8.06 (m, 1H), 6.99 - 6.84 (m, 2H), 5.34 - 5.21 (m, 1H), 4.76 (d, J = 9.7 Hz, 3H), 3.92 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 3.81 (s, 1H), 3.33 (dd, J = 5.7, 4.1 Hz, 4H), 2.87 (d, J = 5.2 Hz, 3H), 2.19 (d, J = 8.5 Hz, 2H), 1.88 (dd, J = 13.3, 5.1 Hz, 6H)

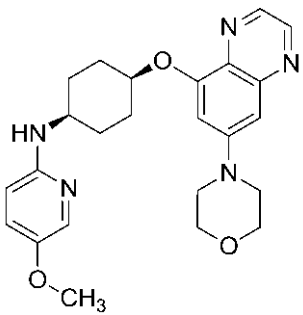
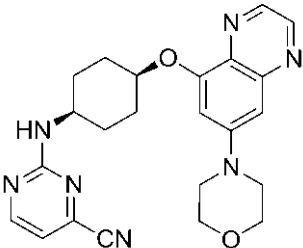
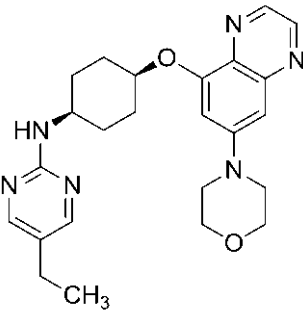
10

20

30

40

【表 1 - 7 2】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
206		436.18	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.82 (d, J = 2.8 Hz, 1H), 7.09 (dd, J = 8.9, 3.0 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.37 (d, J = 8.8 Hz, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.29 (bs, 1H), 3.98 - 3.87 (m, 4H), 3.85 - 3.79 (m, 1H), 3.77 (s, 3H), 3.41 - 3.24 (m, 4H), 2.27 - 2.12 (m, 2H), 1.97 - 1.79 (m, 6H)
207			(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.44 (s, 1H), 6.98 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.82 (d, J = 4.7 Hz, 1H), 5.56 (d, J = 30.8 Hz, 1H), 4.83 (d, J = 5.2 Hz, 1H), 4.04 (s, 2H), 3.97 - 3.84 (m, 4H), 3.44 - 3.29 (m, 4H), 2.23 (d, J = 8.2 Hz, 2H), 2.02 - 1.77 (m, 6H)
208		435.6	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.16 (s, 2H), 7.00 - 6.84 (m, 2H), 5.32 (s, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.03 (s, 1H), 3.96 - 3.85 (m, 4H), 3.43 - 3.32 (m, 4H), 2.49 (q, J = 7.6 Hz, 2H), 2.21 (d, J = 8.8 Hz, 2H), 2.06 - 1.75 (m, 6H), 1.21 (t, J = 7.6 Hz, 3H)

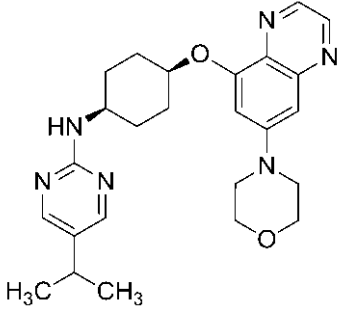
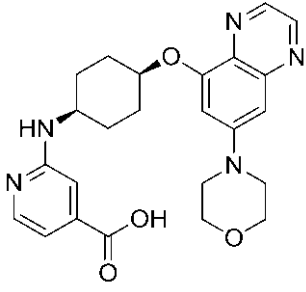
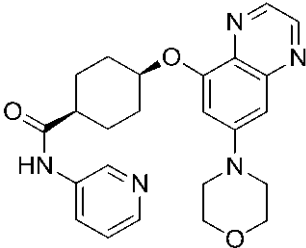
10

20

30

40

【表 1 - 7 3】

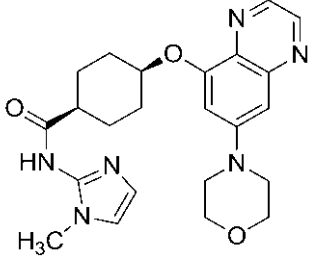
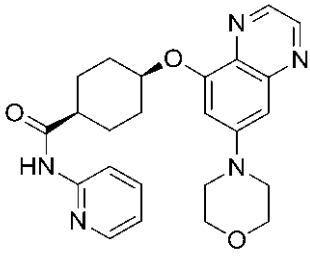
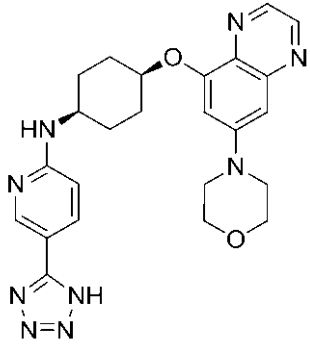
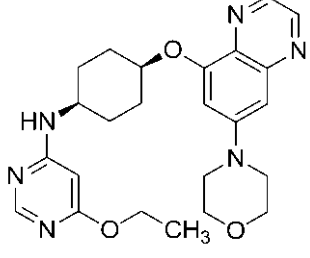
化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
209			(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.18 (s, 2H), 7.01 - 6.88 (m, 2H), 5.30 (d, J = 9.0 Hz, 1H), 4.81 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 4.02 (s, 1H), 3.96 - 3.85 (m, 4H), 3.42 - 3.29 (m, 4H), 2.78 (p, J = 6.9 Hz, 1H), 2.31 - 2.14 (m, 2H), 2.01 - 1.83 (m, 6H), 1.25 (d, J = 6.9 Hz, 6H)
210		450.17	(400 MHz, methanol-d ₄) δ 8.69 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.57 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.92 (d, J = 6.2 Hz, 1H), 7.17 - 7.10 (m, 2H), 7.02 (d, J = 7.1 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.93 (s, 1H), 3.93 - 3.87 (m, 4H), 3.84 - 3.79 (m, 1H), 3.44 - 3.37 (m, 4H), 2.24 - 2.15 (m, 2H), 1.97 - 1.82 (m, 6H)
211		434.19	

10

20

30

【表 1 - 7 4】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
212		437.12	
213		434.15	
214		474.12	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.98 - 8.83 (m, 1H), 8.79 - 8.67 (m, 1H), 8.64 - 8.50 (m, 1H), 8.35 (d, J = 9.2 Hz, 1H), 7.04 - 6.86 (m, 2H), 6.75 (d, J = 9.0 Hz, 2H), 4.78 (s, 1H), 4.00 - 3.79 (m, 5H), 3.42 - 3.21 (m, 4H), 2.17 - 2.11 (m, 2H), 2.02 - 1.81 (m, 6H)
215		451.21	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.25 (d, J = 0.9 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 17.1, 2.5 Hz, 2H), 5.64 (d, J = 0.9 Hz, 1H), 5.00 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.80 (dq, J = 5.5, 2.7 Hz, 1H), 4.33 (q, J = 7.1 Hz, 2H), 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.71 (s, 1H), 3.38 - 3.29 (m, 4H), 2.27 - 2.14 (m, 2H), 2.03 - 1.80 (m, 6H), 1.37 (t, J = 7.1 Hz, 3H)

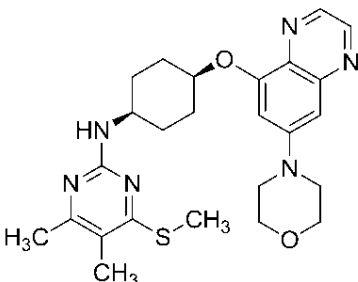
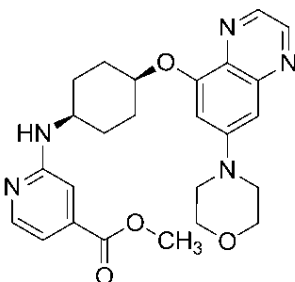
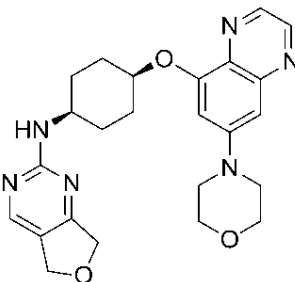
10

20

30

40

【表 1 - 7 5】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
216		481.26	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 0.23 - 0.16 (m, 0H), 4.93 (s, 1H), 4.76 (s, 1H), 4.19 - 4.01 (m, 1H), 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.38 - 3.29 (m, 4H), 2.49 (s, 3H), 2.26 (s, 3H), 2.21 - 2.10 (m, 2H), 2.05 (d, J = 1.8 Hz, 3H), 2.00 - 1.85 (m, 6H)
217		464.17	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.15 (d, J = 5.3 Hz, 1H), 7.06 (dd, J = 5.4, 1.3 Hz, 1H), 7.00 (s, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.15 (s, 1H), 4.81 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 3.95 - 3.83 (m, 8H), 3.38 - 3.30 (m, 4H), 2.27 - 2.16 (m, 2H), 1.97 - 1.85 (m, 6H)
218			(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.17 (d, J = 0.9 Hz, 1H), 7.02 - 6.85 (m, 2H), 5.40 (s, 1H), 5.05 (td, J = 1.8, 0.8 Hz, 2H), 4.91 - 4.73 (m, 3H), 4.05 (s, 0H), 3.99 - 3.85 (m, 4H), 3.43 - 3.27 (m, 4H), 2.30 - 2.12 (m, 2H), 2.02 - 1.82 (m, 6H)

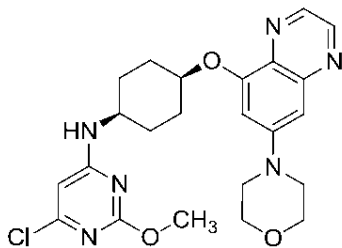
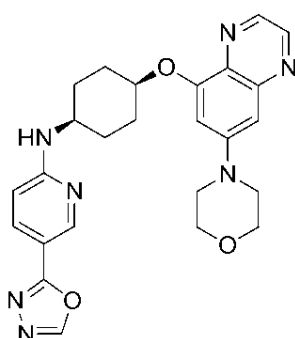
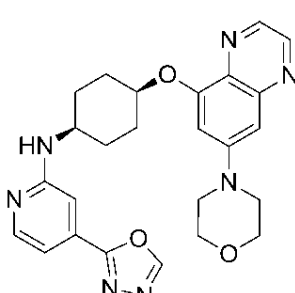
10

20

30

40

【表 1 - 7 6】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
219		471.06	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.03 (s, 1H), 5.00 (s, 1H), 4.79 (s, 1H), 3.92 (d, J = 9.3 Hz, 7H), 3.41 - 3.25 (m, 4H), 2.28 - 2.13 (m, 2H), 1.92 (d, J = 18.6 Hz, 6H)
220		474.07	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (s, 1H), 8.62 (s, 1H), 8.54 (s, 1H), 8.21 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 7.22 - 7.08 (m, 2H), 6.96 (s, 1H), 6.93 (s, 1H), 4.84 (s, 1H), 3.98 - 3.86 (m, 5H), 3.38 - 3.26 (m, 4H), 2.31 - 2.19 (m, 2H), 2.03 - 1.86 (m, 6H)
221		474.12	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.75 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.39 (s, 1H), 8.05 (dd, J = 8.8, 2.3 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.49 (d, J = 8.8 Hz, 1H), 5.23 (s, 1H), 4.88 - 4.71 (m, 1H), 4.05 - 3.95 (m, 1H), 3.95 - 3.85 (m, 4H), 3.39 - 3.26 (m, 4H), 2.28 - 2.16 (m, 2H), 2.00 - 1.83 (m, 6H)

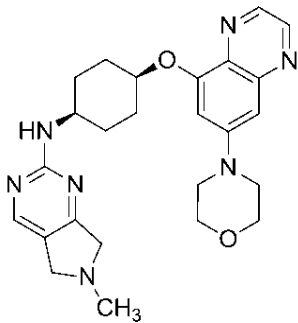
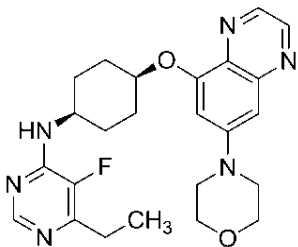
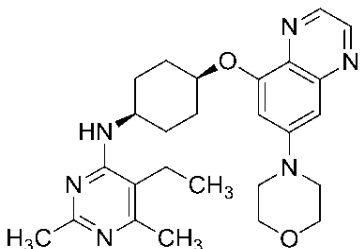
10

20

30

40

【表 1 - 77】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
222		485.14	(CDCl ₃) δ 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.53 (dd, J = 1.9, 0.6 Hz, 1H), 7.71 (d, J = 9.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.68 (d, J = 9.4 Hz, 1H), 5.33 (s, 1H), 4.76 (dq, J = 5.0, 2.5 Hz, 1H), 4.14 (s, 1H), 3.93 - 3.77 (m, 4H), 3.28 (d, J = 5.1 Hz, 7H), 2.18 (dt, J = 13.4, 4.6 Hz, 2H), 2.02 - 1.75 (m, 6H)
223		435.18	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (dd, J = 15.2, 2.5 Hz, 2H), 6.07 (s, 1H), 4.82 (dt, J = 5.8, 3.0 Hz, 1H), 4.02 - 3.83 (m, 4H), 3.77 - 3.57 (m, 1H), 3.43 - 3.28 (m, 4H), 2.52 (s, 3H), 2.37 (s, 3H), 2.30 - 2.16 (m, 2H), 2.05 - 1.78 (m, 6H)
224		475.02	(CDCl ₃) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.27 (s, 1H), 6.98 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 6.44 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.84 (s, 1H), 3.93 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 4H), 3.43 - 3.25 (m, 4H), 2.23 (s, 2H), 2.08 - 1.83 (m, 6H)

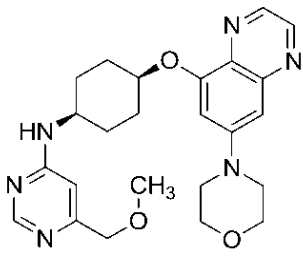
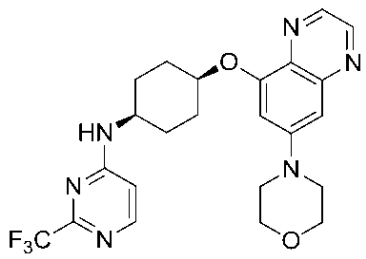
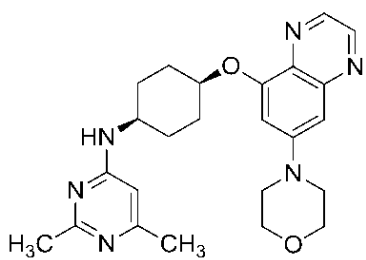
10

20

30

40

【表 1 - 7 8】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
225		451.16	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.49 (d, J = 1.1 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 16.7, 2.5 Hz, 2H), 6.45 (d, J = 1.2 Hz, 1H), 5.01 (s, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.39 (d, J = 0.9 Hz, 2H), 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.49 (s, 3H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.22 (d, J = 9.4 Hz, 2H), 1.99 - 1.87 (m, 6H)
226		463.18	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.75 (d, J = 5.6 Hz, 1H), 4.66 (s, 1H), 4.32 (s, 1H), 4.00 - 3.83 (m, 4H), 3.43 - 3.22 (m, 4H), 2.46 (d, J = 15.1 Hz, 5H), 2.36 (s, 3H), 2.19 (q, J = 6.3, 3.9 Hz, 2H), 1.12 (t, J = 7.6 Hz, 3H)
227		453.2	(CDCl ₃) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.33 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 7.04 - 6.87 (m, 2H), 5.15 (s, 1H), 4.82 (dq, J = 5.2, 2.6 Hz, 1H), 4.24 (dt, J = 8.3, 4.7 Hz, 1H), 4.03 - 3.86 (m, 4H), 3.44 - 3.28 (m, 4H), 2.74 (qd, J = 7.6, 2.3 Hz, 2H), 2.24 (dq, J = 9.6, 4.6 Hz, 2H), 2.09 - 1.85 (m, 6H), 1.29 (t, J = 7.6 Hz, 3H)

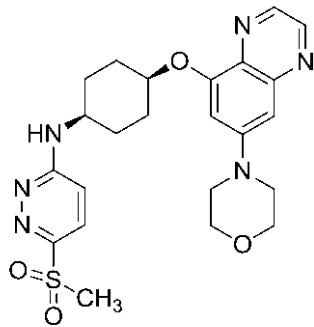
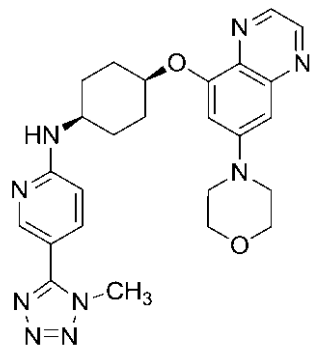
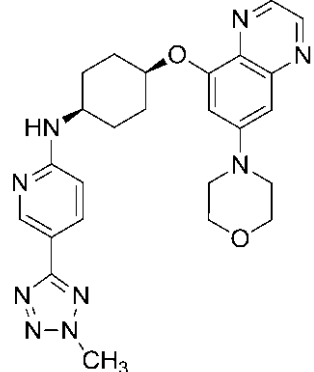
10

20

30

40

【表 1 - 7 9】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
228		462.14	(CDCl ₃) δ 8.60 (dd, J = 8.1, 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.00 (s, 1H), 6.92 - 6.75 (m, 2H), 5.06 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.70 (s, 1H), 3.94 (s, 1H), 3.89 - 3.76 (m, 4H), 3.75 - 3.62 (m, 4H), 3.34 - 3.17 (m, 4H), 2.50 (s, 3H), 2.11 (s, 2H), 1.82 (d, J = 5.0 Hz, 5H)
229		488.57	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.44 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.91 (d, J = 8.8 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.60 (d, J = 8.6 Hz, 1H), 5.52 (s, 1H), 4.83 (s, 1H), 4.18 (s, 3H), 4.00 - 3.87 (m, 5H), 3.39 - 3.24 (m, 4H), 2.31 - 2.18 (m, 2H), 2.04 - 1.87 (m, 6H)
230		488.57	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.81 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.13 (dd, J = 8.8, 2.2 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.52 (d, J = 8.8 Hz, 1H), 4.82 (s, 1H), 4.36 (s, 3H), 3.96 - 3.85 (m, 5H), 3.41 - 3.28 (m, 4H), 2.28 - 2.17 (m, 2H), 2.06 - 1.83 (m, 6H)

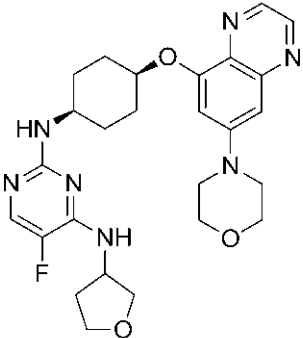
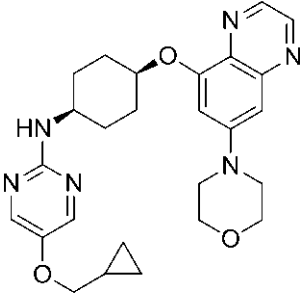
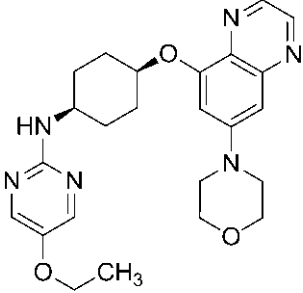
10

20

30

40

【表 1 - 8 0】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、δ 値として示す
231		510.2	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.70 (d, J = 3.4 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 14.6, 2.5 Hz, 2H), 4.96 (dd, J = 17.8, 7.1 Hz, 2H), 4.76 (d, J = 6.2 Hz, 1H), 4.62 (ddt, J = 12.6, 7.1, 3.5 Hz, 1H), 4.05 - 3.82 (m, 8H), 3.75 (dd, J = 9.4, 3.2 Hz, 1H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.35 (ddt, J = 13.0, 8.2, 7.1 Hz, 1H), 2.25 - 2.08 (m, 2H), 2.00 - 1.77 (m, 6H)
232		477.18	(CDCl ₃) δ 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.98 (s, 2H), 6.94 - 6.75 (m, 2H), 5.01 (s, 1H), 4.71 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 3.96 - 3.78 (m, 5H), 3.68 (d, J = 7.0 Hz, 2H), 3.37 - 3.17 (m, 4H), 2.21 - 1.96 (m, 2H), 1.92 - 1.75 (m, 6H), 1.25 - 1.06 (m, 1H), 0.66 - 0.44 (m, 2H), 0.34 - 0.18 (m, 2H)
233		451.2	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.06 (s, 2H), 7.01 - 6.86 (m, 2H), 5.00 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.80 (d, J = 5.6 Hz, 1H), 4.10 - 3.82 (m, 7H), 3.42 - 3.26 (m, 5H), 2.20 (d, J = 8.2 Hz, 2H), 2.01 - 1.80 (m, 6H), 1.39 (t, J = 7.0 Hz, 3H)

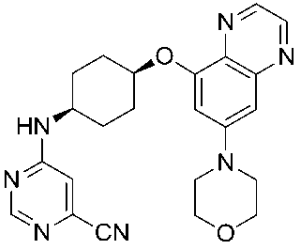
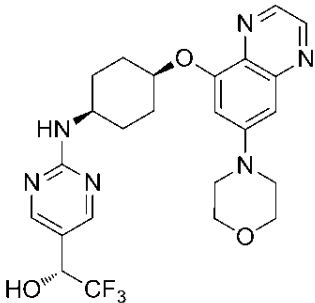
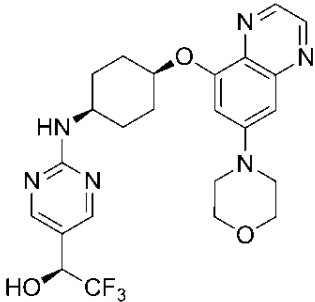
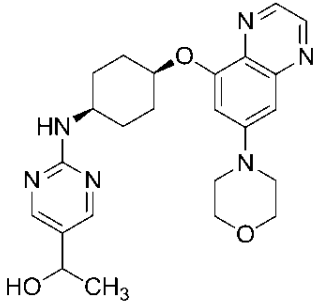
10

20

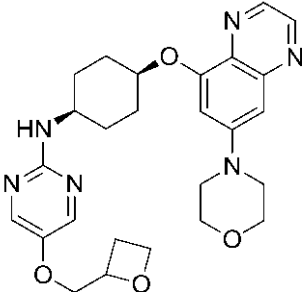
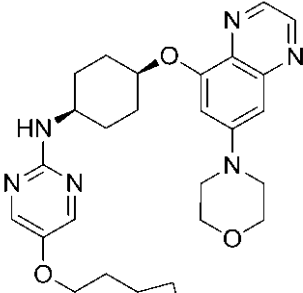
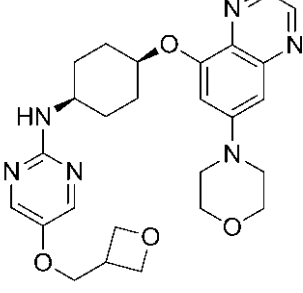
30

40

【表 1 - 8 1】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す	
234		432.17	(CDCl ₃) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (t, J = 1.9 Hz, 2H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.70 (d, J = 1.2 Hz, 1H), 4.85 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 3.98 - 3.84 (m, 4H), 3.42 - 3.26 (m, 4H), 2.33 - 2.17 (m, 2H), 2.01 - 1.77 (m, 5H)	10
235		505.04	(CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.36 (s, 2H), 6.97 - 6.86 (m, 2H), 5.53 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.96 - 4.72 (m, 3H), 4.09 - 3.86 (m, 5H), 3.33 (dd, J = 5.8, 4.0 Hz, 4H), 2.28 - 2.10 (m, 2H), 1.98 - 1.78 (m, 6H)	20
236		505.17	(CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.36 (s, 2H), 6.97 - 6.86 (m, 2H), 5.53 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.96 - 4.72 (m, 3H), 4.09 - 3.86 (m, 5H), 3.33 (dd, J = 5.8, 4.0 Hz, 4H), 2.28 - 2.10 (m, 2H), 1.98 - 1.78 (m, 6H)	30
237		451.16	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.31 (s, 2H), 6.99 - 6.87 (m, 2H), 5.34 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.87 - 4.73 (m, 2H), 4.06 - 3.87 (m, 6H), 3.38 - 3.29 (m, 4H), 2.20 (q, J = 5.8 Hz, 2H), 2.04 - 1.84 (m, 6H), 1.51 (d, J = 6.5 Hz, 3H)	40

【表 1 - 8 2】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
238		492.98	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.15 (s, 2H), 6.99 - 6.86 (m, 2H), 5.11 (td, J = 7.9, 7.4, 3.8 Hz, 1H), 4.82 - 4.55 (m, 3H), 4.10 (dd, J = 4.1, 2.7 Hz, 2H), 3.93 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 5H), 3.60 - 3.43 (m, 1H), 3.36 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 4H), 2.85 - 2.61 (m, 1H), 2.30 - 2.10 (m, 2H), 1.92 (s, 6H), 1.24 (q, J = 6.9 Hz, 1H)
239		507	(CDCl ₃) δ 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.95 (d, J = 13.9 Hz, 2H), 6.92 - 6.72 (m, 2H), 4.85 - 4.64 (m, 3H), 4.41 (t, J = 6.2 Hz, 2H), 3.83 (q, J = 6.7, 5.7 Hz, 6H), 3.33 - 3.18 (m, 5H), 2.20 - 1.97 (m, 1H), 1.82 (s, 7H)
240		493.16	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.08 (s, 2H), 7.01 - 6.87 (m, 2H), 5.11 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.95 - 4.74 (m, 3H), 4.56 (t, J = 6.0 Hz, 2H), 4.17 (d, J = 6.7 Hz, 2H), 4.05 - 3.81 (m, 4H), 3.51 - 3.29 (m, 5H), 2.21 (q, J = 6.4, 5.7 Hz, 2H), 2.03 - 1.80 (m, 8H)

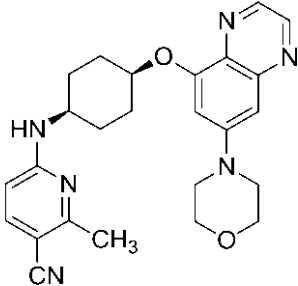
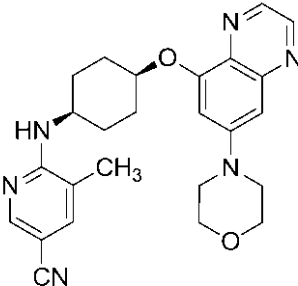
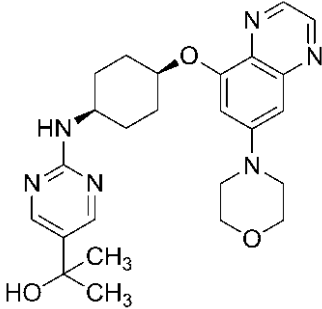
10

20

30

40

【表 1 - 8 3】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
241		445.54	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.52 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.23 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 5.09 (s, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.00 - 3.78 (m, 5H), 3.40 - 3.24 (m, 4H), 2.56 (s, 3H), 2.29 - 2.14 (m, 2H), 2.01 - 1.80 (m, 6H)
242		445.54	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.30 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 7.37 (s, 1H), 6.96 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.74 (s, 1H), 4.28 (s, 1H), 4.01 - 3.83 (m, 4H), 3.40 - 3.25 (m, 4H), 2.30 - 2.17 (m, 2H), 2.11 (s, 3H), 1.99 - 1.87 (m, 6H)
243		465.2	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 5.36 (s, 1H), 4.03 (s, 1H), 1.57 (s, 6H), 2.02 - 1.80 (m, 6H), 8.42 (s, 2H), 6.99 - 6.87 (m, 2H), 4.80 (s, 1H), 3.92 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 4H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.20 (d, J = 9.0 Hz, 2H)

10

20

30

40

【表 1 - 8 4】

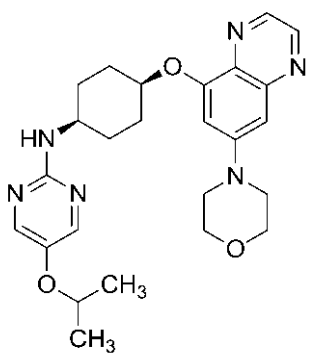
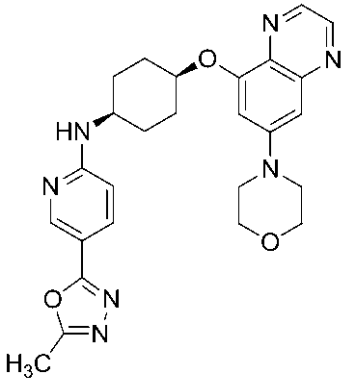
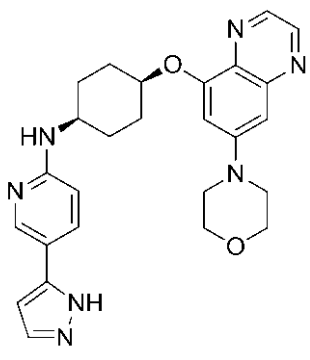
化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
244		475.15	(CDCl ₃) δ 8.98 - 8.86 (m, 2H), 8.66 (dd, J = 23.8, 1.9 Hz, 2H), 8.44 (s, 1H), 7.00 - 6.88 (m, 2H), 5.89 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.83 (dq, J = 5.4, 2.6 Hz, 1H), 4.22 - 4.04 (m, 1H), 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.43 - 3.29 (m, 4H), 2.24 (td, J = 8.3, 7.4, 4.0 Hz, 2H), 2.15 - 1.81 (m, 6H)
245		467.14	(CDCl ₃) δ 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.84 (dd, J = 18.2, 2.5 Hz, 2H), 5.26 (s, 1H), 4.78 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.68 (d, J = 5.6 Hz, 1H), 3.82 (t, J = 4.0 Hz, 10H), 3.30 - 3.15 (m, 4H), 2.10 (q, J = 6.2, 5.7 Hz, 2H), 1.94 - 1.69 (m, 6H)
246		421.23	(CDCl ₃) δ 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.06 (d, J = 5.0 Hz, 1H), 6.94 - 6.78 (m, 2H), 6.32 (d, J = 5.0 Hz, 1H), 5.09 (s, 1H), 4.70 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 3.95 (s, 1H), 3.91 - 3.77 (m, 5H), 3.37 - 3.13 (m, 4H), 2.20 - 2.00 (m, 2H), 1.94 - 1.71 (m, 6H)

10

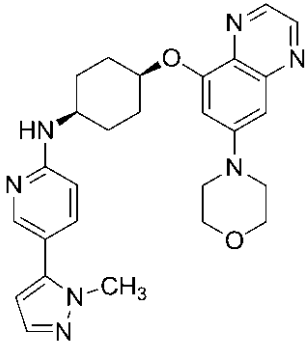
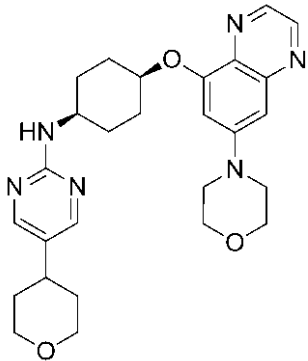
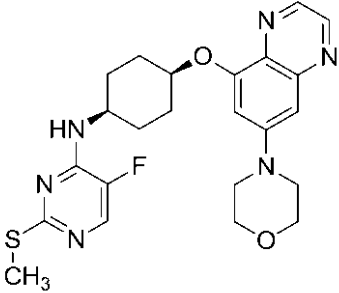
20

30

【表 1 - 8 5】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
247		465.1	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (t, J = 2.4 Hz, 1H), 8.05 (s, 2H), 7.04 - 6.87 (m, 2H), 5.20 (s, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.30 (p, J = 6.1 Hz, 1H), 4.05 - 3.81 (m, 4H), 3.44 - 3.27 (m, 4H), 2.22 (t, J = 7.3 Hz, 2H), 1.93 (d, J = 4.6 Hz, 6H), 1.33 (d, J = 6.1 Hz, 6H)
248		488.48	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.66 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.05 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.51 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 4.82 (s, 1H), 3.99 - 3.85 (m, 5H), 3.38 - 3.27 (m, 4H), 2.59 (s, 3H), 2.29 - 2.18 (m, 2H), 2.01 - 1.84 (m, 6H)
249		472.54	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.45 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.86 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 7.60 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.50 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.48 (d, J = 8.9 Hz, 1H), 4.81 (s, 1H), 3.95 - 3.85 (m, 5H), 3.39 - 3.30 (m, 4H), 2.26 - 2.17 (m, 2H), 1.99 - 1.84 (m, 6H)

【表 1 - 8 6】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
250		486.5	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.09 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 7.56 - 7.45 (m, 2H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.55 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 6.25 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 4.84 (s, 1H), 3.96 - 3.83 (m, 8H), 3.39 - 3.30 (m, 4H), 2.28 - 2.19 (m, 2H), 2.03 - 1.83 (m, 6H)
251		491.1	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.18 (s, 2H), 7.04 - 6.87 (m, 2H), 5.21 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.2-4.0 (m, 3H), 3.98 - 3.85 (m, 4H), 3.61 - 3.44 (m, 2H), 3.41 - 3.21 (m, 4H), 2.75 - 2.47 (m, 1H), 2.21 (d, J = 9.6 Hz, 2H), 1.92 (t, J = 6.4 Hz, 6H), 1.83 - 1.66 (m, 4H)
252		471.1	(CDCl ₃) δ 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.50 (s, 3H), 2.28 - 2.16 (m, 2H), 2.02 - 1.89 (m, 6H), 4.26 - 4.17 (m, 1H), 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.88 (d, J = 3.3 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 18.7, 2.5 Hz, 2H), 5.10 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.79 (d, J = 3.7 Hz, 1H)

10

20

30

40

【表 1 - 8 7】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
253		453.19	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.38 (d, J = 1.1 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 17.3, 2.5 Hz, 2H), 6.18 (d, J = 1.2 Hz, 1H), 5.03 (s, 1H), 4.81 (d, J = 6.1 Hz, 1H), 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.83 (s, 1H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.51 (s, 3H), 2.21 (d, J = 8.8 Hz, 2H), 2.05 (s, 0H), 1.91 (d, J = 10.6 Hz, 6H)
254		406.57	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.15 - 8.04 (m, 1H), 7.46 - 7.39 (m, 1H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.60 - 6.52 (m, 1H), 6.41 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.68 (s, 1H), 3.98 - 3.85 (m, 5H), 3.41 - 3.30 (m, 4H), 2.27 - 2.15 (m, 2H), 1.97 - 1.86 (m, 6H)
255		450.96	(methanol-d ₄) δ 8.71 (dd, J = 7.5, 2.1 Hz, 1H), 8.57 (dd, J = 8.8, 2.1 Hz, 1H), 7.12 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.88 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 3.88 (t, J = 4.8 Hz, 4H), 3.45 - 3.35 (m, 4H), 3.19 (s, 3H), 2.25 - 2.01 (m, 2H), 2.00 - 1.80 (m, 6H)

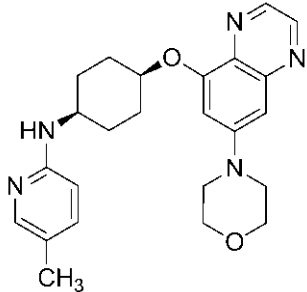
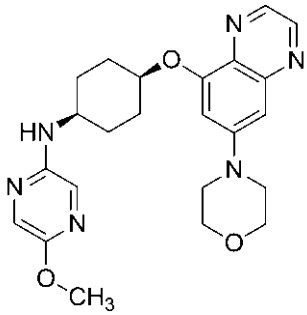
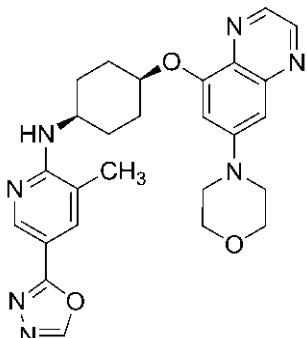
10

20

30

40

【表 1 - 8 8】

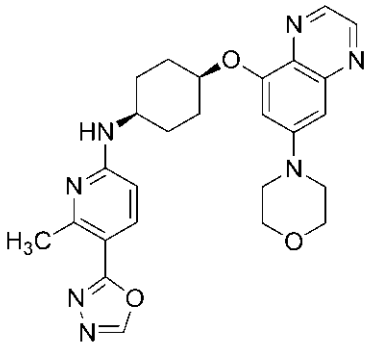
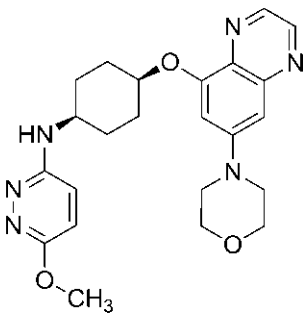
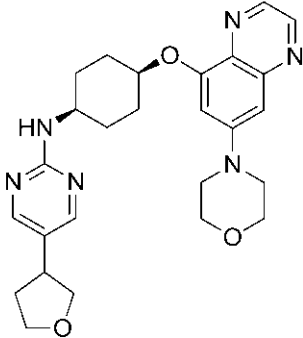
化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、δ 値として示す
256		420.1	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.80 (d, J = 1.5 Hz, 1H), 7.47 (d, J = 1.5 Hz, 1H), 7.02 - 6.86 (m, 2H), 4.80 (s, 1H), 4.27 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 4.00 - 3.72 (m, 7H), 3.35 (dd, J = 6.0, 3.8 Hz, 4H), 2.23 (s, 2H), 2.02 - 1.80 (m, 6H)
257		437.1	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (dd, J = 1.9, 0.7 Hz, 1H), 7.99 - 7.88 (m, 1H), 7.02 - 6.87 (m, 2H), 6.34 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.40 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.03 - 3.75 (m, 5H), 3.35 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 4H), 2.18 (s, 5H), 2.03 - 1.81 (m, 6H)
258		488.52	(CDCl ₃) δ 8.78 - 8.59 (m, 3H), 8.38 (s, 1H), 7.85 (s, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.67 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.32 (s, 1H), 3.99 - 3.82 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.33 - 2.06 (m, 5H), 2.03 - 1.87 (m, 6H)

10

20

30

【表 1 - 8 9】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
259		488.48	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, 1H), 8.41 (s, 1H), 8.04 - 7.93 (m, 1H), 6.96 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 6.35 (d, J = 9.1 Hz, 1H), 5.07 (s, 1H), 4.82 (s, 1H), 4.02 - 3.79 (m, 5H), 3.41 - 3.27 (m, 4H), 2.83 - 2.72 (m, 3H), 2.30 - 2.17 (m, 2H), 2.02 - 1.80 (m, 6H)
260		437.24	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 14.5, 2.5 Hz, 2H), 6.79 (d, J = 9.4 Hz, 1H), 6.64 (d, J = 9.4 Hz, 1H), 4.80 (d, J = 5.5 Hz, 1H), 4.27 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 4.14 (s, 1H), 4.02 (s, 3H), 3.98 - 3.88 (m, 4H), 3.42 - 3.29 (m, 4H), 2.31 - 2.12 (m, 2H), 1.95 (ddd, J = 17.2, 9.2, 6.0 Hz, 6H)
261		477.3	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.20 (s, 2H), 7.04 - 6.84 (m, 2H), 5.16 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.19 - 3.85 (m, 7H), 3.66 (dd, J = 8.5, 7.1 Hz, 1H), 3.35 (dd, J = 5.9, 3.8 Hz, 4H), 3.24 (t, J = 7.5 Hz, 1H), 2.48 - 2.11 (m, 4H), 2.05 - 1.82 (m, 6H)

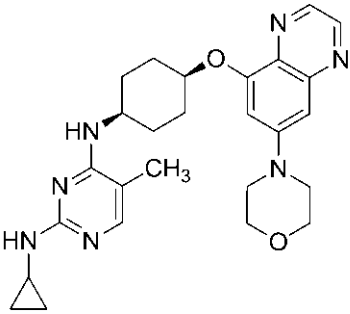
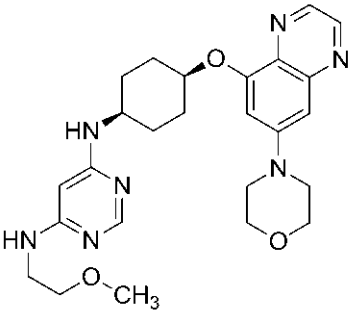
10

20

30

40

【表 1 - 9 0】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
262		476.26	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.61 (d, J = 1.0 Hz, 1H), 6.98 - 6.86 (m, 2H), 4.96 (s, 1H), 4.82 - 4.71 (m, 1H), 4.63 - 4.56 (m, 1H), 4.08 - 3.87 (m, 5H), 3.38 - 3.29 (m, 4H), 2.80 (tdd, J = 6.8, 5.0, 3.1 Hz, 1H), 2.23 - 2.11 (m, 2H), 2.08 - 1.82 (m, 9H), 0.90 - 0.72 (m, 2H), 0.59 - 0.47 (m, 2H)
263		480.22	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.11 (d, J = 0.9 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 15.5, 2.5 Hz, 2H), 5.30 (d, J = 1.0 Hz, 1H), 5.16 (s, 1H), 4.95 (s, 1H), -0.17 - -0.23 (m, 0H), 4.80 (s, 1H), 3.92 (dd, J = 5.9, 3.7 Hz, 4H), 3.74 (s, 1H), 3.57 (dd, J = 5.6, 4.6 Hz, 2H), 3.50 - 3.29 (m, 9H), 2.20 (d, J = 9.1 Hz, 2H), 1.93 (d, J = 13.1 Hz, 6H)

10

20

30

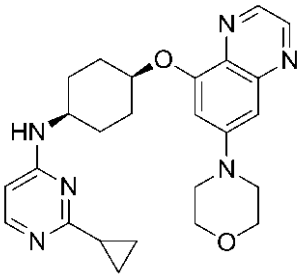
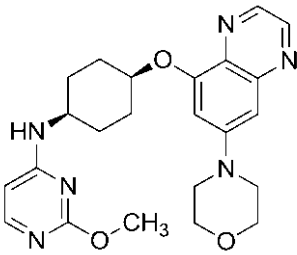
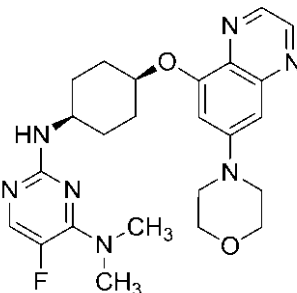
【表 1 - 9 1】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、δ 値として示す
264		494.1	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.76 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 7.02 - 6.86 (m, 2H), 5.66 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 4.80 (d, J = 5.5 Hz, 1H), 4.63 (s, 1H), 3.97 - 3.84 (m, 5H), 1.30 - 1.20 (m, 1H), 3.64 (s, 2H), 3.38 - 3.28 (m, 4H), 1.37 (s, 6H), 5.16 - 4.86 (m, 1H), 2.24 - 2.13 (m, 2H), 1.96 - 1.82 (m, 6H)
265		421.18	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.47 (d, J = 1.1 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 16.7, 2.5 Hz, 2H), 6.17 (t, J = 0.9 Hz, 1H), 4.95 (s, 1H), 4.81 (td, J = 5.3, 2.5 Hz, 1H), 4.07 - 3.83 (m, 5H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.34 (s, 3H), 2.21 (dt, J = 11.1, 5.1 Hz, 2H), 2.04 - 1.76 (m, 6H)
266		441.2	(CDCl ₃) δ 11.49 (s, 1H), 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.73 (d, J = 3.0 Hz, 1H), 7.03 - 6.89 (m, 2H), 6.56 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 4.82 (s, 1H), 3.91 (dd, J = 6.0, 3.8 Hz, 5H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.27 - 2.14 (m, 2H), 2.07 - 1.81 (m, 6H)

30

40

【表 1 - 9 2】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
267		447.11	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.03 (d, J = 6.1 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 18.6, 2.5 Hz, 2H), 6.13 (d, J = 6.1 Hz, 1H), 5.09 (s, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.03 - 3.78 (m, 5H), 3.34 (dd, J = 6.0, 3.8 Hz, 4H), 2.20 (d, J = 8.1 Hz, 2H), 1.96 (s, 7H), 1.10 (d, J = 2.8 Hz, 2H), 1.00 (d, J = 8.0 Hz, 2H)
268		437.19	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.95 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 6.92 (dd, J = 17.9, 2.5 Hz, 2H), 5.99 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 5.01 (s, 1H), 4.79 (dt, J = 6.9, 3.4 Hz, 1H), 3.91 (d, J = 8.7 Hz, 8H), 3.43 - 3.25 (m, 4H), 2.32 - 2.09 (m, 2H), 2.05 - 1.74 (m, 6H)
269		468.13	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.70 (d, J = 6.8 Hz, 1H), 6.92 (dd, J = 14.4, 2.5 Hz, 2H), 4.86 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.75 (dt, J = 8.6, 4.0 Hz, 1H), 3.97 - 3.87 (m, 5H), 3.38 - 3.28 (m, 4H), 3.14 (d, J = 2.2 Hz, 6H), 2.24 - 2.07 (m, 2H), 2.02 - 1.79 (m, 6H)

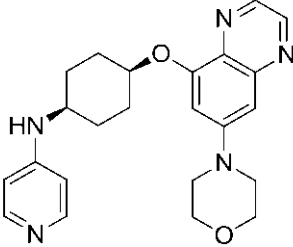
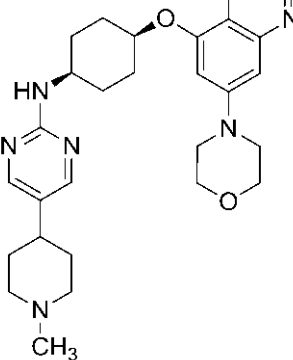
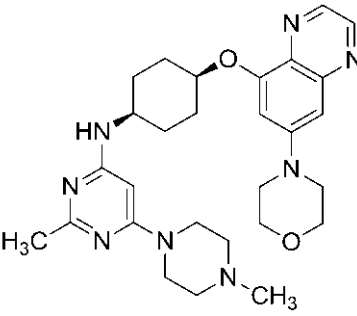
10

20

30

40

【表 1 - 9 4】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
273		406.57	(CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.18 (d, J = 6.3 Hz, 2H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.51 - 6.42 (m, 2H), 4.79 (s, 1H), 4.47 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 3.98 - 3.86 (m, 4H), 3.56 (s, 1H), 3.39 - 3.26 (m, 4H), 2.27 - 2.15 (m, 2H), 2.01 - 1.79 (m, 6H)
274		504.1	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.18 (s, 2H), 7.03 - 6.86 (m, 2H), 5.11 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.81 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 4.12 - 3.84 (m, 5H), 3.42 - 3.29 (m, 4H), 3.05 - 2.89 (m, 2H), 2.33 (s, 4H), 2.21 (d, J = 8.8 Hz, 2H), 2.11 - 1.61 (m, 10H)
275		519.2	(CDCl ₃) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.93 - 6.77 (m, 2H), 5.20 (s, 1H), 4.78 - 4.60 (m, 2H), 3.92 - 3.79 (m, 5H), 3.64 (s, 0H), 3.51 (t, J = 5.1 Hz, 4H), 3.36 - 3.16 (m, 4H), 2.40 (t, J = 5.1 Hz, 4H), 2.27 (d, J = 4.8 Hz, 6H), 2.16 - 2.02 (m, 2H), 1.81 (q, J = 8.1, 5.7 Hz, 6H)

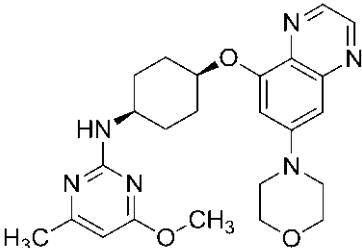
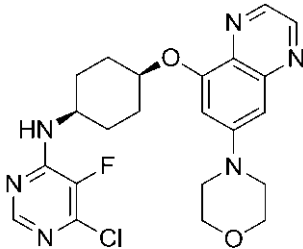
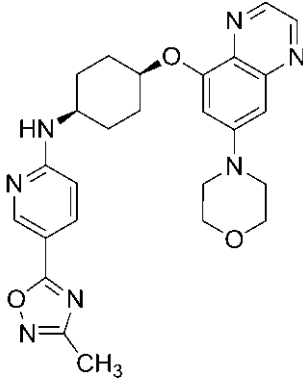
10

20

30

40

【表 1 - 9 5】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
276		451.53	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 5.87 (s, 1H), 5.13 (s, 1H), 4.76 (s, 1H), 4.04 (s, 1H), 3.98 - 3.89 (m, 4H), 3.87 (s, 3H), 3.41 - 3.23 (m, 4H), 2.25 (s, 3H), 2.23 - 2.09 (m, 2H), 1.99 - 1.80 (m, 6H)
277		459.08	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.17 (d, J = 0.9 Hz, 1H), 6.94 (dd, J = 15.8, 2.5 Hz, 2H), 5.31 (s, 1H), 4.83 (dp, J = 4.6, 2.5 Hz, 1H), 4.22 (qt, J = 8.5, 4.9 Hz, 1H), 4.03 - 3.87 (m, 4H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.25 (td, J = 7.9, 6.6, 3.9 Hz, 2H), 2.09 - 1.80 (m, 6H)
278		488.48	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.83 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.02 (dd, J = 8.8, 2.3 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.45 (d, J = 8.9 Hz, 1H), 5.12 (s, 1H), 4.81 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 3.98 (s, 1H), 3.95 - 3.87 (m, 4H), 3.40 - 3.26 (m, 5H), 2.42 (s, 3H), 2.29 - 2.16 (m, 2H), 1.99 - 1.87 (m, 6H)

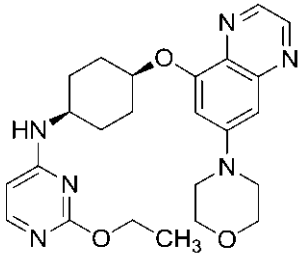
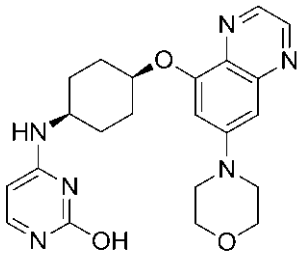
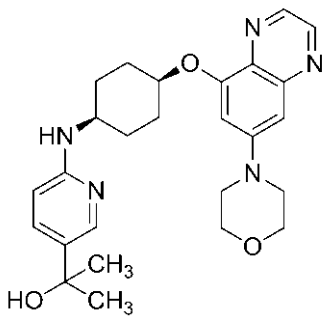
10

20

30

40

【表 1 - 9 6】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
279		451.12	(CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.21 - 7.11 (m, 1H), 7.00 - 6.85 (m, 2H), 5.51 (s, 1H), 4.95 - 4.70 (m, 2H), 4.53 - 4.34 (m, 1H), 4.01 - 3.74 (m, 5H), 3.45 - 3.25 (m, 4H), 2.25 - 2.09 (m, 2H), 2.03 - 1.73 (m, 6H), 1.39 - 1.25 (m, 3H)
280		423.08	(methanol-d ₄) δ 8.68 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.30 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 7.10 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.79 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 4.13 (qd, J = 8.5, 6.7, 2.4 Hz, 1H), 3.87 (dd, J = 5.9, 3.8 Hz, 4H), 3.42 - 3.32 (m, 5H), 2.21 - 2.07 (m, 2H), 2.01 - 1.78 (m, 6H)
281		464.53	(400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.18 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 7.58 (dd, J = 8.7, 2.5 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.39 (d, J = 8.8 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.69 (s, 1H), 3.96 - 3.83 (m, 5H), 3.49 (s, 1H), 3.38 - 3.28 (m, 4H), 2.26 - 2.13 (m, 2H), 1.95 - 1.84 (m, 6H), 1.56 (s, 6H)

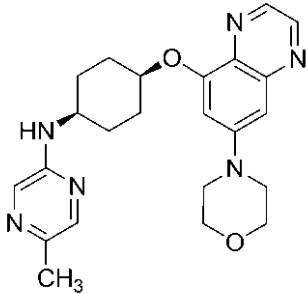
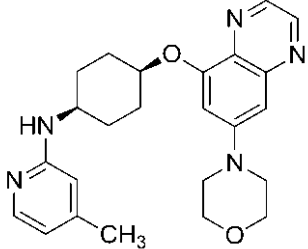
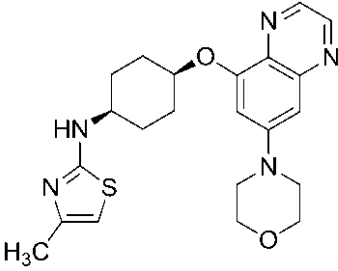
10

20

30

40

【表 1 - 97】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
282		421.2	(CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.93 - 7.74 (m, 2H), 7.04 - 6.82 (m, 2H), 4.80 (s, 1H), 4.50 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 3.93 (dd, J = 6.4, 3.4 Hz, 5H), 3.41 - 3.25 (m, 4H), 2.51 - 2.33 (m, 3H), 2.23 (s, 2H), 2.04 - 1.82 (m, 6H)
283		420.2	(CDCl ₃) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.55 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.88 (dd, J = 5.3, 0.7 Hz, 1H), 6.95 - 6.79 (m, 2H), 6.32 (ddd, J = 5.2, 1.5, 0.7 Hz, 1H), 6.12 (dt, J = 1.6, 0.8 Hz, 1H), 4.71 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 4.40 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 3.98 - 3.67 (m, 4H), 3.35 - 3.17 (m, 4H), 2.15 (s, 4H), 1.83 (d, J = 5.2 Hz, 5H)
284		426.1	(CDCl ₃) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.86 (dd, J = 16.6, 2.5 Hz, 2H), 5.97 (d, J = 1.2 Hz, 1H), 5.02 (s, 1H), 4.71 (dt, J = 5.7, 3.0 Hz, 1H), 3.91 - 3.75 (m, 4H), 3.63 - 3.42 (m, 1H), 3.33 - 3.17 (m, 4H), 2.21 - 2.03 (m, 5H), 1.94 - 1.71 (m, 6H)

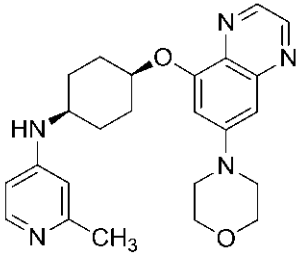
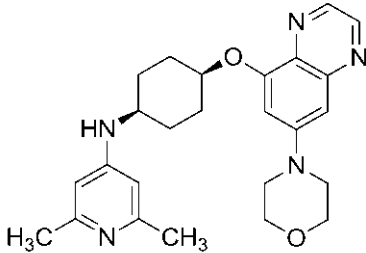
10

20

30

40

【表 1 - 9 8】

化合物番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR (別段の指定がない限り 300 MHz) NMR ピークは、 δ 値として示す
285		420.57	<p>(400 MHz, CDCl₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.08 (d, J = 5.7 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.30 (s, 1H), 6.28 (dd, J = 5.7, 2.2 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.19 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 3.97 - 3.82 (m, 4H), 3.53 (s, 1H), 3.40 - 3.24 (m, 4H), 2.41 (s, 3H), 2.27 - 2.11 (m, 2H), 1.92 - 1.84 (m, 6H)</p>
286		434.56	<p>(400 MHz, CDCl₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.15 (s, 2H), 4.77 (s, 1H), 4.12 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 3.99 - 3.81 (m, 4H), 3.53 (s, 1H), 3.40 - 3.23 (m, 4H), 2.36 (d, J = 14.5 Hz, 6H), 2.25 - 2.14 (m, 2H), 1.89 (t, J = 7.8 Hz, 6H)</p>

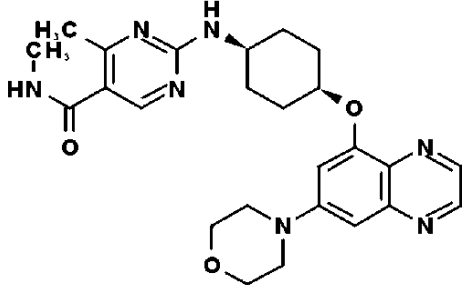
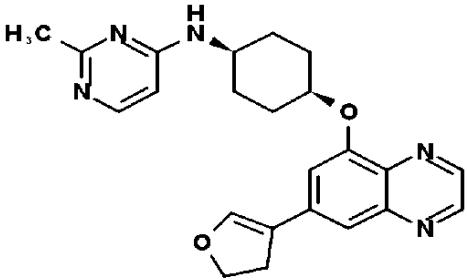
10

20

30

【表 2 - 1】

表 2.

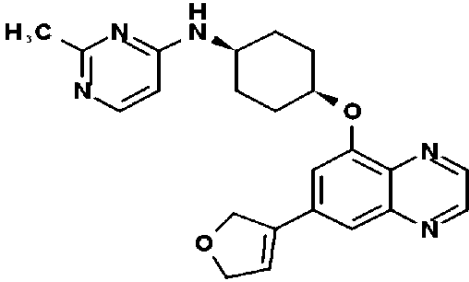
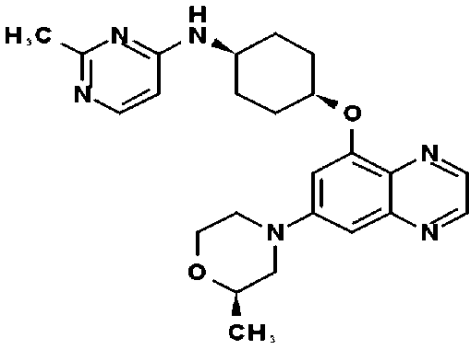
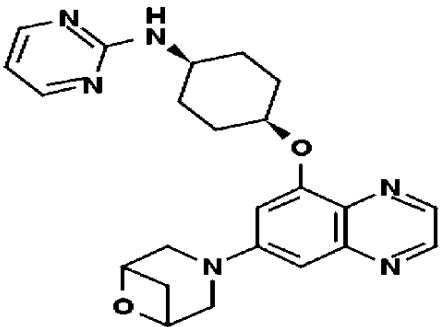
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
287		478.3	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.33 (s, 1H), 6.94 (dd, J = 14.3, 2.5 Hz, 2H), 5.80 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 5.42 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.88 - 4.74 (m, 1H), 4.08 (s, 2H), 3.99 - 3.86 (m, 4H), 3.50 (s, 3H), 3.42 - 3.28 (m, 4H), 3.01 (dd, J = 18.4, 5.0 Hz, 3H), 2.54 (s, 3H), 2.28 - 2.08 (m, 2H), 2.03 - 1.79 (m, 6H).
288		404	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (t, J = 5.2 Hz, 1H), 8.65 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 8.02 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 7.26 (d, J = 1.5 Hz, 1H), 7.08 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 7.00 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 6.07 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.91 (s, 1H), 4.75 (s, 1H), 4.54 (t, J = 9.6 Hz, 2H), 3.03 (td, J = 9.8, 1.6 Hz, 2H), 2.42 (s, 3H), 2.21 - 2.06 (m, 2H), 1.91 - 1.74 (m, 7H).

10

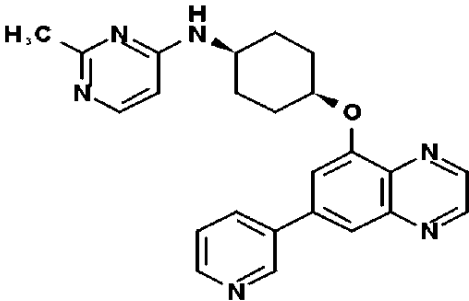
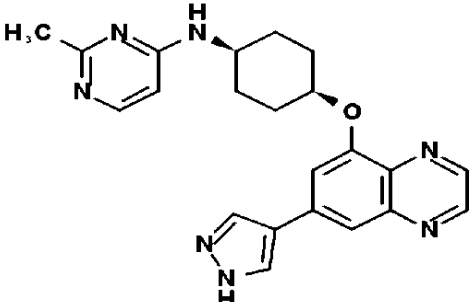
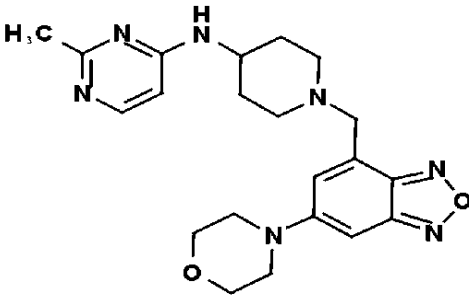
20

30

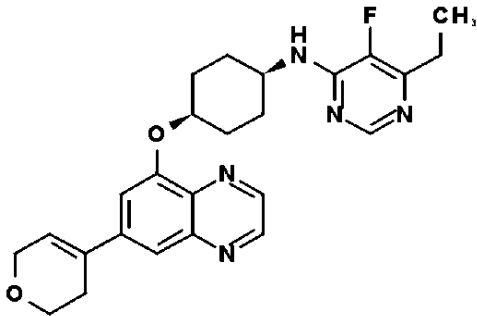
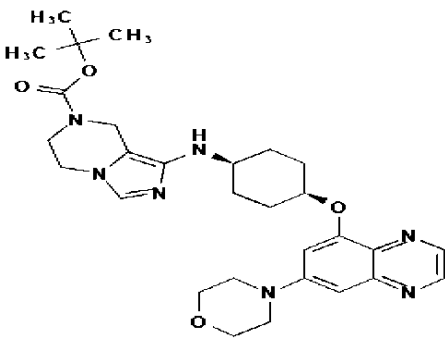
【表 2 - 2】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
289		404	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.79 - 8.71 (m, 2H), 8.03 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 7.39 (s, 1H), 6.38 (s, 1H), 6.08 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 5.06 (s, 2H), 4.83 (d, J = 29.0 Hz, 4H), 2.42 (s, 3H), 2.16 (d, J = 7.2 Hz, 2H), 1.88 (dd, J = 21.2, 8.7 Hz, 6H), 1.58 (s, 2H).
290		435	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.03 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 6.88 (td, J = 19.2, 3.6 Hz, 2H), 6.07 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.87 (s, 1H), 4.74 (s, 1H), 4.06 - 3.93 (m, 1H), 3.80 - 3.69 (m, 2H), 3.58 - 3.38 (m, 2H), 2.94 (td, J = 11.9, 3.5 Hz, 1H), 2.65 - 2.52 (m, 1H), 2.42 (s, 3H), 2.13 (d, J = 10.1 Hz, 2H), 1.81 (d, J = 9.7 Hz, 6H), 1.32 - 1.08 (m, 3H).
291		419.23 [1]	¹ H NMR (400 MHz, Chloroform-d) δ 8.42 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.30 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.04 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.65 - 6.56 (m, 2H), 6.28 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 4.99 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.60 (d, J = 6.5 Hz, 3H), 3.79 (dd, J = 8.2, 4.0 Hz, 0H), 3.62 - 3.38 (m, 4H), 3.17 - 3.03 (m, 1H), 2.07 - 1.90 (m, 2H), 1.89 - 1.59 (m, 7H).

【表 2 - 3】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
292		413	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.83 (dd, J = 2.3, 0.8 Hz, 1H), 8.77 - 8.68 (m, 2H), 8.54 (dd, J = 4.8, 1.6 Hz, 1H), 7.95 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 7.86 (ddd, J = 7.9, 2.4, 1.6 Hz, 1H), 7.76 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 7.31 (ddd, J = 7.9, 4.8, 0.8 Hz, 1H), 7.21 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 7.11 (d, J = 0.9 Hz, 1H), 6.00 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.80 (d, J = 27.2 Hz, 2H), 2.34 (s, 3H), 2.18 - 2.04 (m, 2H), 1.84 - 1.71 (m, 6H).	10
293		402	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 11.20 (s, 1H), 8.74 (t, J = 6.1 Hz, 1H), 8.71 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.03 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 7.96 (s, 2H), 7.75 (t, J = 8.0 Hz, 1H), 7.26 (d, J = 1.5 Hz, 1H), 6.08 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 5.09 (s, 1H), 4.82 (s, 1H), 3.77 (s, 1H), 2.43 (s, 3H), 2.24 - 2.08 (m, 2H), 1.93 - 1.76 (m, 6H).	20 30
294		410.35	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.10 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 7.36 - 7.28 (m, 1H), 6.65 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.13 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.81 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.00 - 3.80 (m, 6H), 3.80 - 3.56 (m, 1H), 3.29 (dd, J = 5.8, 3.8 Hz, 4H), 3.02 - 2.84 (m, 2H), 2.48 (s, 3H), 2.36 (td, J = 11.4, 10.9,	40

【表 2 - 4】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			2.5 Hz, 2H), 2.14 - 1.98 (m, 2H), 1.70 - 1.46 (m, 2H).
295		450.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.98 - 8.78 (m, 2H), 8.33 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.67 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 7.30 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 6.49 - 6.31 (m, 1H), 5.07 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.87 (d, J = 5.5 Hz, 1H), 4.43 (q, J = 2.8 Hz, 2H), 4.24 (s, 1H), 4.02 (t, J = 5.4 Hz, 2H), 2.71 (dtd, J = 13.1, 7.7, 2.7 Hz, 4H), 2.26 (dt, J = 10.4, 5.3 Hz, 2H), 1.97 (d, J = 5.3 Hz, 6H), 1.28 (t, J = 7.6 Hz, 3H).
296		550.6	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.79 - 8.67 (m, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 13.0, 2.6 Hz, 2H), 4.77 (s, 1H), 3.94 (q, J = 6.6, 5.0 Hz, 5H), 3.35 (t, J = 4.8 Hz, 4H), 2.16 (d, J = 33.6 Hz, 2H), 1.86 (m, J = 4.9 Hz, 6H), 1.51 (q, J = 2.0, 1.6 Hz, 9H).

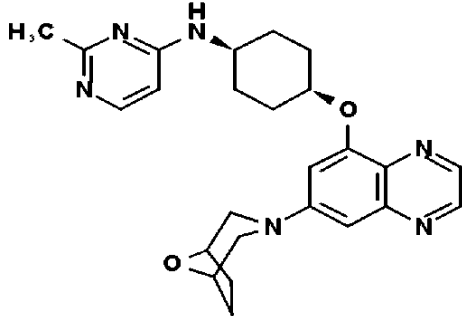
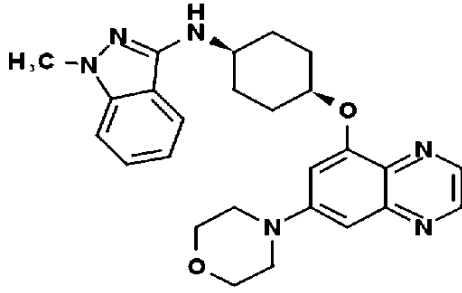
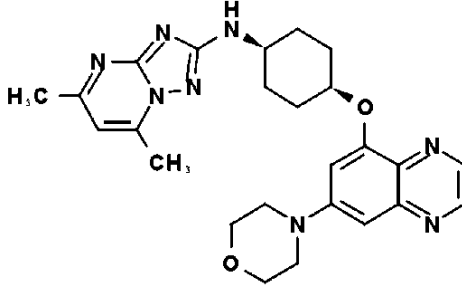
10

20

30

40

【表 2 - 5】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
297		447	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.49 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.02 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.78 (dd, J = 10.1, 2.5 Hz, 2H), 6.08 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.96 (s, 1H), 4.74 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.49 (d, J = 2.3 Hz, 2H), 3.41 (t, J = 5.4 Hz, 2H), 3.12 (dd, J = 11.6, 2.5 Hz, 2H), 2.43 (s, 3H), 2.14 (dd, J = 9.6, 4.9 Hz, 2H), 1.98 - 1.68 (m, 10H).
298		459.4	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.65 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.53 (dt, J = 8.1, 1.0 Hz, 1H), 7.35 (ddd, J = 8.1, 6.8, 1.1 Hz, 1H), 7.20 (dt, J = 8.5, 0.9 Hz, 1H), 7.07 - 6.89 (m, 3H), 4.79 (td, J = 6.1, 3.1 Hz, 1H), 4.02 - 3.91 (m, 4H), 3.87 (s, 3H), 3.43 - 3.25 (m, 4H), 2.34 - 2.15 (m, 2H), 2.10 - 1.88 (m, 6H).
299		475.28	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.02 - 6.89 (m, 2H), 6.57 (d, J = 1.0 Hz, 1H), 4.87 - 4.76 (m, 1H), 4.76 - 4.62 (m, 1H), 4.09 - 3.88 (m, 5H), 3.45 - 3.25 (m, 4H), 2.65 (d, J = 0.8 Hz, 3H), 2.56 (s, 3H), 2.31 - 2.12 (m, 2H), 2.09 - 1.81 (m,

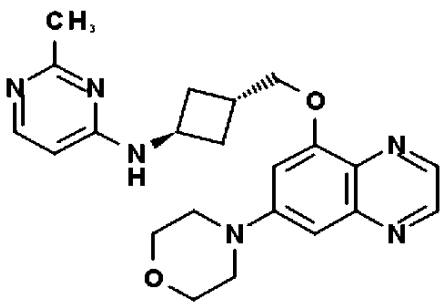
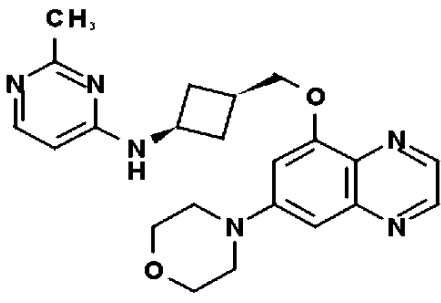
10

20

30

40

【表 2 - 6】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			6H).
300		407.26	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.13 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.85 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.13 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 5.17 (s, 1H), 4.50 (s, 1H), 4.29 (d, J = 6.7 Hz, 2H), 4.03 - 3.82 (m, 4H), 3.45 - 3.32 (m, 4H), 3.04 - 2.93 (m, 1H), 2.58 - 2.50 (m, 2H), 2.49 (s, 3H), 2.24 (ddd, J = 20.4, 10.3, 6.0 Hz, 2H).
301		407.26	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.76 (s, 2H), 8.09 (d, J = 5.7 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.80 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 6.73 (s, 1H), 6.19 (d, J = 5.1 Hz, 1H), 4.35 (s, 1H), 4.17 (d, J = 3.9 Hz, 2H), 4.03 - 3.77 (m, 4H), 3.45 - 3.21 (m, 4H), 2.85 (dd, J = 19.9, 9.1 Hz, 2H), 2.80 - 2.70 (m, 1H), 2.51 (s, 3H), 2.06 (dt, J = 12.7, 6.4 Hz, 2H).

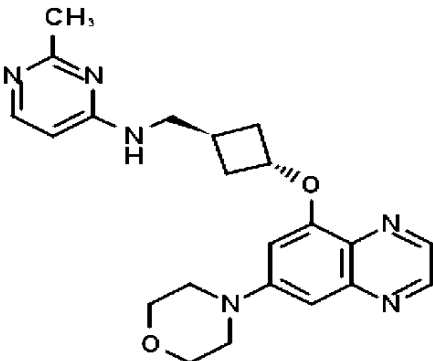
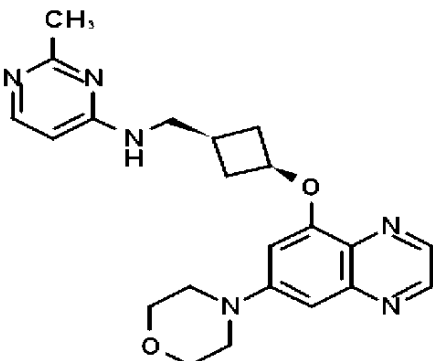
10

20

30

40

【表 2 - 7】

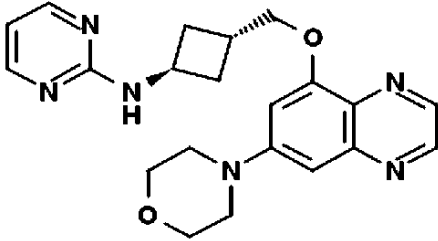
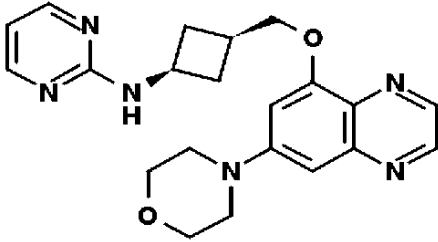
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
302		407.21	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.13 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.55 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.18 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 5.07 - 4.97 (m, 1H), 4.91 (s, 1H), 3.99 - 3.82 (m, 4H), 3.50 (d, J = 5.5 Hz, 1H), 3.38 - 3.23 (m, 4H), 2.72 (dd, J = 8.1, 4.8 Hz, 1H), 2.65 (dt, J = 15.2, 7.7 Hz, 2H), 2.51 (s, 3H), 2.45 (ddd, J = 11.1, 6.8, 3.4 Hz, 2H).
303		407.26	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.10 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.67 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.15 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.95 (s, 1H), 4.79 (p, J = 7.1 Hz, 1H), 3.98 - 3.83 (m, 4H), 3.45 (bt, 2H), 3.36 - 3.27 (m, 4H), 2.79 (dtd, J = 9.8, 7.2, 2.8 Hz, 2H), 2.48 (s, 3H), 2.38 (dt, J = 16.0, 8.0 Hz, 1H), 2.19 (ddd, J = 17.0, 9.7, 2.8 Hz, 2H).

10

20

30

【表 2 - 8】

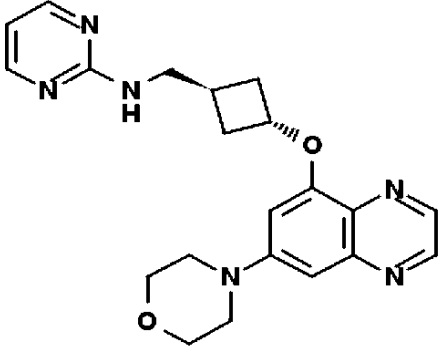
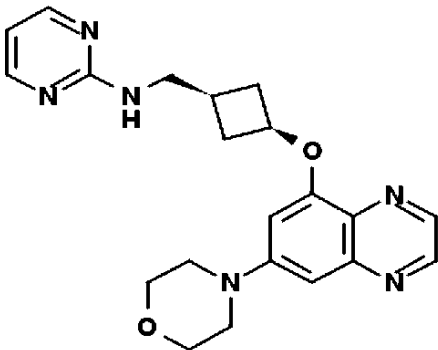
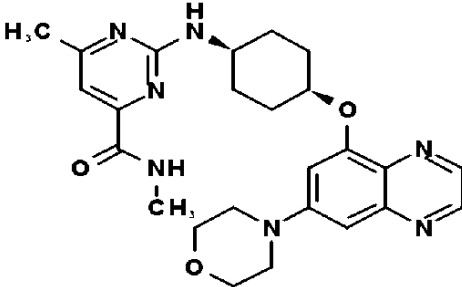
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
304		393.21	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.27 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.93 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.85 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.54 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 5.36 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 4.70 - 4.58 (m, 1H), 4.31 (d, J = 7.7 Hz, 2H), 4.01 - 3.86 (m, 4H), 3.44 - 3.30 (m, 4H), 3.04 - 2.93 (m, 1H), 2.50 (ddd, J = 13.5, 7.8, 3.1 Hz, 2H), 2.31 - 2.19 (m, 2H).
305		393.26	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.81 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.74 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.29 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.93 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.80 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.64 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 6.50 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 4.60 (dq, J = 15.6, 7.6 Hz, 1H), 4.19 (d, J = 4.6 Hz, 2H), 4.01 - 3.84 (m, 4H), 3.43 - 3.27 (m, 4H), 2.88 - 2.78 (m, 2H), 2.78 - 2.68 (m, 1H), 2.08 - 1.97 (m, 2H).

10

20

30

【表 2 - 9】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
306		393.26	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.29 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.63 - 6.51 (m, 2H), 5.21 (s, 1H), 5.03 (p, J = 6.6 Hz, 1H), 4.02 - 3.79 (m, 4H), 3.63 (dd, J = 7.3, 5.9 Hz, 2H), 3.42 - 3.19 (m, 4H), 2.79 - 2.68 (m, 1H), 2.68 - 2.54 (m, 2H), 2.52 - 2.40 (m, 2H).
307		393.26	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.26 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.91 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.68 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 6.53 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 5.19 (s, 1H), 4.76 (p, J = 7.2 Hz, 1H), 3.99 - 3.79 (m, 4H), 3.56 (t, J = 6.4 Hz, 2H), 3.41 - 3.23 (m, 4H), 2.77 (dt, J = 9.7, 7.3 Hz, 2H), 2.39 (dt, J = 16.5, 8.3 Hz, 1H), 2.19 (dd, J = 19.6, 9.7 Hz, 2H).
308		478.64	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.79 (s, 1H), 7.23 (s, 1H), 6.95 (dd, J = 14.0, 2.5 Hz, 2H), 5.23 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.09 (s, 1H), 3.94 (dd, J = 6.1, 3.6 Hz, 4H), 3.43 - 3.23 (m, 4H), 3.02 (d, J = 5.1 Hz, 3H), 2.43 (s, 3H).

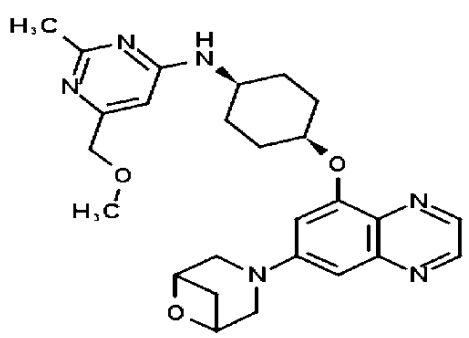
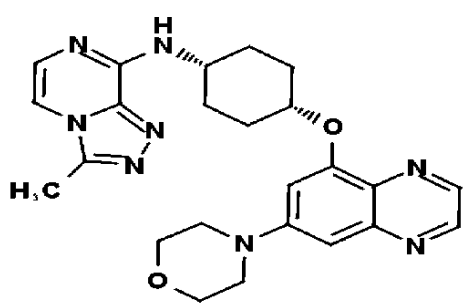
10

20

30

40

【表 2 - 1 0】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			2.31 - 2.12 (m, 2H), 1.95 (p, J = 10.0 Hz, 6H).
309		477.54	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.85 (s, 2H), 6.30 (s, 1H), 5.06 (d, J = 16.2 Hz, 1H), 4.85 (d, J = 6.5 Hz, 3H), 4.44 - 4.30 (m, 2H), 4.14 (q, J = 7.1 Hz, 1H), 3.89 - 3.60 (m, 5H), 3.50 (s, 3H), 3.35 (q, J = 7.2 Hz, 1H), 2.49 (s, 3H), 2.24 (d, J = 8.7 Hz, 2H), 2.08 (d, J = 7.7 Hz, 2H), 1.92 (q, J = 9.6, 6.9 Hz, 6H), 1.28 (t, J = 7.1 Hz, 2H).
310		461.26	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.72 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.66 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.35 (d, J = 4.3 Hz, 1H), 7.17 (d, J = 4.8 Hz, 1H), 6.97 (dd, J = 12.0, 2.2 Hz, 2H), 4.92 (s, 1H), 4.35 (s, 1H), 4.01 - 3.84 (m, 4H), 3.48 - 3.26 (m, 4H), 2.72 (s, 3H), 2.36 - 2.21 (m, 2H), 2.13 - 1.85 (m, 6H).

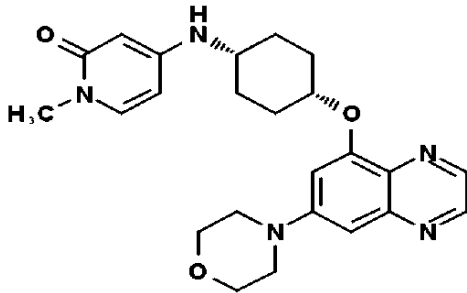
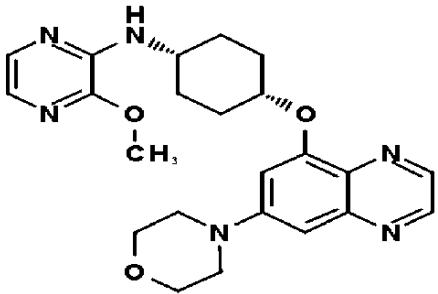
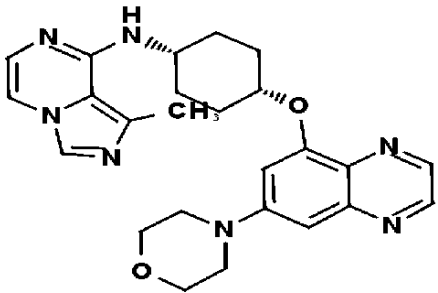
10

20

30

40

【表 2 - 1 1】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
311		436.29	
312		437.33	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.65 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.57 (d, J = 3.2 Hz, 1H), 7.35 - 7.28 (m, 2H), 6.97 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.23 (s, 1H), 4.76 (s, 1H), 4.20 (s, 1H), 4.01 (s, 3H), 3.98 - 3.84 (m, 4H), 3.44 - 3.29 (m, 4H), 2.27 - 2.14 (m, 2H), 2.05 - 1.85 (m, 6H).
313		460.29	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (dd, J = 21.2, 1.9 Hz, 2H), 7.86 (s, 1H), 7.18 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 7.00 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 6.96 (dd, J = 12.1, 2.4 Hz, 2H), 5.18 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.30 (dd, J = 11.9, 6.0 Hz, 1H), 4.05 - 3.77 (m, 4H), 3.45 - 3.14 (m, 4H), 2.75 (s, 3H), 2.37 - 2.14 (m, 2H), 2.14 - 1.87 (m, 6H).

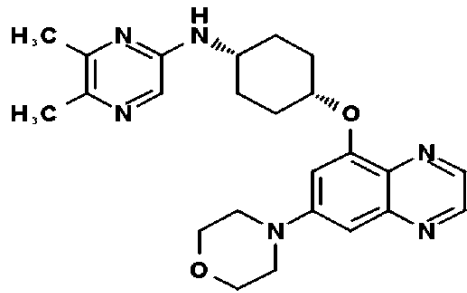
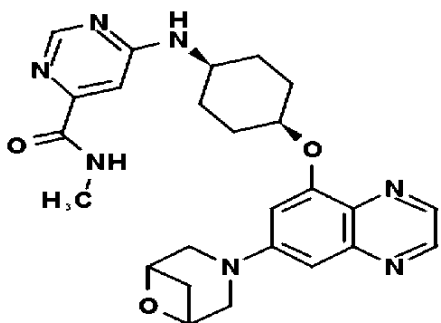
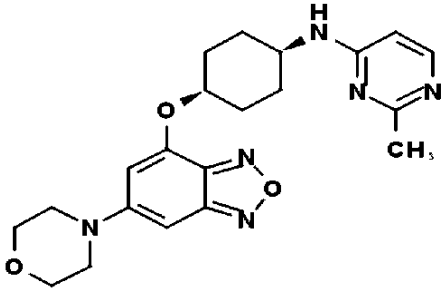
10

20

30

40

【表 2 - 1 2】

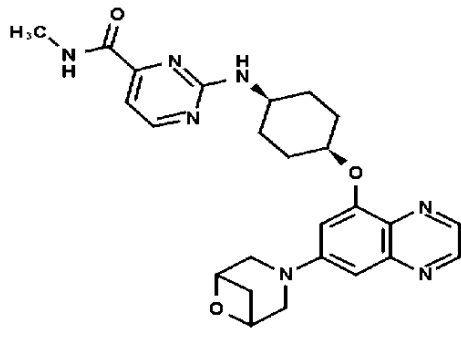
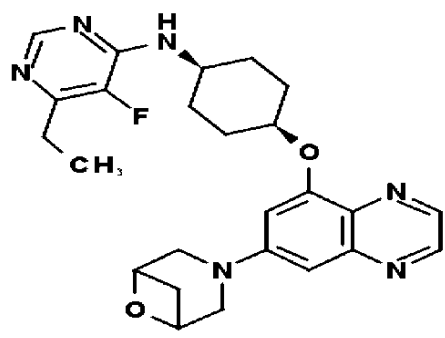
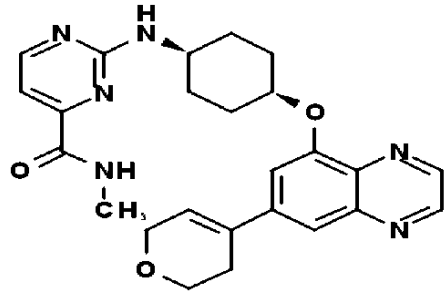
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
314		435.32	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.66 (s, 1H), 6.94 (dd, J = 14.9, 2.4 Hz, 2H), 4.84 - 4.74 (m, 1H), 4.47 (s, 1H), 4.02 - 3.87 (m, 4H), 3.87 - 3.75 (m, 1H), 3.47 - 3.21 (m, 4H), 2.38 (d, J = 4.0 Hz, 6H), 2.26 - 2.13 (m, 2H), 2.01 - 1.78 (m, 6H).
315		476.23	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.59 - 8.46 (m, 2H), 7.98 (s, 1H), 7.18 (s, 1H), 6.85 (s, 2H), 4.85 (d, J = 6.6 Hz, 2H), 3.90 - 3.62 (m, 5H), 3.35 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 3.03 (d, J = 5.1 Hz, 3H), 2.27 (s, 2H), 2.13 - 1.80 (m, 7H), 10.58 (s, 2H).
316		411.34	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.14 (d, J = 6.2 Hz, 1H), 6.50 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 6.43 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 6.21 (d, J = 6.2 Hz, 1H), 4.98 (s, 1H), 4.01 - 3.81 (m, 5H), 3.37 - 3.18 (m, 5H), 2.54 (s, 3H), 2.20 (d, J = 9.1 Hz, 3H), 2.05 - 1.71 (m, 6H).

10

20

30

【表 2 - 1 3】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
317		476.55	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 - 8.41 (m, 2H), 7.79 (s, 1H), 7.33 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 6.85 (q, J = 2.6 Hz, 3H), 4.85 (d, J = 6.3 Hz, 4H), 4.08 (s, 0H), 3.88 - 3.58 (m, 5H), 3.35 (q, J = 6.8 Hz, 1H), 3.03 (d, J = 5.1 Hz, 3H), 2.36 - 2.13 (m, 2H), 2.15 - 1.84 (m, 6H).
318		465.3	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.56 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.33 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.85 (s, 2H), 5.07 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.86 (d, J = 6.4 Hz, 4H), 4.23 (s, 2H), 3.90 - 3.62 (m, 4H), 3.35 (q, J = 7.1 Hz, 1H), 2.73 (qd, J = 7.6, 2.3 Hz, 2H), 2.27 (d, J = 10.1 Hz, 3H), 2.12 - 1.82 (m, 6H), 1.28 (t, J = 7.6 Hz, 3H).
319		461.38	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.83 (dt, J = 6.4, 1.4 Hz, 2H), 8.51 (d, J = 4.7 Hz, 1H), 7.78 (s, 1H), 7.68 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 7.34 (dd, J = 4.9, 0.9 Hz, 1H), 6.38 (s, 1H), 5.32 (d, J = 0.9 Hz, 1H), 4.87 (s, 1H), 4.43 (q, J = 2.8 Hz, 2H), 4.17 - 3.94 (m, 3H), 3.03 (dd, J = 5.1, 1.0 Hz, 3H), 2.76 - 2.59 (m, 2H), 2.23 (d, J

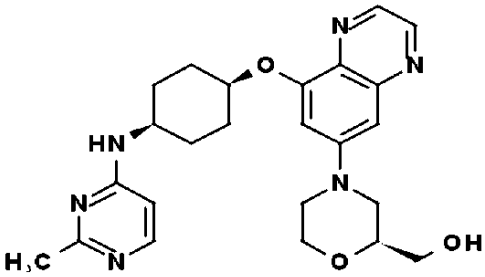
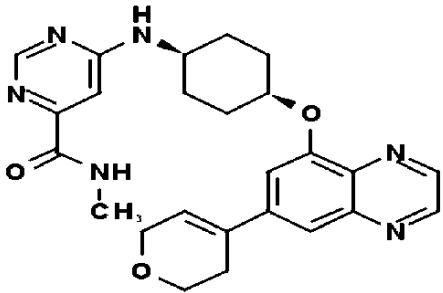
10

20

30

40

【表 2 - 1 4】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			= 12.7 Hz, 2H), 1.98 (d, J = 7.7 Hz, 6H).
320		451.44	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.10 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 6.15 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.99 (s, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.19 - 4.08 (m, 1H), 3.94 - 3.69 (m, 5H), 3.63 (t, J = 11.3 Hz, 2H), 3.04 (td, J = 11.9, 3.5 Hz, 1H), 2.92 - 2.80 (m, 1H), 2.50 (s, 3H), 2.20 (d, J = 8.9 Hz, 2H), 1.90 (d, J = 5.6 Hz, 7H).
321		461.63	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.81 - 8.67 (m, 2H), 8.42 (s, 1H), 7.89 (s, 1H), 7.58 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 7.09 (s, 1H), 6.28 (dq, J = 3.0, 1.6 Hz, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.33 (q, J = 2.8 Hz, 2H), 3.92 (t, J = 5.4 Hz, 2H), 2.93 (d, J = 5.1 Hz, 3H), 2.67 - 2.48 (m, 2H), 2.18 (d, J = 11.3 Hz, 2H), 1.98 - 1.73 (m, 6H).

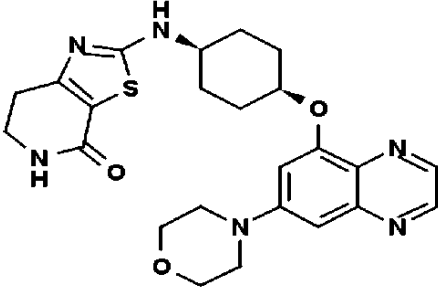
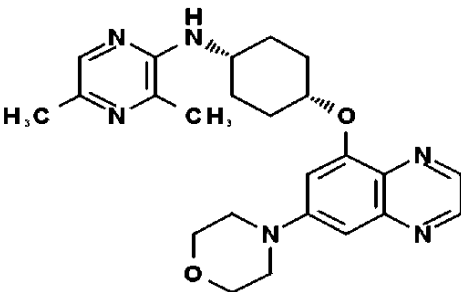
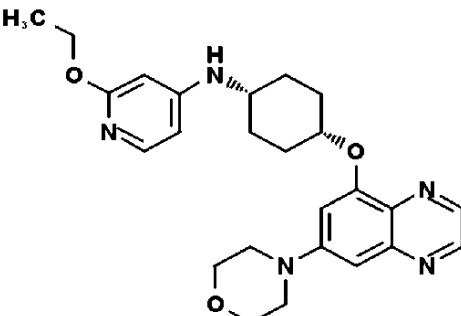
10

20

30

40

【表 2 - 1 5】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
322		481.3	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.52 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.85 (dd, J = 18.8, 2.5 Hz, 2H), 5.59 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 5.24 (s, 1H), 4.72 (s, 1H), 3.84 (t, J = 4.9 Hz, 5H), 3.66 - 3.39 (m, 3H), 3.30 - 3.19 (m, 5H), 2.78 (t, J = 7.0 Hz, 2H), 2.11 (s, 1H), 2.00 - 1.66 (m, 6H).
323		435.33	
324		450.35	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.79 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.13 (dd, J = 5.9, 2.1 Hz, 1H), 5.87 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 4.87 - 4.70 (m, 1H), 4.32 (q, J = 7.1 Hz, 2H), 4.21 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.05 - 3.81 (m, 4H), 3.60 - 3.45 (m, 1H), 3.45 - 3.24 (m, 4H), 2.33 - 2.10 (m, 2H), 2.02 - 1.77 (m, 6H), 1.39 (t, J = 7.1 Hz, 3H). [2]

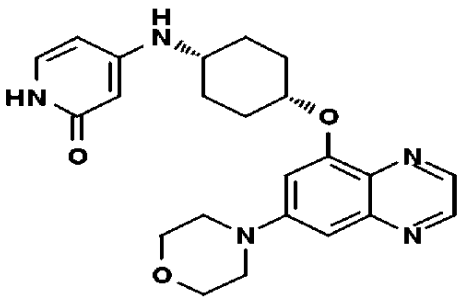
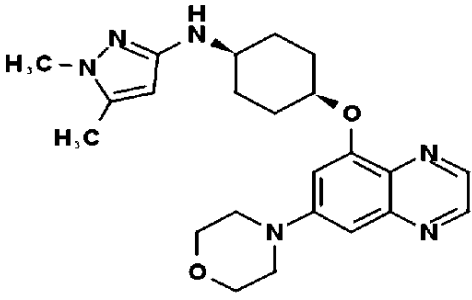
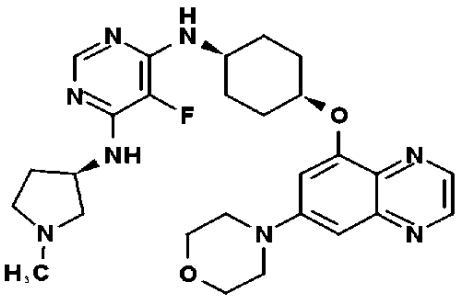
10

20

30

40

【表 2 - 1 6】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
325		422.34	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 11.03 (s, 1H), 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.09 (d, J = 7.1 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.67 (dd, J = 7.2, 2.1 Hz, 1H), 5.58 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 4.84 - 4.75 (m, 1H), 4.41 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.02 - 3.87 (m, 4H), 3.54 - 3.43 (m, 1H), 3.42 - 3.27 (m, 4H), 2.28 - 2.15 (m, 2H), 2.05 - 1.78 (m, 6H).
326		423.4	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.01 - 6.83 (m, 2H), 5.34 (s, 1H), 4.73 (d, J = 6.1 Hz, 1H), 3.91 (dd, J = 6.1, 3.7 Hz, 4H), 3.59 (s, 4H), 3.44 (s, 1H), 3.33 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 2.17 (s, 5H), 1.86 (q, J = 9.1, 6.3 Hz, 6H).
327		523.35	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.00 (d, J = 1.3 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.88 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.63 (d, J = 9.0 Hz, 2H), 4.15 (s, 1H), 3.92 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 3.39 - 3.26 (m, 4H), 2.91 (td, J = 8.6, 3.9 Hz, 1H),

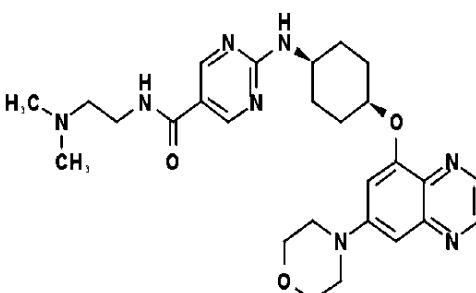
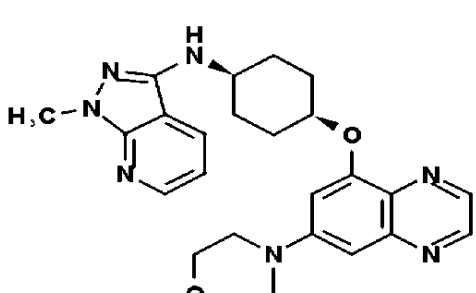
10

20

30

40

【表 2 - 1 7】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			2.72 - 2.55 (m, 2H), 2.50 - 2.10 (m, 7H), 1.91 (d, J = 5.5 Hz, 6H), 1.72 (d, J = 4.7 Hz, 1H).
328		521.69	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.81 - 8.59 (m, 3H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.92 - 6.73 (m, 2H), 5.50 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.72 (s, 1H), 4.01 (s, 2H), 3.84 (t, J = 4.9 Hz, 5H), 3.50 (q, J = 5.3 Hz, 3H), 3.37 - 3.17 (m, 5H), 2.62 (t, J = 5.6 Hz, 2H), 2.34 (s, 7H), 2.13 (d, J = 10.7 Hz, 2H), 1.87 (d, J = 22.1 Hz, 6H).
329		460.44	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.62 (t, J = 1.7 Hz, 1H), 8.55 (t, J = 1.7 Hz, 1H), 8.37 (dt, J = 4.6, 1.5 Hz, 1H), 7.78 (dt, J = 7.9, 1.5 Hz, 1H), 6.93 - 6.77 (m, 3H), 4.71 (d, J = 6.1 Hz, 1H), 3.96 - 3.77 (m, 6H), 3.33 - 3.18 (m, 4H), 2.23 - 2.07 (m, 2H), 2.01 - 1.77 (m, 6H).

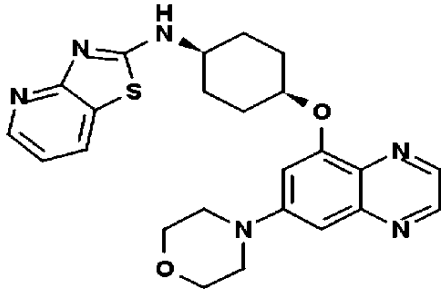
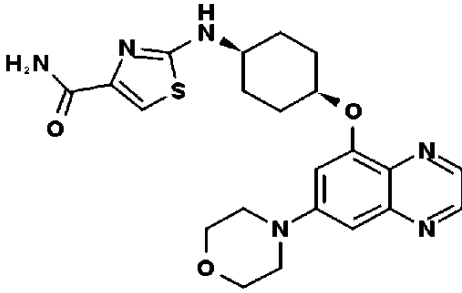
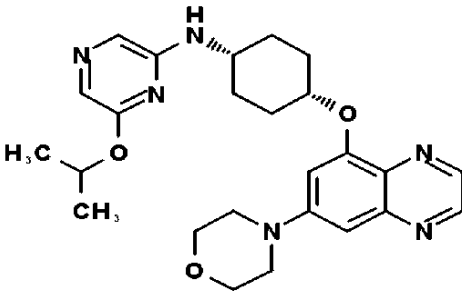
10

20

30

40

【表 2 - 1 8】

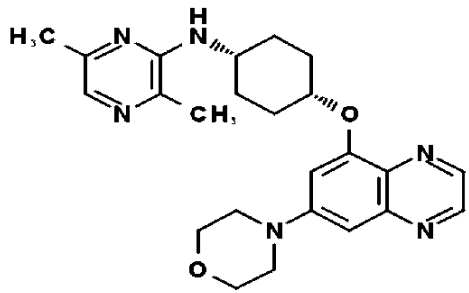
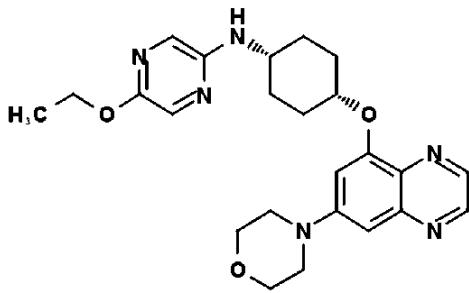
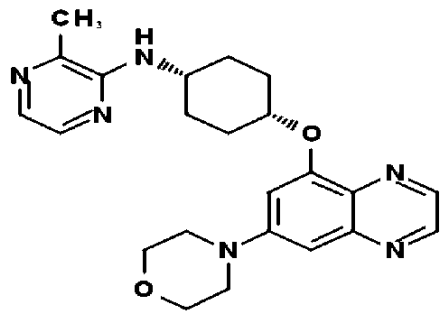
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
330		463.6	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.10 (dd, J = 4.8, 1.5 Hz, 1H), 7.61 (dd, J = 8.0, 1.5 Hz, 1H), 7.12 (dd, J = 8.1, 4.8 Hz, 1H), 6.95 - 6.76 (m, 2H), 5.39 (s, 1H), 4.74 (s, 1H), 3.96 - 3.75 (m, 5H), 3.26 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 2.16 (d, J = 12.8 Hz, 2H), 2.05 - 1.71 (m, 6H).
331		455.4	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.28 (d, J = 0.7 Hz, 1H), 6.94 - 6.77 (m, 2H), 5.39 (s, 1H), 5.09 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.71 (s, 1H), 3.93 - 3.77 (m, 4H), 3.58 (s, 1H), 3.26 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 4H), 2.11 (s, 2H), 1.97 - 1.66 (m, 6H).
332		465.36	

10

20

30

【表 2 - 1 9】

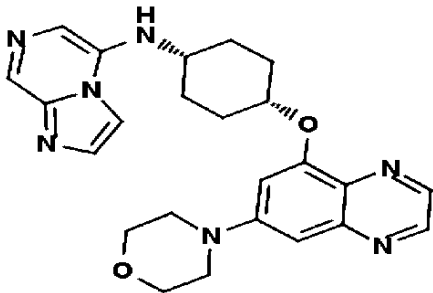
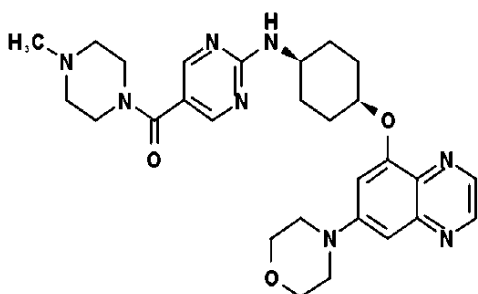
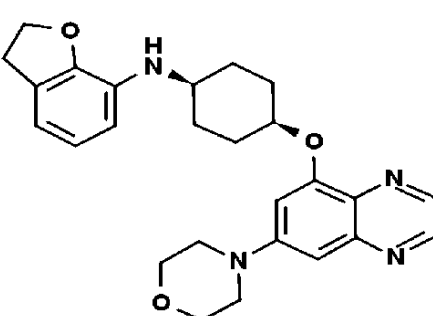
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
333		435.33	
334		451.36	
335		421.37	

10

20

30

【表 2 - 2 0】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
336		446.35	
337		533.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.67 - 8.58 (m, 1H), 8.58 - 8.49 (m, 1H), 8.33 (s, 2H), 6.92 - 6.78 (m, 2H), 5.41 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.72 (s, 1H), 3.98 (d, J = 8.6 Hz, 1H), 3.84 (t, J = 4.8 Hz, 4H), 3.58 (s, 4H), 3.26 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 2.36 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 2.25 (s, 3H), 2.13 (d, J = 10.8 Hz, 2H), 1.84 (s, 6H).
338		447.43	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d6) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.17 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.84 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.69 - 6.61 (m, 1H), 6.50 (m, 2H), 4.94 (m, 1H), 4.50 (t, J = 8.7 Hz, 2H), 4.27 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 3.79 (m, 4H), 3.45 (m, 1H), 3.32 (m, 4H), 3.13 (t, J = 8.7 Hz, 2H), 1.98 (m, 2H), 1.74 (m, 6H).

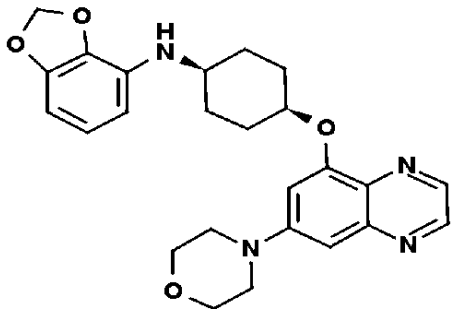
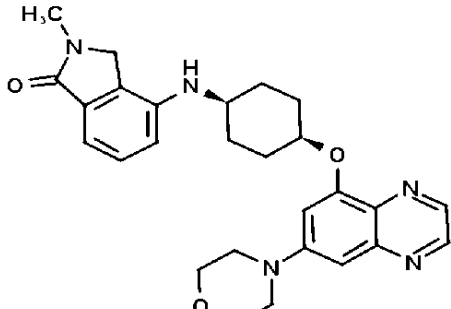
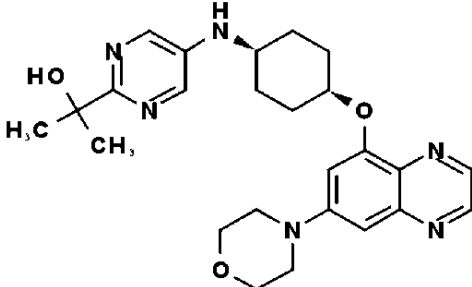
10

20

30

40

【表 2 - 2 1】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
339		449.41	1H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.58 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.14 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.84 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.64 (t, J = 8.0 Hz, 1H), 6.36 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 6.22 (dd, J = 7.7, 1.0 Hz, 1H), 5.89 (s, 2H), 4.96 (m, 2H), 3.79 (m, 4H), 3.51 (m, 1H), 3.32 (m, 4H), 2.03 (m, 2H), 1.75 (m, 6H).
340		474.48	1H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.73 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.25 (m, 1H), 7.14 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 - 6.78 (m, 3H), 5.47 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 4.94 (m, 1H), 4.29 (s, 2H), 3.79 (m, 4H), 3.51 (m, 1H), 3.06 (s, 3H), 2.09 (m, 2H), 1.81 (m, 6H).
341		465.57	1H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.58 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.17 (s, 2H), 7.15 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.06 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.92 (m, 1H), 4.77 (s, 1H), 3.79 (m, 4H), 3.50 (m, 1H), 3.30 (m, 4H), 2.02 (m, 2H), 1.80 (m, 6H), 1.42 (s, 6H).

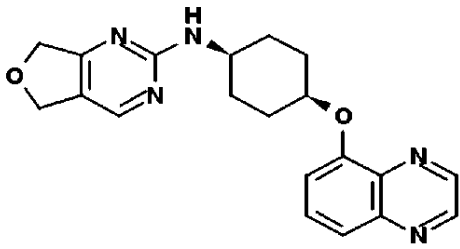
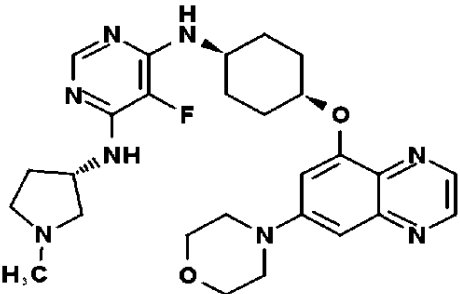
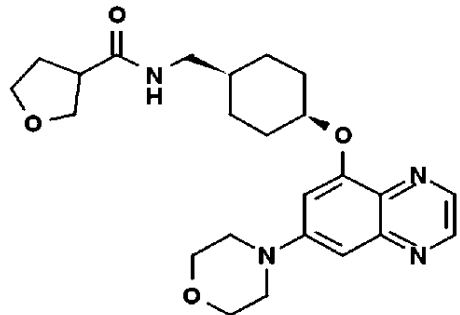
10

20

30

40

【表 2 - 2 2】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
342		364.27	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.86 (d, J = 0.9 Hz, 1H), 8.84 (s, 1H), 8.16 (s, 1H), 7.73 - 7.63 (m, 2H), 7.17 (d, J = 7.0 Hz, 1H), 5.24 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 5.03 (s, 2H), 4.83 (s, 2H), 4.79 (s, 1H), 4.12 - 3.99 (m, 1H), 2.26 - 2.14 (m, 2H), 2.01 - 1.84 (m, 6H).
343		523.44	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.00 (d, J = 1.3 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.88 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.63 (d, J = 9.0 Hz, 2H), 4.15 (s, 1H), 3.92 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 3.39 - 3.26 (m, 4H), 2.91 (td, J = 8.6, 3.9 Hz, 1H), 2.72 - 2.55 (m, 2H), 2.50 - 2.10 (m, 7H), 1.91 (d, J = 5.5 Hz, 6H), 1.72 (d, J = 4.7 Hz, 1H).
344		441.58	

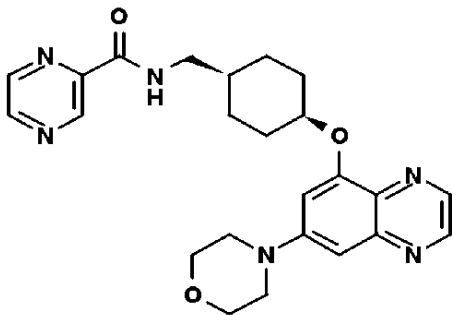
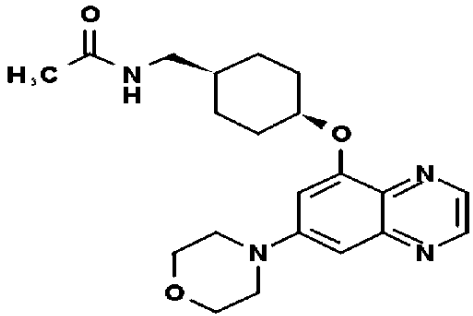
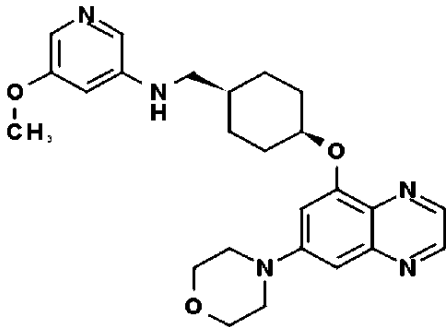
10

20

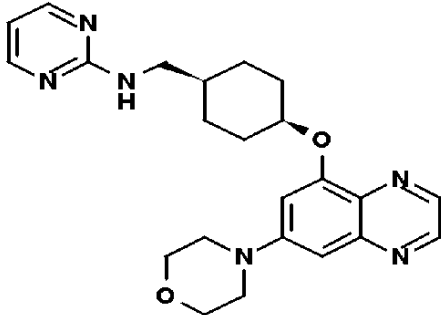
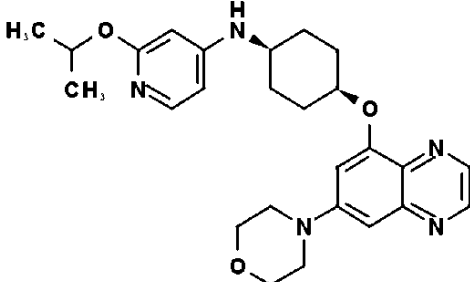
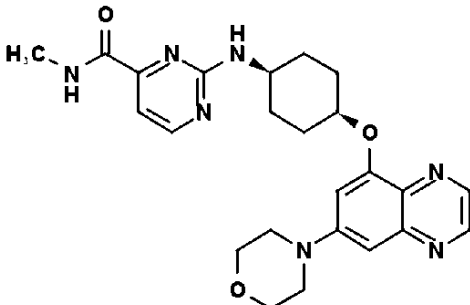
30

40

【表 2 - 2 3】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
345		449.59	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 9.18 (d, J = 1.5 Hz, 1H), 8.98 (t, 1H), 8.87 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 8.76 - 8.69 (m, 2H), 8.57 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.12 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 6.82 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.94 (m, 1H), 3.78 (m, 4H), 3.27 (m, 6H), 1.99 (m, 2H), 1.83 - 1.48 (m, 7H).	10
346		385.56	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.85 (t, 1H), 7.12 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.93 (m, 1H), 3.78 (m, 4H), 3.31 (m, 3H), 2.95 (t, J = 6.0 Hz, 2H), 2.03 - 1.90 (m, 2H), 1.80 (s, 3H), 1.52 (m, 7H).	20
347		450.63	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.59 (s, 1H), 7.60 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 7.46 (s, 1H), 7.13 (s, 1H), 6.83 (s, 1H), 6.46 (s, 1H), 5.97 (m, 1H), 4.96 (m, 1H), 3.87 - 3.70 (m, 7H), 3.30 (s, 4H), 2.95 (t, J = 5.7 Hz, 2H), 1.99 (m, 2H), 1.62 (t, J = 18.1 Hz, 7H).	30

【表 2 - 2 4】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
348		421.6	1H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.24 (d, J = 4.7 Hz, 1H), 7.22 (t, J = 6.0 Hz, 1H), 7.11 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 6.82 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.51 (t, J = 4.7 Hz, 1H), 4.93 (m, 1H), 3.78 (m, 4H), 3.31 (m, 4H), 3.19 (t, J = 6.5 Hz, 2H), 1.97 (m, 2H), 1.55 (m, 7H).
349		464.58	1H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.57 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.59 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 7.14 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.82 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.44 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 6.22 (dd, J = 5.8, 2.1 Hz, 1H), 5.80 - 5.74 (m, 1H), 5.19 - 5.11 (m, 1H), 4.92 (m, 1H), 3.79 (m, 4H), 3.32 (m, 4H), 2.01 (m, 2H), 1.75 (m, 6H), 1.21 (d, J = 6.1 Hz, 6H).
350		464.42	1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 4.79 (s, 1H), 4.24 - 3.76 (m, 5H), 3.50 - 3.20 (m, 4H), 3.02 (d, J = 5.1 Hz, 3H), 2.20 (d, J = 12.8 Hz, 2H), 2.09 - 1.75 (m, 6H), 5.29 - 5.19 (m, 1H), 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.49 (d, J = 4.8 Hz, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.32 (d, J = 4.9

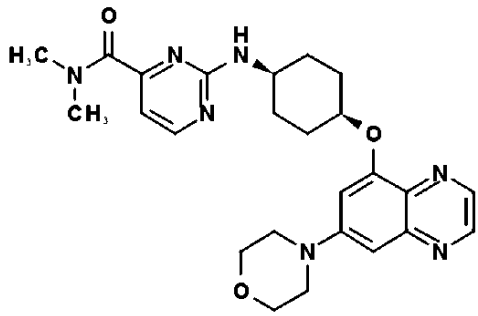
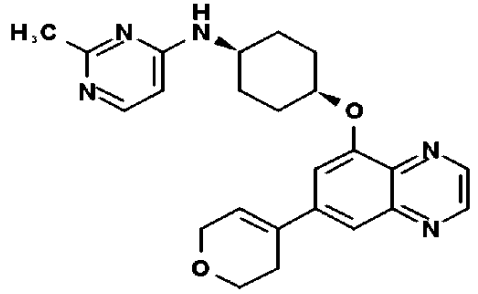
10

20

30

40

【表 2 - 2 5】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			Hz, 1H), 7.02 - 6.86 (m, 2H).
351		478.38	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.38 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 14.5, 2.4 Hz, 2H), 6.68 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 5.28 (s, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.22 - 3.86 (m, 5H), 3.34 (t, J = 4.8 Hz, 4H), 3.17 - 2.97 (m, 6H), 2.20 (s, 2H), 1.91 (d, J = 5.1 Hz, 6H).
352		418.5	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.91 - 8.75 (m, 2H), 8.11 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 7.68 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 6.37 (tt, J = 3.0, 1.5 Hz, 1H), 6.16 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.99 (s, 1H), 4.88 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.43 (q, J = 2.8 Hz, 2H), 4.02 (t, J = 5.4 Hz, 2H), 3.85 (s, 1H), 2.77 - 2.64 (m, 2H), 2.51 (s, 3H), 2.23 (d, J = 13.2 Hz, 2H), 2.03 - 1.82 (m, 6H).

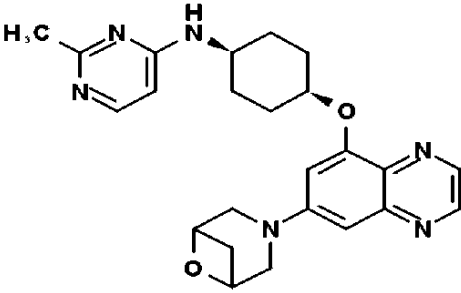
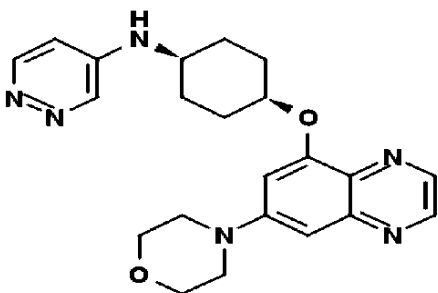
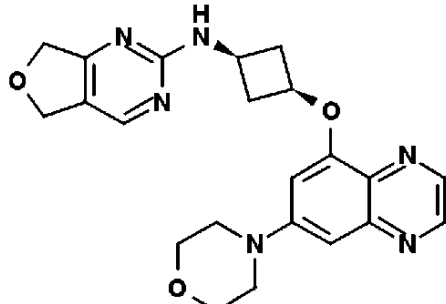
10

20

30

40

【表 2 - 2 6】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
353		433.62	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.67 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.11 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.85 (s, 2H), 6.16 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 5.00 (s, 1H), 4.85 (d, J = 6.5 Hz, 3H), 3.93 - 3.57 (m, 5H), 3.35 (q, J = 7.1 Hz, 1H), 2.62 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 2.50 (s, 3H), 2.24 (d, J = 8.9 Hz, 2H), 2.01 - 1.81 (m, 6H).
354		407.56	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.73 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 3.1 Hz, 1H), 8.58 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.47 (d, J = 6.2 Hz, 1H), 7.15 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.99 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.65 (m, 1H), 4.94 (m, 1H), 3.79 (m, 4H), 3.55 (m, 1H), 3.35 (m, 4H), 2.03 (m, 2H), 1.78 (m, 6H).
355		421.23	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.17 (s, 1H), 6.93 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 6.71 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 5.36 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 5.04 (s, 2H), 4.85 (s, 2H), 4.74 - 4.61 (m, 1H), 4.40 - 4.28 (m, 1H), 4.02 - 3.82 (m, 4H), 3.43 - 3.27 (m, 4H), 3.26 - 3.13 (m, 2H), 2.35 (dd, J = 19.4, 9.4 Hz, 2H).

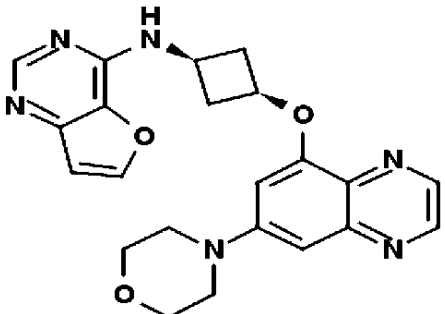
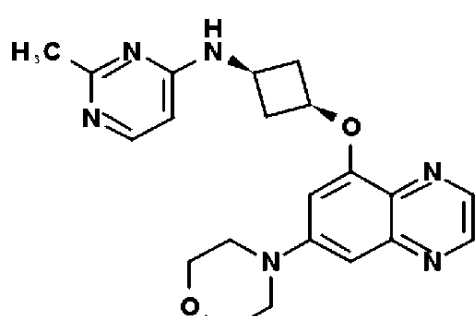
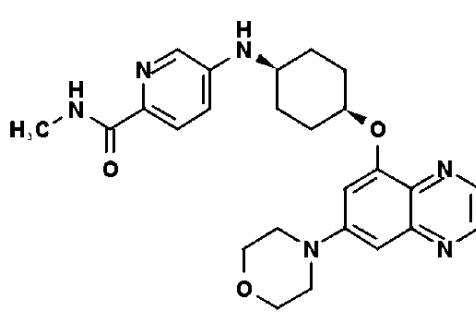
10

20

30

40

【表 2 - 2 7】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
356		419.19	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.72 (s, 1H), 8.62 (d, J = 1.5 Hz, 1H), 8.50 (s, 1H), 7.74 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.73 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 5.44 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 4.82 - 4.72 (m, 1H), 4.72 - 4.61 (m, 1H), 4.00 - 3.86 (m, 4H), 3.40 - 3.32 (m, 4H), 3.32 - 3.22 (m, 2H), 2.53 - 2.40 (m, 2H).
357		393.39	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.12 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.70 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.13 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 5.06 (s, 1H), 4.72 (p, J = 6.9 Hz, 1H), 4.18 (s, 1H), 3.98 - 3.85 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 3.27 - 3.13 (m, 2H), 2.50 (s, 3H), 2.36 (ddd, J = 12.7, 10.0, 2.9 Hz, 2H).
358		463.41	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.57 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.22 (m, 1H), 8.00 (d, J = 2.7 Hz, 1H), 7.73 (d, J = 8.6 Hz, 1H), 7.15 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 7.02 (dd, J = 8.7, 2.8 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.50 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.93 (m, 1H), 3.79 (m, 4H), 3.52

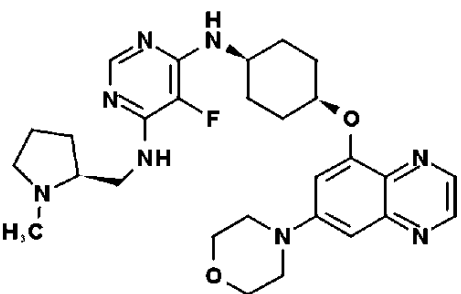
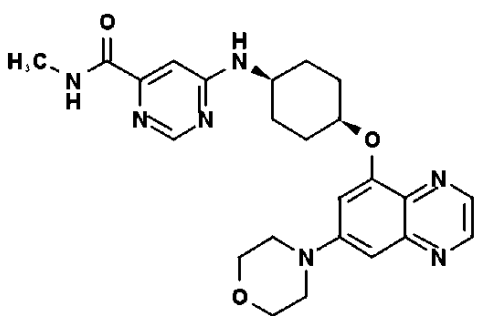
10

20

30

40

【表 2 - 2 8】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			(m, 1H), 3.34 (m, 4H), 2.76 (d, J = 4.9 Hz, 3H), 2.04 (m, 2H), 1.79 (m, 6H).
359		537.71	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.99 (d, J = 1.3 Hz, 1H), 6.92 (dd, J = 16.0, 2.5 Hz, 2H), 5.12 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 4.76 (d, J = 5.4 Hz, 1H), 4.69 - 4.54 (m, 1H), 4.15 (s, 1H), 4.01 - 3.82 (m, 4H), 3.72 (ddd, J = 13.2, 7.6, 2.9 Hz, 1H), 3.44 - 3.21 (m, 5H), 3.21 - 2.99 (m, 1H), 2.46 (dq, J = 7.9, 3.9 Hz, 1H), 2.34 (s, 3H), 2.22 (t, J = 8.8 Hz, 3H), 1.86 (dd, J = 10.0, 4.8 Hz, 7H), 1.79 - 1.51 (m, 2H).
360		464.58	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.16 (d, J = 1.2 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 17.1, 2.5 Hz, 2H), 5.38-5.21 (m, 1H), 4.90 - 4.77 (m, 1H), 3.91 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 5H), 3.44 - 3.26 (m, 4H), 3.00 (d, J = 5.1 Hz,

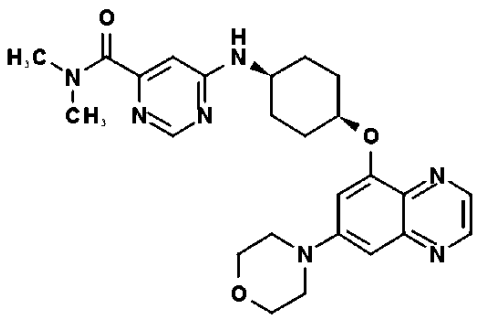
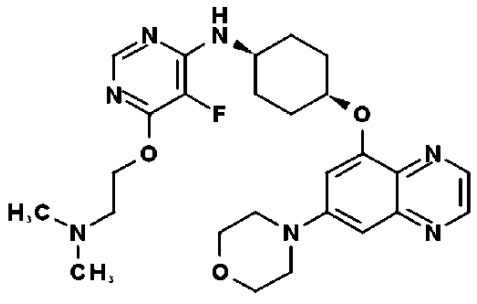
10

20

30

40

【表 2 - 2 9】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			3H), 2.23 (d, J = 11.4 Hz, 2H), 2.04 - 1.76 (m, 6H).
361		478.57	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.38 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 7.00 - 6.85 (m, 2H), 6.68 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 5.29 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.04 (s, 1H), 3.92 (dd, J = 6.0, 3.8 Hz, 4H), 3.41 - 3.26 (m, 4H), 3.10 (s, 3H), 3.04 (s, 3H), 2.19 (d, J = 8.7 Hz, 2H).
362		512.55	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (t, J = 1.6 Hz, 1H), 8.04 (s, 1H), 6.95 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.7 Hz, 1H), 4.88 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.48 (t, J = 5.9 Hz, 2H), 4.17 (s, 1H), 4.01 - 3.81 (m, 4H), 3.34 (t, J = 4.7 Hz, 4H), 2.73 (t, J = 5.9 Hz, 2H), 2.33 (d, J = 1.2 Hz, 8H), 2.07 - 1.73 (m, 6H).

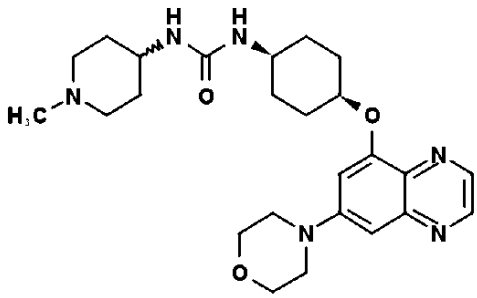
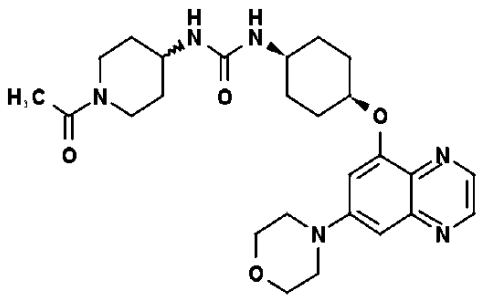
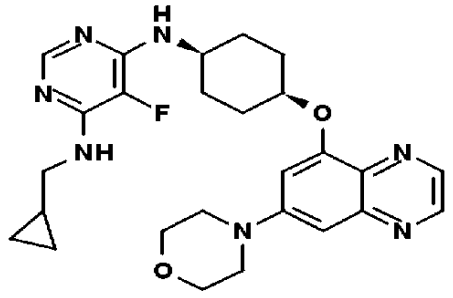
10

20

30

40

【表 2 - 3 0】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
363		469.62	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.92 (dd, J = 21.1, 2.5 Hz, 2H), 4.74 (s, 1H), 4.35 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.12 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.03 - 3.67 (m, 5H), 3.63 - 3.50 (m, 1H), 3.47 - 3.20 (m, 4H), 2.77 (d, J = 11.3 Hz, 2H), 2.28 (s, 3H), 2.22 - 2.04 (m, 4H), 1.90 (dd, J = 38.6, 8.3 Hz, 8H), 1.45 (qd, J = 11.1, 3.8 Hz, 2H).
364		497.61	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.92 (dd, J = 21.8, 2.5 Hz, 2H), 4.75 (s, 1H), 4.47 (dd, J = 28.7, 10.8 Hz, 2H), 4.19 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 3.99 - 3.68 (m, 6H), 3.46 - 3.27 (m, 4H), 3.18 (t, J = 11.7 Hz, 1H), 2.85 - 2.64 (m, 1H), 2.11 (s, 5H), 1.83 (d, J = 4.9 Hz, 6H), 1.41 - 1.17 (m, 5H).
365		495.54	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.67 (dd, J = 21.6, 1.9 Hz, 2H), 8.01 (s, 1H), 6.94 (dd, J = 16.5, 2.5 Hz, 2H), 4.79 (s, 1H), 4.67 (s, 2H), 4.18 (s, 2H), 3.93 (t, J = 4.8 Hz, 4H), 3.41 - 3.27 (m, 6H), 2.20 (d, J = 9.9 Hz, 2H), 1.93 (d, J = 5.5 Hz, 6H), 0.63 - 0.50

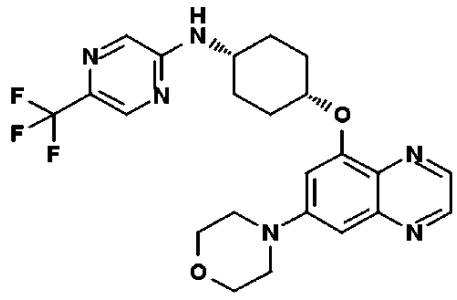
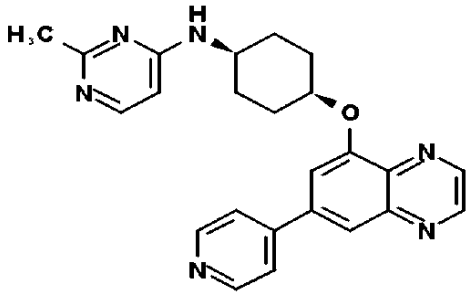
10

20

30

40

【表 2 - 3 1】

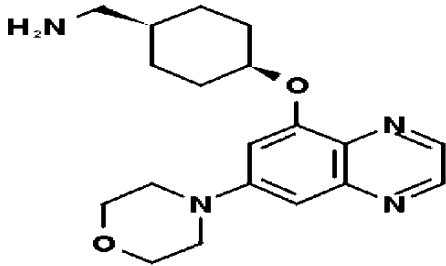
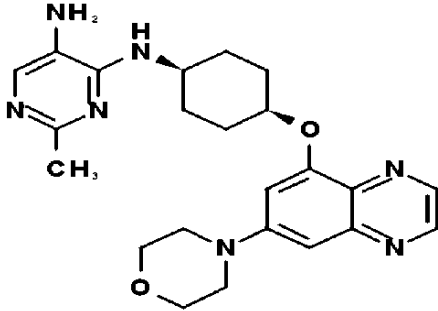
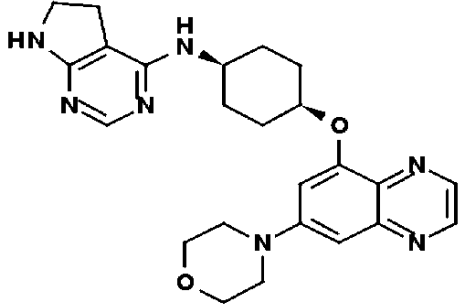
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			(m, 2H), 0.29 (t, J = 5.0 Hz, 2H).
366		475.56	
367		413.34	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.90 (dd, J = 7.2, 1.8 Hz, 2H), 8.75 (dd, J = 4.5, 1.6 Hz, 2H), 8.10 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 7.97 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 7.62 (dd, J = 4.5, 1.6 Hz, 2H), 7.38 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 6.15 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.98 (s, 1H), 4.93 (s, 1H), 3.86 (s, 1H), 2.49 (s, 3H), 2.34 - 2.18 (m, 2H), 1.96 (dd, J = 20.7, 8.9 Hz, 6H).

10

20

30

【表 2 - 3 2】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
368		343.48	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.73 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.96 (s, 2H), 7.15 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.85 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.97 (m, 1H), 3.79 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 3.35 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 2.72 (t, J = 6.2 Hz, 2H), 2.65 (m, 1H), 2.01 (m, 2H), 1.77 - 1.48 (m, 6H).
369		436.5	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.71 (s, 1H), 6.94 (dd, J = 14.6, 2.5 Hz, 2H), 5.09 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 4.80 (d, J = 5.4 Hz, 1H), 4.29 (s, 2H), 4.01 - 3.84 (m, 4H), 3.45 - 3.28 (m, 4H), 2.49 (s, 3H), 2.21 (q, J = 6.1 Hz, 2H), 1.95 (dt, J = 10.0, 4.1 Hz, 6H).
370		448.25	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (t, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (dd, J = 3.9, 2.0 Hz, 1H), 8.11 (s, 1H), 7.01 - 6.90 (m, 2H), 4.75 (d, J = 20.3 Hz, 2H), 4.23 (s, 2H), 3.93 (t, J = 4.8 Hz, 4H), 3.68 (t, J = 8.7 Hz, 2H), 3.42 - 3.29 (m, 4H), 2.90 (t, J = 8.7 Hz, 2H), 2.34 - 2.12 (m, 2H), 2.11 - 1.83 (m, 6H).

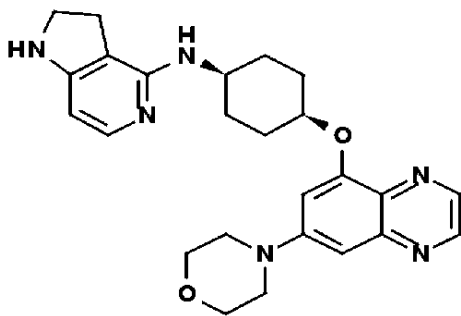
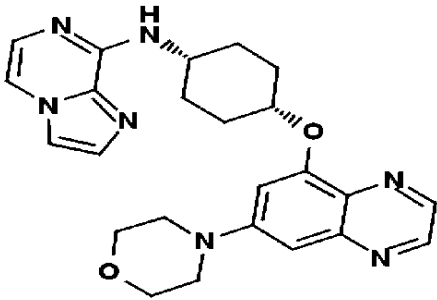
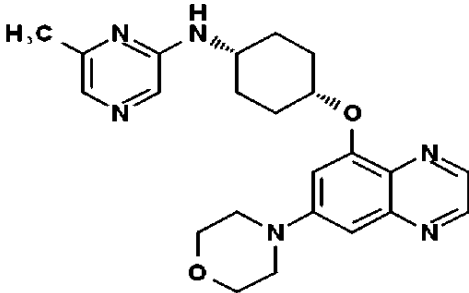
10

20

30

40

【表 2 - 3 3】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
371		447.5	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.79 (d, J = 5.6 Hz, 1H), 7.03 - 6.89 (m, 2H), 6.05 (d, J = 5.6 Hz, 1H), 4.77 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 4.21 (s, 1H), 3.93 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 4H), 3.68 (t, J = 8.7 Hz, 2H), 3.36 (dd, J = 5.8, 4.0 Hz, 4H), 2.85 (t, J = 8.7 Hz, 2H), 2.20 (q, J = 12.1, 9.5 Hz, 2H), 1.94 (t, J = 5.8 Hz, 6H).
372		446.44	
373		421.51	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 7.70 (d, J = 5.0 Hz, 2H), 6.97 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.65 (s, 1H), 3.99 - 3.85 (m, 5H), 3.40 - 3.30 (m, 4H), 2.37 (s, 3H), 2.28 - 2.16 (m, 2H), 2.01 - 1.82 (m, 6H).

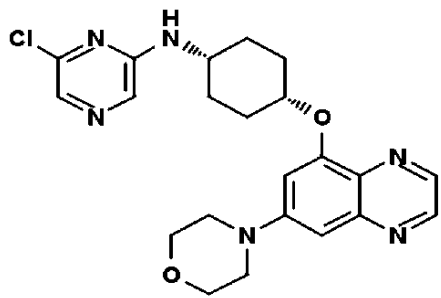
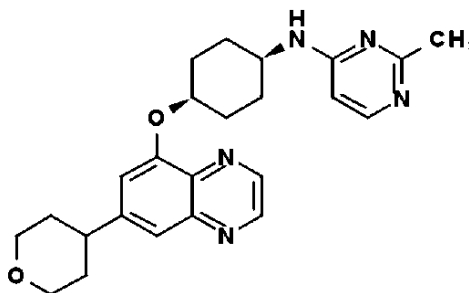
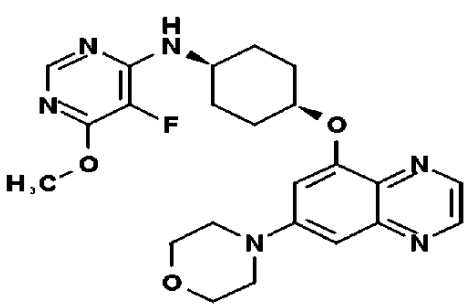
10

20

30

40

【表 2 - 3 4】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
374		441.45	
375		420.57	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.81 - 8.67 (m, 2H), 8.01 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 7.46 (dd, J = 1.7, 0.7 Hz, 1H), 6.98 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 6.06 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.80 (d, J = 38.5 Hz, 2H), 4.13 - 3.97 (m, 3H), 3.51 (td, J = 11.3, 3.5 Hz, 2H), 2.99 - 2.80 (m, 1H), 2.41 (s, 3H), 2.21 - 2.03 (m, 2H), 1.94 - 1.70 (m, 7H).
376		455.33	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.07 (s, 1H), 6.93 (dd, J = 17.0, 2.5 Hz, 2H), 4.98 - 4.71 (m, 2H), 4.17 (s, 1H), 4.00 (s, 3H), 3.92 (dd, J = 5.8, 3.9 Hz, 4H), 3.42 - 3.26 (m, 4H), 2.22 (d, J = 9.5 Hz, 2H), 1.93 (dd, J = 6.1, 2.4 Hz, 6H).

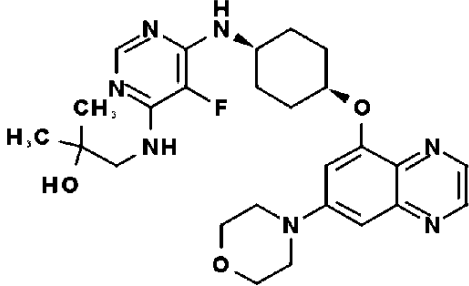
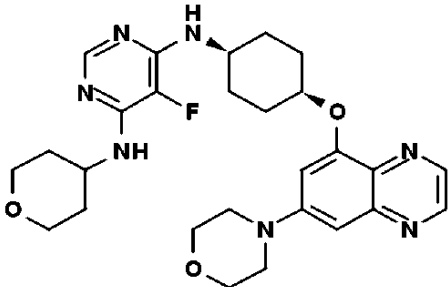
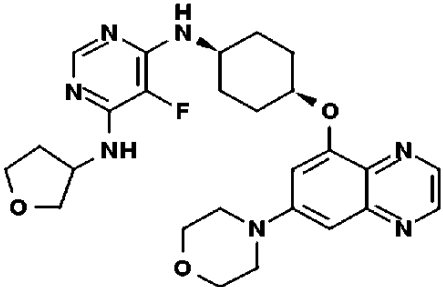
10

20

30

40

【表 2 - 3 5】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
377		512.36	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.95 (d, J = 1.2 Hz, 1H), 6.92 (dd, J = 16.9, 2.5 Hz, 2H), 4.98 (s, 1H), 4.81 - 4.66 (m, 2H), 4.16 (s, 1H), 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.46 (d, J = 6.1 Hz, 2H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.19 (d, J = 12.5 Hz, 2H), 1.91 (d, J = 5.4 Hz, 6H), 1.26 (s, 6H), 0.94 - 0.83 (m, 1H).
378		524.38	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.99 (d, J = 1.3 Hz, 1H), 6.92 (dd, J = 17.1, 2.5 Hz, 2H), 4.77 (s, 1H), 4.66 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 4.41 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 4.23 - 4.10 (m, 2H), 4.05 - 3.87 (m, 6H), 3.54 (td, J = 11.7, 2.1 Hz, 2H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.19 (d, J = 11.3 Hz, 2H), 2.08 - 1.85 (m, 8H), 1.64 - 1.44 (m, 2H).
379		510.38	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.00 (d, J = 1.3 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.87 - 4.56 (m, 4H), 4.16 (s, 1H), 4.04 - 3.65 (m, 8H), 3.46 - 3.26 (m, 4H), 2.43 - 2.26 (m, 4H).

10

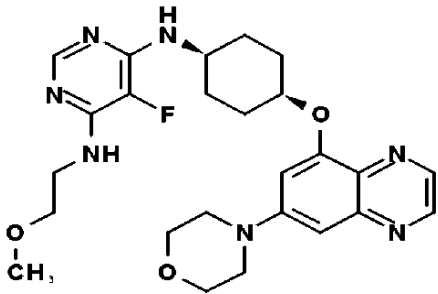
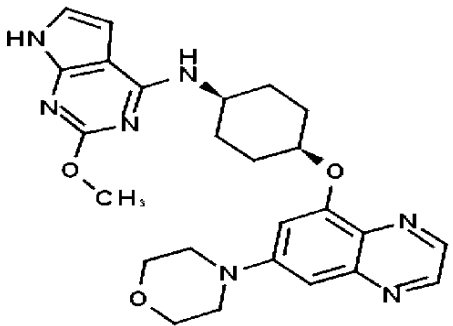
20

30

40

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			1H), 2.20 (q, J = 6.6, 5.9 Hz, 2H), 1.90 (t, J = 5.5 Hz, 6H).
380		498.36	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.00 - 7.91 (m, 1H), 6.92 (dd, J = 17.2, 2.5 Hz, 2H), 4.87 - 4.64 (m, 2H), 4.59 (d, J = 5.7 Hz, 1H), 4.16 (ddt, J = 9.7, 6.8, 3.7 Hz, 2H), 4.01 - 3.85 (m, 4H), 3.75 (d, J = 11.2 Hz, 1H), 3.58 (dd, J = 10.9, 7.0 Hz, 1H), 3.48 - 3.23 (m, 4H), 2.36 - 2.07 (m, 2H), 1.91 (d, J = 5.5 Hz, 6H), 1.28 (d, J = 6.8 Hz, 3H), 0.97 - 0.78 (m, 1H).
381		523.39	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.98 (d, J = 7.3 Hz, 1H), 6.92 (dd, J = 16.7, 2.5 Hz, 2H), 4.87 (d, J = 8.6 Hz, 1H), 4.77 (s, 2H), 4.61 (s, 2H), 4.15 (s, 1H), 3.91 (dd, J = 5.9, 3.8 Hz, 4H), 3.46 - 3.29 (m, 4H), 2.99 - 2.77 (m, 2H), 2.74 -

【表 2 - 3 7】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			2.54 (m, 2H), 2.46 - 2.10 (m, 6H), 1.91 (d, J = 5.5 Hz, 6H).
382		498.32	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.00 (s, 1H), 6.92 (dd, J = 16.5, 2.5 Hz, 2H), 4.92 (s, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.64 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 4.16 (s, 1H), 4.03 - 3.82 (m, 4H), 3.65 (q, J = 5.8, 5.4 Hz, 2H), 3.56 (ddd, J = 5.6, 4.7, 1.0 Hz, 2H), 3.48 - 3.21 (m, 7H), 2.19 (d, J = 10.1 Hz, 2H), 1.91 (d, J = 5.4 Hz, 6H).
383		476.5	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (s, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.55 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.93 - 6.71 (m, 3H), 6.22 (dd, J = 3.6, 2.0 Hz, 1H), 5.01 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.71 (s, 1H), 4.34 (s, 1H), 3.92 - 3.78 (m, 7H), 3.26 (dd, J = 5.9, 3.9 Hz, 4H), 2.15 (d, J = 10.8 Hz, 2H), 1.98 - 1.78 (m, 6H).

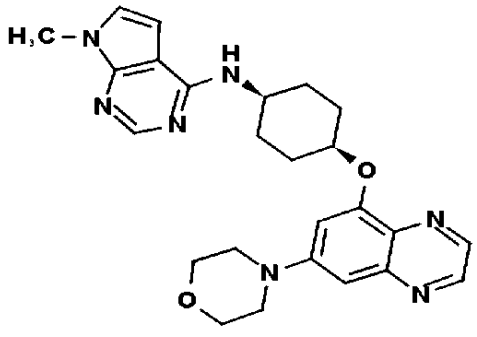
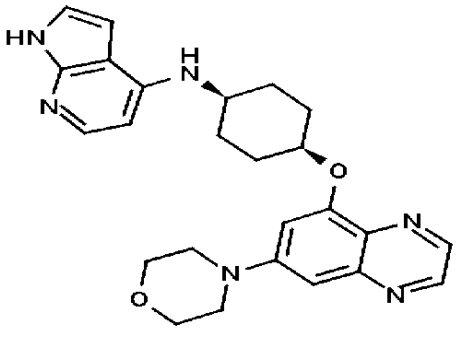
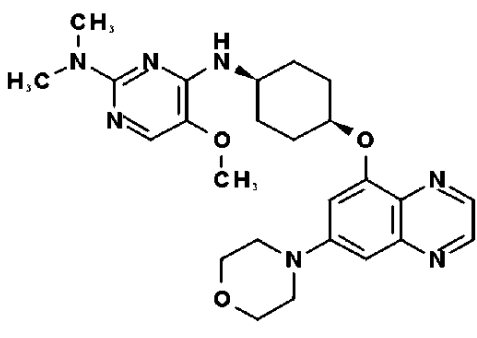
10

20

30

40

【表 2 - 3 8】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
384		460.6	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.72 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.65 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.39 (s, 1H), 7.01 - 6.90 (m, 3H), 6.35 (d, J = 3.5 Hz, 1H), 5.05 (t, J = 8.6 Hz, 1H), 4.83 (d, J = 5.6 Hz, 1H), 4.41 (s, 1H), 4.01 - 3.87 (m, 4H), 3.82 (d, J = 1.1 Hz, 3H), 3.44 - 3.30 (m, 4H), 2.27 (d, J = 8.9 Hz, 2H), 2.12 - 1.86 (m, 6H).
385		445.5	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.65 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.03 (d, J = 5.6 Hz, 1H), 7.11 (d, J = 3.6 Hz, 1H), 7.03 - 6.91 (m, 2H), 6.41 (d, J = 3.6 Hz, 1H), 6.28 (d, J = 5.7 Hz, 1H), 4.83 (s, 1H), 4.56 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.01 - 3.88 (m, 4H), 3.78 (s, 1H), 3.44 - 3.30 (m, 4H), 2.28 (d, J = 10.0 Hz, 2H), 2.11 - 1.85 (m, 6H).
386		480.41	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.49 (s, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.25 (s, 1H), 4.72 (s, 1H), 4.18 (s, 1H), 3.96 - 3.87 (m, 4H), 3.77 (s, 3H), 3.39 - 3.30 (m, 4H), 3.10 (s, 6H), 2.21 - 2.12 (m, 2H), 2.02 - 1.85 (m, 6H).

10

20

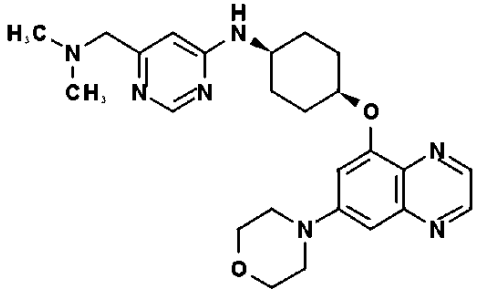
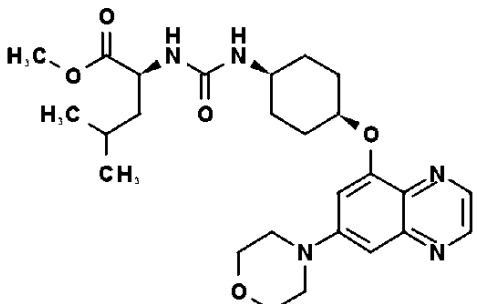
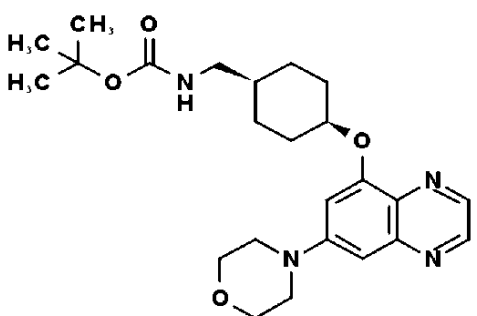
30

40

【表 2 - 3 9】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
387		466.4	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.49 (s, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.25 (s, 1H), 4.72 (s, 1H), 4.18 (s, 1H), 3.96 - 3.87 (m, 4H), 3.77 (s, 3H), 3.39 - 3.30 (m, 4H), 3.10 (s, 6H), 2.21 - 2.12 (m, 2H), 2.02 - 1.85 (m, 6H).
388		480.41	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.04 (s, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.15 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 4.75 (s, 1H), 4.14 (s, 1H), 3.97 - 3.83 (m, 4H), 3.59 (s, 3H), 3.38 - 3.28 (m, 4H), 3.09 (s, 6H), 2.25 - 2.13 (m, 2H), 2.00 - 1.83 (m, 6H).
389		504.48	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.50 (d, J = 1.1 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 16.5, 2.5 Hz, 2H), 6.49 (s, 1H), 4.90 (s, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.08 - 3.87 (m, 5H), 3.44 - 3.29 (m, 6H), 2.45 (t, J = 5.3 Hz, 4H), 2.26 - 2.14 (m, 2H), 1.90 (t, J = 6.5 Hz, 6H), 1.63 (d, J = 5.7 Hz, 4H), 1.53 - 1.43 (m, 2H).

【表 2 - 4 0】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
390		464.62	<p>1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.50 (d, J = 1.1 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 16.5, 2.5 Hz, 2H), 6.44 (d, J = 1.1 Hz, 1H), 4.93 (s, 1H), 4.80 (s, 1H), 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.47 - 3.29 (m, 6H), 2.31 (s, 6H), 2.21 (d, J = 9.1 Hz, 2H), 1.89 (t, J = 6.9 Hz, 6H).</p>
391		500.63	<p>1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.58 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.81 - 4.61 (m, 3H), 4.47 (td, J = 8.7, 5.2 Hz, 1H), 3.98 - 3.88 (m, 4H), 3.85 - 3.66 (m, 4H), 3.40 - 3.25 (m, 4H), 2.24 - 2.07 (m, 2H), 1.93 - 1.74 (m, 6H), 1.71-1.64 (m, 1H), 1.58 - 1.39 (m, 2H), 0.93 (t, J = 6.3 Hz, 6H).</p>
392		443.61	<p>1H NMR (300 MHz, DMSO-d6) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.58 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.10 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.82 (d, J = 2.6 Hz, 2H), 4.92 (m, 1H), 3.78 (m, 4H), 3.30 (m, 5H), 2.84 (t, J = 6.0 Hz, 2H), 1.96 - 1.33 (m, 18H).</p>

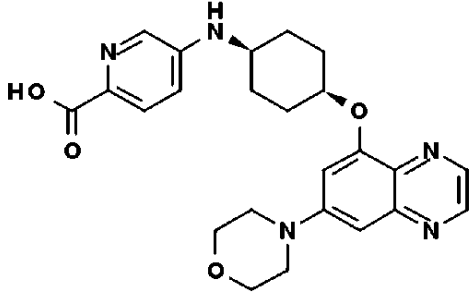
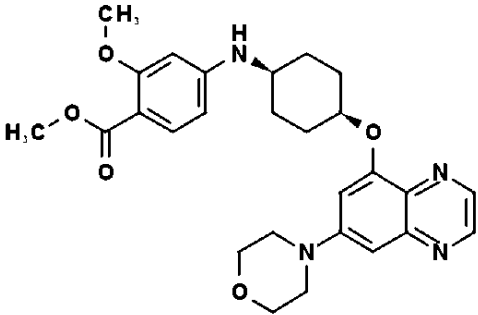
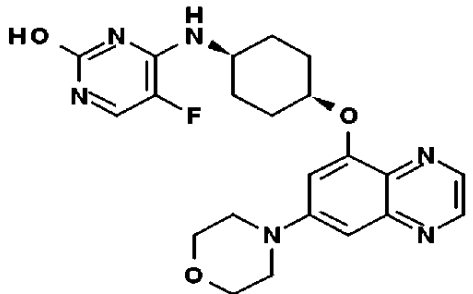
10

20

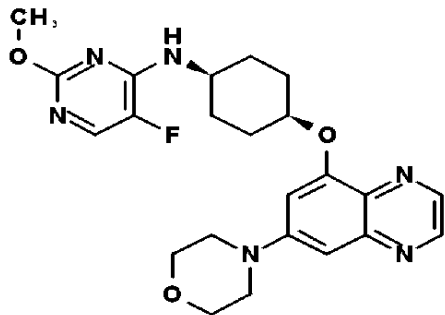
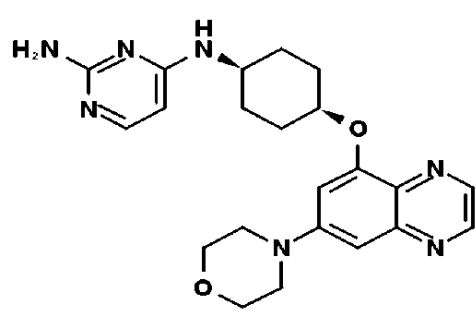
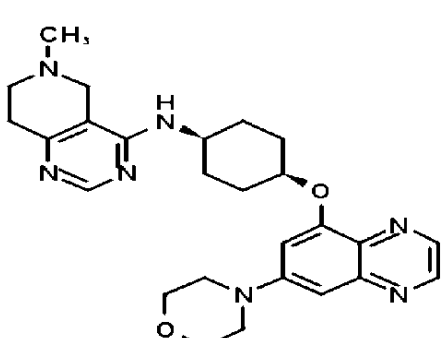
30

40

【表 2 - 4 1】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
393		450.58	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.73 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.58 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.10 (d, J = 2.7 Hz, 1H), 7.97 (d, J = 8.9 Hz, 1H), 7.38 (dd, J = 9.0, 2.7 Hz, 1H), 7.16 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.84 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.96 (m, 1H), 3.79 (m, 4H), 3.66 (m, 1H), 3.3 (m, 4H), 2.14 - 1.95 (m, 2H), 1.81 (m, 5H).	10
394		493.61	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.58 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.54 (d, J = 8.6 Hz, 1H), 7.14 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.48 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 6.30 - 6.18 (m, 2H), 4.92 (m, 1H), 3.79 (m, 4H), 3.74 (s, 3H), 3.66 (s, 3H), 3.55 (m, 1H), 3.34 (m, 4H), 2.03 (m, 2H), 1.78 (m, 6H).	20
395		441.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.13 (d, J = 5.3 Hz, 1H), 6.84 (dd, J = 20.0, 2.4 Hz, 2H), 5.40 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.72 (s, 1H), 4.31 (d, J = 7.0 Hz, 1H), 3.83 (dd, J = 5.8, 3.8 Hz, 4H), 3.26 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 2.14 (d, J = 12.3 Hz, 2H), 1.95 - 1.68 (m, 6H).	30 40

【表 2 - 4 2】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
396		455.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.72 (d, J = 2.9 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.81 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.03 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.71 (s, 1H), 4.16 (s, 2H), 3.83 (q, J = 3.9, 3.1 Hz, 7H), 3.32 - 3.21 (m, 4H), 2.13 (d, J = 11.2 Hz, 2H), 1.83 (t, J = 6.5 Hz, 6H).
397		422.5	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.89 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 7.02 - 6.88 (m, 2H), 5.79 (d, J = 5.7 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.61 (s, 2H), 4.08 - 3.88 (m, 5H), 3.35 (dd, J = 5.6, 4.1 Hz, 4H), 2.27 - 2.09 (m, 2H), 1.91 (d, J = 5.0 Hz, 6H).
398		476.3	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.38 (s, 1H), 6.94 - 6.74 (m, 2H), 4.69 (s, 1H), 4.34 (s, 1H), 4.25 (s, 1H), 3.84 (dd, J = 5.9, 3.8 Hz, 4H), 3.30 - 3.14 (m, 6H), 2.79 (d, J = 5.7 Hz, 2H), 2.71 (d, J = 5.6 Hz, 2H), 2.49 (s, 3H), 2.13 (m, 2H), 1.85 (d, J = 5.5 Hz, 6H).

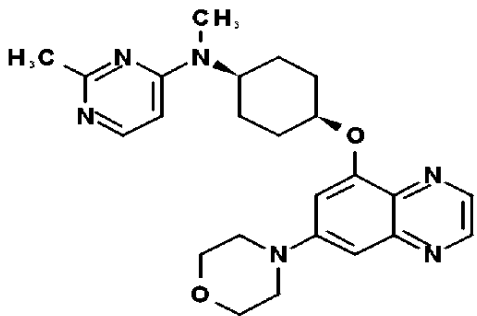
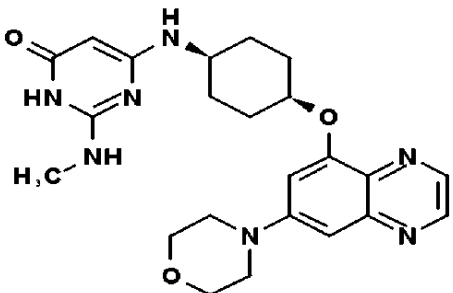
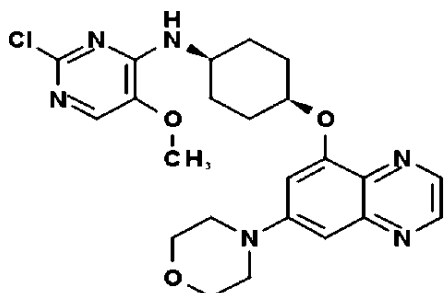
10

20

30

40

【表 2 - 4 3】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
399		435.35	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.08 (d, J = 6.3 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.23 (d, J = 6.3 Hz, 1H), 4.87 (s, 1H), 4.69 (s, 1H), 4.00 - 3.83 (m, 4H), 3.45 - 3.24 (m, 4H), 2.98 (s, 3H), 2.50 (s, 3H), 2.45 - 2.30 (m, 2H), 1.92 - 1.64 (m, 6H).
400		452.3	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (dd, J = 19.8, 2.4 Hz, 2H), 5.09 (s, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.01 - 3.88 (m, 4H), 3.42 - 3.29 (m, 4H), 2.91 (d, J = 4.8 Hz, 3H), 2.18 (m, 2H), 1.90 (s, 6H).
401		471.32	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.51 (s, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.56 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.75 (s, 1H), 4.25 (s, 1H), 3.96 - 3.89 (m, 4H), 3.88 (s, 3H), 3.47 - 3.23 (m, 4H), 2.29 - 2.06 (m, 2H), 2.06 - 1.78 (m, 6H).

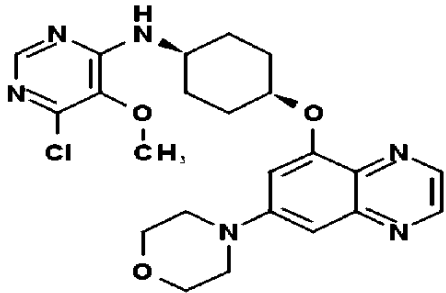
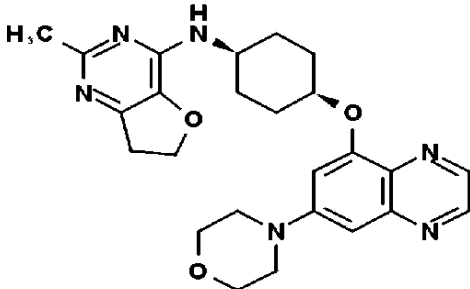
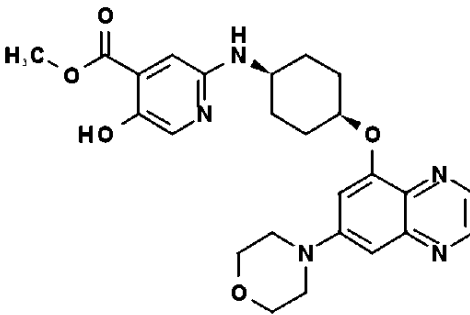
10

20

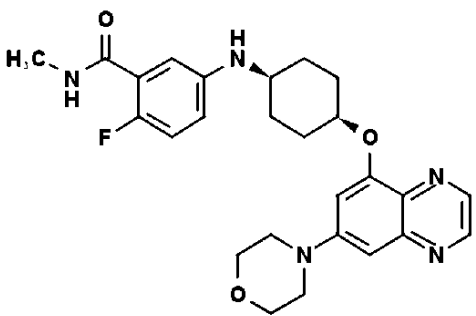
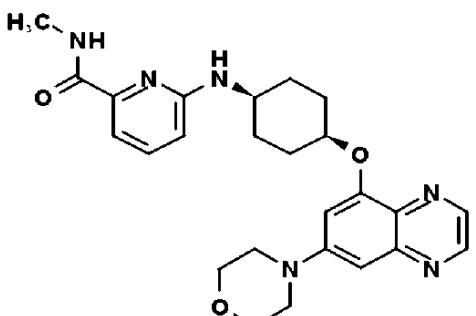
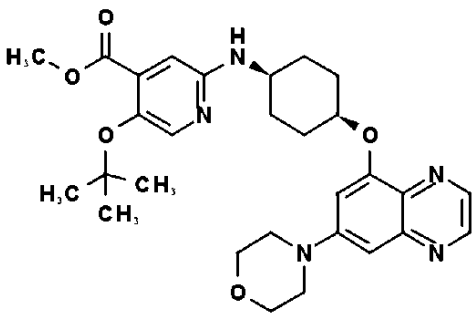
30

40

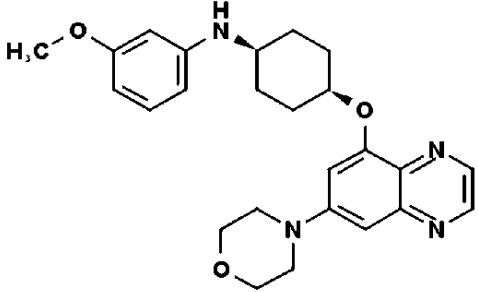
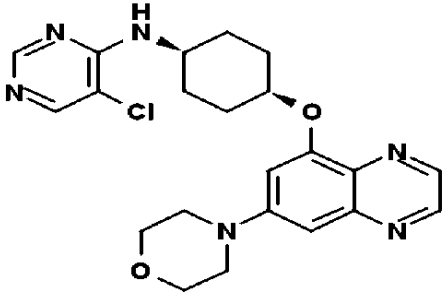
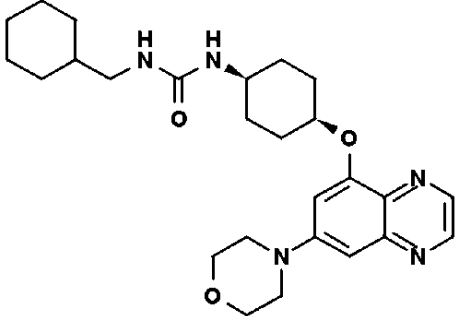
【表 2 - 4 4】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
402		471.36	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.14 (s, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.52 (d, J = 8.6 Hz, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.18 (s, 1H), 3.96 - 3.89 (m, 4H), 3.89 (s, 3H), 3.41 - 3.27 (m, 4H), 2.31 - 2.14 (m, 2H), 2.03 - 1.83 (m, 6H).	10
403		463.4	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.68 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 4.58 (t, J = 9.1 Hz, 2H), 4.25 (s, 1H), 3.98 - 3.84 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 3.19 (t, J = 9.0 Hz, 2H), 2.49 (s, 3H), 2.25 - 2.10 (m, 2H), 2.00 - 1.82 (m, 6H).	20
404		480.56	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.57 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.69 (s, 1H), 7.15 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 7.01 (s, 1H), 6.84 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.94 (m, 1H), 3.75 (m, 8H), 3.34 (m, 4H), 2.05 (m, 2H), 1.86 - 1.70 (m, 6H).	30

【表 2 - 4 5】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
405		480.56	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.57 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.01 (m, 1H), 7.14 (s, 1H), 7.01 - 6.90 (m, 1H), 6.82 (m, 2H), 6.71 (m, 1H), 5.70 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.91 (m, 1H), 3.79 (m, 4H), 3.34 (m, 5H), 2.74 (d, J = 4.6 Hz, 3H), 2.02 (m, 2H), 1.76 (m, 6H).	10
406		463.68	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.58 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.27 (d, J = 5.2 Hz, 1H), 7.46 (dd, J = 8.4, 7.1 Hz, 1H), 7.15 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 7.10 (dd, J = 7.1, 0.9 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.75 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 6.68 (dd, J = 8.4, 0.9 Hz, 1H), 4.91 (m, 1H), 4.14 (m, 1H), 3.80 (m, 4H), 3.35 (m, 4H), 2.82 (d, J = 4.9 Hz, 3H), 2.03 (m, 2H), 1.93 - 1.73 (m, 6H).	20 30
407		536.49	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) rotomers, δ 9.07 (m, 1H), 8.89 (m, 1H), 8.75 (m, 1H), 7.47 (m, 1H), 6.96 (s, 1H), 4.95 (m, 1H), 3.97 (m, 4H), 3.82 (m, 4H), 3.38 (s, 3H), 2.24 (m, 8H), 1.60 (s, 9H).	40

【表 2 - 4 6】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
408		435.6	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.57 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.13 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.94 (t, J = 8.0 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.26 - 6.14 (m, 2H), 6.10 - 6.03 (m, 1H), 5.57 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.90 (m, 1H), 3.79 (m, 4H), 3.66 (s, 3H), 3.33 (m, 4H), 2.03 (m, 2H), 1.77 (m, 6H).
409		441.29	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.47 (s, 1H), 8.18 (s, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.47 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.31 - 4.19 (m, 1H), 4.02 - 3.79 (m, 4H), 3.48 - 3.24 (m, 4H), 2.32 - 2.17 (m, 2H), 2.09 - 1.79 (m, 6H).
410		468.38	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.68 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.73 (d, J = 5.5 Hz, 1H), 4.49 - 4.19 (m, 2H), 4.03 - 3.87 (m, 4H), 3.81 (q, J = 6.6 Hz, 1H), 3.44 - 3.25 (m, 4H), 2.99 (t, J = 6.3 Hz, 2H), 2.13 (q, J = 7.5, 5.0 Hz, 2H), 1.99 - 1.57 (m, 11H), 1.42 (dq, J = 10.0, 7.1,

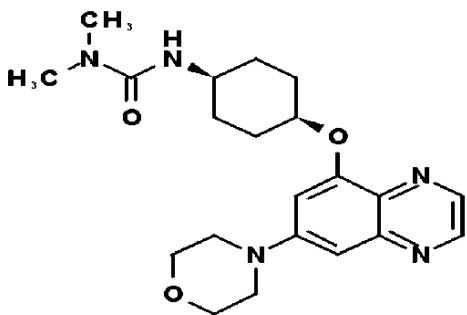
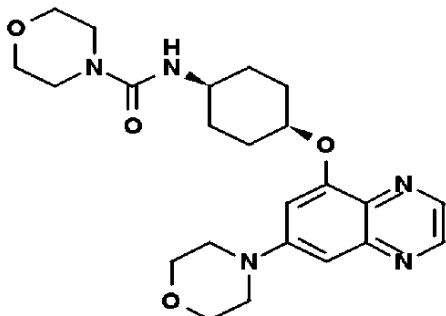
10

20

30

40

【表 2 - 4 7】

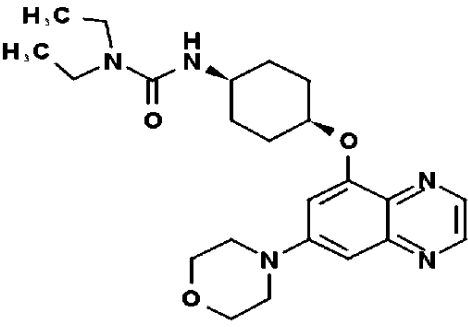
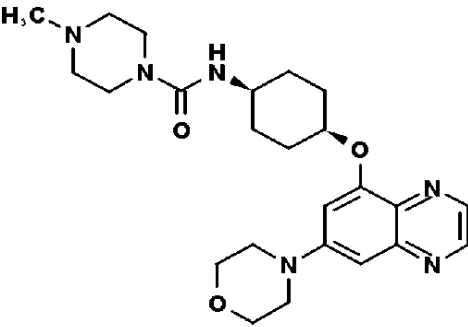
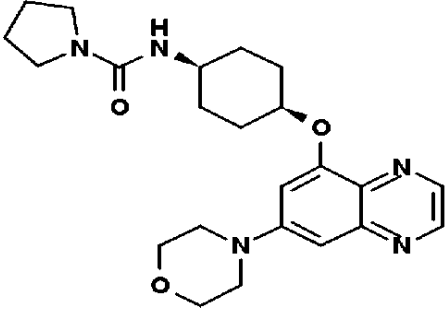
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			6.7, 3.4 Hz, 1H), 1.20 (tt, J = 17.8, 10.5 Hz, 3H), 0.91 (q, J = 12.1 Hz, 2H).
411		400.37	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.70 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 4.41 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 3.97 - 3.81 (m, 4H), 3.41 - 3.25 (m, 4H), 2.91 (s, 6H), 2.15 (d, J = 9.2 Hz, 2H), 1.98 - 1.71 (m, 6H).
412		442.37	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.90 (dd, J = 21.6, 2.5 Hz, 2H), 4.72 (s, 1H), 4.48 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.04 - 3.82 (m, 4H), 3.78 - 3.62 (m, 4H), 3.34 (dt, J = 5.0, 3.2 Hz, 8H), 2.15 (s, 2H), 1.84 (d, J = 4.8 Hz, 6H).

10

20

30

【表 2 - 4 8】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
413		428.37	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.71 (d, J = 5.4 Hz, 1H), 4.37 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 3.99 - 3.81 (m, 4H), 3.44 - 3.09 (m, 8H), 2.24 - 2.06 (m, 2H), 1.94 - 1.73 (m, 6H), 1.15 (t, J = 7.1 Hz, 6H).
414		455.42	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.72 (d, J = 5.6 Hz, 1H), 4.50 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.02 - 3.80 (m, 4H), 3.49 - 3.18 (m, 8H), 2.41 (t, J = 5.1 Hz, 4H), 2.32 (s, 3H), 2.22 - 2.05 (m, 2H), 1.95 - 1.75 (m, 6H).
415		426.52	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.70 (s, 1H), 4.24 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.02 - 3.82 (m, 5H), 3.44 - 3.23 (m, 8H), 2.61 (s, 1H), 2.26 - 2.06 (m, 2H), 1.99 - 1.73 (m, 9H).

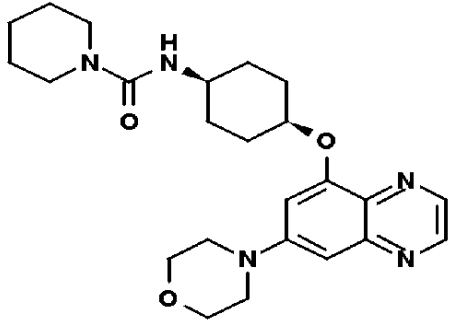
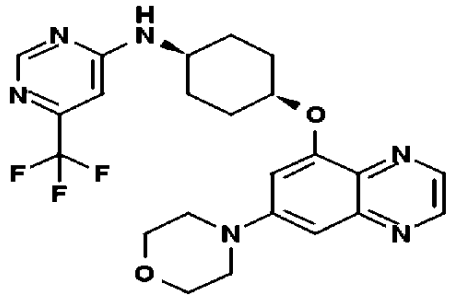
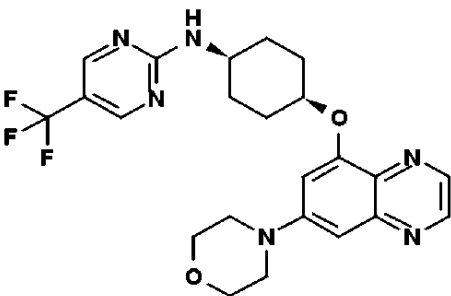
10

20

30

40

【表 2 - 4 9】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
416		440.39	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.70 (d, J = 4.4 Hz, 1H), 4.48 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.03 - 3.80 (m, 5H), 3.49 (d, J = 4.2 Hz, 2H), 3.45 - 3.17 (m, 8H), 2.23 - 2.04 (m, 2H), 2.02 - 1.73 (m, 6H), 1.56 - 1.49 (m, 4H).
417		475.36	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.81 - 8.55 (m, 3H), 6.94 (dd, J = 17.2, 2.5 Hz, 2H), 6.65 (d, J = 1.1 Hz, 1H), 4.84 (td, J = 5.1, 2.4 Hz, 1H), 4.01 - 3.86 (m, 4H), 3.42 - 3.29 (m, 4H), 2.35 - 2.11 (m, 2H), 2.05 - 1.82 (m, 6H).
418		475.4	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.49 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 7.04 - 6.89 (m, 2H), 6.81 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 5.54 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.80 (d, J = 5.2 Hz, 1H), 4.17 - 3.98 (m, 1H), 3.98 - 3.87 (m, 4H), 3.42 - 3.31 (m, 4H), 2.33 - 2.12 (m, 2H), 2.06 - 1.72 (m, 6H).

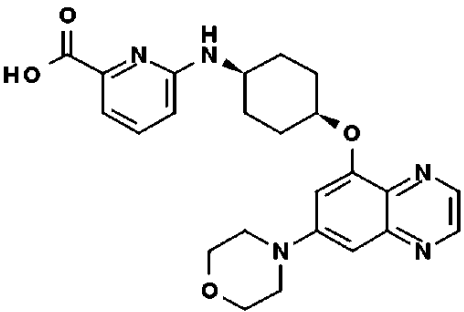
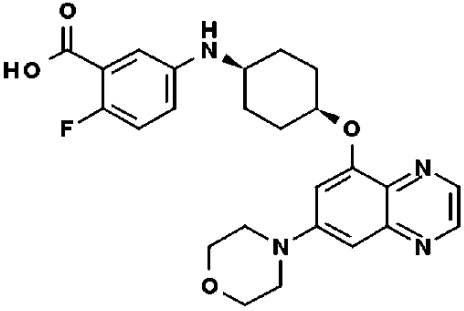
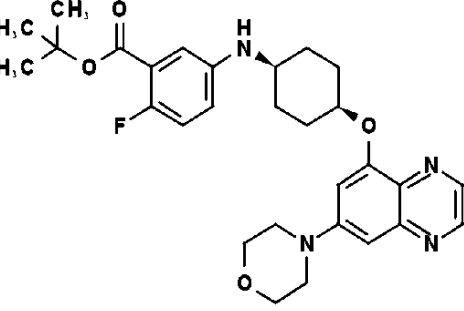
10

20

30

40

【表 2 - 5 0】

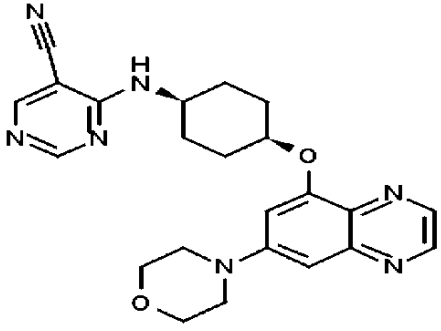
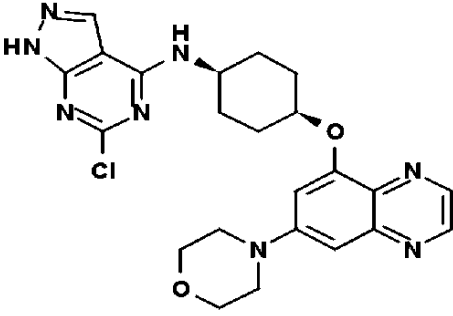
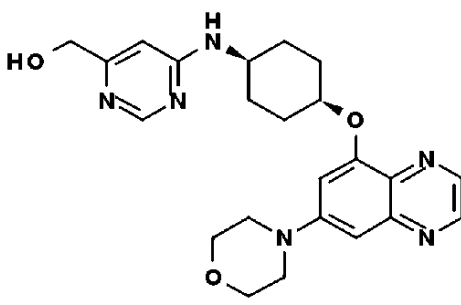
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
419		450.38	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) rotomers δ 8.82 (d, J = 2.9 Hz, 1H), 8.74 (m, 1H), 8.00 (m, 1H), 7.55 - 7.47 (m, 1H), 7.25 (m, 1H), 7.14 (m, 1H), 7.05 (m, 1H), 3.97 (m, 5H), 3.47 (m, 5H), 2.30 (s, 2H), 2.0 (m, 6H)..
420		467.48	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d6) δ 8.73 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.58 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.27 - 6.96 (m, 4H), 6.83 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.92 (m, 1H), 3.85 - 3.74 (m, 4H), 3.45 (m, 1H), 3.34 (m, 4H), 2.05 (m, 2H), 1.76 (m, 6H).
421		523.58	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d6) δ 8.93 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.80 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 7.20 (s, 1H), 7.13 - 6.85 (m, 4H), 4.92 (m, 1H), 3.86 - 3.79 (m, 4H), 3.32 (m, 5H), 2.09 (m, 2H), 1.90 - 1.73 (m, 6H), 1.55 (s, 9H).

10

20

30

【表 2 - 5 1】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
422		432.5	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.72 - 8.52 (m, 3H), 8.38 (s, 1H), 6.87 (dd, J = 15.7, 2.5 Hz, 2H), 5.50 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.79 (p, J = 3.5 Hz, 1H), 4.20 (dp, J = 14.0, 5.2, 4.7 Hz, 1H), 3.90 - 3.76 (m, 4H), 3.32 - 3.22 (m, 4H), 2.29 - 2.07 (m, 2H), 1.99 - 1.71 (m, 6H).
423		481.3	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.74 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.65 (s, 1H), 8.01 (s, 1H), 7.05 - 6.88 (m, 2H), 4.87 (s, 1H), 3.95 (d, J = 4.7 Hz, 4H), 3.77 - 3.56 (m, 1H), 3.37 (dd, J = 5.8, 3.8 Hz, 4H), 3.11 (qd, J = 7.4, 4.2 Hz, 1H), 2.28 (s, 2H), 1.98 (dd, J = 22.7, 9.4 Hz, 6H).
424		437.3	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.52 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.46 - 8.35 (m, 1H), 6.84 (dd, J = 16.8, 2.5 Hz, 2H), 6.28 - 6.20 (m, 1H), 5.08 (s, 1H), 4.72 (d, J = 5.2 Hz, 1H), 4.58 - 4.43 (m, 2H), 3.93 - 3.77 (m, 4H), 3.34 - 3.19 (m, 4H), 2.14 (dd, J = 9.6, 5.4 Hz, 2H), 1.93 - 1.73 (m, 6H).

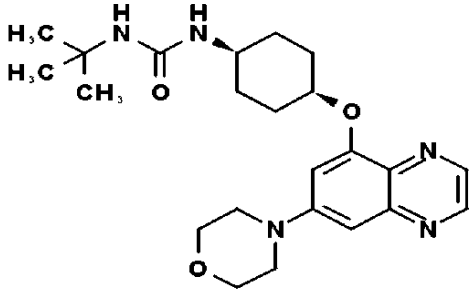
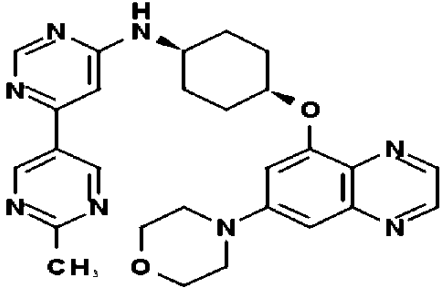
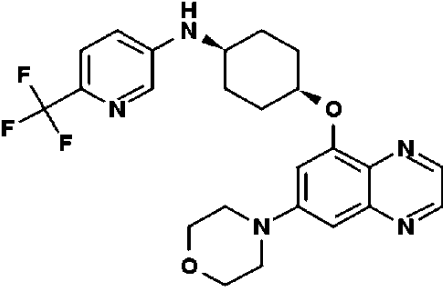
10

20

30

40

【表 2 - 5 2】

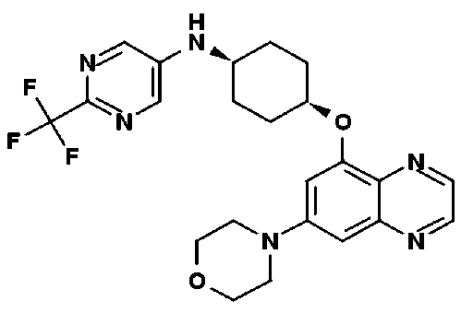
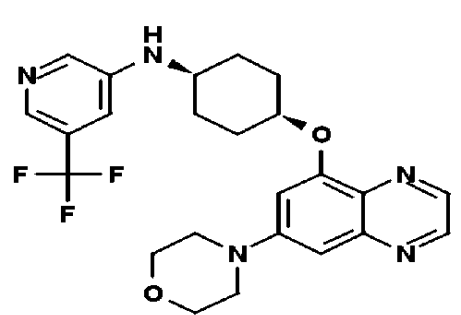
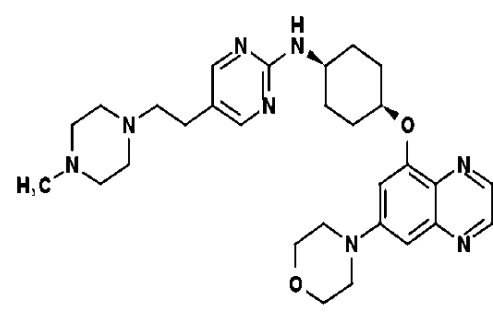
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
425		428.46	<p>¹H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.68 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.72 (s, 1H), 4.20 (s, 1H), 4.11 (s, 1H), 3.98 - 3.85 (m, 4H), 3.78 (s, 1H), 3.40 - 3.24 (m, 4H), 2.14 (d, J = 9.2 Hz, 2H), 1.81 (t, J = 6.3 Hz, 6H), 1.33 (s, 9H).</p>
426		499.35	<p>¹H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 9.26 (m, 2H), 8.90 (m, 1H), 8.79 - 8.64 (m, 2H), 7.22 - 7.01 (m, 3H), 4.97 (m, 1H), 4.01 - 3.87 (m, 4H), 3.38 (m, 5H), 2.77 (s, 3H), 2.19 (m, 9H).</p>
427		474.33	<p>¹H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.94 - 8.63 (m, 2H), 8.07 (d, J = 2.8 Hz, 1H), 7.45 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 7.14 - 6.87 (m, 3H), 4.84 (m, 1H), 3.99 - 3.87 (m, 4H), 3.62 - 3.48 (m, 1H), 3.35 (dt, J = 42.8, 4.8 Hz, 4H), 2.32 - 2.14 (m, 2H), 1.91 (d, J = 17.8 Hz, 6H).</p>

10

20

30

【表 2 - 5 3】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
428		475.41	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.81 - 8.64 (m, 2H), 8.20 (s, 2H), 7.08 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.90 - 4.82 (m, 1H), 4.42 (m, 1H), 3.98 - 3.88 (m, 4H), 3.57 (m, 1H), 3.45 - 3.26 (m, 4H), 2.33 - 2.18 (m, 2H), 2.04 - 1.82 (m, 6H).
429		474.37	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.42 (m, 1H), 8.16 - 8.08 (m, 1H), 7.20 (s, 1H), 7.04 - 6.98 (m, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.84 (m, 1H), 4.01 - 3.87 (m, 4H), 3.54 (m, 1H), 3.42 - 3.26 (m, 4H), 2.33 - 2.19 (m, 2H), 2.08 - 1.80 (m, 6H).
430		533.47	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.15 (s, 2H), 7.03 - 6.85 (m, 2H), 5.09 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 3.92 (dd, J = 5.9, 3.7 Hz, 5H), 3.40 - 3.24 (m, 4H), 2.71 - 2.33 (m, 8H), 2.30 (s, 3H), 2.20 (s, 2H), 1.91 (d, J = 5.0 Hz, 6H), 1.26 (d, J = 3.1 Hz, 4H).

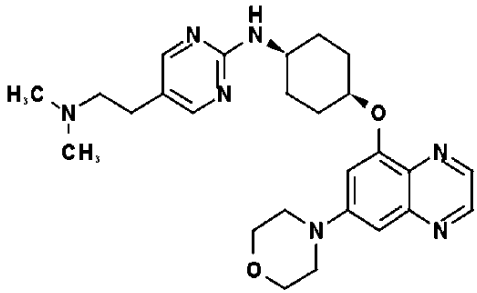
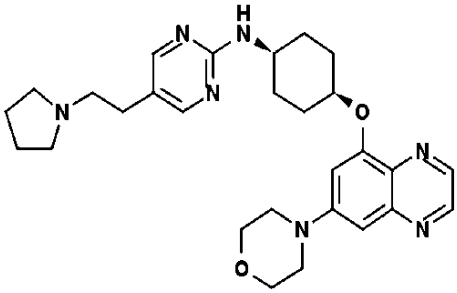
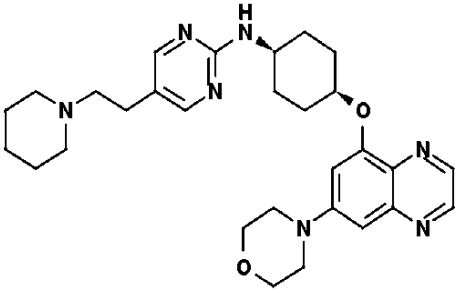
10

20

30

40

【表 2 - 5 4】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
431		478.47	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.15 (s, 2H), 6.99 - 6.86 (m, 2H), 5.10 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.79 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 4.09 - 3.85 (m, 5H), 3.41 - 3.25 (m, 4H), 2.68 - 2.51 (m, 2H), 2.52 - 2.37 (m, 2H), 2.28 (s, 6H), 2.19 (q, J = 6.2, 5.8 Hz, 2H), 2.02 - 1.81 (m, 6H).
432		504.44	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.16 (s, 2H), 6.98 - 6.86 (m, 2H), 5.10 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.08 - 3.83 (m, 5H), 3.39 - 3.27 (m, 4H), 2.60 (d, J = 16.9 Hz, 8H), 2.19 (d, J = 7.8 Hz, 2H), 2.01 - 1.74 (m, 10H).
433		518.72	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.15 (s, 2H), 6.99 - 6.85 (m, 2H), 5.09 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.06 - 3.85 (m, 5H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.67 - 2.55 (m, 2H), 2.47 (d, J = 9.1 Hz, 6H), 2.19 (d, J = 9.6 Hz, 2H), 1.91 (d, J = 4.8 Hz, 6H), 1.62 (d, J = 5.5 Hz, 6H).

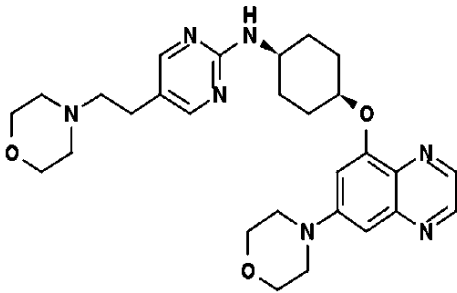
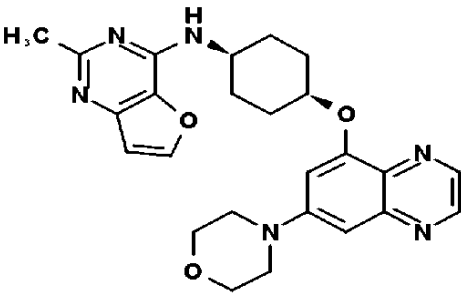
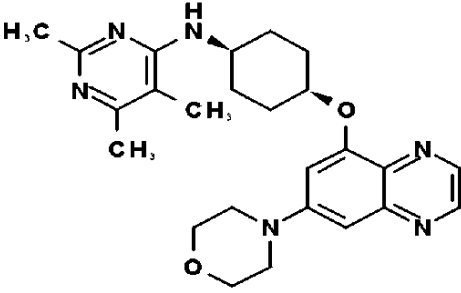
10

20

30

40

【表 2 - 5 5】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
434		520.47	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.16 (s, 2H), 6.99 - 6.84 (m, 2H), 5.11 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.05 - 3.87 (m, 5H), 3.78 - 3.66 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.69 - 2.43 (m, 8H), 2.19 (d, J = 8.2 Hz, 2H), 1.91 (d, J = 4.8 Hz, 6H).
435		461.37	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.68 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.76 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 5.21 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 4.86 - 4.76 (m, 1H), 4.45 - 4.33 (m, 1H), 3.98 - 3.84 (m, 4H), 3.39 - 3.25 (m, 4H), 2.59 (s, 3H), 2.31 - 2.16 (m, 2H), 2.06 - 1.89 (m, 6H).
436		449.44	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.88 - 4.70 (m, 2H), 4.32 (s, 1H), 3.98 - 3.85 (m, 4H), 3.41 - 3.27 (m, 4H), 2.53 (s, 3H), 2.40 (s, 3H), 2.26 - 2.14 (m, 2H), 1.99 (s, 3H), 1.94 - 1.88 (m, 6H).

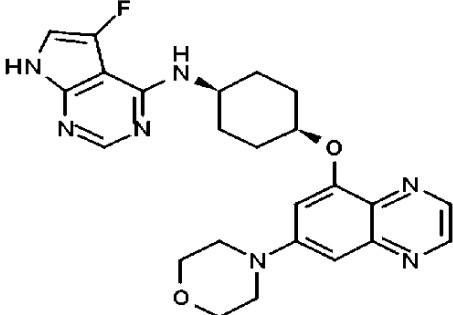
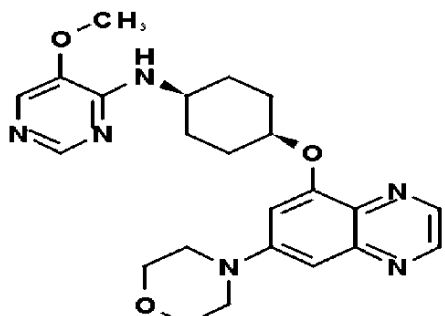
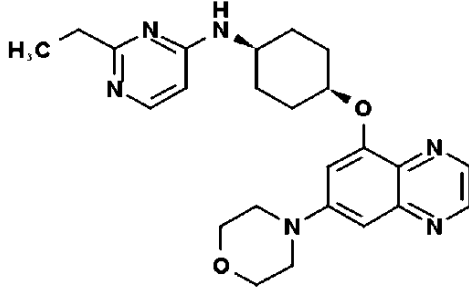
10

20

30

40

【表 2 - 5 6】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
437		464.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.72 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.65 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.31 (s, 1H), 7.02 - 6.88 (m, 2H), 6.77 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 5.42 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.90 - 4.78 (m, 1H), 4.42 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 3.99 - 3.85 (m, 4H), 3.43 - 3.27 (m, 4H), 2.37 - 2.13 (m, 2H), 2.10 - 1.88 (m, 6H).
438		437.3	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.72 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.28 (s, 1H), 7.72 (s, 1H), 6.94 (dd, J = 16.4, 2.5 Hz, 2H), 5.45 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.76 (d, J = 6.6 Hz, 1H), 4.26 (s, 1H), 4.01 - 3.85 (m, 7H), 3.44 - 3.28 (m, 4H), 2.30 - 2.11 (m, 2H), 2.08 - 1.82 (m, 6H).
439		435.44	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.14 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 6.98 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.17 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 5.05 (s, 1H), 4.01 - 3.70 (m, 5H), 3.42 - 3.25 (m, 4H), 2.77 (q, J = 7.6 Hz, 2H), 2.32 - 2.16 (m, 2H), 2.04 - 1.80 (m, 6H), 1.32 (t, J = 7.6 Hz, 3H).

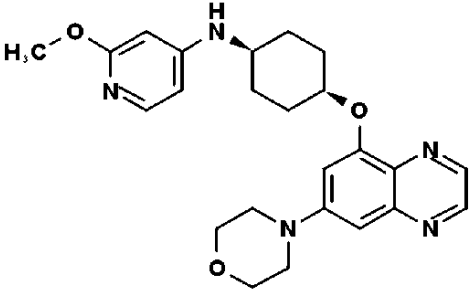
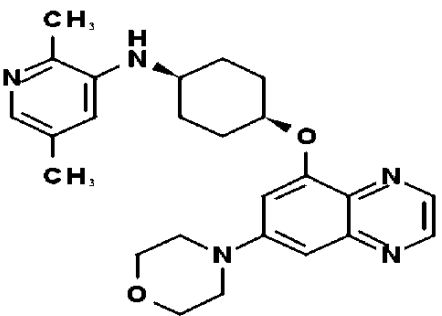
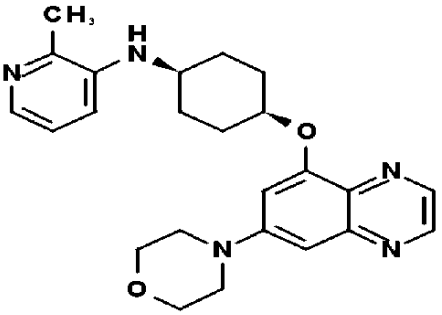
10

20

30

40

【表 2 - 5 7】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
440		436.22	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.81 (d, J = 6.3 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 6.24 (d, J = 6.2 Hz, 1H), 5.92 (s, 1H), 4.80 (m, 1H), 3.98 (s, 3H), 3.95 - 3.87 (m, 4H), 3.54 (m, 1H), 3.38 - 3.28 (m, 4H), 2.23 (m, 2H), 2.00 - 1.81 (m, 6H).
441		434.35	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) rotomers, δ 8.80 (d, 1H), 8.73 (d, 1H), 7.73 (s, 1H), 7.16 - 6.99 (m, 3H), 4.91 (m, 1H), 3.95 (m, 4H), 3.55 (m, 1H), 3.37 (m, 4H), 2.73 (s, 3H), 2.41 (s, 3H), 2.29 (m, 2H), 2.13 (m, 6H).
442		420.4	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.89 (dd, J = 5.0, 1.4 Hz, 1H), 7.19 - 7.10 (m, 1H), 7.03 - 6.95 (m, 2H), 6.92 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 4.80 (m, 1H), 3.96 - 3.87 (m, 4H), 3.79 (m, 1H), 3.51 (m, 1H), 3.38 - 3.29 (m, 4H), 2.51 (m, 3H), 2.25 (m, 2H), 2.00 - 1.87 (m, 6H).

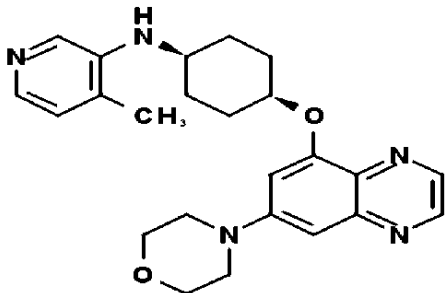
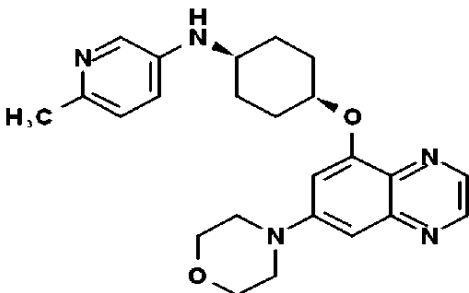
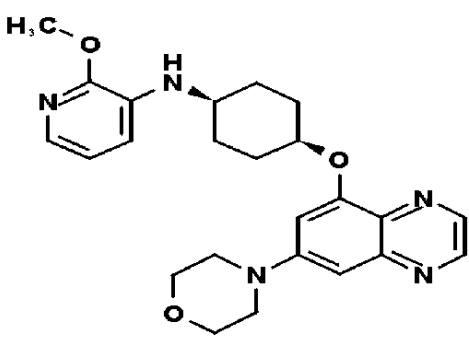
10

20

30

40

【表 2 - 5 8】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
443		420.36	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.01 (s, 1H), 7.89 (d, J = 4.8 Hz, 1H), 7.03 (d, J = 4.8 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.78 (m, 1H), 3.98 - 3.86 (m, 4H), 3.61 (m, 2H), 3.39 - 3.28 (m, 4H), 2.30 - 2.15 (m, 5H), 1.93 (m, 6H).
444		420.28	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.03 (dd, J = 2.7, 0.9 Hz, 1H), 7.12 - 7.00 (m, 2H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.79 (m, 1H), 4.08 - 3.87 (m, 5H), 3.49 (m, 1H), 3.38 - 3.28 (m, 4H), 2.53 (s, 3H), 2.21 (m, 2H), 1.84 (d, J = 6.8 Hz, 6H).
445		436.43	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.65 (m, 1H), 8.40 (m, 1H), 7.50 (dd, J = 4.5, 2.2 Hz, 1H), 7.03 (s, 1H), 6.92 (s, 1H), 6.80 (m, 2H), 4.76 (m, 1H), 4.08 (s, 3H), 3.93 (m, 5H), 3.49 (m, 1H), 3.42 - 3.30 (m, 4H), 2.20 (m, 2H), 1.92 (m, 6H).

10

20

30

40

【表 2 - 5 9】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
446		436.17	<p>1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.71 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 7.65 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.55 (t, J = 2.4 Hz, 1H), 4.79 (m, 1H), 4.13 (m, 1H), 3.92 (m, 4H), 3.85 (s, 3H), 3.48 (m, 1H), 3.38 - 3.29 (m, 4H), 2.22 (m, 2H), 1.98 - 1.88 (m, 6H).</p>
447		436.34	<p>1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.70 (s, 1H), 7.15 (m, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.92 (m, 1H), 6.64 (d, J = 8.8 Hz, 1H), 4.80 (m, 1H), 3.90 (m, 7H), 3.45 - 3.26 (m, 5H), 2.24 - 2.12 (m, 2H), 1.98 - 1.81 (m, 6H).</p>
448		421.39	<p>1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.78 (dd, J = 4.0, 2.0 Hz, 1H), 8.66 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 8.55 (s, 1H), 8.06 (s, 1H), 7.02 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.88 (m, 1H), 3.93 (m, 4H), 3.55 (m, 1H), 3.40 (m, 4H), 3.29 (m, 1H), 2.58 (s, 3H), 2.28 (m, 2H), 2.07 (m, 6H).</p>

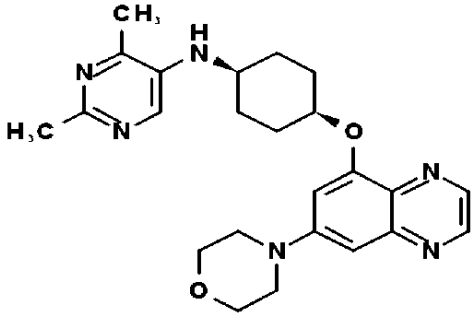
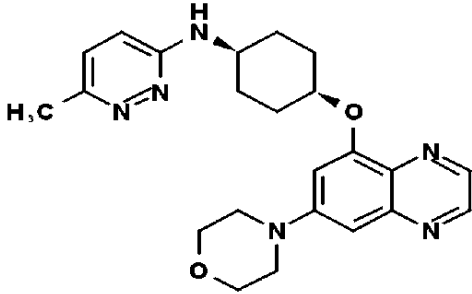
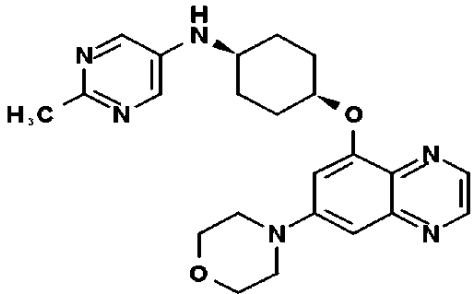
10

20

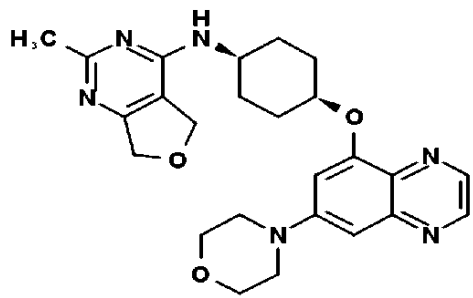
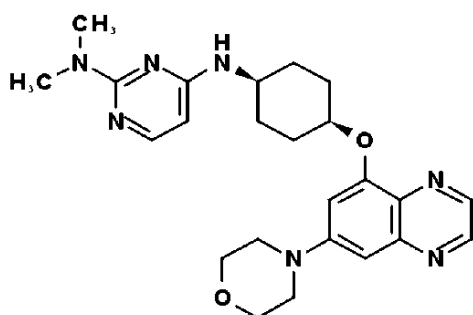
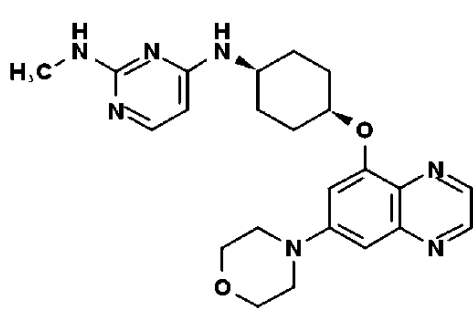
30

40

【表 2 - 6 0】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
449		435.35	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) rotomers, δ 8.85 (d, 1H), 8.67 (d, 1H), 7.92 (d, 1H), 7.07 - 6.96 (m, 2H), 4.91 (m, 1H), 4.01 - 3.88 (m, 4H), 3.53 - 3.24 (m, 5H), 2.87 (s, 3H), 2.64 (s, 3H), 2.04 - 1.76 (m, 6H).	10
450		421.36	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.21 (d, J = 9.2 Hz, 1H), 6.99 - 6.87 (m, 3H), 4.87 (m, 1H), 3.98 - 3.82 (m, 5H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.51 (s, 3H), 2.30 - 2.22 (m, 2H), 2.11 - 1.84 (m, 6H).	20
451		421.56	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) rotomers, δ 8.92 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.77 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.30 (m, 2H), 7.02 - 6.90 (m, 2H), 4.86 (m, 1H), 3.94 (m, 4H), 3.52 - 3.26 (m, 5H), 2.78 (s, 3H), 2.26 (d, J = 11.8 Hz, 2H), 1.90 (m, 6H).	30

【表 2 - 6 1】

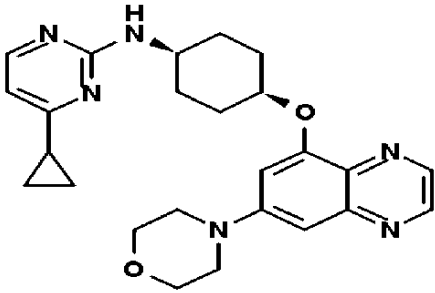
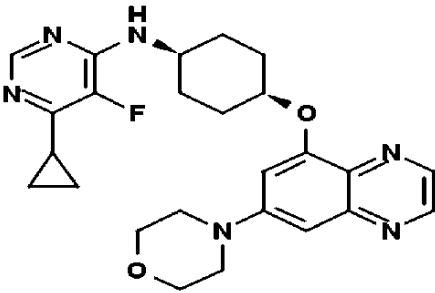
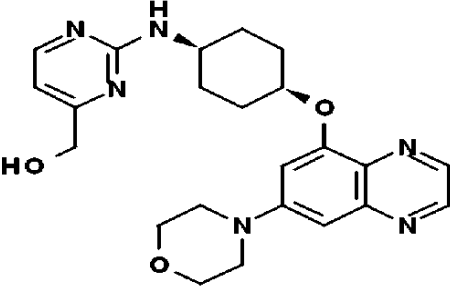
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
452		463.35	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.01 (s, 2H), 4.91 (t, J = 2.5 Hz, 2H), 4.79 (s, 1H), 4.49 (s, 1H), 4.16 (s, 1H), 3.99 - 3.82 (m, 4H), 3.40 - 3.25 (m, 4H), 2.53 (s, 3H), 2.29 - 2.15 (m, 2H), 1.96 - 1.80 (m, 6H).
453		450.43	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (s, 1H), 8.62 (s, 1H), 7.89 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 6.94 (s, 1H), 6.89 (s, 1H), 5.64 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.87 - 4.66 (m, 2H), 3.98 - 3.83 (m, 4H), 3.44 - 3.24 (m, 4H), 3.13 (s, 6H), 2.26 - 2.10 (m, 2H), 2.04 - 1.75 (m, 6H).
454		436.34	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.61 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.52 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.69 (s, 1H), 6.86 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.80 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 5.62 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.83 (s, 1H), 4.69 (s, 1H), 3.91 - 3.74 (m, 4H), 3.36 - 3.10 (m, 4H), 2.86 (d, J = 5.0 Hz, 3H), 2.22 - 2.03 (m, 2H), 1.91 - 1.72 (m, 6H).

10

20

30

【表 2 - 6 2】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
455		447.41	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.05 (d, J = 5.2 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.39 (d, J = 5.2 Hz, 1H), 5.13 (bd, 1H), 4.76 (s, 1H), 4.10 - 3.96 (m, 1H), 3.95 - 3.83 (m, 4H), 3.40 - 3.24 (m, 4H), 2.26 - 2.09 (m, 2H), 1.97 - 1.76 (m, 7H), 1.10 - 1.00 (m, 2H), 1.00 - 0.91 (m, 2H).
456		465.29	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.23 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.04 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.21 (s, 1H), 4.02 - 3.82 (m, 4H), 3.44 - 3.26 (m, 4H), 2.33 - 2.10 (m, 3H), 2.06 - 1.82 (m, 6H), 1.19 - 1.11 (m, 2H), 1.06 - 0.97 (m, 2H).
457		437.38	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.21 (d, J = 5.1 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.45 (d, J = 5.1 Hz, 1H), 5.33 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.85 - 4.74 (m, 1H), 4.56 (s, 2H).

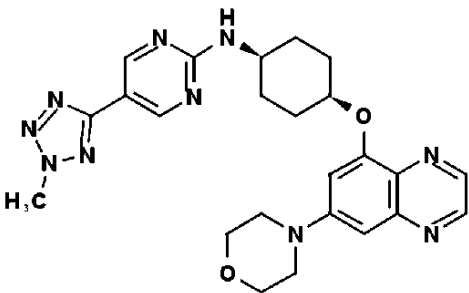
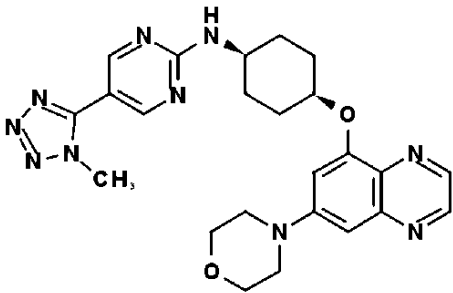
10

20

30

40

【表 2 - 6 3】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			4.12 - 4.00 (m, 1H), 3.95 - 3.86 (m, 4H), 3.66 (s, 1H), 3.39 - 3.27 (m, 4H), 2.18 (dd, J = 14.1, 8.4 Hz, 2H), 2.01 - 1.83 (m, 6H).
458		489.41	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.97 (s, 2H), 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.54 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.38 (s, 3H), 4.16 - 4.05 (m, 1H), 4.00 - 3.81 (m, 4H), 3.42 - 3.23 (m, 4H), 2.29 - 2.15 (m, 2H), 2.05 - 1.83 (m, 6H).
459		489.41	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.80 - 8.64 (m, 3H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.69 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.82 (s, 1H), 4.18 (s, 3H), 4.15 - 4.06 (m, 1H), 4.01 - 3.83 (m, 4H), 3.44 - 3.24 (m, 4H), 2.32 - 2.18 (m, 2H), 2.07 - 1.84 (m, 6H).

10

20

30

【表 2 - 6 4】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
460		475.37	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 9.02 (s, 2H), 8.84 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.66 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.01 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.90 (d, J = 7.1 Hz, 1H), 4.74 (s, 1H), 4.13 (s, 1H), 4.04 - 3.88 (m, 4H), 3.45 - 3.32 (m, 4H), 2.06 (d, J = 7.5 Hz, 2H), 1.96 - 1.84 (m, 6H).
461		475.19	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.59 (s, 1H), 8.54 (bd, 1H), 7.37 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 5.55 (bd, 1H), 4.83 (s, 1H), 4.14 (s, 1H), 4.00 - 3.89 (m, 4H), 3.42 - 3.29 (m, 4H), 2.30 - 2.18 (m, 2H), 1.96 (s, 6H).
462		473.39	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 2.5 Hz, 3H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.62 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.52 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 5.37 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.86 - 4.75 (m, 1H), 4.14 - 4.01 (m, 1H), 3.99 - 3.83 (m, 4H), 3.41 - 3.26 (m, 4H), 2.28 - 2.15 (m, 2H), 2.01 - 1.86 (m, 6H).

10

20

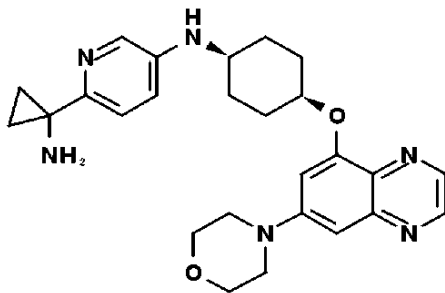
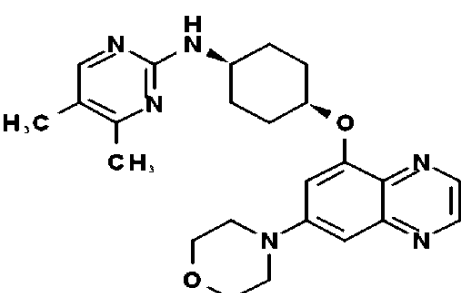
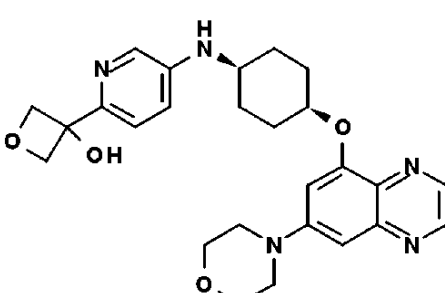
30

40

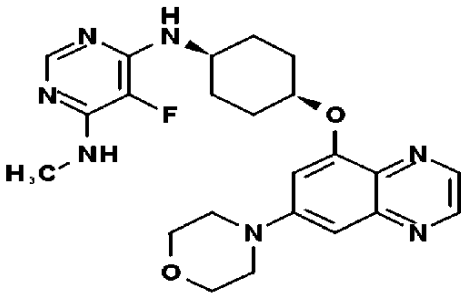
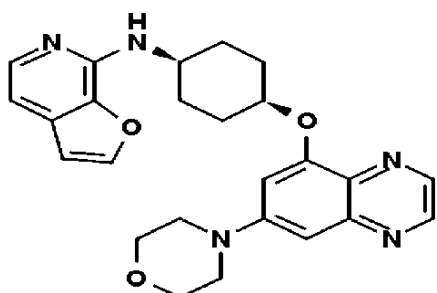
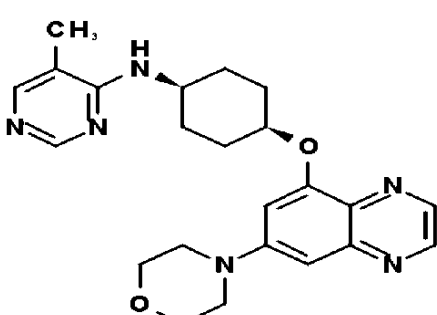
【表 2 - 6 5】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
463		453.4	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.95 (d, J = 7.1 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.23 (d, J = 3.8 Hz, 1H), 3.99 - 3.82 (m, 4H), 3.42 - 3.25 (m, 4H), 2.45 (d, J = 0.6 Hz, 3H), 2.30 (d, J = 2.8 Hz, 3H), 2.26 - 2.14 (m, 2H), 1.99 - 1.86 (m, 6H).
464		449.35	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.22 (s, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.78 (d, J = 7.8 Hz, 2H), 4.62 (t, J = 9.1 Hz, 2H), 4.23 (s, 1H), 3.97 - 3.85 (m, 4H), 3.40 - 3.30 (m, 4H), 3.25 (t, J = 9.1 Hz, 2H), 2.27 - 2.11 (m, 2H), 2.01 - 1.82 (m, 6H).
465		420.19	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.86 (d, J = 2.7 Hz, 1H), 7.78 (s, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.78 (t, J = 2.1 Hz, 1H), 4.78 (m, 1H), 4.00 - 3.86 (m, 4H), 3.50 (s, 1H), 3.38 - 3.28 (m, 4H), 2.28 (s, 3H), 2.25 - 2.14 (m, 2H), 1.95 - 1.85 (m, 6H).

【表 2 - 6 6】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
466		461.33	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (m, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.20 (m, 1H), 7.93 (s, 1H), 6.97 - 6.89 (m, 3H), 4.77 (m, 1H), 3.92 (m, 4H), 3.49 (m, 1H), 3.34 (m, 4H), 2.20 (m, 2H), 1.88 (d, J = 4.1 Hz, 6H), 1.70 (m, 4H).
467		435.35	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.95 (s, 1H), 6.94 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.00 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.83 - 4.74 (m, 1H), 4.07 - 3.96 (m, 1H), 3.96 - 3.87 (m, 4H), 3.38 - 3.28 (m, 4H), 2.29 (s, 3H), 2.22 - 2.12 (m, 2H), 2.07 (s, 3H), 1.93 - 1.85 (m, 6H).
468		478.21	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.91 (d, J = 2.7 Hz, 1H), 7.73 (dd, J = 8.6, 0.7 Hz, 1H), 7.11 (dd, J = 8.6, 2.8 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.11 - 5.02 (m, 2H), 4.85 - 4.75 (m, 1H), 4.75 - 4.67 (m, 2H), 3.98 - 3.86 (m, 4H), 3.54 (s, 1H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.31 - 2.15 (m, 2H), 2.00 - 1.83 (m, 6H).

【表 2 - 6 7】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
469		454.3	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.03 (s, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.67 (s, 1H), 4.60 (s, 1H), 4.16 (s, 1H), 4.00 - 3.82 (m, 4H), 3.41 - 3.25 (m, 4H), 3.04 (d, J = 5.0 Hz, 3H), 2.28 - 2.11 (m, 2H), 1.99 - 1.84 (m, 6H).
470		446.38	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.88 (d, J = 5.5 Hz, 1H), 7.61 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.84 (d, J = 5.5 Hz, 1H), 6.70 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 4.92 (s, 1H), 4.82 - 4.74 (m, 1H), 4.44 - 4.28 (m, 1H), 3.95 - 3.86 (m, 4H), 3.39 - 3.26 (m, 4H), 2.28 - 2.17 (m, 2H), 2.06 - 1.92 (m, 6H).
471		421.35	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.42 (s, 1H), 7.91 (d, J = 13.5 Hz, 1H), 6.93 - 6.78 (m, 2H), 4.71 (s, 1H), 4.57 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.22 (s, 1H), 3.91 - 3.78 (m, 4H), 3.33 - 3.19 (m, 4H), 2.16 (d, J = 6.6 Hz, 2H), 1.96 (s, 3H), 1.91 -

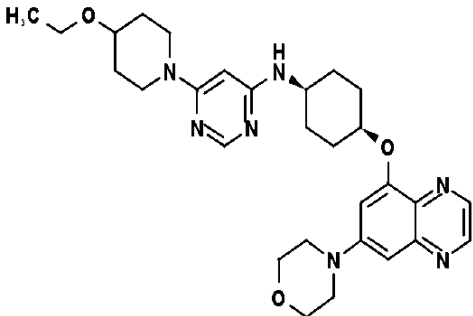
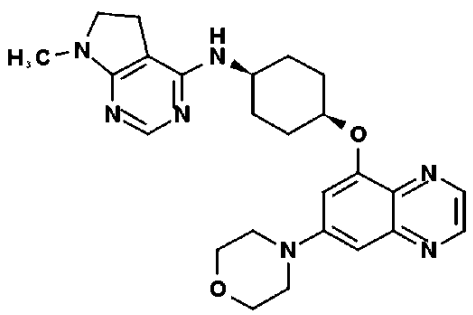
10

20

30

40

【表 2 - 6 8】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			1.77 (m, 6H).
472		534.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.10 (d, J = 0.8 Hz, 1H), 6.92 - 6.77 (m, 2H), 5.36 (dd, J = 7.9, 0.9 Hz, 1H), 4.71 (q, J = 5.2, 4.2 Hz, 2H), 3.97 - 3.69 (m, 7H), 3.58 - 3.37 (m, 4H), 3.30 - 3.03 (m, 6H), 2.22 - 2.04 (m, 2H), 1.93 - 1.73 (m, 6H), 1.52 (dtd, J = 12.8, 8.9, 3.8 Hz, 2H), 1.28 - 1.16 (m, 3H).
473		462.3	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.16 (s, 1H), 6.92 (dd, J = 15.4, 2.5 Hz, 2H), 4.77 (d, J = 5.4 Hz, 1H), 4.25 - 4.07 (m, 2H), 3.98 - 3.86 (m, 5H), 3.51 (dd, J = 9.3, 8.2 Hz, 2H), 3.40 - 3.29 (m, 5H), 2.92 (s, 3H), 2.87 - 2.71 (m, 2H), 2.19 (d, J = 7.1 Hz, 2H), 1.91 (t, J = 4.0 Hz, 6H).

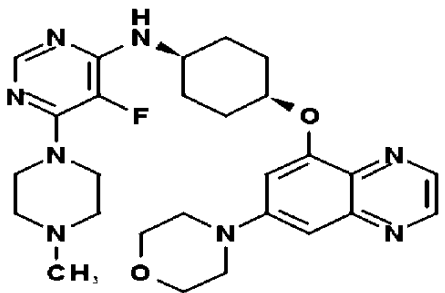
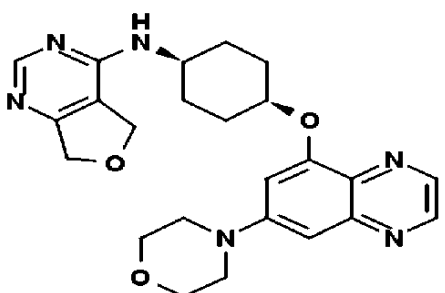
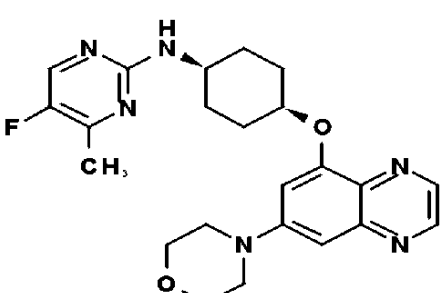
10

20

30

40

【表 2 - 6 9】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
474		523.31	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.99 (d, J = 1.5 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.82 (d, J = 5.5 Hz, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.15 (s, 1H), 3.96 - 3.85 (m, 4H), 3.76 - 3.65 (m, 4H), 3.38 - 3.26 (m, 4H), 2.59 - 2.45 (m, 4H), 2.34 (s, 3H), 2.27 - 2.13 (m, 2H), 1.96 - 1.85 (m, 6H).
475		449.21	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.52 (s, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.01 (d, J = 2.6 Hz, 2H), 4.98 - 4.89 (m, 2H), 4.80 (s, 1H), 4.54 (s, 1H), 4.22 (s, 1H), 3.95 - 3.86 (m, 4H), 3.39 - 3.27 (m, 4H), 2.29 - 2.16 (m, 2H), 1.98 - 1.84 (m, 6H).
476		439.4	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.03 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.18 - 5.04 (m, 1H), 4.80 (s, 1H), 3.99 - 3.90 (m, 5H), 3.40 - 3.32 (m, 4H), 2.36 (d, J = 2.4 Hz, 3H), 2.23 - 2.15 (m, 2H), 1.95 - 1.85 (m, 6H).

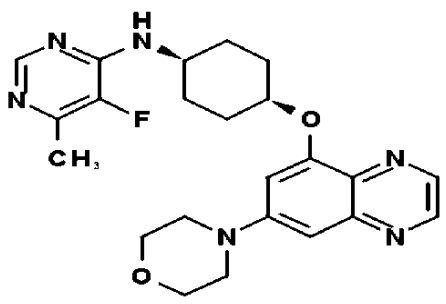
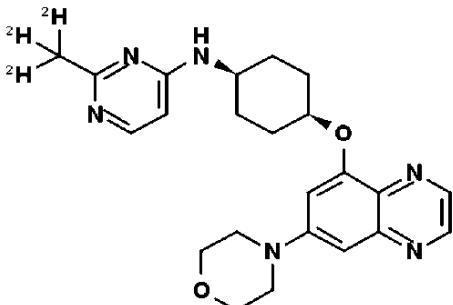
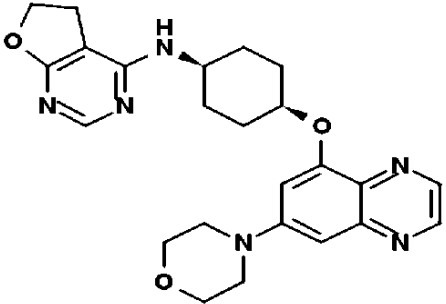
10

20

30

40

【表 2 - 7 0】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
477		439.36	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.26 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.07 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.30 - 4.13 (m, 1H), 3.98 - 3.83 (m, 4H), 3.38 - 3.26 (m, 4H), 2.36 (d, J = 2.8 Hz, 3H), 2.29 - 2.16 (m, 2H), 1.97 - 1.85 (m, 6H).
478		424	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.64 (t, J = 9.6 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.02 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.07 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 4.91 (s, 1H), 4.73 (s, 1H), 3.83 (dd, J = 17.8, 12.9 Hz, 5H), 3.25 (dd, J = 17.8, 13.0 Hz, 4H), 2.14 (dd, J = 8.9, 5.0 Hz, 2H), 1.91 - 1.76 (m, 6H).
479		449.3	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.15 (s, 1H), 6.84 (dd, J = 17.3, 2.5 Hz, 2H), 4.70 (s, 1H), 4.55 (dd, J = 9.2, 8.3 Hz, 2H), 4.36 (s, 1H), 4.16 (s, 1H), 3.92 - 3.76 (m, 4H), 3.35 - 3.15 (m, 4H), 3.03 - 2.83 (m, 2H), 2.14 (s, 2H), 1.84 (d, J = 5.4 Hz, 6H).

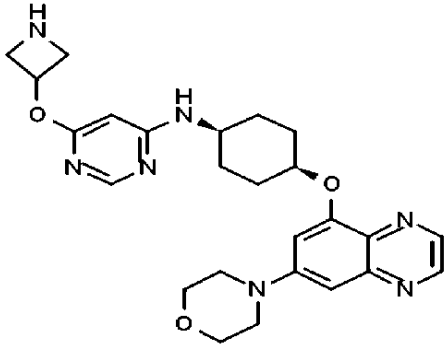
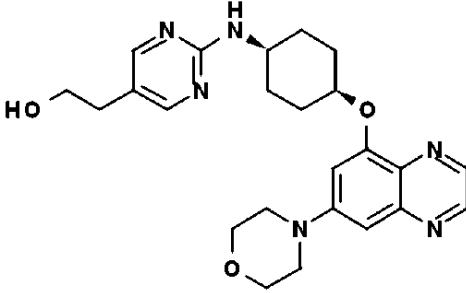
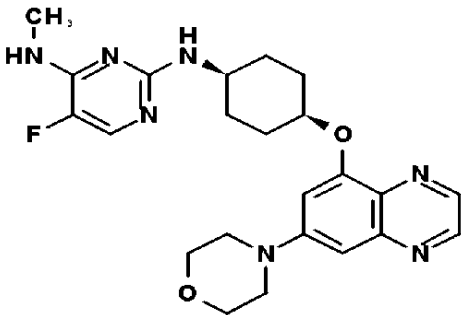
10

20

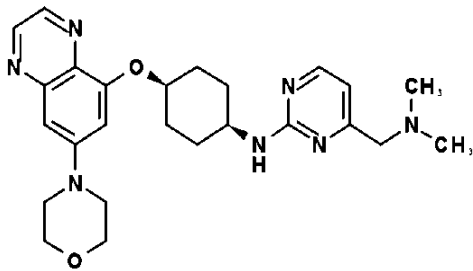
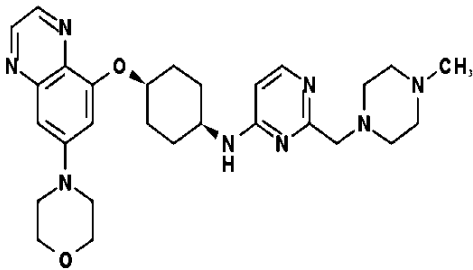
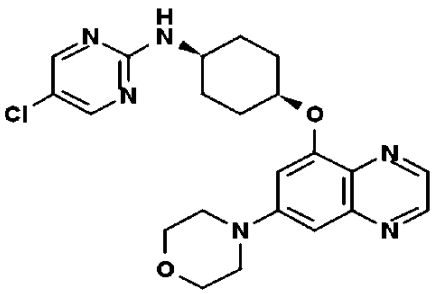
30

40

【表 2 - 7 1】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
480		478.26	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.20 (d, J = 0.9 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 17.6, 2.5 Hz, 2H), 5.65 (d, J = 0.9 Hz, 1H), 5.54 - 5.38 (m, 1H), 4.97 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.04 - 3.85 (m, 5H), 3.81 - 3.62 (m, 3H), 3.41 - 3.24 (m, 4H), 2.62 (s, 1H), 2.31 - 2.11 (m, 2H), 1.90 (dd, J = 8.0, 3.5 Hz, 6H).	10
481		451.41	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.18 (s, 2H), 6.99 - 6.87 (m, 2H), 5.16 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.03 - 3.87 (m, 5H), 3.80 (t, J = 6.5 Hz, 2H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.67 (t, J = 6.5 Hz, 2H), 2.26 - 2.14 (m, 2H), 1.90 (t, J = 6.5 Hz, 6H).	20 30
482		454.35	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.65 (d, J = 3.6 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.14 (s, 1H), 4.90 (s, 1H), 4.76 (s, 1H), 4.01 - 3.87 (m, 5H), 3.39 - 3.31 (m, 4H), 3.01 (d, J = 5.0 Hz, 3H), 2.23 - 2.12 (m, 2H), 1.99 - 1.81 (m, 6H).	40

【表 2 - 7 2】

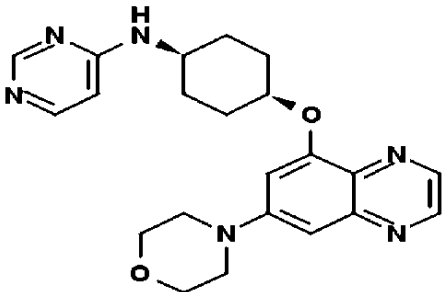
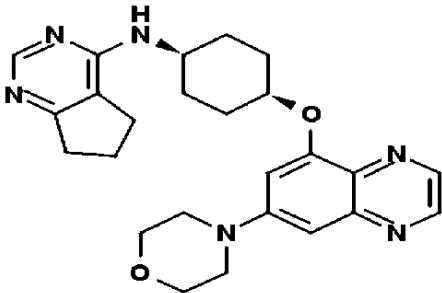
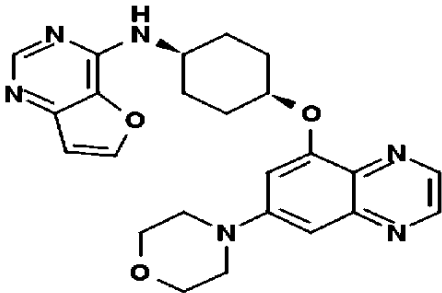
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
483		464.3	1H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.81 - 1.98 (m, 6 H), 2.11 - 2.23 (m, 2 H), 2.29 (s, 6 H), 3.29 - 3.38 (m, 6 H), 3.89 - 3.94 (m, 4 H), 3.98 - 4.08 (m, 1 H), 4.75 - 4.82 (m, 1 H), 5.21 (d, J = 7.9 Hz, 1 H), 6.61 (d, J = 5.1 Hz, 1 H), 6.90 (d, J = 2.3 Hz, 1 H)
484		519.3	1H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.79 - 1.98 (m, 6 H), 2.13 - 2.26 (m, 2 H), 2.34 (s, 3 H), 2.46 - 2.78 (m, 8 H), 3.28 - 3.38 (m, 4 H), 3.60 (s, 2 H), 3.78 - 3.98 (m, 5 H), 4.76 - 4.85 (m, 1 H), 5.10 (br s, 1 H), 6.18 (d, J = 6.0 Hz, 1 H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1 H)
485		441.29	1H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.20 (s, 2H), 6.96 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.27 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.01 - 3.84 (m, 5H), 3.40 - 3.25 (m, 4H), 2.25 - 2.12 (m, 2H), 1.97 - 1.82 (m, 6H).

10

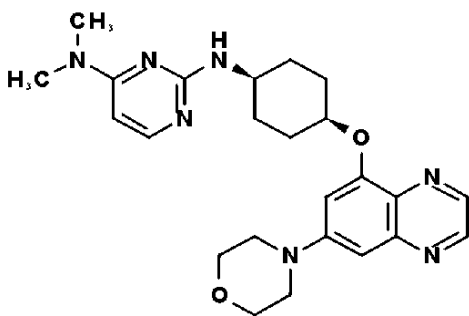
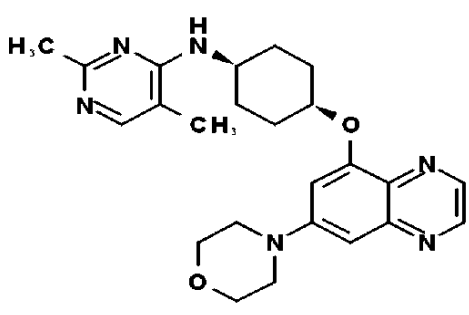
20

30

【表 2 - 7 3】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
486		407	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.49 (s, 1H), 8.08 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.24 (dd, J = 6.0, 1.1 Hz, 1H), 4.88 (s, 1H), 4.78 - 4.67 (m, 1H), 3.87 - 3.82 (m, 4H), 3.25 (dd, J = 13.6, 8.8 Hz, 4H), 2.15 (dd, J = 8.8, 5.1 Hz, 2H), 1.90 - 1.78 (m, 6H).	10
487		447.37	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.45 (s, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.87 (t, J = 9.8 Hz, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.49 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.28 (s, 1H), 3.96 - 3.86 (m, 4H), 3.40 - 3.28 (m, 4H), 2.95 - 2.85 (m, 2H), 2.73 - 2.61 (m, 2H), 2.28 - 2.17 (m, 2H), 2.17 - 2.06 (m, 2H), 1.94 - 1.89 (m, 6H).	20 30
488		447.37	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.48 (s, 1H), 7.73 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.85 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 5.29 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 4.88 - 4.75 (m, 1H), 4.46 - 4.33 (m, 1H), 3.95 - 3.87 (m, 4H), 3.38 - 3.30 (m,	40

【表 2 - 7 4】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			4H), 2.31 - 2.19 (m, 2H), 2.06 - 1.91 (m, 6H).
489		450.34	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.85 (d, J = 6.1 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.81 (d, J = 6.1 Hz, 1H), 4.92 (s, 1H), 4.75 (s, 1H), 4.02 (s, 1H), 3.97 - 3.86 (m, 4H), 3.32 (dd, J = 17.6, 12.8 Hz, 4H), 3.04 (s, 6H), 2.18 (dd, J = 24.2, 17.3 Hz, 2H).
490		435.35	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.87 (d, J = 0.7 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.67 (s, 1H), 4.41 - 4.28 (m, 1H), 3.96 - 3.88 (m, 4H), 3.38 - 3.30 (m, 4H), 2.52 (s, 3H), 2.28 - 2.16 (m, 2H), 2.00 (s, 3H), 1.98 - 1.90 (m, 6H).

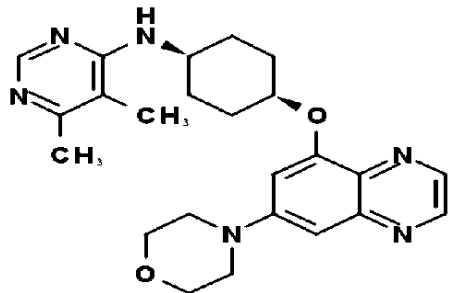
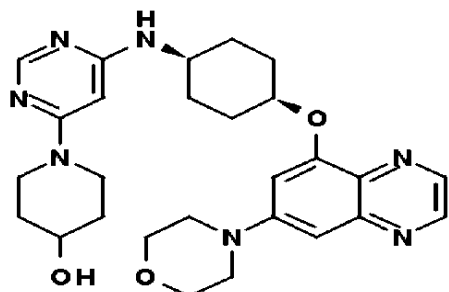
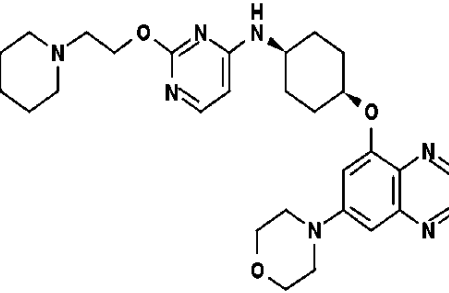
10

20

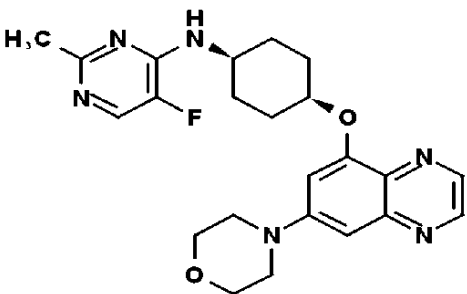
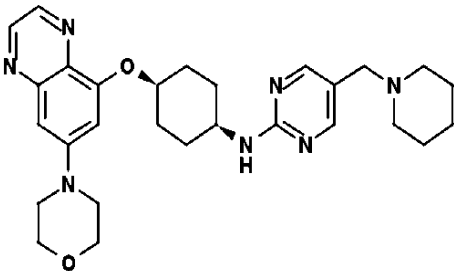
30

40

【表 2 - 7 5】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
491		435.35	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 8.42 (s, 1H), 6.95 (s, 1H), 6.90 (s, 1H), 4.79 (s, 2H), 4.28 (s, 1H), 3.98 - 3.86 (m, 4H), 3.40 - 3.28 (m, 4H), 2.42 (s, 3H), 2.30 - 2.16 (m, 2H), 2.02 (s, 3H), 1.99 - 1.89 (m, 6H).	10
492		506.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.20 (d, J = 0.8 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.47 (d, J = 1.0 Hz, 1H), 4.76 (d, J = 23.9 Hz, 2H), 4.12 - 3.75 (m, 7H), 3.41 - 3.28 (m, 4H), 3.20 (ddd, J = 13.2, 9.6, 3.2 Hz, 2H), 2.20 (d, J = 6.9 Hz, 2H), 1.91 (d, J = 5.2 Hz, 6H).	20
493		534	¹ H NMR (400 MHz, DMSO) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.57 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.45 (s, 1H), 7.14 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.15 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 4.92 (s, 1H), 4.26 (t, J = 6.1 Hz, 2H), 4.09 - 3.89 (m, 1H), 3.83 - 3.72 (m, 4H), 3.34 (d, J = 7.7 Hz, 4H), 2.57 (t, J = 6.1 Hz, 2H), 2.36 (d, J = 24.2 Hz, 4H), 2.01 (d, J = 17.5 Hz, 2H), 1.76 (d, J = 4.8 Hz, 6H).	30 40

【表 2 - 7 6】

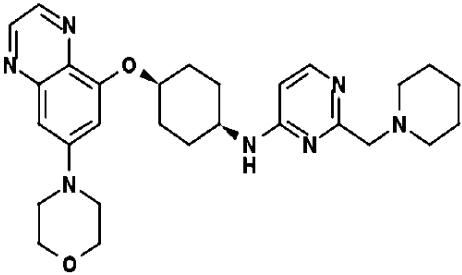
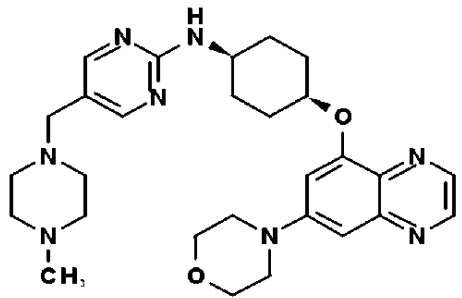
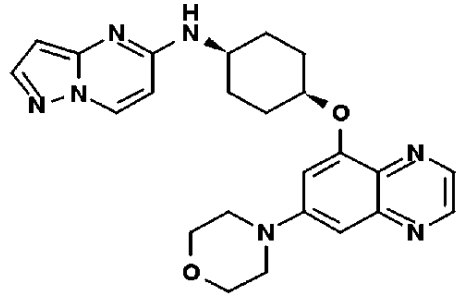
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			1.52 - 1.35 (m, 6H).
494		439.23	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.82 (d, J = 3.4 Hz, 1H), 6.88 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.82 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.96 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.72 (d, J = 3.1 Hz, 1H), 4.18 (s, 1H), 3.90 - 3.78 (m, 4H), 3.35 - 3.19 (m, 4H), 2.41 (d, J = 0.9 Hz, 3H), 2.13 (q, J = 6.4 Hz, 2H), 1.84 (t, J = 6.3 Hz, 6H).
495		504.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.37 - 1.47 (m, 2 H), 1.51 - 1.60 (m, 4 H), 1.82 - 1.99 (m, 6 H), 2.14 - 2.24 (m, 2 H), 2.30 - 2.41 (m, 4 H), 3.29 (s, 2 H), 3.30 - 3.35 (m, 4 H), 3.89 - 3.93 (m, 4 H), 3.96 - 4.06 (m, 1 H), 4.75 - 4.81 (m, 1 H), 5.18 (d, J =

10

20

30

【表 2 - 7 7】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
496		504.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.38 - 1.49 (m, 2 H), 1.56 - 1.64 (m, 4 H), 1.79 - 1.97 (m, 6 H), 2.15 - 2.26 (m, 2 H), 2.45 - 2.57 (m, 4 H), 3.28 - 3.38 (m, 4 H), 3.53 (s, 2 H), 3.68 - 3.99 (m, 5 H), 4.76 - 4.85 (m, 1 H), 5.11 (br s, 1 H), 6.18 (d, J = 6.0
497		519.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.22 (s, 2H), 7.01 - 6.85 (m, 2H), 5.21 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.79 (d, J = 5.3 Hz, 1H), 4.11 - 3.87 (m, 5H), 3.35 (q, J = 3.4 Hz, 6H), 2.46 (s, 6H), 2.29 (s, 3H), 2.19 (s, 3H), 2.01 - 1.83 (m, 6H).
498		446.1	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.23 (dd, J = 7.6, 0.8 Hz, 1H), 7.85 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.12 (dd, J = 2.2, 0.8 Hz, 1H), 6.00 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.91 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.20 (s, 1H), 4.01 - 3.88 (m, 4H), 3.42 - 3.28 (m, 4H), 2.22 (s, 2H), 1.97 (dd, J = 7.8, 5.5 Hz, 6H).

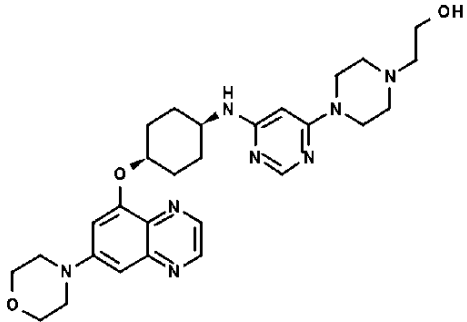
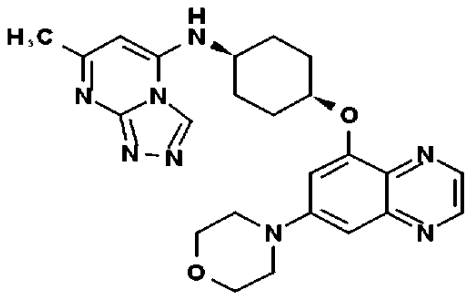
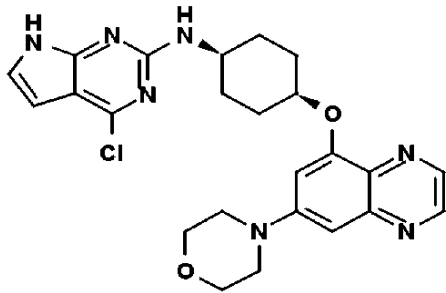
10

20

30

40

【表 2 - 7 8】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
499		535.24	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.19 (d, J = 0.8 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 16.4, 2.5 Hz, 2H), 5.42 (d, J = 1.0 Hz, 1H), 4.87 - 4.67 (m, 2H), 4.01 - 3.77 (m, 5H), 3.61 (dt, J = 27.3, 5.1 Hz, 6H), 3.41 - 3.26 (m, 4H), 2.73 (t, J = 5.3 Hz, 1H), 2.59 (ddd, J = 6.2, 5.0, 3.7 Hz, 6H), 2.19 (d, J = 6.6 Hz, 2H), 1.89 (t, J = 5.2 Hz, 6H).
500		461.24	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.55 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.21 (s, 1H), 6.88 (dd, J = 16.1, 2.5 Hz, 2H), 6.16 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 5.98 (s, 1H), 4.80 (d, J = 2.9 Hz, 1H), 3.90 - 3.77 (m, 4H), 3.72 - 3.51 (m, 1H), 3.33 - 3.20 (m, 4H), 2.51 (s, 3H), 2.34 - 1.66 (m, 8H).
501		480.15	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.55 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (dd, J = 3.6, 2.3 Hz, 1H), 6.86 (dd, J = 13.7, 2.4 Hz, 2H), 6.30 (dd, J = 3.6, 2.0 Hz, 1H), 5.22 (m, 1H), 4.74 (s, 1H), 4.30 (s, 1H), 3.91 - 3.79 (m, 4H), 3.35 - 3.19 (m,

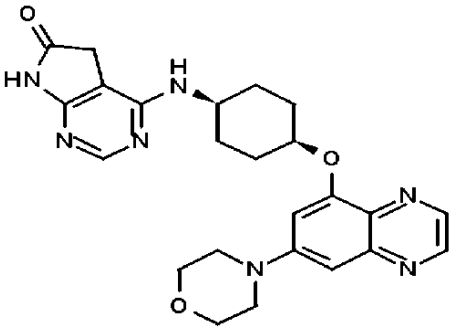
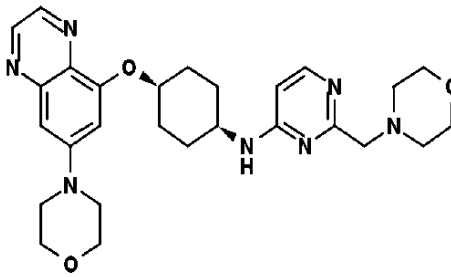
10

20

30

40

【表 2 - 7 9】

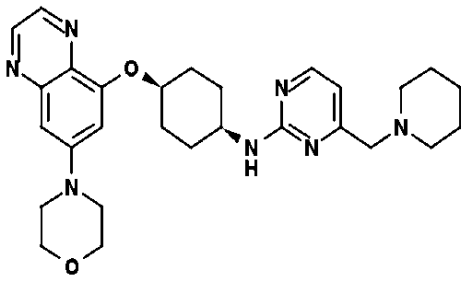
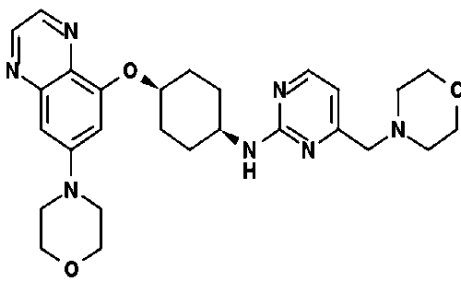
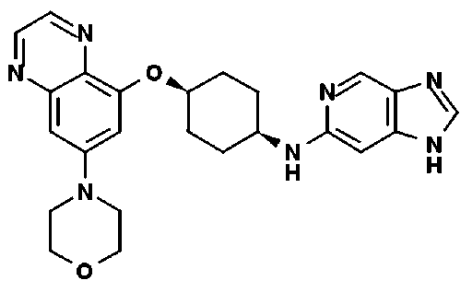
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			4H), 2.15 (m, 2H), 2.03 - 1.76 (m, 6H).
502		462.19	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.25 (s, 1H), 6.88 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.82 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.73 (s, 1H), 4.54 (s, 1H), 4.12 (s, 1H), 3.84 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 4H), 3.37 - 3.19 (m, 5H), 2.17 (d, J = 10.1 Hz, 2H), 1.92 - 1.71 (m, 6H).
503		506.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.79 ñ 1.99 (m, 6 H), 2.15 - 2.26 (m, 2 H), 2.54 - 2.65 (m, 4 H), 3.29 - 3.37 (m, 4 H), 3.58 (s, 2 H), 3.74 - 3.83 (m, 5 H), 3.88 - 3.95 (m, 4 H), 4.75 - 4.85 (m, 1 H), 5.11 (br. s, 1 H), 6.19 (d, J = 5.9 Hz, 1 H), 6.90 (d, J

10

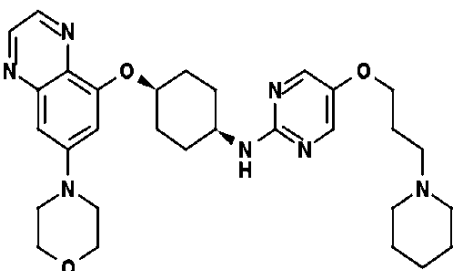
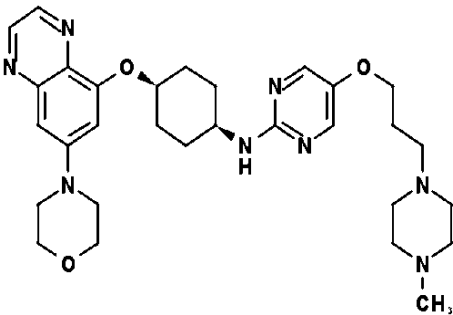
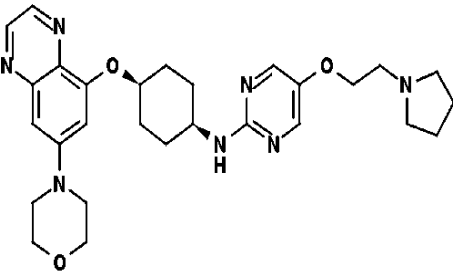
20

30

【表 2 - 8 0】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
504		504.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.40 - 1.49 (m, 2 H), 1.55 - 1.65 (m, 4 H), 1.84 - 1.96 (m, 6 H), 2.12 - 2.23 (m, 2 H), 2.43 (br. s, 4 H), 3.30 - 3.40 (m, 6 H), 3.88 - 3.95 (m, 4 H), 3.97 - 4.08 (m, 1 H), 4.75 - 4.82 (m, 1 H), 5.17 (d, J = 7.9 Hz, 1 H), 6.68	10
505		506.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.83 - 1.96 (m, 6 H), 2.13 - 2.23 (m, 2 H), 2.53 (br. s, 4 H), 3.30 - 3.36 (m, 4 H), 3.42 (s, 2 H), 3.72 - 3.78 (m, 4 H), 3.88 - 3.95 (m, 4 H), 4.03 (br. s, 1 H), 4.75 - 4.82 (m, 1 H), 5.21 (d, J = 8.0 Hz, 1 H), 6.67 (d, J = 5)	20
506		446.3	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆): ppm 1.71 - 1.85 (m, 6 H), 1.98 - 2.10 (m, 2 H), 3.33 - 3.38 (m, 4 H), 3.74 - 3.91 (m, 5 H), 4.87 - 4.96 (m, 1 H), 6.02 (d, J = 7.2 Hz, 1 H), 6.51 (s, 1 H), 6.83 (d, J = 1.9 Hz, 1 H), 7.14 (d, J = 1.9 Hz, 1 H), 7.94 (s, 1 H), 8.3	30

【表 2 - 8 1】

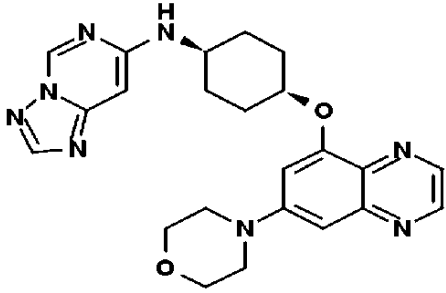
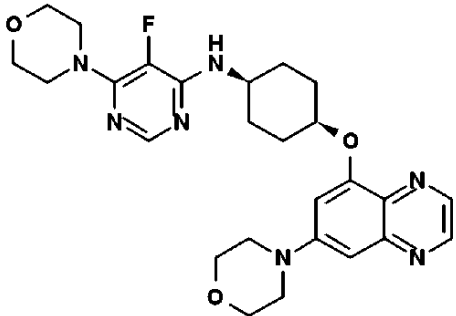
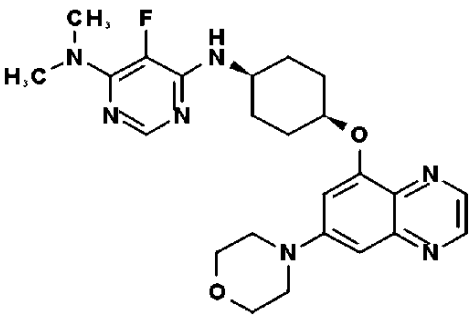
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
507		548.4	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.39 - 1.48 (m, 2 H), 1.54 - 1.69 (m, 4 H), 1.83 - 1.98 (m, 8 H), 2.12 - 2.24 (m, 2 H), 2.33 - 2.47 (m, 6 H), 3.31 - 3.35 (m, 4 H), 3.89 - 3.99 (m, 7 H), 4.74 - 4.81 (m, 1 H), 4.95 (d, J = 8.2 Hz, 1 H), 6.90 (d, J = 2.3 Hz, 1
508		563.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.82 - 1.98 (m, 8 H), 2.13 - 2.23 (m, 2 H), 2.29 (s, 3 H), 2.35 - 2.62 (m, 10 H), 3.29 - 3.37 (m, 4 H), 3.87 - 3.94 (m, 5 H), 3.97 (t, J = 6.3 Hz, 2 H), 4.74 - 4.81 (m, 1 H), 4.96 (d, J = 8.1 Hz, 1 H), 6.90 (d, J = 2.3 Hz, 1 H
509		520.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.77 - 1.96 (m, 10 H), 2.11 - 2.25 (m, 2 H), 2.57 - 2.65 (m, 4 H), 2.86 (t, J = 5.7 Hz, 2 H), 3.31 - 3.35 (m, 4 H), 3.87 - 3.98 (m, 5 H), 4.05 (t, J = 5.7 Hz, 2 H), 4.74 - 4.81 (m, 1 H), 4.98 (d, J = 8.2 Hz, 1 H), 6.90 (d, J =

10

20

30

【表 2 - 8 2】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
510		447.16	1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.95 (d, J = 1.3 Hz, 1H), 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.14 (s, 1H), 6.95 (dd, J = 16.0, 2.5 Hz, 2H), 6.36 (d, J = 1.3 Hz, 1H), 5.11 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.83 (dd, J = 5.5, 2.9 Hz, 1H), 4.01 - 3.84 (m, 4H), 3.73 - 3.55 (m, 1H), 3.40 - 3.30 (m, 4H), 2.34 - 2.21 (m, 2H), 2.08 - 1.83 (m, 6H).
511		510.2	1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.55 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.93 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 6.85 (dd, J = 16.5, 2.5 Hz, 2H), 4.74 (ddd, J = 21.7, 7.5, 3.9 Hz, 2H), 4.09 (p, J = 7.7, 7.2 Hz, 1H), 3.92 - 3.79 (m, 4H), 3.71 (dd, J = 5.7, 3.7 Hz, 4H), 3.57 (dd, J = 5.7, 3.7 Hz, 4H), 3.34 - 3.20 (m, 4H), 2.15 (td, J = 11.0, 10.0, 6.2 Hz, 2H), 1.94 - 1.79 (m, 6H).
512		468.27	1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.99 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 7.00 - 6.85 (m, 2H), 4.77 (d, J = 6.6 Hz, 2H), 4.14 (q, J = 7.2 Hz, 1H), 4.03 - 3.87 (m, 4H), 3.78 - 3.64 (m, 1H), 3.43 - 3.28 (m, 4H), 3.15 (d, J = 2.5

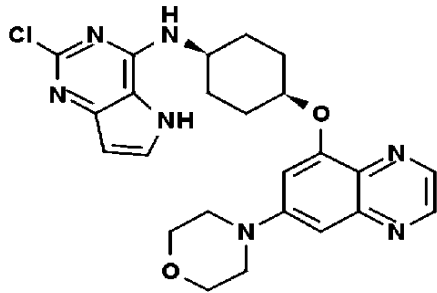
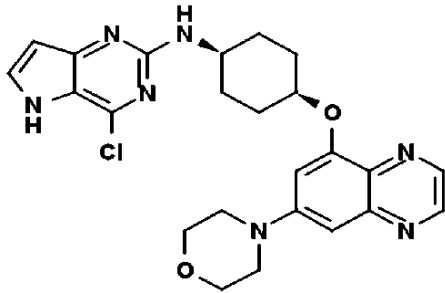
10

20

30

40

【表 2 - 8 3】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			Hz, 6H), 2.98 - 2.84 (m, 1H), 2.20 (d, J = 11.9 Hz, 2H), 1.94 (p, J = 5.8, 5.3 Hz, 6H).
513		480.1	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 10.85 (d, J = 3.0 Hz, 1H), 8.66 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.40 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.22 (t, J = 2.9 Hz, 1H), 6.85 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.75 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.36 (dd, J = 3.1, 1.9 Hz, 1H), 5.86 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.59 (s, 1H), 4.25 (s, 1H), 3.82 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 4H), 3.24 (dd, J = 6.0, 3.8 Hz, 4H), 1.71 (s, 11H), 1.51 (t, J = 10.1 Hz, 2H).
514		480.1	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 10.96 (s, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.40 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.84 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.75 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.34 (dd, J = 3.1, 1.9 Hz, 1H), 6.02 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.59 (s, 1H), 4.23 (td, J = 8.8, 8.3, 4.2 Hz, 1H), 3.89 - 3.74 (m, 4H), 3.30 - 3.03 (m, 4H), 1.89 - 1.61 (m, 6H), 1.61 - 1.39 (m, 2H).

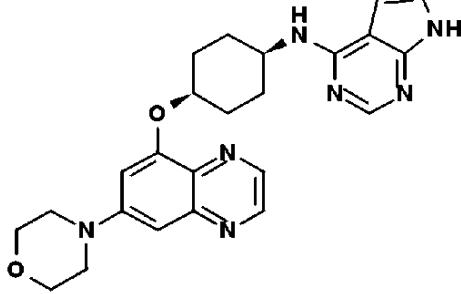
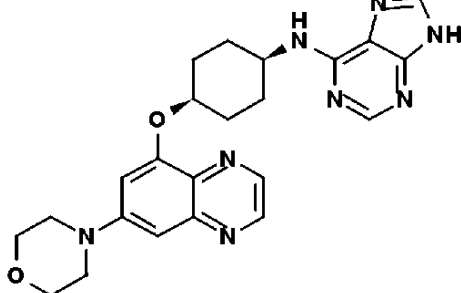
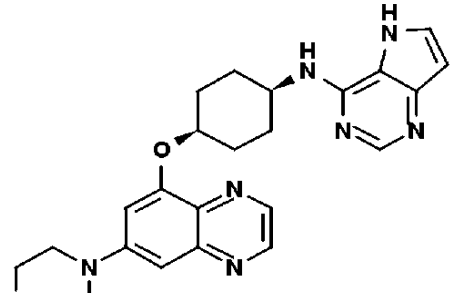
10

20

30

40

【表 2 - 8 4】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
515		446.42	1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 9.53 (s, 1H), 8.71 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.35 (s, 1H), 7.06 (dd, J = 3.6, 2.1 Hz, 1H), 7.00 - 6.85 (m, 2H), 6.39 (dd, J = 3.6, 1.8 Hz, 1H), 5.14 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 4.82 (s, 1H), 4.40 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.01 - 3.81 (m, 4H), 3.44 - 3.25 (m, 4H), 2.26 (d, J = 9.8 Hz, 2H), 2.08 - 1.86 (m, 6H).
516		447.32	1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 12.29 (s, 1H), 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.43 (s, 1H), 7.95 (s, 1H), 7.00 - 6.89 (m, 2H), 6.03 (s, 1H), 4.86 (s, 1H), 4.42 (s, 1H), 3.92 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 4H), 3.40 - 3.30 (m, 4H), 2.27 (d, J = 10.1 Hz, 2H), 2.07 - 1.88 (m, 6H).
517		446.33	1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 11.28 (s, 1H), 8.75 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.47 (s, 1H), 7.34 (s, 1H), 6.93 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.82 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 1.93 - 1.71 (m, 6H), 6.54 (d, J = 3.0 Hz, 1H), 5.57 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.64 (s, 1H), 4.33 (s, 1H), 3.90 (t, J = 4.8 Hz, 4H), 3.31 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 1.80-1.68 (m, 6H),

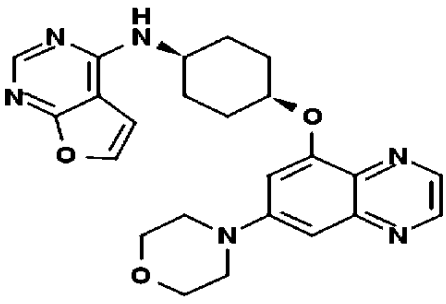
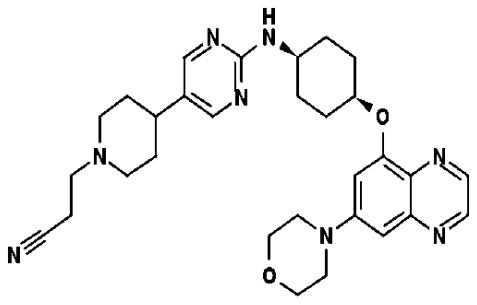
10

20

30

40

【表 2 - 8 5】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			1.54 (d, J = 9.2 Hz, 2H).
518		447.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.55 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.32 (s, 1H), 7.42 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.88 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.58 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.07 (s, 1H), 4.74 (s, 1H), 4.26 (s, 1H), 3.84 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 4H), 3.42 - 3.10 (m, 4H), 2.18 (d, J = 10.2 Hz, 2H), 2.06 - 1.70 (m, 6H).
519		543.21	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.07 (s, 2H), 6.93 - 6.79 (m, 2H), 5.04 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.70 (s, 1H), 4.02 - 3.76 (m, 5H), 3.34 - 3.20 (m, 4H), 3.02 - 2.87 (m, 2H), 2.66 (t, J = 6.9 Hz, 2H), 2.53 - 2.42 (m, 2H), 2.35 - 2.22 (m, 1H), 2.10 (td, J = 11.6, 3.0 Hz, 3H), 1.90 - 1.46 (m, 11H).

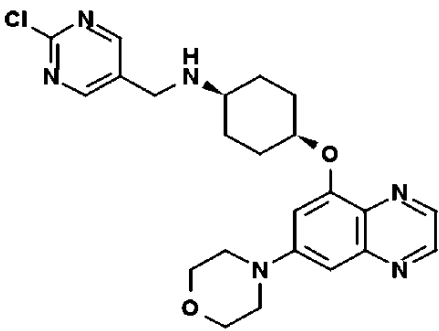
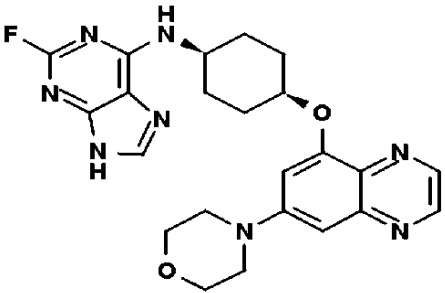
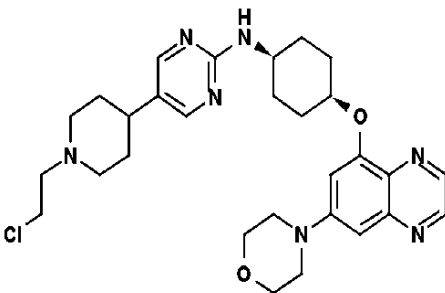
10

20

30

40

【表 2 - 8 6】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
520		455.17	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.61 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.56 (d, J = 0.6 Hz, 2H), 8.53 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.67 (d, J = 6.1 Hz, 1H), 3.89 - 3.81 (m, 4H), 3.79 (d, J = 0.7 Hz, 2H), 3.31 - 3.17 (m, 4H), 2.60 (s, 1H), 2.20 - 2.03 (m, 2H), 1.79 - 1.59 (m, 6H).
521		465.16	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.74 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.66 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.93 (s, 1H), 6.99 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.20 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 4.87 (s, 1H), 4.36 (s, 1H), 3.94 (dd, J = 5.9, 3.8 Hz, 4H), 3.42 - 3.32 (m, 4H), 2.26 (s, 2H), 1.93 (s, 6H).
522		552.21	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.17 (s, 2H), 7.01 - 6.89 (m, 2H), 5.12 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.09 - 3.86 (m, 5H), 3.63 (t, J = 7.1 Hz, 2H), 3.40 - 3.29 (m, 4H), 3.06 (d, J = 11.3 Hz, 2H), 2.79 (t, J = 7.1 Hz, 2H), 2.39 - 2.15 (m, 4H), 2.02 - 1.53 (m, 10H).

10

20

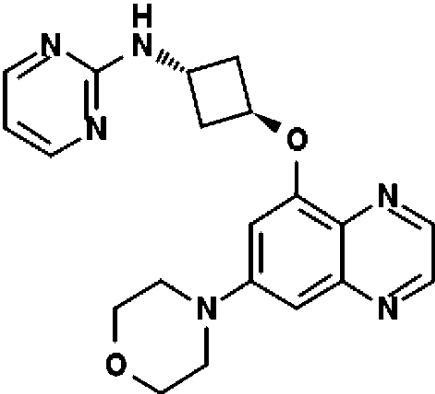
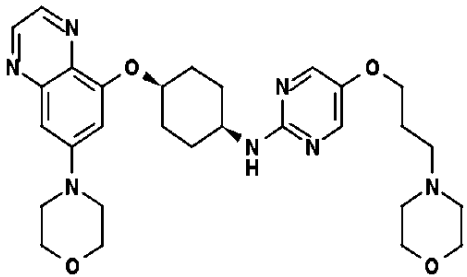
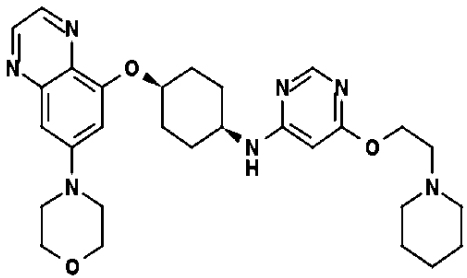
30

40

10

20

【表 2 - 8 8】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
525		379.26	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.31 (s, 1H), 8.30 (s, 1H), 6.93 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.64 - 6.54 (m, 2H), 5.38 (d, J = 5.1 Hz, 1H), 5.17 - 5.07 (m, 1H), 4.68 - 4.56 (m, 1H), 3.95 - 3.85 (m, 4H), 3.35 - 3.27 (m, 4H), 2.94 (ddd, J = 13.4, 8.2, 5.1 Hz, 2H), 2.59 (ddd, J = 13.9, 7.0, 4.5 Hz, 2H).
526		550.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.80 - 2.07 (m, 8 H), 2.11 - 2.25 (m, 2 H), 2.39 - 2.76 (m, 6 H), 3.27 - 3.40 (m, 4 H), 3.70 - 3.84 (m, 4 H), 3.87 - 3.96 (m, 5 H), 3.99 (t, J = 6.2 Hz, 2 H), 4.73 - 4.82 (m, 1 H), 4.97 (d, J = 8.1 Hz, 1 H), 6.90 (d, J = 2.4 H
527		534.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.39 - 1.48 (m, 2 H), 1.56 - 1.67 (m, 4 H), 1.78 - 1.96 (m, 6 H), 2.14 - 2.25 (m, 2 H), 2.44 - 2.52 (m, 4 H), 2.72 (t, J = 6.0 Hz, 2 H), 3.31 - 3.35 (m, 4 H), 3.63 - 3.75 (m, 1 H), 3.90 - 3.93 (m, 4 H), 4.41 (t, J = 6.0 Hz, 2

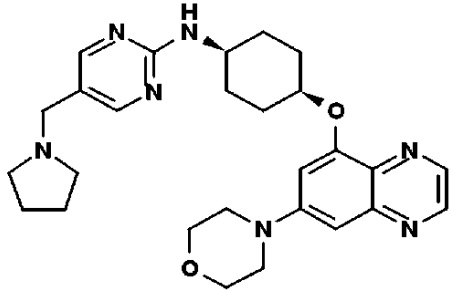
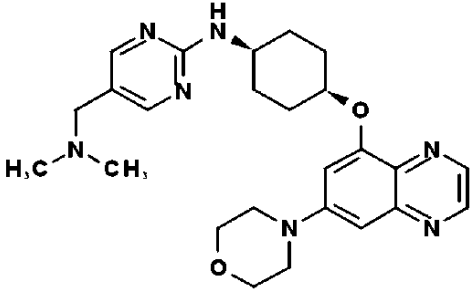
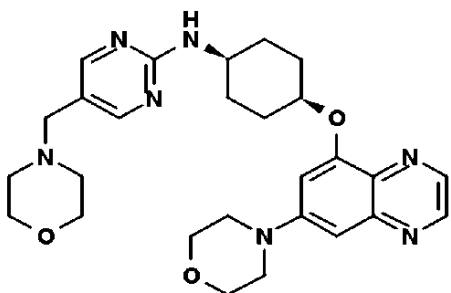
10

20

30

40

【表 2 - 8 9】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
528		490.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.31 (s, 2H), 7.02 - 6.86 (m, 2H), 5.52 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.81 (dt, J = 6.8, 3.4 Hz, 1H), 4.04 (td, J = 8.0, 4.0 Hz, 1H), 3.97 - 3.86 (m, 4H), 3.64 (s, 2H), 3.43 - 3.27 (m, 4H), 2.75 (t, J = 5.4 Hz, 4H), 2.32 - 2.15 (m, 2H), 2.07 (s, 2H), 1.92 (tt, J = 6.7, 3.6 Hz, 8H).
529		464.23	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.22 (s, 2H), 7.02 - 6.86 (m, 2H), 5.21 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.81 (dt, J = 7.5, 3.7 Hz, 1H), 4.04 (d, J = 6.9 Hz, 1H), 3.96 - 3.82 (m, 4H), 3.41 - 3.30 (m, 4H), 3.27 (s, 2H), 2.24 (m, 8H), 2.07 - 1.77 (m, 6H).
530		506.25	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.13 (s, 2H), 6.87 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.83 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.10 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.71 (s, 1H), 3.94 (s, 1H), 3.88 - 3.78 (m, 4H), 3.67 - 3.56 (m, 4H), 3.32 - 3.17 (m, 6H), 2.41 - 2.26 (m, 4H), 2.12

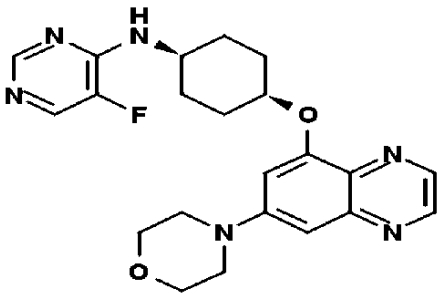
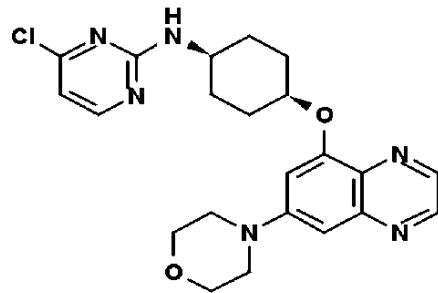
10

20

30

40

【表 2 - 9 0】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			(d, J = 8.7 Hz, 2H), 1.92 - 1.76 (m, 6H).
531		425.19	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.39 (dd, J = 2.7, 0.5 Hz, 1H), 8.04 (d, J = 3.4 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 5.15 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.83 (dq, J = 5.1, 2.6 Hz, 1H), 4.25 (dd, J = 8.1, 4.6 Hz, 1H), 3.98 - 3.88 (m, 4H), 3.39 - 3.28 (m, 4H), 2.34 - 2.17 (m, 2H), 2.03 - 1.84 (m, 6H).
532		441.29	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.13 (d, J = 4.8 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.54 (d, J = 5.2 Hz, 1H), 5.36 (s, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.03 (s, 1H), 3.97 - 3.84 (m, 4H), 3.41 - 3.23 (m, 4H), 2.26 - 2.12 (m, 2H), 1.98 - 1.81 (m, 6H).

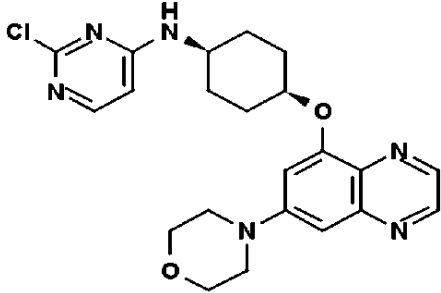
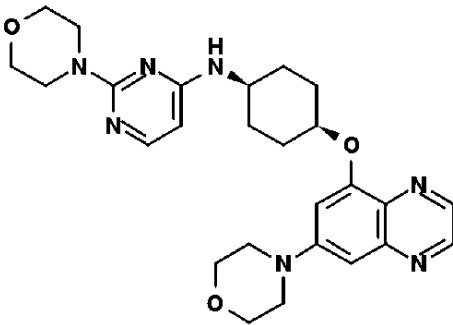
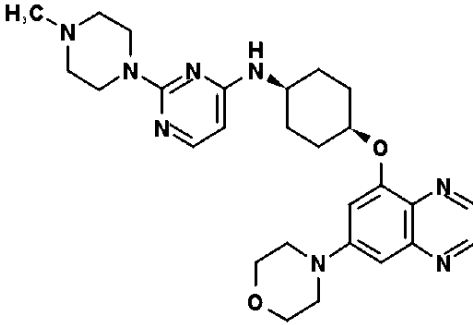
10

20

30

40

【表 2 - 9 1】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
533		441.25	1H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.99 (s, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.22 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 5.22 (s, 1H), 4.81 (s, 1H), 4.03 (dt, J = 12.1, 6.2 Hz, 1H), 3.94 - 3.86 (m, 4H), 3.40 - 3.26 (m, 4H), 2.27 - 2.13 (m, 2H), 1.90 (t, J = 17.4 Hz, 6H).
534		492.39	1H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (s, 1H), 8.61 (s, 1H), 7.89 (d, J = 5.5 Hz, 1H), 6.95 (s, 1H), 6.89 (s, 1H), 5.71 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 4.76 (s, 2H), 4.01 - 3.81 (m, 5H), 3.74 (s, 8H), 3.41 - 3.26 (m, 4H), 2.26 - 2.12 (m, 2H), 1.98 - 1.81 (m, 6H).
535		505.35	1H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.88 (d, J = 5.7 Hz, 1H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.67 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 4.84 - 4.63 (m, 2H), 3.99 - 3.83 (m, 5H), 3.82 - 3.73 (m, 4H), 3.37 - 3.27 (m, 4H), 2.49 - 2.40 (m, 4H), 2.33 (s, 3H), 2.23 - 2.11 (m, 2H), 1.96 - 1.82 (m, 6H).

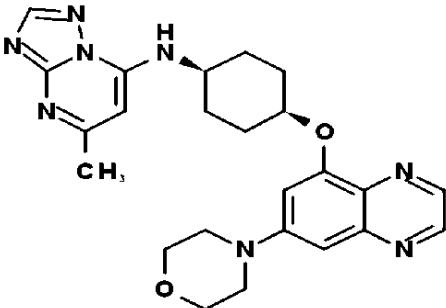
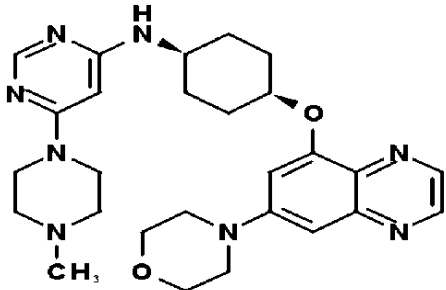
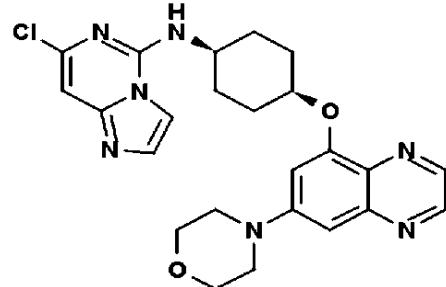
10

20

30

40

【表 2 - 9 2】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
536		461.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.73 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.65 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.30 (s, 1H), 6.97 (dd, J = 15.8, 2.5 Hz, 2H), 6.23 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 6.07 (s, 1H), 4.90 (dt, J = 5.1, 2.4 Hz, 1H), 3.99 - 3.88 (m, 4H), 3.72 (dq, J = 9.2, 4.7 Hz, 1H), 3.40 - 3.29 (m, 4H), 2.60 (s, 3H), 2.34 (dt, J = 14.1, 5.2 Hz, 2H), 2.23 - 1.79 (m, 6H).
537		505.35	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 8.18 (s, 1H), 6.95 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 6.90 (s, 1H), 5.42 (s, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.71 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 3.98 - 3.87 (m, 4H), 3.83 (s, 1H), 3.65 - 3.48 (m, 4H), 3.41 - 3.24 (m, 4H), 2.54 - 2.42 (m, 4H), 2.33 (s, 3H), 2.25 - 2.11 (m, 2H), 1.97 - 1.82 (m, 6H).
538		480.19	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.74 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.57 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 7.38 (dd, J = 1.7, 0.8 Hz, 1H), 7.05 - 6.88 (m, 3H), 5.52 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.87 (d, J = 4.0 Hz, 1H), 4.47 - 4.31 (m, 1H), 3.98 - 3.88 (m, 4H), 3.42 - 3.30 (m, 4H), 2.35 - 2.21 (m, 4H).

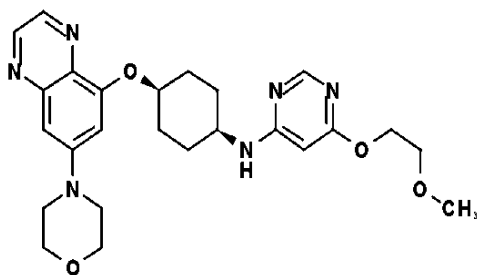
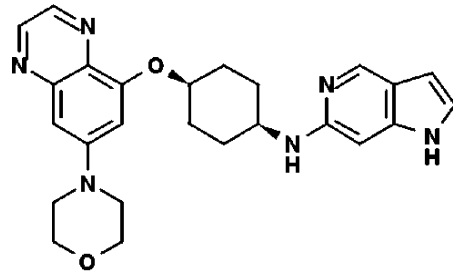
10

20

30

40

【表 2 - 9 3】

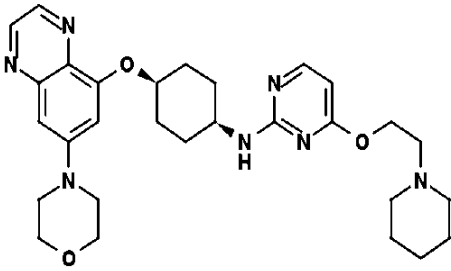
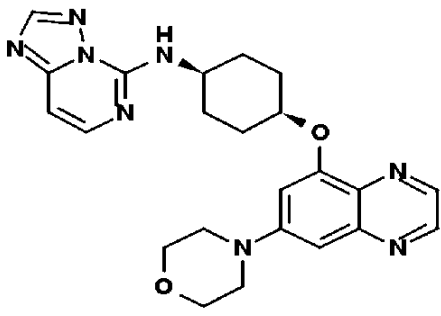
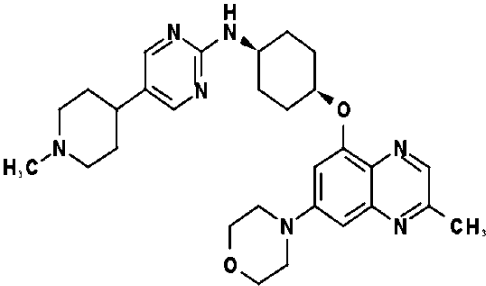
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			2H), 2.16 - 1.88 (m, 6H).
539		481.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.76 - 1.97 (m, 6 H), 2.15 - 2.26 (m, 2 H), 3.31 - 3.35 (m, 4 H), 3.43 (s, 3 H), 3.61 - 3.72 (m, 3 H), 3.90 - 3.93 (m, 4 H), 4.45 - 4.48 (m, 2 H), 4.76 - 4.82 (m, 1 H), 4.94 (d, J = 7.1 Hz, 1 H), 5.73 (s, 1 H), 6.89 (d, J = 2.
540		445.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.82 - 1.99 (m, 6 H), 2.13 - 2.25 (m, 2 H), 3.29 - 3.38 (m, 4 H), 3.73 (br. s, 1 H), 3.84 - 3.98 (m, 4 H), 4.45 (br. s, 1 H), 4.74 - 4.84 (m, 1 H), 6.31 (s, 1 H), 6.43 - 6.47 (m, 1 H), 6.91 (d, J = 2.3 Hz, 1 H), 6.93 - 6.99 (m

10

20

30

【表 2 - 9 4】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
541		534.4	1H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.40 - 1.48 (m, 2 H), 1.56 - 1.67 (m, 4 H), 1.84 - 1.99 (m, 6 H), 2.11 - 2.24 (m, 2 H), 2.45 - 2.52 (m, 4 H), 2.72 (t, J = 6.2 Hz, 2 H), 3.32 - 3.35 (m, 4 H), 3.90 - 3.93 (m, 4 H), 3.96 - 4.08 (m, 1 H), 4.40 (t, J = 6.2 Hz, 2
542		447.25	1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.56 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.18 (s, 1H), 7.83 (d, J = 6.3 Hz, 1H), 6.96 - 6.80 (m, 3H), 6.23 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.77 (dd, J = 5.8, 3.3 Hz, 1H), 4.23 (dq, J = 8.6, 4.3 Hz, 1H), 3.89 - 3.75 (m, 4H), 3.35 - 3.20 (m, 4H), 2.20 (d, J = 12.8 Hz, 2H), 2.10 - 1.79 (m, 6H).
543		518.2	1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.53 (s, 1H), 8.18 (s, 2H), 6.96 - 6.80 (m, 2H), 5.14 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.08 - 3.86 (m, 5H), 3.33 (dd, J = 6.0, 3.8 Hz, 4H), 3.07 - 2.94 (m, 2H), 2.71 (s, 3H), 2.35 (s, 3H), 2.26 - 1.97 (m, 4H), 1.99 - 1.57 (m, 11H).

10

20

30

【表 2 - 9 5】

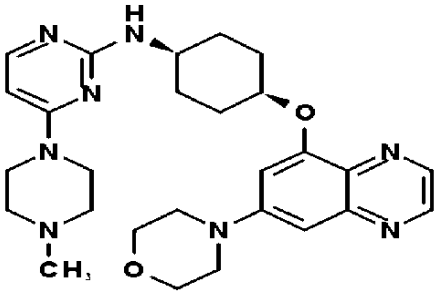
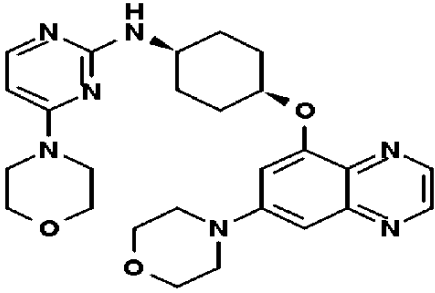
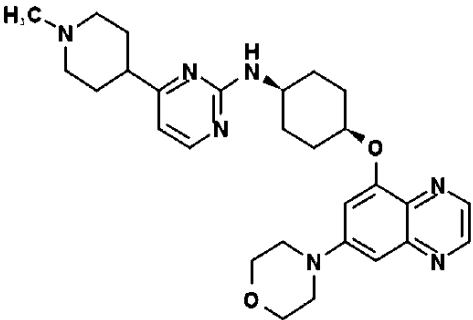
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
544		518.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.61 (s, 1H), 8.18 (s, 2H), 7.02 - 6.87 (m, 2H), 5.12 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.05 - 3.87 (m, 5H), 3.38 - 3.27 (m, 4H), 3.01 (d, J = 11.4 Hz, 3H), 2.74 (s, 3H), 2.36 (s, 3H), 2.20 (m, 2H), 2.06 (m, 2H), 2.00 - 1.58 (m, 11H).
545		461.24	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.73 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.39 (s, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.05 - 6.89 (m, 2H), 4.88 (s, 1H), 4.06 (s, 3H), 3.94 (dd, J = 6.0, 3.8 Hz, 4H), 3.36 (t, J = 4.9 Hz, 5H), 2.29 (s, 2H), 1.98 (d, J = 35.4 Hz, 6H).
546		461.24	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.55 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.32 (s, 1H), 7.66 (s, 1H), 6.92 - 6.81 (m, 2H), 4.79 (s, 1H), 3.87 - 3.80 (m, 4H), 3.75 (s, 3H), 3.31 - 3.22 (m, 4H), 2.18 (d, J = 12.7 Hz, 2H), 2.08 - 1.75 (m, 6H).

10

20

30

【表 2 - 9 6】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
547		505.4	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.90 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 5.89 (d, J = 6.1 Hz, 1H), 4.96 (s, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.08 - 3.98 (m, 1H), 3.96 - 3.87 (m, 4H), 3.70 - 3.53 (m, 4H), 3.43 - 3.27 (m, 4H), 2.53 - 2.42 (m, 4H), 2.35 (s, 3H), 2.25 - 2.13 (m, 2H), 2.00 - 1.85 (m, 6H).
548		492.39	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.93 (d, J = 5.9 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 5.87 (d, J = 6.1 Hz, 1H), 4.97 (s, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.02 (s, 1H), 3.97 - 3.88 (m, 4H), 3.83 - 3.70 (m, 4H), 3.63 - 3.52 (m, 4H), 3.39 - 3.27 (m, 4H), 2.25 - 2.12 (m, 2H), 2.01 - 1.85 (m, 6H).
549		504.27	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.18 (d, J = 5.1 Hz, 1H), 6.98 - 6.89 (m, 2H), 6.42 (d, J = 5.1 Hz, 1H), 5.18 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.79 (dt, J = 7.9, 3.7 Hz, 1H), 4.11 - 3.87 (m, 5H), 3.42 - 3.25 (m, 4H), 3.00 (dq, J = 9.9, 3.3 Hz, 2H), 2.63

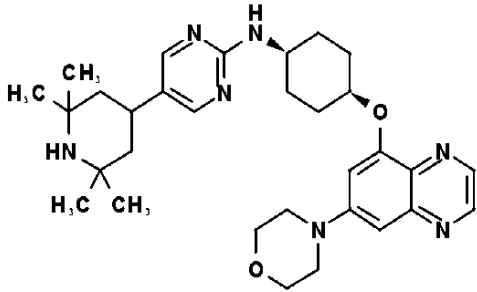
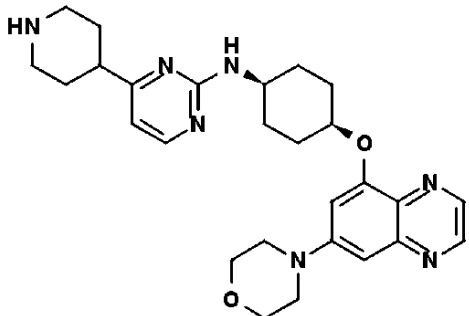
10

20

30

40

【表 2 - 9 7】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			- 2.35 (m, 5H), 2.27 - 2.04 (m, 4H), 1.97 - 1.82 (m, 9H).
550		546.31	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.16 (s, 2H), 7.05 - 6.83 (m, 2H), 5.14 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.79 (d, J = 5.3 Hz, 1H), 4.10 - 3.85 (m, 5H), 3.41 - 3.28 (m, 4H), 2.87 (tt, J = 12.8, 3.2 Hz, 1H), 2.20 (q, J = 6.2 Hz, 2H), 1.91 (p, J = 3.7, 2.8 Hz, 6H), 1.73 (dd, J = 13.1, 3.2 Hz, 2H), 1.29 (d, J = 24.9 Hz, 12H).
551		490.28	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.20 (d, J = 5.1 Hz, 1H), 7.01 - 6.89 (m, 2H), 6.42 (d, J = 5.1 Hz, 1H), 5.15 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.05 (s, 1H), 3.97 - 3.88 (m, 4H), 3.43 - 3.31 (m, 4H), 3.24 (d, J = 12.3 Hz, 2H), 2.84 - 2.69 (m, 2H), 2.59 (m, 1H), 2.20 (m, 2H), 1.92 (t, J = 8.2 Hz, 6H).

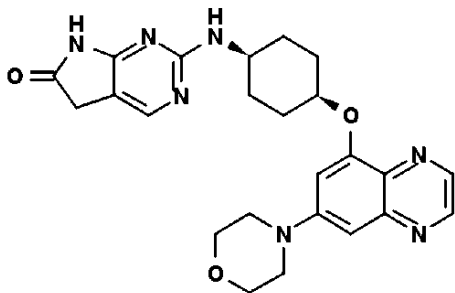
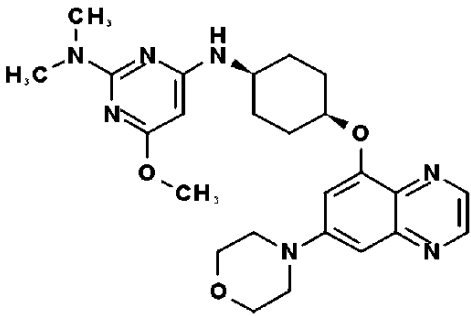
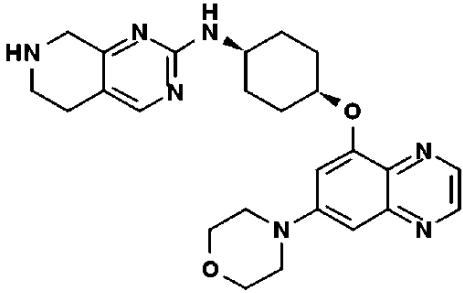
10

20

30

40

【表 2 - 9 8】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
552		462.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.61 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.85 (s, 1H), 6.94 - 6.73 (m, 2H), 5.33 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.69 (s, 1H), 4.00 - 3.78 (m, 5H), 3.38 (d, J = 1.0 Hz, 2H), 3.33 - 3.20 (m, 4H), 2.19 - 1.99 (m, 2H), 1.83 (h, J = 5.6 Hz, 6H).
553		480.19	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 17.8, 2.5 Hz, 2H), 5.07 (s, 1H), 4.78 (d, J = 6.2 Hz, 1H), 4.68 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.03 - 3.90 (m, 4H), 3.87 (s, 3H), 3.71 (s, 1H), 3.42 - 3.28 (m, 4H), 3.13 (s, 6H), 2.27 - 2.00 (m, 2H), 2.00 - 1.79 (m, 6H).
554		462.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.04 (s, 1H), 5.04 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.09 - 3.90 (m, 5H), 3.85 (s, 2H), 3.42 - 3.31 (m, 4H), 3.11 (t, J = 5.8 Hz, 2H), 2.63 (t, J = 5.8 Hz, 2H), 2.19 (d, J = 8.1 Hz, 2H), 1.91 (d, J = 5.5 Hz, 6H).

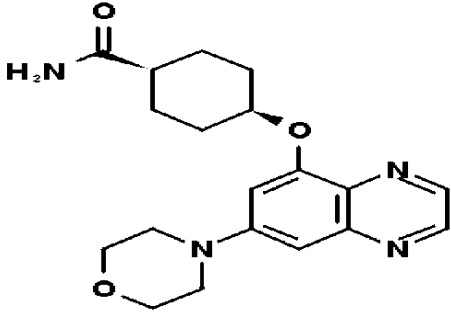
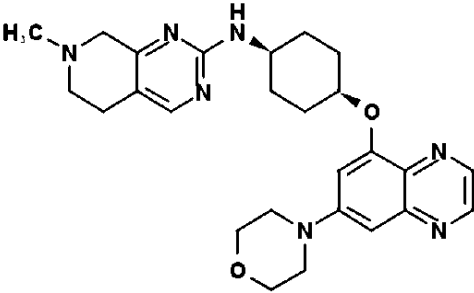
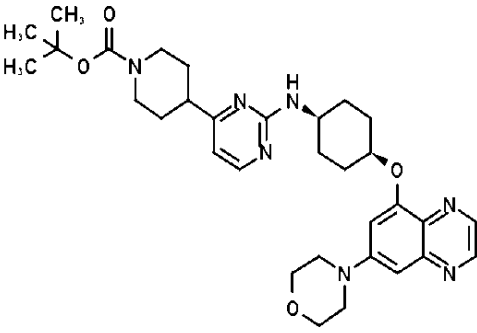
10

20

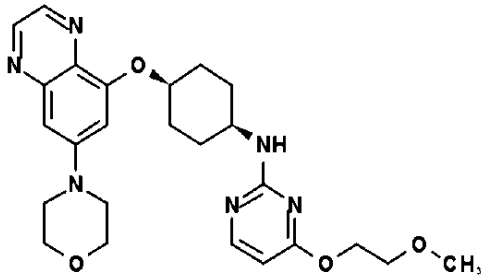
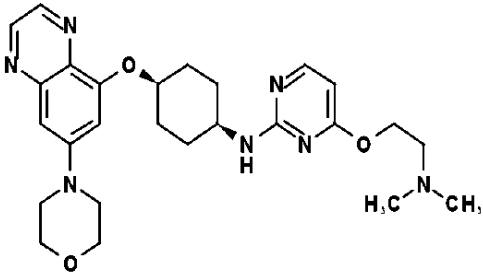
30

40

【表 2 - 9 9】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
555		357.15	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 5.47 (s, 1H), 5.30 (s, 1H), 4.50 (s, 1H), 4.00 - 3.84 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.45 - 2.33 (m, 2H), 2.33 - 2.18 (m, 1H), 2.15 - 2.00 (m, 2H), 1.74 (d, J = 5.4 Hz, 4H).	10
556		476.23	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.97 (s, 1H), 6.92 - 6.77 (m, 2H), 4.95 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.76 - 4.64 (m, 1H), 3.97 - 3.75 (m, 5H), 3.34 (s, 2H), 3.30 - 3.17 (m, 4H), 2.60 (dq, J = 9.7, 5.3, 4.8 Hz, 4H), 2.37 (s, 3H), 2.10 (td, J = 10.8, 10.3, 6.1 Hz, 2H), 1.90 - 1.62 (m, 6H).	20
557		590.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.20 (d, J = 5.1 Hz, 1H), 7.01 - 6.89 (m, 2H), 6.40 (d, J = 5.1 Hz, 1H), 5.20 (s, 1H), 4.81 (d, J = 6.1 Hz, 1H), 4.23 (s, 2H), 4.04 (s, 1H), 3.97 - 3.89 (m, 4H), 3.42 - 3.28 (m, 4H), 2.82 (t, J = 12.8 Hz, 2H), 2.67 - 2.44 (m, 1H), 2.27 - 2.11 (m, 2H), 1.98 - 1.87 (m,	30 40

【表 2 - 1 0 0】

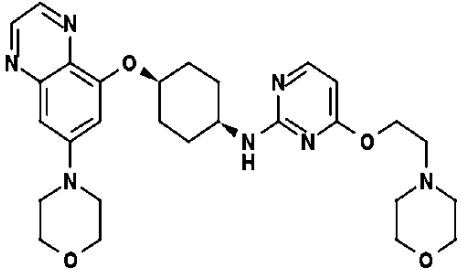
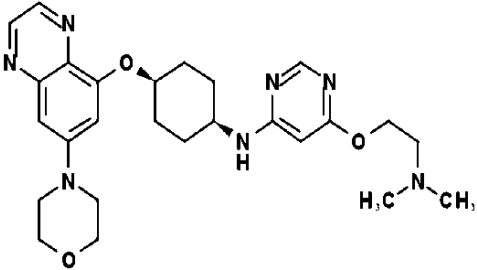
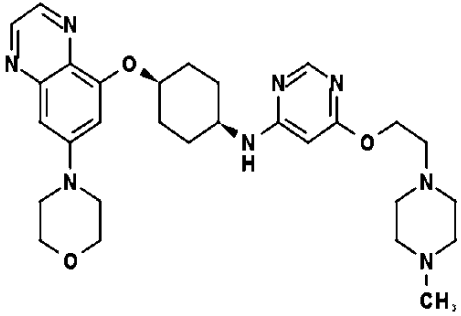
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			8H), 1.49 (s, 9H).
558		481.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.84 - 1.99 (m, 6 H), 2.11 - 2.25 (m, 2 H), 3.32 - 3.36 (m, 4 H), 3.43 (s, 3 H), 3.70 - 3.73 (m, 2 H), 3.90 - 3.93 (m, 4 H), 3.96 - 4.07 (m, 1 H), 4.41 - 4.44 (m, 2 H), 4.72 - 4.80 (m, 1 H), 5.10 (br. s, 1 H), 6.06 (d, J = 5.6
559		494.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.84 - 1.98 (m, 6 H), 2.13 - 2.23 (m, 2 H), 2.32 (s, 6 H), 2.68 (t, J = 5.8 Hz, 2 H), 3.30 - 3.37 (m, 4 H), 3.88 - 3.95 (m, 4 H), 3.98 - 4.08 (m, 1 H), 4.37 (t, J = 5.8 Hz, 2 H), 4.73 - 4.80 (m, 1 H), 5.05 (d, J = 7.5 Hz, 1 H)

10

20

30

【表 2 - 1 0 1】

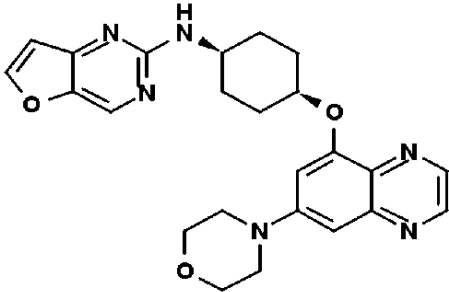
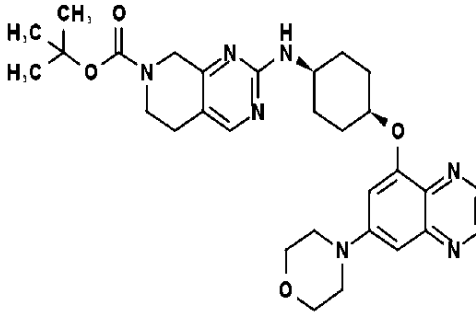
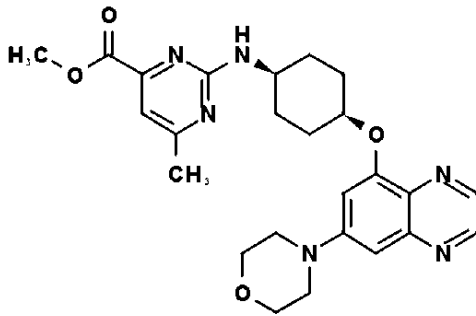
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
560		536.3	1H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.83 - 2.00 (m, 6 H), 2.10 - 2.25 (m, 2 H), 2.52 - 2.59 (m, 4 H), 2.76 (t, J = 5.8 Hz, 2 H), 3.31 - 3.38 (m, 4 H), 3.70 - 3.77 (m, 4 H), 3.89 - 3.95 (m, 4 H), 4.03 (br. s, 1 H), 4.41 (t, J = 5.8 Hz, 2 H), 4.72 - 4.80 (m, 1 H).
561		494.3	1H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.78 - 1.94 (m, 6 H), 2.14 - 2.25 (m, 2 H), 2.32 (s, 6 H), 2.67 (t, J = 5.5 Hz, 2 H), 3.28 - 3.38 (m, 4 H), 3.66 (br. s, 1 H), 3.84 - 3.98 (m, 4 H), 4.39 (t, J = 5.5 Hz, 2 H), 4.79 (br. s, 1 H), 4.90 (d, J = 7.2 Hz, 1 H), 5.73
562		549.3	1H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.81 - 1.94 (m, 6 H), 2.14 - 2.24 (m, 2 H), 2.28 (s, 3 H), 2.47 (br. s, 4 H), 2.59 (br. s, 4 H), 2.76 (t, J = 5.8 Hz, 2 H), 3.30 - 3.37 (m, 4 H), 3.69 (br. s, 1 H), 3.88 - 3.95 (m, 4 H), 4.42 (t, J = 5.8 Hz, 2 H), 4.75 - 4.83

10

20

30

【表 2 - 1 0 2】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
563		447.37	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.48 (d, J = 0.6 Hz, 1H), 7.75 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.92 - 6.88 (m, 1H), 6.67 (d, J = 1.4 Hz, 1H), 5.22 (t, J = 9.5 Hz, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.06 (s, 1H), 4.00 - 3.84 (m, 4H), 3.40 - 3.24 (m, 4H), 2.16 (t, J = 21.2 Hz, 2H), 1.98 - 1.85 (m, 6H).
564		562.25	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.07 (s, 1H), 6.99 - 6.84 (m, 2H), 5.10 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.78 (d, J = 5.7 Hz, 1H), 4.42 (s, 2H), 4.10 - 3.85 (m, 5H), 3.64 (t, J = 5.6 Hz, 2H), 3.40 - 3.29 (m, 4H), 2.65 (dt, J = 6.2, 2.8 Hz, 2H), 2.19 (q, J = 6.0 Hz, 2H), 1.98 - 1.85 (m, 6H), 1.49 (s, 9H).
565		479.1	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.55 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.47 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.93 (s, 1H), 6.86 - 6.72 (m, 2H), 5.25 (s, 1H), 4.66 (s, 1H), 4.05 - 3.90 (m, 1H), 3.86 - 3.71 (m, 7H), 3.30 - 3.09 (m, 4H), 2.27 (d, J = 2.2 Hz, 3H), 2.04 (d, J = 9.2 Hz, 2H), 1.75 (d, J = 4.8 Hz, 6H).

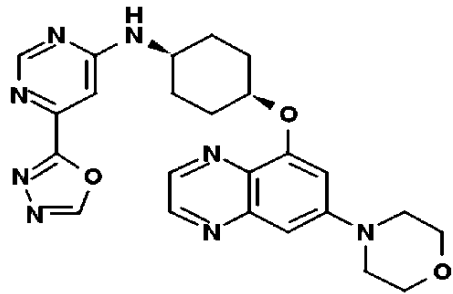
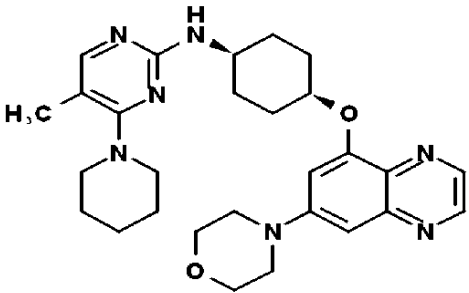
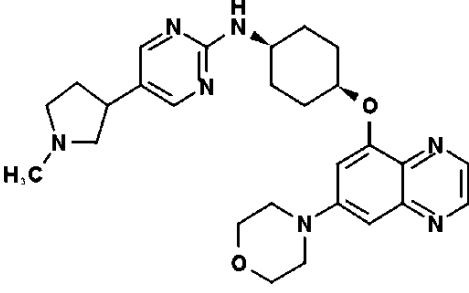
10

20

30

40

【表 2 - 1 0 3】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
566		475.15	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 2.0 Hz, 2H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.42 (s, 1H), 7.01 - 6.86 (m, 2H), 5.64 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.83 (s, 1H), 3.92 (dd, J = 6.0, 3.7 Hz, 4H), 3.34 (dd, J = 5.8, 3.9 Hz, 4H), 2.11 - 1.78 (m, 6H).	10
567		504.1	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.74 (s, 1H), 7.00 - 6.89 (m, 2H), 4.91 (s, 1H), 4.76 (d, J = 6.1 Hz, 1H), 4.04 - 3.93 (m, 5H), 3.43 - 3.28 (m, 4H), 2.26 - 2.14 (m, 2H), 2.08 (d, J = 0.8 Hz, 3H), 2.00 - 1.92 (m, 6H), 1.69 (d, J = 21.2 Hz, 10H).	20
568		490.23	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.22 (s, 2H), 7.04 - 6.88 (m, 2H), 5.14 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.80 (d, J = 5.5 Hz, 1H), 4.09 - 3.85 (m, 5H), 3.41 - 3.31 (m, 4H), 3.29 - 3.13 (m, 1H), 3.04 - 2.92 (m, 1H), 2.81 (q, J = 8.1 Hz, 1H), 2.68 (dt, J = 9.2, 4.6 Hz, 1H), 2.52 - 2.26 (m, 5H), 2.24 - 2.13 (m, 2H), 2.02 - 1.78 (m, 7H).	30 40

【表 2 - 1 0 4】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
569		476.06	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.10 (s, 2H), 6.93 - 6.76 (m, 2H), 5.07 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.68 (d, J = 15.8 Hz, 1H), 4.00 - 3.78 (m, 5H), 3.35 - 3.20 (m, 4H), 3.18 - 2.92 (m, 3H), 2.70 (dd, J = 10.7, 8.4 Hz, 1H), 2.24 - 2.02 (m, 3H), 1.94 - 1.62 (m, 7H).
570		576.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 8.19 (s, 2H), 7.03 - 6.86 (m, 2H), 4.10 - 3.86 (m, 5H), 3.46 - 3.28 (m, 4H), 3.24 - 3.13 (m, 1H), 2.35 - 2.16 (m, 1H), 2.05 - 1.84 (m, 8H), 1.81 - 1.66 (m, 1H), 1.55 - 1.41 (m, 11H).
571		476.31	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.88 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.76 (s, 1H), 4.98 (s, 2H), 4.78 (s, 1H), 4.00 - 3.86 (m, 4H), 3.83 (s, 1H), 3.39 - 3.27 (m, 4H), 2.21 (d, J = 9.6 Hz, 2H), 1.89 (dd, J = 13.3, 8.6 Hz, 6H), 1.50 (s, 6H).

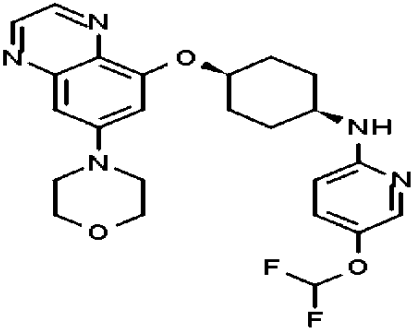
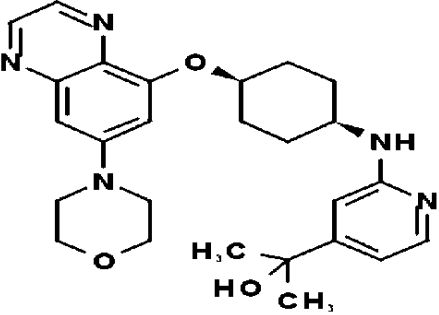
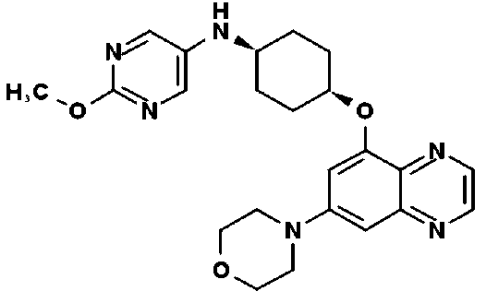
10

20

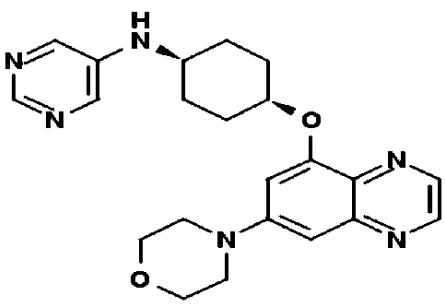
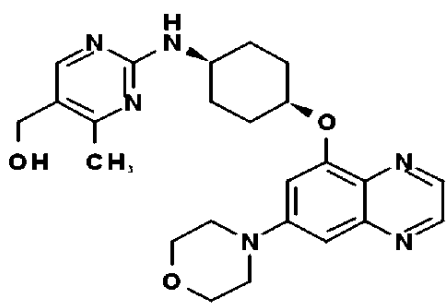
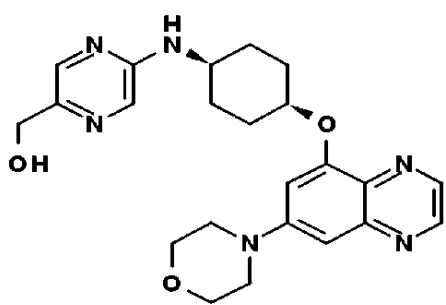
30

40

【表 2 - 1 0 5】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
572		472.2	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.82 - 1.99 (m, 6 H), 2.14 - 2.28 (m, 2 H), 3.32 - 3.35 (m, 4 H), 3.80 - 3.88 (m, 1 H), 3.90 - 3.93 (m, 4 H), 4.70 - 4.83 (m, 2 H), 6.37 (d, J = 8.8 Hz, 1 H), 6.38 (t, J = 73.8 Hz, 1 H), 6.90 (d, J = 2.3 Hz, 1 H), 6.95 (d, J =	10
573		464.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.52 (s, 6 H), 1.73 (br s, 1 H), 1.85 - 1.96 (m, 6 H), 2.11 - 2.25 (m, 2 H), 3.30 - 3.36 (m, 4 H), 3.88 - 4.00 (m, 5 H), 4.55 (d, J = 8.1 Hz, 1 H), 4.74 - 4.81 (m, 1 H), 6.52 (s, 1 H), 6.57 (dd, J = 5.4, 1.4 Hz, 1 H), 6.90 (d,	20
574		437.42	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.99 (s, 2H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.01 - 3.84 (m, 7H), 3.41 (s, 2H), 3.37 - 3.27 (m, 4H), 2.26 - 2.14 (m, 2H), 1.93 - 1.81 (m, 6H).	30

【表 2 - 1 0 6】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
575		407.35	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.57 (s, 1H), 8.13 (s, 2H), 6.98 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.86 - 4.73 (m, 1H), 3.95 - 3.88 (m, 4H), 3.56 - 3.49 (m, 1H), 3.39 - 3.31 (m, 4H), 2.30 - 2.18 (m, 2H), 1.97 - 1.84 (m, 6H).
576		450.13	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.13 (s, 1H), 7.01 - 6.87 (m, 2H), 4.81 (s, 1H), 4.57 (s, 2H), 4.06 (s, 1H), 3.99 - 3.87 (m, 4H), 3.35 (dd, J = 5.9, 3.8 Hz, 4H), 2.45 (s, 3H), 2.20 (d, J = 8.0 Hz, 2H), 1.93 (d, J = 5.1 Hz, 6H).
577		437.25	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.02 (d, J = 1.4 Hz, 1H), 7.87 (d, J = 1.5 Hz, 1H), 6.94 (dd, J = 16.2, 2.5 Hz, 2H), 4.89 - 4.71 (m, 2H), 4.65 (s, 2H), 4.06 - 3.85 (m, 4H), 3.40 - 3.27 (m, 4H), 2.23 (dt, J = 11.5, 5.5 Hz, 2H), 2.04 - 1.80 (m, 6H).

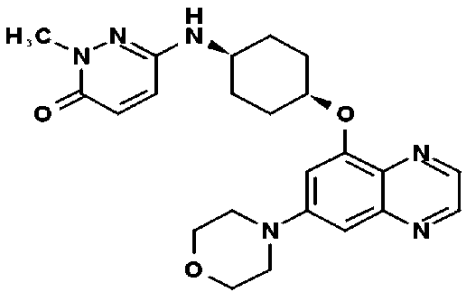
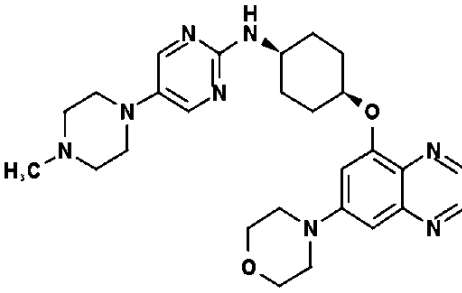
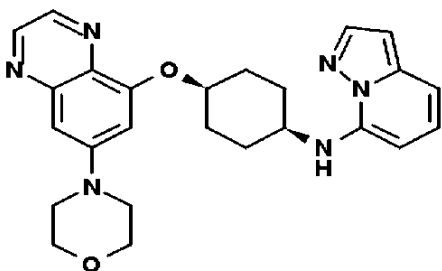
10

20

30

40

【表 2 - 1 0 7】

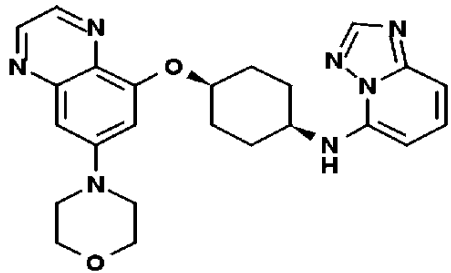
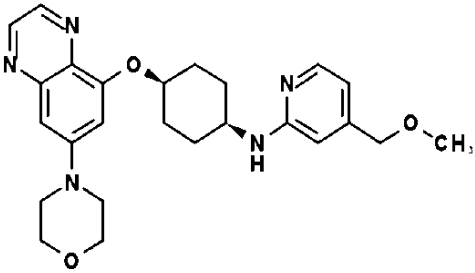
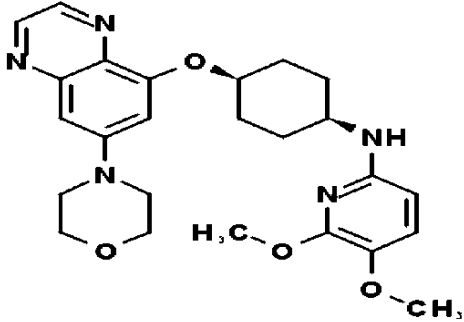
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
578		437.2	1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.01 - 6.88 (m, 2H), 6.87 - 6.66 (m, 2H), 3.94 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 3.65 (s, 3H), 3.42 - 3.30 (m, 4H), 2.19 (s, 2H), 1.91 (d, J = 4.9 Hz, 6H).
579		505.53	1H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (s, 1H), 8.61 (s, 1H), 8.07 (s, 2H), 6.94 (s, 1H), 6.90 (s, 1H), 4.96 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 4.02 - 3.81 (m, 5H), 3.47 - 3.19 (m, 5H), 3.19 - 2.83 (m, 4H), 2.76 - 2.52 (m, 3H), 2.37 (s, 3H), 2.26 - 2.11 (m, 2H), 2.03 - 1.82 (m, 6H).
580		445.3	1H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.84 - 2.17 (m, 6 H), 2.23 - 2.35 (m, 2 H), 3.31 - 3.38 (m, 4 H), 3.63 ñ 3.75 (m, 1 H), 3.87 - 3.96 (m, 4 H), 4.82 - 4.89 (m, 1 H), 5.88 (d, J = 7.2 Hz, 1 H), 6.11 (d, J = 7.8 Hz, 1 H), 6.44 (d, J = 2.2 Hz, 1 H), 6.90 ñ 6.95 (

10

20

30

【表 2 - 1 0 8】

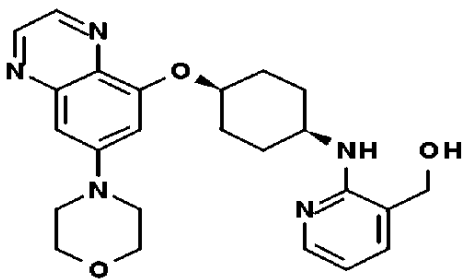
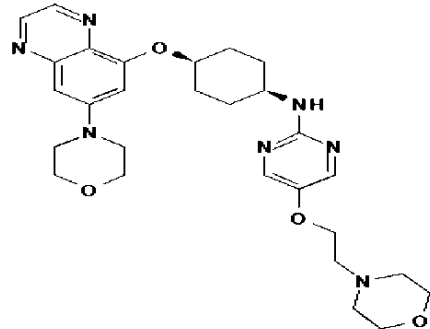
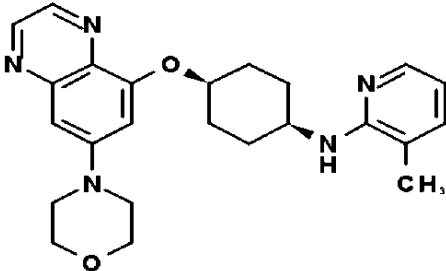
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
581		446.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.85 - 2.18 (m, 6 H), 2.24 - 2.36 (m, 2 H), 3.31 - 3.39 (m, 4 H), 3.64 - 3.77 (m, 1 H), 3.88 - 3.97 (m, 4 H), 4.82 - 4.89 (m, 1 H), 5.91 (d, J = 7.9 Hz, 1 H), 6.12 (d, J = 7.9 Hz, 1 H), 6.93 (d, J = 2.4 Hz, 1 H), 6.98 (d, J =
582		450.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.83 ñ 1.96 (m, 6 H), 2.14 - 2.26 (m, 2 H), 3.30 - 3.36 (m, 4 H), 3.41 (s, 3 H), 3.87 ñ 3.95 (m, 5 H), 4.36 (s, 2 H), 4.59 - 4.89 (m, 2 H), 6.38 (s, 1 H), 6.48 (d, J = 5.2 Hz, 1 H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1 H), 6.95 (d, J = 2.4
583		466.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.84 - 2.00 (m, 6 H), 2.09 - 2.24 (m, 2 H), 3.30 - 3.37 (m, 4 H), 3.64 - 3.74 (m, 1 H), 3.78 (s, 3 H), 3.89 - 3.95 (m, 7 H), 4.71 - 4.79 (m, 1 H), 5.88 (d, J = 8.3 Hz, 1 H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1 H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1 H)

10

20

30

【表 2 - 1 0 9】

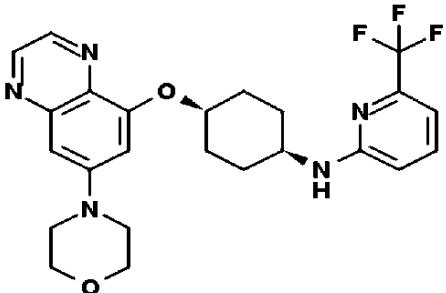
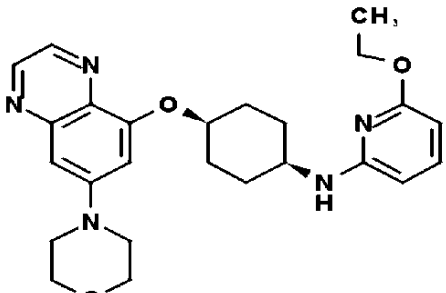
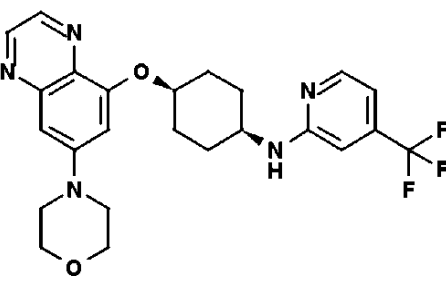
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
584		436.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.86 - 2.04 (m, 6 H), 2.12 - 2.26 (m, 2 H), 3.28 - 3.39 (m, 4 H), 3.88 - 3.96 (m, 4 H), 4.26 (br s, 1 H), 4.62 (s, 2 H), 4.69 - 4.78 (m, 1 H), 5.56 (br s, 1 H), 6.50 (t, J = 5.3 Hz, 1 H), 6.90 (d, J = 1.9 Hz, 1 H), 6.93 (d, J
585		536.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.81 - 1.96 (m, 6 H), 2.11 - 2.25 (m, 2 H), 2.56 (br s, 4 H), 2.76 (t, J = 5.3 Hz, 2 H), 3.30 - 3.36 (m, 4 H), 3.74 (t, J = 4.4 Hz, 4 H), 3.88 - 3.96 (m, 5 H), 4.06 (t, J = 5.3 Hz, 2 H), 4.73 - 4.81 (m, 1 H), 4.99 (d, J = 7.8
586		420.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.88 ñ 2.01 (m, 6 H), 2.10 (s, 3 H), 2.15 - 2.25 (m, 2 H), 3.30 - 3.37 (m, 4 H), 3.89 ñ 3.95 (m, 4 H), 4.25 (br s, 2 H), 4.71 - 4.78 (m, 1 H), 6.51 (dd, J = 6.8, 5.4 Hz, 1 H), 6.90 (d, J = 2.3 Hz, 1 H), 6.94 (d, J = 2.3 Hz, 1

10

20

30

【表 2 - 1 1 0】

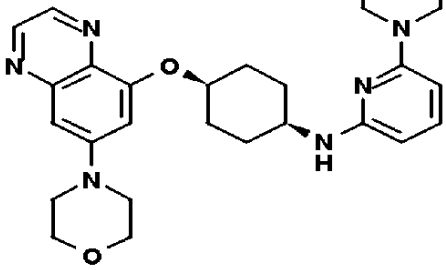
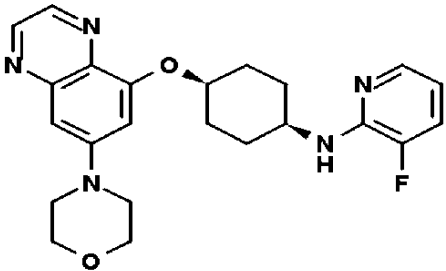
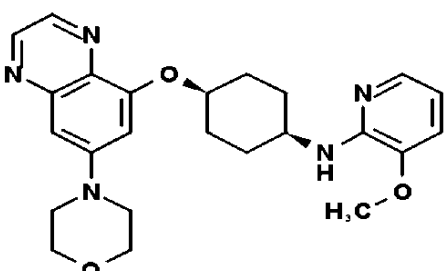
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
587		474.2	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.82 - 1.98 (m, 6 H), 2.12 - 2.26 (m, 2 H), 3.25 - 3.43 (m, 4 H), 3.82 - 3.98 (m, 5 H), 4.80 (br s, 2 H), 6.52 (d, J = 8.4 Hz, 1 H), 6.87 - 6.93 (m, 2 H), 6.95 - 7.00 (m, 1 H), 7.50 (t, J = 7.9 Hz, 1 H), 8.63 (d, J = 1.2 Hz, 1
588		450.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.38 (t, J = 7.0 Hz, 3 H), 1.83 - 2.00 (m, 6 H), 2.11 - 2.24 (m, 2 H), 3.30 - 3.37 (m, 4 H), 3.75 - 3.85 (m, 1 H), 3.89 - 3.94 (m, 4 H), 4.25 (q, J = 7.0 Hz, 2 H), 4.42 - 4.54 (m, 1 H), 4.72 - 4.79 (m, 1 H), 5.94 (d, J = 7.7 H
589		474.2	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.86 - 1.99 (m, 6 H), 2.16 - 2.27 (m, 2 H), 3.31 - 3.36 (m, 4 H), 3.88 - 3.95 (m, 5 H), 4.77 - 4.84 (m, 1 H), 4.90 (br s, 1 H), 6.55 (s, 1 H), 6.72 (d, J = 5.0 Hz, 1 H), 6.91 (d, J = 2.4 Hz, 1 H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1 H), 8.

10

20

30

【表 2 - 1 1 1】

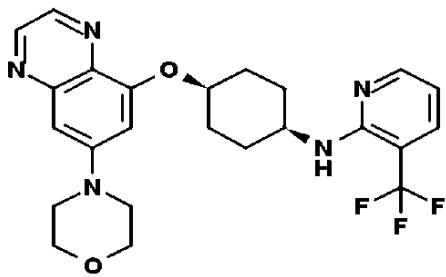
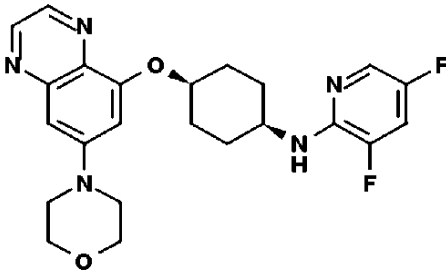
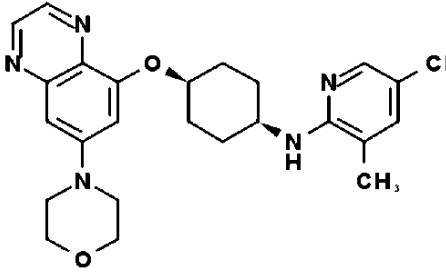
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
590		491.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.82 - 1.98 (m, 6 H), 2.10 - 2.22 (m, 2 H), 3.31 - 3.35 (m, 4 H), 3.41 - 3.45 (m, 4 H), 3.69 - 3.82 (m, 5 H), 3.90 - 3.93 (m, 4 H), 4.43 (d, J = 7.7 Hz, 1 H), 4.70 - 4.77 (m, 1 H), 5.81 (d, J = 8.0 Hz, 1 H), 5.90 (d, J = 8.0 H
591		424.2	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.88 - 2.00 (m, 6 H), 2.13 - 2.28 (m, 2 H), 3.29 - 3.38 (m, 4 H), 3.88 - 3.95 (m, 4 H), 4.21 (br s, 1 H), 4.62 - 4.84 (m, 2 H), 6.45 - 6.54 (m, 1 H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1 H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1 H), 7.07 - 7.18 (m, 1 H),
592		436.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.84 - 2.03 (m, 6 H), 2.11 - 2.24 (m, 2 H), 3.30 - 3.37 (m, 4 H), 3.84 (s, 3 H), 3.89 - 3.95 (m, 4 H), 4.17 - 4.29 (m, 1 H), 4.67 - 4.76 (m, 1 H), 5.08 (d, J = 7.4 Hz, 1 H), 6.50 (dd, J = 7.3, 5.2 Hz, 1 H), 6.82 (d, J = 7.4 Hz

10

20

30

【表 2 - 1 1 2】

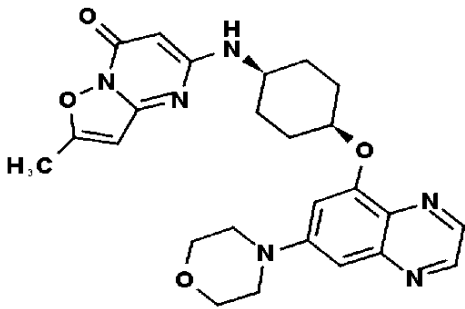
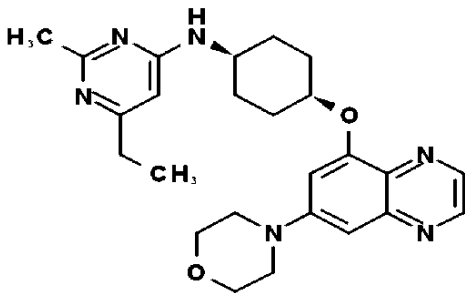
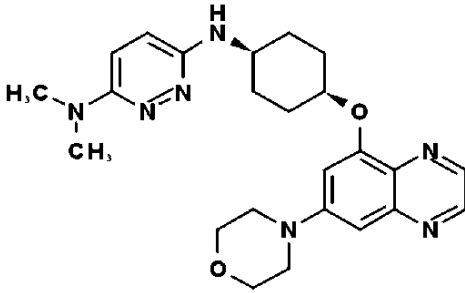
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
593		474.2	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.86 - 2.00 (m, 6 H), 2.13 - 2.26 (m, 2 H), 3.30 - 3.38 (m, 4 H), 3.88 - 3.97 (m, 4 H), 4.22 - 4.35 (m, 1 H), 4.73 - 4.80 (m, 1 H), 4.89 - 4.99 (m, 1 H), 6.60 (dd, J = 7.1, 5.1 Hz, 1 H), 6.91 (d, J = 2.3 Hz, 1 H), 6.96 (d, J =
594		442.2	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.85 - 2.00 (m, 6 H), 2.11 - 2.28 (m, 2 H), 3.29 - 3.39 (m, 4 H), 3.87 - 3.97 (m, 4 H), 4.06 - 4.18 (m, 1 H), 4.56 (d, J = 7.6 Hz, 1 H), 4.73 - 4.81 (m, 1 H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1 H), 6.95 (d, J = 2.4 Hz, 1 H), 7.05 (ddd, J =
595		434.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.88 - 2.02 (m, 6 H), 2.08 (s, 3 H), 2.15 (s, 3 H), 2.14 - 2.24 (m, 2 H), 3.31 - 3.36 (m, 4 H), 3.89 - 3.95 (m, 4 H), 4.03 - 4.16 (m, 1 H), 4.23 (br s, 1 H), 4.69 - 4.77 (m, 1 H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1 H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz

10

20

30

【表 2 - 1 1 3】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
596		477.68	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.99 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.92 (t, J = 2.8 Hz, 1H), 6.08 (d, J = 1.1 Hz, 1H), 5.21 (s, 1H), 4.81 (s, 2H), 3.98 - 3.87 (m, 4H), 3.43 - 3.30 (m, 4H), 2.51 (d, J = 1.0 Hz, 3H), 2.19 (s, 2H), 2.01 - 1.77 (m, 6H).
597		449.23	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.07 - 6.87 (m, 2H), 6.02 (s, 1H), 4.83 (d, J = 5.5 Hz, 1H), 4.03 - 3.81 (m, 5H), 3.44 - 3.25 (m, 4H), 2.72 - 2.57 (m, 1H), 2.51 (s, 3H), 2.29 - 2.11 (m, 2H), 2.05 - 1.72 (m, 6H), 1.27 (t, J = 7.6 Hz, 3H).
598		450.23	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.93 - 6.72 (m, 3H), 6.55 (s, 1H), 4.71 (s, 1H), 4.01 (s, 1H), 3.92 - 3.76 (m, 4H), 3.34 - 3.18 (m, 4H), 2.98 (s, 6H), 2.07 (d, J = 24.1 Hz, 2H), 1.87 (d, J = 9.2 Hz, 6H).

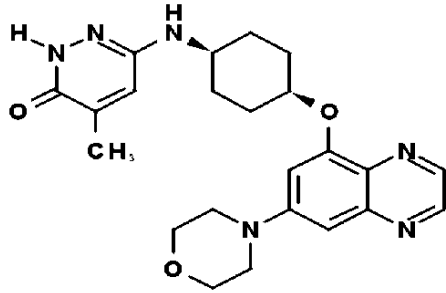
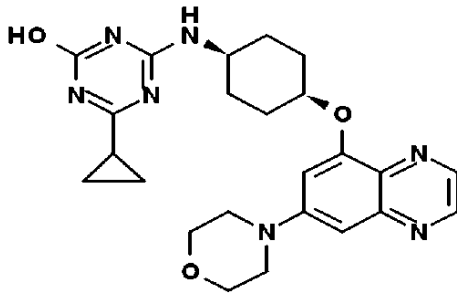
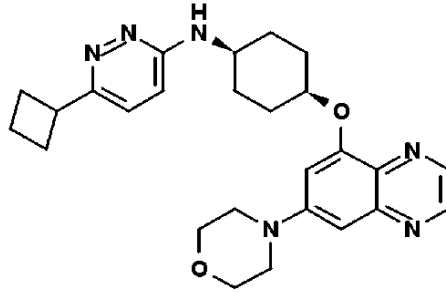
10

20

30

40

【表 2 - 1 1 4】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
599		437.21	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (t, J = 2.4 Hz, 1H), 6.85 (dd, J = 18.9, 2.4 Hz, 2H), 6.63 - 6.50 (m, 1H), 4.68 (s, 1H), 3.92 - 3.76 (m, 4H), 3.66 (s, 1H), 3.32 - 3.17 (m, 4H), 2.16 - 1.99 (m, 5H), 1.92 - 1.72 (m, 6H).
600		464.26	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 7.00 - 6.85 (m, 2H), 5.44 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 4.78 (s, 1H), 3.93 (t, J = 4.8 Hz, 4H), 3.35 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 3.06 - 2.91 (m, 1H), 2.15 (d, J = 26.6 Hz, 2H), 1.89 (s, 6H), 1.30 - 0.94 (m, 4H).
601		461.32	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.06 (d, J = 9.1 Hz, 1H), 6.98 - 6.86 (m, 2H), 6.58 (d, J = 9.1 Hz, 1H), 4.81 (dq, J = 5.5, 2.7 Hz, 1H), 4.52 (s, 1H), 4.17 (d, J = 5.0 Hz, 1H), 4.01 - 3.87 (m, 4H), 3.67 (dq, J = 8.9, 8.1 Hz, 1H), 3.43 - 3.30 (m, 4H), 2.47 - 2.29 (m, 4H), 2.22 (dt, J = 11.9, 5.5 Hz, 2H), 2.05 - 1.82 (m, 6H).

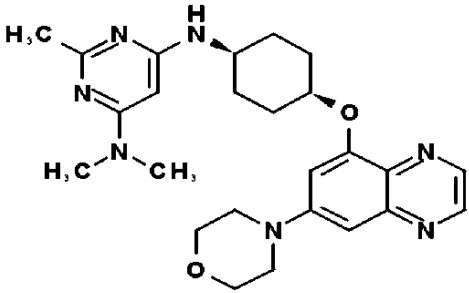
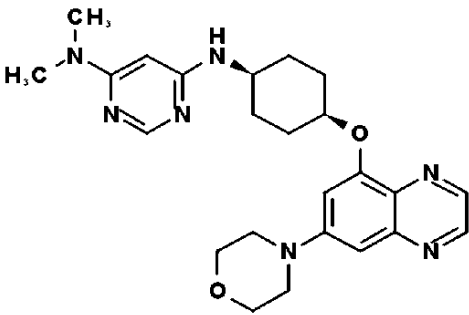
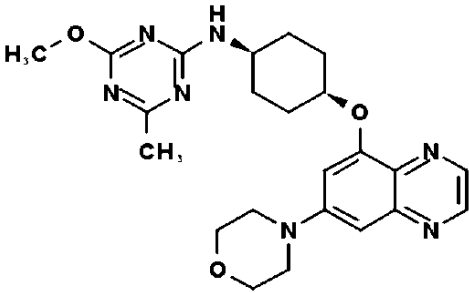
10

20

30

40

【表 2 - 1 1 5】

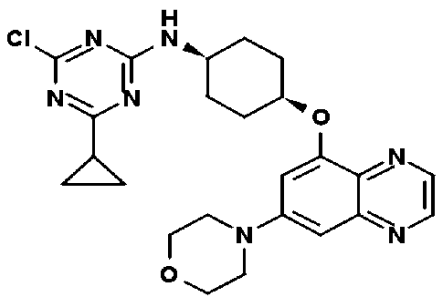
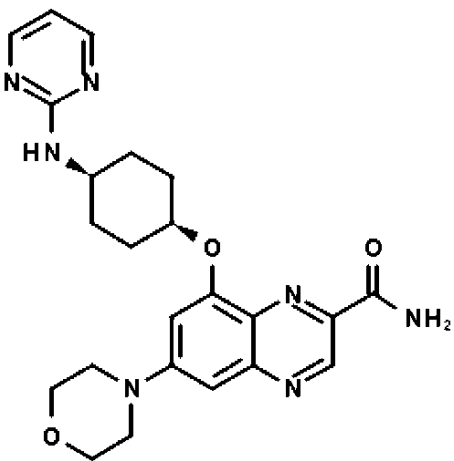
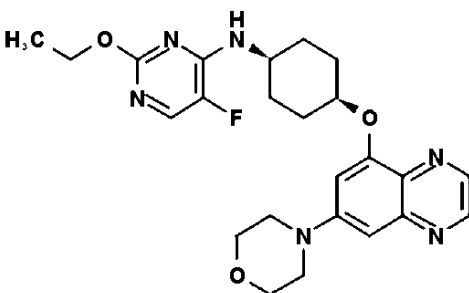
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
602		464.1	<p>1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.04 - 6.92 (m, 2H), 4.82 (d, J = 3.0 Hz, 1H), 3.93 (dd, J = 5.9, 3.8 Hz, 4H), 3.65 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 3.44 - 3.29 (m, 4H), 3.08 (s, 6H), 2.39 (s, 3H), 2.21 (d, J = 14.4 Hz, 2H), 1.92 (dt, J = 17.0, 10.7 Hz, 6H).</p>
603		450.1	<p>1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.18 (s, 1H), 7.02 - 6.86 (m, 2H), 4.81 (s, 2H), 4.00 - 3.76 (m, 5H), 3.42 - 3.26 (m, 4H), 3.07 (s, 6H), 2.20 (q, J = 6.3, 5.8 Hz, 2H), 2.01 - 1.79 (m, 6H).</p>
604		452.1	<p>1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.53 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.81 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 4.71 (s, 1H), 3.94 - 3.72 (m, 7H), 3.25 (dd, J = 5.8, 3.8 Hz, 4H), 2.29 (d, J = 10.4 Hz, 3H), 2.21 - 2.02 (m, 2H), 1.93 - 1.71 (m, 6H).</p>

10

20

30

【表 2 - 1 1 6】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
605		482.3	
606		450.17	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 9.41 (s, 1H), 8.20 (dd, J = 4.8, 2.4 Hz, 2H), 6.98 - 6.77 (m, 3H), 6.44 (dt, J = 7.5, 4.8 Hz, 2H), 4.71 (s, 2H), 3.83 (dd, J = 5.7, 4.0 Hz, 6H), 3.27 (dt, J = 30.0, 4.9 Hz, 5H), 2.13 (s, 2H), 2.00 - 1.68 (m, 6H).
607		469.08	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.79 (d, J = 2.9 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 17.8, 2.5 Hz, 2H), 5.19 - 5.07 (m, 1H), 4.80 (dt, J = 6.7, 3.4 Hz, 1H), 4.32 (q, J = 7.1 Hz, 3H), 3.98 - 3.87 (m, 4H), 3.41 - 3.29 (m, 4H), 2.30 - 2.13 (m, 2H), 2.03 - 1.84 (m, 6H), 1.41 (t, J = 7.1 Hz, 3H).

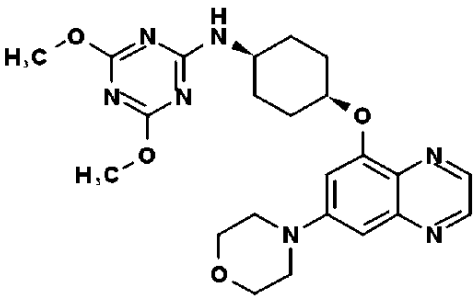
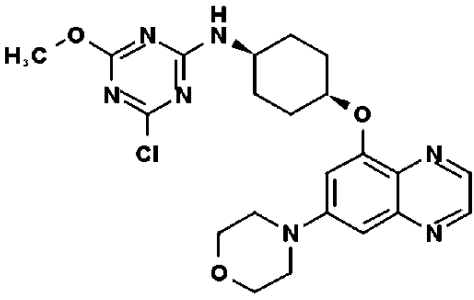
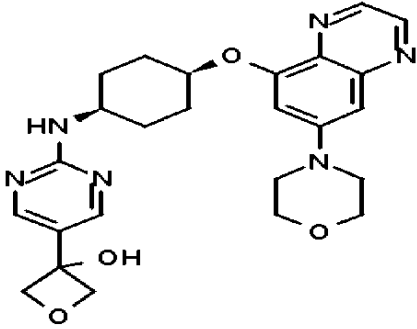
10

20

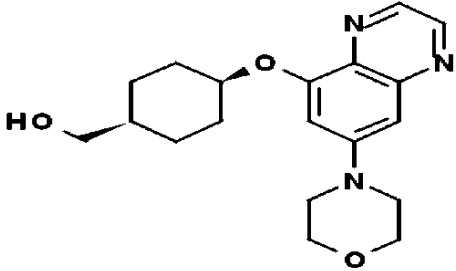
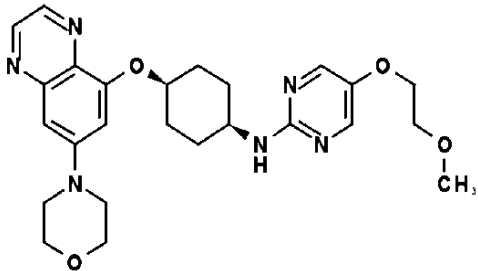
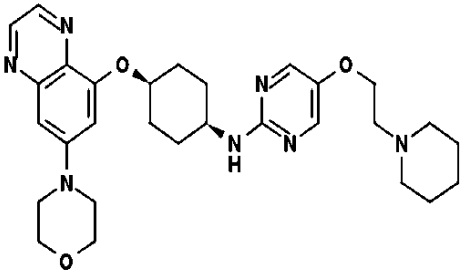
30

40

【表 2 - 1 1 7】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
608		468.63	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 2.0 Hz, 1H), 6.94 (dd, J = 18.9, 2.5 Hz, 2H), 5.42 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.22 - 4.06 (m, 1H), 4.03 - 3.89 (m, 10H), 3.42 - 3.22 (m, 4H), 2.19 (m, 2H), 2.01 - 1.79 (m, 6H).	10
609		471.87	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.72 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.03 - 6.84 (m, 2H), 5.66 (d, J = 9.1 Hz, 1H), 4.82 (s, 1H), 4.09 - 3.84 (m, 7H), 3.35 (dd, J = 5.5, 3.6 Hz, 4H), 2.20 (s, 2H), 1.91 (d, J = 6.4 Hz, 6H).	20
610		479.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.51 (s, 2H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.91 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 5.39 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.88 (d, J = 1.8 Hz, 4H), 4.80 (d, J = 6.2 Hz, 1H), 4.13 - 3.98 (m, 1H), 3.96 - 3.89 (m, 4H), 3.38 - 3.30 (m, 4H), 3.06 (s, 1H), 2.28 - 2.11 (m, 2H), 1.98 - 1.84 (m, 6H).	30

【表 2 - 1 1 8】

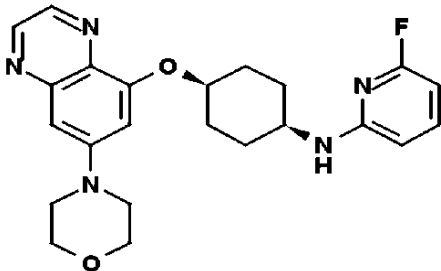
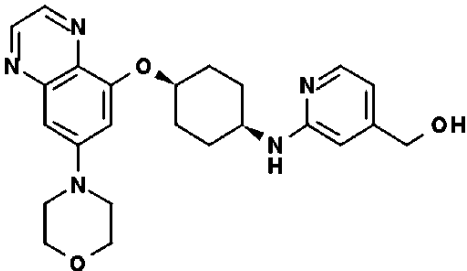
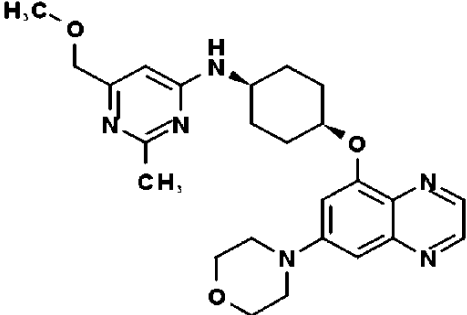
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
611		344.19	1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.67 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.91 (dd, J = 16.1, 2.5 Hz, 2H), 4.81 (q, J = 3.6, 2.4 Hz, 1H), 4.03 - 3.75 (m, 4H), 3.59 (d, J = 2.9 Hz, 2H), 3.45 - 3.28 (m, 4H), 2.20 (dt, J = 9.5, 4.6 Hz, 2H), 1.74 - 1.23 (m, 7H) 1.41 (s, 1H).
612		481.3	1H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.83 - 1.96 (m, 6 H), 2.14 - 2.24 (m, 2 H), 3.31 - 3.35 (m, 4 H), 3.44 (s, 3 H), 3.69 - 3.72 (m, 2 H), 3.89 - 3.95 (m, 5 H), 4.06 - 4.09 (m, 2 H), 4.74 - 4.83 (m, 1 H), 5.04 - 5.15 (m, 1 H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1 H), 6.94 (d,
613		534.3	1H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.39 - 1.75 (m, 6 H), 1.82 - 1.95 (m, 6 H), 2.11 - 2.24 (m, 2 H), 2.37 - 2.63 (m, 4 H), 2.67 - 2.90 (m, 2 H), 3.33 (t, J = 4.7 Hz, 4 H), 3.87 - 3.97 (m, 5 H), 4.01 - 4.20 (m, 2 H), 4.74 - 4.82 (m, 1 H), 4.98 (d, J = 7.9 Hz, 1

10

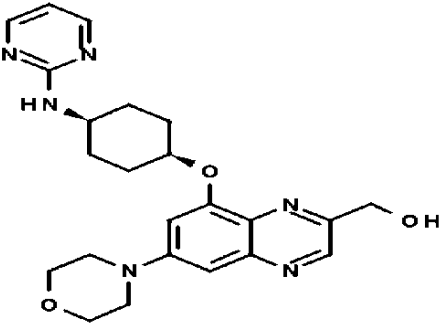
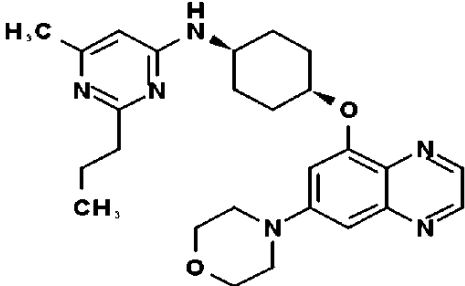
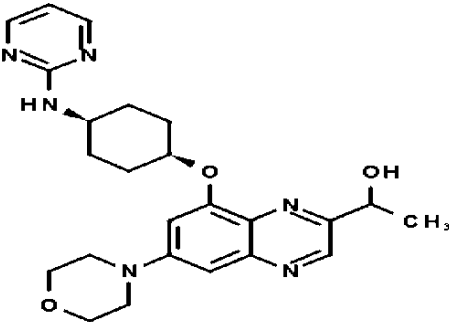
20

30

【表 2 - 1 1 9】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
614		424.2	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.83 - 1.95 (m, 6 H), 2.12 - 2.26 (m, 2 H), 3.30 - 3.40 (m, 4 H), 3.85 - 3.96 (m, 5 H), 4.55 - 4.68 (m, 1 H), 4.74 - 4.82 (m, 1 H), 6.10 (dd, J = 7.7, 1.8 Hz, 1 H), 6.18 (dd, J = 8.0, 1.8 Hz, 1 H), 6.90 (d, J = 1.8 Hz, 1 H), 6	10
615		436.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.82 - 2.10 (m, 7 H), 2.14 - 2.29 (m, 2 H), 3.26 - 3.40 (m, 4 H), 3.82 - 4.05 (m, 5 H), 4.64 (s, 2 H), 4.75 - 4.84 (m, 1 H), 4.85 - 5.13 (m, 1 H), 6.46 (s, 1 H), 6.51 (d, J = 5.3 Hz, 1 H), 6.90 (d, J = 1.7 Hz, 1 H), 6.94 (d,	20
616		465.1	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.95 (dd, J = 16.6, 2.5 Hz, 2H), 6.30 (s, 1H), 5.02 (s, 1H), 4.82 (s, 1H), 4.38 (d, J = 0.9 Hz, 2H), 3.99 - 3.83 (m, 5H), 3.39 - 3.24 (m, 4H), 2.49 (s, 3H), 2.33 - 2.11 (m, 2H), 1.91 (q, J = 9.0, 6.9 Hz, 6H).	30

【表 2 - 1 2 0】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
617		437.1	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.63 (s, 1H), 8.20 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 6.90 (dd, J = 16.2, 2.5 Hz, 2H), 6.44 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 5.15 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.90 (d, J = 3.9 Hz, 2H), 4.79 - 4.64 (m, 1H), 3.99 - 3.71 (m, 6H), 3.32 - 3.19 (m, 4H), 2.21 - 2.04 (m, 2H), 1.95 - 1.70 (m, 6H).
618		463.13	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.55 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.86 (dd, J = 16.5, 2.5 Hz, 2H), 5.94 (s, 1H), 4.73 (s, 1H), 3.85 (dd, J = 5.9, 3.7 Hz, 4H), 3.35 - 3.20 (m, 4H), 2.67 - 2.51 (m, 2H), 2.26 (s, 3H), 2.09 (d, J = 36.8 Hz, 3H), 1.94 - 1.59 (m, 6H), 0.91 (t, J = 7.4 Hz, 3H).
619			¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.77 (s, 1H), 8.29 (d, J = 4.7 Hz, 2H), 7.02 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.53 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 5.16 (dd, J = 16.9, 7.5 Hz, 2H), 4.81 (s, 1H), 3.93 (t, J = 4.8 Hz, 5H), 3.34 (t, J = 4.9 Hz, 4H), 2.27 (d, J = 21.1 Hz, 2H), 2.06 - 1.76 (m, 6H), 1.66 (d, J = 6.6 Hz, 3H).

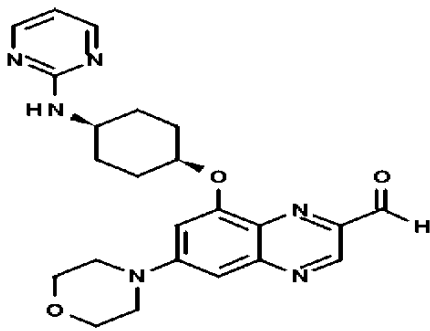
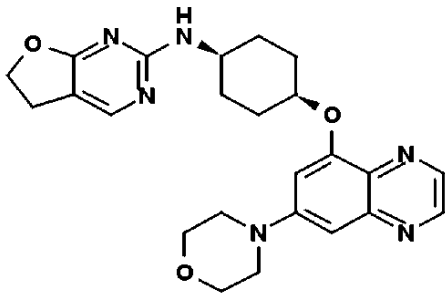
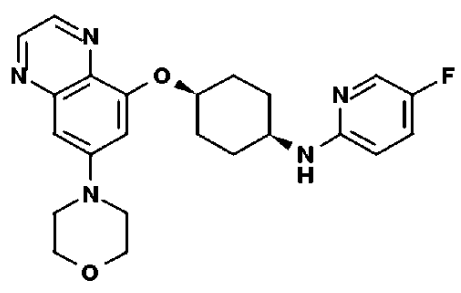
10

20

30

40

【表 2 - 1 2 1】

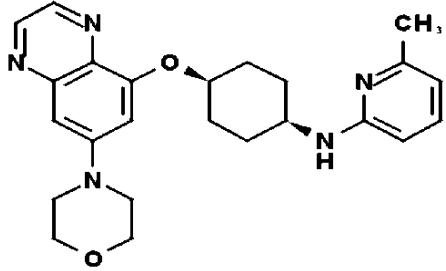
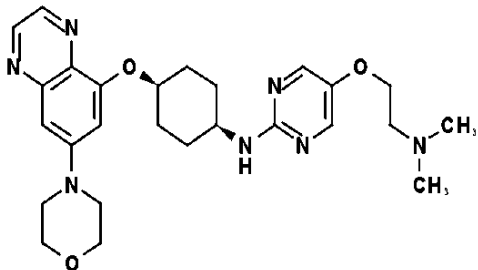
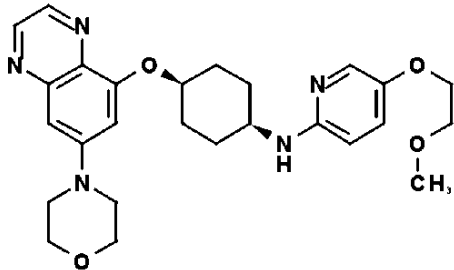
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
620		435.1	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 10.21 (s, 1H), 9.26 (s, 1H), 8.30 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 7.09 - 6.88 (m, 2H), 6.54 (t, J = 4.8 Hz, 1H), 4.89 (dq, J = 4.9, 2.5 Hz, 1H), 4.04 (q, J = 6.5 Hz, 1H), 3.99 - 3.87 (m, 5H), 3.55 - 3.39 (m, 5H), 2.35 - 2.17 (m, 3H), 2.09 - 1.82 (m, 6H).
621		449.55	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 7.95 (s, 1H), 6.94 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 6.90 (s, 1H), 5.12 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 4.77 (s, 1H), 4.60 (t, J = 8.5 Hz, 2H), 4.00 (s, 1H), 3.94 - 3.84 (m, 4H), 3.38 - 3.27 (m, 4H), 3.11 (t, J = 8.3 Hz, 2H), 2.25 - 2.10 (m, 2H), 1.97 - 1.82 (m, 6H).
622		424.2	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.81 - 1.98 (m, 6 H), 2.13 - 2.25 (m, 2 H), 3.29 - 3.38 (m, 4 H), 3.75 - 3.85 (m, 1 H), 3.88 - 3.96 (m, 4 H), 4.56 - 4.71 (m, 1 H), 4.75 - 4.83 (m, 1 H), 6.36 (dd, J = 9.1, 3.3 Hz, 1 H), 6.90 (d, J = 1.9 Hz, 1 H), 6.95 (d, J =

10

20

30

【表 2 - 1 2 2】

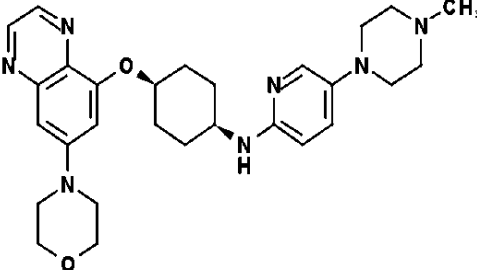
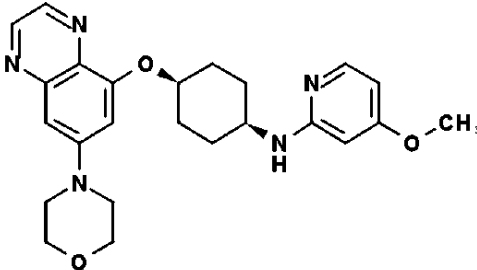
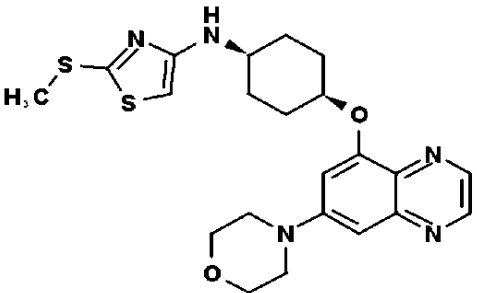
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
623		420.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.80 - 1.98 (m, 6 H), 2.13 - 2.23 (m, 2 H), 2.38 (s, 3 H), 3.25 - 3.37 (m, 4 H), 3.62 - 3.77 (m, 1 H), 3.88 - 3.97 (m, 4 H), 4.76 - 4.83 (m, 1 H), 6.23 (d, J = 7.9 Hz, 1 H), 6.43 (d, J = 7.3 Hz, 1 H), 6.91 (d, J = 2.5 Hz, 1 H)
624		494.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.78 - 2.01 (m, 6 H), 2.11 - 2.24 (m, 2 H), 2.33 (s, 6 H), 2.38 - 2.45 (m, 1 H), 2.69 (t, J = 5.2 Hz, 2 H), 3.26 - 3.42 (m, 4 H), 3.84 - 3.98 (m, 4 H), 4.01 (t, J = 5.2 Hz, 2 H), 4.72 - 4.83 (m, 1 H), 4.97 (d, J = 7.5 Hz, 1 H)
625		480.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.81 - 1.95 (m, 6 H), 2.11 - 2.26 (m, 2 H), 3.31 - 3.35 (m, 4 H), 3.44 (s, 3 H), 3.69 - 3.73 (m, 2 H), 3.76 - 3.84 (m, 1 H), 3.89 - 3.93 (m, 4 H), 4.04 - 4.08 (m, 2 H), 4.44 (br s, 1 H), 4.74 - 4.81 (m, 1 H), 6.37 (d, J = 8.9

10

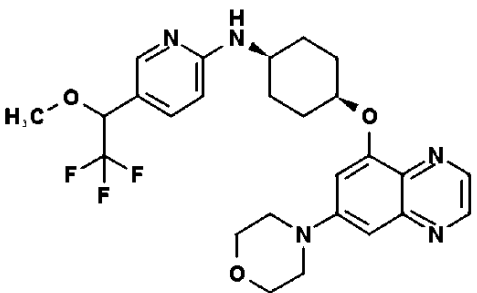
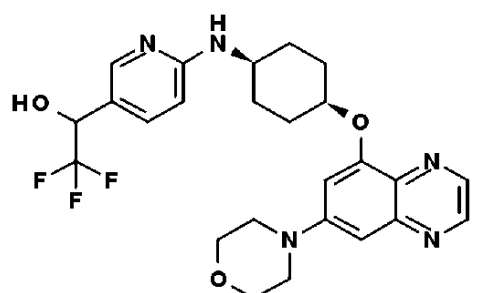
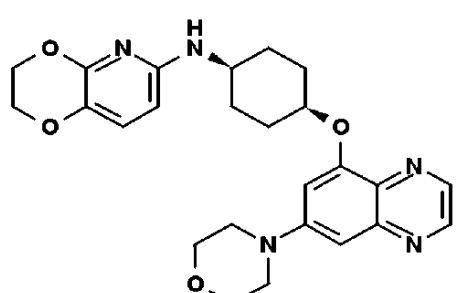
20

30

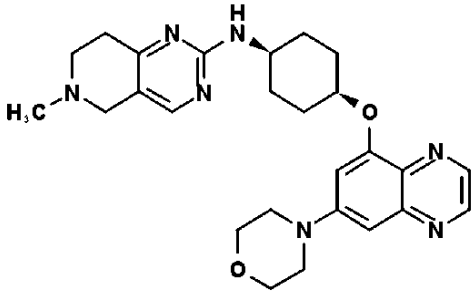
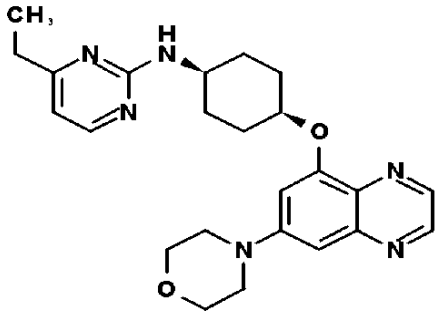
【表 2 - 1 2 3】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
626		504.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.81 - 1.98 (m, 6 H), 2.12 - 2.25 (m, 2 H), 2.37 - 2.48 (m, 3 H), 2.58 - 2.77 (m, 4 H), 3.04 - 3.16 (m, 4 H), 3.28 - 3.37 (m, 4 H), 3.77 - 3.85 (m, 1 H), 3.87 - 3.97 (m, 4 H), 4.32 - 4.51 (m, 1 H), 4.73 - 4.83 (m, 1 H), 6.38 (10
627		436.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.81 - 2.03 (m, 7 H), 2.12 - 2.28 (m, 2 H), 3.28 - 3.39 (m, 4 H), 3.81 (s, 3 H), 3.87 - 3.98 (m, 5 H), 4.76 - 4.84 (m, 1 H), 5.87 (d, J = 1.5 Hz, 1 H), 6.21 (dd, J = 5.9, 1.5 Hz, 1 H), 6.91 (d, J = 1.7 Hz, 1 H), 6.95 (d, J = 1	20
628		458.05	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (dd, J = 14.6, 2.5 Hz, 2H), 5.57 (s, 1H), 4.86 - 4.72 (m, 1H), 4.02 - 3.86 (m, 4H), 3.50 - 3.26 (m, 5H), 2.65 (s, 3H), 2.32 - 2.06 (m, 2H), 2.06 - 1.73 (m, 6H).	30

【表 2 - 1 2 4】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
629		518.4	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.62 (s, 1H), 8.54 (s, 1H), 8.15 - 7.93 (m, 1H), 7.40 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 6.88 (s, 1H), 6.84 (s, 1H), 6.34 (d, J = 8.6 Hz, 1H), 4.83 - 4.56 (m, 2H), 4.40 - 4.22 (m, 1H), 4.00 - 3.62 (m, 5H), 3.47 - 3.04 (m, 7H), 2.24 - 2.02 (m, 2H), 1.96 - 1.70 (m, 6H).
630		504.22	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.06 (s, 1H), 7.55 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 6.41 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 4.88 (dd, J = 13.4, 6.7 Hz, 1H), 4.85 - 4.71 (m, 2H), 3.98 - 3.85 (m, 5H), 3.39 - 3.28 (m, 4H), 2.25 - 2.12 (m, 2H), 1.94 - 1.82 (m, 6H).
631		464.53	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 7.01 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.89 (s, 1H), 5.96 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 4.75 (s, 1H), 4.43 - 4.35 (m, 2H), 4.22 (s, 1H), 4.19 - 4.10 (m, 2H), 3.98 - 3.86 (m, 4H), 3.82 (s, 1H), 3.36 - 3.28 (m, 4H), 2.23 - 2.08 (m, 2H), 1.94 - 1.79 (m, 6H).

【表 2 - 1 2 5】

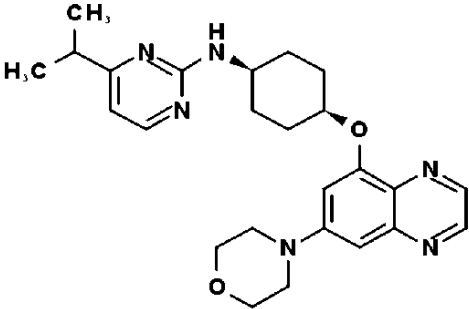
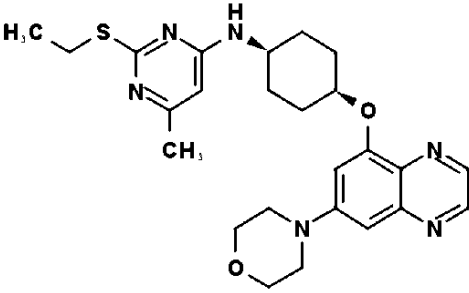
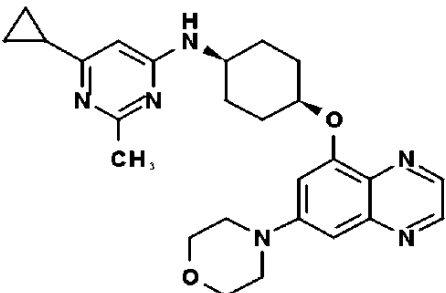
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
632		476.44	<p>¹H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.02 - 6.85 (m, 2H), 5.04 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 4.79 (s, 1H), 4.02 (s, 1H), 3.96 - 3.87 (m, 4H), 3.40 - 3.25 (m, 4H), 2.82 (t, J = 5.9 Hz, 2H), 2.73 (t, J = 5.8 Hz, 2H), 2.48 (s, 3H), 2.19 (d, J = 8.5 Hz, 2H), 1.91 (d, J = 5.3 Hz, 5H).</p>
633		435.2	<p>¹H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.18 (d, J = 5.1 Hz, 1H), 7.01 - 6.88 (m, 2H), 6.42 (d, J = 5.1 Hz, 1H), 5.15 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.79 (d, J = 5.7 Hz, 1H), 4.17 - 4.00 (m, 1H), 3.98 - 3.83 (m, 4H), 3.67 (td, J = 6.7, 4.0 Hz, 1H), 3.42 - 3.31 (m, 4H), 2.59 (q, J = 7.6 Hz, 2H), 2.20 (q, J = 6.1 Hz, 2H), 2.03 - 1.86 (m, 6H), 1.26 (t, J = 7.6 Hz, 3H).</p>

10

20

30

【表 2 - 1 2 6】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
634		449.2	<p>1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.19 (d, J = 5.1 Hz, 1H), 7.01 - 6.88 (m, 2H), 6.42 (d, J = 5.2 Hz, 1H), 5.14 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.80 (dt, J = 7.8, 3.8 Hz, 1H), 4.06 (d, J = 4.1 Hz, 0H), 3.99 - 3.85 (m, 4H), 3.46 - 3.24 (m, 4H), 2.78 (hept, J = 7.0 Hz, 1H), 2.34 - 2.11 (m, 2H), 2.04 - 1.81 (m, 7H), 1.25 (d, J = 7.0 Hz, 6H).</p>
635		481.05	<p>1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.85 (dd, J = 17.6, 2.5 Hz, 2H), 5.86 - 5.70 (m, 1H), 4.89 - 4.67 (m, 2H), 3.94 - 3.77 (m, 5H), 3.34 - 3.20 (m, 4H), 3.02 (q, J = 7.3 Hz, 2H), 2.27 - 2.04 (m, 5H), 1.93 - 1.63 (m, 6H), 1.30 (t, J = 7.3 Hz, 3H).</p>
636		461.1	<p>1H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.63 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.54 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.86 (dd, J = 16.2, 2.5 Hz, 2H), 5.85 (s, 1H), 4.75 (d, J = 5.5 Hz, 1H), 3.96 - 3.76 (m, 4H), 3.34 - 3.19 (m, 4H), 2.41 (s, 3H), 2.13 (d, J = 8.5 Hz, 2H), 1.82 (q, J = 10.2, 8.8 Hz, 6H), 1.58 - 1.33 (m, 3H),</p>

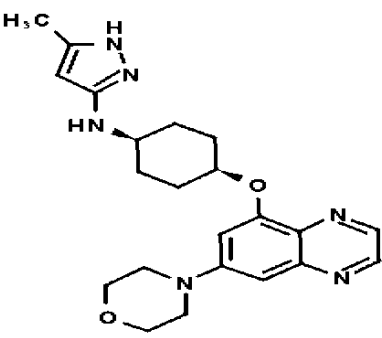
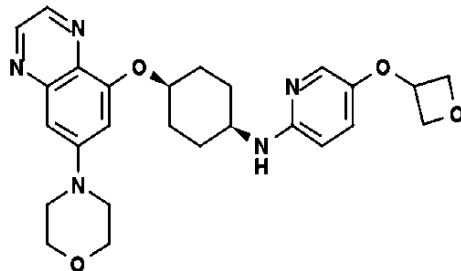
10

20

30

40

【表 2 - 1 2 7】

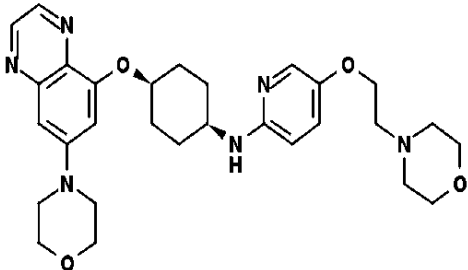
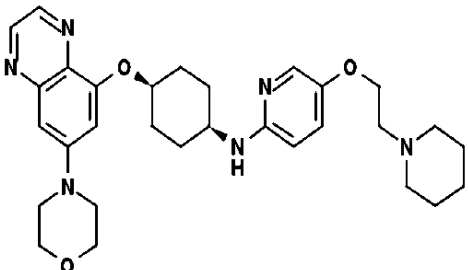
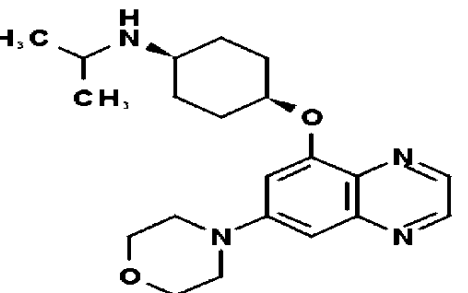
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			1.03 - 0.86 (m, 3H).
637		409.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.02 - 6.82 (m, 2H), 5.41 (d, J = 0.8 Hz, 1H), 4.76 (td, J = 5.9, 3.0 Hz, 1H), 4.03 - 3.84 (m, 4H), 3.49 (q, J = 5.8 Hz, 1H), 3.40 - 3.25 (m, 5H), 2.33 - 2.10 (m, 4H), 2.00 - 1.77 (m, 7H).
638		478.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.82 - 1.95 (m, 6 H), 2.14 - 2.26 (m, 2 H), 3.31 - 3.35 (m, 4 H), 3.77 - 3.85 (m, 1 H), 3.90 - 3.93 (m, 4 H), 4.71 - 4.80 (m, 3 H), 4.92 (t, J = 6.6 Hz, 2 H), 5.10 (quint., J = 5.6 Hz, 1 H), 6.39 (d, J = 8.9 Hz, 1 H), 6.90 (d,

10

20

30

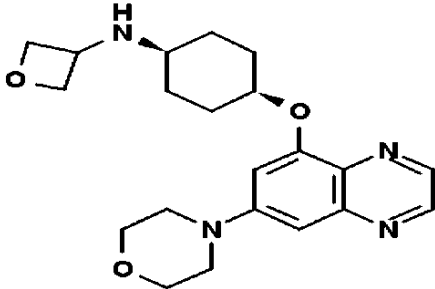
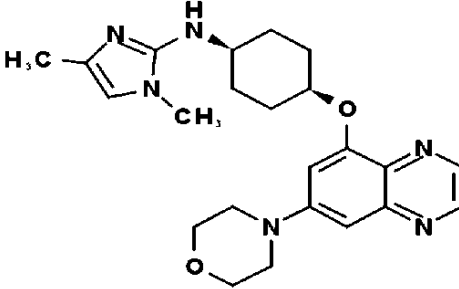
【表 2 - 1 2 8】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR	
639		535.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): 1.80 - 1.95 (m, 6 H), 2.10 - 2.25 (m, 2 H), 2.52 - 2.64 (m, 4 H), 2.77 (t, J = 5.6 Hz, 2 H), 3.33 (t, J = 4.7 Hz, 4 H), 3.74 (t, J = 4.7 Hz, 4 H), 3.70 - 3.85 (m, 1 H), 3.91 (t, J = 4.7 Hz, 4 H), 4.06 (t, J = 5.6 Hz, 2 H), 4.30 -	10
640		533.4	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.40 - 1.50 (m, 2 H), 1.56 - 1.70 (m, 4 H), 1.84 - 1.94 (m, 6 H), 2.11 - 2.23 (m, 2 H), 2.46 - 2.58 (m, 4 H), 2.71 - 2.80 (m, 2 H), 3.33 (t, J = 4.7 Hz, 4 H), 3.76 - 3.84 (m, 1 H), 3.91 (t, J = 4.7 Hz, 4 H), 4.07 (t, J = 5.7 H	20
641		371.56	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.73 - 8.65 (m, 1H), 8.60 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 6.93 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.89 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.75 (s, 1H), 3.95 - 3.87 (m, 4H), 3.39 - 3.28 (m, 4H), 3.05 - 2.93 (m, 1H), 2.82 - 2.69 (m, 1H), 2.24 - 2.08 (m, 2H), 1.80 - 1.71 (m, 6H), 1.07 (d, J = 6.2 Hz, 6H).	30

【表 2 - 1 2 9】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
642		424.53	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.78 (d, J = 5.8 Hz, 1H), 6.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.36 - 6.26 (m, 1H), 5.99 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 4.79 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.47 (d, J = 7.1 Hz, 1H), 3.99 - 3.85 (m, 4H), 3.56 - 3.49 (m, 1H), 3.39 - 3.26 (m, 4H), 2.28 - 2.16 (m, 2H), 1.98 - 1.80 (m, 6H).
643		492.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.57 - 8.45 (m, 1H), 7.81 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.18 (d, J = 1.2 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 16.8, 2.5 Hz, 2H), 5.48 (s, 1H), 4.83 (dp, J = 4.5, 2.4 Hz, 1H), 4.23 (dp, J = 8.3, 6.6 Hz, 1H), 4.00 - 3.85 (m, 4H), 3.42 - 3.23 (m, 4H), 2.35 - 2.15 (m, 2H), 1.97 - 1.76 (m, 6H), 1.26 (d, J = 6.6 Hz, 6H).
644		465.16	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 17.5, 2.5 Hz, 2H), 5.47 (s, 1H), 4.90 (s, 1H), 4.31 (q, J = 7.1 Hz, 2H), 3.92 (dd, J = 5.9, 3.7 Hz, 4H), 3.60 (s, 1H), 3.38 - 3.28 (m, 4H), 2.40 (s, 3H), 2.19 (d,

【表 2 - 1 3 0】

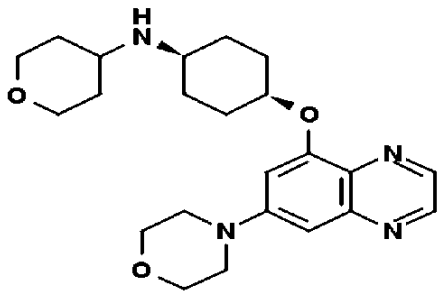
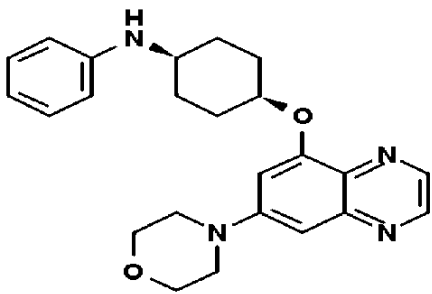
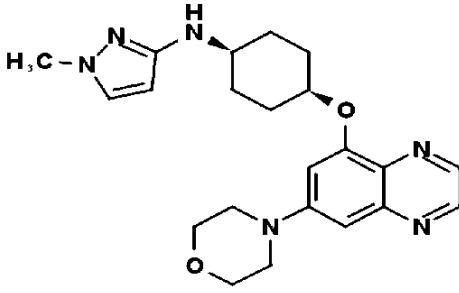
化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			J = 9.4 Hz, 2H), 1.97 - 1.80 (m, 6H), 1.36 (t, J = 7.1 Hz, 3H), 4.83 - 4.76 (m, 1H).
645		385.51	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.68 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.87 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.83 (t, J = 6.9 Hz, 2H), 4.76 (s, 1H), 4.45 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 4.14 - 4.05 (m, 1H), 3.94 - 3.88 (m, 4H), 3.35 - 3.30 (m, 4H), 2.65 (s, 1H), 2.24 - 2.15 (m, 2H), 1.75 - 1.64 (m, 6H).
646		423.16	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.71 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.57 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.01 - 6.84 (m, 2H), 6.18 (d, J = 1.4 Hz, 1H), 4.80 (s, 1H), 4.43 (s, 1H), 3.93 (t, J = 4.9 Hz, 5H), 3.48 (s, 3H), 3.43 - 3.25 (m, 5H), 2.38 - 1.86 (m, 9H).

10

20

30

【表 2 - 1 3 1】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
647		413.59	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.67 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.94 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.88 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 4.75 (s, 1H), 4.03 - 3.94 (m, 2H), 3.94 - 3.83 (m, 4H), 3.41 (td, J = 11.7, 2.1 Hz, 2H), 3.36 - 3.25 (m, 4H), 2.89 - 2.77 (m, 2H), 2.24 - 2.13 (m, 2H), 1.85 - 1.68 (m, 8H), 1.40 (ddd, J = 16.2, 12.3, 4.4 Hz, 3H).
648		405.58	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.17 (dd, J = 8.5, 7.4 Hz, 2H), 6.95 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.69 (t, J = 7.3 Hz, 1H), 6.63 (d, J = 7.9 Hz, 2H), 4.75 (s, 1H), 3.98 - 3.71 (m, 5H), 3.52 (s, 1H), 3.40 - 3.30 (m, 4H), 2.24 - 2.11 (m, 2H), 1.94 - 1.84 (m, 6H).
649		409.17	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.10 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 6.99 - 6.81 (m, 2H), 5.52 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 4.76 (t, J = 5.9 Hz, 1H), 4.06 - 3.86 (m, 5H), 3.72 (s, 3H), 3.49 (t, J = 5.3 Hz, 1H), 3.40 - 3.18 (m, 4H), 2.19 (dq, J = 12.9, 7.1, 6.7 Hz, 2H), 1.90 (dd, J = 9.4,

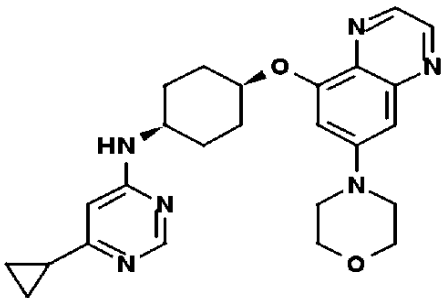
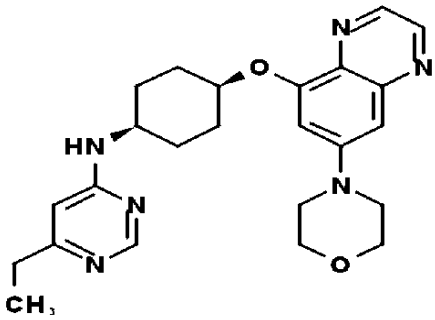
10

20

30

40

【表 2 - 1 3 2】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
			5.2 Hz, 7H).
650		447.2	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.62 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.47 - 8.36 (m, 1H), 6.96 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.90 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 6.18 (d, J = 1.2 Hz, 1H), 4.95 - 4.73 (m, 2H), 4.04 - 3.78 (m, 5H), 3.44 - 3.24 (m, 4H), 2.30 - 2.12 (m, 2H), 2.03 - 1.70 (m, 7H), 1.17 - 0.80 (m, 4H).
651		435.18	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.50 (d, J = 1.1 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 15.9, 2.5 Hz, 2H), 6.17 (d, J = 1.1 Hz, 1H), 4.98 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 4.86 - 4.75 (m, 1H), 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.39 - 3.29 (m, 4H), 2.61 (q, J = 7.6 Hz, 2H), 2.21 (dt, J = 11.2, 5.0 Hz, 2H), 2.04 - 1.82 (m, 6H), 1.25 (t, J = 7.6 Hz, 3H).

10

20

30

40

【表 2 - 1 3 3】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
652		449.23	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.70 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.61 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.52 (d, J = 1.1 Hz, 1H), 6.93 (dd, J = 16.0, 2.5 Hz, 2H), 6.19 - 6.12 (m, 1H), 4.91 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.81 (d, J = 5.4 Hz, 1H), 4.13 - 3.77 (m, 5H), 3.40 - 3.29 (m, 4H), 2.80 (hept, J = 6.8 Hz, 1H), 2.27 - 2.00 (m, 2H), 1.99 - 1.83 (m, 6H), 1.40 - 1.12 (m, 6H).
653		451.07	¹ H NMR (300 MHz, Methanol-d ₄ / CDCl ₃) δ 8.82 - 8.68 (m, 2H), 8.61 (d, J = 0.8 Hz, 1H), 7.38 (t, J = 0.8 Hz, 1H), 7.18 (s, 1H), 5.11 - 4.99 (m, 1H), 4.47 - 4.31 (m, 1H), 3.99 - 3.88 (m, 4H), 3.74 - 3.58 (m, 4H), 2.37 - 2.23 (m, 2H), 2.13 - 1.80 (m, 6H).
654		493.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.82 - 1.95 (m, 6 H), 2.11 - 2.24 (m, 2 H), 2.32 (s, 6 H), 2.68 (t, J = 5.7 Hz, 2 H), 3.29 - 3.37 (m, 4 H), 3.76 - 3.86 (m, 1 H), 3.88 - 3.95 (m, 4 H), 4.00 (t, J = 5.7 Hz, 2 H), 4.29 (d, J = 8.2 Hz, 1 H), 4.70 - 4.83 (m, 1 H)

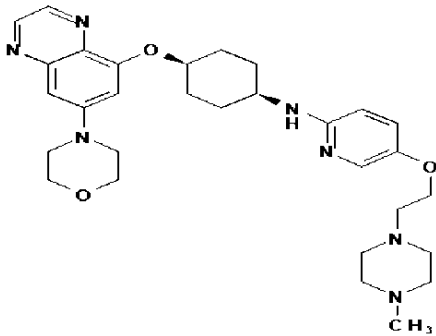
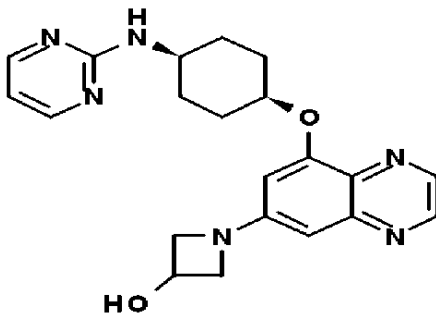
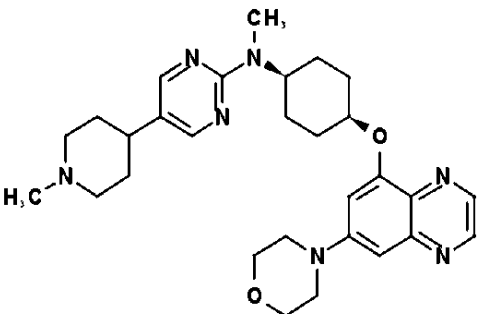
10

20

30

40

【表 2 - 1 3 4】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
655		548.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.81 - 1.97 (m, 6 H), 2.10 - 2.25 (m, 2 H), 2.33 (s, 3 H), 2.42 - 2.83 (m, 8 H), 2.78 (t, J = 5.6 Hz, 2 H), 3.28 - 3.39 (m, 4 H), 3.75 - 3.85 (m, 1 H), 3.86 - 3.97 (m, 4 H), 4.05 (t, J = 5.6 Hz, 2 H), 4.29 (t, J = 8.4 Hz, 1 H)
656		393.1	¹ H NMR (300 MHz, DMSO-d ₆) δ 8.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.47 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.25 (d, J = 4.8 Hz, 2H), 7.15 (d, J = 7.3 Hz, 1H), 6.59 - 6.47 (m, 2H), 6.31 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 5.80 - 5.68 (m, 1H), 4.85 (s, 2H), 4.62 (d, J = 5.3 Hz, 0H), 4.24 (t, J = 7.4 Hz, 2H), 3.83 (s, 1H), 3.71 (dd, J = 8.4, 4.7 Hz, 2H), 2.14 - 1.97 (m, 2H), 1.79 (d, J = 19.4 Hz, 5H).
657		518.32	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.59 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.50 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.11 (s, 2H), 6.91 - 6.70 (m, 2H), 4.66 (s, 1H), 3.92 - 3.56 (m, 7H), 3.45 (d, J = 4.3 Hz, 3H), 3.31 - 3.18 (m, 6H), 2.08 (s, 2H), 1.84 (d, J = 38.5 Hz, 8H).

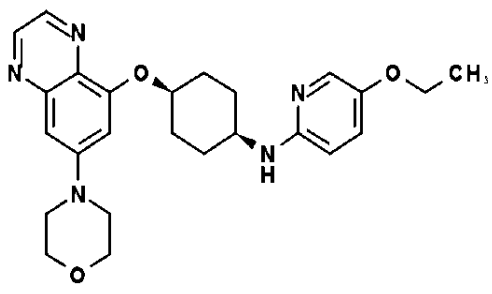
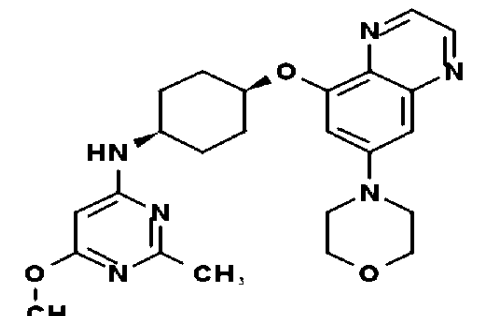
10

20

30

40

【表 2 - 1 3 5】

化合物 番号	化合物構造	ESMS (M+H)	¹ H NMR
658		450.3	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): ppm 1.37 (t, J = 7.0 Hz, 3 H), 1.84 - 1.94 (m, 6 H), 2.10 - 2.25 (m, 2 H), 3.29 - 3.38 (m, 4 H), 3.75 - 3.85 (m, 1 H), 3.88 - 3.95 (m, 4 H), 3.97 (q, J = 7.0 Hz, 2 H), 4.22 - 4.34 (m, 1 H), 4.73 - 4.80 (m, 1 H), 6.36 (d, J = 9.0 Hz)
659		451.34	¹ H NMR (300 MHz, Chloroform-d) δ 8.69 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 8.60 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.92 (dd, J = 19.6, 2.5 Hz, 2H), 5.25 (s, 1H), 4.76 (q, J = 8.3, 7.2 Hz, 2H), 3.97 - 3.87 (m, 4H), 3.58 - 3.28 (m, 8H), 2.40 (s, 3H), 2.24 - 2.13 (m, 2H), 2.07 - 1.78 (m, 6H).

【 0 1 6 6 】

本発明の化合物の生物学的分析

DNA - PK 阻害分析

化合物を、標準の放射分析を使用して、DNA - PK キナーゼを阻害するその能力についてスクリーニングした。簡単に言うと、このキナーゼ分析では、³³P - ATP における末端 ³³P - リン酸のペプチド基質への移動を調べる。この分析は、約 6 nM DNA - PK、50 mM HEPES (pH 7.5)、10 mM MgCl₂、25 mM NaCl、0.01% BSA、1 mM DTT、10 μg/mL 断片化 (sheared) 二本鎖 DNA (Sigma 社から入手)、0.8 mg/mL DNA - PK ペプチド (Glu - Pro - Pro - Leu - Ser - Gln - Glu - Ala - Phe - Ala - Asp - Leu - Trp - Lys - Lys - Lys、American Peptide 社から入手)、および 100 μM ATP を含有する、ウェルあたり 50 μL の最終体積の、384 ウェルプレートで実施した。したがって、本発明の化合物を、DMSO に溶解して、10 mM の最初のストック溶液を作製した。次いで、DMSO での連続希釈を行って、分析のための最終溶液を得た。各ウェルに、0.75 μL 分量の DMSO、または DMSO に阻害剤を入れたものを添加し、それに続いて、³³P - ATP (Perkin Elmer 社から入手) を含有する ATP 基質溶液を添加した。DNA - PK、ペプチド、および ds - DNA の添加によって、反応を開始させた。45 分後、25 μL の 5% リン酸で反応を停止させた。反応混合物を、MultiScreen HTS 384 ウェル PH プレート (Millipore 社から入手) に移し、1 時間結合させ、1% リン酸で 3 回洗浄した。50 μL の Ultima Gold (商標) 高効率シンチラント (scintillant) (Perkin Elmer 社から入手) の添加後、Packard TopCount NXT Microplate Scintillation and Luminescence Counter (Packard Biosci

10

20

30

40

50

ence社)で、試料を計数した。Microsoft Excel Solverマクロを使用して K_i 値を算出し、データを、競合的な強結合(tight-binding)阻害についての動態モデルに当てはめた。

【0167】

化合物1~291、295~331、333~367、369~523、525~640、642~644、646、および648~659はそれぞれ、DNA-PKの阻害に対する1.0マイクロモル未満の K_i を有する。化合物3、6~14、16~18、23~34、36~37、39~41、43~46、49~72、74~76、78、84~101、103~123、127~200、202~291、295~299、305、307~331、333~341、343、347~366、369~374、376~391、393~519、521~523、526~554、556~610、612~640、642~644、646、648~655、および657~659はそれぞれ、DNA-PKの阻害に対する0.10マイクロモル未満の K_i を有する。

10

【0168】

前述の発明は、明確な理解を目的として、説明および例示のために、いくらか詳細に記載してきたが、本発明の教えを考慮して、添付の特許請求の範囲の趣旨および範囲を逸脱せずに、これにある種の変更および改変を施すことができることが、当業者には容易に明らかであろう。

フロントページの続き

(51)Int.Cl.

F I

C 0 7 D 403/14	(2006.01)	C 0 7 D 403/14	
C 0 7 D 405/12	(2006.01)	C 0 7 D 405/12	
C 0 7 D 405/14	(2006.01)	C 0 7 D 405/14	
C 0 7 D 413/12	(2006.01)	C 0 7 D 413/12	
C 0 7 D 413/14	(2006.01)	C 0 7 D 413/14	
C 0 7 D 417/12	(2006.01)	C 0 7 D 417/12	
C 0 7 D 471/04	(2006.01)	C 0 7 D 471/04	1 0 4 Z
C 0 7 D 473/34	(2006.01)	C 0 7 D 471/04	1 0 6 A
C 0 7 D 475/00	(2006.01)	C 0 7 D 471/04	1 0 6 C
C 0 7 D 487/04	(2006.01)	C 0 7 D 471/04	1 0 7 Z
C 0 7 D 491/048	(2006.01)	C 0 7 D 471/04	1 1 7 N
C 0 7 D 491/052	(2006.01)	C 0 7 D 471/04	1 1 7 Z
C 0 7 D 491/056	(2006.01)	C 0 7 D 473/34	3 6 1
C 0 7 D 498/08	(2006.01)	C 0 7 D 475/00	
C 0 7 D 498/04	(2006.01)	C 0 7 D 487/04	1 4 0
C 0 7 D 513/04	(2006.01)	C 0 7 D 487/04	1 4 2
A 6 1 K 31/506	(2006.01)	C 0 7 D 487/04	1 4 3
A 6 1 K 31/5377	(2006.01)	C 0 7 D 487/04	1 4 4
A 6 1 K 31/5386	(2006.01)	C 0 7 D 487/04	1 4 5
A 6 1 P 35/00	(2006.01)	C 0 7 D 487/04	1 4 6
A 6 1 P 43/00	(2006.01)	C 0 7 D 491/048	
		C 0 7 D 491/052	
		C 0 7 D 491/056	
		C 0 7 D 498/08	
		C 0 7 D 498/04	1 0 5
		C 0 7 D 513/04	3 4 3
		A 6 1 K 31/506	
		A 6 1 K 31/5377	
		A 6 1 K 31/5386	
		A 6 1 P 35/00	
		A 6 1 P 43/00	1 0 5

(72)発明者 マクスウェル, ジョン バトリック

アメリカ合衆国 マサチューセッツ 0 2 4 7 2, ヒンガン, ギルフォード ロード 6 9

(72)発明者 チャリフソン, ポール エス.

アメリカ合衆国 マサチューセッツ 0 1 7 0 1, フラミンガム, ダートマス ドライブ 7

(72)発明者 タン, チン

アメリカ合衆国 マサチューセッツ 0 1 7 2 0, アクトン, ウェストサイド ドライブ 6

(72)発明者 ロンキン, スティーブン エム.

アメリカ合衆国 マサチューセッツ 0 2 4 7 2, ウォータータウン, ジェンセン ロード
1 6

(72)発明者 ジャクソン, カトリーナ リー

アメリカ合衆国 マサチューセッツ 0 2 1 3 9, ケンブリッジ, フランクリン ストリート
3 4 5, ナンバー 4 0 4

(72)発明者 ピアース, アルバート チャールズ

アメリカ合衆国 マサチューセッツ 0 2 1 3 8, ケンブリッジ, ハーバード ストリート
2 9 5, アpartment 9 1 1

- (72)発明者 ラウファー, デイビッド ジェイ.
アメリカ合衆国 マサチューセッツ 01775, ストー, テイラー ロード 254
- (72)発明者 リー, パン
アメリカ合衆国 マサチューセッツ 02421, レキシントン, モルト レーン 3
- (72)発明者 ジルー, サイモン
アメリカ合衆国 マサチューセッツ 02138, ケンブリッジ, ウィーラー ストリート 27
- (72)発明者 シュー, ジンワン
アメリカ合衆国 マサチューセッツ 01701, フレーミングハム, ウェスレイ ロード 28
- (72)発明者 コットレル, ケビン エム.
アメリカ合衆国 マサチューセッツ 02138, ケンブリッジ, ロバーツ ロード 17ビ
ー
- (72)発明者 モリス, マーク エー.
アメリカ合衆国 マサチューセッツ 02143, サマービル, ローウェル ストリート 37
- (72)発明者 ワール, ネイサン ディー.
アメリカ合衆国 マサチューセッツ 02141, ケンブリッジ, カーディナル メディロス
アベニュー 295
- (72)発明者 コート, ジョン ジェイ.
アメリカ合衆国 マサチューセッツ 01460, リトルトン, アーニーズ ドライブ 27
- (72)発明者 グ, ウェンシン
アメリカ合衆国 マサチューセッツ 01742, コンコード, ダンバー ウェイ 2
- (72)発明者 デン, ホンボ
アメリカ合衆国 マサチューセッツ, サウスボロー, ウッドランド ロード 178

審査官 吉海 周

- (56)参考文献 特開2011-246389(JP, A)
国際公開第02/020500(WO, A2)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C07D

A61K

CAplus/REGISTRY(STN)