(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7029806号
(P7029806)

(45)発行日　令和4年3月4日(2022.3.4)

(24)登録日　令和4年2月24日(2022.2.24)

(51)国際特許分類

C07D 401/12 (2006.01)	C07D 401/12	CSP
C07D 403/12 (2006.01)	C07D 403/12	
A61K 31/4439(2006.01)	A61K 31/4439	
A61K 31/506(2006.01)	A61K 31/506	
A61K 45/00 (2006.01)	A61K 45/00	

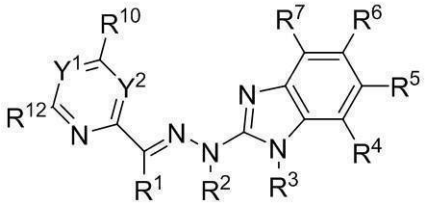
請求項の数　34　（全81頁）　最終頁に続く

(21)出願番号　特願2018-552795(P2018-552795)
(86)(22)出願日　平成29年4月6日(2017.4.6)
(65)公表番号　特表2019-513747(P2019-513747A)
(43)公表日　令和1年5月30日(2019.5.30)
(86)国際出願番号　PCT/US2017/026330
(87)国際公開番号　WO2017/176981
(87)国際公開日　平成29年10月12日(2017.10.12)
審査請求日　令和2年3月27日(2020.3.27)
(31)優先権主張番号　62/320,121
(32)優先日　平成28年4月8日(2016.4.8)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(31)優先権主張番号　62/441,658
(32)優先日　平成29年1月3日(2017.1.3)
最終頁に続く

(73)特許権者　391058060
ベイラー カレッジ オブ メディスン
BAYLOR COLLEGE OF MEDICINE
アメリカ合衆国，テキサス ７７０３０，ヒューストン，ワン ベイラー プラザ（番地なし）
(74)代理人　100078282
弁理士　山本 秀策
(74)代理人　100113413
弁理士　森下 夏樹
(72)発明者　オマリー， バート ダブリュー．
アメリカ合衆国 テキサス ７７００５，ヒューストン， ブロンプトン ロード ６６０２
最終頁に続く

(54)【発明の名称】　ステロイド受容体コアクチベーターの小分子レギュレーター及びその使用方法

(57)【特許請求の範囲】
【請求項１】
以下の式：
【化１００】



の化合物またはその薬学的に許容される塩（式中、
Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、
Ｒ２は、水素、置換または非置換アルキル、または置換または非置換アリールであり、
Ｒ３は、置換または非置換アルキル、または置換または非置換アリールであり、

Ｙ１及びＹ２は、それぞれ独立して、ＣＲ及びＮから選択され、Ｒは、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキニル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換シクロアルキル、または置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキルであり、そして
Ｒ１０及びＲ１２は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、
ここで、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７のうちの少なくとも１つが、ハロゲンである）。

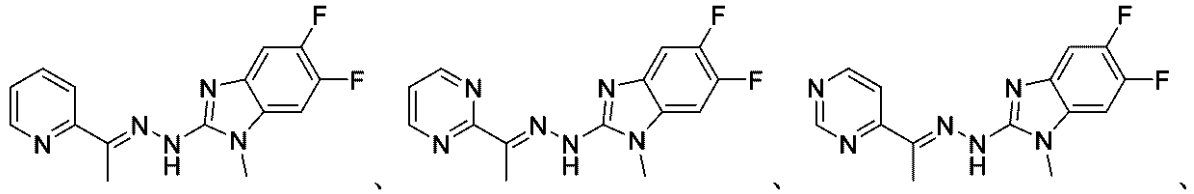
【請求項２】

Ｒ、Ｒ１０、及びＲ１２が、それぞれ独立して、水素及びハロゲンから選択される、請求項１に記載の化合物。

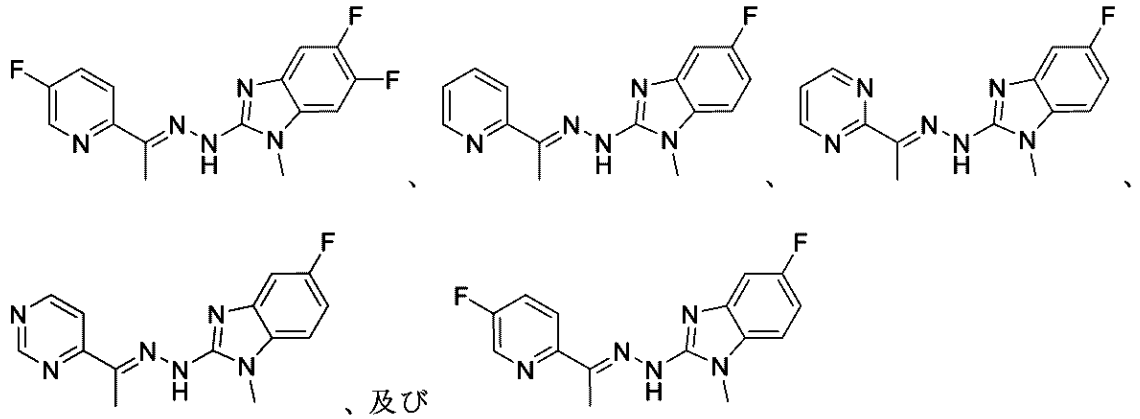
【請求項３】

前記化合物が、

【化１０１】



【化１０２】



からなる群から選択される、請求項１に記載の化合物。

【請求項４】

請求項１に記載の化合物の互変異性体。

【請求項５】

前記化合物が、安定同位体で同位体置換されている、請求項１～４のいずれかに記載の化合物。

【請求項６】

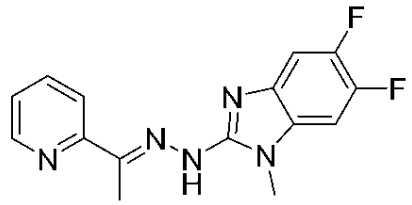
前記安定同位体が、重水素、１３Ｃ、１５Ｎ、及び１８Ｏからなる群から選択される、請求項５に記載の化合物。

【請求項７】

薬学的用途のための、請求項１～６のいずれか１項に記載の化合物及び薬学的に許容される担体を含む組成物。

【請求項８】
薬学的用途のための、請求項１～６のいずれか１項に記載の化合物を含むキット。
【請求項９】
薬学的用途のための、請求項７に記載の組成物を含むキット。
【請求項１０】
対象においてステロイド受容体コアクチベーター関連疾患を治療または予防するための、請求項１～６のいずれか１項に記載の化合物を含む組成物。
【請求項１１】
対象においてステロイド受容体コアクチベーター関連疾患を治療または予防するための、請求項７に記載の組成物。
【請求項１２】
前記ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患が、がんである、請求項１０または１１に記載の組成物。
【請求項１３】
前記ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患が、代謝障害である、請求項１０または１１に記載の組成物。
【請求項１４】
前記ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患が、ヒト免疫不全ウイルス感染である、請求項１０または１１に記載の組成物。
【請求項１５】
前記ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患が、神経変性障害である、請求項１０または１１に記載の組成物。
【請求項１６】
前記ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患が、炎症性疾患である、請求項１０または１１に記載の組成物。
【請求項１７】
前記ステロイド受容体コアクチベーターが、ＳＲＣ－１、ＳＲＣ－２、またはＳＲＣ－３である、請求項１０～１６のいずれか１項に記載の組成物。
【請求項１８】
追加の治療剤と組み合わせて投与されることを特徴とする、請求項１０～１７のいずれか１項に記載の組成物。
【請求項１９】
前記追加の治療剤が、化学療法剤である、請求項１８に記載の組成物。
【請求項２０】
細胞内のステロイド受容体コアクチベータータンパク質を調節する方法において使用するための、請求項１～６のいずれか１項に記載の化合物を含む組成物であって、前記方法は、細胞を前記化合物と接触させることを含む、組成物。
【請求項２１】
前記ステロイド受容体コアクチベータータンパク質が、ＳＲＣ－１、ＳＲＣ－２、またはＳＲＣ－３である、請求項２０に記載の組成物。
【請求項２２】
前記接触が、インビトロまたはインビボで実施される、請求項２０または２１に記載の組成物。
【請求項２３】
R^4、R^5、R^6、及びR^7のうちの少なくとも１つが、フルオロである、請求項１に記載の化合物。
【請求項２４】
前記化合物が、

【化２４】

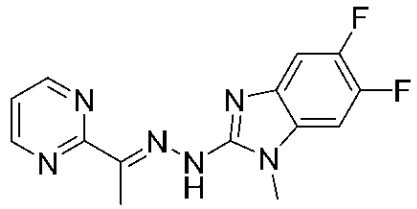


またはその薬学的に許容される塩である、請求項１に記載の化合物。

【請求項２５】

前記化合物が、

【化２５】

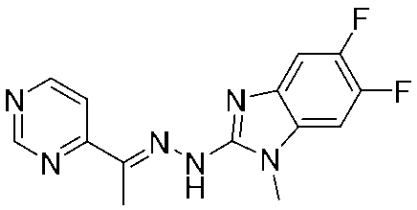


またはその薬学的に許容される塩である、請求項１に記載の化合物。

【請求項２６】

前記化合物が、

【化２６】

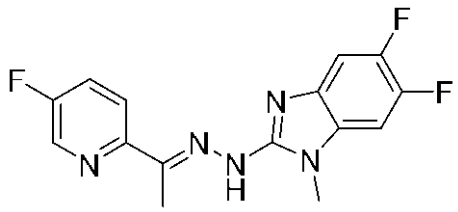


またはその薬学的に許容される塩である、請求項１に記載の化合物。

【請求項２７】

前記化合物が、

【化２７】

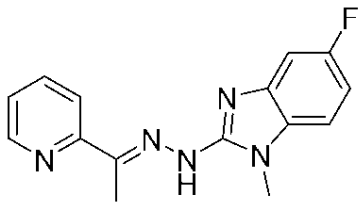


またはその薬学的に許容される塩である、請求項１に記載の化合物。

【請求項２８】

前記化合物が、

【化２８】

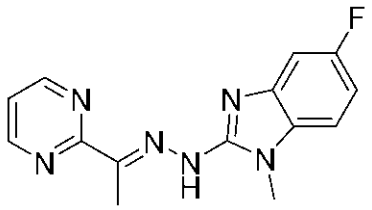


またはその薬学的に許容される塩である、請求項１に記載の化合物。

【請求項２９】

前記化合物が、

【化２９】

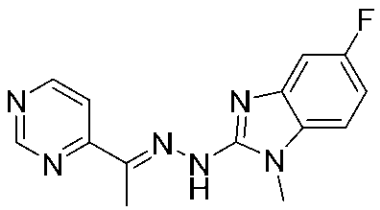


またはその薬学的に許容される塩である、請求項１に記載の化合物。

【請求項３０】

前記化合物が、

【化３０】

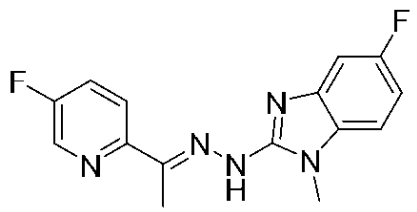


またはその薬学的に許容される塩である、請求項１に記載の化合物。

【請求項３１】

前記化合物が、

【化３１】



またはその薬学的に許容される塩である、請求項１に記載の化合物。

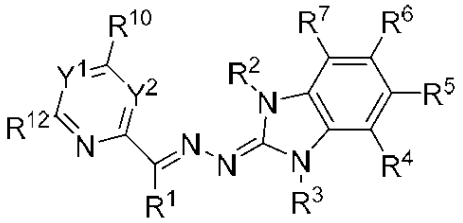
【請求項３２】

前記化合物が、Ｚ－立体配座またはＥ－立体配座にある、請求項１に記載の化合物。

【請求項３３】

以下の式：

【化３４】



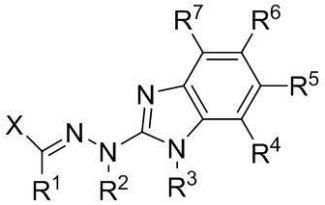
の化合物またはその薬学的に許容される塩（式中、
Ｒ１は、メチルであり、Ｒ２は、メチルまたは水素であり、Ｒ３は、メチルまたは水素であり、Ｒ４は、水素であり、Ｒ５は、フルオロであり、Ｒ６は、フルオロであり、Ｒ７は、水素であり、Ｙ１は、ＣＦであり、Ｙ２は、ＣＨであり、Ｒ１０は、水素であり、そしてＲ１２は、水素であり、
ただし、Ｒ２がメチルである場合、Ｒ３は、水素であり、そしてＲ２が水素である場合、Ｒ３は、メチルである）。
【請求項３４】
前記化合物が、Ｚ－立体配座またはＥ－立体配座にある、請求項３３に記載の化合物。
【発明の詳細な説明】
【技術分野】
【０００１】
関連出願の相互参照
本出願は、２０１６年４月８日に出願された米国仮出願第６２／３２０，１２１号、及び２０１７年１月３日に出願された米国仮出願第６２／４４１，６５８号の利益を主張し、参照することによりそれらの全体が本明細書に組み込まれる。
【０００２】
連邦政府支援の研究に関する声明
本発明は、国立衛生研究所によって与えられた認可番号Ｒ０１ＧＭ１１５６２２、ＨＤ０７６５９６、ＤＫ０５９８２０、及びＲ０１ＣＡ１１２４０３、ならびに国防省によって与えられた認可番号ＤＯＤ　ＢＣ１２０８９４の下で政府の支援でなされた。政府は本発明において一定の権利を有する。
【背景技術】
【０００３】
コアクチベーターは、核内受容体（ＮＲ）及び多くの他の転写因子の転写活性を媒介する非ＤＮＡ結合タンパク質である。４００を超えるコアクチベーターが同定され、神経性及び代謝性障害、炎症性疾患、及びがんを含む広範囲のヒト疾患と関連している。ステロイド受容体コアクチベーターは、多くの細胞シグナル伝達経路を調節するために協同的に機能するＳＲＣ－１、ＳＲＣ－２、及びＳＲＣ－３を含む３つのファミリーメンバーを含有する。エストロゲン受容体陽性（ＥＲ＋）乳癌を例にとると、がん細胞は、選択的エストロゲン受容体モジュレーター（ＳＥＲＭ）に打ち勝って核内受容体（ＮＲ）活性を沈黙させる多数の機構を用い得る。乳癌細胞は内分泌療法に対して耐性になり得るが、これらのがん細胞が生存するためにコアクチベーターを採用することは必須である。コアクチベーターはまた他の転写因子と連携する。そのため、過剰発現したコアクチベーターを直接的に標的とし、それらの活性または安定性を低下させ得る小分子阻害剤（ＳＭＩ）は薬物開発の標的である。また、コアクチベーターの刺激は、がんを含む所定の病理学的状態に有益であり得、また代謝障害の治療に有益であり得る。
【発明の概要】
【課題を解決するための手段】
【０００４】
ステロイド受容体コアクチベーター（ＳＲＣ）レギュレーターが本明細書に記載されており、それは本明細書においてＳＲＣモジュレーターとも称される。また、本明細書には、

がん、代謝障害（例えば、肥満）、ヒト免疫不全ウイルス、神経変性障害、及び炎症性疾患などのＳＲＣ関連疾患を治療及び／または予防する際のそれらの使用方法が記載されている。その方法は、本明細書に記載の化合物を対象に投与することを含む。

【０００５】

本明細書に記載のステロイド受容体コアクチベーターレギュレーターの種類は、以下の式の化合物：

【化１】

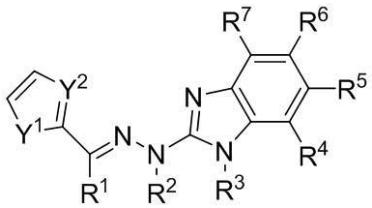


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、Ｒ２及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである）を含む。これらの化合物において、Ｘがピリジンまたはピリミジンである場合、（１）ピリジンまたはピリミジンが置換されているか、（２）Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７のうちの少なくとも１つが水素以外であるか、または（３）Ｒ１が水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、または置換もしくは非置換シクロアルキル以外である。

【０００６】

任意に、化合物は以下の式：

【化２】

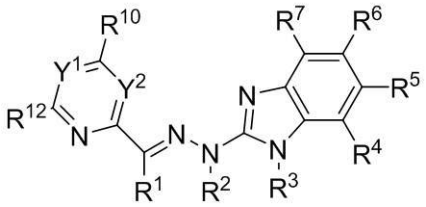


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｙ１は、ＣＲＲ、ＮＲ、Ｏ、またはＳであり、Ｙ２は、ＣＲまたはＮであり、各Ｒは、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキニル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換シクロアルキル、または置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキルである）を有する。いくつかの例では、各Ｒは、水素または置換もしくは非置換アルキルである。

【０００７】

任意に、化合物は以下の式：

【化３】

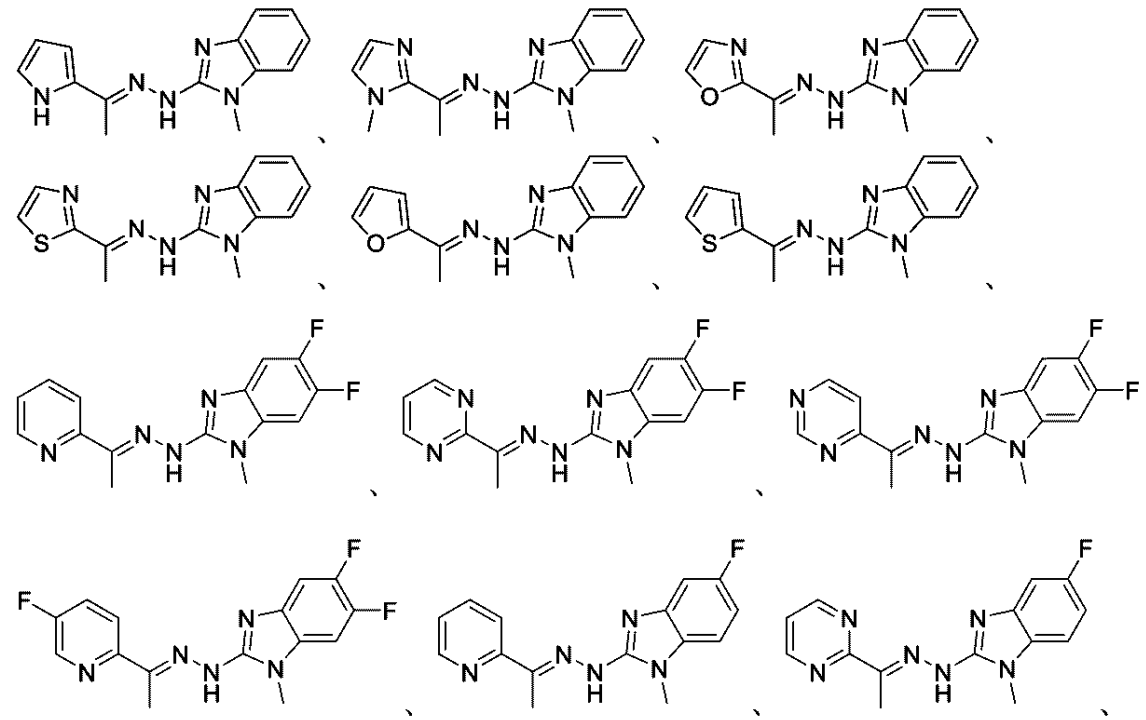


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｙ１及びＹ２は、それぞれ独立して、ＣＲ及びＮから選択され、Ｒは、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキニル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換シクロアルキル、または置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキルであり、Ｒ１０及びＲ１２は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される）を有する。これらの化合物において、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ１０、Ｒ１２、及びＲのうちの少なくとも１つが、水素以外である。いくつかの例では、Ｒ、Ｒ１０、及びＲ１２は、それぞれ独立して、水素及びハロゲンから選択される。

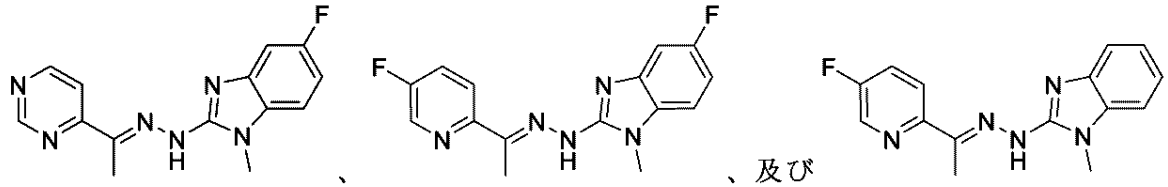
【０００８】

任意に、ＳＲＣレギュレーターは、

【化４】



【化５】

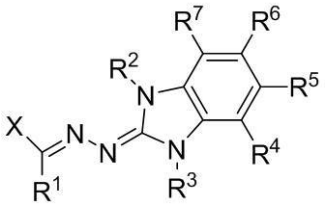


からなる群から選択される化合物である。

【０００９】

任意に、ＳＲＣモジュレーターは、本明細書に記載の化合物の互変異性体である。互変異性体は、以下の式：

【化６】

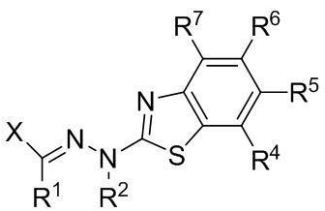


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、Ｒ２及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択され、Ｘがピリジンまたはピリミジンである場合、（１）ピリジンまたはピリミジンが置換されているか、（２）Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７のうちの少なくとも１つが水素以外であるか、または（３）Ｒ１が水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、または置換もしくは非置換シクロアルキル以外である）を有し得る。

【００１０】

本明細書に記載のステロイド受容体コアクチベーターレギュレーターの種類は、以下の式の化合物：

【化７】



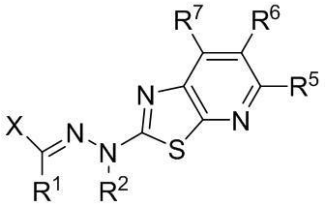
またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換

アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、Ｒ２は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである）を含む。

【００１１】

本明細書に記載のステロイド受容体コアクチベーターレギュレーターの種類は、以下の式の化合物：

【化８】

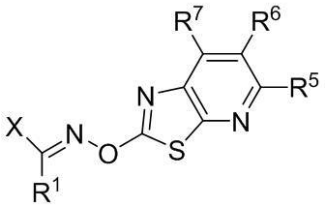


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ１、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、Ｒ２は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである）を含む。任意に、Ｒ２は水素またはメチルである。

【００１２】

本明細書に記載のステロイド受容体コアクチベーターレギュレーターの種類は、以下の式の化合物：

【化９】



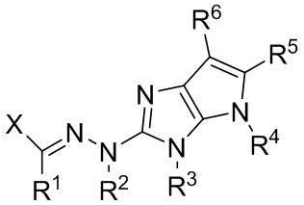
またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ１、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換

アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される）を含む。

【００１３】

本明細書に記載のステロイド受容体コアクチベーターレギュレーターの種類は、以下の式の化合物：

【化１０】

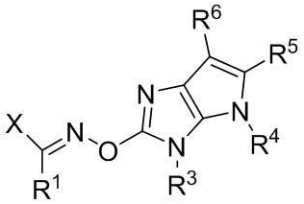


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ１、Ｒ５、及びＲ６は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、Ｒ２、Ｒ３、及びＲ４は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールから選択される）を含む。

【００１４】

本明細書に記載のステロイド受容体コアクチベーターレギュレーターの種類は、以下の式の化合物：

【化１１】

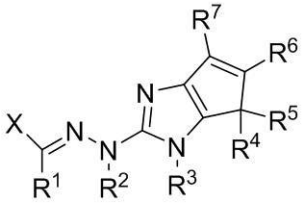


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ１、Ｒ５、及びＲ６は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、Ｒ３及びＲ４は、それぞれ独立して、水素、シアノ、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールから選択される）を含む。

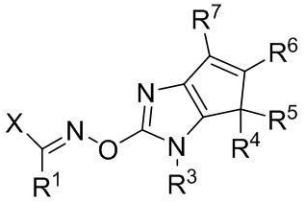
【００１５】

本明細書に記載のステロイド受容体コアクチベーターレギュレーターの種類は、以下の式

の化合物：
【化１２】

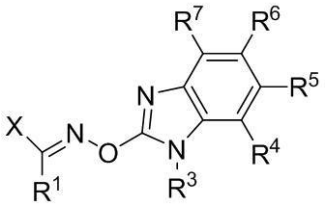


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、Ｒ２及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである）を含む。
【００１６】
本明細書に記載のステロイド受容体コアクチベーターレギュレーターの種類は、以下の式の化合物：
【化１３】



またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、Ｒ３は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである）を含む。任意に、Ｒ３は水素またはメチルである。
【００１７】
本明細書に記載のステロイド受容体コアクチベーターレギュレーターの種類は、以下の式の化合物

【化１４】

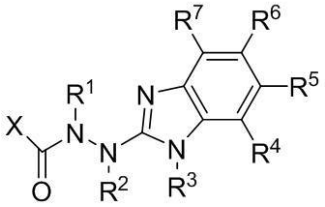


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、Ｒ３は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである）を含む。

【００１８】

本明細書に記載のステロイド受容体コアクチベーターレギュレーターの種類は、以下の式の化合物：

【化１５】

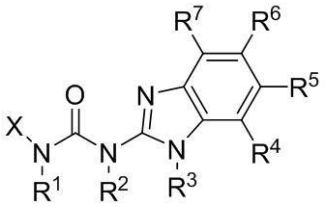


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ１、Ｒ２、及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択され、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される）を含む。

【００１９】

本明細書に記載のステロイド受容体コアクチベーターレギュレーターの種類は、以下の式の化合物：

【化１６】

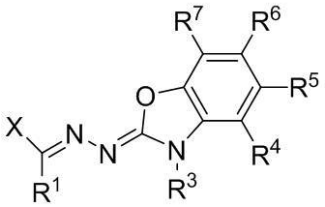


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ１、Ｒ２、及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択され、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される）を含む。

【００２０】

本明細書に記載のステロイド受容体コアクチベーターレギュレーターの種類は、以下の式の化合物：

【化１７】

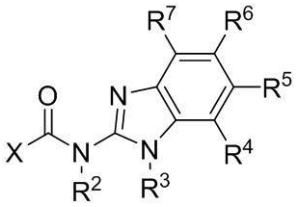


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、Ｒ３は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである）を含む。

【００２１】

本明細書に記載のステロイド受容体コアクチベーターレギュレーターの種類は、以下の式の化合物：

【化１８】

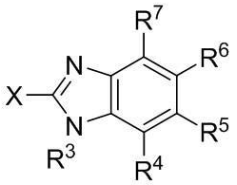


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ２及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択され、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される）を含む。

【００２２】

本明細書に記載のステロイド受容体コアクチベーターレギュレーターの種類は、以下の式の化合物：

【化１９】



またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、Ｒ３は、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールであり、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される）を含む。

【００２３】

任意に、本明細書に記載の化合物は、安定同位体で同位体置換されている。安定同位体は、例えば、重水素、１３Ｃ、１５Ｎ、及び／または１８Ｏであり得る。

【００２４】

また、本明細書に記載の化合物及び薬学的に許容される担体を含む組成物も本明細書に記載されている。

【００２５】

本明細書に記載の化合物または組成物を含むキットが本明細書に更に記載されている。

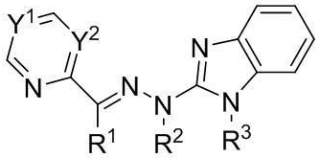
【００２６】

対象においてステロイド受容体コアクチベーター関連疾患を治療または予防する方法も本明細書で提供される。対象においてステロイド受容体コアクチベーター関連疾患を治療または予防する方法は、有効量の上述された化合物を対象に投与することを含む。任意に、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患は、がん、代謝障害、ヒト免疫不全ウイルス、神経変性障害、または炎症性疾患である。任意に、ステロイド受容体コアクチベーターは、ＳＲＣ－１、ＳＲＣ－２、またはＳＲＣ－３である。その方法は、第２の化合物または組成物を投与することを更に含み得る。任意に、第２の化合物または組成物は化学療法剤である。

【００２７】

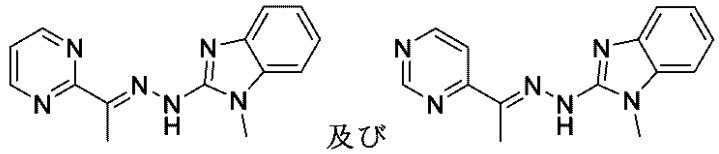
また、対象において代謝障害、ヒト免疫不全ウイルス、神経変性障害、または炎症性疾患を治療する方法が本明細書に記載されている。対象において代謝障害、ヒト免疫不全ウイルス、神経変性障害、または炎症性疾患を治療する方法は、有効量の以下の式の化合物：

【化２０】



またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、Ｙ１及びＹ２は、それぞれ独立して、ＣＨまたはＮから選択され、Ｒ１、Ｒ２、及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールから選択される）を対象に投与することを含む。この方法では、Ｙ１及びＹ２の少なくとも１つはＮである。任意に、化合物は、

【化２１】



からなる群から選択される。

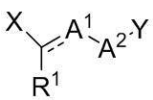
【００２８】

細胞内のステロイド受容体コアクチベータータンパク質を調節する方法も本明細書で提供される。細胞内のステロイド受容体コアクチベータータンパク質を調節する方法は、細胞を有効量の本明細書に記載の化合物と接触させることを含む。ステロイド受容体コアクチベータータンパク質は、任意に、ＳＲＣ－１、ＳＲＣ－２、またはＳＲＣ－３であり得る。任意に、接触はインビトロまたはインビボで実施される。

【００２９】

更に、以下の式の化合物：

【化２２】



またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、

【化２３】

=---

は単結合または二重結合であり、Ｘ及びＹは、それぞれ独立して、置換または非置換ヘテロシクロアルキル、置換または非置換ヘテロシクロアルケニル、置換または非置換ヘテロ

シクロアルキニル、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換アリール、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルからなる群から選択され、A^1は、Ｂ、ＣＲ、ＣＲＲ’、Ｎ、ＮＲ、Ｏ、またはＳであり、A^2は、ＢＲ、ＣＲＲ’、ＮＲ、Ｏ、またはＳであり、Ｒ及びＲ’は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、R^1は、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキニル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換シクロアルキル、または置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキルであり、Ｘがピリジンである場合、

【化２４】

は二重結合であり、A^1はＮであり、A^2はＮＨであり、R^1はメチルであり、次いでＹは非置換ベンズイミダゾールまたはＮ－メチル－ベンズイミダゾールではない）が本明細書に記載されている。

【００３０】

また、対象においてステロイド受容体コアクチベーター関連疾患を治療または予防するために上記で示された化合物を使用する方法も本明細書に記載されている。対象においてステロイド受容体コアクチベーター関連疾患を治療または予防する方法は、有効量の前記化合物を対象に投与することを含む。

【００３１】

１つ以上の実施形態の詳細は、図面及び以下の説明で記述されている。他の特徴、目的、及び利点は、説明及び図面、ならびに請求項から明らかになる。

【図面の簡単な説明】

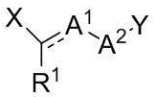
【００３２】

【図１】ＳＲＣ－１、ＳＲＣ－２、及びＳＲＣ－３の内因性転写活性に対する効果について試験された一連の化合物の結果を示している。ルシフェラーゼアッセイは、ｐＢＩＮＤ及びｐＢＩＮＤ－ＳＲＣ－３の発現ベクターと組み合わされたレポーターベクターｐＧ５－ＬＵＣで一過性にトランスフェクトされたＨｅＬａ細胞で実施してから、化合物と２４時間インキュベートした。図１において、各セットにおける１番目のヒストグラムバーはｐＢＩＮＤを表し、各セットにおける２番目のヒストグラムバーはＳＲＣ－１を表し、各セットにおける３番目のヒストグラムバーはＳＲＣ－２を表し、各セットにおける４番目のヒストグラムバーはＳＲＣ－３を表す。

【図２】一連の化合物が所定の用量でＳＲＣ－３内因性活性を刺激することができたことを示している。内因性転写活性アッセイは図１のように行われた。図２では、各セットにおける左のヒストグラムバーはｐＢＩＮＤを表し、各セットにおける右のヒストグラムバーはｐＢＩＮＤ－ＳＲＣ３を表す。

【図３】パネルＡ～Ｅは、同所性膵臓癌マウスモデルにおけるＳＩ－１２の治療有効性を示す。パネル（Ａ）は、ＳＩ－１２またはビヒクルでの処理後の腫瘍の発光強度を示している。パネル（Ｂ）は、ＳＩ－１２またはビヒクルでの治療後の体重を示している。データは、平均±ＳＥＭを表す。＊、Ｐ＜０．０５、＊＊、Ｐ＜０．０１、スチューデントのｔ検定による。パネル（Ｃ）は、ＳＩ－１２またはビヒクルでの８週間の治療後のルシフェラーゼ画像化の代表的な画像を示している。パネル（Ｄ）は、ＳＩ－１２またはビヒクルによる８週間の治療後の採取された腫瘍及び腫瘍重量のプロットを示している。パネル

（Ｅ）は、抗ＳＲＣ－３抗体または抗Ｋｉ－６７抗体で処理及び免疫組織化学的染色された対照群及びＳＩ－１２群から収集された腫瘍組織（Ｎ＞３）の画像を示している。
【図４】移植されたルシフェラーゼ発現ＭＤＡ－ＭＢ－２３１トリプルネガティブ乳癌（ＴＮＢＣ）腫瘍細胞を有し、かつ腫瘍の進行を追跡するためにＳＩ－１２またはビヒクルで１週間に１回治療されたマウス全体のルシフェラーゼ画像化の写真を示している。定量化されたルシフェラーゼ活性が図４のグラフに示されている。
【発明を実施するための形態】
【００３３】
ステロイド受容体コアクチベーター（ＳＲＣ）モジュレーター及びそれらの使用方法が本明細書に記載されている。具体的には、本明細書に記載の小分子は、ＳＲＣ－１、ＳＲＣ－２、及び／またはＳＲＣ－３を含むＳＲＣファミリータンパク質メンバーの１つ以上のモジュレーターである。本明細書に記載の化合物及び方法は、がん、代謝障害、ヒト免疫不全ウイルス、神経変性障害、炎症性疾患、及び他のＳＲＣ関連疾患を治療するのに有用である。
【００３４】
Ｉ．化合物
いくつかの場合では、本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターは、以下の式：
【化２５】



ならびにその薬学的に許容される塩及びプロドラッグによって表される。
【００３５】
上記で示された式において、
【化２６】
═══

は単結合または二重結合である。
【００３６】
また、上記で示された式において、Ｘ及びＹは、それぞれ独立して、置換または非置換ヘテロシクロアルキル、置換または非置換ヘテロシクロアルケニル、置換または非置換ヘテロシクロアルキニル、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換アリール、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルからなる群から選択される。任意に、ＸまたはＹは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。
【００３７】
また、上記で示された式において、Ａ１は、
【化２７】
═══

が単結合であるかまたは二重結合であるかに基づいて適切に、Ｂ、ＣＲ、ＣＲＲ’、Ｎ、ＮＲ、Ｏ、またはＳである。例えば、

【化２８】
═══

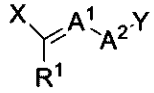
が二重結合である場合、Ａ^{1}はＣＲまたはＮであり得る。
【化２９】
═══

が単結合である場合、Ａ^{1}はＣＲＲ’、ＮＲ、Ｏ、またはＳであり得る。Ｒ及びＲ’は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。
【００３８】
更に、上記で示された式において、Ａ^{2}は、ＢＲ、ＣＲＲ’、ＮＲ、Ｏ、またはＳである。Ｒ及びＲ’は、A^{1}について上記で定義された通りである。
【００３９】
任意に、
【化３０】
═══

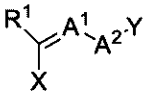
は二重結合であり、Ａ^{1}はＮであり、Ａ^{2}はＮＨまたはＯである。
【００４０】
また、上記で示された式において、Ｒ^{1}は、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルであり得る。
【００４１】
いくつかの実施形態では、Ｘがピリジンである場合、
【化３１】
═══

は二重結合であり、Ａ^{1}はＮであり、Ａ^{2}はＮＨであり、Ｒ^{1}はメチルであり、次いでＹは非置換ベンズイミダゾールまたはＮ－メチル－ベンズイミダゾールではない。
【００４２】
上記で示された構造によるＳＲＣモジュレーターの例示的な種類は、式Ｉ、式ＩＩ、式ＩＩＩ、式ＩＶ、式Ｖ、式ＶＩ、式ＶＩＩ、式ＶＩＩＩ、及び式ＩＸとして以下に提供される。
【００４３】
本出願を通して上述の及び後続の式のＳＲＣモジュレーターは、Ｅ－立体配座で図示される。しかしながら、本出願を通して見出されるＳＲＣモジュレーターは、以下に示されるように、本出願における例示的な図示にかかわらず、Ｅ－立体配座またはＺ－立体配座のいずれかにあり得る。

【化３２】



Ｅ－立体配座

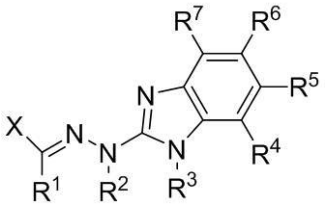


Ｚ－立体配座

【００４４】

本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターの種類は、式Ｉ：

【化３３】



及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される。

【００４５】

式Ｉにおいて、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。

【００４６】

また、式Ｉにおいて、Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。

【００４７】

また、式Ｉにおいて、Ｒ２及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択される。任意に、Ｒ２及びＲ３は、それぞれ、水素及びメチルから選択される。

【００４８】

任意に、式Ｉにおいて、Ｒ１及びＲ２は組み合わさって、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、または置換もしくは非置換ヘテロアリールを形成する。

【００４９】

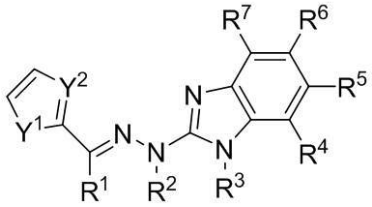
式Ｉのいくつかの例では、Ｘがピリジンまたはピリミジンである場合、ピリジンまたはピリミジンは置換されている（すなわち、ピリジンまたはピリミジンは、少なくとも１つの非水素置換基を含有する）。式Ｉのいくつかの例では、Ｘがピリジンまたはピリミジンである場合、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７のうちの少なくとも１つは水素以外である。式Ｉのいくつかの例では、Ｘがピリジンまたはピリミジンである場合、Ｒ１は、水素、置換も

しくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、または置換もしくは非置換シクロアルキル以外である。

【００５０】

いくつかの例では、式Ｉは構造Ｉ－Ａによって表される：

【化３４】



構造Ｉ－Ａ

【００５１】

構造Ｉ－Ａにおいて、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、式Ｉについて上記で定義された通りである。

【００５２】

また、構造Ｉ－Ａにおいて、Ｙ１は、ＣＲＲ、ＮＲ、Ｏ、またはＳである。

【００５３】

また、構造Ｉ－Ａにおいて、Ｙ２は、ＣＲまたはＮである。

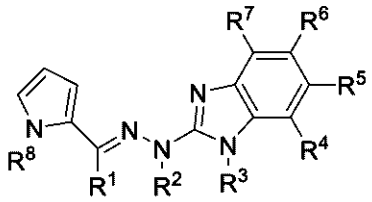
【００５４】

Ｙ１及び／またはＹ２がＮＲ、ＣＲ、またはＣＲＲである場合、各Ｒは、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルであり得る。任意に、各Ｒは、水素または置換もしくは非置換アルキル（例えば、メチル）である。

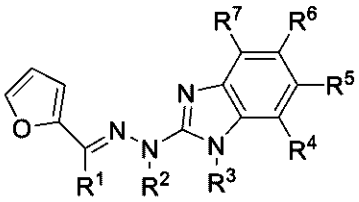
【００５５】

構造Ｉ－Ａのいくつかの例では、Ｙ１はヘテロ原子であり得、Ｙ２はＣＨであり得る。例えば、構造Ｉ－Ａの化合物は、構造Ｉ－Ａ１、構造Ｉ－Ａ２、または構造Ｉ－Ａ３によって表され得る：

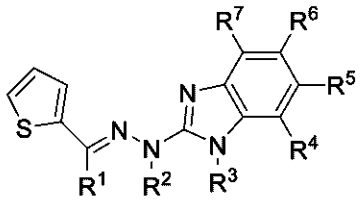
【化３５】



構造Ｉ－Ａ１



構造Ｉ－Ａ２



構造Ｉ－Ａ３

【００５６】

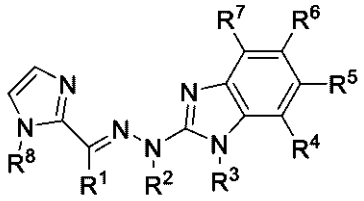
構造Ｉ－Ａ１、構造Ｉ－Ａ２、及び構造Ｉ－Ａ３において、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ

５、Ｒ６、及びＲ７は、式Ｉについて上記で定義された通りである。また、構造Ｉ－Ａ１において、Ｒ８は、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキニル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換シクロアルキル、または置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキルであり得る。

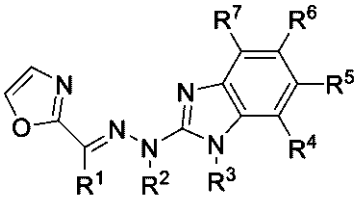
【００５７】

構造Ｉ－Ａのいくつかの例では、Ｙ１及びＹ２はいずれともヘテロ原子であり得る。例えば、構造Ｉ－Ａの化合物は、構造Ｉ－Ａ４、構造Ｉ－Ａ５、または構造Ｉ－Ａ６によって表され得る：

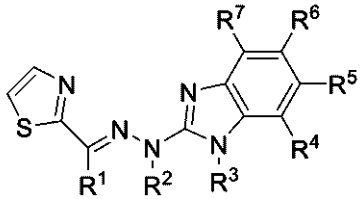
【化３６】



造Ｉ－Ａ４



構造Ｉ－Ａ５



構造Ｉ－Ａ６

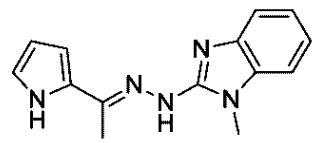
【００５８】

構造Ｉ－Ａ４、構造Ｉ－Ａ５、及び構造Ｉ－Ａ６において、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、式Ｉについて上記で定義された通りである。また、構造Ｉ－Ａ４において、Ｒ８は、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキニル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換シクロアルキル、または置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキルであり得る。

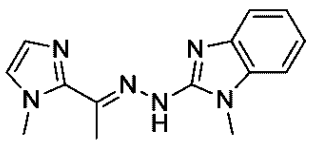
【００５９】

構造Ｉ－Ａの例には、以下の化合物が含まれる：

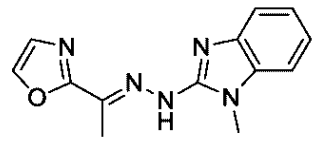
【化３７】



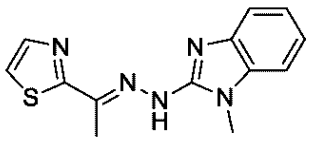
化合物ＳＩ－３



化合物ＳＩ－４

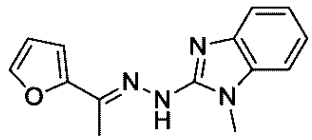


化合物ＳＩ－５

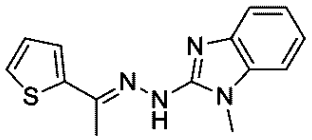


化合物ＳＩ－６

【化３８】



化合物ＳＩ－７

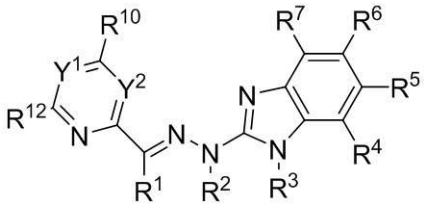


化合物ＳＩ－８

【００６０】

いくつかの例では、式Ｉは構造Ｉ－Ｂによって表される：

【化３９】



構造Ｉ－Ｂ

【００６１】

構造Ｉ－Ｂにおいて、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、式Ｉについて上記で定義された通りである。

【００６２】

また、構造Ｉ－Ｂにおいて、Ｙ１及びＹ２は、それぞれ独立して、ＣＲまたはＮから選択される。Ｒは、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキニル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換シクロアルキル、または置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキルである。任意に、Ｒは水素またはハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）である。

【００６３】

また、構造Ｉ－Ｂにおいて、Ｒ１０及びＲ１２は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。任意に、Ｒ１０及びＲ１２は、水素またはハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）から選択される。

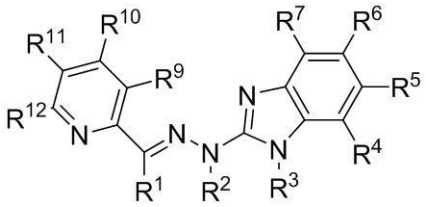
【００６４】

更に、構造Ｉ－Ｂにおいて、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ１０、Ｒ１２、及びＲのうちの少なくとも１つは（Ｙ１またはＹ２がＣＲである場合に）水素以外である。

【００６５】

構造Ｉ－Ｂのいくつかの例では、Ｙ１及びＹ２はいずれとも、ピリジンが形成されるようにＣＨであり得る。例えば、構造Ｉ－Ｂの化合物は、構造Ｉ－Ｂ１によって表され得る：

【化４０】



構造Ｉ－Ｂ１

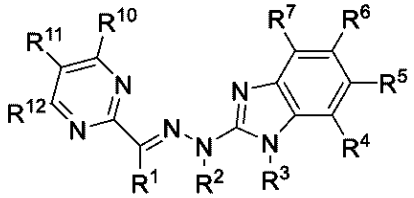
【００６６】

構造Ｉ－Ｂ１において、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ１０、及びＲ１２は、式Ｉ－Ｂについて上記で定義された通りである。Ｒ９及びＲ１１は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され得る。

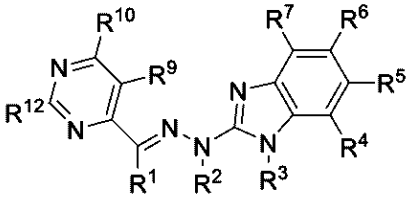
【００６７】

構造Ｉ－Ｂのいくつかの例では、Ｙ１またはＹ２は、ピリミジンが形成されるようにＮであり得る。例えば、構造Ｉ－Ｂの化合物は、構造Ｉ－Ｂ２または構造Ｉ－Ｂ３によって表され得る：

【化４１】



構造Ｉ－Ｂ２



構造Ｉ－Ｂ３

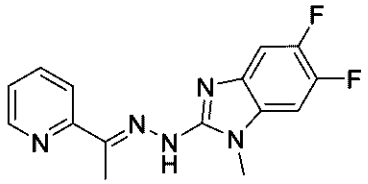
【００６８】

構造Ｉ－Ｂ２において、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ１０、Ｒ１１、及びＲ１２は、式Ｉ－Ｂ１について上記で定義された通りである。構造Ｉ－Ｂ３において、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ９、Ｒ１０、及びＲ１２は、式Ｉ－Ｂ１について上記で定義された通りである。

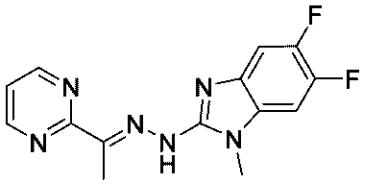
【００６９】

構造Ｉ－Ｂの例には、以下の化合物が含まれる：

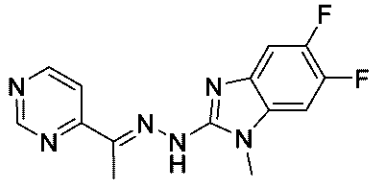
【化４２】



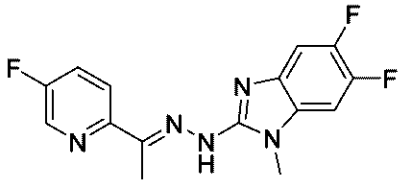
化合物ＳＩ－９



化合物ＳＩ－１０

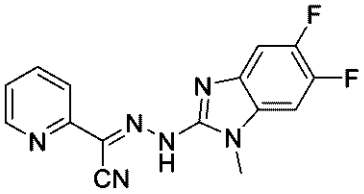


化合物ＳＩ－１１

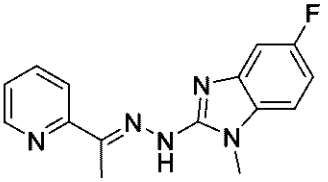


化合物ＳＩ－１２

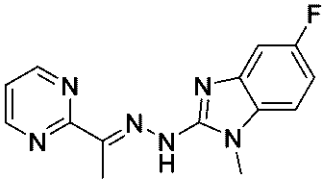
【化４３】



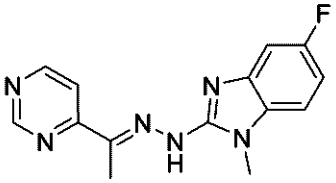
化合物ＳＩ－１３



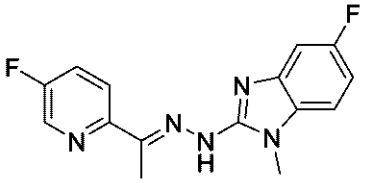
化合物ＳＩ－１４



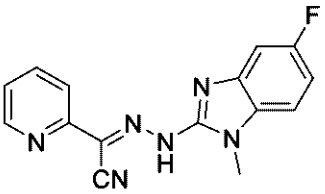
化合物ＳＩ－１５



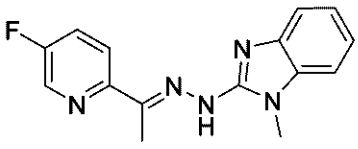
化合物ＳＩ－１６



化合物ＳＩ－１７



化合物ＳＩ－１８

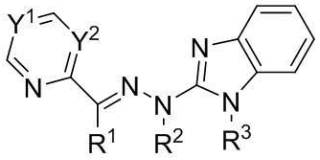


化合物ＳＩ－２１

【００７０】

いくつかの例では、式Ｉは構造Ｉ－Ｃによって表される：

【化４４】



構造Ｉ－Ｃ

【００７１】

構造Ｉ－Ｃにおいて、Ｙ１及びＹ２は、それぞれ独立して、ＣＨまたはＮから選択される。任意に、Ｙ１及びＹ２のうちの少なくとも１つはＮである。

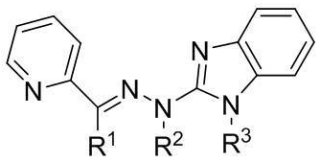
【００７２】

また、式Ｉ－Ｃにおいて、Ｒ１、Ｒ２、及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択される。

【００７３】

構造Ｉ－Ｃのいくつかの例では、Ｙ１及びＹ２はいずれとも、ピリジンが形成されるようにＣＨであり得る。例えば、構造Ｉ－Ｃの化合物は、構造Ｉ－Ｃ１によって表され得る：

【化４５】



構造Ｉ－Ｃ１

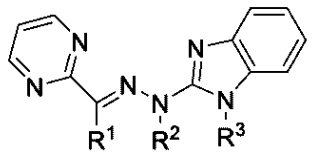
【００７４】

構造Ｉ－Ｃ１において、Ｒ１、Ｒ２、及びＲ３は、構造Ｉ－Ｃについて上記で定義された通りである。

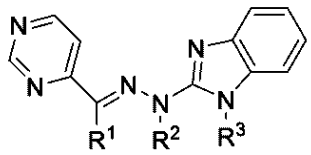
【００７５】

構造Ｉ－Ｃのいくつかの例では、Ｙ１またはＹ２は、ピリミジンが形成されるようにＮであり得る。例えば、構造Ｉ－Ｃの化合物は、構造Ｉ－Ｃ２または構造Ｉ－Ｃ３によって表され得る：

【化４６】



構造Ｉ－Ｃ２



構造Ｉ－Ｃ３

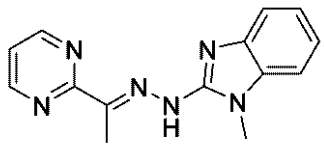
【００７６】

構造Ｉ－Ｃ２及び構造Ｉ－Ｃ３において、Ｒ１、Ｒ２、及びＲ３は、構造Ｉ－Ｃについて上記で定義された通りである。

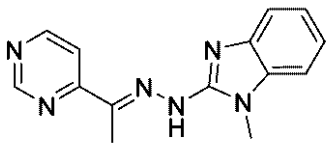
【００７７】

構造Ｉ－Ｃの例には、以下の化合物が含まれる：

【化４７】



化合物ＳＩ－１９

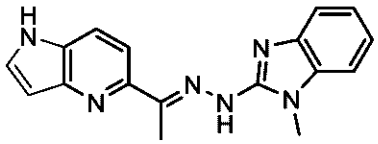


化合物ＳＩ－２０

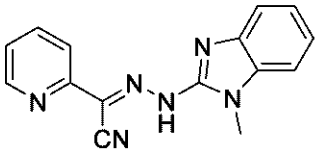
【００７８】

構造Ｉの更なる例には、以下の化合物が含まれる：

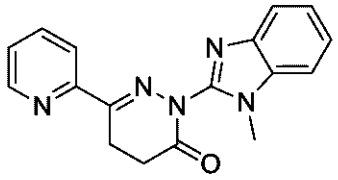
【化４８】



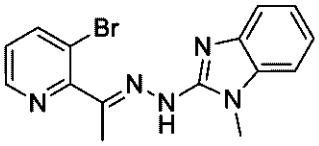
化合物１



化合物ＳＩ－２２

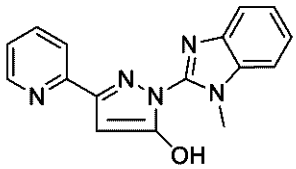


化合物ＳＩ－Ｄ－０１

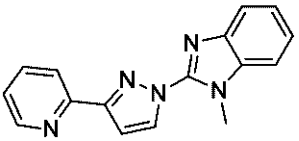


化合物ＳＩ－Ｅ－０１Ｐ

【化４９】



化合物ＳＩ－Ｆ－０１

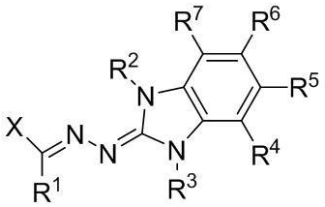


化合物ＳＩ－Ｈ－０１

【００７９】

いくつかの場合では、本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターは、互変異性体として存在し得る。全ての互変異性体が、本明細書に提示される化合物の範囲内に含まれる。例えば、式ＩによるＳＲＣモジュレーターは、式Ｉ（Ｔ）、すなわち、式Ｉ（互変異性体）：

【化５０】



及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される互変異性体として存在し得る。

【００８０】

式Ｉ（Ｔ）において、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。

【００８１】

また、式Ｉ（Ｔ）において、Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。

【００８２】

また、式Ｉ（Ｔ）において、Ｒ２及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択される。任意に、Ｒ２及びＲ３は、それぞれ、水素及びメチルから選択される。

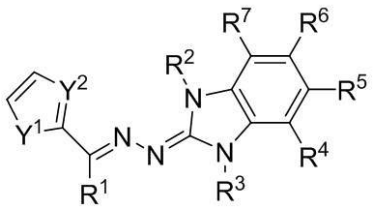
【００８３】

式Ｉ（Ｔ）のいくつかの例では、Ｘがピリジンまたはピリミジンである場合、ピリジンまたはピリミジンは置換されている（すなわち、ピリジンまたはピリミジンは、少なくとも１つの非水素置換基を含有する）。式Ｉ（Ｔ）のいくつかの例では、Ｘがピリジンまたはピリミジンである場合、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７のうちの少なくとも１つは水素以外である。式Ｉ（Ｔ）のいくつかの例では、Ｘがピリジンまたはピリミジンである場合、Ｒ１は、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、または置換もしくは非置換シクロアルキル以外である。

【００８４】

いくつかの例では、式Ｉ（Ｔ）は構造Ｉ－Ａ（Ｔ）によって表される：

【化５１】



構造Ｉ－Ａ（Ｔ）

【００８５】

構造Ｉ－Ａ（Ｔ）において、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、式Ｉ（Ｔ）について上記で定義された通りである。

【００８６】

また、構造Ｉ－Ａ（Ｔ）において、Ｙ１は、ＣＲＲ、ＮＲ、Ｏ、またはＳである。

【００８７】

また、構造Ｉ－Ａ（Ｔ）において、Ｙ２は、ＣＲまたはＮである。

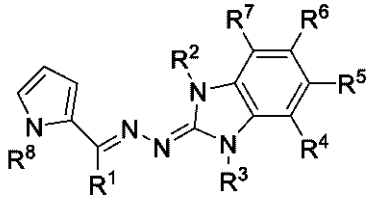
【００８８】

Ｙ１及び／またはＹ２がＮＲ、ＣＲ、またはＣＲＲである場合、各Ｒは、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルであり得る。任意に、各Ｒは、水素または置換もしくは非置換アルキル（例えば、メチル）である。

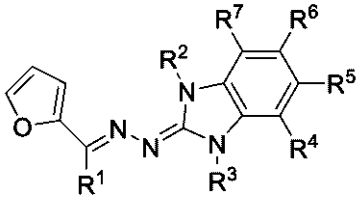
【００８９】

構造Ｉ－Ａ（Ｔ）のいくつかの例では、Ｙ１はヘテロ原子であり得、Ｙ２はＣＨであり得る。例えば、構造Ｉ－Ａ（Ｔ）の化合物は、構造Ｉ－Ａ１（Ｔ）、構造Ｉ－Ａ２（Ｔ）、または構造Ｉ－Ａ３（Ｔ）によって表され得る：

【化５２】

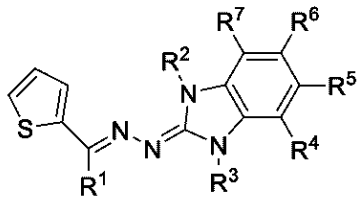


構造Ｉ－Ａ１（Ｔ）



構造Ｉ－Ａ２（Ｔ）

【化５３】



構造Ｉ－Ａ３（Ｔ）

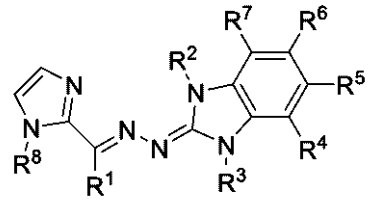
【００９０】

構造Ｉ－Ａ１（Ｔ）、構造Ｉ－Ａ２（Ｔ）、及び構造Ｉ－Ａ３（Ｔ）において、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、式Ｉ（Ｔ）について上記で定義された通りである。また、構造Ｉ－Ａ１（Ｔ）において、Ｒ８は、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキニル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換シクロアルキル、または置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキルであり得る。

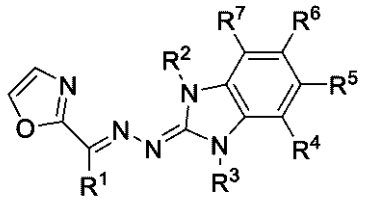
【００９１】

構造Ｉ－Ａ（Ｔ）のいくつかの例では、Ｙ１及びＹ２はいずれともヘテロ原子であり得る。例えば、構造Ｉ－Ａ（Ｔ）の化合物は、構造Ｉ－Ａ４（Ｔ）、構造Ｉ－Ａ５（Ｔ）、または構造Ｉ－Ａ６（Ｔ）によって表され得る：

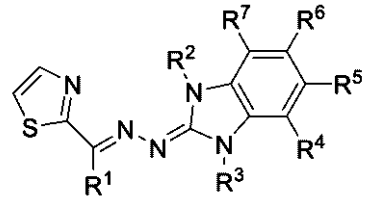
【化５４】



構造Ｉ－Ａ４（Ｔ）



構造Ｉ－Ａ５（Ｔ）



構造Ｉ－Ａ６（Ｔ）

【００９２】

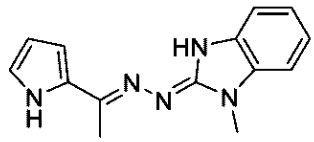
構造Ｉ－Ａ４（Ｔ）、構造Ｉ－Ａ５（Ｔ）、及び構造Ｉ－Ａ６（Ｔ）において、Ｒ１、Ｒ

２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、式Ｉ（Ｔ）について上記で定義された通りである。また、構造Ｉ－Ａ４（Ｔ）において、Ｒ８は、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキニル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換シクロアルキル、または置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキルであり得る。

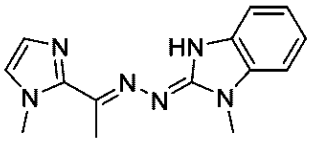
【００９３】

構造Ｉ－Ａ（Ｔ）の例には、以下の化合物が含まれる：

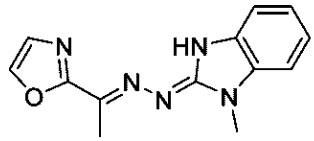
【化５５】



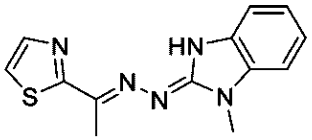
化合物ＳＩ－３（Ｔ）



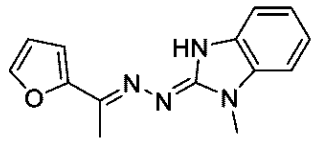
化合物ＳＩ－４（Ｔ）



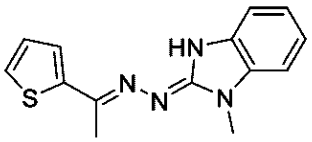
化合物ＳＩ－５（Ｔ）



化合物ＳＩ－６（Ｔ）



化合物ＳＩ－７（Ｔ）

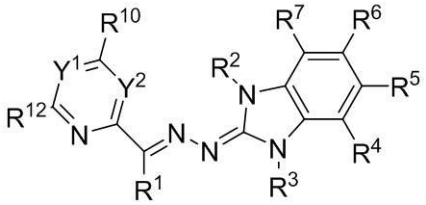


化合物ＳＩ－８（Ｔ）

【００９４】

いくつかの例では、式Ｉ（Ｔ）は構造Ｉ－Ｂ（Ｔ）によって表される：

【化５６】



構造Ｉ－Ｂ（Ｔ）

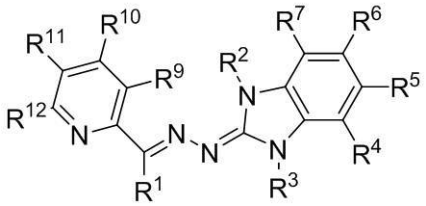
【００９５】

構造Ｉ－Ｂ（Ｔ）において、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、式Ｉ（Ｔ）について上記で定義された通りである。

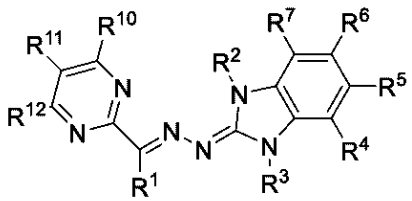
【００９６】

また、構造Ｉ－Ｂ（Ｔ）において、Ｙ１及びＹ２は、それぞれ独立して、ＣＲまたはＮから選択される。Ｒは、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキニル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換シクロアルキル、または置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキルである。任意に、Ｒは水素またはハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）である。

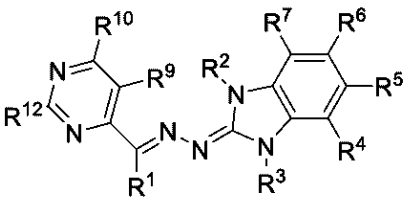
【００９７】
また、構造Ｉ－Ｂ（Ｔ）において、Ｒ１０及びＲ１２は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。任意に、Ｒ１０及びＲ１２は、水素またはハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）から選択される。
【００９８】
更に、構造Ｉ－Ｂ（Ｔ）において、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ１０、Ｒ１２、及びＲのうちの少なくとも１つは（Ｙ１またはＹ２がＣＲである場合に）水素以外である。
【００９９】
構造Ｉ－Ｂ（Ｔ）のいくつかの例では、Ｙ１及びＹ２はいずれとも、ピリジンが形成されるようにＣＨであり得る。例えば、構造Ｉ－Ｂ（Ｔ）の化合物は、構造Ｉ－Ｂ１（Ｔ）によって表され得る：
【化５７】



構造Ｉ－Ｂ１（Ｔ）
【０１００】
構造Ｉ－Ｂ（Ｔ）において、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ１０、及びＲ１２は、構造Ｉ－Ｂ１（Ｔ）について上記で定義された通りである。Ｒ９及びＲ１１は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され得る。
【０１０１】
構造Ｉ－Ｂ（Ｔ）のいくつかの例では、Ｙ１またはＹ２は、ピリミジンが形成されるようにＮであり得る。例えば、構造Ｉ－Ｂ（Ｔ）の化合物は、構造Ｉ－Ｂ２（Ｔ）または構造Ｉ－Ｂ３（Ｔ）によって表され得る：
【化５８】



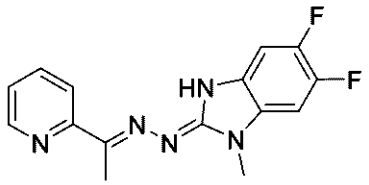
構造Ｉ－Ｂ２（Ｔ）

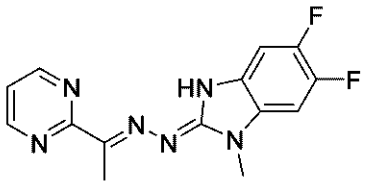


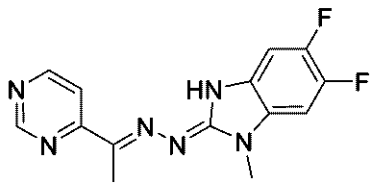
構造Ｉ－Ｂ３（Ｔ）

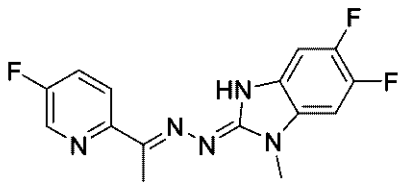
【０１０２】
構造Ｉ－Ｂ２（Ｔ）において、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ１０、Ｒ１１、及びＲ１２は、構造Ｉ－Ｂ１（Ｔ）について上記で定義された通りである。構造Ｉ－Ｂ３（Ｔ）において、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ９、Ｒ１０、及びＲ１２は、構造Ｉ－Ｂ１（Ｔ）について上記で定義された通りである。

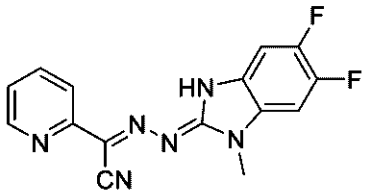
【０１０３】
構造Ｉ－Ｂ（Ｔ）の例には、以下の化合物が含まれる：
【化５９】

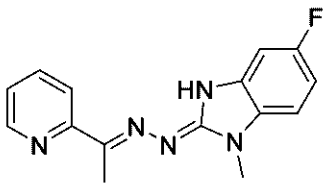

化合物ＳＩ－９（Ｔ）

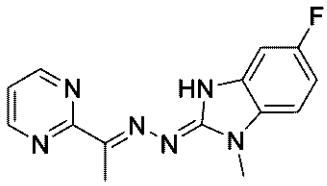

化合物ＳＩ－１０（Ｔ）

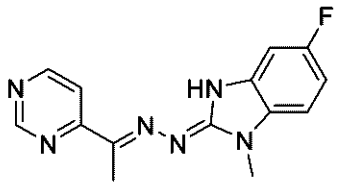

化合物ＳＩ－１１（Ｔ）

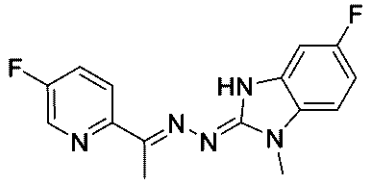

化合物ＳＩ－１２（Ｔ）

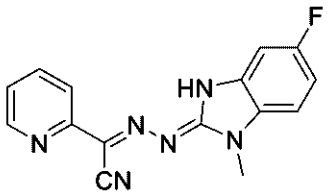

化合物ＳＩ－１３（Ｔ）

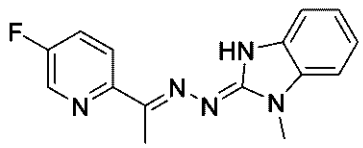

化合物ＳＩ－１４（Ｔ）

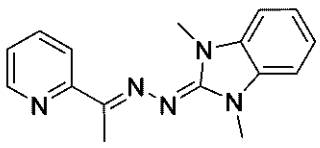

化合物ＳＩ－１５（Ｔ）


化合物ＳＩ－１６（Ｔ）

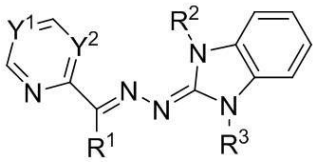

化合物ＳＩ－１７（Ｔ）


化合物ＳＩ－１８（Ｔ）


化合物ＳＩ－２１（Ｔ）


化合物ＳＩ－２－ＮＭｅ

【０１０４】
いくつかの例では、式Ｉ（Ｔ）は構造Ｉ－Ｃ（Ｔ）によって表される：
【化６０】



構造Ｉ－Ｃ（Ｔ）

【０１０５】

構造Ｉ－Ｃ（Ｔ）において、Ｙ１及びＹ２は、それぞれ独立して、ＣＨまたはＮから選択される。任意に、Ｙ１及びＹ２のうちの少なくとも１つはＮである。

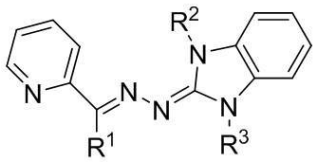
【０１０６】

また、式Ｉ－Ｃ（Ｔ）において、Ｒ１、Ｒ２、及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択される。

【０１０７】

構造Ｉ－Ｃ（Ｔ）のいくつかの例では、Ｙ１及びＹ２はいずれとも、ピリジンが形成されるようにＣＨであり得る。例えば、構造Ｉ－Ｃ（Ｔ）の化合物は、構造Ｉ－Ｃ１（Ｔ）によって表され得る：

【化６１】



構造Ｉ－Ｃ１（Ｔ）

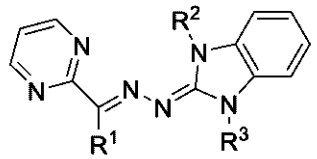
【０１０８】

構造Ｉ－Ｃ１（Ｔ）において、Ｒ１、Ｒ２、及びＲ３は、構造Ｉ－Ｃ（Ｔ）について上記で定義された通りである。

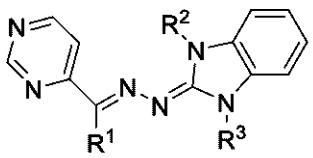
【０１０９】

構造Ｉ－Ｃ（Ｔ）のいくつかの例では、Ｙ１またはＹ２は、ピリミジンが形成されるようにＮであり得る。例えば、構造Ｉ－Ｃ（Ｔ）の化合物は、構造Ｉ－Ｃ２（Ｔ）または構造Ｉ－Ｃ３（Ｔ）によって表され得る：

【化６２】



構造Ｉ－Ｃ２（Ｔ）



構造Ｉ－Ｃ３（Ｔ）

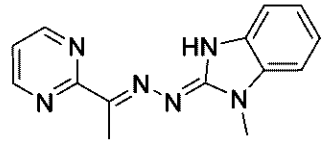
【０１１０】

構造Ｉ－Ｃ２（Ｔ）及び構造Ｉ－Ｃ３（Ｔ）において、Ｒ１、Ｒ２、及びＲ３は、構造Ｉ－Ｃ（Ｔ）について上記で定義された通りである。

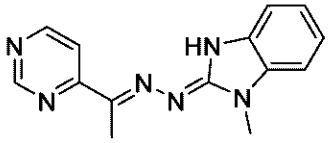
【０１１１】

構造Ｉ－Ｃ（Ｔ）の例には、以下の化合物が含まれる：

【化６３】



化合物ＳＩ－１９（Ｔ）

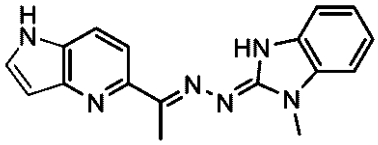


化合物ＳＩ－２０（Ｔ）

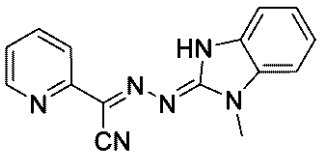
【０１１２】

構造Ｉ（Ｔ）の更なる例には、以下の化合物が含まれる：

【化６４】



化合物１（Ｔ）



化合物ＳＩ－２２（Ｔ）

【０１１３】

任意に、本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターは、互変異性形態の混合物として存在し得る。例えば、本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターは、式Ｉによる化合物と式Ｉ（Ｔ）による化合物との混合物を含み得る。いくつかの例では、本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターは、互変異性混合物に存在し得、式Ｉ（Ｔ）による化合物が、存在する主要な互変異性体であり、式Ｉによる化合物が、存在するより少ない互変異性体である。本明細書で使用される場合、存在する主要な互変異性体は、ＳＲＣモジュレーターの５０重量％を超える量（例えば、６０重量％以上、７０重量％以上、８０重量％以上、９０重量％以上、または９５重量％以上）で存在する互変異性体を指す。本明細書で使用される場合、存在するより少ない互変異性体は、ＳＲＣモジュレーターの５０重量％未満の量（例えば、４０重量％以下、３０重量％以下、２０重量％以下、１０重量％以下、または５重量％以下）で存在する互変異性体を指す。他の例では、本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターは、互変異性混合物に存在し得、式Ｉによる化合物が、存在する主要な互変異性体であり、式Ｉ（Ｔ）による化合物が、存在するより少ない互変異性体である。

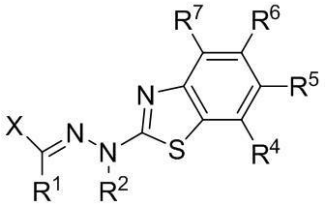
【０１１４】

本明細書には図示されていないが、互変異性形態及び混合物は、以下に示される式ＩＩ、式ＩＩＩ、式Ｖ、式ＶＩＩ、式Ｘ、式ＸＩ、式ＸＩＩＩ、及び式ＸＩＶについて企図される。

【０１１５】

本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターの種類は、式ＩＩ：

【化６５】



及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される。

【０１１６】

式ＩＩにおいて、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。

【０１１７】

また、式ＩＩにおいて、Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。

【０１１８】

また、式ＩＩにおいて、Ｒ２は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである。任意に、Ｒ２は水素またはメチルである。

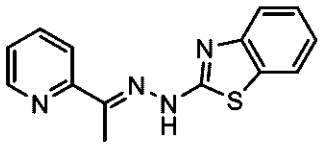
【０１１９】

任意に、式ＩＩにおいて、Ｒ１及びＲ２は組み合わさって、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、または置換もしくは非置換ヘテロアリールを形成する。

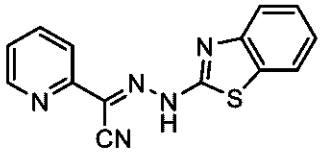
【０１２０】

式ＩＩの例には、以下の化合物が含まれる：

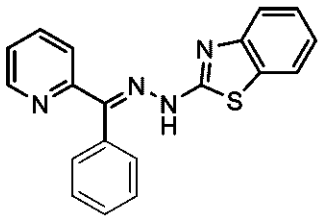
【化６６】



化合物２



化合物３

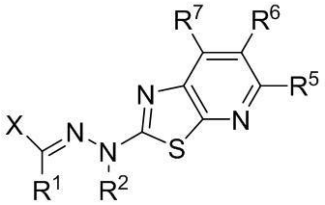


化合物４

【０１２１】

本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターの種類は、式ＩＩＩ：

【化６７】



及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される。

【０１２２】

式ＩＩＩにおいて、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、

置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。

【０１２３】

また、式ＩＩＩにおいて、Ｒ１、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。

【０１２４】

また、式ＩＩＩにおいて、Ｒ２は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである。任意に、Ｒ２は水素またはメチルである。

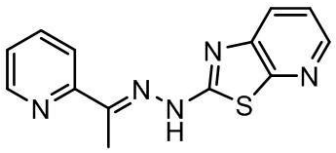
【０１２５】

任意に、式ＩＩＩにおいて、Ｒ１及びＲ２は組み合わさって、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、または置換もしくは非置換ヘテロアリールを形成する。

【０１２６】

式ＩＩＩの例には、以下の化合物が含まれる：

【化６８】

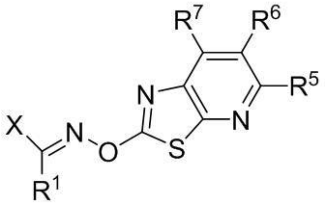


化合物５

【０１２７】

本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターの種類は、式ＩＶ：

【化６９】

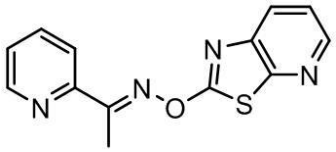


及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される。

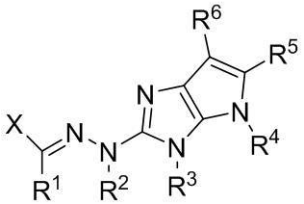
【０１２８】

式ＩＶにおいて、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。

【０１２９】
また、式ＩＶにおいて、Ｒ１、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。
【０１３０】
式ＩＶの例には、以下の化合物が含まれる：
【化７０】

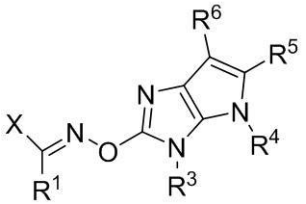


化合物６
【０１３１】
本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターの種類は、式Ｖ：
【化７１】

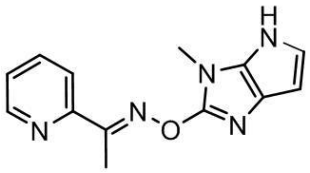


及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される。
【０１３２】
式Ｖにおいて、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。
【０１３３】
また、式Ｖにおいて、Ｒ１、Ｒ５、及びＲ６は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。
【０１３４】
また、式Ｖにおいて、Ｒ２、Ｒ３、及びＲ４は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択される。任意に、Ｒ２、Ｒ３、及

びＲ４は、それぞれ、水素及びメチルから選択される。
【０１３５】
任意に、式Ｖにおいて、Ｒ１及びＲ２は組み合わさって、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、または置換もしくは非置換ヘテロアリールを形成する。
【０１３６】
本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターの種類は、式ＶＩ：
【化７２】

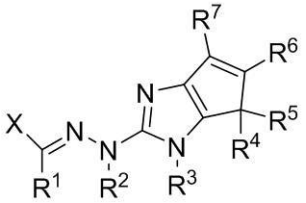


及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される。
【０１３７】
式ＶＩにおいて、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。
【０１３８】
また、式ＶＩにおいて、Ｒ１、Ｒ５、及びＲ６は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。
【０１３９】
また、式ＶＩにおいて、Ｒ３及びＲ４は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択される。任意に、Ｒ３及びＲ４は、それぞれ、水素及びメチルから選択される。
【０１４０】
式ＶＩの例には、以下の化合物が含まれる：
【化７３】

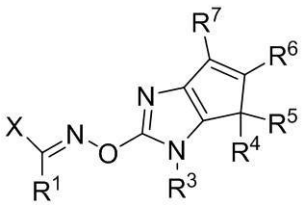


化合物７
【０１４１】

本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターの種類は、式ＶＩＩ：
【化７４】



及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される。
【０１４２】
式ＶＩＩにおいて、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。
【０１４３】
また、式ＶＩＩにおいて、Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。
【０１４４】
また、式ＶＩＩにおいて、Ｒ２及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択される。任意に、Ｒ２及びＲ３は、それぞれ、水素及びメチルから選択される。
【０１４５】
任意に、式ＶＩＩにおいて、Ｒ１及びＲ２は組み合わさって、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、または置換もしくは非置換ヘテロアリールを形成する。
【０１４６】
本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターの種類は、式ＶＩＩＩ：
【化７５】



及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される。
【０１４７】
式ＶＩＩＩにおいて、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非

置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。

【０１４８】

また、式ＶＩＩＩにおいて、Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。

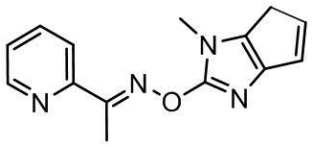
【０１４９】

また、式ＶＩＩＩにおいて、Ｒ３は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである。任意に、Ｒ３は水素またはメチルである。

【０１５０】

式ＶＩＩＩの例には、以下の化合物が含まれる：

【化７６】

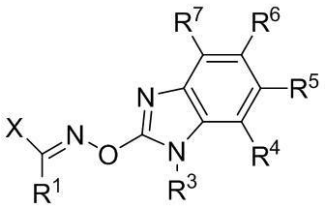


化合物８

【０１５１】

本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターの種類は、式ＩＸ：

【化７７】

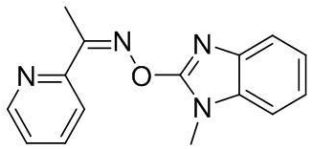


及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される。

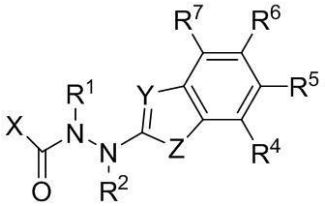
【０１５２】

式ＩＸにおいて、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイ

ミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。
【０１５３】
また、式ＩＸにおいて、Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。
【０１５４】
また、式ＩＸにおいて、Ｒ３は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである。任意に、Ｒ３は水素またはメチルである。
【０１５５】
式ＩＸの例には、以下の化合物が含まれる：
【化７８】



化合物ＳＩ－Ｂ－０１
【０１５６】
ＳＲＣモジュレーターの更なる例示的な種類は、式Ｘ、式ＸＩ、式ＸＩＩ、式ＸＩＩＩ、及び式ＸＩＶとして以下に提供される。
【０１５７】
本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターの種類は、式Ｘ：
【化７９】



及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される。
【０１５８】
式Ｘにおいて、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。
【０１５９】
また、式Ｘにおいて、Ｙは、Ｎ、Ｐ、及びＢからなる群から選択される。
【０１６０】
また、式Ｘにおいて、Ｚは、ＮＲ３、ＰＲ３、ＢＲ３、Ｏ、及びＳからなる群から選択さ

れる。Ｒ３は、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールである。任意に、Ｒ３は水素またはメチルである。

【０１６１】

また、式Ｘにおいて、Ｒ１及びＲ２は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択される。任意に、Ｒ１及びＲ２は、それぞれ、水素及びメチルから選択される。

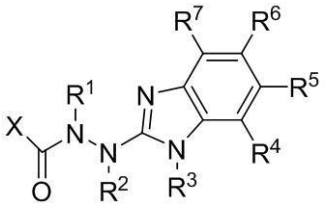
【０１６２】

また、式Ｘにおいて、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。

【０１６３】

いくつかの例では、式Ｘは構造Ｘ－Ａによって表される：

【化８０】



構造Ｘ－Ａ

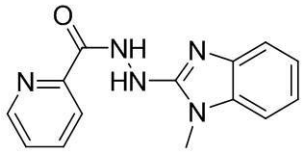
【０１６４】

構造Ｘ－Ａにおいて、Ｘ、Ｒ１、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、式Ｘについて上記で定義された通りである。

【０１６５】

式Ｘの例には、以下の化合物が含まれる：

【化８１】

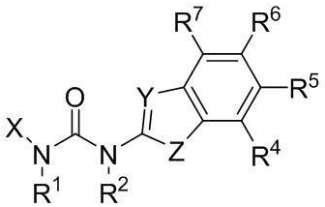


化合物ＳＩ－Ｃ－０１

【０１６６】

本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターの種類は、式ＸＩ：

【化８２】



及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される。

【０１６７】

式ＸＩにおいて、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換

ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。

【０１６８】

また、式ＸＩにおいて、Ｙは、Ｎ、Ｐ、及びＢからなる群から選択される。

【０１６９】

また、式ＸＩにおいて、Ｚは、ＮＲ^{3}、ＰＲ^{3}、ＢＲ^{3}、Ｏ、及びＳからなる群から選択される。Ｒ^{3}は、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールである。任意に、Ｒ^{3}は水素またはメチルである。

【０１７０】

式ＸＩにおいて、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択される。任意に、Ｒ^{1}及びＲ^{2}は、それぞれ、水素及びメチルから選択される。

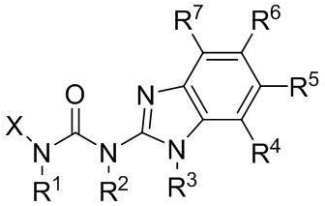
【０１７１】

また、式ＸＩにおいて、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{6}、及びＲ^{7}は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。

【０１７２】

いくつかの例では、式ＸＩは構造ＸＩ－Ａによって表される：

【化８３】



構造ＸＩ－Ａ

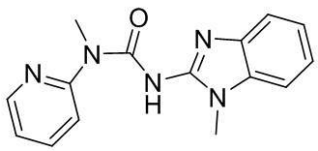
【０１７３】

構造ＸＩ－Ａにおいて、Ｘ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{6}、及びＲ^{7}は、式ＸＩについて上記で定義された通りである。

【０１７４】

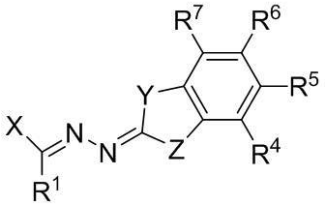
式ＸＩの例には、以下の化合物が含まれる：

【化８４】

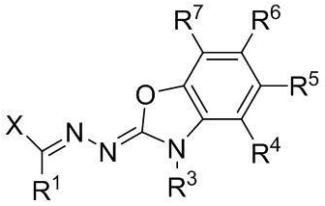


化合物ＳＩ－Ｌ－０１

【０１７５】
本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターの種類は、式ＸＩＩ：
【化８５】



及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される。
【０１７６】
式ＸＩＩにおいて、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。
【０１７７】
また、式ＸＩＩにおいて、Ｙは、ＮＲ^2、ＰＲ^2、ＢＲ^2、Ｏ、及びＳからなる群から選択される。Ｒ^{2}は、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールである。任意に、Ｒ^{2}は水素またはメチルである。
【０１７８】
また、式ＸＩＩにおいて、Ｚは、ＮＲ^3、ＰＲ^3、ＢＲ^3、Ｏ、及びＳからなる群から選択される。Ｒ^{3}は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである。任意に、Ｒ^{3}は水素またはメチルである。
【０１７９】
また、式ＸＩＩにおいて、Ｒ^1、Ｒ^4、Ｒ^5、Ｒ^6、及びＲ^{7}は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。
【０１８０】
いくつかの例では、式ＸＩＩは構造ＸＩＩ－Ａによって表される：
【化８６】



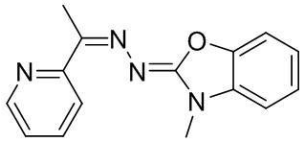
構造ＸＩＩ－Ａ
【０１８１】

構造ＸＩＩ－Ａにおいて、Ｘ、Ｒ１、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、式ＸＩＩについて上記で定義された通りである。

【０１８２】

式ＸＩＩの例には、以下の化合物が含まれる：

【化８７】

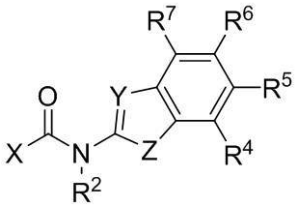


化合物９

【０１８３】

本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターの種類は、式ＸＩＩＩ：

【化８８】



及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される。

【０１８４】

式ＸＩＩＩにおいて、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、または置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾールである。

【０１８５】

また、式ＸＩＩＩにおいて、Ｙは、Ｎ、Ｐ、及びＢからなる群から選択される。

【０１８６】

また、式ＸＩＩＩにおいて、Ｚは、ＮＲ３、ＰＲ３、ＢＲ３、Ｏ、及びＳからなる群から選択される。Ｒ３は、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールである。任意に、Ｒ３は水素またはメチルである。

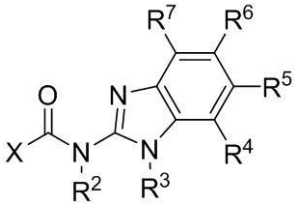
【０１８７】

また、式ＸＩＩＩにおいて、Ｒ２は、水素、置換もしくは非置換アルキル、及び置換もしくは非置換アリールである。任意に、Ｒ２は水素またはメチルである。

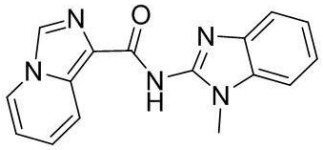
【０１８８】

また、式ＸＩＩＩにおいて、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。

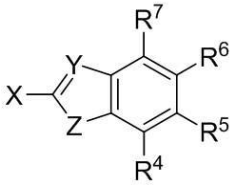
【０１８９】
いくつかの例では、式ＸＩＩＩは構造ＸＩＩＩ－Ａによって表される：
【化８９】



構造ＸＩＩＩ－Ａ
【０１９０】
構造ＸＩＩＩ－Ａにおいて、Ｘ、Ｒ２、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、式ＸＩＩＩについて上記で定義された通りである。
【０１９１】
式ＸＩＩＩの例には、以下の化合物が含まれる：
【化９０】



化合物１０
【０１９２】
本明細書に記載のＳＲＣモジュレーターの種類は、式ＸＩＶ：
【化９１】



及びその薬学的に許容される塩またはプロドラッグによって表される。
【０１９３】
式ＸＩＶにおいて、Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである。任意に、Ｘは、置換もしくは非置換ピロール、置換もしくは非置換イミダゾール、置換もしくは非置換チアゾール、置換もしくは非置換ベンゾチアゾール、置換もしくは非置換チオフェン、置換もしくは非置換オキサゾール、置換もしくは非置換フラン、置換もしくは非置換ピリジン、置換もしくは非置換ピリミジン、置換もしくは非置換ピラジン、置換もしくは非置換チアゾロピリジン、置換もしくは非置換イミダゾピリジン、置換もしくは非置換ピロロイミダゾール、置換もしくは非置換シクロペンタイミダゾール、置換もしくは非置換ピリドピリダジノン、置換もしくは非置換ピリドトリアゼピン、置換もしくは非置換ナフチリジン、置換もしくは非置換ピリドピリミジン、置換もしくは非置換ピリドオキサゼピン、置換もしくは非置換ピリドジアゼピン、または置換もしくは非置換ピリドアゼピンである。
【０１９４】
また、式ＸＩＶにおいて、Ｙは、Ｎ、Ｐ、及びＢからなる群から選択される。
【０１９５】

また、式ＸＩＶにおいて、Ｚは、ＮＲ３、ＰＲ３、ＢＲ３、Ｏ、及びＳからなる群から選択される。Ｒ３は、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールである。任意に、Ｒ３は水素またはメチルである。

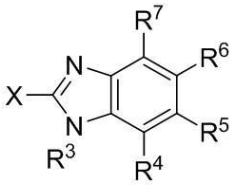
【０１９６】

また、式ＸＩＶにおいて、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン（例えば、ブロモ、クロロ、フルオロ、またはヨード）、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される。

【０１９７】

いくつかの例では、式ＸＩＶは構造ＸＩＶ－Ａによって表される：

【化９２】



構造ＸＩＶ－Ａ

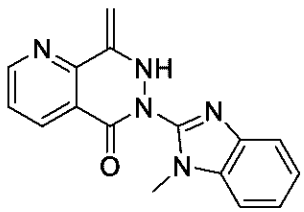
【０１９８】

構造ＸＩＶ－Ａにおいて、Ｘ、Ｒ３、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、式ＸＩＶについて上記で定義された通りである。

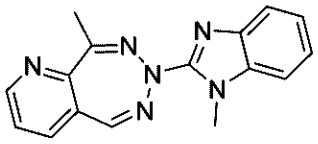
【０１９９】

式ＸＩＶの例には、以下の化合物が含まれる：

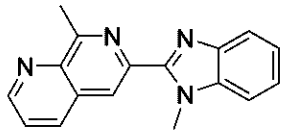
【化９３】



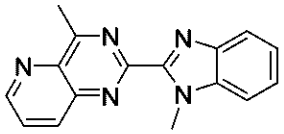
化合物ＳＩ－Ｉ－０１



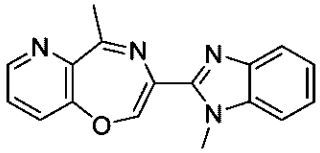
化合物ＳＩ－Ｋ－０１



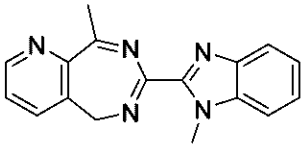
化合物１１



化合物１２

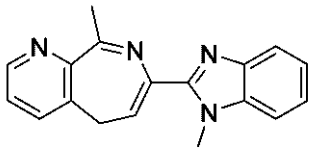


化合物１３



化合物１４

【化９４】



化合物１５

【０２００】
本明細書で使用される場合、アルキル、アルケニル、及びアルキニルという用語には、直鎖及び分枝鎖の一価置換基が含まれる。例には、メチル、エチル、イソブチル、３－ブチニルなどが含まれる。本明細書に記載の化合物及び方法で有用なこれらの基の範囲には、Ｃ１～Ｃ２０アルキル、Ｃ２～Ｃ２０アルケニル、及びＣ２～Ｃ２０アルキニルが含まれる。本明細書に記載の化合物及び方法で有用なこれらの基の範囲には、Ｃ１～Ｃ１２アルキル、Ｃ２～Ｃ１２アルケニル、Ｃ２～Ｃ１２アルキニル、Ｃ１～Ｃ６アルキル、Ｃ２～Ｃ６アルケニル、Ｃ２～Ｃ６アルキニル、Ｃ１～Ｃ４アルキル、Ｃ２～Ｃ４アルケニル、及びＣ２～Ｃ４アルキニルが含まれる。
【０２０１】
ヘテロアルキル、ヘテロアルケニル、及びヘテロアルキニルは、アルキル、アルケニル、及びアルキニルと同様に定義されるが、骨格内にＯ、Ｓ、もしくはＮヘテロ原子またはそれらの組み合わせを含有し得る。本明細書に記載の化合物及び方法で有用なこれらの基の範囲には、Ｃ１～Ｃ２０ヘテロアルキル、Ｃ２～Ｃ２０ヘテロアルケニル、及びＣ２～Ｃ２０ヘテロアルキニルが含まれる。本明細書に記載の化合物及び方法で有用なこれらの基の追加の範囲には、Ｃ１～Ｃ１２ヘテロアルキル、Ｃ２～Ｃ１２ヘテロアルケニル、Ｃ２～Ｃ１２ヘテロアルキニル、Ｃ１～Ｃ６ヘテロアルキル、Ｃ２～Ｃ６ヘテロアルケニル、Ｃ２～Ｃ６ヘテロアルキニル、Ｃ１～Ｃ４ヘテロアルキル、Ｃ２～Ｃ４ヘテロアルケニル、及びＣ２～Ｃ４ヘテロアルキニルが含まれる。
【０２０２】
シクロアルキル、シクロアルケニル、及びシクロアルキニルという用語には、単一の環状環または複数の縮合環を有する環状アルキル基が含まれる。例には、シクロヘキシル、シクロペンチルエチル、及びアダマンタニルが含まれる。本明細書に記載の化合物及び方法で有用なこれらの基の範囲には、Ｃ３～Ｃ２０シクロアルキル、Ｃ３～Ｃ２０シクロアルケニル、及びＣ３～Ｃ２０シクロアルキニルが含まれる。本明細書に記載の化合物及び方法で有用なこれらの基の追加の範囲には、Ｃ５～Ｃ１２シクロアルキル、Ｃ５～Ｃ１２シクロアルケニル、Ｃ５～Ｃ１２シクロアルキニル、Ｃ５～Ｃ６シクロアルキル、Ｃ５～Ｃ６シクロアルケニル、及びＣ５～Ｃ６シクロアルキニルが含まれる。
【０２０３】
ヘテロシクロアルキル、ヘテロシクロアルケニル、及びヘテロシクロアルキニルという用語は、シクロアルキル、シクロアルケニル、及びシクロアルキニルと同様に定義されるが、環状骨格内にＯ、Ｓ、もしくはＮヘテロ原子またはそれらの組み合わせを含有し得る。本明細書に記載の化合物及び方法で有用なこれらの基の範囲には、Ｃ３～Ｃ２０ヘテロシクロアルキル、Ｃ３～Ｃ２０ヘテロシクロアルケニル、及びＣ３～Ｃ２０ヘテロシクロアルキニルが含まれる。本明細書に記載の化合物及び方法で有用なこれらの基の追加の範囲には、Ｃ５～Ｃ１２ヘテロシクロアルキル、Ｃ５～Ｃ１２ヘテロシクロアルケニル、Ｃ５～Ｃ１２ヘテロシクロアルキニル、Ｃ５～Ｃ６ヘテロシクロアルキル、Ｃ５～Ｃ６ヘテロシクロアルケニル、及びＣ５～Ｃ６ヘテロシクロアルキニルが含まれる。
【０２０４】
アリール分子には、例えば、交互の単及び二重共有結合からなるかのように番号が付けられた非局在化電子によって接続された典型的には６個の炭素原子の１つ以上の平面的セットを組み込む環状炭化水素が含まれる。アリール分子の例はベンゼンである。ヘテロアリ

ール分子は、Ｏ、Ｎ、またはＳなどのそれらの主な環状鎖に沿った置換を含む。ヘテロ原子が導入される場合、一組の５個の原子、例えば、４個の炭素及び１つのヘテロ原子が芳香族系を作り出し得る。ヘテロアリール分子の例には、フラン、ピロール、チオフェン、イミダゾール、オキサゾール、ピリジン、及びピラジンが含まれる。アリール及びヘテロアリール分子にはまた、追加の縮合環、例えば、ベンゾフラン、インドール、ベンゾチオフェン、ナフタレン、アントラセン、及びキノリンが含まれ得る。アリール及びヘテロアリール分子は、別段記述されない限り、環上の任意の位置に結合され得る。

【０２０５】

本明細書で使用されるアルコキシという用語は、単一の末端エーテル結合を介して結合したアルキル基である。本明細書で使用されるアリールオキシという用語は、単一の末端エーテル結合を介して結合したアリール基である。同様に、本明細書で使用されるアルケニルオキシ、アルキニルオキシ、ヘテロアルキルオキシ、ヘテロアルケニルオキシ、ヘテロアルキニルオキシ、ヘテロアリールオキシ、シクロアルキルオキシ、及びヘテロシクロアルキルオキシという用語は、それぞれ、単一の末端エーテル結合を介して結合したアルケニルオキシ、アルキニルオキシ、ヘテロアルキルオキシ、ヘテロアルケニルオキシ、ヘテロアルキニルオキシ、ヘテロアリールオキシ、シクロアルキルオキシ、及びヘテロシクロアルコキシ基である。

【０２０６】

本明細書で使用されるヒドロキシという用語は、式－ＯＨによって表される。

【０２０７】

本明細書で使用されるアミンまたはアミノという用語は、式：－ＮＺ１Ｚ２（式中、Ｚ１及びＺ２は、それぞれ、上述の水素、アルキル、ハロゲン化アルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、シクロアルキル、シクロアルケニル、ヘテロシクロアルキル、またはヘテロシクロアルケニル基などの本明細書に記載された置換基であり得る。

【０２０８】

本明細書で使用されるアルコキシ、アリールオキシ、アミノ、アルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアルキル、ヘテロアルケニル、ヘテロアルキニル、ヘテロアリール、シクロアルキル、またはヘテロシクロアルキル分子は置換または非置換であり得る。本明細書で使用される場合、置換されたという用語には、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、アルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアルキル、ヘテロアルケニル、ヘテロアルキニル、ヘテロアリール、シクロアルキル、またはヘテロシクロアルキルの主鎖に結合した位置へのアルコキシ、アリールオキシ、アミノ、アルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアルキル、ヘテロアルケニル、ヘテロアルキニル、ヘテロアリール、シクロアルキル、またはヘテロシクロアルキル基の付加、例えば、これらの分子のうちの１つによる水素の置き換えが含まれる。置換基の例には、ヒドロキシ、ハロゲン（例えば、Ｆ、Ｂｒ、Ｃｌ、またはＩ）、及びカルボキシル基が含まれるが、これらに限定されない。逆に、本明細書で使用される場合、非置換という用語は、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、アルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアルキル、ヘテロアルケニル、ヘテロアルキニル、ヘテロアリール、シクロアルキル、またはヘテロシクロアルキルが、置換を有しない水素の完全な補完、すなわち、その飽和レベルと等しいこと、例えば、線状デカン（－（ＣＨ２）９－ＣＨ３）を示す。

【０２０９】

ＩＩ．化合物を作製する方法

本明細書に記載の化合物は、様々な方法で調製され得る。化合物は、様々な合成方法を使用して合成され得る。これらの方法の少なくともいくつかは、合成有機化学の分野で知られている。本明細書に記載の化合物は、容易に入手可能な出発材料から調製され得る。最適な反応条件は、使用される特定の反応物または溶媒によって変わり得るが、そのような条件は、当業者によって日常的な最適化手順によって決定され得る。

【０２１０】

式Ｉ、式ＩＩ、式ＩＩＩ、式ＩＶ、式Ｖ、式ＶＩ、式ＶＩＩ、式ＶＩＩＩ、式ＩＸ、式Ｘ、式ＸＩ、式ＸＩＩ、式ＸＩＩＩ、及び式ＸＩＶ、ならびにそれらの互変異性体に対する変形は、各化合物について記載したような様々な構成成分の付加、除去、または移動を含む。同様に、１つ以上のキラル中心が分子中に存在する場合、全ての可能性のあるキラル類型が含まれる。また、化合物の合成は、様々な化学基の保護及び脱保護を伴い得る。保護及び脱保護の使用、ならびに適切な保護基の選択は、当業者によって決定され得る。保護基の化学的性質は、例えば、Ｇｒｅｅｎｅ’ｓ Ｐｒｏｔｅｃｔｉｖｅ Ｇｒｏｕｐｓ ｉｎ Ｏｒｇａｎｉｃ Ｓｙｎｔｈｅｓｉｓ，５ｔｈ．Ｅｄ．，Ｗｉｌｅｙ ＆ Ｓｏｎｓ，２０１４において見出され得、その全体が参照により本明細書に組み込まれる。

【０２１１】

本明細書に記載の化合物は、任意に同位体置換され得る。例えば、本明細書に記載の化合物は、重水素、１３Ｃ、１５Ｎ、及び／または１８Ｏなどの安定または非放射性同位体で置換され得る。水素に対する重水素の置換などの重原子の組み込みは、薬物の薬物動態を変え得る同位体効果を引き起こし得る。いくつかの例では、本明細書に記載の化合物中の原子（例えば、水素、炭素、窒素、または酸素原子）の少なくとも５ｍｏｌ％（例えば、少なくとも１０ｍｏｌ％または少なくとも２５ｍｏｌ％）が安定同位体で置換される。例えば、本明細書に記載の化合物中の原子の少なくとも５０ｍｏｌ％、６０ｍｏｌ％、７０ｍｏｌ％、８０ｍｏｌ％、または９０ｍｏｌ％が、安定同位体で置換され得る。同位体置換または濃縮は、例えば、プロトンを重水素と交換することによって、または濃縮または置換された出発材料で分子を合成することによって達成され得る。当該技術分野で既知の他の方法も同位体置換のために使用され得る。

【０２１２】

本明細書に記載の化合物を生成する反応は、有機合成の当業者によって容易に選択され得る溶媒中で行われ得る。溶媒は、反応が行われる条件、すなわち、温度及び圧力下で、出発材料（反応物）、中間体、または生成物と実質的に非反応性であり得る。反応は、１種の溶媒または１種を超える溶媒の混合物中で行われ得る。生成物または中間体の形成は、当該技術分野において既知の任意の好適な方法に従って監視され得る。例えば、生成物の形成は、核磁気共鳴分光法（例えば、１Ｈまたは１３Ｃ）、赤外分光法、分光光度法（例えば、ＵＶ－可視光）、質量分析法などの分光手段によって、または高速液体クロマトグラフィ（ＨＰＬＣ）もしくは薄層クロマトグラフィなどのクロマトグラフィによって監視され得る。

【０２１３】

本明細書に記載の化合物を合成するための例示的な方法は、以下の実施例１に提供されている。

【０２１４】

ＩＩＩ．薬学的製剤

本明細書に記載の化合物またはその誘導体は、薬学的組成物に提供され得る。意図される投与様式に応じて、薬学的組成物は、固体、半固体または液体の剤形、例えば、錠剤、坐剤、丸剤、カプセル、粉末、液体、または懸濁液の形態、好ましくは正確な投薬量の単回投与に好適な単位剤形であり得る。組成物は、薬学的に許容される担体と組み合わせて治療的有効量の本明細書に記載の化合物またはその誘導体を含み、また、他の医薬剤、薬学的薬剤、担体、または希釈剤を含み得る。薬学的に許容されるとは、許容されない生物学的作用を引き起こすことなく、または薬学的組成物に含有されている他の成分と有害な様式で相互作用することなく、選択された化合物と共に個体に投与され得る、生物学上またはその他の点で望ましくないものでない材料を意味する。

【０２１５】

本明細書で使用される場合、担体という用語は、任意の賦形剤、希釈剤、充填剤、塩、緩衝剤、安定剤、可溶化剤、脂質、安定剤、または薬学的製剤における使用のために当該技術分野でよく知られている他の材料を包含する。組成物中で使用するための担体の選択は、組成物の意図される投与経路に依存する。これらの材料を含有する薬学的に許容される

担体及び製剤の調製は、例えば、Ｒｅｍｉｎｇｔｏｎ：Ｔｈｅ Ｓｃｉｅｎｃｅ ａｎｄ Ｐｒａｃｔｉｃｅ ｏｆ Ｐｈａｒｍａｃｙ，２２ｄ Ｅｄｉｔｉｏｎ，Ｌｏｙｄ ｅｔ ａｌ．ｅｄｓ．，Ｐｈａｒｍａｃｅｕｔｉｃａｌ Ｐｒｅｓｓ ａｎｄ Ｐｈｉｌａｄｅｌｐｈｉａ Ｃｏｌｌｅｇｅ ｏｆ Ｐｈａｒｍａｃｙ ａｔ Ｕｎｉｖｅｒｓｉｔｙ ｏｆ ｔｈｅ Ｓｃｉｅｎｃｅｓ（２０１２）に記載されている。生理的に許容される担体の例には、リン酸塩緩衝液、クエン酸塩緩衝液、及び他の有機酸を有する緩衝液などの緩衝液；アスコルビン酸を含む抗酸化剤；低分子量（約１０残基未満）ポリペプチド；血清アルブミン、ゼラチン、もしくは免疫グロブリンなどのタンパク質；ポリビニルピロリドンなどの親水性ポリマー；グリシン、グルタミン、アスパラギン、アルギニン、もしくはリジンなどのアミノ酸；単糖類、二糖類、及びグルコース、マンノース、もしくはデキストリンを含む他の炭水化物；ＥＤＴＡなどのキレート剤；マンニトールもしくはソルビトールなどの糖アルコール；ナトリウムなどの塩形成対イオン；及び／またはＴＷＥＥＮ（登録商標）（ＩＣＩ，Ｉｎｃ．；Ｂｒｉｄｇｅｗａｔｅｒ，Ｎｅｗ Ｊｅｒｓｅｙ）、ポリエチレングリコール（ＰＥＧ）、及びＰＬＵＲＯＮＩＣＳ（商標）（ＢＡＳＦ；Ｆｌｏｒｈａｍ Ｐａｒｋ，ＮＪ）などの非イオン性界面活性剤が含まれる。

【０２１６】

非経口的注射に好適な本明細書に記載の化合物またはその誘導体を含有する組成物は、生理学的に許容される水性または非水性の滅菌溶液、分散液、懸濁液またはエマルション、及び滅菌注射用溶液または分散液への再構成用の滅菌粉末を含み得る。好適な水性または非水性の担体、希釈剤、溶媒、またはビヒクルの例には、水、エタノール、ポリオール（プロピレングリコール、ポリエチレングリコール、グリセロールなど）、それらの好適な混合物、植物油（オリーブ油など）、及びオレイン酸エチルなどの注射用有機エステルが含まれる。例えば、レシチンなどのコーティング剤の使用によって、分散液の場合には必要とされる粒径の維持によって、及び界面活性剤の使用によって、適切な流動性を維持することができる。

【０２１７】

これらの組成物はまた、防腐剤、湿潤剤、乳化剤、及び分散剤などのアジュバントを含有し得る。微生物の作用の予防は、様々な抗菌剤及び抗真菌剤、例えば、パラベン、クロロブタノール、フェノール、ソルビン酸などによって促進され得る。等張剤、例えば、糖、塩化ナトリウムなども含まれ得る。注射可能な薬学的形態の持続的吸収は、吸収を遅らせる薬剤、例えば、モノステアリン酸アルミニウム及びゼラチンの使用によってもたらされ得る。

【０２１８】

経口投与のための固形剤形は、カプセル、錠剤、丸剤、粉末、及び顆粒剤を含む。そのような固体剤形において、本明細書に記載の化合物またはその誘導体は、少なくとも１種の不活性常用賦形剤（もしくは担体）、例えば、クエン酸ナトリウムもしくはリン酸二カルシウム、または（ａ）充填剤もしくは増量剤、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、及びケイ酸、（ｂ）バインダー、例えば、カルボキシメチルセルロース、アルギネート、ゼラチン、ポリビニルピロリドン、スクロース、及びアカシア、（ｃ）保水剤、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、ジャガイモデンプンもしくはタピオカデンプン、アルギン酸、所定の複合ケイ酸塩、及び炭酸ナトリウム、（ｅ）溶液遅延剤、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、及びモノステアリン酸グリセロール、（ｈ）吸着剤、例えば、カオリン及びベントナイト、ならびに（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、固形ポリエチレングリコール、ラウリル硫酸ナトリウム、またはそれらの混合物と混合される。カプセル剤、錠剤、及び丸剤の場合、剤形はまた、緩衝剤を含んでもよい。

【０２１９】

類似した型の固形組成物はまた、ラクトースまたは乳糖、ならびに高分子量のポレチレングリコールなどの賦形剤を使用して、軟質及び硬質充填ゼラチンカプセル中の充填剤とし

て用いられ得る。
【０２２０】
錠剤、糖衣錠、カプセル、丸剤、及び顆粒剤の固形剤形は、腸溶コーティング及び当該技術分野で既知の他のコーティングなどのコーティング及びシェルを用いて調製され得る。それらは、不透明化剤を含有し得、腸管の所定の部分において遅延された様式で活性化合物または複数の化合物を放出するような組成物のものであり得る。使用され得る埋封組成物の例は、ポリマー物質及びワックスである。活性化合物はまた、適切な場合、上述の賦形剤のうちの１つ以上とともにマイクロカプセル化された形態であってもよい。
【０２２１】
本明細書に記載の化合物またはその誘導体の経口投与のための液体剤形には、薬学的に許容されるエマルション、溶液、懸濁液、シロップ、及びエリキシルが含まれる。活性化合物に加えて、液体剤形は、例えば、水または他の溶媒などの当該技術分野において一般的に使用される不活性希釈剤、可溶化剤、ならびに乳化剤、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、シクロデキストリン、ジメチルホルムアミド、油、特に、綿実油、ラッカセイ油、トウモロコシ胚芽油、オリーブ油、ヒマシ油、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、及びソルビタンの脂肪酸エステル、またはこれらの物質の混合物などを含有し得る。
【０２２２】
そのような不活性希釈剤以外に、組成物はまた、湿潤剤、乳化剤、懸濁剤、甘味剤、香味剤、及び芳香剤などの追加の薬剤を含み得る。
【０２２３】
活性化合物に加えて、懸濁剤は、追加の薬剤、例えば、エトキシル化イソステアリールアルコール、ポリオキシエチレンソルビトール、及びソルビタンエステル、微結晶性セルロース、アルミニウムメタヒドロキシド、ベントナイト、寒天及びトラガント、またはこれらの物質の混合物などを含有し得る。
【０２２４】
直腸投与用の本明細書に記載の化合物またはその誘導体の組成物は、任意に、常温では固体であるが体温では液体であり、そのため直腸または膣腔内で溶融し、活性成分を放出する好適な非刺激性賦形剤または担体、例えば、カカオバター、ポリエチレングリコール、または坐剤ワックスと化合物を混合することによって調製され得る坐剤である。
【０２２５】
本明細書に記載の化合物またはその誘導体の局所投与のための剤形は、軟膏剤、粉末、スプレー剤、吸入剤、及び皮膚パッチを含む。本明細書に記載の化合物またはその誘導体は、生理学的に許容される担体と、必要な場合は、任意の保存剤、緩衝剤、または噴霧剤と一緒に、滅菌条件下で混合される。眼科用製剤、軟膏、粉末、及び溶剤もまた、組成物の範囲内であるものとして企図される。
【０２２６】
任意に、本明細書に記載の化合物は、薬物デポ剤に含有され得る。薬物デポ剤は、所望の部位（例えば、滑膜関節、椎間板腔、脊柱管、腹部領域、患者の組織など）における移植及び保持を容易にする物理的構造を含む。薬物デポ剤は、移植部位から最大で約０．１ｃｍ～約５ｃｍの距離で化合物の最適濃度勾配を提供し得る。デポ剤には、本明細書で使用される場合、カプセル、マイクロスフィア、マイクロ粒子、マイクロカプセル、マイクロファイバー粒子、ナノスフィア、ナノ粒子、コーティング、マトリックス、ウェハ、丸剤、ペレット、エマルション、リポソーム、ミセル、ゲル、抗体－化合物コンジュゲート、タンパク質－化合物コンジュゲート、または他の薬学的送達組成物が含まれるがこれらに限定されない。デポ剤に好適な材料には、好ましくはＦＤＡ承認またはＧＲＡＳ材料である薬学的に許容される生分解性材料が含まれる。これらの材料は、ポリマー性または非ポリマー性、及び合成または天然に存在するもの、またはそれらの組み合わせであり得る。

デポ剤は、薬物ポンプを任意に含み得る。

【０２２７】

組成物は、本明細書に記載の化合物のうちの１種以上及び薬学的に許容される担体を含み得る。本明細書で使用される場合、薬学的に許容される塩という用語は、正当な医学的判断の範囲内で、過度の毒性、刺激、アレルギー反応などを伴わずに対象の組織と接触して使用するのに好適であり、妥当な利益／危険比に相応であり、それらの意図された使用に有効である本明細書に記載の化合物またはその誘導体の塩、ならびに可能な場合には、本明細書に記載の化合物の双性イオン形態を指す。塩という用語は、本明細書に記載の化合物の比較的非毒性の無機及び有機酸付加塩を指す。これらの塩は、化合物の単離及び精製の間にその場で、またはその遊離塩基形態の精製化合物を好適な有機または無機酸と別々に反応させ、そのようにして形成された塩を単離することによって調製され得る。代表的な塩には、臭化水素酸塩、塩化水素酸塩、硫酸塩、重硫酸塩、硝酸塩、酢酸塩、シュウ酸塩、吉草酸塩、オレイン酸塩、パルミチン酸塩、ステアリン酸塩、ラウリン酸塩、ホウ酸塩、安息香酸塩、乳酸塩、リン酸塩、トシル酸塩、クエン酸塩、マレイン酸塩、フマル酸塩、コハク酸塩、酒石酸塩、ナフチル酸メシル酸塩、グルコヘプトン酸塩、ラクトビオン酸塩、メタンスルホン酸塩、及びラウリルスルホン酸塩などが含まれる。これらには、アルカリ及びアルカリ土類金属に基づくカチオン、例えば、ナトリウム、リチウム、カリウム、カルシウム、マグネシウム、及び同等物、ならびに、アンモニウム、テトラメチルアンモニウム、テトラエチルアンモニウム、メチルアミン、ジメチルアミン、トリメチルアミン、トリエチルアミン、エチルアミン、及び同等物を含むがこれらに限定されない非毒性アンモニウム、第４級アンモニウム、及びアミンカチオンが含まれ得る。（Ｓ．Ｍ．Ｂａｒｇｅ ｅｔ ａｌ．，Ｊ．Ｐｈａｒｍ．Ｓｃｉ．（１９７７）６６，１を参照されたい。これは、少なくともその中で教示された組成物について、その全体が参照により本明細書に組み込まれる。）

【０２２８】

本明細書に記載の化合物及び組成物またはそれらの薬学的に許容される塩の投与は、治療的に有効な量の本明細書に記載の化合物及び組成物または本明細書に記載のそれらの薬学的に許容される塩を使用して障害を治療するのに有効な期間で行われ得る。本明細書に記載の化合物及び組成物または本明細書に記載のそれらの薬学的に許容される塩の有効量は、当業者によって決定され得、哺乳動物の場合、１日当たり約０．０００１～約２００ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物の例示的な投薬量を含み、これは、単回用量または１日当たり１～４回などの個別の分割された用量の形態で投与され得る。代替的に、投薬量は、１日当たり約０．０１～約１５０ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、１日当たり約０．１～１００ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、１日当たり約０．５～約７５ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、１日当たり約０．５～約５０ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、１日当たり約０．０１～約５０ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、１日当たり約０．０５～約２５ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、１日当たり約０．１～約２５ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、１日当たり約０．５～約２５ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、１日当たり約１～約２０ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、１日当たり約１～約１０ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、１日当たり約２０ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、１日当たり約１０ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、１日当たり約５ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、１日当たり約２．５ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、１日当たり約１．０ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、または１日当たり約０．５ｍｇ／ｋｇ体重の活性化合物、またはそれらの中で導き出せる任意の範囲であり得る。任意に、投薬量は、１日当たり約０．０１ｍｇ／ｋｇ体重～約１０ｍｇ／ｋｇ体重である。任意に、投薬量は、約０．０１ｍｇ／ｋｇ～約５ｍｇ／ｋｇである。任意に、投薬量は、約０．０１ｍｇ／ｋｇ～約２．５ｍｇ／ｋｇである。

【０２２９】

当業者は、任意の特定の対象のための特定の用量レベル及び投与頻度が変化し得、用いられる特定の化合物の活性、その化合物の代謝安定性及び作用の長さ、対象の種、年齢、体重、全般的な健康状態、性別、及び食事、投与の様式及び時間、排泄速度、薬物の組み合

わせ、ならびに特定の状態の重篤度を含む様々な要因に依存することを理解する。
【０２３０】
製剤において用いられる正確な用量はまた、投与経路、及び疾患または障害の重篤度に依存し、従事者の判断及び各対象の状況に従って決定されるべきである。有効用量は、インビトロまたは動物モデル試験系から誘導された用量反応曲線から外挿することができる。更に、投与経路に依存して、当業者は、対象の細胞、組織、及び／または器官における所望のレベルの応答のための血漿濃度をもたらす用量を決定する仕方を知っているであろう。
【０２３１】
ＩＶ．使用方法
対象においてステロイド受容体コアクチベーター関連疾患を治療、予防、または改善する方法が本明細書で提供される。その方法は、有効量の本明細書に記載の化合物もしくは組成物、またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグのうちの１種以上を対象に投与することを含む。有効量は、方法において化合物の量を記載するために使用される場合、所望の薬理学的効果または他の生物学的効果を達成する化合物の量を指す。有効量は、例えば、本明細書で提供されるように、ＳＲＣがインビトロで阻害または刺激される化合物の濃度であり得る。インビトロで投与される濃度に対応する対象の標的細胞におけるインビボ濃度が達成されるように、本明細書に記載の１種以上の化合物の量を対象に投与することを含む方法もまた企図される。
【０２３２】
本明細書に記載の化合物及び組成物またはそれらの薬学的に許容される塩は、限定されないが、小児及び老人集団を含むヒト、及び動物、例えば、獣医学的用途におけるステロイド受容体コアクチベーター関連疾患を治療するのに有用である。
【０２３３】
任意に、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患は、ＳＲＣ－１関連疾患である。任意に、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患は、ＳＲＣ－２関連疾患である。任意に、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患は、ＳＲＣ－３関連疾患である。
【０２３４】
いくつかの実施形態では、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患は、がんである。任意に、がんは予後不良がんである。不良予後という用語は、本明細書で使用される場合、前向きな結果の可能性の低下に関連する疾患、感染、または医学的状態からの回復の見込みを指す。がんなどの疾患に関して、予後不良は、患者生存率の低下、患者の生存時間の短縮、前述のがん細胞の転移性進行のより高い可能性、及び／または前述のがん細胞の化学療法耐性のより高い可能性と関連し得る。任意に、予後不良がんは、５０％以下の患者生存率に関連するがんであり得る。任意に、予後不良がんは、診断から５年以内の患者生存時間に関連するがんであり得る。いくつかの実施形態では、がんは、浸潤癌である。
【０２３５】
任意に、がんは、同じ細胞型の非がん細胞と比較して、ＳＲＣ－１、ＳＲＣ－２、及び／またはＳＲＣ－３の増加した発現を有するがんである。任意に、がんは、膀胱癌、脳腫瘍、乳癌、気管支癌、結腸直腸癌（例えば、結腸癌、直腸癌）、子宮頸癌、軟骨肉腫、子宮内膜癌、胃腸癌、胃癌、泌尿生殖癌、頭頸部癌、肝癌、肝細胞癌、白血病、肝臓癌、肺癌、リンパ腫、皮膚のメラノーマ、卵巣癌、膵臓癌、前立腺癌、腎臓癌、皮膚癌、精巣癌、甲状腺癌、または子宮癌である。任意に、がんは、以下の部位のうちの１つ以上に影響を及ぼすがんである：口腔及び咽頭（例えば、舌、口、咽頭、または他の口腔）、消化器系（例えば、食道、胃、小腸、結腸、直腸、肛門、肛門管、肛門直腸、肝臓及び肝内胆管、胆嚢及び他の胆管、膵臓、または他の消化器系器官）、呼吸器系（例えば、喉頭、肺及び気管支、または他の呼吸器系器官）、骨及び関節、軟組織（例えば、心臓）、皮膚（例えば、皮膚または他の非上皮のメラノーマ）、乳房、生殖系（例えば、子宮頚部、子宮体、卵巣、外陰、膣、及び他の女性生殖器領域、前立腺、精巣、陰茎、及び他の男性生殖器領域）、泌尿器系（例えば、膀胱、腎臓及び腎盂、ならびに尿管及び他の泌尿器系器官）、目及び眼窩、脳及び他の神経系、内分泌系（例えば、甲状腺及び他の内分泌系）、リンパ

腫（例えば、ホジキンリンパ腫及び非ホジキンリンパ腫）、骨髄腫、または白血病（例えば、急性リンパ性白血病、慢性リンパ球性白血病、急性骨髄性白血病、慢性骨髄性白血病、または他の白血病）。

【０２３６】

任意に、乳癌はトリプルネガティブ乳癌である。本明細書で使用される場合、トリプルネガティブ乳癌（ＴＮＢＣ）は、エストロゲン受容体（ＥＲ）及びプロゲステロン受容体（ＰＲ）の検出可能なタンパク質発現を欠き、ＨＥＲ２タンパク質の過剰発現が不存在の乳癌のサブタイプを指す。換言すれば、ＴＮＢＣは、免疫学的にＥＲ、ＰＲ、及びＨＥＲ２に陰性である乳癌の免疫表現型を指す。

【０２３７】

任意に、がんは膠芽腫である。いくつかの例では、膠芽腫は多形性膠芽腫瘍である。任意に、多形性膠芽腫瘍は小児多形性膠芽腫瘍である。膠芽腫を治療する方法は、本明細書に記載の化合物を対象に投与することを含む。任意に、膠芽腫を治療する方法は、対象における膠芽腫細胞の増殖を阻害する方法を含む。

【０２３８】

いくつかの実施形態では、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患は、代謝障害（例えば、肥満、糖尿病、及び遺伝的障害）である。いくつかの実施形態では、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患は、ヒト免疫不全ウイルス（ＨＩＶ）である。任意に、ＨＩＶはＨＩＶタイプ１（ＨＩＶ－１）である。任意に、ＨＩＶはＨＩＶタイプ２（ＨＩＶ－２）である。任意に、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患は、神経変性障害である。任意に、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患は、炎症性疾患である。いくつかの実施形態では、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患は、Ｄａｓｇｕｐｔａ　ｅｔ　ａｌ．，Ａｎｎｕ　Ｒｅｖ　Ｍｅｄ．，６５：２７９－２９２（２０１４）に記載されている疾患であり、これは参照により本明細書に組み込まれる。

【０２３９】

対象においてＳＲＣ関連疾患（例えば、がん）を治療または予防する方法は、１種以上の追加の薬剤を対象に投与することを更に含み得る。１種以上の追加の薬剤及び本明細書に記載の化合物またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグは、付随、同時、または逐次投与を含む任意の順序で投与され得る。逐次投与は、最大で数日間隔で時間的に隔てられた順序の投与であり得る。その方法はまた、１種以上の追加の薬剤及び／または本明細書に記載の化合物またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグの１回より多くの投与を含み得る。１種以上の追加の薬剤及び本明細書に記載の化合物またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグの投与は、同じまたは異なる経路によって同時または逐次的であり得る。

【０２４０】

追加の治療剤には、化学療法剤、抗うつ剤、抗不安剤、抗体、抗ウイルス剤、ステロイド性及び非ステロイド性抗炎症剤、慣用の免疫療法剤、サイトカイン、ケモカイン、及び／または成長因子が含まれるがこれらに限定されない。

【０２４１】

化学療法剤は、異常に増殖する細胞の増殖を阻害または停止するのに有効な化合物または組成物である。それ故、そのような薬剤は、がん及び異常な細胞増殖によって特徴付けられる他の疾患を治療するために治療的に使用され得る。化学療法化合物の実例には、ベキサロテン、ゲフィチニブ、エルロチニブ、ゲムシタビン、パクリタキセル、ドセタキセル、トポテカン、イリノテカン、テモゾロミド、カルムスチン、ビノレルビン、カペシタビン、ロイコボリン、オキサリプラチン、ベバシズマブ、セツキシマブ、パニツムマブ、ボルテゾミブ、オブリメルセン、ヘキサメチルメラミン、イホスファミド、ＣＰＴ－１１、デフルノミド、シクロヘキシミド、ジカルバジン、アスパラギナーゼ、ミトタント、ビンブラスチン硫酸塩、カルボプラチン、コルヒチン、エトポシド、メルファラン、６－メルカプトプリン、テニポシド、ビンブラスチン、抗生物質誘導体（例えば、ドキソルビシン、リポソームドキソルビシン、及びジエチルスチルベストロールドキソルビシンなどのア

ントラサイクリン、ブレオマイシン、ダウノルビシン、及びダクチノマイシン）、抗エストロゲン剤（例えば、タモキシフェン）、代謝拮抗剤（例えば、フルオロウラシル（５－ＦＵ）、５－ＦＵ、メトトレキセート、フロクスウリジン、インターフェロンアルファ－２Ｂ、グルタミン酸、プリカマイシン、メルカプトプリン、及び６－チオグアニン）、細胞毒性剤（例えば、カルムスチン、ＢＣＮＵ、ロムスチン、ＣＣＮＵ、シトシンアラビノシド、シクロホスファミド、エストラムスチン、ヒドロキシ尿素、プロカルバジン、マイトマイシン、ブスルファン、シスプラチン、ビンクリスチン、及びビンクリスチン硫酸塩）、ホルモン（例えば、メドロキシプロゲステロン、エストラムスチンホスフェートナトリウム、エチニルエストラジオール、エストラジオール、メゲストロールアセテート、メチルテストステロン、ジエチルスチルベストロールジホスフェート、クロロトリアニセン、及びテストラクトン）、窒素マスタード誘導体（例えば、メファレン、クロラムブシル、メクロレタミン（窒素マスタード）及びチオテパ）、ならびにステロイド（例えば、ベタメタゾンナトリウムホスフェート）が含まれるがこれらに限定されない。

【０２４２】

前述の治療剤のいずれも、本明細書に記載の組成物との任意の組み合わせで使用され得る。組み合わせは、付随的に（例えば、混合物として）、別々であるが同時に（例えば、同じ対象に別々の静脈ラインを介して）、または連続して（例えば、化合物または薬剤のうちの１つが最初に与えられ、続いて２つ目が与えられる）のいずれかで投与される。それ故、組み合わせという用語は、２つ以上の薬剤の付随、同時、または逐次投与を指すために使用される。

【０２４３】

任意に、本明細書に記載の化合物または治療剤は、放射線療法、免疫療法、遺伝子療法、または手術と組み合わせて投与され得る。

【０２４４】

本明細書に記載の方法及び化合物は、予防的及び治療的処置の両方に有用である。予防的使用のため、本明細書に記載の化合物及び組成物またはそれらの薬学的に許容される塩の治療的有効量は、発症前（例えば、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患の明らかな徴候の前）に、早期発症中（例えば、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患の初期徴候及び症状の際に）、またはステロイド受容体コアクチベーター関連疾患の進行後に対象に投与される。予防的投与は、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患の症状の出現前に数日から数年間行われ得る。治療的処置は、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患が診断された後に、治療的有効量の本明細書に記載の化合物及び組成物またはそれらの薬学的に許容される塩を対象に投与することを含む。

【０２４５】

本明細書に記載の化合物はまた、細胞内のステロイド受容体コアクチベータータンパク質を調節するのに有用である。細胞内のステロイド受容体コアクチベータータンパク質を調節する方法は、細胞を有効量の本明細書に記載の化合物のうちの１種以上と接触させることを含む。任意に、ステロイド受容体コアクチベータータンパク質は、ＳＲＣ－１、ＳＲＣ－２、またはＳＲＣ－３のうちの１つ以上である。任意に、接触はインビボで実施される。任意に、接触はインビトロで実施される。

【０２４６】

予防的及び治療的処置のための本明細書の方法は、ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患を有するか、または発症するリスクのある対象を選択することを任意に含む。当業者は、例えば、疾患または状態の個人または家族歴、臨床検査（例えば、画像化、生検、遺伝子検査）などを含む様々な予後及び診断方法を使用してそのような決定を行うことができる。任意に、本明細書の方法は、寛解期の対象（例えば、以前はがんを有していた対象）におけるがんの再発を予防するために使用され得る。

【０２４７】

Ｖ．キット

対象におけるがんを治療または予防するためのキットも本明細書で提供される。キットは

、本明細書に記載の化合物または組成物のいずれかを含み得る。例えば、キットは、式Ｉ、式ＩＩ、式ＩＩＩ、式ＩＶ、式Ｖ、式ＶＩ、式ＶＩＩ、式ＶＩＩＩ、式ＩＸ、式Ｘ、式ＸＩ、式ＸＩＩ、式ＸＩＩＩ、及び式ＸＩＶ、それらの１種以上の互変異性体、またはそれらの混合物を含み得る。キットは、１種以上の化学療法剤などの１種以上の追加の薬剤を更に含み得る。キットは、本明細書に記載の化合物または組成物のいずれかの経口製剤を含み得る。キットは、本明細書に記載の化合物または組成物のいずれかの静脈注射製剤を含み得る。キットは、キットの使用のための説明書（例えば、対象を治療するための指示書）、容器、化合物または組成物を投与するための手段（例えば、注射器）、及び／または担体を追加的に含み得る。

【０２４８】

本明細書で使用される場合、治療、治療する、または治療することという用語は、疾患または状態の１つ以上の症状を低減する方法を指す。それ故、開示される方法において、治療は、疾患または状態の１つ以上の症状の重篤度の１０％、２０％、３０％、４０％、５０％、６０％、７０％、８０％、９０％、または１００％の低減を指し得る。例えば、疾患を治療するための方法は、対照と比較して、対象における疾患の１つ以上の症状または徴候（例えば、腫瘍の大きさまたは腫瘍増殖の速度）が１０％低減する場合に治療であると見なされる。本明細書で使用される場合、対照は未治療状態（例えば、本明細書に記載の化合物及び組成物で治療されていない腫瘍細胞）を指す。それ故、その低減は、天然または対照レベルと比較して、１０％、２０％、３０％、４０％、５０％、６０％、７０％、８０％、９０％、１００％、または１０％～１００％の間の任意の低減率であり得る。治療が、疾患、状態、または疾患もしくは状態の症状の治癒または完全な除去を必ずしも指さないことが理解される。

【０２４９】

本明細書で使用される場合、疾患または障害を予防する、予防すること、及び予防という用語は、対象が疾患または障害のうちの１つ以上の症状を示し始める前、またはそれとほぼ同時に行われる、組成物または治療剤の動作、例えば、投与であって、疾患または障害のうちの１つ以上の症状の発症または重症度を阻害または遅延させるものを指す。

【０２５０】

本明細書で使用される場合、減少、低減、または阻害に関する言及は、対照レベルと比較して、１０％、２０％、３０％、４０％、５０％、６０％、７０％、８０％、９０％、またはそれ以上の変化を含む。そのような用語は、完全な排除を含み得るが、必ずしもそれを含むとは限らない。

【０２５１】

本明細書で使用される場合、対象は哺乳動物及び非哺乳動物の両方を意味する。哺乳動物には、例えば、ヒト、非ヒト霊長類、例えば、類人猿及びサル、ウシ、ウマ、ヒツジ、ラット、マウス、ブタ、及びヤギが含まれる。非哺乳動物には、例えば、魚類及び鳥類が含まれる。

【０２５２】

本出願を通して、様々な刊行物が参照されている。これらの刊行物の開示は、それらの全体が参照により本明細書によって本出願に組み込まれる。

【０２５３】

以下の実施例は、本明細書に記載の方法及び組成物の所定の態様を更に説明することが意図されており、特許請求の範囲を限定することは意図されていない。

【実施例】

【０２５４】

実施例１：化合物の合成

全ての化学物質は、他に規定されない限り、Ｓｉｇｍａ－Ａｌｄｒｉｃｈ（Ｍｉｌｗａｕｋｅｅ、ＷＩ）またはＡｌｆａ　Ａｅｓａｒ（Ｗａｒｄ　Ｈｉｌｌ、ＭＡ）から購入した。更なる精製なしに、他の全ての溶媒及び試薬を得たまま使用した。化合物は、Ｖａｒｉａｎ４００－ＭＲ分光計（Ｐａｌｏ　Ａｌｔｏ、ＣＡ）で^{1}Ｈ－ＮＭＲによって特性化され

た。化学シフト（δ）は、溶媒シグナル［^{1}Ｈ　ＮＭＲ：ＤＭＳＯ－ｄ６（２．５０）］を参照としてｐｐｍで得られた。ＵＶ－Ｖｉｓ測定は、Ｃａｒｙ６０ＵＶ－Ｖｉｓ分光計を用いて１０×１０ｍｍ石英キュベットで実施された。フラッシュクロマトグラフィは、Ｔｅｌｅｄｙｎｅ　ＩＳＣＯ　ＣｏｍｂｉＦｌａｓｈ　Ｒｆ２００で実施された。ＥＳＩ質量分光分析は、Ａｇｉｌｅｎｔ　Ｍａｓｓ　Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｅｒ（６１３０シングルクアッド）で測定された。

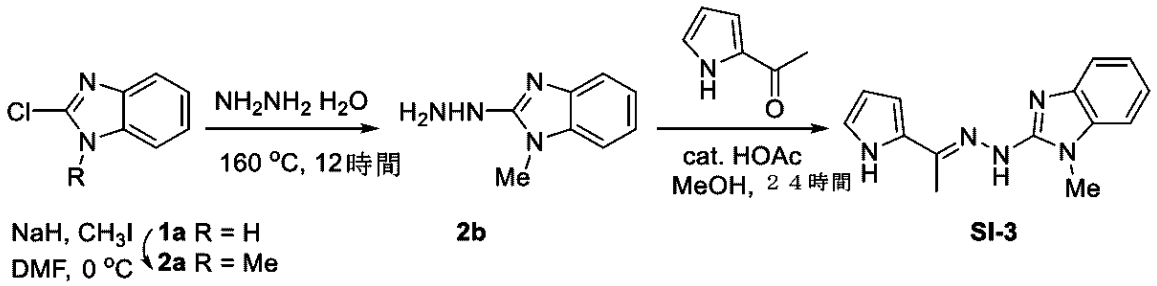
【０２５５】

本明細書に記載の化合物は、以下に記載の方法に従って調製された。いくつかの場合では、合成された化合物は互変異性混合物として存在する。

【０２５６】

化合物ＳＩ－３の合成：

【化９５】



０℃に冷却された１０ｍＬの乾燥ＤＭＦ中の２－クロロ－１Ｈ－ベンゾ［ｄ］イミダゾール（９１６ｍｇ、６ｍｍｏｌ）の溶液に、ＮａＨ（２４０ｍｇ、１０．８ｍｍｏｌ）を少量ずつ注意深く添加した。混合物をこの温度で１５分間撹拌した。次いで、ヨウ化メチル（０．４１ｍＬ、６．６ｍｍｏｌ）を更に１５分間連続的撹拌下で添加した。薄層クロマトグラフィ（ＴＬＣ）が完全な変換を示したときに、混合物を６０ｍＬの水に注ぎ、白色固体が沈殿した。沈殿物を濾過によって収集し、真空中で乾燥させて、２ａ　６５０ｍｇ（６５％）の純粋生成物を白色固体として得た。^{1}Ｈ　ＮＭＲ　（４００　ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$）　δ　７．６２－７．５４　（ｍ，２Ｈ），７．３４－７．２７　（ｍ，１Ｈ），７．２７－７．２０　（ｍ，１Ｈ），３．８０　（ｓ，３Ｈ）。

【０２５７】

２－クロロ－１－メチル－１Ｈ－ベンゾ［ｄ］イミダゾール（２ａ；６５０ｍｇ、３．９０ｍｍｏｌ）を４ｍＬのヒドラジン水和物と共に封止管内で、１６０℃で１２時間加熱した。室温に冷却した後、沈殿物を濾別し、水で数回洗浄し、乾燥させて、化合物２ｂ（２３０ｍｇ、３６％）を灰色固体として得た。^{1}Ｈ　ＮＭＲ　（４００　ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$）　δ　７．７９　（ｓ，１Ｈ），７．２９　－　７．２１　（ｍ，１Ｈ），７．２０　－　７．１３　（ｍ，１Ｈ），７．０１　－　６．９１　（ｍ，２Ｈ），４．２６　（ｓ，２Ｈ），３．４６　（ｓ，３Ｈ）。

【０２５８】

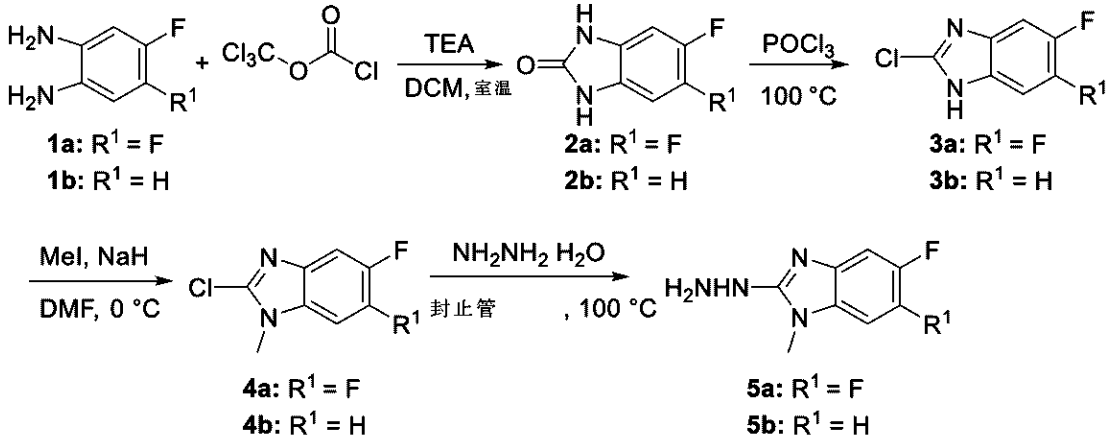
２滴の酢酸を含有するメタノール中の２－アセチルピリジン（０．１６ｍＬ、１．４１８ｍｍｏｌ）及びヒドラジン２ｂ（２３０ｍｇ、１．４１８ｍｍｏｌ）の混合物を室温で７２時間反応させた。溶媒を除去した。メタノールからの再結晶でＳＩ－３（２９０ｍｇ、７７％）を得た。^{1}Ｈ　ＮＭＲ　（４００　ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_3$）　δ　１０．７８　（ｓ，１Ｈ），７．２２　（ｄ，Ｊ　＝　７．６　Ｈｚ，１Ｈ），７．１２　（ｔ，Ｊ　＝　７．６　Ｈｚ，１Ｈ），７．０８　－　７．０３　（ｍ，１Ｈ），６．８２　（ｓ，１Ｈ），６．７５　（ｄ，Ｊ　＝　８．０　Ｈｚ，１Ｈ），６．１０　－　６．００　（ｍ，２Ｈ），３．５０　（ｓ，３Ｈ），２．２２　（ｓ，３Ｈ）。

【０２５９】

化合物ＳＩ－４～ＳＩ－８の合成：

ＳＩ－４からＳＩ－８の合成は、ＳＩ－３について記載したのと同様の手順に従った。

【０２６０】
ＳＩ－４：^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$） δ ７．１０ － ６．９６ （ｍ，５Ｈ），６．８７ （ｓ，１Ｈ），３．９５ （ｓ，３Ｈ），３．５２ （ｓ，３Ｈ），２．５４ （ｓ，３Ｈ）。
【０２６１】
ＳＩ－５ （Ｚ，Ｅ の混合物 （４：６））：^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$） δ ９．７７ （ｓ，０．６×１Ｈ），９．４４ （ｓ，０．４×Ｚ１Ｈ），７．６６ （ｓ，１Ｈ），７．２３ － ７．１８ （ｍ，１Ｈ），７．１５ － ６．９１ （ｍ，４Ｈ），３．５５ （ｓ，０．６×３Ｈ），３．４３ （ｓ，０．４×３Ｈ），２．５０ （ｓ，３Ｈ）。
【０２６２】
ＳＩ－６：^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$） δ ８．７９ （ｂｒ ｓ，１Ｈ），７．８２ （ｄ，Ｊ ＝ ３．２ Ｈｚ，１Ｈ），７．２２ （ｄ，Ｊ ＝ ３．２ Ｈｚ，１Ｈ），７．１８ － ６．９５ （ｍ，４Ｈ），３．５７ （ｓ，３Ｈ），２．５７ （ｓ，３Ｈ）。
【０２６３】
ＳＩ－７：^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$） δ ９．０１ （ｓ，１Ｈ），７．４４ （ｓ，１Ｈ），７．１０ － ６．９１ （ｍ，４Ｈ），６．７０ （ｄ，Ｊ ＝ ３．２ Ｈｚ，１Ｈ），６．４７ － ６．３８ （ｍ，１Ｈ），３．６０ （ｓ，３Ｈ），２．４２ （ｓ，３Ｈ）。
【０２６４】
ＳＩ－８：^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$） δ ９．３３ （ｂｒ ｓ，１Ｈ），７．２５ － ７．１９ （ｍ，２Ｈ），７．１５ － ６．９６ （ｍ，５Ｈ），３．６２ （ｓ，３Ｈ），２．４８ （ｓ，３Ｈ）。
【０２６５】
化合物ＳＩ－９～ＳＩ－２１の合成：
ヒドラジン（５ａ、５ｂ、または５ｃ）をケトン（６ａ、６ｂ、６ｃ、または６ｄ）と反応させることによって化合物ＳＩ－９からＳＩ－２１を調製した。いくつかの場合では、合成された化合物は互変異性混合物として存在する。ヒドラジンを調製するための、及びヒドラジンをケトンと反応させるための手順を以下に詳述する。
【０２６６】
ヒドラジン５ｂの合成：
【化９６】



1a: R^1 = F
1b: R^1 = H
2a: R^1 = F
2b: R^1 = H
3a: R^1 = F
3b: R^1 = H
4a: R^1 = F
4b: R^1 = H
5a: R^1 = F
5b: R^1 = H

塩化メチレン（２０ｍＬ）中の４－フルオロベンゼン－１，２－ジアミン１ｂ（１．３９ｇ、１１．０ｍｍｏｌ）及びトリエチルアミン（３．２６ｍＬ、２３．２ｍｍｏｌ）の溶液に、塩化メチレン（５ｍＬ）中のジホスゲン（０．６９ｍＬ、５．７２ｍｍｏｌ）の溶液を０～５℃で滴下して添加した。得られた懸濁液を室温で２時間撹拌し、濾過した。収

集した白色固体を水で洗浄し、乾燥して、化合物２ｂ（１．５６ｇ、９３％）を得た。^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$） δ １０．７３ （ｓ，１Ｈ），１０．６１ （ｓ，１Ｈ），６．９７ － ６．８１ （ｍ，１Ｈ），６．７４ （ｍ，２Ｈ）；ＭＳ （ＥＳＩ）： ｍ／ｚ １５３．１ ［Ｍ＋１］$^+$。

【０２６７】

オキシ塩化リン（１４ｍＬ、１５４．５ｍｍｏｌ）中の５－フルオロ－１，３－ジヒドロ－２Ｈ－ベンゾ［ｄ］イミダゾール－２－オン２ｂ（１．５６２ｇ、１０．３ｍｍｏｌ）の溶液を１００℃で１８時間加熱した。反応混合物を室温に冷却し、過剰のＰＯＣｌ$_3$を真空中で蒸発させた。残渣を飽和ＮａＨＣＯ$_3$溶液（１０ｍＬ）で中和し、ＥｔＯＡｃ（３×２０ｍＬ）で抽出した。有機相をブラインで洗浄し、次いでＭｇＳＯ$_4$で乾燥させ、濾過し、減圧下で濃縮して、２－クロロ－６－フルオロ－１Ｈ－ベンゾ［ｄ］イミダゾール３ｂ（１．５５２ｇ、８８％）を得た。^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$） δ ７．５１ （ｓ，１Ｈ），７．３４ （ｄ，Ｊ ＝ ７．６ Ｈｚ，１Ｈ），７．０８ （ｍ，１Ｈ）；ＭＳ （ＥＳＩ）： ｍ／ｚ １７１．０ ［Ｍ＋１］$^+$。

【０２６８】

ＤＭＦ（１０ｍＬ）中のＮａＨ（５４６ｍｇ、鉱油中６０％分散液）の溶液に、２－クロロ－６－フルオロ－１Ｈ－ベンゾ［ｄ］イミダゾール３ｂ（１．５５２ｇ、９．０９ｍｍｏｌ）を０℃で添加した。混合物をこの温度で更に１５分間撹拌した。次いでヨウ化メチル（０．７４ｍＬ、１１．８ｍｍｏｌ）を添加し、更に１５分間撹拌を継続した。ＴＬＣが完全な変換を示したときに、混合物を６０ｍＬの水に注ぎ、化合物をＥｔＯＡｃで抽出した。有機相をブラインで洗浄し、次いでＭｇＳＯ$_4$で乾燥させ、濾過し、減圧下で濃縮した。残渣を（ヘキサン／酢酸エチル＝１０：１～４：１）を使用してフラッシュクロマトグラフィによって精製して化合物４ｂ（１．３７ｇ、８２％）を得た。１：１ の混合物，ｚ^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$） δ ７．６２ （ｄ，Ｊ ＝ ７．８ Ｈｚ，１Ｈ），７．５９ （ｄ，Ｊ ＝ ８．５ Ｈｚ，１Ｈ），７．５５ （ｄ，Ｊ ＝ ９．２ Ｈｚ，１Ｈ），７．４３ （ｄ，Ｊ ＝ ９．６ Ｈｚ，１Ｈ），７．１９ （ｔ，Ｊ ＝ ９．４ Ｈｚ，１Ｈ），７．１０ （ｔ，Ｊ ＝ ９．４ Ｈｚ，１Ｈ），３．７９ （ｓ，３Ｈ），３．７７ （ｓ，３Ｈ）；ＭＳ （ＥＳＩ）： ｍ／ｚ １８５．０ ［Ｍ＋１］$^+$。

【０２６９】

ヒドラジン水和物（５ｍＬ）中の化合物４ｂ（７７１ｍｇ、４．１８ｍｍｏｌ）の混合物を封止管中で、１００℃で１２時間加熱した。室温に冷却した後、沈殿物を濾別し、水で数回洗浄し、乾燥させて、化合物５ｂ（６７０ｍｇ、８９％）を得た。^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$） δ ７．１９ （ｄｄ，Ｊ ＝ ８．４，４．８ Ｈｚ，１Ｈ），７．１３ （ｄｄ，Ｊ ＝ ８．４，４．８ Ｈｚ，１Ｈ），７．１０ （ｄ，Ｊ ＝ １０．０ Ｈｚ，１Ｈ），７．０３ （ｄ，Ｊ ＝ １０．０ Ｈｚ，１Ｈ），６．７９ （ｄ，Ｊ ＝ １０．０ Ｈｚ，１Ｈ），６．７４ （ｄ，Ｊ ＝ ９．２ Ｈｚ，１Ｈ），４．２８ （ｓ，２Ｈ），４．２８ （ｓ，２Ｈ），３．４６ （ｓ，３Ｈ），３．４６ （ｓ，３Ｈ）；ＭＳ （ＥＳＩ）： ｍ／ｚ １８１．１ ［Ｍ＋１］$^+$。

【０２７０】

ヒドラジン５ａの合成：

ヒドラジン５ｂについて上述した手順に従って化合物５ａを調製した。

【０２７１】

２ａ： ^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$） δ １０．７７ （ｓ，１Ｈ），６．９８ （ｔ，Ｊ ＝ ８．８ Ｈｚ，１Ｈ），ＭＳ （ＥＳＩ）： ｍ／ｚ ［Ｍ＋１］$^+$。

【０２７２】

３ａ： ^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$） δ ７．６８ － ７．５２ （ｍ，２Ｈ），ＭＳ （ＥＳＩ）： ｍ／ｚ １８９．０ ［Ｍ＋１］$^+$。

【０２７３】

４ａ：^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_3$） δ ７．４７ （ｄｄ，Ｊ ＝ １０．４，７．２ Ｈｚ，１Ｈ），７．１０ （ｄｄ，Ｊ ＝ ９．６，６．８ Ｈｚ，１Ｈ），３．７６ （ｓ，３Ｈ）；ＭＳ （ＥＳＩ）： ｍ／ｚ ２０３．０ ［Ｍ＋１］$^+$。

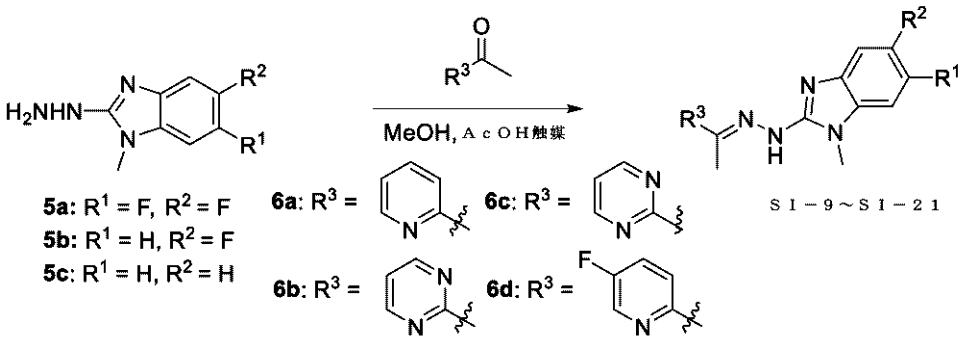
【０２７４】

５ａ：^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$） δ ７．９４ （ｓ，１Ｈ），７．３３ （ｄｄ，Ｊ ＝ １０．８，７．２ Ｈｚ，１Ｈ），７．２３ （ｄｄ，Ｊ ＝ １１．６，７．２ Ｈｚ，１Ｈ），４．２８ （ｓ，２Ｈ），３．４５ （ｓ，３Ｈ）；ＭＳ （ＥＳＩ）： ｍ／ｚ １９９．１ ［Ｍ＋１］$^+$。

【０２７５】

化合物ＳＩ－９～ＳＩ－２１を形成するためのヒドラジンとケトンとの反応：

【化９７】



一般的方法：メタノール（２ｍＬ）中のヒドラジン５（０．２ｍｍｏｌ）及びケトン６（０．２１ｍｍｏｌ）の混合物に、室温で酢酸（２．４ｍｇ、０．０４ｍｍｏｌ）を添加した。混合物をこの温度で更に１２時間撹拌した。溶媒を除去し、残渣を（ＤＣＭ／ＥｔＯＨ＝２０：１～１０：１）を使用してフラッシュクロマトグラフィによって精製してＳＩ化合物を得た。

【０２７６】

ＳＩ－９：^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$） δ １１．１４ （ｓ，１Ｈ），８．５４ （ｄ，Ｊ ＝ ４．４ Ｈｚ，１Ｈ），８．４１ （ｄ，Ｊ ＝ ６．８ Ｈｚ，１Ｈ），７．７７ （ｔ，Ｊ ＝ ７．２ Ｈｚ，１Ｈ），７．４７ － ７．３３ （ｍ，１Ｈ），７．３３ － ７．２３ （ｍ，１Ｈ），７．１０ － ６．９８ （ｍ，１Ｈ），３．４３ （ｓ，３Ｈ），２．４０ （ｓ，３Ｈ）；ＭＳ （ＥＳＩ）： ｍ／ｚ ３０２．１ ［Ｍ＋１］$^+$。

【０２７７】

ＳＩ－１０：^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$） δ １１．１４ （ｓ，１Ｈ），８．８１ （ｓ，１Ｈ），８．８２ （ｓ，１Ｈ），７．４９ － ７．３０ （ｍ，２Ｈ），７．１０ （ｄｄ，Ｊ ＝ ９．２，８．０ Ｈｚ，１Ｈ），３．４６ （ｓ，３Ｈ），２．４４ （ｓ，３Ｈ）；ＭＳ （ＥＳＩ）： ｍ／ｚ ３０３．１ ［Ｍ＋１］$^+$。

【０２７８】

ＳＩ－１１：^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$） δ １１．４７ （ｓ，１Ｈ），９．１２ （ｓ，１Ｈ），８．７１ （ｄ，Ｊ ＝ ５．２ Ｈｚ，１Ｈ），８．４１ （ｓ，１Ｈ），７．４８ （ｔ，Ｊ ＝ ８．８ Ｈｚ，１Ｈ），７．１３ （ｔ，Ｊ ＝ ８．０ Ｈｚ，１Ｈ），３．４９ （ｓ，３Ｈ），２．３６ （ｓ，３Ｈ）；ＭＳ （ＥＳＩ）： ｍ／ｚ ３０３．１ ［Ｍ＋１］$^+$。

【０２７９】

ＳＩ－１２：^{1}Ｈ ＮＭＲ （４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$） δ １１．２０ （ｓ，１Ｈ），８．６０ － ８．４０ （ｍ，２Ｈ），７．７４ （ｔｄ，Ｊ ＝ ８．８，２．８ Ｈｚ，１Ｈ），７．４６ － ７．３２ （ｍ，１Ｈ），７．１１ － ６．９７ （ｍ，１Ｈ），３．４３ （ｓ，３Ｈ），２．３９ （ｓ，３Ｈ）；ＭＳ （ＥＳＩ）： ｍ

／ｚ ３２０．１ [Ｍ＋１]＋。
【０２８０】
ＳＩ－１４：１Ｈ ＮＭＲ（４００ ＭＨｚ，ＣＤＣｌ３）δ ８．５７（ｄ，Ｊ＝ ４．４ Ｈｚ，１Ｈ），８．０２ － ７．８２（ｍ，１Ｈ），７．６２（ｔ，Ｊ＝ ７．６ Ｈｚ，１Ｈ），７．２２ － ７．１０（ｍ，１Ｈ），６．９９ － ６．７４（ｍ，２Ｈ），６．７４ － ６．６６（ｍ，１Ｈ），３．６０（ｓ，０．５＊ ３Ｈ），３．５６（ｓ，０．５＊３Ｈ），２．５３（ｓ，３Ｈ）；ＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ ２８４．１ [Ｍ＋１]＋。
【０２８１】
ＳＩ－１５：１Ｈ ＮＭＲ（４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ６）δ １１．０４（ｓ，１Ｈ），８．８１（ｓ，１Ｈ），８．８０（ｓ，１Ｈ），７．３６（ｍ，１Ｈ），７．１４（ｄ，Ｊ＝ ８．４ Ｈｚ，１Ｈ），７．１０ － ６．７１ － ６．９０（ｍ，１Ｈ），６．８５ － ６．７２（ｍ，１Ｈ），３．４６（ｓ，３Ｈ），２．４３（ｓ，３Ｈ）；ＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ ２８５．１ [Ｍ＋１]＋。
【０２８２】
ＳＩ－１６：１Ｈ ＮＭＲ（４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ６）δ １１．５０（ｓ，０．５４＊１Ｈ），１１．３８（ｓ，０．４５＊１Ｈ），９．１１（ｓ，１Ｈ），８．７０（ｄ，Ｊ＝ ５．６ Ｈｚ，１Ｈ），８．４４（ｓ，１Ｈ），７．２７ － ７．１９（ｍ，１Ｈ），７．１３ － ６．９２（ｍ，１Ｈ），６．９１ － ６．８１（ｍ，１Ｈ），３．５０（ｓ，３Ｈ），２．３６（ｓ，３Ｈ）；ＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ ２８５．１ [Ｍ＋１]＋。
【０２８３】
ＳＩ－１７：１Ｈ ＮＭＲ（４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ６）δ １１．２４（ｓ，０．５＊１Ｈ），１１．１０（ｓ，０．５＊１Ｈ），８．６２ － ８．４５（ｍ，２Ｈ），７．８０ － ７．６５（ｍ，１Ｈ），７．１４（ｄ，Ｊ＝ ８．８ Ｈｚ，１Ｈ），７．０７ － ６．８５（ｍ，１Ｈ），６．９５ － ６．７１（ｍ，１Ｈ），３．４５（ｓ，３Ｈ），２．３９（ｓ，３Ｈ）；ＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ ３０２．１ [Ｍ＋１]＋。
【０２８４】
ＳＩ－１９：１Ｈ ＮＭＲ（４００ ＭＨｚ，ＣＤＣｌ３）δ １１．３１（ｂｒ ｓ，１Ｈ），８．７３（ｓ，１Ｈ），８．７２（ｓ，１Ｈ），７．１４（ｔ，Ｊ＝ ４．８ Ｈｚ，１Ｈ），７．０９（ｄ，Ｊ＝ ７．２ Ｈｚ，１Ｈ），７．０７ － ７．０３（ｍ，２Ｈ），７．０３ －６．９４（ｍ，２Ｈ），３．５９（ｓ，３Ｈ），２．５９（ｓ，３Ｈ）；ＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ ２６７．１ [Ｍ＋１]＋。
【０２８５】
ＳＩ－２０：１Ｈ ＮＭＲ（４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ６）δ １１．４０（ｓ，１Ｈ），９．１０（ｓ，１Ｈ），８．６８（ｄ，Ｊ＝ ５．２ Ｈｚ，１Ｈ），８．４７（ｄ，Ｊ＝ ５．２ Ｈｚ，１Ｈ），７．２９ － ７．２２（ｍ，１Ｈ），７．２０ － ７．１４（ｍ，１Ｈ），７．１１ － ７．０３（ｍ，２Ｈ），３．５２（ｓ，３Ｈ），２．３６（ｓ，３Ｈ）；ＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ ２６７．１ [Ｍ＋１]＋。
【０２８６】
ＳＩ－２１：１Ｈ ＮＭＲ（４００ ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ６）δ １１．１２（ｓ，１Ｈ），８．５６（ｄｄ，Ｊ＝ ８．８，４．８ Ｈｚ，１Ｈ），８．５０（ｄ，Ｊ＝ ２．８ Ｈｚ，１Ｈ），７．７２（ｔｄ，Ｊ＝ ８．８，２．８ Ｈｚ，１Ｈ），７．１７（ｄ，Ｊ＝ ６．４ Ｈｚ，１Ｈ），７．１３ －７．０９（ｍ，１Ｈ），７．０４ － ６．９９（ｍ，１Ｈ），６．９９ － ６．９４（ｄ，１Ｈ），３．４６（ｓ，３Ｈ），２．４０（ｓ，３Ｈ）；ＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ ２８４．１ [Ｍ＋１]＋。
【０２８７】

実施例２：ステロイド受容体コアクチベーターの小分子レギュレーター
神経性及び代謝性障害、炎症性疾患、及びがんを治療するために適用され得るステロイド受容体コアクチベーターの新規種類の小分子レギュレーター（すなわち、阻害剤及び刺激剤）が本明細書に記載されている。
【０２８８】
ＳＩ化合物はがん細胞株において効能がある。
本明細書に記載の化合物は、実施例１に記載のように合成した。ＩＣ５０値は、対応する化合物の一連の濃度を７２時間インキュベートすることによってＭＤＡ－ＭＢ－４６８、ＢＴ－４７４、及びＭＣＦ－７細胞で測定した。結果を表１に示す。
【表１】

表１

化合物	ＭＤＡ－ＭＢ－４６８	ＢＴ－４７４	ＭＣＦ－７
ＳＩ－３	ＮＡ*		
ＳＩ－４	ＮＡ*		
ＳＩ－５	ＮＡ*		
ＳＩ－６	＋＋		
ＳＩ－７	ＮＡ*		
ＳＩ－８	ＮＡ*		
ＳＩ－９		＋＋＋	
ＳＩ－１０		＋＋＋	＋＋＋
ＳＩ－１１		＋＋＋	＋＋＋
ＳＩ－１２		＋＋＋	＋＋＋
ＳＩ－１４		＋＋＋	＋＋＋
ＳＩ－１５		＋＋＋	＋＋＋
ＳＩ－１６		＋＋＋	＋＋＋
ＳＩ－１７		＋＋＋	＋＋＋
ＳＩ－１９		＋＋＋	＋＋＋
ＳＩ－２０		＋＋＋	＋＋＋
ＳＩ－２１		＋＋＋	＋＋＋

【０２８９】
所定の化合物のＥＣ５０値は、対応する化合物の一連の濃度を７２時間インキュベートすることによってＭＤＡ－ＭＢ－４６８細胞で測定した。結果を表２に示す。

【表２】
表２

化合物	ＭＤＡ－ＭＢ－４６８
ＳＩ－Ｂ－０１	ＮＡ*
ＳＩ－Ｃ－０１	＋＋
ＳＩ－Ｄ－０１	＋＋
ＳＩ－Ｅ－０１Ｐ	＋＋
ＳＩ－Ｆ－０１	ＮＡ*
ＳＩ－Ｈ－０１	ＮＡ*
ＳＩ－Ｉ－０１	ＮＡ*

表１及び２において、「－」は１０μＭよりも高いＩＣ５０またはＥＣ５０値を表し、「＋」は１μＭ～１０μＭよりも高いＩＣ５０またはＥＣ５０値を表し、「＋＋」は０．１μＭ～１μＭのＩＣ５０またはＥＣ５０値を表し、「＋＋＋」は０．１μＭ未満のＩＣ５０またはＥＣ５０値を表す。また、表１及び２において、「＊」は、５００ｎＭの化合物濃度で細胞死が認められなかったことを示す。

【０２９０】
ＳＩ化合物はＳＲＣの内因性転写活性を調節する。
ＳＲＣ－１、ＳＲＣ－２、及びＳＲＣ－３の内因性転写活性に対する本明細書に記載のＳＩ化合物の効果を調査した。ＨｅＬａ細胞を、ｐＧＬ５－ＬＵＣレポーターならびにｐＢＩＮＤ及びｐＢＩＮＤ－ＳＲＣ－１、ｐＢＩＮＤ－ＳＲＣ－２、ｐＢＩＮＤ－ＳＲＣ－３の発現ベクターで一過性にトランスフェクトし、続いて異なる濃度のＳＩ化合物で２４時間治療した。ＳＩ－９、ＳＩ－１０、ＳＩ－１１、ＳＩ－１２、ＳＩ－１４、ＳＩ－１５、ＳＩ－１６、ＳＩ－１７、ＳＩ－１９、ＳＩ－２０、及びＳＩ－２１を含む本明細書に記載の化合物を図１におけるＳＲＣ－１、ＳＲＣ－２、及びＳＲＣ－３の内因性転写活性を阻害するそれらの能力について試験した。ＳＩ－３、ＳＩ－４、ＳＩ－５、ＳＩ－６、ＳＩ－７、及びＳＩ－８を含むいくつかの化合物は、所定用量でＳＲＣ－３の内因性活性を刺激することが可能であった（図２）。

【０２９１】
実施例３：
ＳＩ－１２は、膵臓、肺、脳、及び黒色腫の癌において試験された。膵臓腫瘍治療のための代表的な例が以下に記載されている。ホタルルシフェラーゼ細胞を安定に発現するＰａｎｃ－１細胞（Ｐａｎｃ－１－Ｌｕｃ、マウス当たり０．５×１０６個の細胞）をＳＣＩＤマウスの膵尾に注射した（６－７週間）。マウスをルシフェラーゼ画像化に基づいて２つの群に無作為化した（ｎ＝８／群）。腫瘍接種の８日後に、２つの群に、ＳＩ－１２（１０ｍｇ／ｋｇ、腹腔内注射、１日１回）または等容量のビヒクル対照を週に５回投与した。腫瘍増殖及び全身毒性を、ルシフェラーゼ画像化及び体重毎週に基づいて監視した。８週間の治療後にマウスを　　殺した。ＳＩ－１２治療は、膵臓腫瘍増殖を有意に遅延させた（図３Ａ及び３Ｃ）一方で、最小の体重減少を引き起こした（図３Ｂ）。実験の最後に、腫瘍を採取し、体重を測定した。ＳＩ－１２で治療されたマウスの平均腫瘍重量は、ビヒクルで治療された対応物の約３０％であった（図３Ｄ）。

【０２９２】
ＳＩ－１２がインビボでＳＲＣ－３ダウンレギュレーションを引き起こすかどうかを試験するために、腫瘍組織におけるＳＲＣ－３レベルを免疫組織化学（ＩＨＣ）によって測定した。対照群及びＳＩ－１２治療群の両方から収集した複数の腫瘍組織（Ｎ＞３）を処理し、抗ＳＲＣ－３抗体または抗Ｋｉ－６７抗体で免疫組織化学的に染色した。図３Ｅに示されるように、ＳＩ－１２治療腫瘍組織におけるＳＲＣ－３レベル（暗色）は、ビヒクル治療対照群よりも有意に低かった。細胞増殖マーカーであるＫｉ－６７も免疫化学的に分

析した。ＳＩ－１２治療腫瘍組織は、劇的に少ないＫｉ－６７陽性細胞（暗染色を有する細胞、図３Ｅ）を有していた。これらのデータに基づいて、ＳＩ－１２は、ＳＲＣ－３の阻害を介して膵臓腫瘍増殖を有意に阻害する。

【０２９３】

また、ＳＩ－１２を、キナーゼ活性を妨げるその能力について試験した。Ｋｉｎａｓｅ－Ｇｌｏ Ｌｕｍｉｎｅｓｃｅｎｔ Ｋｉｎａｓｅ Ａｓｓａｙシステム（Ｐｒｏｍｅｇａ；Ｍａｄｉｓｏｎ、ＷＩ）を使用して化合物の効果を２４のキナーゼのパネルで試験した。ＳＩ－１２は、アッセイシステムにおいて組換えキナーゼを妨害するその能力について、１０００ｎＭ、５０ｎＭ、及び５ｎＭの濃度で試験した。ＳＩ－１２の存在下でのＡＴＰ対ＡＤＰ変換の量をＤＭＳＯビヒクル対照と比較した。表３に示される値は、ＤＭＳＯビヒクル対照と比較したキナーゼ活性の百分率を表している。ＳＩ－１２は、この生化学アッセイシステムにおいてキナーゼ活性に最小の影響を及ぼした（表３参照）。

【表３】

表３

キナーゼ	１０００ｎＭ	５０ｎＭ	５ｎＭ
ＡＫＴ１	－	－	－
ＰＫＣａ	－	－	－
ＲＯＣＫ１	＋	＋	＋
Ａｕｒｏｒａ Ａ	－	－	－
ＣＫ２ａ １	－	－	－
ＩＫＫｂ	＋＋＋	＋＋＋	＋＋
ＣＫ１ａ １	－	－	－
ＣＫ１ｙ１	－	－	－
ＦＧＦＲ１	－	－	＋
ＣＤＫ２／ＣｙｃｌｉｎＥ１	－	－	－
ＪＡＫ３	＋	＋	－
ＧＳＫ３Ｂ	－	－	－
ＬＣＫ	－	－	－
Ｐ３８Ａ	－	－	－
ＳＹＫ	－	－	－
ＡＭＰＫ Ａ１／Ｂ１／Ｇ２	－	－	－
ＭＩＮＫ１	－	－	－
ＣＡＭＫ４	－	－	－
ＰＡＫ１／ＣＤＣ４２	－	－	－
ＣＨＫ１	－	－	－
ＩＲＡＫ４	－	－	－
ＤＡＰＫ１	－	－	－
ＴＡＫ１－ＴＡＢ１	－	－	－
ＭＡＰＫＡＰＫ２	－	－	－

【０２９４】

表３において、「－」は２０％未満の阻害を表し、「＋」は２０％～４０％の阻害を表し、「＋＋」は４０％～６０％の阻害を表し、「＋＋＋」は６０％を超える阻害を表す。

【０２９５】

図４は、ＳＩ－１２がＭＤＡ－ＭＢ－２３１異種移植モデルにおける腫瘍増殖を阻害し得ることを示している。ＳＩ－１２は、ＭＤＡ－ＭＢ－２３１腫瘍細胞がルシフェラーゼ発現ベクターで安定にトランスフェクトされたＭＤＡ－ＭＢ－２３１モデルで評価された。ヌードマウスは、ヌードマウスの除外乳房脂肪パッドに移植された２．５×１０^{5}個の腫瘍細胞を有していた。対照及びＳＩ－１２治療動物（週に４ｍｇ／ｋｇを５回）における腫瘍の進行に続いて、５週間の期間にわたってマウスのルシフェラーゼ画像化を行った。全身ルシフェラーゼ画像化を介して、原発腫瘍の部位及びＭＤＡ－ＭＢ－２３１の肺への転移の両方において、ＳＩ－１２がルシフェラーゼ発現を減少させたことが示された（図４）。

【０２９６】

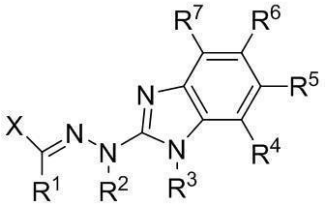
添付の特許請求の範囲の化合物及び方法は、本明細書に記載の特定の化合物及び方法によって範囲が限定されるものではなく、特許請求の範囲のいくつかの態様の例示として意図されており、機能的に均等である任意の化合物及び方法は、本開示の範囲内である。本明細書に示され、記載されたものに加えて化合物及び方法の様々な改変は、添付の特許請求の範囲内に入ることが意図される。更に、これらの化合物及び方法の所定の代表的な化合物、方法、及び態様のみが具体的に記載されているが、他の化合物及び方法が添付の特許請求の範囲内に入ることが意図される。それ故、工程、要素、成分、または構成要素の組み合わせは、本明細書において明示的に記述され得る；しかしながら、明示的に述べられていないとしても、工程、要素、成分、及び構成要素の他の全ての組み合わせが含まれる。

特定の実施形態では、例えば以下の項目が提供される。

（項目１）

以下の式の化合物：

【化９８】



またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、

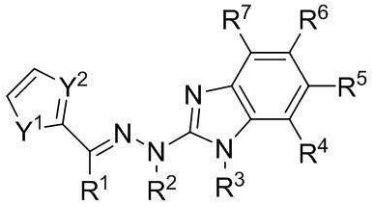
Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、

Ｒ^1、Ｒ^4、Ｒ^5、Ｒ^6、及びＲ^{7}は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、

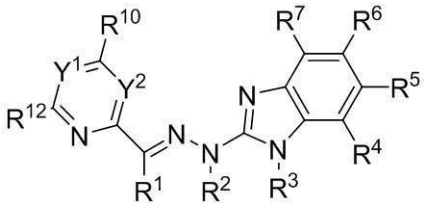
Ｒ^{2}及びＲ^{3}は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択され、

Ｘがピリジンまたはピリミジンである場合、（１）前記ピリジンまたは前記ピリミジンが置換されているか、（２）Ｒ^4、Ｒ^5、Ｒ^6、及びＲ^{7}のうちの少なくとも１つが水素以外であるか、または（３）Ｒ^{1}が水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、または置換もしくは非置換シクロア

ルキル以外である）。
（項目２）
前記化合物が、以下の式：
【化９９】

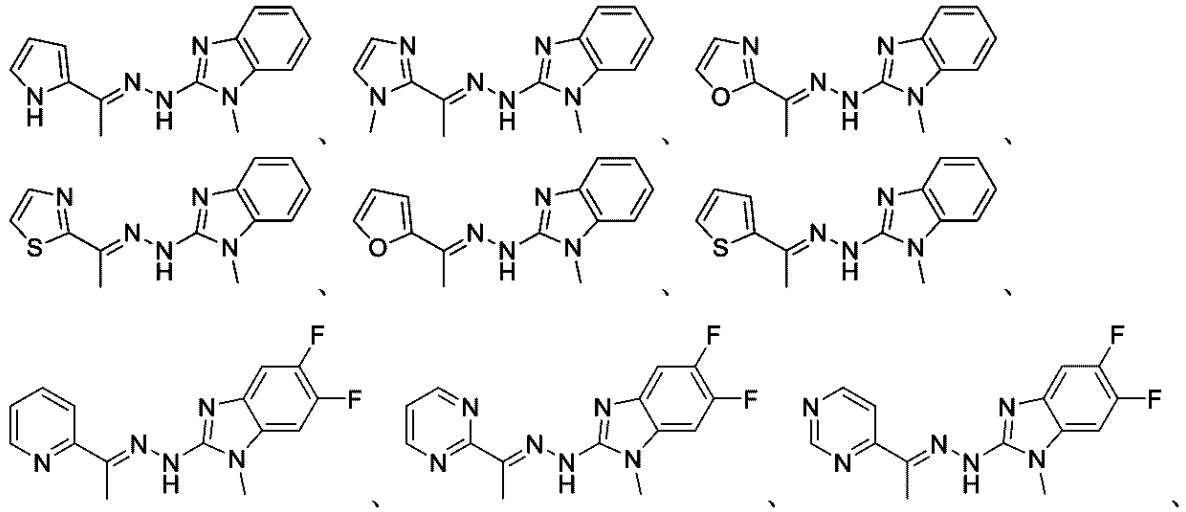


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
Ｙ１は、ＣＲＲ、ＮＲ、Ｏ、またはＳであり、
Ｙ２は、ＣＲまたはＮであり、
各Ｒは、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキニル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換シクロアルキル、または置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキルである）を有する、項目１に記載の化合物。
（項目３）
各Ｒが、水素または置換もしくは非置換アルキルである、項目２に記載の化合物。
（項目４）
前記化合物が、以下の式：
【化１００】

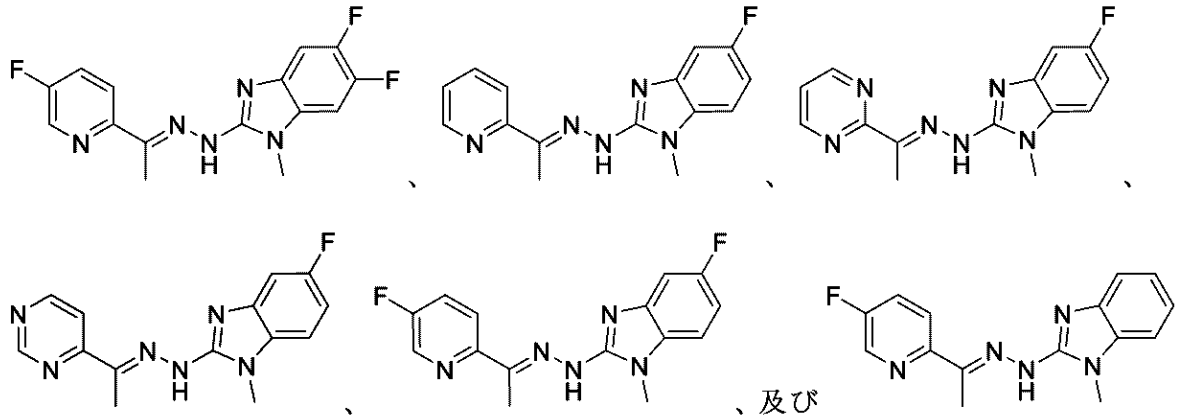


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
Ｙ１及びＹ２は、それぞれ独立して、ＣＲ及びＮから選択され、Ｒは、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキニル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換シクロアルキル、または置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキルであり、
Ｒ１０及びＲ１２は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、
Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ１０、Ｒ１２、及びＲのうちの少なくとも１つが、水素以外である）を有する、項目１に記載の化合物。
（項目５）
Ｒ、Ｒ１０、及びＲ１２が、それぞれ独立して、水素及びハロゲンから選択される、項目４に記載の化合物。

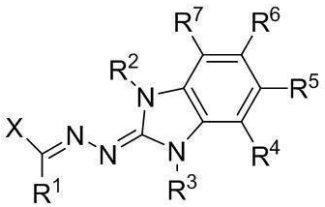
（項目６）
前記化合物が、
【化１０１】



【化１０２】



からなる群から選択される、項目１に記載の化合物。
（項目７）
項目１に記載の化合物の互変異性体。
（項目８）
前記互変異性体が、以下の式：
【化１０３】



またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、

Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、

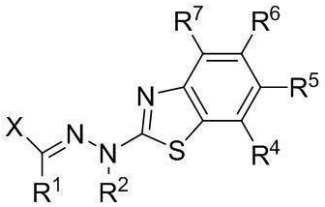
Ｒ２及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択され、

Ｘがピリジンまたはピリミジンである場合、（１）前記ピリジンまたは前記ピリミジンが置換されているか、（２）Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７のうちの少なくとも１つが水素以外であるか、または（３）Ｒ１が水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、または置換もしくは非置換シクロアルキル以外である）を有する、項目７に記載の互変異性体。

（項目９）

以下の式の化合物：

【化１０４】



またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、

Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、

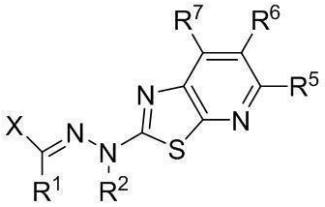
Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、

Ｒ２は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである）。

（項目１０）

以下の式の化合物：

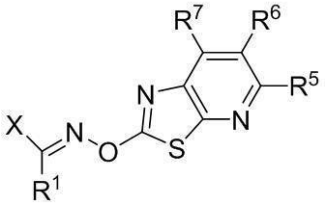
【化１０５】



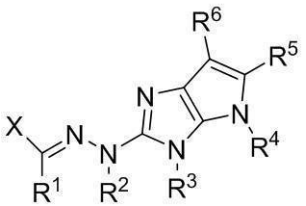
またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、

Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換

アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、
Ｒ１、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、
Ｒ２は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである）。
（項目１１）
以下の式の化合物：
【化１０６】

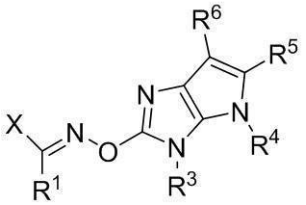


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、
Ｒ１、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される）。
（項目１２）
以下の式の化合物：
【化１０７】

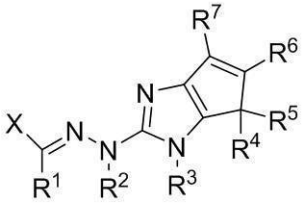


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、
Ｒ１、Ｒ５、及びＲ６は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキル

から選択され、
Ｒ２、Ｒ３、及びＲ４は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択される）。
（項目１３）
以下の式の化合物：
【化１０８】



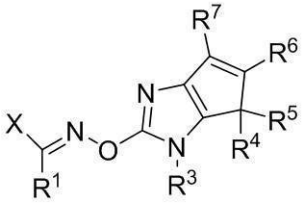
またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、
Ｒ１、Ｒ５、及びＲ６は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、
Ｒ３及びＲ４は、それぞれ独立して、水素、シアノ、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択される）。
（項目１４）
以下の式の化合物：
【化１０９】



またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、
Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、
Ｒ２及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択される）。
（項目１５）

以下の式の化合物：

【化１１０】



またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、

Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、

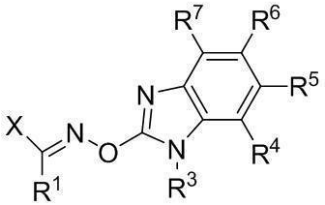
Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、

Ｒ３は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである）。

（項目１６）

以下の式の化合物：

【化１１１】



またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、

Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、

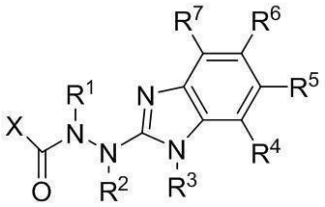
Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、

Ｒ３は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである）。

（項目１７）

以下の式の化合物：

【化１１２】

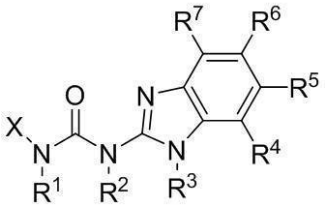


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、
Ｒ１、Ｒ２、及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択され、
Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される）。

（項目１８）

以下の式の化合物：

【化１１３】

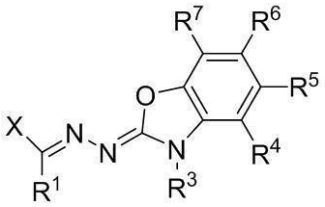


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、
Ｒ１、Ｒ２、及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択され、
Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される）。

（項目１９）

以下の式の化合物：

【化１１４】

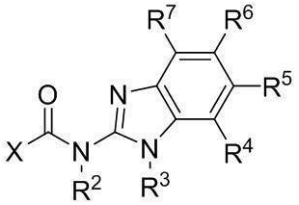


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、
Ｒ１、Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、
Ｒ３は、水素、置換もしくは非置換アルキル、または置換もしくは非置換アリールである）。

（項目２０）

以下の式の化合物：

【化１１５】

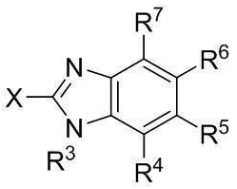


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、
Ｒ２及びＲ３は、それぞれ独立して、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールから選択され、
Ｒ４、Ｒ５、Ｒ６、及びＲ７は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される）。

（項目２１）

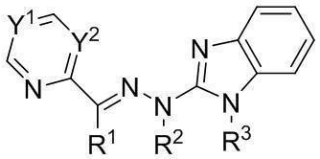
以下の式の化合物：

【化１１６】

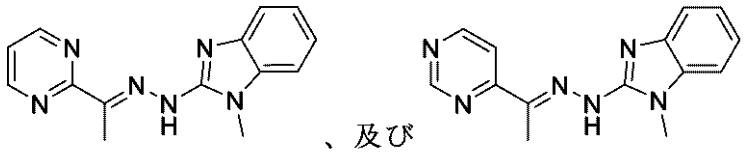


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
Ｘは、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり、
R^3は、水素、置換または非置換アルキル、及び置換または非置換アリールであり、
R^4、R^5、R^6、及びR^7は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択される）。
（項目２２）
前記化合物が、安定同位体で同位体置換されている、項目１～２１のいずれかに記載の化合物。
（項目２３）
前記安定同位体が、重水素、^{13}C、^{15}N、及び^{18}Oからなる群から選択される、項目２２に記載の化合物。
（項目２４）
項目１～２３のいずれか１項に記載の化合物及び薬学的に許容される担体を含む組成物。
（項目２５）
項目１～２４のいずれか１項に記載の化合物または組成物を含むキット。
（項目２６）
対象においてステロイド受容体コアクチベーター関連疾患を治療または予防する方法であって、
有効量の項目１～２４のいずれか１項に記載の化合物または組成物を前記対象に投与することを含む、前記方法。
（項目２７）
前記ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患が、がんである、項目２６に記載の方法。
（項目２８）
前記ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患が、代謝障害である、項目２６に記載の方法。
（項目２９）
前記ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患が、ヒト免疫不全ウイルスである、項目２６に記載の方法。
（項目３０）
前記ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患が、神経変性障害である、項目２６に記載の方法。
（項目３１）
前記ステロイド受容体コアクチベーター関連疾患が、炎症性疾患である、項目２６に記載の方法。
（項目３２）

前記ステロイド受容体コアクチベーターが、ＳＲＣ－１、ＳＲＣ－２、またはＳＲＣ－３である、項目２６～３１のいずれか１項に記載の方法。
（項目３３）
第２の化合物または組成物を投与することを更に含む、項目２６～３２のいずれか１項に記載の方法。
（項目３４）
前記第２の化合物または組成物が、化学療法剤である、項目３３に記載の方法。
（項目３５）
細胞内のステロイド受容体コアクチベータータンパク質を調節する方法であって、
細胞を有効量の項目１～２３のいずれか１項に記載の化合物と接触させることを含む、前記方法。
（項目３６）
前記ステロイド受容体コアクチベータータンパク質が、ＳＲＣ－１、ＳＲＣ－２、またはＳＲＣ－３である、項目３５に記載の方法。
（項目３７）
前記接触が、インビトロまたはインビボで実施される、項目３５または３６に記載の方法。
（項目３８）
対象における代謝障害、ヒト免疫不全ウイルス、神経変性障害、または炎症性疾患を治療する方法であって、
有効量の以下の式の化合物：
【化１１７】

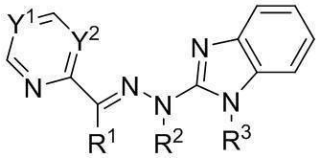


またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
Ｙ１及びＹ２は、それぞれ独立して、ＣＨ及びＮから選択され、
Ｒ１、Ｒ２、及びＲ３は、それぞれ独立して、水素及び置換または非置換アルキルから選択され、
Ｙ１及びＹ２のうちの少なくとも１つがＮである）を前記対象に投与することを含む、前記方法。
（項目３９）
前記化合物が、
【化１１８】

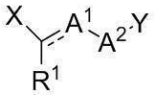


からなる群から選択される、項目３８に記載の方法。
（項目４０）
細胞内のステロイド受容体コアクチベータータンパク質を調節する方法であって、
細胞を有効量の以下の式の化合物：

【化１１９】



またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
Ｙ１及びＹ２は、それぞれ独立して、ＣＨ及びＮから選択され、
Ｒ１、Ｒ２、及びＲ３は、それぞれ独立して、水素及び置換または非置換アルキルから選択され、
Ｙ１及びＹ２のうちの少なくとも１つがＮである）と接触させることを含む、前記方法。
（項目４１）
前記ステロイド受容体コアクチベータータンパク質が、ＳＲＣ－１、ＳＲＣ－２、またはＳＲＣ－３である、項目４０に記載の方法。
（項目４２）
前記接触が、インビトロまたはインビボで実施される、項目４０または４１に記載の方法。
（項目４３）
以下の式の化合物：
【化１２０】



またはその薬学的に許容される塩もしくはプロドラッグ（式中、
【化１２１】
===

は、単結合または二重結合であり、
Ｘ及びＹは、それぞれ独立して、置換または非置換ヘテロシクロアルキル、置換または非置換ヘテロシクロアルケニル、置換または非置換ヘテロシクロアルキニル、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換アリール、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、及び置換または非置換アルキニルからなる群から選択され、
Ａ１は、Ｂ、ＣＲ、ＣＲＲ’、Ｎ、ＮＲ、Ｏ、またはＳであり、
Ａ２は、ＢＲ、ＣＲＲ’、ＮＲ、Ｏ、またはＳであり、
Ｒ及びＲ’は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換ヘテロアルキル、置換または非置換ヘテロアルケニル、置換または非置換ヘテロアルキニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換シクロアルキル、及び置換または非置換ヘテロシクロアルキルから選択され、
Ｒ１は、水素、ハロゲン、シアノ、トリフルオロメチル、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキル、置換もしくは非置換ヘテロアルケニル、置換もしくは非置換ヘテロアルキニル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、置換もしくは非置換シクロアルキル、または置換もしくは非置換ヘテロシクロアルキルであり、
Ｘがピリジンである場合、
【化１２２】
===

は二重結合であり、Ａ１がＮである場合、Ａ２はＮＨであり、Ｒ１がメチルである場合、

次いでＹは非置換ベンズイミダゾールまたはＮ－メチル－ベンズイミダゾールではない）。（項目４４）

対象においてステロイド受容体コアクチベーター関連疾患を治療または予防する方法であって、

有効量の項目４３に記載の化合物を前記対象に投与することを含む、前記方法。

【図面】

【図１－１】

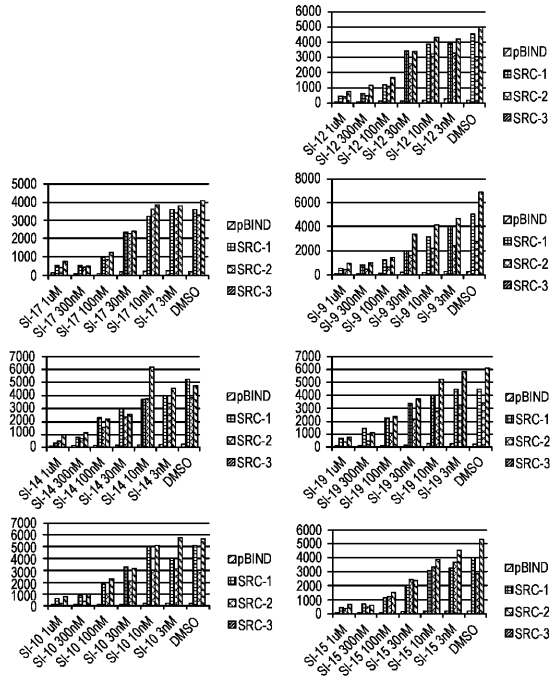


Figure 1

【図１－２】

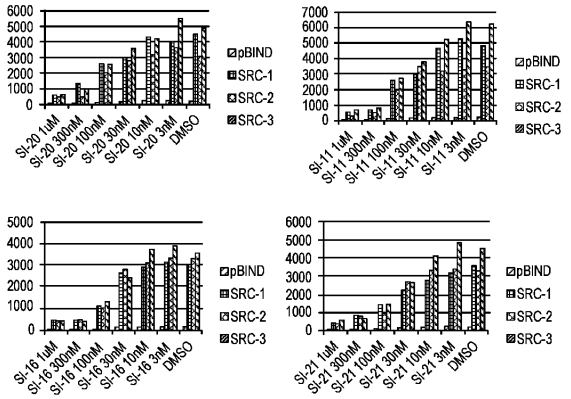


Figure 1 (cont'd)

【図２】

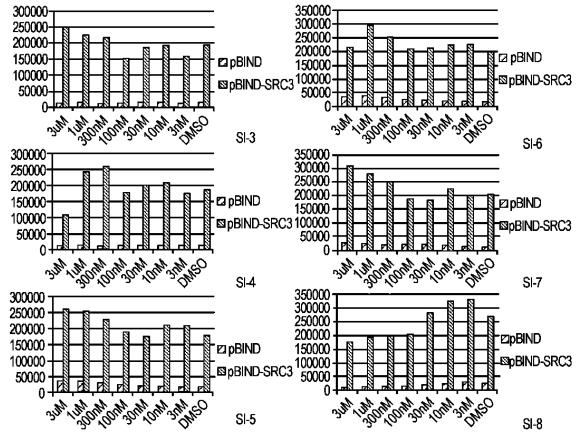
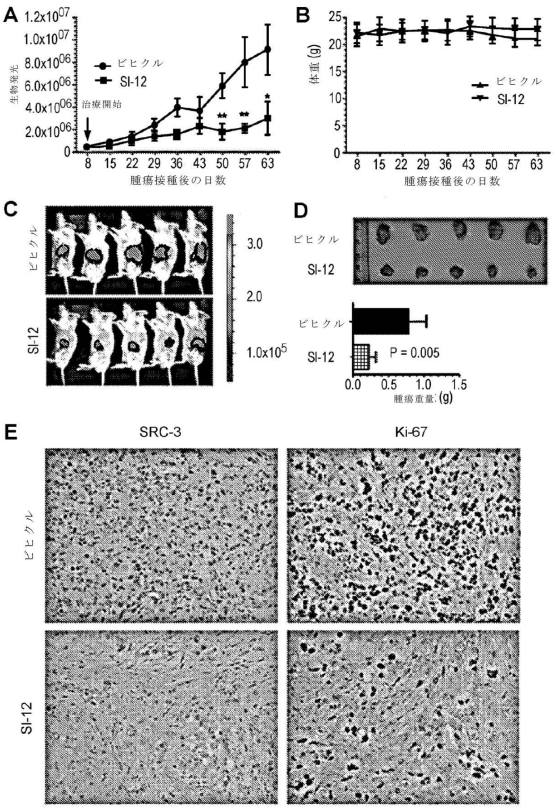
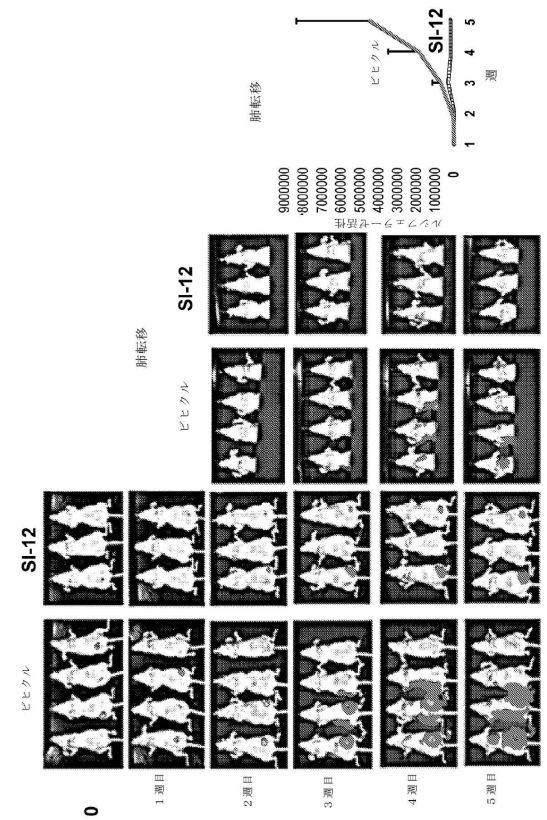


Figure 2

【図３】



【図４】



フロントページの続き

(51)国際特許分類			FI		
A61P	*43/00*	*(2006.01)*	A61P	43/00	111
A61P	*35/00*	*(2006.01)*	A61P	43/00	121
A61P	*31/18*	*(2006.01)*	A61P	35/00	
A61P	*29/00*	*(2006.01)*	A61P	31/18	
A61P	*25/28*	*(2006.01)*	A61P	29/00	
A61P	*3/00*	*(2006.01)*	A61P	25/28	
			A61P	3/00	

(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)

前置審査

(72)発明者 ロナルド， デイビッド マイケル
アメリカ合衆国 テキサス ７７５８４， パーランド， ベサニー ベイ ドライブ １２６０３
(72)発明者 ワン， ジン
アメリカ合衆国 テキサス ７７４７９， シュガー ランド， ハウズリー ウェイ ６７１１
(72)発明者 シュー， ジアンミン
アメリカ合衆国 テキサス ７７４０１， ベルエアー， ミモザ ドライブ ４１０３
(72)発明者 チェン， ジアンウェイ
アメリカ合衆国 テキサス ７７０８１， ヒューストン， ビソネット ストリート ５６０６， アパートメント ７４
審査官 谷尾 忍

(56)参考文献 米国特許出願公開第２００３／０１６６６５８（ＵＳ，Ａ１）
特表２０１３－５３３２３７（ＪＰ，Ａ）
PERVOVA I G; MELKOZEROV S A; SLEPUKHIN P A; ET AL，SYNTHESIS, STRUCTURE, AND PHOTOCHEMICAL PROPERTIES OF HETARYLALDEHYDES BENZIMIDAZOLYL-2-HYDRAZONES，RUSSIAN JOURNAL OF GENERAL CHEMISTRY，ロシア，2010年05月，VOL:80, NR:5，PAGE(S):987 - 993，http://dx.doi.org/10.1134/S1070363210050221
IYAS ALDIB; JALAL SOUBHYE; KARIM ZOUAOUI BOUDJELTIA; ET AL，EVALUATION OF NEW SCAFFOLDS OF MYELOPEROXIDASE INHIBITORS BY RATIONAL DESIGN COMBINED WITH HIGH-THROUGHPUT VIRTUAL SCREENING，JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY，2012年07月13日，VOL:55, NR:16，PAGE(S):7208 - 7218，http://dx.doi.org/10.1021/jm3007245
NATASHA THORNE; MIN SHEN; WENDY A LEA; ET AL，FIREFLY LUCIFERASE IN CHEMICAL BIOLOGY: A COMPENDIUM OF INHIBITORS, MECHANISTIC EVALUATION OF CHEMOTYPES, AND SUGGESTED USE AS A REPORTER，CHEMISTRY AND BIOLOGY，英国，2012年08月，VOL:19, NR:8，PAGE(S):1060 - 1072，http://dx.doi.org/10.1016/j.chembiol.2012.07.015
BRAD E SLEEBS; WILHEMUS J A KERSTEN; SANJI KULASEGARAM; ET AL，DISCOVERY OF POTENT AND SELECTIVE BENZOTHIAZOLE HYDRAZONE INHIBITORS OF BCL-X L，JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY，2013年06月14日，VOL:56, NR:13，PAGE(S):5514 - 5540，http://dx.doi.org/10.1021/jm400556w
CHRISTOPHER O CAMPBELL; DANIEL N SANTIAGO; WAYNE C GUIDA; ET AL，IN SILICO CHARACTERIZATION OF AN ATYPICAL MAPK PHOSPHATASE OF PLASMODIUM FALCIPARUM AS A SUITABLE TARGET FOR DRUG DISCOVERY，CHEMICAL BIOLOGY & DRUG DESIGN，英国，2014年05月12日，VOL:84, NR:2，PAGE(S):158 - 168，http://dx.doi.org/10.1111/cbdd.12315
GEMMA SANDRA; GIOVANI SIMONE; BRINDISI MARGHERITA; ET AL，QUINOLYLHYDRAZONES AS NOVEL INHIBITORS OF PLASMODIUM FALCIPARUM SERINE PROTEASE PFSUB1，BIOORGANIC & MEDICINAL CHEMISTRY LETTERS，2012年06月23日，VOL:22, NR:16，PAGE(S):5317 - 5321，http://dx.doi.org/10.1016/j.bmcl.2012.06.023

HALL I H; ET AL，INVESTIGATIONS ON THE MECHANISM OF ACTION OF THE NOVEL ANTITUMOR AGENTS 2-BENZOTHIAZOLYL, 2-BENZOXAZOLYL, AND 2-BENZIMIDAZOLYL HYDRAZONES DERIVED FROM 2-ACETYLPYRIDINE，ARCH. PHARM. PHARM. MED. CHEM.，WILEY VERLAG，1999年，VOL:332, NR:4，PAGE(S):115 - 123，http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1521-4184(19994)332:4〈115::AID-ARDP115〉3.3.CO;2-7
JOHNNY EASMON; GERHARD PUERSTINGER; THOMAS ROTH; ET AL，2-BENZOXAZOLYL AND 2-BENZIMIDAZOLYL HYDRAZONES DERIVED FROM 2-ACETYLPYRIDINE: A NOVEL CLASS OF ANTITUMOR AGENTS，INTERNATIONAL JOURNAL OF CANCER，米国，2001年10月，VOL:94, NR:1，PAGE(S):89 - 96，http://dx.doi.org/10.1002/ijc.1427

(58)調査した分野 (Int.Cl.，ＤＢ名)

ＣＯ７Ｄ ４０１／１２
ＣＯ７Ｄ ４０３／１２
ＣＯ７Ｄ ４０５／１２
ＣＯ７Ｄ ４０９／１２
ＣＯ７Ｄ ４１３／１２
ＣＯ７Ｄ ４１７／１２
Ａ６１Ｋ ３１／４１８４
Ａ６１Ｋ ３１／４２２
Ａ６１Ｋ ３１／４２７
Ａ６１Ｋ ３１／４４３９
Ａ６１Ｋ ３１／５０６
Ａ６１Ｋ ４５／００
ＣＡｐｌｕｓ／ＲＥＧＩＳＴＲＹ（ＳＴＮ）