

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 3 部門第 2 区分

【発行日】令和 7 年 3 月 14 日(2025.3.14)

【公開番号】特開 2023-119042(P2023-119042A)

【公開日】令和 5 年 8 月 25 日(2023.8.25)

【年通号数】公開公報(特許)2023-160

【出願番号】特願 2023-113057(P2023-113057)

【国際特許分類】

C 07 J 63/00(2006.01)

10

A 61 P 25/00(2006.01)

A 61 P 25/24(2006.01)

A 61 P 25/08(2006.01)

A 61 K 31/18(2006.01)

A 61 K 31/122(2006.01)

A 61 K 31/166(2006.01)

A 61 K 31/133(2006.01)

A 61 K 31/277(2006.01)

A 61 K 31/16(2006.01)

A 61 K 31/167(2006.01)

20

A 61 K 31/4402(2006.01)

A 61 K 31/121(2006.01)

A 61 K 31/415(2006.01)

A 61 K 31/41(2006.01)

【F I】

C 07 J 63/00 C S P

A 61 P 25/00

A 61 P 25/24

A 61 P 25/08

A 61 K 31/18

30

A 61 K 31/122

A 61 K 31/166

A 61 K 31/133

A 61 K 31/277

A 61 K 31/16

A 61 K 31/167

A 61 K 31/4402

A 61 K 31/121

A 61 K 31/415

A 61 K 31/41

40

【誤訳訂正書】

【提出日】令和 7 年 3 月 5 日(2025.3.5)

【誤訳訂正 1】

【訂正対象書類名】特許請求の範囲

【訂正対象項目名】全文

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

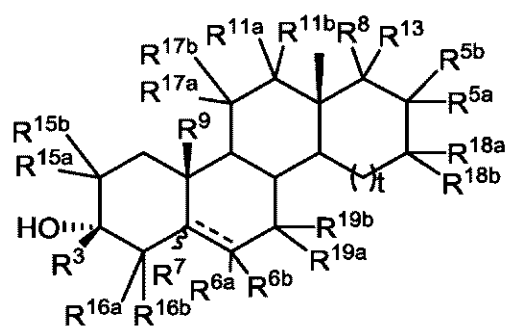
【特許請求の範囲】

【請求項 1】

50

式 ( I - I ) :

【化 4 2 4】



10

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であって、

式 ( I - I ) において、

t は 1 であり ;

R<sup>7</sup> は、水素であり ;

R<sup>3</sup> は、置換もしくは非置換 C<sub>1</sub> ~ 3 アルキルであり ;

R<sup>9</sup> は、水素または非置換 C<sub>1</sub> ~ 3 アルキルであり ;

R<sup>5a</sup>、R<sup>5b</sup>、R<sup>6a</sup>、R<sup>6b</sup>、R<sup>11a</sup>、R<sup>11b</sup>、R<sup>15a</sup>、R<sup>15b</sup>、R<sup>16a</sup>、R<sup>16b</sup>、R<sup>17a</sup>、R<sup>17b</sup>、R<sup>18a</sup>、R<sup>18b</sup>、R<sup>19a</sup>、または R<sup>19b</sup> の各々は、水

20

素であり ;  
R<sup>8</sup> および R<sup>13</sup> の各々は、独立して、水素、ハロゲン、シアノ、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、-SR<sup>A1</sup>、-N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-C(O)R<sup>A1</sup>、-C(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OC(=O)R<sup>A1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A1</sup>、-OC(=O)SR<sup>A1</sup>、-OC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-SC(=O)R<sup>A2</sup>、-SC(=O)OR<sup>A1</sup>、-SC(=O)SR<sup>A1</sup>、-SC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-NHC(=O)R<sup>A1</sup>、-NHC(=O)OR<sup>A1</sup>、-NHC(=O)SR<sup>A1</sup>、-NHC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>R<sup>A2</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>OR<sup>A1</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>A2</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>OR<sup>A1</sup>、-S(=O)R<sup>A2</sup>、-SO<sub>2</sub>R<sup>A2</sup>、または -S(=O)<sub>2</sub>OR<sup>A1</sup> であり、ここで R<sup>A1</sup> の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、-SO<sub>2</sub>R<sup>A2</sup>、-C(O)R<sup>A2</sup> であるが、または 2 つの R<sup>A1</sup> 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し ; R<sup>A2</sup> は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり ;

30

40

ここで、R<sup>8</sup> および R<sup>13</sup> の少なくとも 1 つは、エチル、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、-SR<sup>A1</sup>、-N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-C(O)R<sup>A1</sup>、-C(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OC(=O)R<sup>A1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A1</sup>、-OC(=O)SR<sup>A1</sup>、-OC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-SC(=O)R<sup>A2</sup>、-SC(=O)OR<sup>A1</sup>、-SC(=O)SR<sup>A1</sup>、-SC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-NHC(=O)R<sup>A1</sup>、-NHC(=O)OR<sup>A1</sup>、-NHC(=O)SR<sup>A1</sup>、-NHC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>R<sup>A2</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>OR<sup>A1</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>A2</sup>、-S-

50

$S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ でなければならないか；あるいは

$R^8$ および $R^{13}$ が一緒になってオキソ(=O)基を形成し、

ここで、 $R^8$ と $R^{13}$ との両方がメチルであることはできず；そして

ここで、

【化 4 2 6】

は、単結合を表す、化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

【請求項 2】

$R^7$ が、 $R^9$ に対してシス位の水素である、請求項 1 に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

【請求項 3】

$R^7$ が、 $R^9$ に対してトランス位の水素である、請求項 1 に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

【請求項 4】

$R^3$ が、非置換 $C_{1\sim3}$ アルキルまたは非置換 $C_{1\sim3}$ アルコキシ- $C_{1\sim3}$ アルキルである、請求項 1～3 のいずれか 1 項に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

【請求項 5】

$R^3$ が、メチル、エチル、メトキシメチル、またはエトキシメチルである、請求項 1～4 のいずれか 1 項に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

【請求項 6】

$R^3$ が、メチルまたはエトキシメチルである、請求項 1～5 のいずれか 1 項に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

【請求項 7】

$R^9$ が、水素、メチル、またはエチルである、請求項 1～6 のいずれか 1 項に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

【請求項 8】

$R^9$ が、水素である、請求項 1～7 のいずれか 1 項に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

【請求項 9】

$R^9$ が、メチルである、請求項 1～7 のいずれか 1 項に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

【請求項 10】

$R^8$ が、水素でありそして $R^{13}$ が、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、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-C(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、または $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、請求項 1～9 のいずれか 1 項に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

【請求項 11】

$R^8$ または $R^{13}$ が、置換もしくは非置換アルキル、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-C(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、または $-OC(=O)OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、請求項 1～9 のいずれか 1 項に記載の化合物または薬学的に受容

10

20

30

40

50

可能な塩。

【請求項 1 2】

$R^8$  または  $R^{13}$  が、 $-C(O)R^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  は、置換もしくは非置換ヘテロアリールで置換されたアルキルである、請求項 1 ~ 9 または 11 のいずれか 1 項に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

【請求項 1 3】

$R^8$  が、水素であり、 $R^{13}$  が、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-C(=O)N(R^{A1})_2$ 、または  $-C(=O)NH(R^{A1})$  であり、そして  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、 $-SO_2R^{A2}$ 、 $-C(O)R^{A2}$  であるか、または 2 つの  $R^{A1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し、ここで、前記複素環またはヘテロアリールは、少なくとも 1 つの窒素原子を有し；そして  $R^{A2}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

10

【請求項 1 4】

$R^8$  が、水素であり、そして  $R^{13}$  が、 $-N(R^{A1})_2$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、 $-SO_2R^{A2}$ 、 $-C(O)R^{A2}$  であるか、または 2 つの  $R^{A1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し、ここで、前記複素環またはヘテロアリールは、少なくとも 1 つの窒素原子を有し；そして  $R^{A2}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

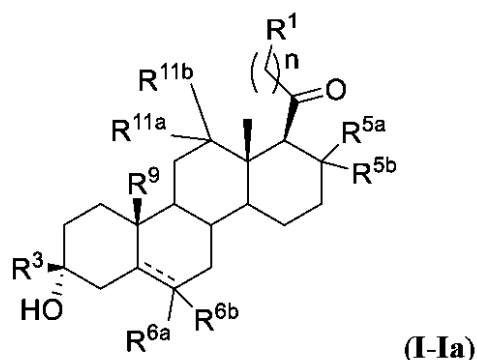
20

30

【請求項 1 5】

前記式 (I - I) の化合物が、式 (I - Ia)

【化 6 1 0】



40

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であり、

ここで、 $R^1$  は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-OC($

50

$=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、  
 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、  
 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、  
 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、  
 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または  $-S(=O)_2OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$   
 の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カル  
 ボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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であるか、または 2 つの  $R^{A1}$  基が一緒になって置換もしく  
 は非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$  は、置換もしくは非置換  
 アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置  
 換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

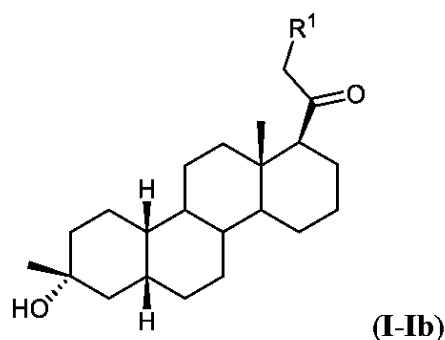
10

$n$  は、0、1、2、または 3 である、請求項 1 に記載の化合物または薬学的に受容可能  
 な塩。

【請求項 16】

前記式 (I-Ia) の化合物が、式 (I-Ib)

【化 611】



20

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩である、請求項 15 に記載の化合物または薬学  
 的に受容可能な塩。

【請求項 17】

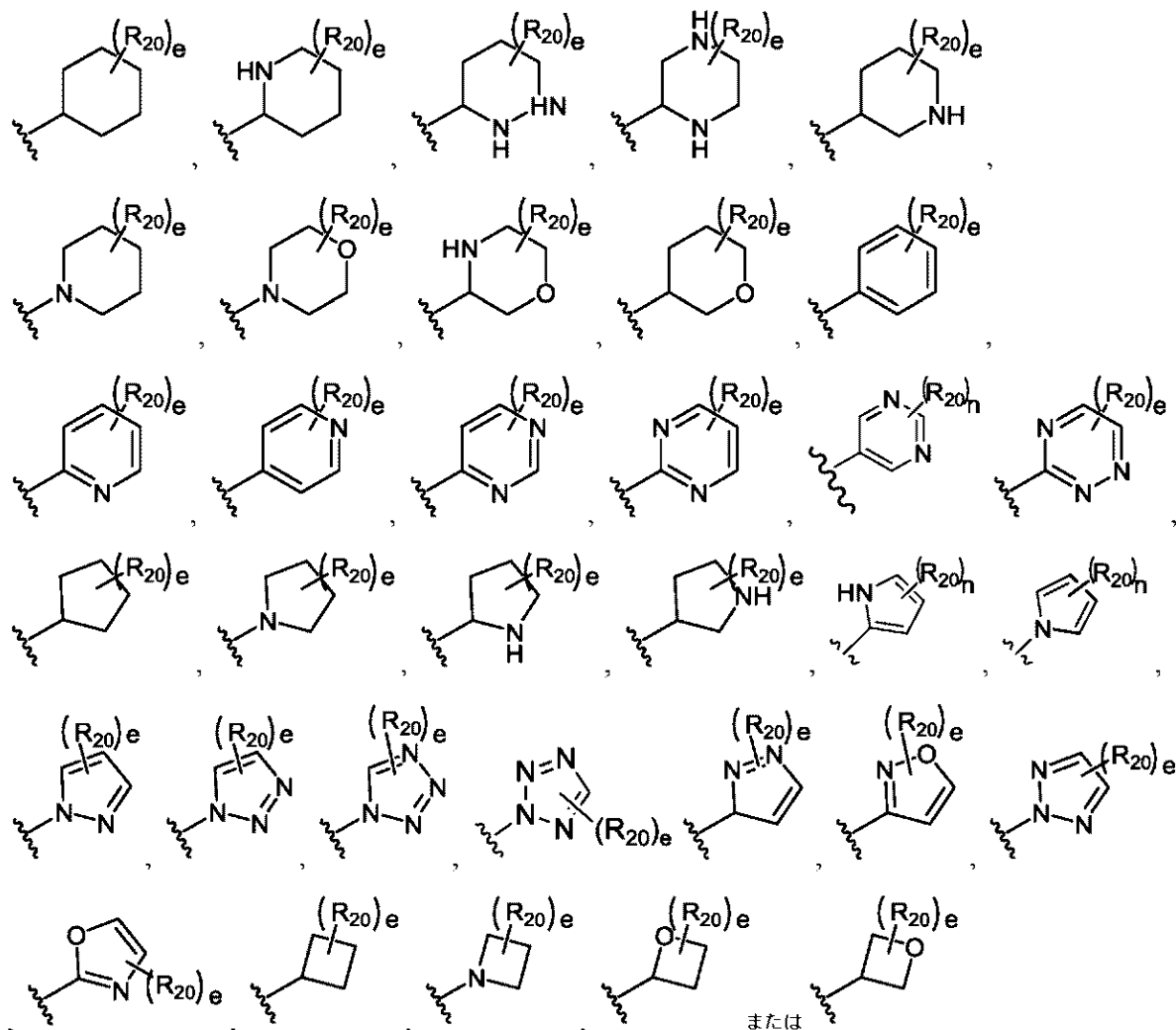
30

$R^1$  が、

40

50

## 【化 4 3 0】



10

20

30

40

であり、

ここで  $R_{20}$  の各々の存在は独立して、ハロゲン、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OS}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、または  $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ ；置換もしくは非置換  $\text{C}_{1-6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $\text{C}_{3-4}$  カルボシクリル、または置換もしくは非置換の 3～4 員ヘテロシクリルであり；

ここで  $\text{R}^{\text{GA}}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $\text{C}_{1-6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $\text{C}_{3-6}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3～6 員ヘテロシクリル、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であるか、または 2 つの  $\text{R}^{\text{GA}}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の炭素環または複素環式環を形成し；

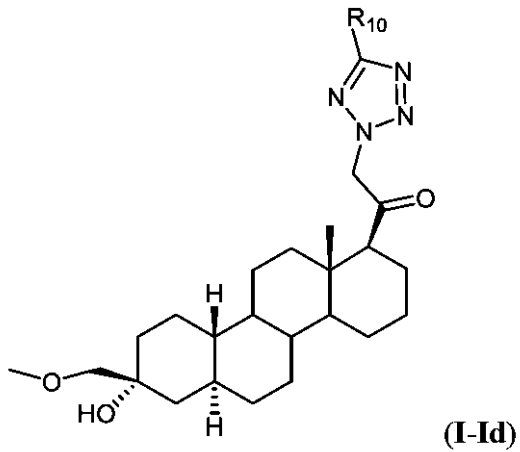
$n$  および  $e$  の各々は、独立して、0、1、2、3、4、または 5 である、請求項 1 5 または請求項 1 6 に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

## 【請求項 1 8】

前記式 (I - I) の化合物が、式 (I - I d)

50

## 【化 6 1 2】



10

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であり、

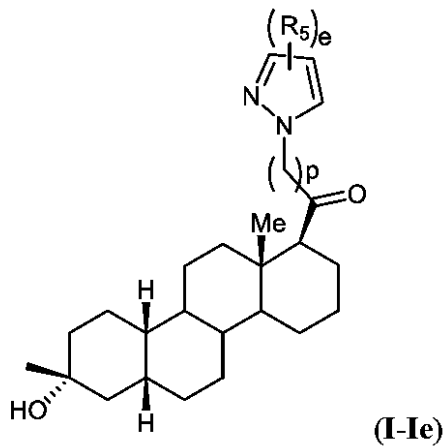
ここで、 $R_{10}$  は独立して、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、請求項 1 に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

## 【請求項 19】

前記式 (I - I) の化合物が、式 (I - I e)

20

## 【化 6 1 3】



30

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であり、

ここで、 $e$  は、0、1、2、または 3 であり；

$p$  は、0、1、または 3 であり；

$R_5$  の各々は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、請求項 1 に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

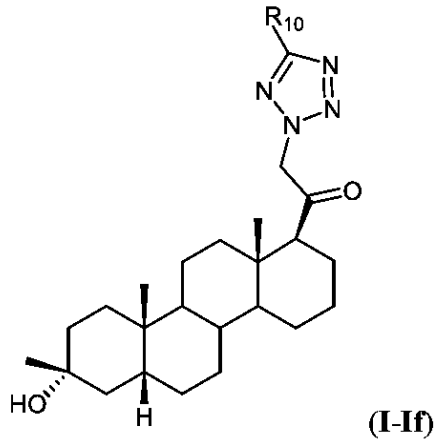
## 【請求項 20】

40

前記式 (I - I) の化合物が、式 (I - I f)

50

## 【化 6 1 4】



10

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であり、

ここで、 $R_{10}$ は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、請求項1に記載の化合物または薬学的に受容可能な塩。

## 【請求項 2 1】

## 【表 2 1 - 1】

	<b>I-A7</b>
	<b>I-A8</b>

20

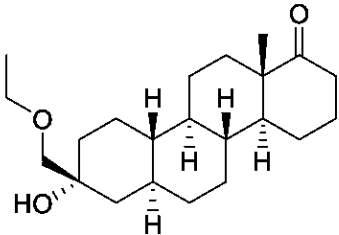
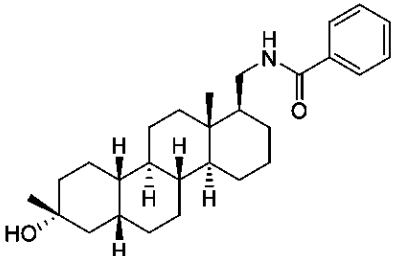
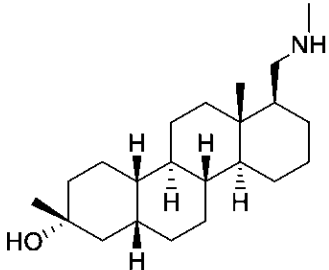
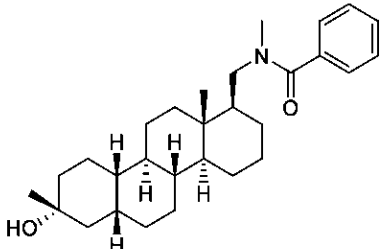
30

40

50



【表 2 1 - 2】

	<b>I-B6</b>
	<b>I-C4</b>
	<b>I-C5</b>
	<b>I-C6</b>

10

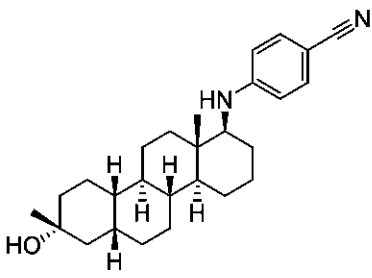
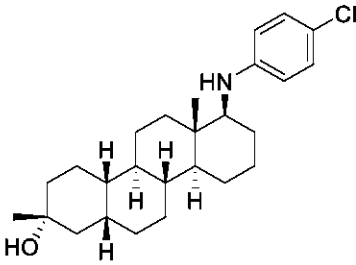
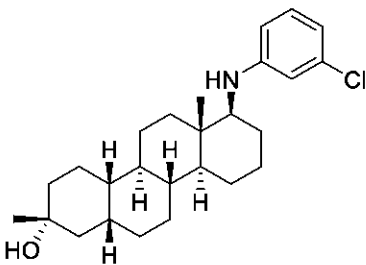
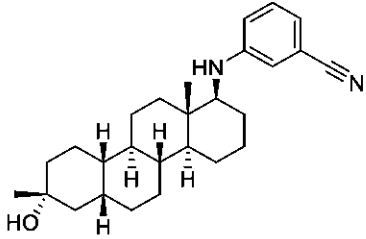
20

30

40

50

【表 2 1 - 3】

	<b>I-7</b>
	<b>I-8</b>
	<b>I-9</b>
	<b>I-10</b>

10

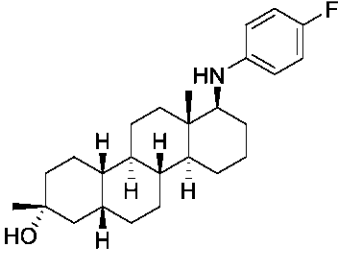
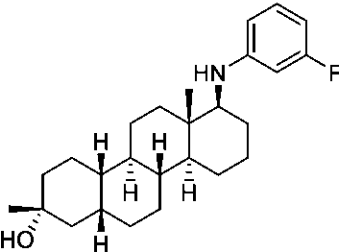
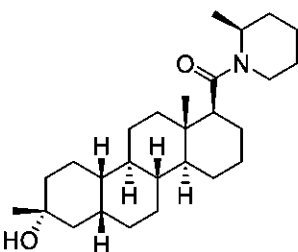
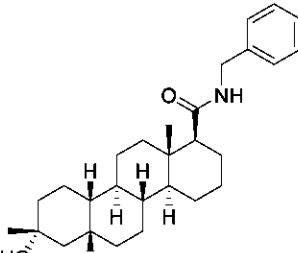
20

30

40

50

【表 2 1 - 4】

	<b>I-11</b>
	<b>I-12</b>
	<b>I-E4</b>
	<b>I-14</b>

10

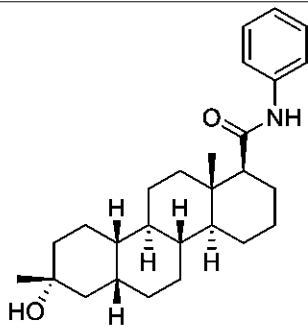
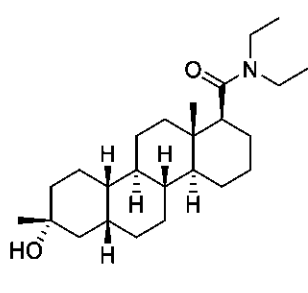
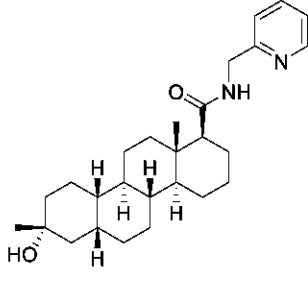
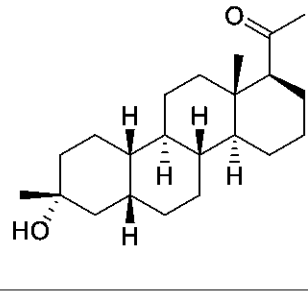
20

30

40

50

【表 2 1 - 5】

	<b>I-15</b>
	<b>I-16</b>
	<b>I-17</b>
	<b>I-D7</b>

10

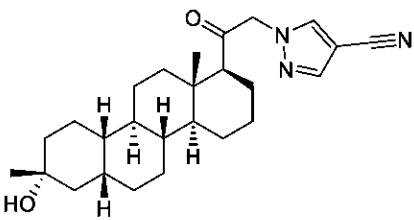
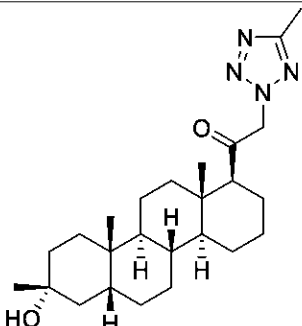
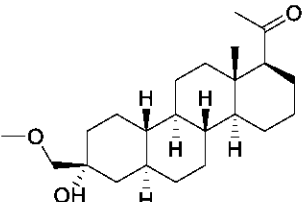
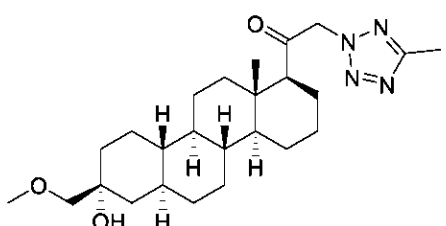
20

30

40

50

【表 2 1 - 6】

 <p>Chemical structure of steroid I-D9: A steroid nucleus with a hydroxyl group at C3, methyl groups at C10 and C13, and a side chain at C17 consisting of a carbonyl group, a methylene group, and a 4-cyano-1H-imidazol-2-yl group.</p>	<b>I-D9</b>
 <p>Chemical structure of steroid I-20: A steroid nucleus with a hydroxyl group at C3, methyl groups at C10 and C13, and a side chain at C17 consisting of a carbonyl group, a methylene group, and a 1,2,4-triazol-5-yl group.</p>	<b>I-20</b>
 <p>Chemical structure of steroid I-G14: A steroid nucleus with a hydroxyl group at C3, a methoxy group at C4, methyl groups at C10 and C13, and an acetyl group at C17.</p>	<b>I-G14</b>
 <p>Chemical structure of steroid I-G16: A steroid nucleus with a hydroxyl group at C3, a methoxy group at C4, methyl groups at C10 and C13, and a side chain at C17 consisting of a carbonyl group, a methylene group, and a 1,2,4-triazol-5-yl group.</p>	<b>I-G16</b>

10

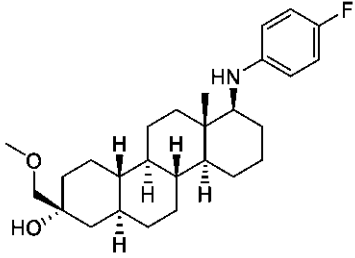
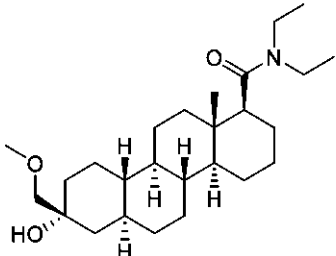
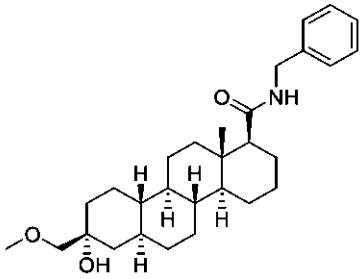
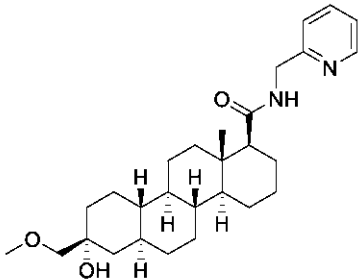
20

30

40

50

【表 2 1 - 7】

	<b>I-23</b>
	<b>I-M3</b>
	<b>I-25</b>
	<b>I-26</b>

10

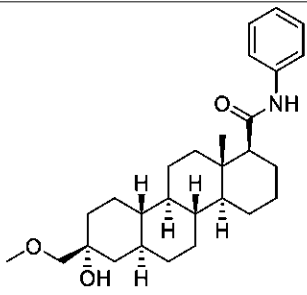
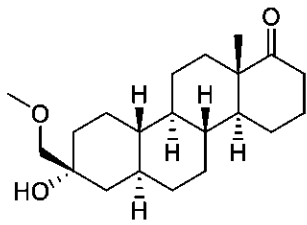
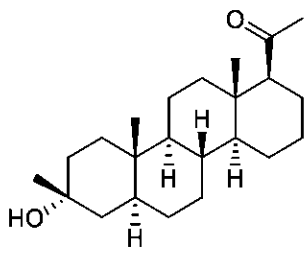
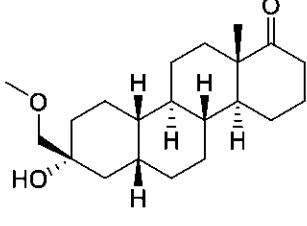
20

30

40

50

【表 2 1 - 8】

	<b>I-27</b>
	<b>I-H5</b>
	<b>I-K2</b>
	<b>I-L6</b>

10

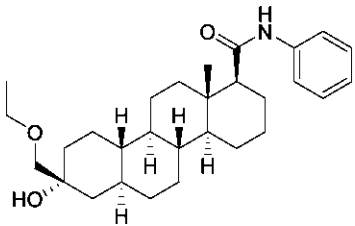
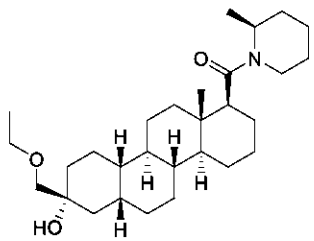
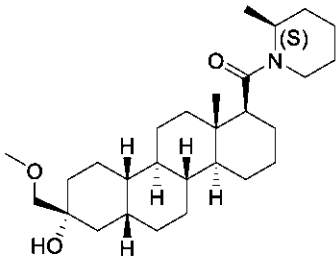
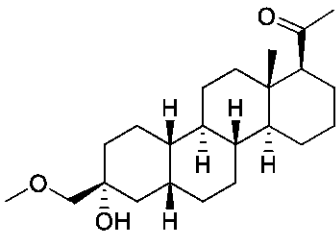
20

30

40

50

【表 2 1 - 9】

	<b>I-B11</b>
	<b>I-P9</b>
	<b>I-L14</b>
	<b>I-L17</b>

10

20

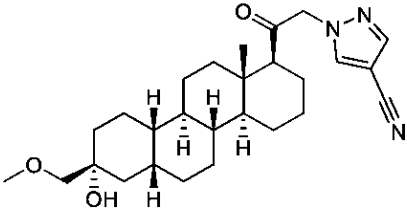
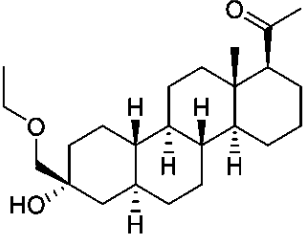
30

40

50



【表 2 1 - 1 0 A】

	<b>I-L19</b>
	<b>I-S3</b>

10

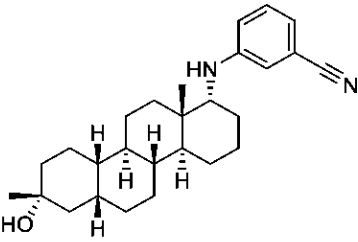
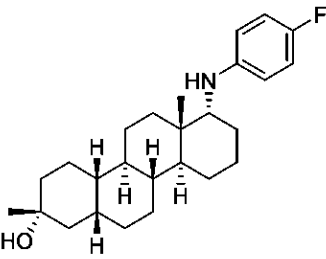
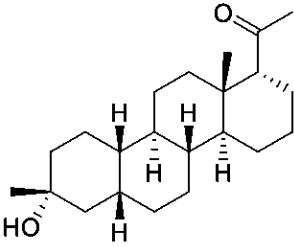
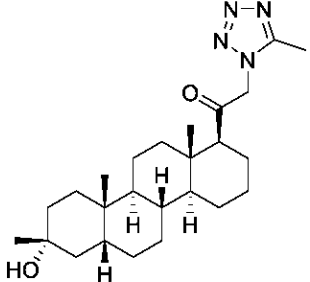
20

30

40

50

【表 2 1 - 1 1】

	<b>I-10a</b>
	<b>I-11a</b>
	<b>I-D7a</b>
	<b>I-20a</b>

10

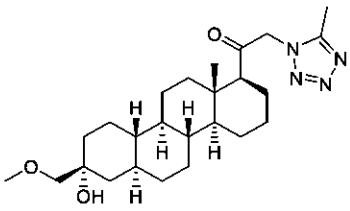
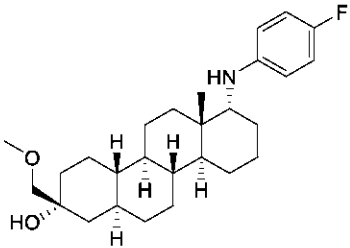
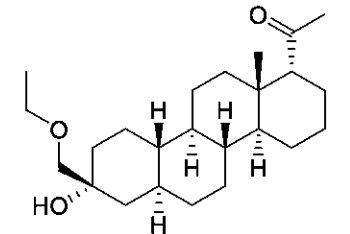
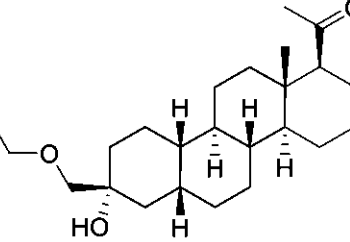
20

30

40

50

【表 2 1 - 1 2】

	<p><b>I-G16a</b></p>
	<p><b>I-23a</b></p>
	<p><b>I-S3a</b></p>
	<p><b>I-U11</b></p>

から選択される化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

【請求項 2 2】

前記化合物が、以下

10

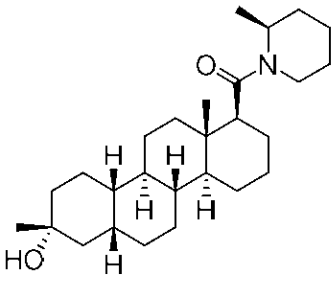
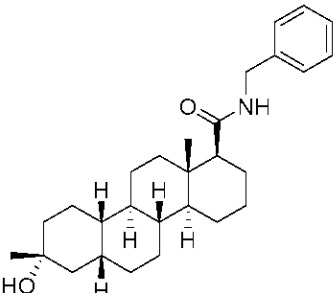
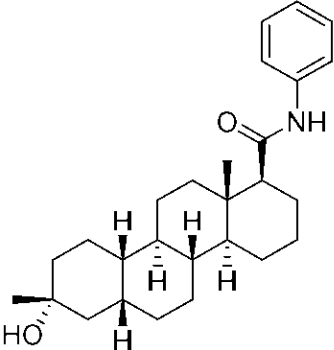
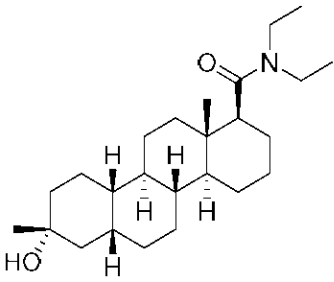
20

30

40

50

【化 2 2 - 1】

	<b>I-E4</b>
	<b>I-14</b>
	<b>I-15</b>
	<b>I-16</b>

10

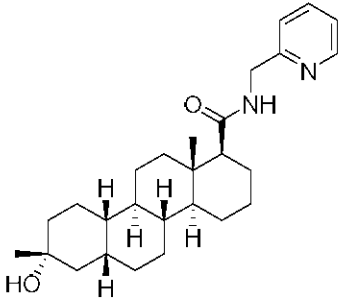
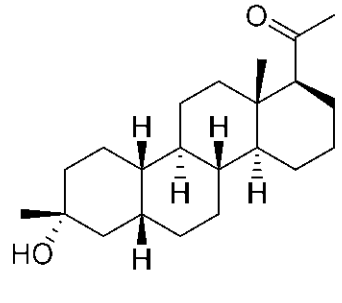
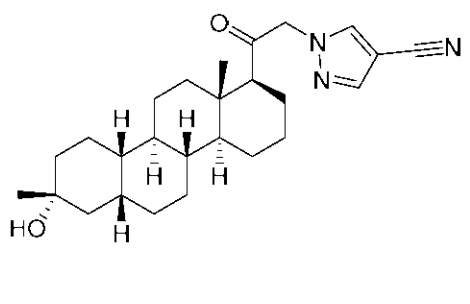
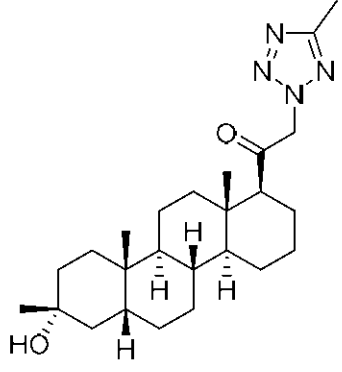
20

30

40

50

【化 2 2 - 2】

	<b>I-17</b>
	<b>I-D7</b>
	<b>I-D9</b>
	<b>I-20</b>

10

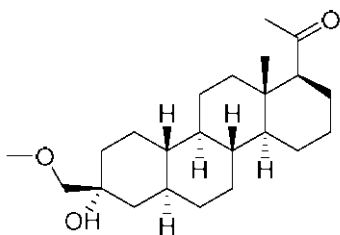
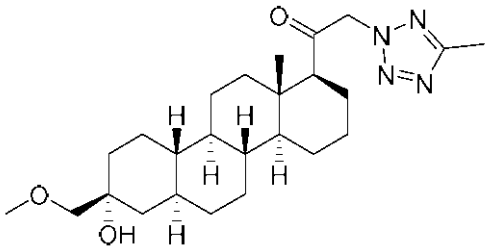
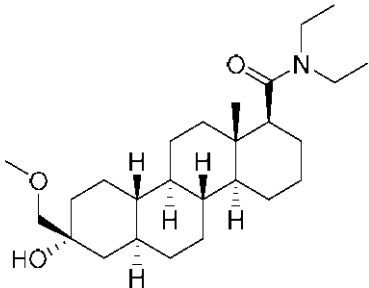
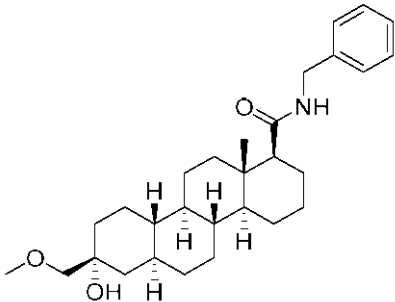
20

30

40

50

【化 2 2 - 3】

	<b>I-G14</b>
	<b>I-G16</b>
	<b>I-M3</b>
	<b>I-25</b>

10

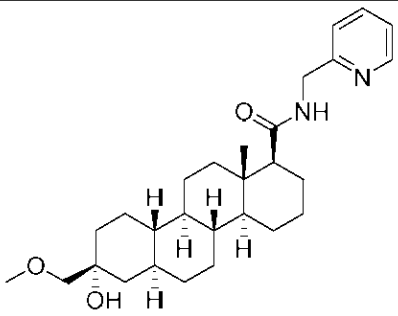
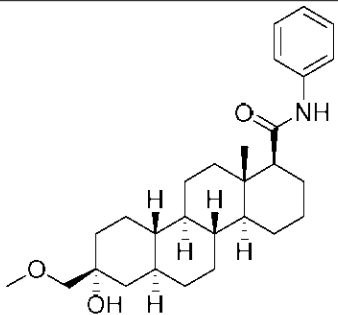
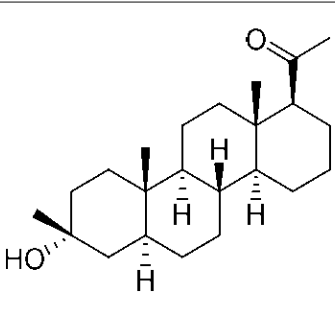
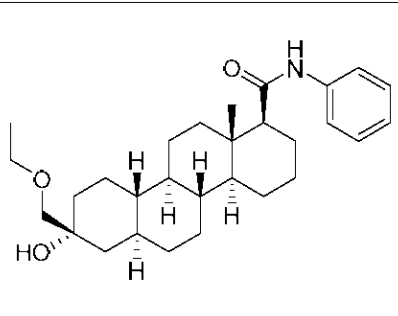
20

30

40

50

【化 2 2 - 4】

	<b>I-26</b>
	<b>I-27</b>
	<b>I-K2</b>
	<b>I-B11</b>

10

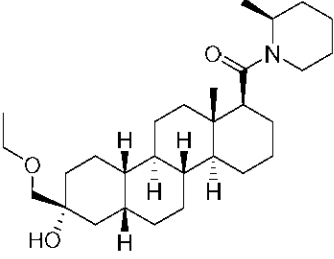
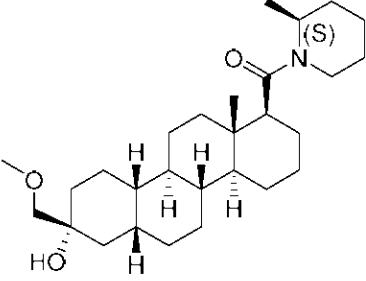
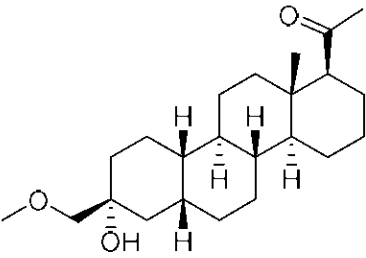
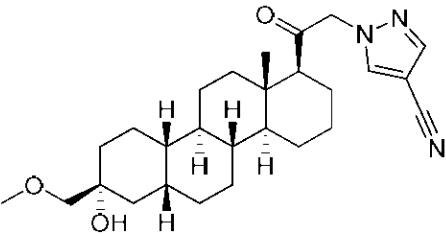
20

30

40

50

【化 2 2 - 5】

	<b>I-P9</b>
	<b>I-L14</b>
	<b>I-L17</b>
	<b>I-L19</b>

10

20

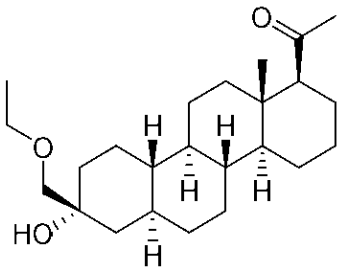
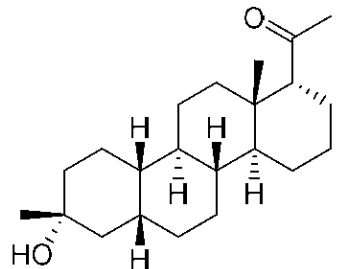
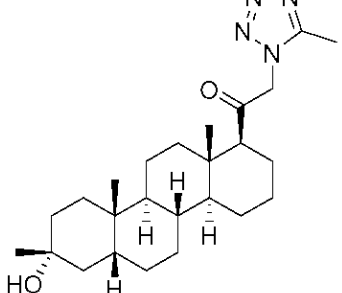
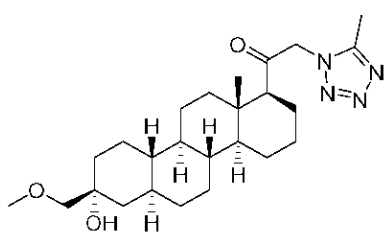
30

40

50



【化 2 2 - 6】

	<b>I-S3</b>
	<b>I-D7a</b>
	<b>I-20a</b>
	<b>I-G16a</b>

10

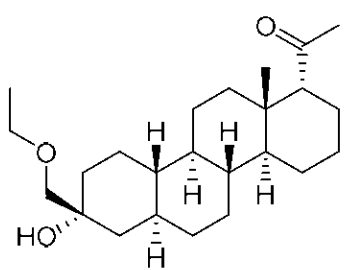
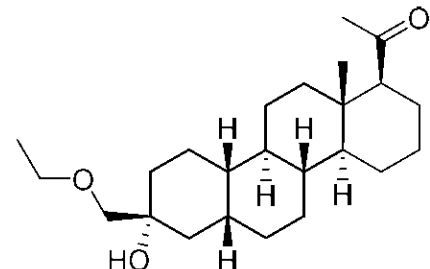
20

30

40

50

## 【化 2 2 - 7】

	<p><b>I-S3a</b></p>
	<p><b>I-U11</b></p>

10

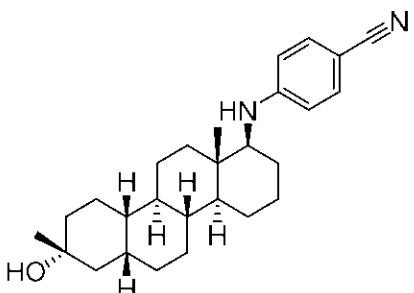
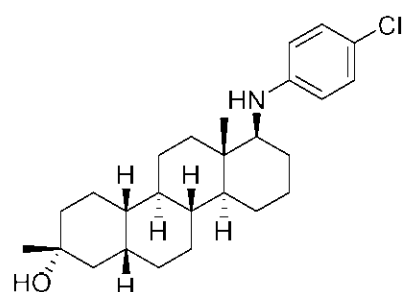
20

またはその薬学的に受容可能な塩から選択される、請求項 2 1 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

## 【請求項 2 3】

前記化合物が、以下

## 【化 2 3 - 1】

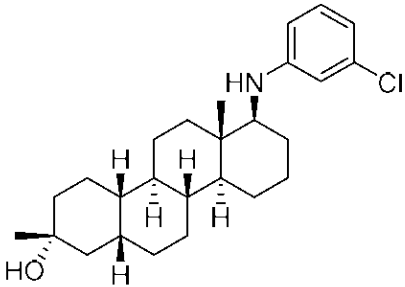
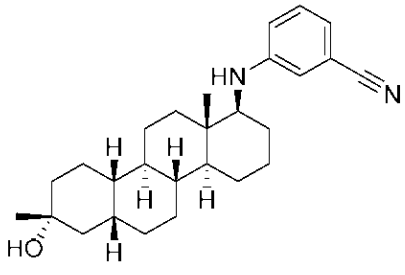
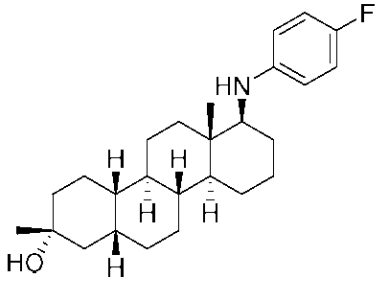
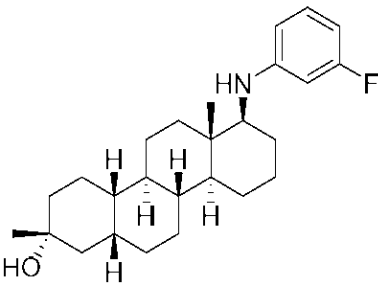
	<p><b>I-7</b></p>
	<p><b>I-8</b></p>

30

40

50

## 【化 2 3 - 2】

	<b>I-9</b>
	<b>I-10</b>
	<b>I-11</b>
	<b>I-12</b>

10

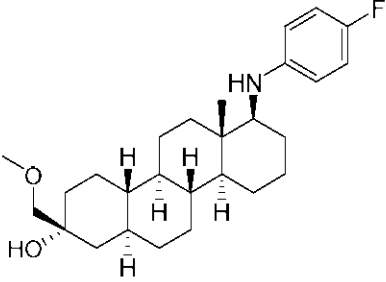
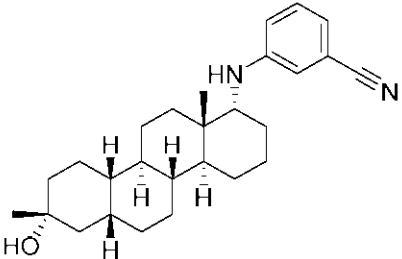
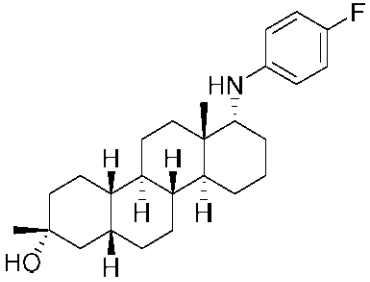
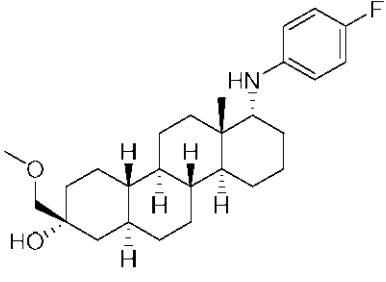
20

30

40

50

## 【化 2 3 - 3】

	<p style="text-align: center;"><b>I-23</b></p>
	<p style="text-align: center;"><b>I-10a</b></p>
	<p style="text-align: center;"><b>I-11a</b></p>
	<p style="text-align: center;"><b>I-23a</b></p>

10

20

30

またはその薬学的に受容可能な塩から選択される、請求項 2 1 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

40

## 【請求項 2 4】

請求項 1 ~ 2 3 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩、および薬学的に受容可能な添加剤を含む薬学的組成物。

## 【請求項 2 5】

C N S 関連障害の処置を必要とする被験体において C N S 関連障害を処置することにおける使用のための組成物であって、請求項 1 ~ 2 3 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩を含み、前記 C N S 関連障害が、睡眠障害、気分障害、統合失調症スペクトラム障害、痙攣障害、記憶および / もしくは認知の障害、運動障害、人格障害、自閉症スペクトラム障害、疼痛、外傷性脳損傷、脈管疾患、物質乱用障害および / もしくは離脱症候群、耳鳴、またはてんかん発作重積状態である、組成物。

## 【請求項 2 6】

50

前記 C N S 関連障害が、うつである、請求項 2 5 に記載の組成物。

【請求項 2 7】

前記 うつ が、産後うつである、請求項 2 6 に記載の組成物。

【請求項 2 8】

前記 C N S 関連障害が、大うつ病性障害である、請求項 2 5 に記載の組成物。

【請求項 2 9】

前記大うつ病性障害が、中程度の大うつ病性障害である、請求項 2 8 に記載の組成物。

【請求項 3 0】

前記大うつ病性障害が、重度の大うつ病性障害である、請求項 2 8 に記載の組成物。

【請求項 3 1】

前記 C N S 関連障害が、発作である、請求項 2 5 に記載の組成物。

【請求項 3 2】

前記 C N S 関連障害が、てんかんまたはてんかん発作重積状態である、請求項 2 5 に記載の組成物。

【請求項 3 3】

前記 C N S 関連障害が、振顫である、請求項 2 5 に記載の組成物。

【請求項 3 4】

前記振顫が、本態性振顫である、請求項 3 3 に記載の組成物。

【請求項 3 5】

前記組成物が、長期投与されるかまたは急性に投与される、請求項 2 5 に記載の組成物。

【請求項 3 6】

前記組成物が、経口投与、静脈内投与、経皮投与、鼻腔内投与、または皮下投与される、請求項 3 5 に記載の組成物。

【誤訳訂正 2】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0 1 3 1

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0 1 3 1】

一部の実施形態では、薬学的組成物は、本明細書中に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩、および薬学的に受容可能な添加剤を含む。

【誤訳訂正 3】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0 1 3 5

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0 1 3 5】

1 つの局面において、本明細書中に記載の化合物（例えば、式（I - I）、式（I - I I）、式（I I - I）、式（I I - I I）、式（I I I - I）、式（I I I - I I）、式（I V - I）、式（I V - I I）、式（I V - I I I）、式（V - I）、式（V - I I）または式（V - I I I）の化合物）またはその薬学的に許容され得る塩、および薬学的に許容され得る添加剤を含む薬学的組成物を本明細書中に提供する。ある特定の実施形態において、本発明の化合物は、薬学的組成物中に有効量で提供される。ある特定の実施形態において、本発明の化合物は、治療有効量で提供される。ある特定の実施形態において、本発明の化合物は、予防有効量で提供される。

【誤訳訂正 4】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0 1 4 3

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

10

20

30

40

50

## 【 0 1 4 3 】

本明細書中で提供される組成物では、エナンチオマー的に純粋な化合物は、他の活性成分または不活性成分と共に存在し得る。例えば、エナンチオマー的に純粋な R - 化合物を含む薬学的組成物は、例えば、約 90 % の添加剤および約 10 % のエナンチオマー的に純粋な R - 化合物を含み得る。特定の実施形態において、このような組成物中のエナンチオマー的に純粋な R - 化合物は、例えば、化合物の総重量に対して少なくとも約 95 重量 % の R - 化合物および多くとも約 5 重量 % の S - 化合物を含み得る。例えば、エナンチオマー的に純粋な S - 化合物を含む薬学的組成物は、例えば、約 90 % の添加剤および約 10 % のエナンチオマー的に純粋な S - 化合物を含み得る。特定の実施形態において、このような組成物中のエナンチオマー的に純粋な S - 化合物は、例えば、化合物の総重量に対して少なくとも約 95 重量 % の S - 化合物および多くとも約 5 重量 % の R - 化合物を含み得る。特定の実施形態において、活性成分は、少量の添加剤もしくはキャリアと共に製剤化され得るか、または添加剤もしくはキャリアなしで製剤化され得る。

10

## 【 誤 訳 訂 正 5 】

【 訂 正 対 象 書 類 名 】 明 細 書

【 訂 正 対 象 項 目 名 】 0 4 1 8

【 訂 正 方 法 】 変 更

【 訂 正 の 内 容 】

## 【 0 4 1 8 】

1 つの局面において、本明細書中に記載の化合物（例えば、式（ I - I ）、式（ I - I I ）、式（ I I - I ）、式（ I I - I I ）、式（ I I I - I ）、式（ I I I - I I ）、式（ I V - I ）、式（ I V - I I ）、式（ I V - I I I ）、式（ V - I ）、式（ V - I I ）または式（ V - I I I ）の化合物）またはその薬学的に許容され得る塩、および薬学的に許容され得る添加剤を含む薬学的組成物を本明細書中に提供する。ある特定の実施形態において、本発明の化合物は、薬学的組成物中に有効量で提供される。ある特定の実施形態において、本発明の化合物は、治療有効量で提供される。ある特定の実施形態において、本発明の化合物は、予防有効量で提供される。

20

## 【 誤 訳 訂 正 6 】

【 訂 正 対 象 書 類 名 】 明 細 書

【 訂 正 対 象 項 目 名 】 0 4 2 1

【 訂 正 方 法 】 変 更

【 訂 正 の 内 容 】

## 【 0 4 2 1 】

本明細書中で使用される場合、「エピソード性投薬レジメン」は、本明細書に記載される式の化合物または本明細書に記載される式の化合物を含む組成物を、障害またはその症状の診断（例えば、うつ、大うつ病性障害、双極性うつ、不安、または産後うつのエピソードの診断または症状）に対応して限定した期間にわたって被験体に投与する投薬レジメンである。一部の実施形態では、大うつ病性障害は、中程度の大うつ病性障害である。一部の実施形態では、大うつ病性障害は、重度の大うつ病性障害である。一部の実施形態では、化合物は、個別の投薬単位（各単位は、本明細書に記載される式の化合物および 1 つもしくはそれより多くの適切な薬学的添加剤を含む）として製剤化される。一部の実施形態では、エピソード性投薬レジメンの期間は、数週間（例えば、約 8 週間）である。本明細書中で定義されるような長期投与と対照的に、化合物のエピソード性投薬は、障害（例えば、うつまたはその症状）の診断に対応して限定した期間（例えば、約 2 週間～約 8 週間）にわたって行う。一部の実施形態では、発症時投薬は、数週間（例えば、約 2 週間～約 6 週間）にわたって 1 日 1 回実施する。1 つの実施形態では、エピソード性投薬の期間は、2 週間である。一部の実施形態では、1 つより多くのエピソード性投薬レジメン（例えば、被験体の生涯にわたって 2 またはそれより多くのエピソード性レジメン）が、被験体に投与される。

40

## 【 誤 訳 訂 正 7 】

50

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0424

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0424】

1つの局面において、本明細書中に記載の化合物（例えば、式（I-I）、式（I-II）、式（III-I）、式（III-II）、式（III-III）、式（IV-I）、式（IV-II）、式（IV-III）、式（V-I）、式（V-II）または式（V-III）の化合物）またはその薬学的に許容され得る塩、および薬学的に許容され得る添加剤を含む薬学的組成物を本明細書中に提供する。ある特定の実施形態において、本発明の化合物は、薬学的組成物中に有効量で提供される。ある特定の実施形態において、本発明の化合物は、治療有効量で提供される。特定の実施形態において、本発明の化合物は、予防有効量で提供される。

10

【誤訳訂正8】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0431

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0431】

経口投与用の組成物は、バルクの液体の溶液もしくは懸濁液またはバルクの粉末の形態をとり得る。しかしながら、より一般的には、組成物は、正確な投薬を促進する単位剤形で提供される。用語「単位剤形」とは、ヒト被験体および他の哺乳動物に対する単位投与量として好適な物理的に不連続の単位のことを指し、各単位は、好適な薬学的添加剤とともに所望の治療効果をもたらすと計算される所定量の活性な材料を含む。典型的な単位剤形としては、液体組成物の予め測定され予め充填されたアンプルもしくは注射器、または固体組成物の場合は丸剤、錠剤、カプセルなどが挙げられる。そのような組成物では、化合物は、通常、少量の成分（約0.1～約50重量%または好ましくは約1～約40重量%）であり、残りは、様々なビヒクルまたは添加剤および所望の投薬形態を形成するのに役立つ加工助剤である。

20

【誤訳訂正9】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0436

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0436】

注射可能組成物は、典型的には、注射可能な滅菌された生理食塩水もしくはリン酸緩衝生理食塩水または当該分野で公知の他の注射可能な添加剤に基づくものである。従来どおり、そのような組成物における活性な化合物は、典型的には、しばしば約0.05～10重量%である微量の成分であり、残りは、注射可能な添加剤などである。

30

【誤訳訂正10】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0442

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0442】

別の局面において、本発明は、本発明の化合物および薬学的に受容可能な添加剤を含む薬学的組成物（例えば、静脈内（IV）投与などの注射に適切な組成物）を提供する。

40

【誤訳訂正11】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0443

50

## 【訂正方法】変更

## 【訂正の内容】

## 【0443】

薬学的に受容可能な添加剤としては、所望の特定の剤形、例えば注射に適切な任意の全ての希釈剤または他の液体ビヒクル、分散助剤または懸濁助剤、表面活性剤、等張剤、防腐剤、滑沢剤などが挙げられる。薬学的組成物の製剤化および／または製造における一般的な考察は、例えば、Remington's Pharmaceutical Sciences, 第16版, E. W. Martin (Mack Publishing Co., Easton, Pa., 1980), and Remington: The Science and Practice of Pharmacy, 第21版 (Lippincott Williams & Wilkins, 2005)に見出すことができる。

## 【誤訳訂正12】

## 【訂正対象書類名】明細書

## 【訂正対象項目名】0444

## 【訂正方法】変更

## 【訂正の内容】

## 【0444】

例えば、注射用調製物、例えば滅菌注射用水性懸濁液は、適切な分散剤または湿潤剤および懸濁化剤を使用して、公知の技術によって製剤化され得る。用いられ得る例示的な添加剤としては、水、滅菌生理食塩水またはリン酸緩衝生理食塩水、またはリンゲル液が挙げられるが、これらに限定されない。

## 【誤訳訂正13】

## 【訂正対象書類名】明細書

## 【訂正対象項目名】0448

## 【訂正方法】変更

## 【訂正の内容】

## 【0448】

組成物は、正確な投薬を容易にする単位剤形で提供される。用語「単位剤形」とは、ヒト被験体および他の哺乳動物に対する単位投与量として適切な物理的に不連続な単位のことを指し、各単位は、適切な薬学的添加剤とともに、所望の治療効果をもたらすと計算される所定量の活性な材料を含む。典型的な単位剤形としては、液体組成物の予め測定され予め充填されたアンプルもしくは注射器が挙げられる。このような組成物では、化合物は、通常、少量の成分（約0.1～約50重量%または好ましくは約1～約40重量%）であり、残りは、様々なビヒクルまたはキャリアおよび所望の投薬形態を形成するのに役立つ加工助剤である。

## 【誤訳訂正14】

## 【訂正対象書類名】明細書

## 【訂正対象項目名】0829

## 【訂正方法】変更

## 【訂正の内容】

## 【0829】

本発明の好ましい実施形態によれば、例えば、以下が提供される。

(項1)

式(I-I)：

10

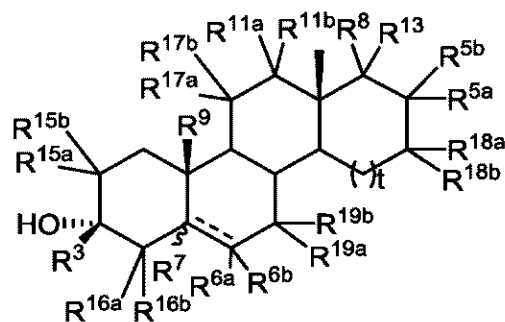
20

30

40



## 【化 4 2 4】



10

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であって、

式 (I - I) において、

t は 1 または 2 であり；

R<sup>7</sup> は、水素またはメチルであるか、または

## 【化 4 2 5】

=====

が二重結合である場合、R<sup>7</sup> は存在せず；

R<sup>3</sup> 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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

20

R<sup>9</sup> は、水素または置換もしくは非置換アルキルであり；

R<sup>6a</sup> および R<sup>6b</sup> の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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か、または R<sup>6a</sup> および R<sup>6b</sup> が一緒になってオキソ (= O) 基を形成し；

R<sup>11a</sup>、R<sup>11b</sup>、R<sup>15a</sup>、R<sup>15b</sup>、R<sup>16a</sup>、R<sup>16b</sup>、R<sup>17a</sup>、R<sup>17b</sup>、R<sup>18a</sup>、R<sup>18b</sup>、R<sup>19a</sup>、または R<sup>19b</sup> の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、-OR<sup>D1</sup>、-OC(=O)R<sup>D1</sup>、-NH<sub>2</sub>、-N(R<sup>D1</sup>)<sub>2</sub>、または-NR<sup>D1</sup>C(=O)R<sup>D1</sup>であり、ここで R<sup>D1</sup> の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの R<sup>D1</sup> 基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成し；または R<sup>11a</sup> および R<sup>11b</sup>、R<sup>15a</sup> および R<sup>15b</sup>、R<sup>16a</sup> および R<sup>16b</sup>、R<sup>17a</sup> および R<sup>17b</sup>、ならびに R<sup>18a</sup> および R<sup>18b</sup> のうちの任意の 1 つが一緒になってオキソ (= O) 基を形成し；

30

40

R<sup>5a</sup>、R<sup>5b</sup>、R<sup>8</sup>、および R<sup>13</sup> の各々は、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、-OR<sup>A1</sup>、-SR<sup>A1</sup>、-N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-N(R<sup>A1</sup>)、-CN(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-C(O)R<sup>A1</sup>、-C(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OC(=O)R<sup>A1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A1</sup>、-OC(=O)SR<sup>A1</sup>、-OC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-SC(=O)R<sup>A2</sup>、-SC(=O)OR<sup>A1</sup>、-SC(=O)SR<sup>A1</sup>、-SC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-NHC(=O)R<sup>A1</sup>、-NHC(=O)OR<sup>A1</sup>、-NHC(=O)SR<sup>A1</sup>、-NHC(=O)N(R

50

$R^{A1} )_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、 $-SO_2R^{A2}$ 、 $-C(O)R^{A2}$ であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであるか；

または $R^8$ および $R^{13}$ が一緒になってオキソ( $=O$ )基を形成し、ここで $R^8$ および $R^{13}$ が一緒になってオキソ( $=O$ )基を形成する場合、 $R^3$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

ここで、 $R^{5a}$ 、 $R^{5b}$ 、 $R^8$ 、および $R^{13}$ の少なくとも1つは、エチル、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-C(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ でなければならず；

ここで、 $R^8$ と $R^{13}$ との両方がメチルであることはできず；

ここで、

【化426】

-----

は、単結合または二重結合を表し、二重結合が環B内に存在する場合、 $R^{6a}$ または $R^{6b}$ の一方および $R^7$ は存在しない、化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項2)

$R^{15a}$ および $R^{15b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項1に記載の化合物。

(項3)

$R^{15a}$ および $R^{15b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^{D1})_2$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もし

くは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 または 2 に記載の化合物。

(項 4)

$R^{15a}$  および  $R^{15b}$  が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 5)

$R^{15a}$  および  $R^{15b}$  の両方が水素である、上記項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項 6)

$R^{15a}$  および  $R^{15b}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 1 ~ 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 7)

$R^{15a}$  および  $R^{15b}$  の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシハロ、または  $-OH$  である、上記項 1 ~ 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 8)

$R^{15a}$  または  $R^{15b}$  が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または  $-CH(CH_3)_2$  である、上記項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 9)

$R^{16a}$  または  $R^{16b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

(項 10)

$R^{16a}$  または  $R^{16b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または  $-N(R^{D1})_2$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 11)

$R^{16a}$  または  $R^{16b}$  が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 10 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

(項 12)

$R^{16a}$  および  $R^{16b}$  の両方が水素である、上記項 1 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 13)

$R^{16a}$  および  $R^{16b}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルであ

50

る、上記項 1 ~ 1 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 4)

$R^{16a}$  および  $R^{16b}$  の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシハロ、または  $-OH$  である、上記項 1 ~ 1 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 5)

$R^{16a}$  または  $R^{16b}$  が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または  $-CH(CH_3)_2$  である、上記項 1 ~ 1 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 6)

$R^{17a}$  または  $R^{17b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 1 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項 1 7)

$R^{17a}$  または  $R^{17b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または  $-N(R^{D1})_2$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 1 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 1 8)

$R^{17a}$  または  $R^{17b}$  が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 1 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

(項 1 9)

$R^{17a}$  および  $R^{17b}$  の両方が水素である、上記項 1 ~ 1 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 0)

$R^{17a}$  および  $R^{17b}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 1 ~ 1 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 1)

$R^{17a}$  および  $R^{17b}$  の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシハロ、または  $-OH$  である、上記項 1 ~ 2 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

(項 2 2)

$R^{17a}$  または  $R^{17b}$  が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または  $-CH(CH_3)_2$  である、上記項 1 ~ 2 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 3)

$R^{18a}$  または  $R^{18b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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ルケ

50

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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 2 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 4)

$R^{18a}$  または  $R^{18b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または  $-N(R^{D1})_2$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 2 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項 2 5)

$R^{18a}$  または  $R^{18b}$  が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 2 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 6)

$R^{18a}$  および  $R^{18b}$  の両方が水素である、上記項 1 ~ 2 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 2 7)

$R^{18a}$  および  $R^{18b}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 1 ~ 2 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 8)

$R^{18a}$  および  $R^{18b}$  の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシハロ、または  $-OH$  である、上記項 1 ~ 2 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 9)

$R^{18a}$  または  $R^{18b}$  が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または  $-CH(CH_3)_2$  である、上記項 1 ~ 2 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

(項 3 0)

$R^{19a}$  または  $R^{19b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 2 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 3 1)

40

$R^{19a}$  または  $R^{19b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または  $-N(R^{D1})_2$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 3 2)

$R^{19a}$  または  $R^{19b}$  が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキ

50

ル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 3 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 3 3)

$R^{19a}$  および  $R^{19b}$  の両方が水素である、上記項 1 ~ 3 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 3 4)

$R^{19a}$  および  $R^{19b}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 1 ~ 3 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 3 5)

$R^{19a}$  および  $R^{19b}$  の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシハロ、または  $-OH$  である、上記項 1 ~ 3 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 3 6)

$R^{19a}$  または  $R^{19b}$  が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または  $-CH(CH_3)_2$  である、上記項 1 ~ 3 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 3 7)

$R^7$  が、シス位の水素である、上記項 1 ~ 3 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 3 8)

$R^7$  が、トランス位の水素である、上記項 1 ~ 3 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 3 9)

$R^7$  が、シス位のメチルである、上記項 1 ~ 3 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 0)

$R^7$  が、トランス位のメチルである、上記項 1 ~ 3 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 1)

$t$  が、1 である、上記項 1 ~ 4 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 2)

$t$  が、2 である、上記項 1 ~ 4 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 3)

$R^3$  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ルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである、上記項 1 ~ 4 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 4)

$R^3$  が、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 4 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 5)

$R^3$  が、置換もしくは非置換アルキルである、上記項 1 ~ 4 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 6)

$R^3$  が、水素である、上記項 1 ~ 4 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 7)

$R^3$  が、置換アルキルである、上記項 1 ~ 4 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 8)

$R^3$  が、非置換アルキルである、上記項 1 ~ 4 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 9)

$R^3$  が、メチルである、上記項 1 ~ 4 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 5 0)

$R^9$  が、水素である、上記項 1 ~ 4 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 5 1)

$R^9$  が、置換アルキルである、上記項 1 ~ 5 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

20

30

40

50

(項 5 2)

R<sup>9</sup> が、非置換アルキルである、上記項 1 ~ 5 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 5 3)

R<sup>9</sup> が、メチルである、上記項 1 ~ 5 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 5 4)

R<sup>9</sup> が、-OCH<sub>3</sub> である、上記項 1 ~ 5 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 5 5)

R<sup>9</sup> が、エチルである、上記項 1 ~ 5 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 5 6)

R<sup>6a</sup> および R<sup>6b</sup> が独立して、水素、ハロゲン、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、上記項 1 ~ 5 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項 5 7)

R<sup>6a</sup> および R<sup>6b</sup> が独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 1 ~ 5 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 5 8)

R<sup>6a</sup> および R<sup>6b</sup> が独立して、水素または置換アルキルである、上記項 1 ~ 5 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 5 9)

R<sup>6a</sup> および R<sup>6b</sup> が独立して、水素または非置換アルキルである、上記項 1 ~ 5 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 6 0)

R<sup>6a</sup> および R<sup>6b</sup> の両方が水素である、上記項 1 ~ 5 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 6 1)

R<sup>6a</sup> が、ハロまたはアルキルであり、R<sup>6b</sup> は、水素である、上記項 1 ~ 6 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 6 2)

R<sup>6a</sup> および R<sup>6b</sup> の両方がハロである、上記項 1 ~ 6 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

(項 6 3)

R<sup>6a</sup> および R<sup>6b</sup> の両方がアルキルである、上記項 1 ~ 6 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 6 4)

R<sup>6a</sup> および R<sup>6b</sup> が一緒になってオキシ基を形成する、上記項 1 ~ 6 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 6 5)

R<sup>11a</sup> または R<sup>11b</sup> が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、-OR<sup>D1</sup>、-OC(=O)R<sup>D1</sup>、-NH<sub>2</sub>、-N(R<sup>D1</sup>)<sub>2</sub>、または-NR<sup>D1</sup>C(=O)R<sup>D1</sup>であり、ここで R<sup>D1</sup> の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 6 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

(項 6 6)

R<sup>11a</sup> または R<sup>11b</sup> が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、-OR<sup>D1</sup>、-OC(=O)R<sup>D1</sup>、-NH<sub>2</sub>、または-N(R<sup>D1</sup>)<sub>2</sub>であり、ここで R<sup>D1</sup> の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換も

50

くは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 65 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 67)

$R^{11a}$  または  $R^{11b}$  が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 66 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 68)

$R^{11a}$  および  $R^{11b}$  の両方が水素である、上記項 1 ~ 67 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 69)

$R^{11a}$  および  $R^{11b}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 1 ~ 68 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 70)

$R^8$  または  $R^{13}$  が、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-C(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、または  $-OC(=O)N(R^{A1})_2$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 69 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 71)

$R^8$  または  $R^{13}$  が、置換もしくは非置換アルキル、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-C(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、または  $-OC(=O)OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 70 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 72)

$R^8$  または  $R^{13}$  が、 $-C(O)R^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  は、置換アルキルである、上記項 1 ~ 70 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 73)

前記アルキルが、ヘテロアリールで置換されている、上記項 72 に記載の化合物。

(項 74)

前記アルキルが、5員ヘテロアリールで置換されている、上記項 72 に記載の化合物。

(項 75)

$R^{5a}$  および  $R^{5b}$  が各々独立して、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、または  $-OC(=O)OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 74 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

20

30

40

50



(項 7 6)

$R^{5a}$  および  $R^{5b}$  が各々独立して、水素、ハロゲン、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、または  $-OC(=O)OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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シクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 ~ 7 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 7 7)

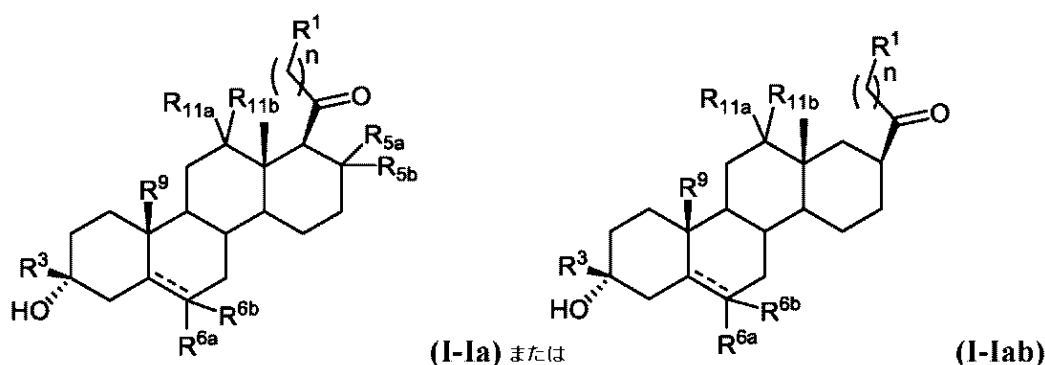
$R^{5a}$  および  $R^{5b}$  が各々、水素である、上記項 1 ~ 7 4 のいずれか 1 項に記載の化合物

10

(項 7 8)

前記化合物が、式 (I - I a) または式 (I - I a b)

【化 4 2 7】



20

の化合物であり、

ここで、 $R^1$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または  $-S(=O)_2OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{A1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

30

40

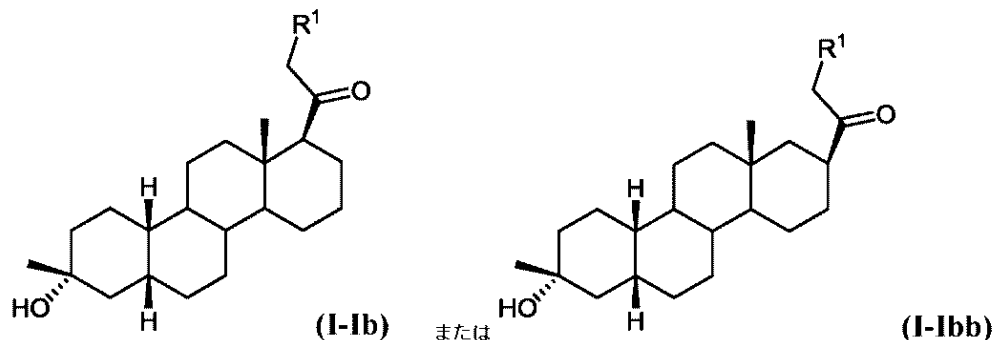
$n$  は、0、1、2、または 3 である、上記項 1 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 7 9)

前記化合物が、式 (I - I b) または式 (I - I b b)

50

【化 4 2 8】



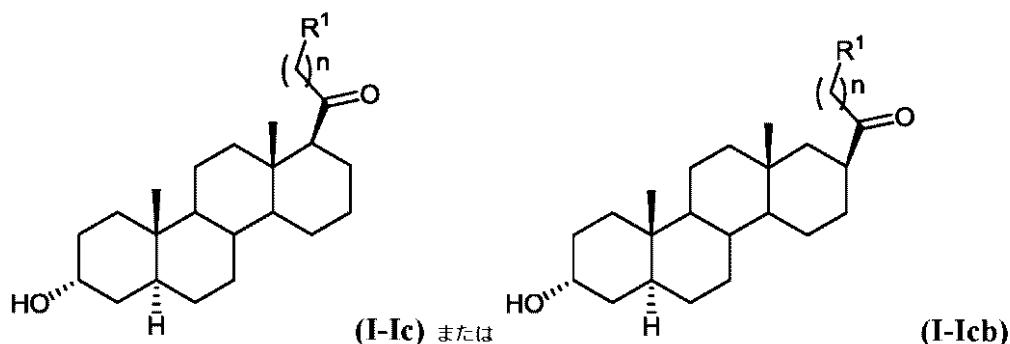
10

の化合物である、上記項 7 8 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 8 0)

前記化合物が、式 (I - I c) または式 (I - I c b)

【化 4 2 9】



20

の化合物であり、

$R^1$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または  $-S(=O)_2OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{A1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

30

40

$n$  は、0、1、2、または 3 である、上記項 7 8 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 8 1)

$R^1$  が、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル

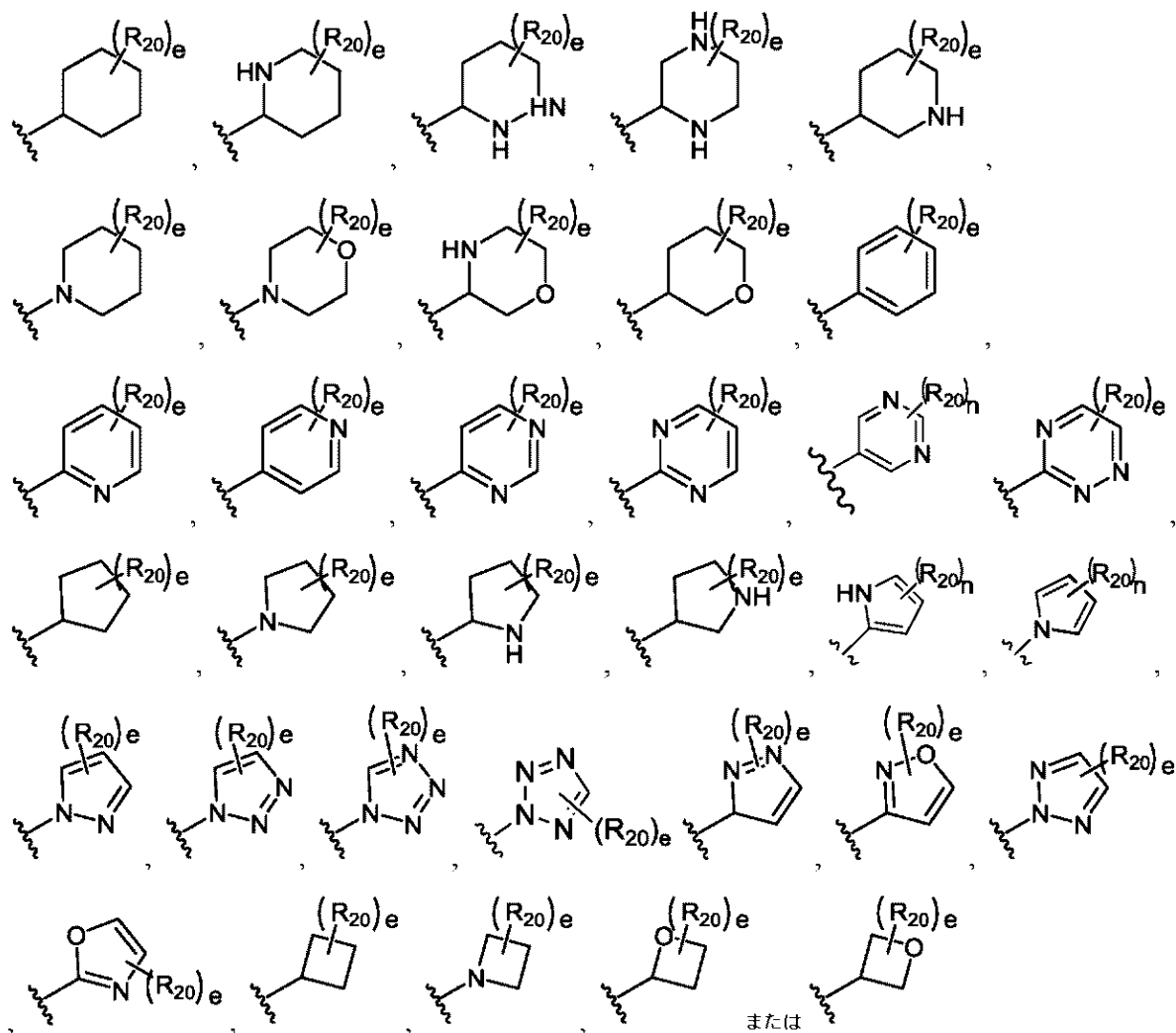
50

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である、上記項 78 ~ 79 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 82)

R<sup>1</sup> が、

【化 430】



10

20

30

であり、

ここで R<sub>20</sub> の各々の存在は独立して、ハロゲン、-NO<sub>2</sub>、-CN、-OR<sup>GA</sup>、-N(R<sup>GA</sup>)<sub>2</sub>、-C(=O)R<sup>GA</sup>、-C(=O)OR<sup>GA</sup>、-OC(=O)R<sup>GA</sup>、-OC(=O)OR<sup>GA</sup>、-C(=O)N(R<sup>GA</sup>)<sub>2</sub>、-N(R<sup>GA</sup>)C(=O)R<sup>GA</sup>、-OC(=O)N(R<sup>GA</sup>)<sub>2</sub>、-N(R<sup>GA</sup>)C(=O)OR<sup>GA</sup>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>GA</sup>、-S(=O)<sub>2</sub>OR<sup>GA</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>R<sup>GA</sup>、-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>GA</sup>)<sub>2</sub>、または -N(R<sup>GA</sup>)S(=O)<sub>2</sub>R<sup>GA</sup>；置換もしくは非置換 C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、置換もしくは非置換 C<sub>3</sub> ~ 4 カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ~ 4 員ヘテロシクリルであるか、または必要に応じて 2 つの R<sup>GA</sup> が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の 3 ~ 4 員炭素環または複素環式環を形成し；

40

ここで R<sup>GA</sup> の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換 C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、置換もしくは非置換 C<sub>3</sub> ~ 6 カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ~ 6 員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの R<sup>GA</sup> 基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の炭素環または複素環式環を形成し；

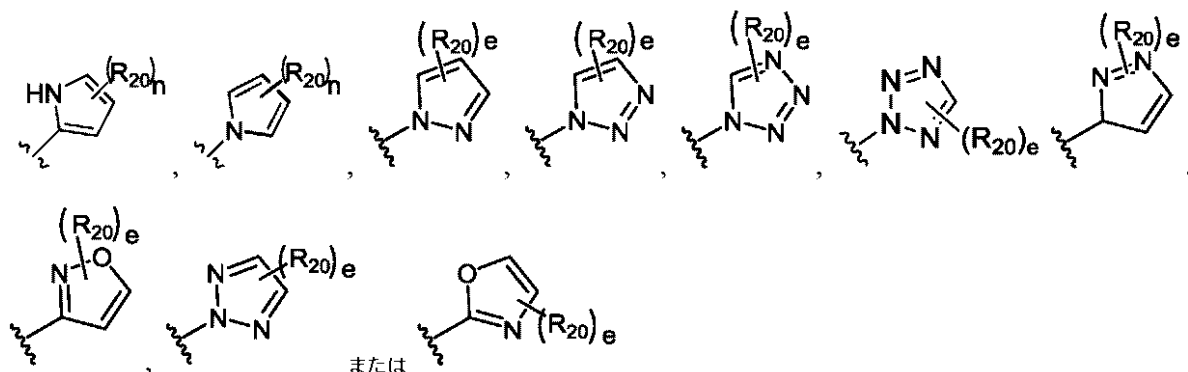
50

n または e は、0、1、2、3、4、または 5 である、上記項 78 ~ 81 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 83)

R<sup>1</sup> が、

【化 431】



10

であり、

ここで R<sub>20</sub> の各々の存在は独立して、ハロゲン、-NO<sub>2</sub>、-CN、-OR<sup>G A</sup>、-N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>、-C(=O)R<sup>G A</sup>、-C(=O)OR<sup>G A</sup>、-OC(=O)R<sup>G A</sup>、-OC(=O)OR<sup>G A</sup>、-C(=O)N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>、-N(R<sup>G A</sup>)C(=O)R<sup>G A</sup>、  
-OC(=O)N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>、-N(R<sup>G A</sup>)C(=O)OR<sup>G A</sup>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G A</sup>、-S(=O)<sub>2</sub>OR<sup>G A</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>R<sup>G A</sup>、-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>、  
または -N(R<sup>G A</sup>)S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G A</sup>；置換もしくは非置換 C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、置換もしくは非置換 C<sub>3</sub> ~ 4 カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ~ 4 員ヘテロシクリルであるか、または必要に応じて 2 つの R<sup>G A</sup> が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の 3 ~ 4 員炭素環または複素環式環を形成し；

20

ここで R<sup>G A</sup> の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換 C<sub>1</sub> ~ 6 アルキル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub> ~ 6 アルケニル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub> ~ 6 アルキニル、置換もしくは非置換 C<sub>3</sub> ~ 6 カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ~ 6 員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの R<sup>G A</sup> 基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の炭素環または複素環式環を形成し；

30

n または e は、0、1、2、3、4、または 5 である、上記項 78 ~ 82 のいずれか 1 項に記載の化合物。

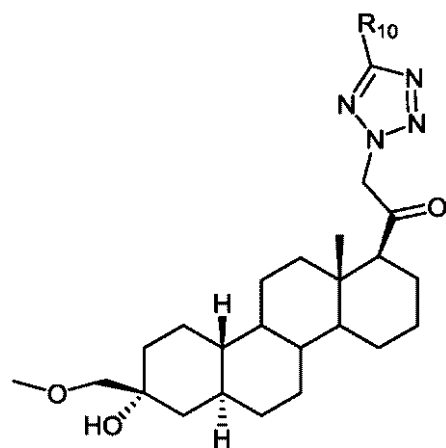
(項 84)

前記化合物が、式 (I - I d) または式 (I - I d b)

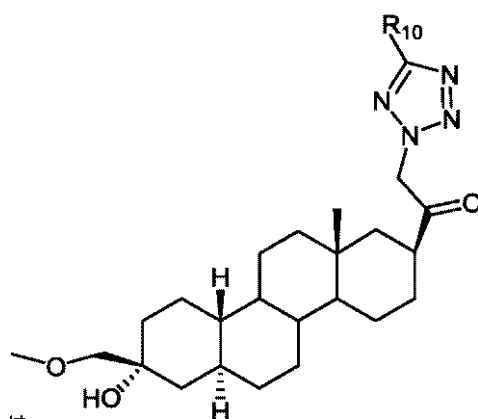
40

50

## 【化 4 3 2】



(I-ld) または



(I-ldb)

10

の化合物であり、

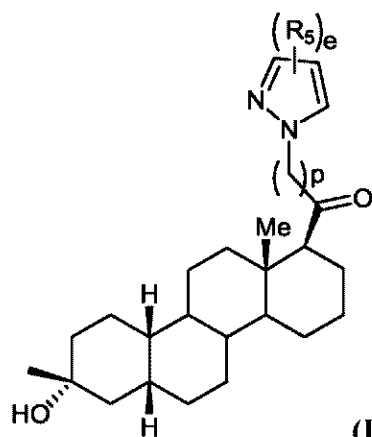
ここで、 $R_{10}$  は独立して、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項 1 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 8 5)

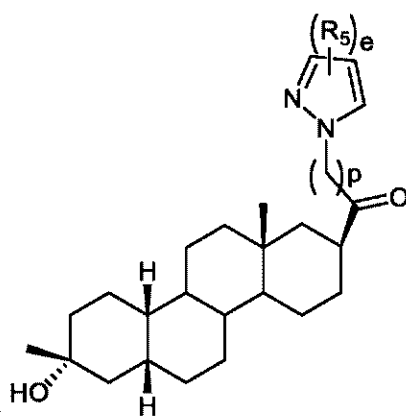
前記化合物が、式 (I - I e) または式 (I - I e b)

## 【化 4 3 3】

20



(I-le) または



(I-leb)

30

の化合物であり、

ここで、 $e$  は、0、1、2、または 3 であり；

$p$  は、0、1、または 3 であり；

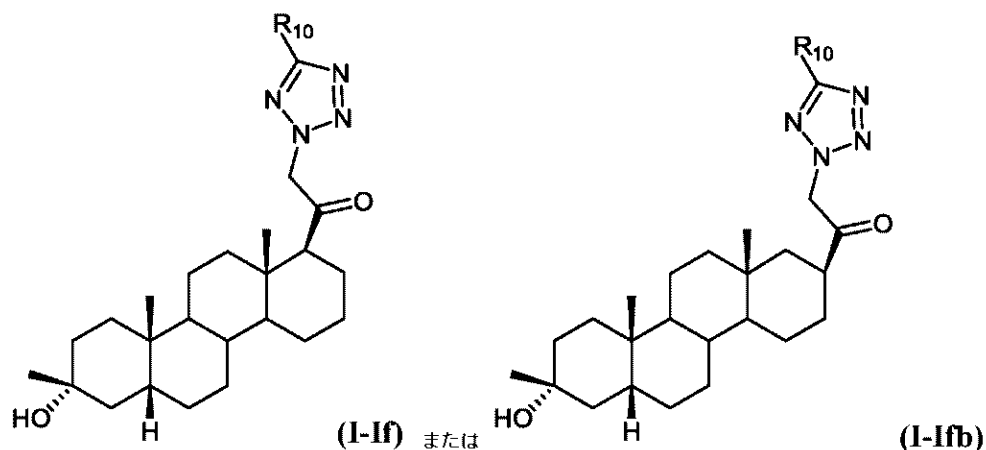
$R_5$  の各々は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項 1 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 8 6)

前記化合物が、式 (I - I f) または式 (I - I f b)

40

## 【化 4 3 4】



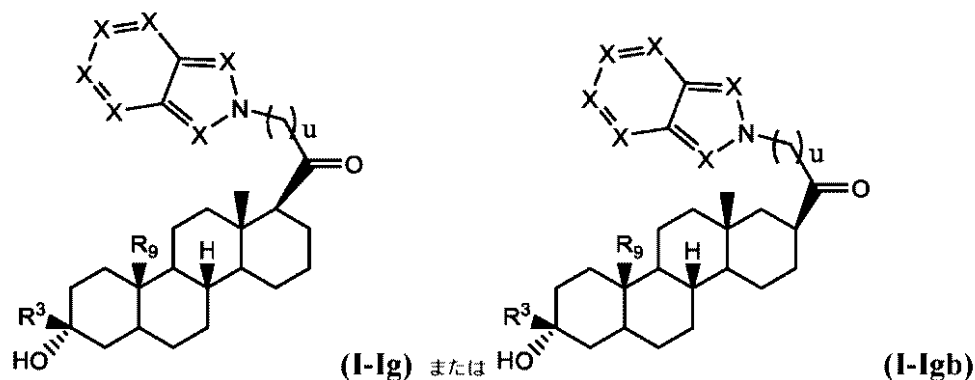
10

の化合物であり、

ここで、 $R_{10}$ は独立して、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項1に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。  
(項87)

前記化合物が、式(I-Ig)または式(I-Igb)

## 【化 4 3 5】



30

の化合物であり、

ここで、各Xは独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または $N(R^N)-$ であり、ここで $R^N$ は独立して、水素、置換もしくは非置換 $C_{1-6}$ アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$ であり；

$R^{GA}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換 $C_{1-6}$ アルキル、置換もしくは非置換 $C_{2-6}$ アルケニル、置換もしくは非置換 $C_{2-6}$ アルキニル、置換もしくは非置換 $C_{3-6}$ カルボシクリル、置換もしくは非置換の3~6員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{GA}$ 基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成し；

40

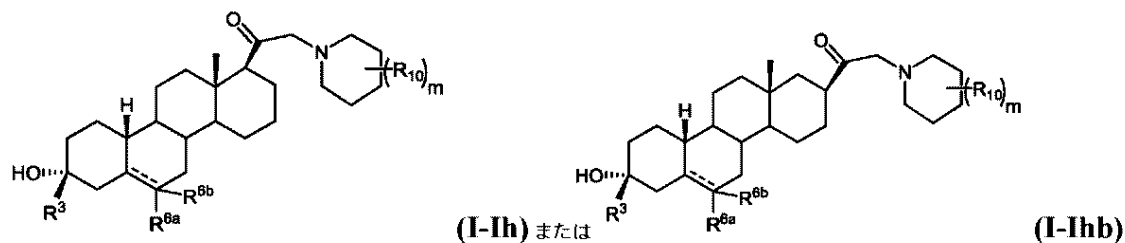
uは、0、1、または2である、上記項1に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項88)

前記化合物が、式(I-Ih)または式(I-Ihb)

50

## 【化 4 3 6】



の化合物であり、

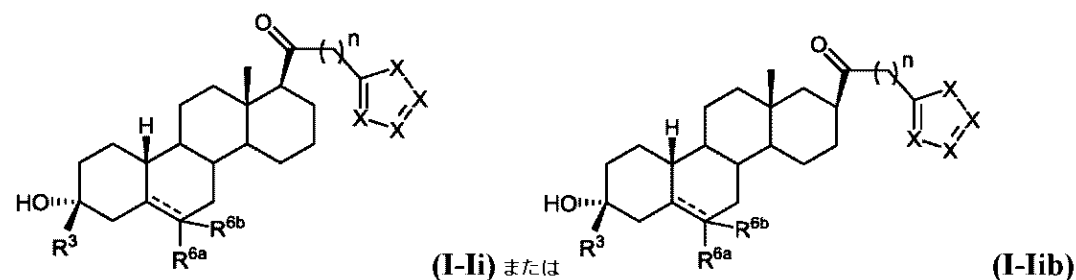
10

ここで、 $R_{10}$ の各々は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノであり； $m$ は、0、1、2、または3である、上記項1に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 8 9)

前記化合物が、式 (I - I i) または式 (I - I i b)

## 【化 4 3 7】



20

の化合物であり、

ここで、各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

30

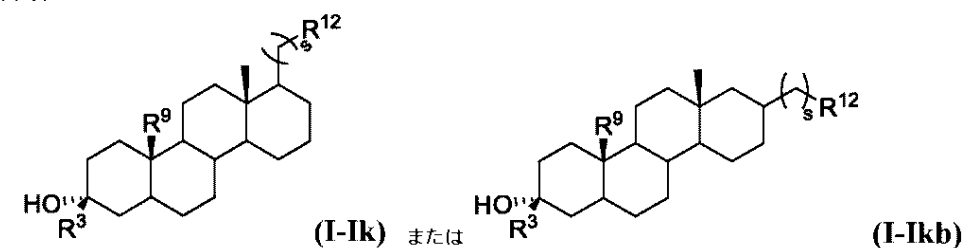
$R^{GA}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_{3-6}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成し、 $n$ は、0、1、2または3である、上記項1に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 9 0)

前記化合物が、(I - I k) または式 (I - I k b)

40

## 【化 4 3 8】



の化合物であり、

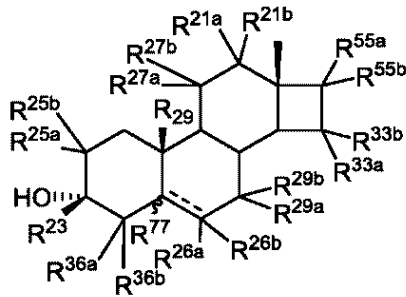
50

ここで、 $s$  は、0、1、または2であり； $R^{12}$  は、 $-N(R^{ab})_2$ 、 $-OR^{ab}$  であり、ここで  $R^{ab}$  の各々は独立して、H、置換もしくは非置換アルキル、 $-SO_2(R^{15})$ 、 $-C(O)R^{15}$  であり、ここで  $R^{15}$  は、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、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換シクロアルカンである、上記項1に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項91)

式(I-II)：

【化439】



(I-II)

10

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であって、  
式(I-II)において、

20

$R^{77}$  は、水素またはメチルであるか、または

【化440】

-----

が二重結合である場合、 $R^7$  は存在せず；

$R^{23}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$R^{29}$  は、水素または置換もしくは非置換アルキルであり；

30

$R^{26a}$  および  $R^{26b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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か、または  $R^{26a}$  および  $R^{26b}$  が一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

$R^{21a}$ 、 $R^{21b}$ 、 $R^{25a}$ 、 $R^{25b}$ 、 $R^{36a}$ 、 $R^{36b}$ 、 $R^{27a}$ 、 $R^{27b}$ 、 $R^{29a}$ 、または  $R^{29b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの  $R^{D1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成するか；または  $R^{21a}$  および  $R^{21b}$ 、 $R^{25a}$  および  $R^{25b}$ 、 $R^{36a}$  および  $R^{36b}$ 、 $R^{27a}$  および  $R^{27b}$ 、ならびに  $R^{29a}$  および  $R^{29b}$  のいずれか1つが一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

40

$R^{55a}$ 、 $R^{55b}$ 、 $R^{33a}$ 、および  $R^{33b}$  の各々は、各々独立して、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、

50



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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-C(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または  
 は $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、 $-SO_2R^{A2}$ 、 $-C(O)R^{A2}$ であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

10

ここで、

【化441】

20

は、単結合または二重結合を表し、二重結合が環B内に存在する場合、 $R^{26a}$ または $R^{26b}$ の一方は存在せず、単結合が環B内に存在する場合、C5の水素は 位または 位にある、化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項92)

$R^{25a}$ および $R^{25b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項91に記載の化合物。

30

(項93)

$R^{25a}$ および $R^{25b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^{D1})_2$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項91または92に記載の化合物。

40

(項94)

$R^{25a}$ および $R^{25b}$ が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項91～93のいずれか1項に記載の化合物。

(項95)

$R^{25a}$ および $R^{25b}$ の両方が水素である、上記項91～94のいずれか1項に記載の

50

化合物。

(項 9 6)

$R^{25a}$  および  $R^{25b}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 9 1 ~ 9 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 9 7)

$R^{25a}$  および  $R^{25b}$  の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシハロ、または  $-OH$  である、上記項 9 1 ~ 9 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 9 8)

$R^{25a}$  または  $R^{25b}$  が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または  $-CH(CH_3)_2$  である、上記項 9 1 ~ 9 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。 10

(項 9 9)

$R^{36a}$  または  $R^{36b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 9 1 ~ 9 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。 20

(項 1 0 0)

$R^{36a}$  または  $R^{36b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または  $-N(R^{D1})_2$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 9 7 ~ 9 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 0 1)

$R^{36a}$  または  $R^{36b}$  が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 9 1 ~ 1 0 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。 30

(項 1 0 2)

$R^{36a}$  および  $R^{36b}$  の両方が水素である、上記項 9 1 ~ 1 0 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 0 3)

$R^{36a}$  および  $R^{36b}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 9 1 ~ 1 0 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。 40

(項 1 0 4)

$R^{36a}$  および  $R^{36b}$  の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシハロ、または  $-OH$  である、上記項 9 1 ~ 1 0 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 0 5)

$R^{36a}$  または  $R^{36b}$  が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または  $-CH(CH_3)_2$  である、上記項 9 1 ~ 1 0 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 0 6)

$R^{27a}$  または  $R^{27b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロ 50

シクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 91 ~ 105 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 107)

$R^{27a}$ または $R^{27b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^{D1})_2$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 106 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項 108)

$R^{27a}$ または $R^{27b}$ が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 91 ~ 107 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 109)

$R^{27a}$ および $R^{27b}$ の両方が水素である、上記項 91 ~ 108 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 110)

$R^{27a}$ および $R^{27b}$ が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 91 ~ 109 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 111)

$R^{27a}$ および $R^{27b}$ の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシハロ、または $-OH$ である、上記項 91 ~ 110 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

(項 112)

$R^{27a}$ または $R^{27b}$ が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または $-CH(CH_3)_2$ である、上記項 91 ~ 111 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 113)

$R^{29a}$ または $R^{29b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 91 ~ 112 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

(項 114)

$R^{29a}$ または $R^{29b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^{D1})_2$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 91 ~ 113 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 115)

50

$R^{29a}$  または  $R^{29b}$  が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 91 ~ 114 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 116)

$R^{29a}$  および  $R^{29b}$  の両方が水素である、上記項 91 ~ 115 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 117)

$R^{29a}$  および  $R^{29b}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 91 ~ 116 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 118)

$R^{29a}$  および  $R^{29b}$  の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシハロ、または  $-OH$  である、上記項 91 ~ 117 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 119)

$R^{29a}$  または  $R^{29b}$  が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または  $-CH(CH_3)_2$  である、上記項 91 ~ 118 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 120)

$R^{21a}$  または  $R^{21b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 91 ~ 119 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 121)

$R^{21a}$  または  $R^{21b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または  $-N(R^{D1})_2$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 91 ~ 120 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 122)

$R^{21a}$  または  $R^{21b}$  が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 91 ~ 121 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 123)

$R^{21a}$  および  $R^{21b}$  の両方が水素である、上記項 91 ~ 122 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 124)

$R^{21a}$  および  $R^{21b}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 91 ~ 123 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 125)

$R^{21a}$  および  $R^{21b}$  の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロア

10

20

30

40

50

ルキル、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシハロ、または -OH である、上記項 9 1 ~ 1 2 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 2 6)

$R^{2 1 a}$  または  $R^{2 1 b}$  が、-CH<sub>3</sub>、-CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-OH、-OCH<sub>3</sub>、または -CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> である、上記項 9 1 ~ 1 2 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 2 7)

$R^{7 7}$  が、シス位の水素である、上記項 9 1 ~ 1 2 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 2 8)

$R^{7 7}$  が、トランス位の水素である、上記項 9 1 ~ 1 2 7 のいずれか 1 項に記載の化合物

。

10

(項 1 2 9)

$R^{7 7}$  が、シス位のメチルである、上記項 9 1 ~ 1 2 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 3 0)

$R^{7 7}$  が、トランス位のメチルである、上記項 9 1 ~ 1 2 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 3 1)

$R^{2 3}$  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ルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである、上記項 9 1 ~ 1 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 3 2)

$R^{2 3}$  が、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 9 1 ~ 1 3 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 1 3 3)

$R^{2 3}$  が、置換もしくは非置換アルキルである、上記項 9 1 ~ 1 3 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 3 4)

$R^{2 3}$  が、水素である、上記項 9 1 ~ 1 3 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 3 5)

$R^{2 3}$  が、置換アルキルである、上記項 9 1 ~ 1 3 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

(項 1 3 6)

$R^{2 3}$  が、非置換アルキルである、上記項 9 1 ~ 1 3 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 3 7)

$R^{2 3}$  が、メチルである、上記項 9 1 ~ 1 3 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 3 8)

$R^{2 9}$  が、水素である、上記項 9 1 ~ 1 3 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 3 9)

$R^{2 9}$  が、置換アルキルである、上記項 9 1 ~ 1 3 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 4 0)

$R^{2 9}$  が、非置換アルキルである、上記項 9 1 ~ 1 3 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

(項 1 4 1)

$R^{2 9}$  が、メチルである、上記項 9 1 ~ 1 4 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 4 2)

$R^{2 9}$  が、-OCH<sub>3</sub> である、上記項 9 1 ~ 1 4 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 4 3)

$R^{2 9}$  が、エチルである、上記項 9 1 ~ 1 4 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 4 4)

$R^{2 6 a}$  および  $R^{2 6 b}$  が独立して、水素、ハロゲン、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、上記項 9 1 ~ 1 4 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

50

(項 1 4 5)

$R^{26a}$  および  $R^{26b}$  が独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 9 1 ~ 1 4 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 4 6)

$R^{26a}$  および  $R^{26b}$  が独立して、水素または置換アルキルである、上記項 9 1 ~ 1 4 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 4 7)

$R^{26a}$  および  $R^{26b}$  は独立して、水素または非置換アルキルである、上記項 9 1 ~ 1 4 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 4 8)

$R^{26a}$  および  $R^{26b}$  の両方が水素である、上記項 9 1 ~ 1 4 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 4 9)

$R^{26a}$  が、ハロまたはアルキルであり、 $R^{26b}$  が、水素である、上記項 9 1 ~ 1 4 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 5 0)

$R^{26a}$  および  $R^{26b}$  の両方がハロである、上記項 9 1 ~ 1 4 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 5 1)

$R^{26a}$  および  $R^{26b}$  の両方がアルキルである、上記項 9 1 ~ 1 5 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 5 2)

$R^{26a}$  および  $R^{26b}$  が一緒になってオキシ基を形成する、上記項 9 1 ~ 1 5 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 5 3)

$R^{55a}$  または  $R^{55b}$  が、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-C(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、または  $-OC(=O)N(R^{A1})_2$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 9 1 ~ 1 5 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 5 4)

$R^{55a}$  または  $R^{55b}$  が、置換もしくは非置換アルキル、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-C(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、または  $-OC(=O)OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 9 1 ~ 1 5 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 5 5)

$R^{55a}$  または  $R^{55b}$  が、 $-C(=O)R^{A1}$  または  $-C(=O)N(R^{A1})_2$  であり、ここで  $R^{A1}$  は、置換アルキルである、上記項 9 1 ~ 1 5 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 5 6)

前記アルキルが、ヘテロアリールで置換されている、上記項 1 5 5 に記載の化合物。

(項 1 5 7)

前記アルキルが、5 員ヘテロアリールで置換されている、上記項 1 5 5 に記載の化合物。

(項 1 5 8)

10

20

30

40

50

$R^{33a}$  および  $R^{33b}$  が各々独立して、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、または  $-OC(=O)OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 91 ~ 157 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項 159)

$R^{33a}$  および  $R^{33b}$  が各々独立して、水素、ハロゲン、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、または  $-OC(=O)OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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シクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 91 ~ 158 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 160)

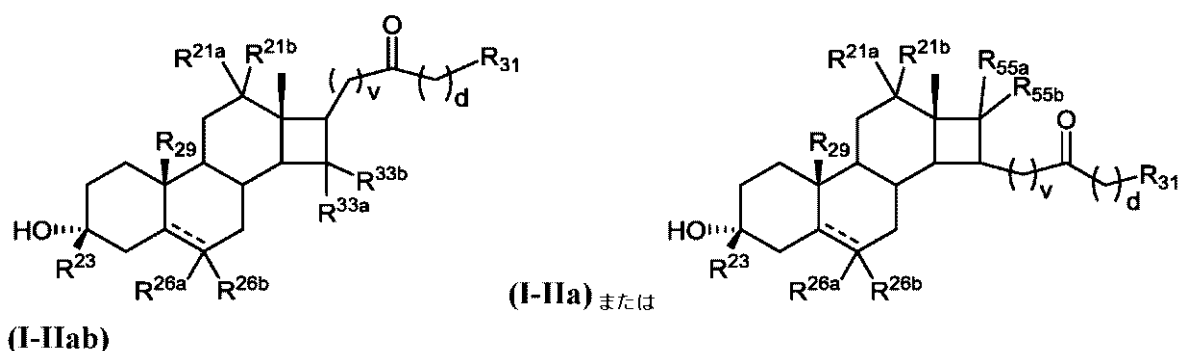
$R^{33a}$  および  $R^{33b}$  が各々、水素である、上記項 91 ~ 159 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 161)

前記化合物が、式 (I-IIa) または式 (I-IIab)

【化 442】



30

の化合物であり、

ここで、 $R_{31}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または  $-S(=O)_2OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合す

40

50

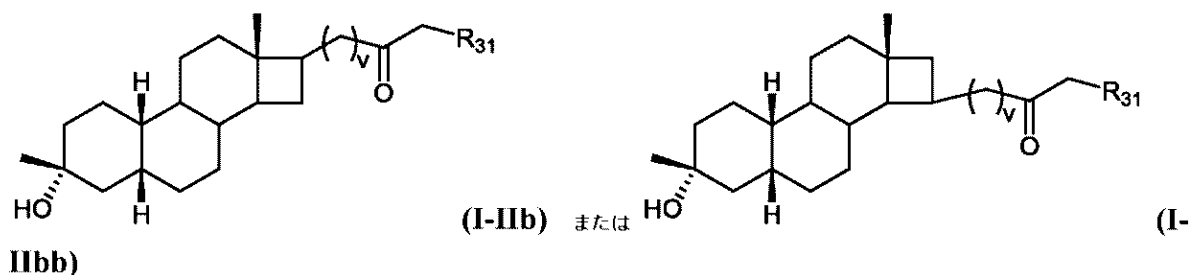
る場合の窒素保護基であるか、または2つの  $R^{A1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$  は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

d は、0、1、2、または3であり、v は、0、1、2、または3である、上記項91に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項162)

前記化合物が、式(I-IIb)または式(I-IIbb)

【化443】



の化合物であり、

ここで、 $R_{31}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

v は、0、1、2、または3である、上記項91に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項163)

$R^{31}$  が、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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である、上記項161～163のいずれか1項に記載の化合物。

(項164)

$R^{31}$  が、

10

20

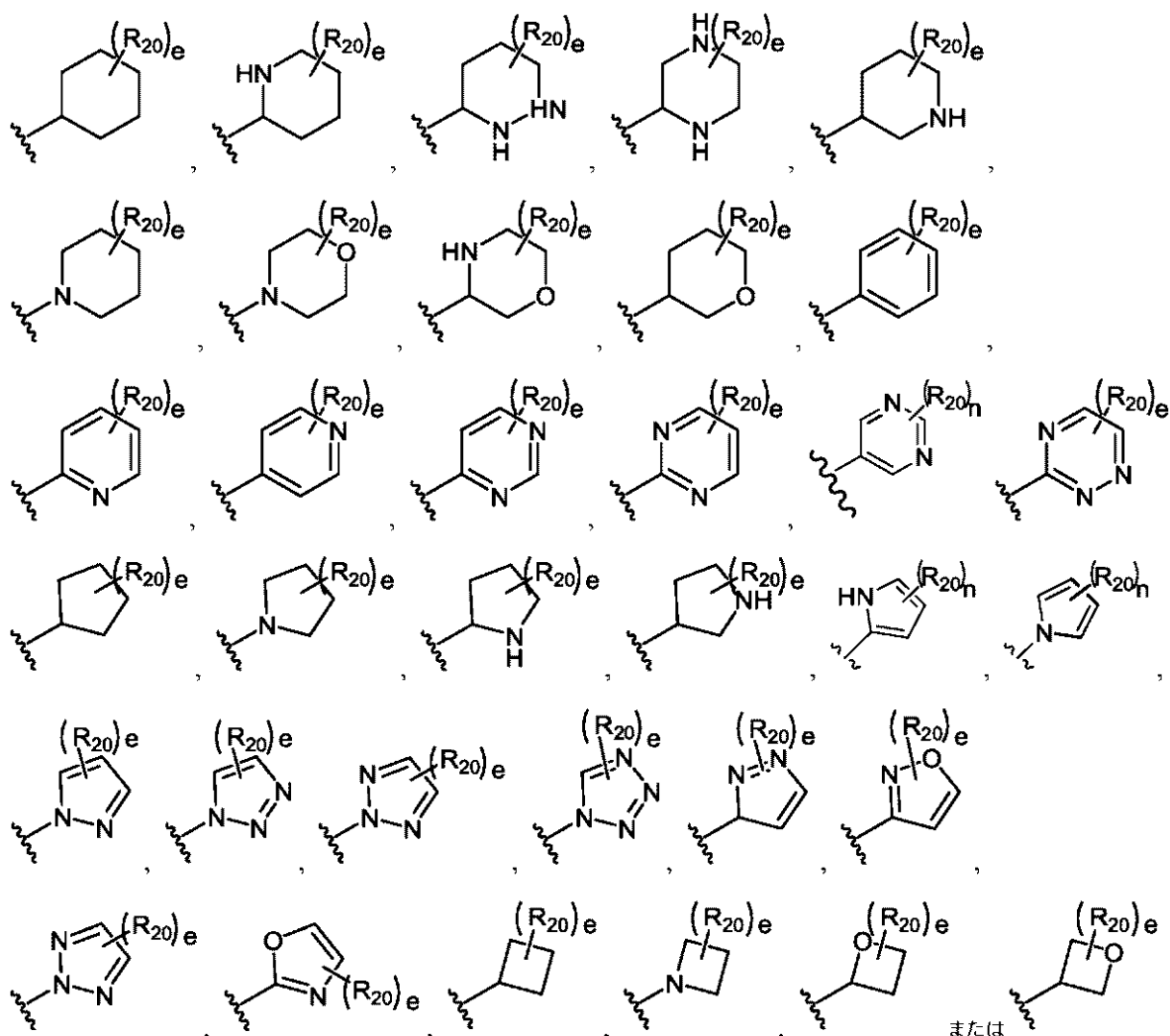
30

40

50



## 【化 4 4 4】



であり、

ここで  $R_{20}$  の各々の存在は独立して、ハロゲン、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OR}^{GA}$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{GA})_2$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}^{GA}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{GA}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{R}^{GA}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{OR}^{GA}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{GA})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{GA})\text{C}(=\text{O})\text{R}^{GA}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{GA})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{GA})\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{GA}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{GA}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{OR}^{GA}$ 、 $-\text{OS}(=\text{O})_2\text{R}^{GA}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{N}(\text{R}^{GA})_2$ 、または  $-\text{N}(\text{R}^{GA})\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{GA}$ ；置換もしくは非置換  $\text{C}_{1\sim 6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $\text{C}_{2\sim 6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_{2\sim 6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_{3\sim 4}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3～4 員ヘテロシクリルであるか、または必要に応じて 2 つの  $\text{R}^{GA}$  が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の 3～4 員炭素環または複素環式環を形成し；

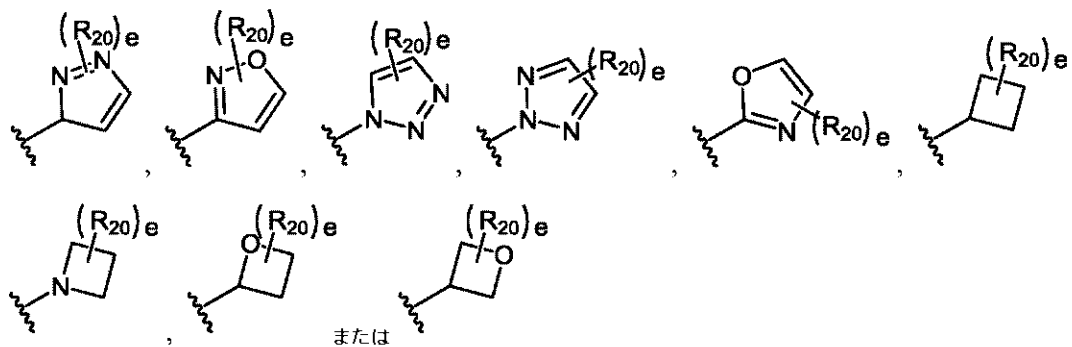
ここで  $\text{R}^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $\text{C}_{1\sim 6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $\text{C}_{2\sim 6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_{2\sim 6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_{3\sim 6}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3～6 員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $\text{R}^{GA}$  が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の炭素環または複素環式環を形成し；

$n$  または  $e$  は、0、1、2、3、4、または 5 である、上記項 162～163 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 165)

R<sup>31</sup> が、

【化 4 4 5】



10

であり、

ここで R<sub>20</sub> の各々の存在は独立して、ハロゲン、-NO<sub>2</sub>、-CN、-OR<sup>GA</sup>、-N(R<sup>GA</sup>)<sub>2</sub>、-C(=O)R<sup>GA</sup>、-C(=O)OR<sup>GA</sup>、-OC(=O)R<sup>GA</sup>、-OC(=O)OR<sup>GA</sup>、-C(=O)N(R<sup>GA</sup>)<sub>2</sub>、-N(R<sup>GA</sup>)C(=O)R<sup>GA</sup>、-OC(=O)N(R<sup>GA</sup>)<sub>2</sub>、-N(R<sup>GA</sup>)C(=O)OR<sup>GA</sup>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>GA</sup>、-S(=O)<sub>2</sub>OR<sup>GA</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>R<sup>GA</sup>、-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>GA</sup>)<sub>2</sub>、または -N(R<sup>GA</sup>)S(=O)<sub>2</sub>R<sup>GA</sup>；置換もしくは非置換 C<sub>1</sub>~6 アルキル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub>~6 アルケニル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub>~6 アルキニル、置換もしくは非置換 C<sub>3</sub>~4 カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3~4 員ヘテロシクリルであるか、または必要に応じて 2 つの R<sup>GA</sup> が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の 3~4 員炭素環または複素環式環を形成し；

20

ここで R<sup>GA</sup> の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換 C<sub>1</sub>~6 アルキル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub>~6 アルケニル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub>~6 アルキニル、置換もしくは非置換 C<sub>3</sub>~6 カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3~6 員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの R<sup>GA</sup> 基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の炭素環または複素環式環を形成し；

30

e は、0、1、2、3、4、または 5 である、上記項 162~164 のいずれか 1 項に記載の化合物。

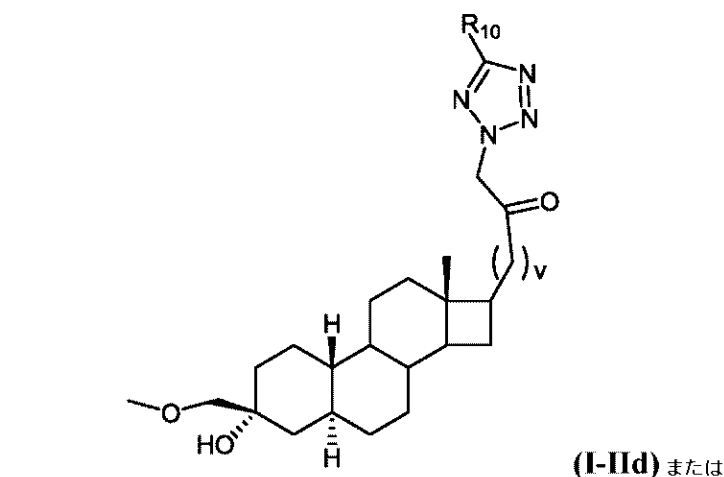
(項 166)

前記化合物が、式 (I - IId) または式 (I - IIdb)

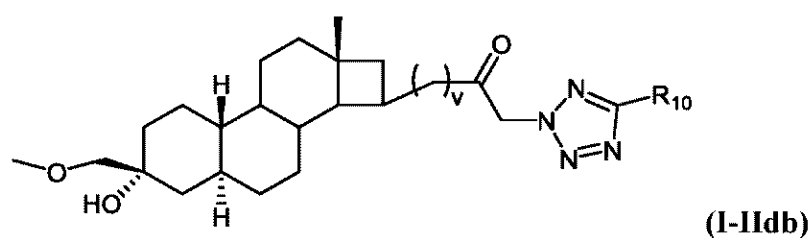
40

50

【化 4 4 6】



10



20

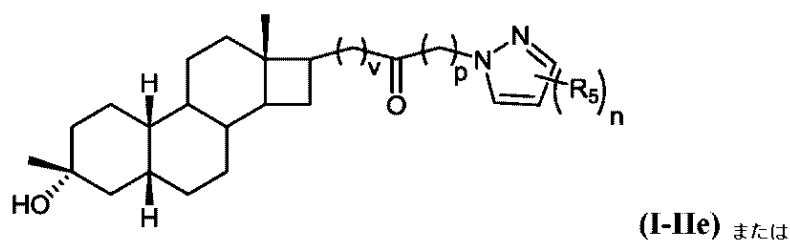
の化合物であり、

ここで、 $v$  は、0、1、2、または3であり； $R_{10}$  は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項91に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

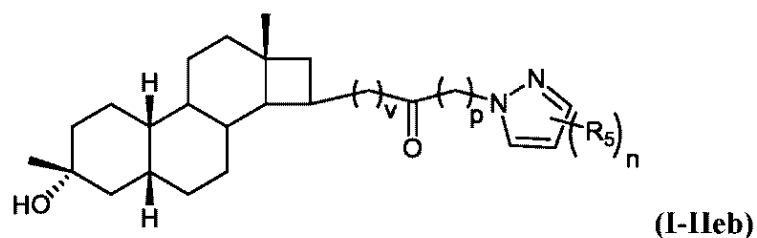
(項167)

前記化合物が、式 (I - II e) または式 (I - II e b)

【化 4 4 7】



30



40

の化合物であり、

ここで、 $n$  は、0、1、2、または3であり；

$v$  は、0、1、2、または3であり；

$p$  は、0、1、または3であり；

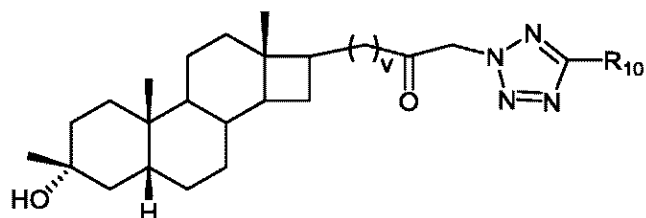
$R_5$  の各々は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項91に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項168)

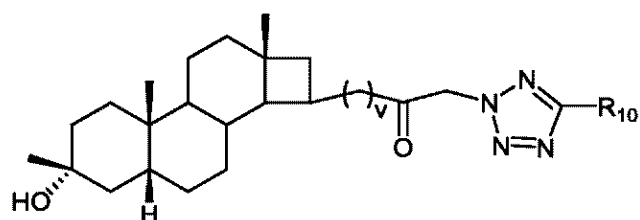
前記化合物が、式 (I - II f) または式 (I - II f b)

50

## 【化 4 4 8】



(I-IIIf) または



(I-IIIfb)

10

の化合物であり、

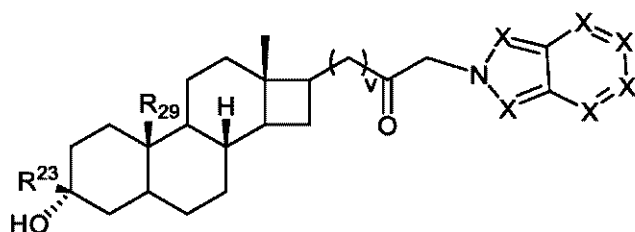
ここで、 $v$  は、0、1、2、または3であり； $R_{10}$  は独立して、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項91に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

20

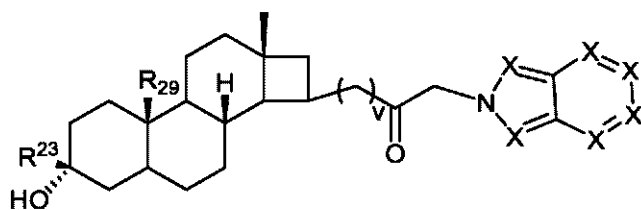
(項169)

前記化合物が、式 (I-IIIg) または式 (I-IIIfb)

## 【化 4 4 9】



(I-IIIg) または



(I-IIIfb)

30

の化合物であり、

ここで、各  $v$  は、0、1、2 または 3 であり、 $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

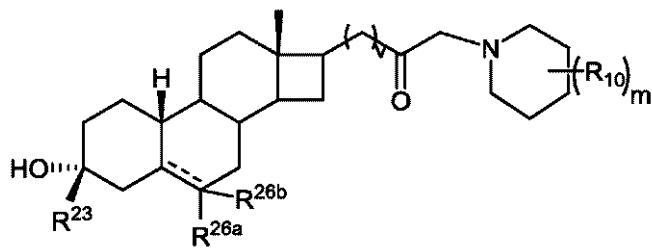
40

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_{3-6}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3～6 員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項91に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

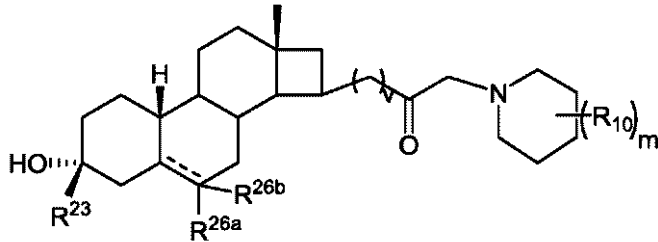
(項170)

50

前記化合物が、式 (I-IIh) または式 (I-IIhb) である。  
【化 450】



(I-IIh) または



(I-IIhb)

の化合物であり、

ここで、v の各々は、0、1、2、または 3 であり；

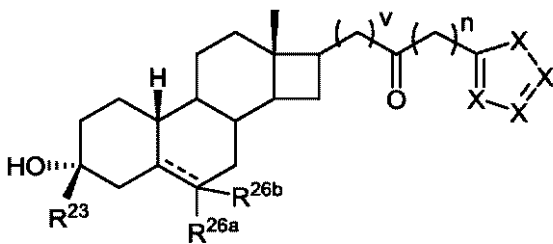
R<sub>10</sub> は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノであり；

m は、0、1、2、または 3 である、上記項 91 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

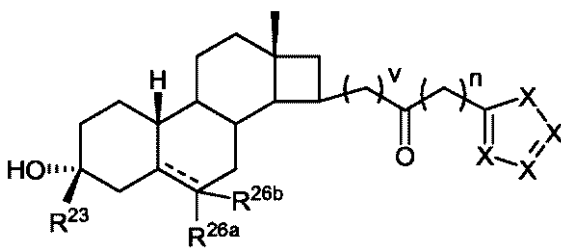
(項 171)

前記化合物が、式 (I-IIi) または式 (I-IIib) である。

【化 451】



(I-IIi) または



(I-IIib)

の化合物であり、

ここで、v は、0、1、2、または 3 であり；各 X は独立して、-C(R<sup>N</sup>)-、-C(R<sup>N</sup>)<sub>2</sub>-、-O-、-S-、-N-、または N(R<sup>N</sup>)- であり、ここで R<sup>N</sup> は独立して、水素、置換もしくは非置換 C<sub>1</sub>~6 アルキル、C(=O)R<sup>GA</sup>、-C(=O)OR<sup>GA</sup>、-C(=O)N(R<sup>GA</sup>)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>GA</sup>、または -S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>GA</sup>)<sub>2</sub> であり；

R<sup>GA</sup> の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換 C<sub>1</sub>~6 アルキル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub>~6 アルケニル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub>~6 アルキニル、置換もしくは非置換 C<sub>3</sub>~6 カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3~6 員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸

10

20

30

40

50

素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{GA}$ 基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項91に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項172)

上記項1～171のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩、および薬学的に受容可能な添加剤を含む薬学的組成物。

(項173)

CNS関連障害の処置を必要とする被験体においてCNS関連障害を処置する方法であって、前記被験体に有効量の上記項1～172のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩を投与する工程を含む、方法。

10

(項174)

前記CNS関連障害が、睡眠障害、気分障害、統合失調症スペクトラム障害、痙攣障害、記憶および/もしくは認知の障害、運動障害、人格障害、自閉症スペクトラム障害、疼痛、外傷性脳損傷、脈管疾患、物質乱用障害および/もしくは離脱症候群、耳鳴、またはてんかん発作重積状態である、上記項173に記載の方法。

(項175)

前記CNS関連障害が、うつである、上記項173に記載の方法。

(項176)

前記CNS関連障害が、産後うつである、上記項173に記載の方法。

(項177)

20

前記CNS関連障害が、大うつ病性障害である、上記項173に記載の方法。

(項178)

前記大うつ病性障害が、中程度の大うつ病性障害である、上記項177に記載の方法。

(項179)

前記大うつ病性障害が、重度の大うつ病性障害である、上記項177に記載の方法。

(項180)

$R^3$ が、メトキシメチルまたはエトキシメチルである、上記項1～171のいずれか1項に記載の化合物。

(項181)

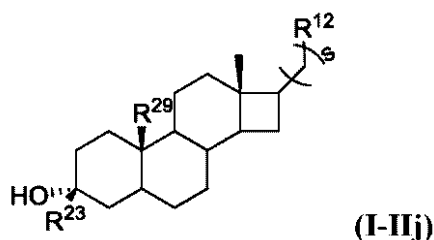
$R^8$ または $R^{13}$ が $-C(O)CH_3$ である場合、 $R^3$ は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項1～171のいずれか1項に記載の化合物。

30

(項182)

前記化合物が、式(I-IIj)

【化452】



40

の化合物であり、

ここで、 $s$ は、0、1、または2であり； $R^{12}$ は、 $-N(R^{ab})_2$ 、 $-OR^{ab}$ であり、ここで $R^{ab}$ の各々は独立して、H、置換もしくは非置換アルキル、 $-SO_2(R^{15})$ 、 $-C(O)R^{15}$ であり、ここで $R^{15}$ は、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、置換もしくは非置換ヘテ

50

ロシクリル、または置換もしくは非置換シクロアルカンである、上記項 9 1 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 1 8 3)

$R^8$  または  $R^{13}$  が、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-C(=O)N(R^{A1})_2$  であり、ここで  $R^{A1}$  は、置換アルキルである、上記項 1 ~ 9 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 8 4)

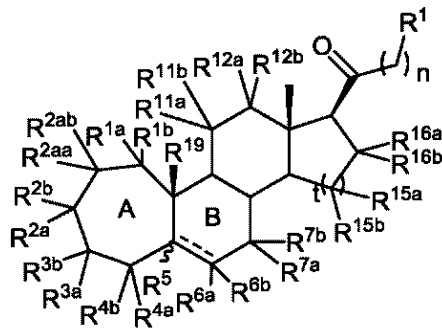
$R^8$  および  $R^{13}$  が一緒になってオキソ ( $=O$ ) 基を形成する、上記項 1 ~ 9 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 1 8 5)

式 (II-I) :

10

【化 4 5 3 - 1】



(II-I)

20

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であって、

式 (II-I) において、

$t$  は、1 であり；

$n$  は、0、1、または 2 であり；

$R^{19}$  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  $C_2 \sim C_6$  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であり；

$R^5$  は、水素またはメチルであるか、または

【化 4 5 3 - 2】

30

が二重結合である場合、 $R^5$  は存在せず；

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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か、または  $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が一緒になってオキソ ( $=O$ ) 基を形成し；

$R^1$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または  $-S(=O)_2OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する

40

50

場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$R^{1a}$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^{2a}$ 、 $R^{2b}$ 、 $R^{2aa}$ 、 $R^{2ab}$ 、 $R^{3a}$ 、 $R^{3b}$ 、 $R^{4a}$ 、 $R^{4b}$ 、 $R^{7a}$ 、 $R^{7b}$ 、 $R^{11a}$ 、 $R^{11b}$ 、 $R^{12a}$ 、または $R^{12b}$ の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ニトロ、アジド、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{D1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成するか；または $R^{2a}$ および $R^{2b}$ 、 $R^{3a}$ および $R^{3b}$ 、 $R^{4a}$ および $R^{4b}$ 、 $R^{7a}$ および $R^{7b}$ 、 $R^{11a}$ および $R^{11b}$ 、ならびに $R^{12a}$ および $R^{12b}$ のいずれか1つが一緒になってオキソ( $=O$ )基を形成し；

ここで $R^{1a}$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^{2a}$ 、 $R^{2b}$ 、 $R^{2aa}$ 、 $R^{2ab}$ 、 $R^{3a}$ 、 $R^{3b}$ 、 $R^{4a}$ 、または $R^{4b}$ の少なくとも1つは、ヒドロキシルであり；

$R^{15a}$ 、 $R^{15b}$ 、 $R^{16a}$ 、および $R^{16b}$ の各々は、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、 $-SO_2R^{A2}$ 、 $-C(O)R^{A2}$ であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

ここで、 $n$ が0であり、 $t$ が1であり、 $R^{19}$ がメチルであり、 $R^5$ が水素であり、 $R^{3a}$ がヒドロキシルであり、環Bが二重結合を有し、 $R^{6a}$ 、 $R^{6b}$ 、 $R^{1a}$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^{2a}$ 、 $R^{2b}$ 、 $R^{2aa}$ 、 $R^{2ab}$ 、 $R^{3b}$ 、 $R^{4a}$ 、 $R^{4b}$ 、 $R^{7a}$ 、 $R^{7b}$ 、 $R^{11a}$ 、 $R^{11b}$ 、 $R^{12a}$ 、 $R^{12b}$ 、 $R^{15a}$ 、 $R^{15b}$ 、 $R^{16a}$ 、および $R^{16b}$ が各々水素である場合、 $R^1$ は、メチルではなく；

ここで、

【化453-3】

-----

10

20

30

40

50



は、単結合または二重結合を表し、二重結合が環 B 内に存在する場合、 $R^{6a}$  または  $R^{6b}$  の一方および  $R^5$  は存在しない、化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

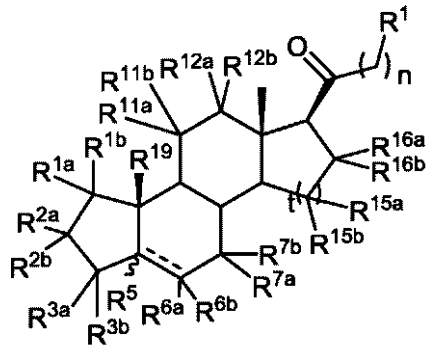
(項 185)

$R^{19}$  が、水素である、式 (II-I) の化合物。

(項 186)

式 (II-II) :

【化 454】



(II-II)

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であって、

式 (II-I) において、

可変基は、式 (II-I) に記載される通りに定義され；ここで  $R^{1a}$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^{2a}$ 、 $R^{2b}$ 、 $R^{3a}$ 、または  $R^{3b}$  の少なくとも 1 つは、ヒドロキシルである、化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 187)

$R^{2a}$  および  $R^{2b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 185 または 186 に記載の化合物。

(項 188)

$R^{2a}$  および  $R^{2b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または  $-N(R^{D1})_2$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 185 ~ 187 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 189)

$R^{2a}$  および  $R^{2b}$  が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 185 ~ 188 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 190)

$R^{2a}$  および  $R^{2b}$  の両方が水素である、上記項 185 ~ 189 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 191)

$R^{2a}$  および  $R^{2b}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 185 ~ 190 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 192)

$R^{2a}$  および  $R^{2b}$  の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシハロ、または  $-OH$  である、上記項 185 ~ 191 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 193)

$R^{2a}$  および  $R^{2b}$  が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または  $-CH(CH_3)_2$  である、上記項 189 ~ 192 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 194)

$R^{2aa}$  および  $R^{2ab}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 189 ~ 193 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 195)

$R^{2aa}$  および  $R^{2ab}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または  $-N(R^{D1})_2$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 185 ~ 194 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 196)

$R^{2aa}$  および  $R^{2ab}$  が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 185 ~ 195 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 197)

$R^{2aa}$  および  $R^{2ab}$  の両方が水素である、上記項 185 ~ 196 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 198)

$R^{2aa}$  および  $R^{2ab}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 185 ~ 197 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 199)

$R^{2aa}$  および  $R^{2ab}$  の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシハロ、または  $-OH$  である、上記項 185 ~ 198 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 200)

$R^{2aa}$  および  $R^{2ab}$  が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または  $-CH(CH_3)_2$  である、上記項 185 ~ 199 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 201)

$R^{1a}$  および  $R^{1b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々

10

20

30

40

50

の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 185 ~ 200 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 202)

$R^{1a}$  および  $R^{1b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または  $-N(R^{D1})_2$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 185 ~ 201 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項 203)

$R^{1a}$  および  $R^{1b}$  が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 185 ~ 202 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 204)

$R^{1a}$  および  $R^{1b}$  の両方が水素である、上記項 185 ~ 203 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 205)

$R^{1a}$  および  $R^{1b}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 185 ~ 204 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 206)

$R^{1a}$  および  $R^{1b}$  の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシハロ、または  $-OH$  である、上記項 185 ~ 205 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 207)

$R^{1a}$  および  $R^{1b}$  が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または  $-CH(CH_3)_2$  である、上記項 185 ~ 206 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

(項 208)

$R^{4a}$  または  $R^{4b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 185 ~ 207 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

(項 209)

$R^{4a}$  および  $R^{4b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または  $-N(R^{D1})_2$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 185 ~ 208 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 210)

$R^{4a}$  および  $R^{4b}$  が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$

50

<sup>1</sup>であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項185～209のいずれか1項に記載の化合物。

(項211)

$R^{4a}$ および $R^{4b}$ の両方が水素である、上記項185～210のいずれか1項に記載の化合物。

(項212)

$R^{4a}$ および $R^{4b}$ が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項185～211のいずれか1項に記載の化合物。

10

(項213)

$R^{4a}$ および $R^{4b}$ の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシハロ、または $-OH$ である、上記項185～212のいずれか1項に記載の化合物。

(項214)

$R^{4a}$ および $R^{4b}$ が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または $-CH(CH_3)_2$ である、上記項185～213のいずれか1項に記載の化合物。

(項215)

$R^{11a}$ または $R^{11b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項185～214のいずれか1項に記載の化合物。

20

(項216)

$R^{11a}$ または $R^{11b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^{D1})_2$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項185～215のいずれか1項に記載の化合物。

30

(項217)

$R^{11a}$ または $R^{11b}$ が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項185～216のいずれか1項に記載の化合物。

40

(項218)

$R^{11a}$ または $R^{11b}$ の両方が水素である、上記項185～217のいずれか1項に記載の化合物。

(項219)

$R^{11a}$ または $R^{11b}$ が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項185～218のいずれか1項に記載の化合物。

(項220)

$R^{11a}$ または $R^{11b}$ の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシハロ、または $-OH$ である、上記項185～219のいずれか1項に記載の化合物。

50

(項 2 2 1)

$R^{11a}$  または  $R^{11b}$  が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または  $-CH(CH_3)_2$  である、上記項 1 8 5 ~ 2 2 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 2 2)

$R^{11a}$  および  $R^{11b}$  が一緒になってオキソを形成することができる、上記項 1 8 5 ~ 2 2 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 2 3)

$R^{15a}$  または  $R^{15b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 8 5 ~ 2 2 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項 2 2 4)

$R^{16a}$  または  $R^{16b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 8 5 ~ 2 2 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 2 2 5)

$R^{7a}$  または  $R^{7b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 8 5 ~ 2 2 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

(項 2 2 6)

$R^{7a}$  および  $R^{7b}$  の両方が水素である、上記項 1 8 5 ~ 2 2 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 2 7)

$R^{7a}$  および  $R^{7b}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 1 8 5 ~ 2 2 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 2 8)

$R^{7a}$  および  $R^{7b}$  の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシハロ、または  $-OH$  である、上記項 1 8 5 ~ 2 2 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

(項 2 2 9)

$R^{7a}$  または  $R^{7b}$  が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または  $-CH(CH_3)_2$  である、上記項 1 8 5 ~ 2 2 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 3 0)

$R^5$  が、 $C_{19}$  位に対してシス位の水素である、上記項 1 8 5 ~ 2 2 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 3 1)

50

R<sup>5</sup> が、C 1 9 位に対してトランス位の水素である、上記項 1 8 5 ~ 2 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 3 2 )

R<sup>5</sup> が、C 1 9 位に対してシス位のメチルである、上記項 1 8 5 ~ 2 3 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 3 3 )

R<sup>5</sup> が、C 1 9 位に対してトランス位のメチルである、上記項 1 8 5 ~ 2 3 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 3 4 )

n が、1 である、上記項 1 8 5 ~ 2 3 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

( 項 2 3 5 )

n が、2 である、上記項 1 8 5 ~ 2 3 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 3 6 )

R<sup>3 a</sup> または R<sup>3 b</sup> 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ルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである、上記項 1 8 5 ~ 2 3 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 3 7 )

R<sup>3 a</sup> または R<sup>3 b</sup> が、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 8 5 ~ 2 3 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

( 項 2 3 8 )

R<sup>3 a</sup> または R<sup>3 b</sup> が、置換もしくは非置換アルキルである、上記項 1 8 5 ~ 2 3 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 3 9 )

R<sup>3 a</sup> または R<sup>3 b</sup> が、水素である、上記項 1 8 5 ~ 2 3 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 4 0 )

R<sup>3 a</sup> または R<sup>3 b</sup> が、置換アルキルである、上記項 1 8 5 ~ 2 3 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 4 1 )

30

R<sup>3 a</sup> または R<sup>3 b</sup> が、非置換アルキルである、上記項 1 8 5 ~ 2 4 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 4 2 )

R<sup>3 a</sup> または R<sup>3 b</sup> が、メチルである、上記項 1 8 5 ~ 2 4 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 4 3 )

R<sup>1 9</sup> が、エチルである、上記項 1 8 5 ~ 2 4 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 4 4 )

R<sup>1 9</sup> が、置換アルキルである、上記項 1 8 5 ~ 2 4 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 4 5 )

40

R<sup>1 9</sup> が、非置換アルキルである、上記項 1 8 5 ~ 2 4 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 4 6 )

R<sup>1 9</sup> が、置換 C<sub>2</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキルである、上記項 1 8 5 ~ 2 4 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 4 7 )

R<sup>1 9</sup> が、非置換 C<sub>2</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキルである、上記項 1 8 5 ~ 2 4 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 2 4 8 )

R<sup>1 9</sup> が、置換 C<sub>2</sub> ~ C<sub>6</sub> アルケニルである、上記項 1 8 5 ~ 2 4 7 のいずれか 1 項に記載

50

載の化合物。

(項 2 4 9)

$R^{19}$  が、非置換  $C_2 \sim C_6$  アルケニルである、上記項 1 8 5 ~ 2 4 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 5 0)

$R^{19}$  が、置換  $C_2 \sim C_6$  アルキニルである、上記項 1 8 5 ~ 2 4 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 5 1)

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が独立して、水素、ハロゲン、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、上記項 1 8 5 ~ 2 5 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項 2 5 2)

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が独立して、水素または置換アルキルである、上記項 1 8 5 ~ 2 5 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 5 3)

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の両方が水素である、上記項 1 8 5 ~ 2 5 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 5 4)

$R^{6a}$  が、ハロまたはアルキルであり、 $R^{6b}$  が、水素である、上記項 1 8 5 ~ 2 5 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 2 5 5)

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の両方がハロである、上記項 1 8 5 ~ 2 5 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 5 6)

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の両方がアルキルである、上記項 1 8 5 ~ 2 5 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 5 7)

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 8 5 ~ 2 5 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

(項 2 5 8)

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^{D1})_2$ であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 8 5 ~ 2 5 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

(項 2 5 9)

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 1 8 5 ~ 2 5 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 2 6 0)

50

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  の両方が水素である、上記項 185 ~ 259 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 261)

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  が、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 185 ~ 260 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 262)

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  の各々が独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$  アルコキシハロ、または  $-OH$  である、上記項 185 ~ 261 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 263)

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  が、 $-CH_3$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-OH$ 、 $-OCH_3$ 、または  $-CH(CH_3)_2$  である、上記項 185 ~ 262 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 264)

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  の両方が水素である、上記項 185 ~ 263 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 265)

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  が一緒になってオキソを形成する、上記項 185 ~ 264 のいずれか 1 項に記載の化合物。

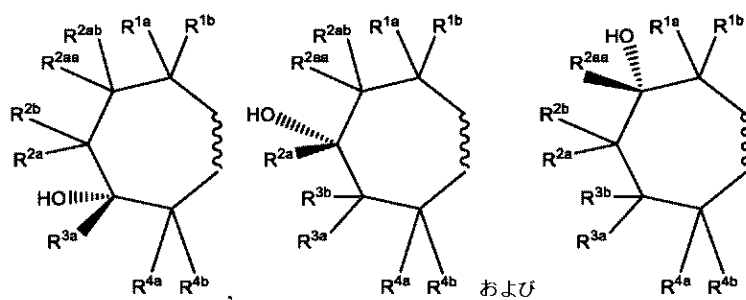
(項 266)

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  は、各々独立して、水素または置換もしくは非置換アルキルである、上記項 185 ~ 265 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 267)

環 A が、

【化 455】



からなる群から選択され、

ここで、

【化 456】



は、環 A が環 B に結合していることを示す、上記項 185 ~ 266 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 268)

$R^1$  が、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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である、上記項 185 ~ 267 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 269)

$R^1$  が、

10

20

30

40

50



## 20



30

40

40

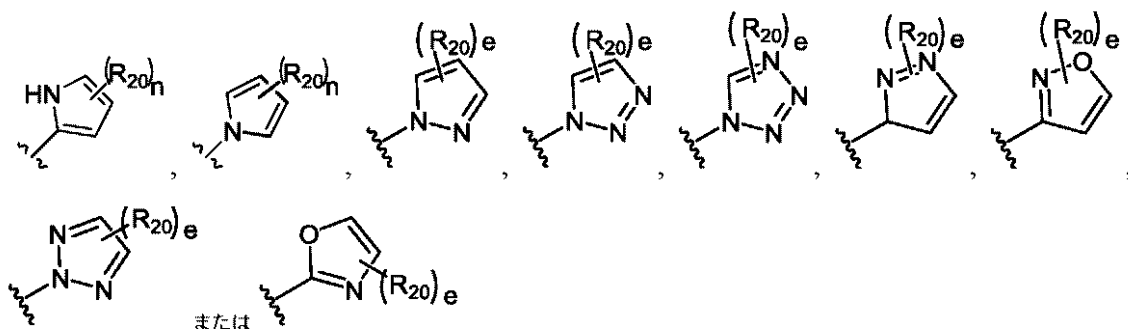
50

e は、0、1、2、3、4、または5であり、n は、0、1、2、3、4、または5である、上記項 1 8 5 ~ 2 6 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 270)

 $R^1$  が、

【化 458】



10

であり、

ここで  $R_{20}$  の各々の存在は独立して、ハロゲン、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OS}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、または  $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ ；置換もしくは非置換  $\text{C}_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_3 \sim 4$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の  $3 \sim 4$  員ヘテロシクリル、 $\text{C}_5 \sim 10$  置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換の  $5 \sim 10$  員ヘテロアリールであるか、または必要に応じて 2 つの  $\text{R}^{\text{GA}}$  が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の  $3 \sim 4$  員炭素環または複素環式環を形成し；

20

ここで  $\text{R}^{\text{GA}}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $\text{C}_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の  $3 \sim 6$  員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $\text{R}^{\text{GA}}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の炭素環または複素環式環を形成し；

30

$e$  は、0、1、2、3、4、または 5 であり、 $n$  は、0、1、2、3、4、または 5 である、上記項 185 ~ 269 のいずれか 1 項に記載の化合物。

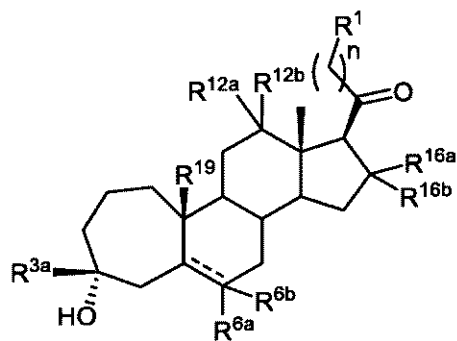
(項 271)

式 (II - I) の前記化合物が、式 (II - Ia)、(II - Iab)、または (II - Iac)：

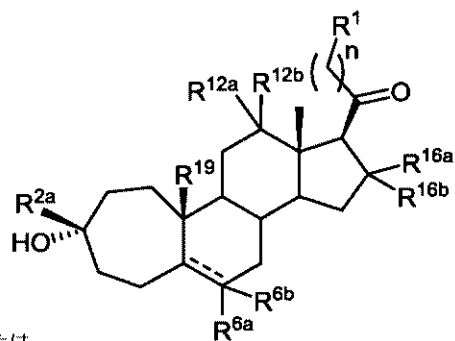
40

50

【化 4 5 9】

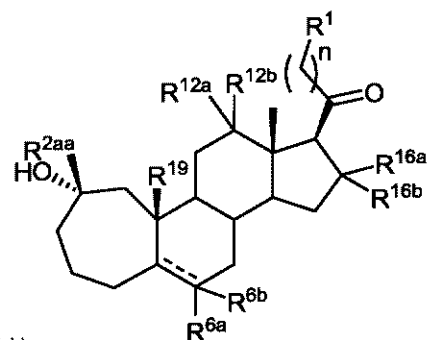


(II-Ia) または



(II-

10



lab) または

(II-Iac)

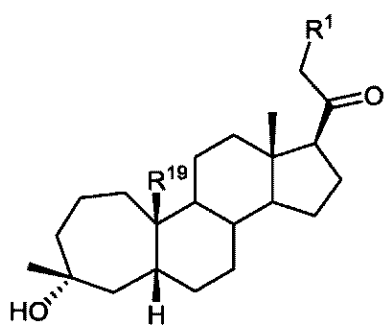
20

の化合物である、上記項 1 8 5 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

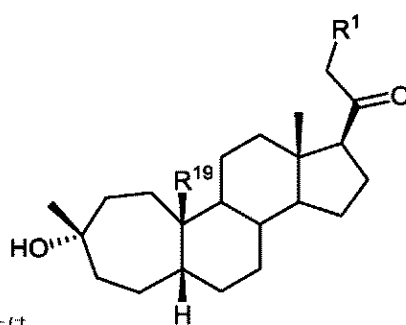
(項 2 7 2)

式 (II - I) の前記化合物が、式 (II - Ib)、(II - Ibb)、または (II - Ibc)

【化 4 6 0】

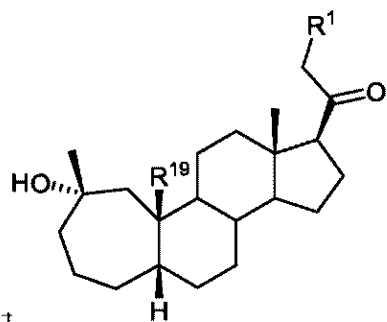


(II-Ib) または



(II-Ibb)

30



または

(II-Ibc)

40

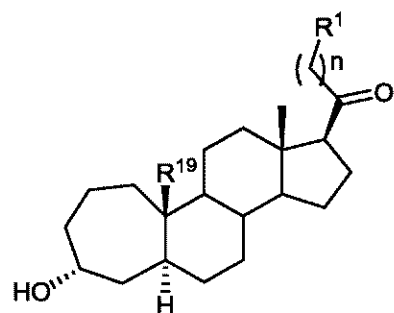
の化合物である、上記項 1 8 5 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 2 7 3)

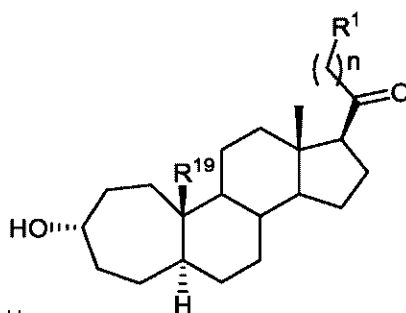
式 (II - I) の前記化合物が、式 (II - Ic)、(II - Icb)、または (II - Icc)

50

## 【化 4 6 1】

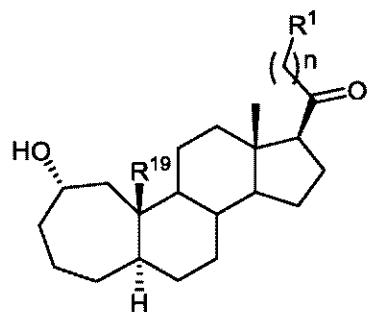


(II-Ic) または



(II-Icb) または

10



(II-Icc)

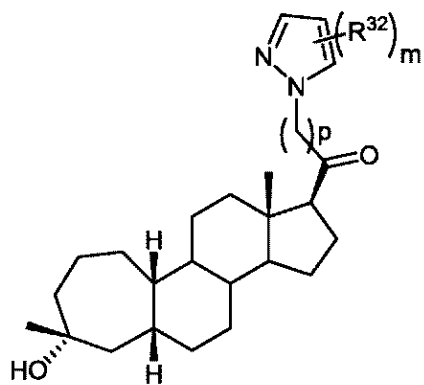
20

の化合物である、上記項 1 8 5 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

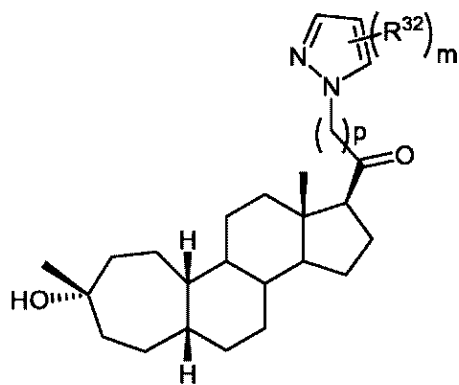
(項 2 7 4)

式 (II-I) の前記化合物が、式 (II-Ie)、(II-Ieb)、または (II-Iec)

## 【化 4 6 2】

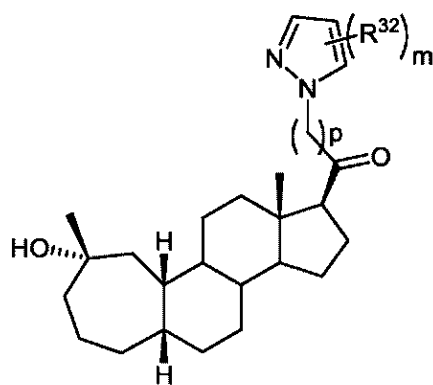


(II-Ie),



(II-Ieb) または

30



(II-Iec)

40

の化合物であり、

ここで、m は、0、1、2、または 3 であり；

p は、0、1、または 3 であり；

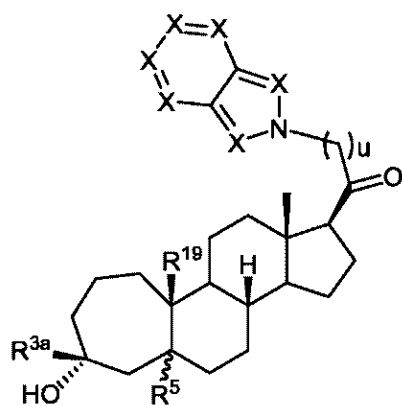
50

$R^{32}$  の各々は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、  
上記項 185 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

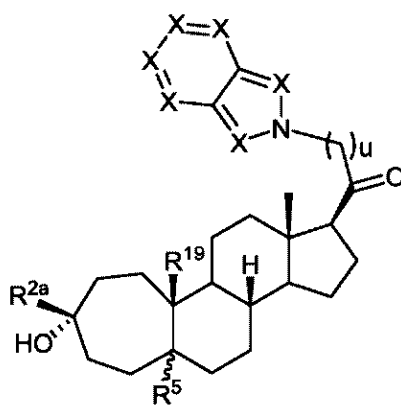
(項 275)

式 (II-I) の前記化合物が、式 (II-Ig)、(II-Igb) または (II-Igc)

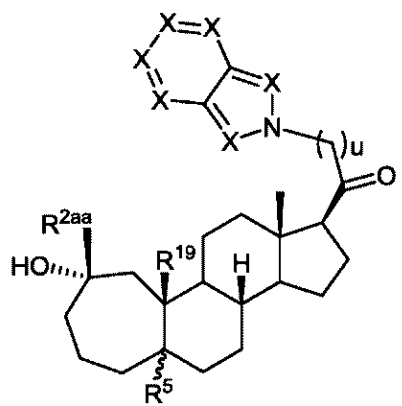
【化 463】



(II-Ig),



(II-Igb) または



(II-Igc)

の化合物であり、

ここで、 $u$  は、0、1、または 2 であり、各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_{3-6}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ~ 6 員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項 185 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 276)

式 (II-I) の前記化合物が、式 (II-Ieg)、(II-Iegb) または (II-Iegc)

10

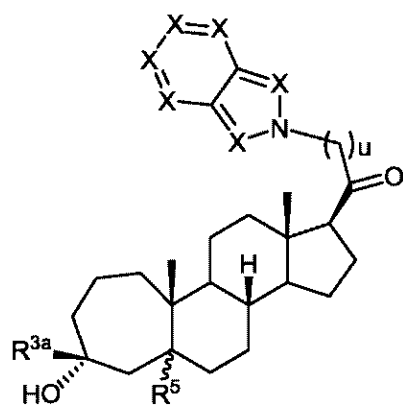
20

30

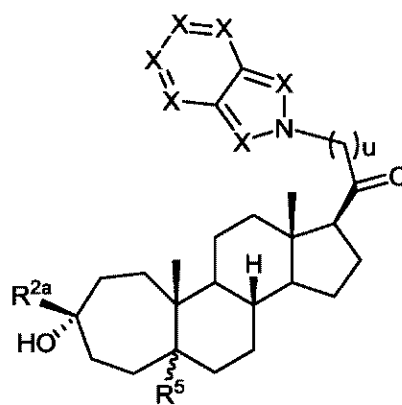
40

50

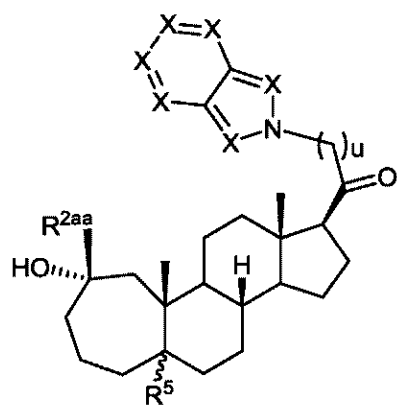
【化 4 6 4】



(II-leg),



(II-legb) または



(II-legc)

10

20

の化合物であり、

ここで、 $u$  は、0、1、または2であり、各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

30

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_{3-6}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項185に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

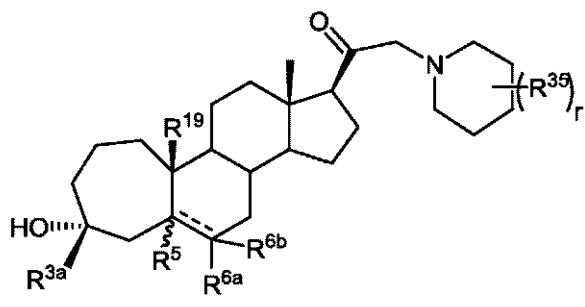
(項277)

式(II-I)の前記化合物が、式(II-Ih)、(II-Ihb)、または(II-Ihc)

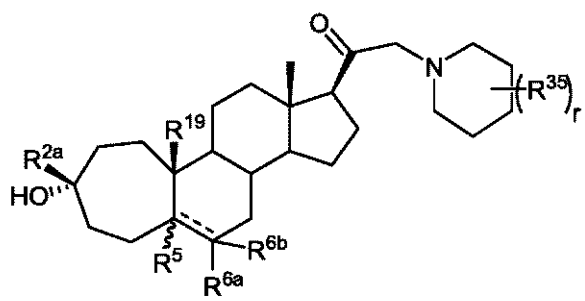
40

50

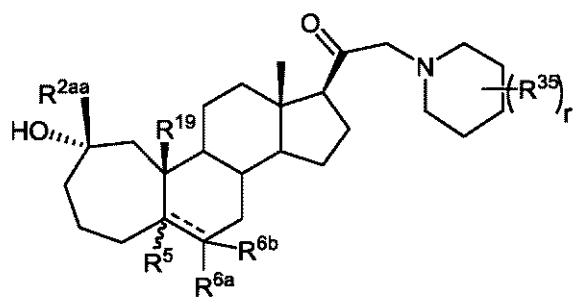
【化 4 6 5】



10



20



の化合物であり、

ここで、 $R^{35}$ の各々は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノであり； $r$ は、0、1、2、または3である、上記項185に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。 30

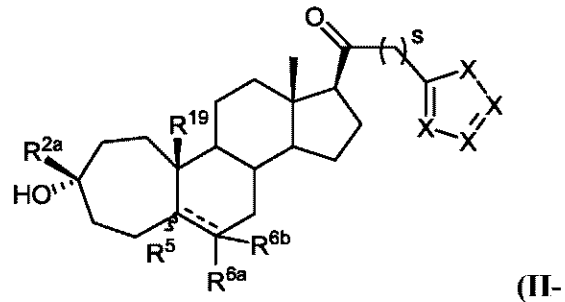
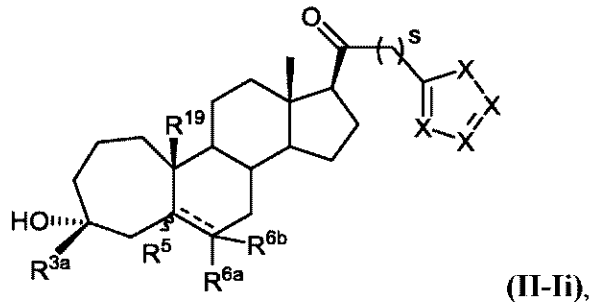
(項278)

式(II-I)の前記化合物が、式(II-Ii)、(II-Iib)または(II-Iic)

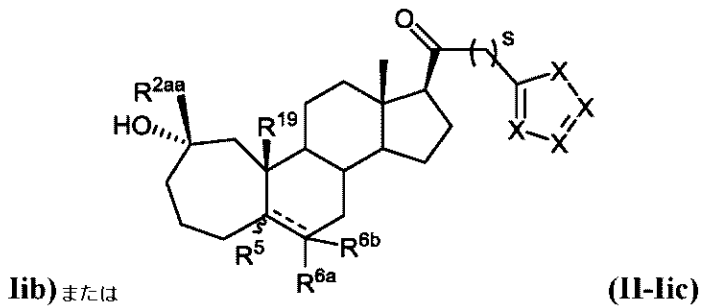
40

50

【化 4 6 6】



10



lib)または

の化合物であり、

20

ここで、 $s$  は、0、1、または2であり；各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

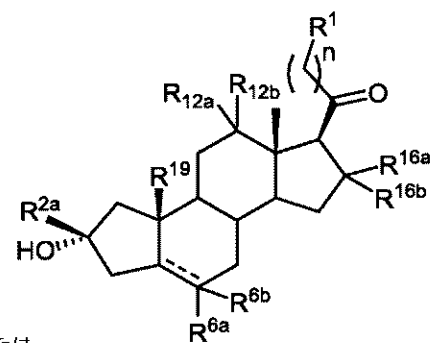
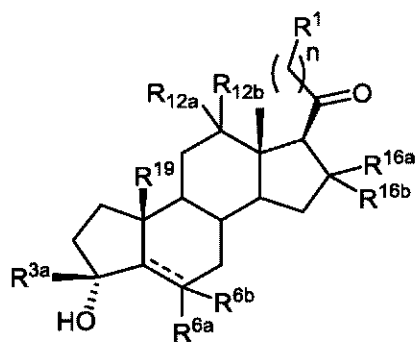
$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_{3-6}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項185に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

30

(項279)

式(II-II)の前記化合物が、式(II-IIa)または(II-IIab)：

【化 4 6 7】



40

の化合物である、上記項186に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

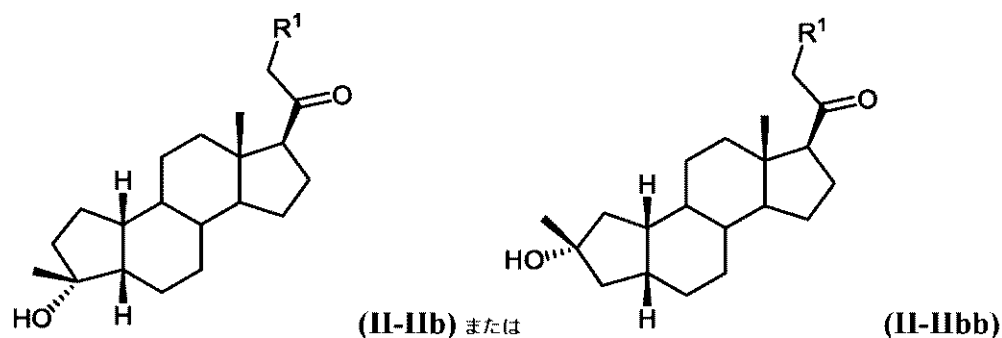
(項280)

式(II-II)の前記化合物が、式(II-IIb)または(II-IIbb)

50



【化 4 6 8】



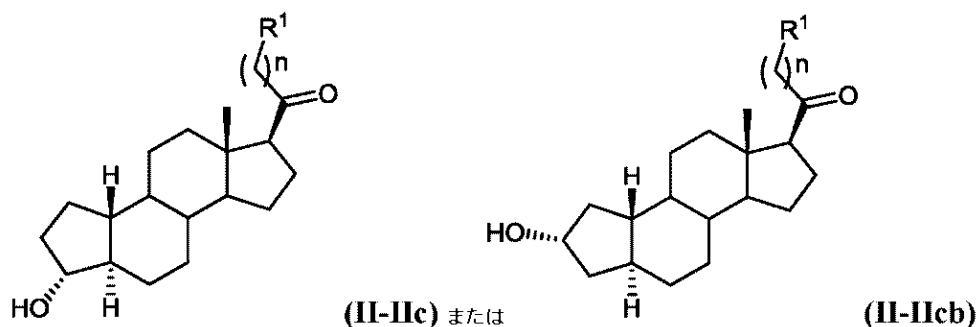
10

の化合物である、上記項 1 8 6 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 2 8 1)

式 (II - II) の前記化合物が、式 (II - II c) または (II - II c b)

【化 4 6 9】



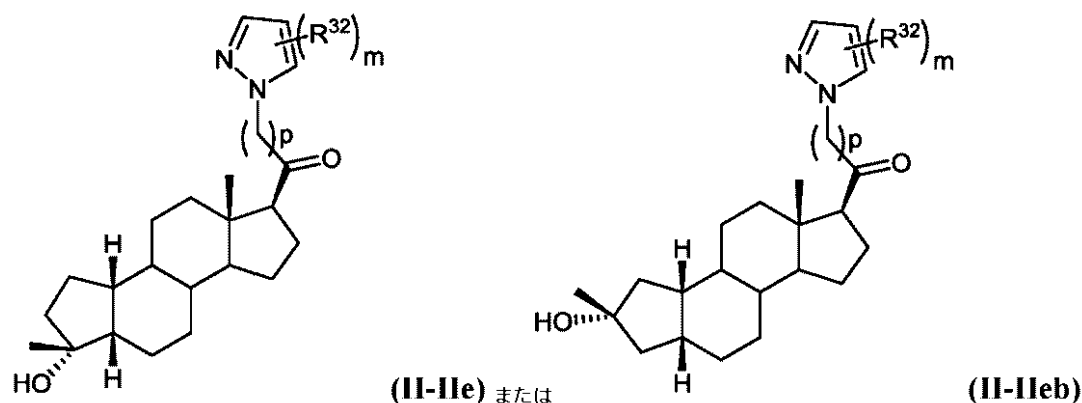
20

の化合物である、上記項 1 8 6 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 2 8 2)

式 (II - II) の前記化合物が、式 (II - II e) または (II - II e b)

【化 4 7 0】



40

の化合物であり、

ここで、m は、0、1、2、または 3 であり；

p は、0、1、または 3 であり；

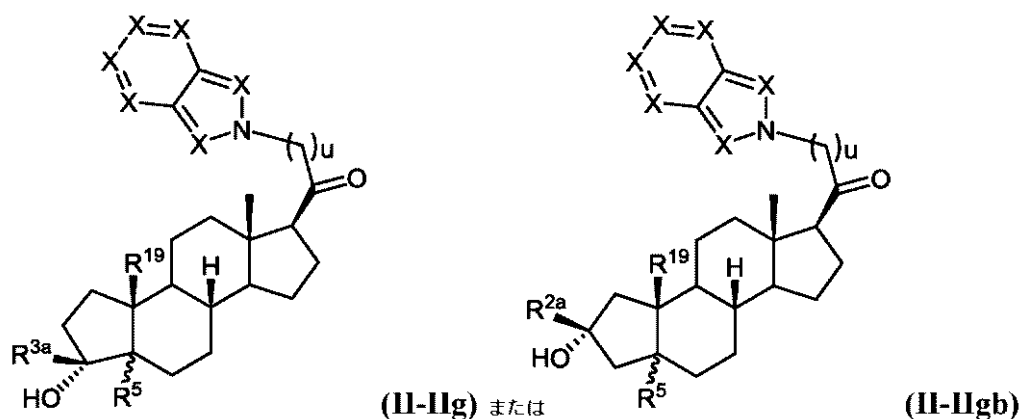
R<sup>32</sup> の各々は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、  
上記項 1 8 6 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 2 8 3)

式 (II - II) の前記化合物が、式 (II - II g) or (II - II g b)

50

【化 4 7 1】



10

の化合物であり、

ここで、 $u$ は、0、1、または2であり、各 $X$ は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または $N(R^N)-$ であり、ここで $R^N$ は独立して、水素、置換もしくは非置換 $C_1 \sim 6$ アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$ であり；

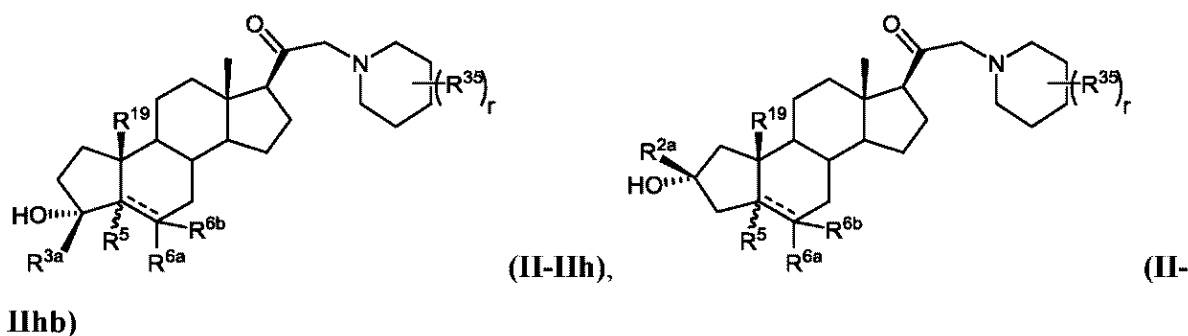
$R^{GA}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換 $C_1 \sim 6$ アルキル、置換もしくは非置換 $C_2 \sim 6$ アルケニル、置換もしくは非置換 $C_2 \sim 6$ アルキニル、置換もしくは非置換 $C_3 \sim 6$ カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{GA}$ 基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項186に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

20

(項284)

式(II-II)の前記化合物が、式(II-IIh)または(II-IIhb)

【化 4 7 2】



30

の化合物であって、

ここで、 $R^{35}$ の各々は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノであり； $r$ は、0、1、2、または3である、上記項186に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

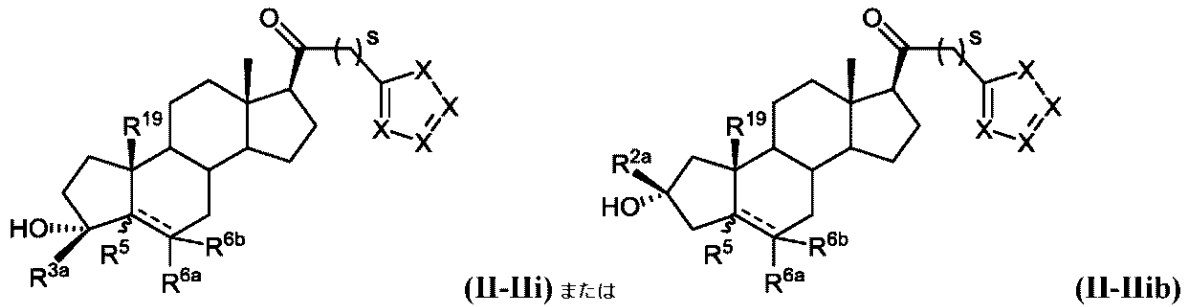
40

(項285)

式(II-II)の前記化合物が、式(II-IIi)または(II-IIib)

50

## 【化 4 7 3】



10

の化合物であり、

ここで、 $s$  は、0、1、または2であり；各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1\sim6}$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1\sim6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_{2\sim6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_{2\sim6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_{3\sim6}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項186に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

20

(項286)

上記項185～285のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩、および薬学的に受容可能な添加剤を含む薬学的組成物。

(項287)

CNS関連障害の処置を必要とする被験体においてCNS関連障害を処置する方法であって、前記被験体に有効量の上記項185～286のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩を投与する工程を含む、方法。

30

(項288)

前記CNS関連障害が、睡眠障害、気分障害、統合失調症スペクトラム障害、痙攣障害、記憶および/もしくは認知の障害、運動障害、人格障害、自閉症スペクトラム障害、疼痛、外傷性脳損傷、脈管疾患、物質乱用障害および/もしくは離脱症候群、耳鳴、またはてんかん発作重積状態である、上記項287に記載の方法。

(項289)

前記CNS関連障害が、うつである、上記項287に記載の方法。

(項290)

前記CNS関連障害が、産後うつである、上記項287に記載の方法。

(項291)

前記CNS関連障害が、大うつ病性障害である、上記項287に記載の方法。

40

(項292)

前記大うつ病性障害が、中程度の大うつ病性障害である、上記項287に記載の方法。

(項293)

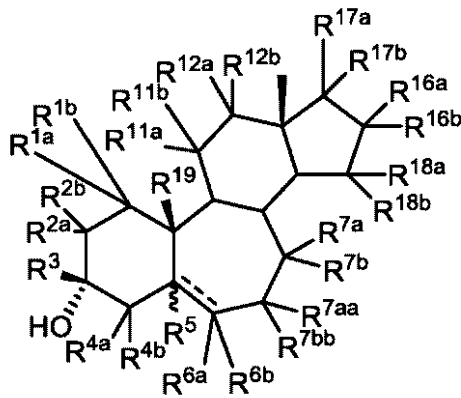
前記大うつ病性障害が、重度の大うつ病性障害である、上記項287に記載の方法。

(項294)

CNS関連障害の処置を必要とする被験体においてCNS関連障害を処置する方法であって、前記被験体に式(III-I)：

50

【化 4 7 4】



(III-I)

10

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩を投与する工程を含み、  
式 (III-I) において、

$R^5$  は、水素または置換もしくは非置換メチルであるか、または

【化 4 7 5】

=====

が二重結合である場合、 $R^5$  は存在せず；

20

$R^3$  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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$R^{19}$  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；

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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か、または  $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が一緒になってオキシ (= O) 基を形成し；

30

$R^{1a}$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$ 、 $R^{12b}$ 、 $R^{2a}$ 、 $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$ 、 $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$ 、 $R^{11b}$ 、 $R^{18a}$ 、および  $R^{18b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{D1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成するか；または  $R^{1a}$  および  $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$  および  $R^{12b}$ 、 $R^{2a}$  および  $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$  および  $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$  および  $R^{11b}$ 、ならびに  $R^{18a}$  および  $R^{18b}$  のいずれか 1 つが一緒になってオキシ (= O) 基を形成し；

40

$R^{7a}$ 、 $R^{7b}$ 、 $R^{7aa}$ 、および  $R^{7bb}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または

50

置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{D1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成し；または $R^{7a}$ および $R^{7b}$ ならびに $R^{7aa}$ および $R^{7bb}$ のいずれか1つが一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

$R^{16a}$ 、 $R^{16b}$ 、 $R^{17a}$ 、および $R^{17b}$ の各々は、各々独立して、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、 $-SO_2R^{A2}$ 、 $-C(O)R^{A2}$ であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであるか、または $R^{17a}$ および $R^{17b}$ が一緒になってオキソ基を形成し；

ここで、

【化476】

-----

は、単結合または二重結合を表し、二重結合が存在する場合、 $R^5$ および $R^{6a}$ または $R^{6b}$ の一方は存在しない、方法。

(項295)

前記CNS関連障害が、睡眠障害、気分障害、統合失調症スペクトラム障害、痙攣障害、記憶および/もしくは認知の障害、運動障害、人格障害、自閉症スペクトラム障害、疼痛、外傷性脳損傷、脈管疾患、物質乱用障害および/もしくは離脱症候群、耳鳴、またはてんかん発作重積状態である、上記項294に記載の方法。

(項296)

前記CNS関連障害が、産後うつである、上記項294または295に記載の方法。

(項297)

前記CNS関連障害が、大うつ病性障害である、上記項294～296のいずれか1項に記載の方法。

(項298)

前記CNS関連障害に、長期投与されるかまたは急性に投与される、上記項294～297のいずれか1項に記載の方法。

(項299)

前記CNS関連障害に、経口投与、静脈内投与、経皮投与、鼻腔内投与、または皮下投与される、上記項294～298のいずれか1項に記載の方法。

(項300)

前記CNS関連障害に経口投与される、上記項294～299のいずれか1項に記載の方法。

10

20

30

40

50

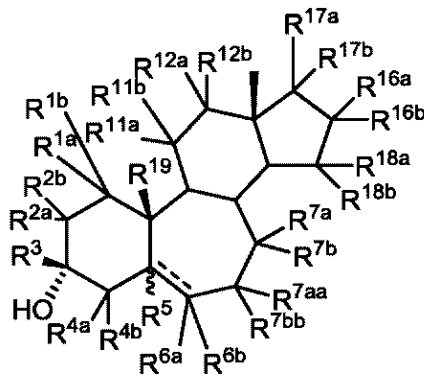
(項 3 0 1)

前記 C N S 関連障害に静脈内投与される、上記項 2 9 4 ~ 3 0 0 のいずれか 1 項に記載の方法。

(項 3 0 2)

式 ( I I I - I ) :

【化 4 7 7】



(III-I)

10

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であって、

式 ( I I I - I ) において、

20

$R^5$  は、水素または置換もしくは非置換メチルであるか、または

【化 4 7 8】

が二重結合である場合、 $R^5$  は存在せず；

$R^3$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$R^{19}$  は、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；

30

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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か、または  $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が一緒になってオキソ (= O) 基を形成し；

$R^{1a}$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$ 、 $R^{12b}$ 、 $R^{2a}$ 、 $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$ 、 $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$ 、 $R^{11b}$ 、 $R^{18a}$ 、および  $R^{18b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{D1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成するか；または  $R^{1a}$  および  $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$  および  $R^{12b}$ 、 $R^{2a}$  および  $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$  および  $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$  および  $R^{11b}$ 、ならびに  $R^{18a}$  および  $R^{18b}$  のいずれか 1 つが一緒になってオキソ (= O) 基を形成し；

40

$R^{7a}$ 、 $R^{7b}$ 、 $R^{7aa}$ 、および  $R^{7bb}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-O$

50

$C(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{D1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成し；または $R^{7a}$ および $R^{7b}$ ならびに $R^{7aa}$ および $R^{7bb}$ のいずれか1つが一緒になってオキソ( $=O$ )基を形成し；

$R^{16a}$ 、 $R^{16b}$ 、 $R^{17a}$ 、および $R^{17b}$ の各々は、各々独立して、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、 $-SO_2R^{A2}$ 、 $-C(O)R^{A2}$ であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであるか、または $R^{17a}$ および $R^{17b}$ が一緒になってオキソ基を形成し；

ここで、

【化479】

-----

は、単結合または二重結合を表し、二重結合が存在する場合、 $R^5$ および $R^{6a}$ または $R^{6b}$ の一方は存在しない、化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項303)

$R^{2a}$ および $R^{2b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項302に記載の化合物。

(項304)

$R^{11a}$ および $R^{11b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 3 0 2 ~ 3 0 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 3 0 5)

$R^{16a}$  および  $R^{16b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 3 0 2 ~ 3 0 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項 3 0 6)

$R^{7a}$ 、 $R^{7b}$ 、 $R^{7aa}$ 、および  $R^{7bb}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 3 0 2 ~ 3 0 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 3 0 7)

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が独立して、水素、ハロゲン、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、上記項 3 0 2 ~ 3 0 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 3 0 8)

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 3 0 2 ~ 3 0 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

(項 3 0 9)

$R^{17a}$  および  $R^{17b}$  が、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、または  $-OC(=O)N(R^{A1})_2$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 3 0 2 ~ 3 0 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

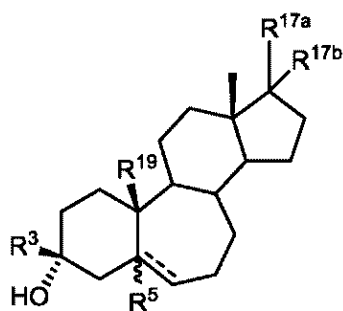
40

(項 3 1 0)

前記化合物が、式 (III - Ia)



【化 4 8 0】



(III-Ia)

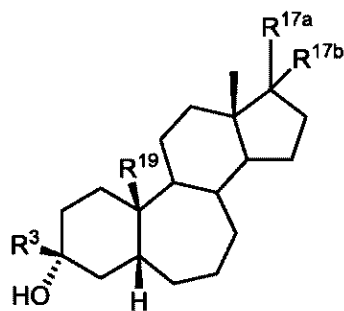
10

の化合物である、上記項 3 0 2 ~ 3 0 9 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 3 1 1)

前記化合物が、式 ( I I I - I b )

【化 4 8 1】



(III-Ib)

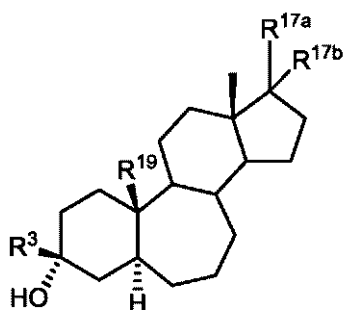
20

の化合物である、上記項 3 0 2 ~ 3 1 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 3 1 2)

前記化合物が、式 ( I I I - I c )

【化 4 8 2】



(III-Ic)

40

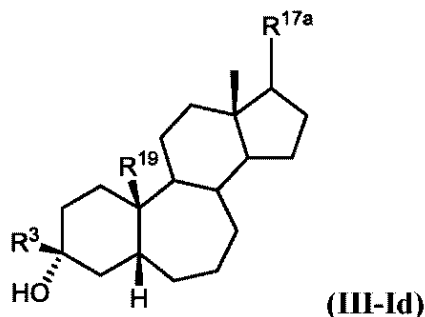
の化合物である、上記項 3 0 2 ~ 3 0 9 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 3 1 3)

前記化合物が、式 ( I I I - I d )

50

【化 4 8 3】



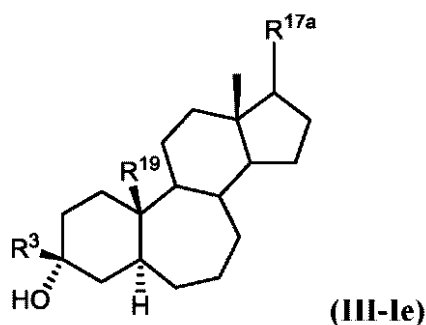
10

の化合物である、上記項 3 0 2 ~ 3 0 9 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

( 項 3 1 4 )

前記化合物が、式 ( I I I - I e )

【化 4 8 4】



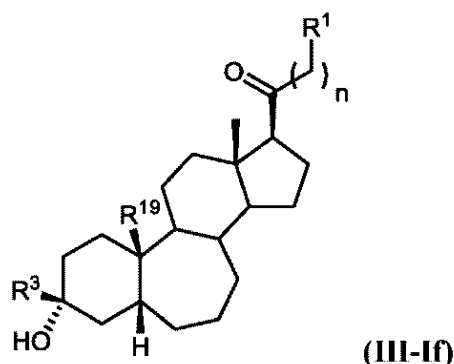
20

の化合物である、上記項 3 0 2 ~ 3 0 9 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

( 項 3 1 5 )

前記化合物が、式 ( I I I - I f )

【化 4 8 5】



40

の化合物であり、

ここで、 $R^1$  は、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)$

50

$SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

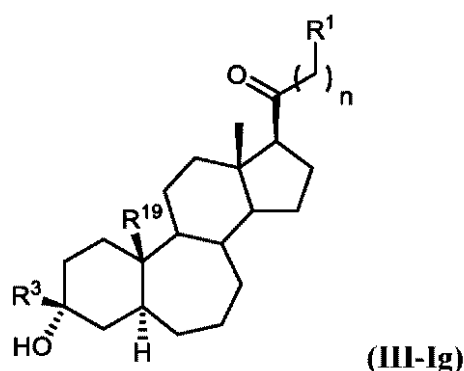
10

$n$ は、0、1、または2である、上記項302～309のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項316)

前記化合物が、式(III-Ig)

【化486】



20

の化合物であり、

ここで、 $R^1$ は、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

30

40

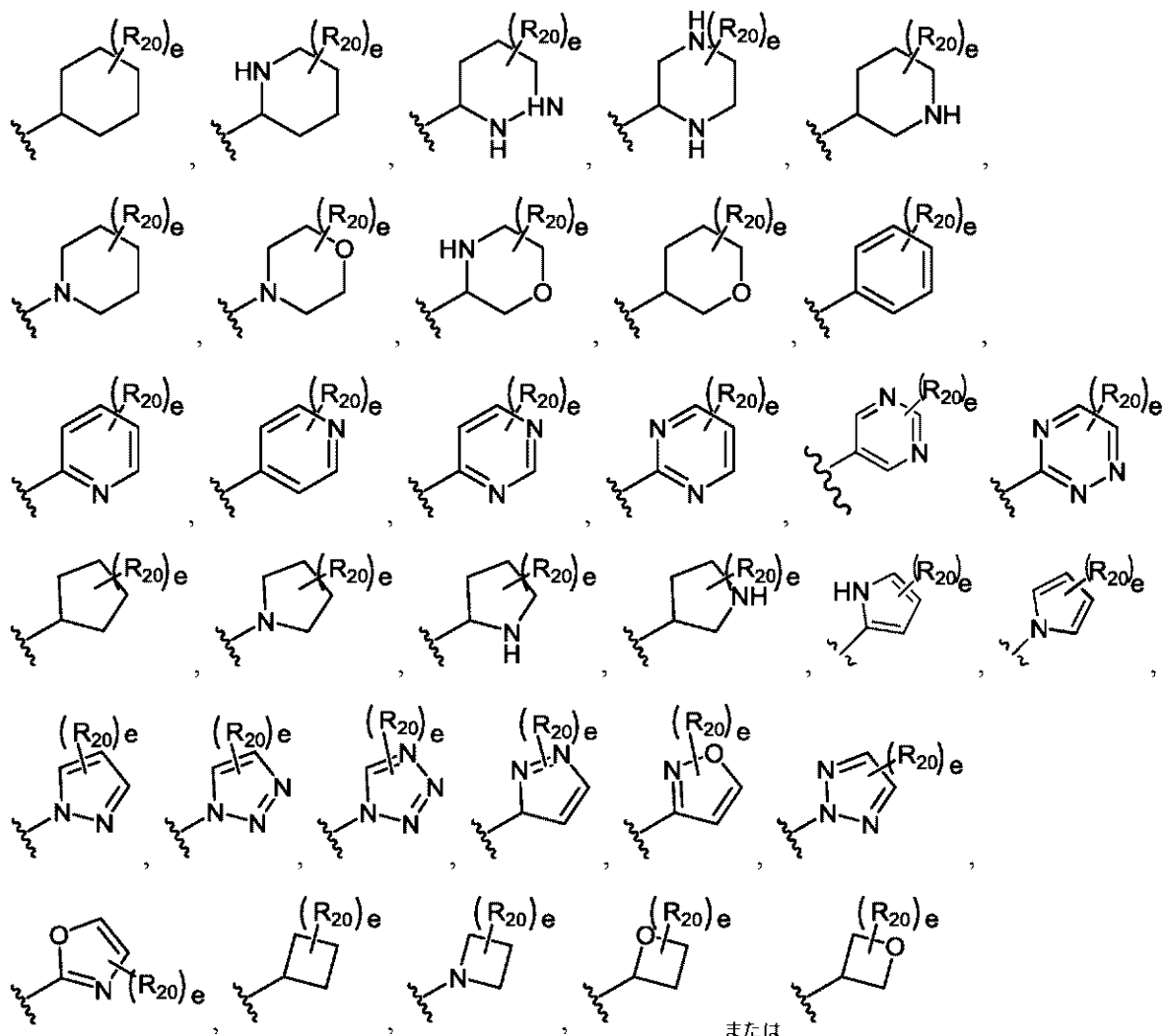
$n$ は、0、1、2、または3である、上記項302～309のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

50

(項 3 1 7)

 $R^1$  が、

【化 4 8 7】



10

20

30

または

であり、

ここで  $R_{20}$  の各々の存在は独立して、ハロゲン、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OS}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、または  $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ ；置換もしくは非置換  $\text{C}_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_3 \sim 4$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の  $3 \sim 4$  員ヘテロシクリルであるか、または必要に応じて2つの  $\text{R}^{\text{GA}}$  が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の  $3 \sim 4$  員炭素環または複素環式環を形成し；

40

ここで  $\text{R}^{\text{GA}}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $\text{C}_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の  $3 \sim 6$  員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの  $\text{R}^{\text{GA}}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の炭素環または複素環式環を形成し；

$e$  は、0、1、2、3、4、または5である、上記項 3 1 5 または 3 1 6 に記載の化合

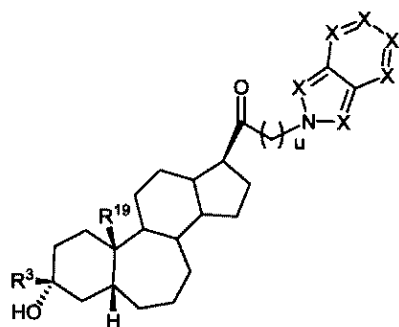
50

物。

(項 3 1 8)

前記化合物が、式 ( I I I - I h )

【化 4 8 8】



(III-Ih)

10

の化合物であり、

ここで、 $u$  は、0、1、または2であり、各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

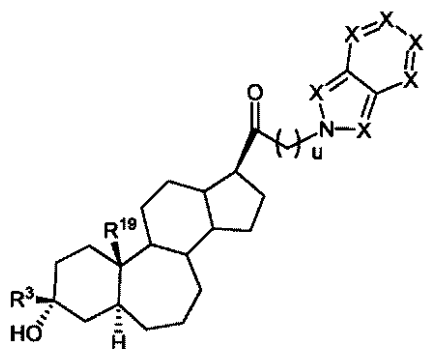
20

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項 2 9 4 に記載の化合物。

(項 3 1 9)

前記化合物が、式 ( I I I - I i )

【化 4 8 9】



(III-Ii)

30

40

の化合物であり、

ここで、 $u$  は、0、1、または2であり、各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、置換

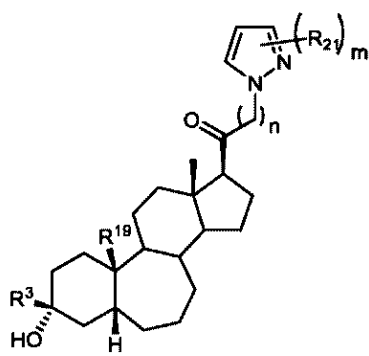
50

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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{GA}$ 基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項294に記載の化合物。

(項320)

前記化合物が、式(I I I - I j )

【化490】



(III-Ij)

10

の化合物であり、

ここで、 $m$ は、0、1、2、または3であり； $n$ は、0、1、または2であり；

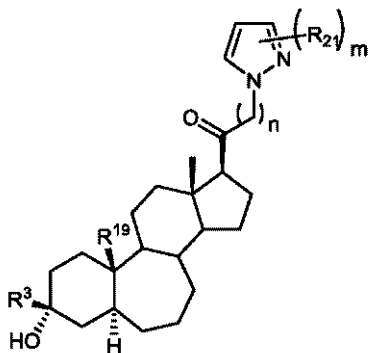
各 $R^{21}$ は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項315に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

20

(項321)

前記化合物が、式(I I I - I k )

【化491】



(III-Ik)

30

の化合物であり、

ここで、 $m$ は、0、1、2、または3であり； $n$ は、0、2、または2であり；

各 $R^{21}$ は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項316に記載の化合物。

40

(項322)

$R^{21}$ が、 $-CN$ である、上記項320または321に記載の化合物。

(項323)

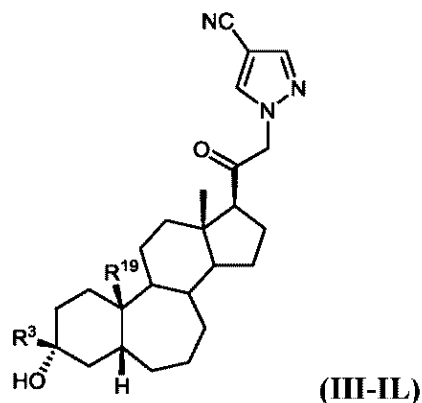
$m$ が1であり、 $n$ が1である、上記項320～322のいずれか1項に記載の化合物。

(項324)

前記化合物が、式(I I I - I L )

50

【化 4 9 2】



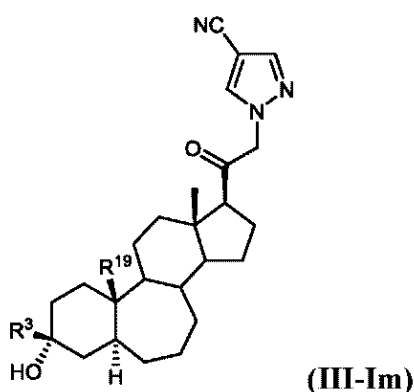
10

の化合物である、上記項 3 1 5 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 3 2 5)

前記化合物が、式 ( I I I - I m )

【化 4 9 3】



20

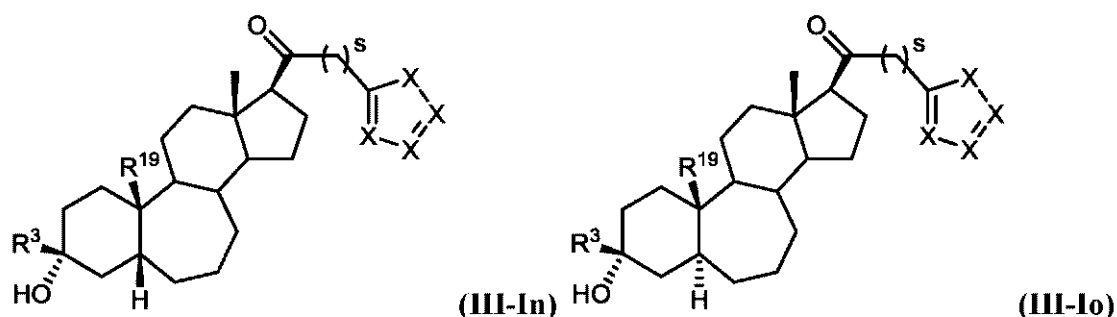
の化合物である、上記項 3 1 6 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

30

(項 3 2 6)

前記化合物が、式 ( I I I - I n ) または式 ( I I I - I o )

【化 4 9 4】



40

の化合物であり、

ここで、 $s$  は、0、1、または 2 であり；各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、置換も

50

しくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ～ 6 員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項 294 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 327)

$R^3$  が、置換もしくは非置換アルキルである、上記項 302 ～ 326 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 328)

$R^3$  が、非置換アルキルである、上記項 302 ～ 327 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 329)

$R^3$  が、 $-CH_3$  である、上記項 302 ～ 328 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 330)

$R^{19}$  が、置換もしくは非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim C_6$  アルケニル、または置換もしくは非置換  $C_2 \sim C_6$  アルキニルである、上記項 302 ～ 329 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 331)

$R^{19}$  が、非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキルである、上記項 302 ～ 330 のいずれか 1 項に記載の化合物。

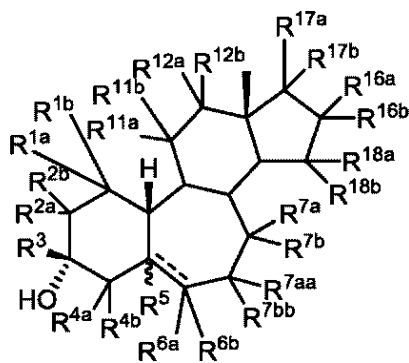
(項 332)

$R^{19}$  が、 $-CH_3$  である、上記項 302 ～ 331 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 333)

式 (III-I) :

【化 495】



(III-II)

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であって、

式 (III-I) において、

$R^5$  は、水素または置換もしくは非置換メチルであるか、または

【化 496】

=====

が二重結合である場合、 $R^5$  は存在せず；

$R^3$  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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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

10

20

30

40

50



ルキニルであるか、または  $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が一緒になってオキソ(=O)基を形成し

；  
 $R^{1a}$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$ 、 $R^{12b}$ 、 $R^{2a}$ 、 $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$ 、 $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$ 、 $R^{11b}$ 、 $R^{18a}$ 、および  $R^{18b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの  $R^{D1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成するか；または  $R^{1a}$  および  $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$  および  $R^{12b}$ 、 $R^{2a}$  および  $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$  および  $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$  および  $R^{11b}$ 、ならびに  $R^{18a}$  および  $R^{18b}$  のいずれか1つが一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

$R^{7a}$ 、 $R^{7b}$ 、 $R^{7aa}$ 、および  $R^{7bb}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの  $R^{D1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成し；または  $R^{7a}$  および  $R^{7b}$  ならびに  $R^{7aa}$  および  $R^{7bb}$  のいずれか1つが一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

$R^{16a}$ 、 $R^{16b}$ 、 $R^{17a}$ 、および  $R^{17b}$  の各々は、各々独立して、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または  $-S(=O)_2OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、 $-SO_2R^{A2}$ 、 $-C(O)R^{A2}$  であるか、または2つの  $R^{A1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

ここで、

【化497】

-----

10

20

30

40

50

は、単結合または二重結合を表し、二重結合が存在する場合、 $R^5$  および  $R^{6a}$  または  $R^{6b}$  の一方は存在しない、化合物またはその薬学的に受容可能な塩

(項 334)

$R^{2a}$  および  $R^{2b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 333 に記載の化合物。

10

(項 335)

$R^{4a}$  および  $R^{4b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 333 または 334 に記載の化合物。

20

(項 336)

$R^{11a}$  および  $R^{11b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであるか、または  $R^{11a}$  および  $R^{11b}$  が一緒になってオキソ基を形成する、上記項 333 ~ 335 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

(項 337)

$R^{16a}$  および  $R^{16b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 333 ~ 336 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

(項 338)

$R^{7a}$ 、 $R^{7b}$ 、 $R^{7aa}$ 、および  $R^{7bb}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであるか、または  $R^{7a}$  および  $R^{7b}$  または  $R^{7aa}$  および  $R^{7bb}$  のいずれかが一緒になってオキソ(=O)を形成する、上記項 333 ~ 337 のいずれか 1 項に記載の化合物。

50

(項 3 3 9)

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が独立して、水素、ハロゲン、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、上記項 3 3 3 ~ 3 3 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 3 4 0)

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 3 3 3 ~ 3 3 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項 3 4 1)

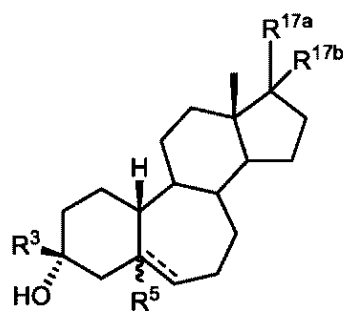
$R^{17a}$  および  $R^{17b}$  が、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、または  $-OC(=O)N(R^{A1})_2$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もし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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 3 3 3 ~ 3 4 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 3 4 2)

前記化合物が、式 (III - II a)

【化 4 9 8】



(III-IIa)

30

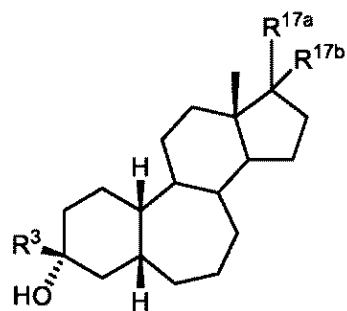
の化合物である、上記項 3 3 3 ~ 3 4 1 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 3 4 3)

前記化合物が、式 (III - II b)

40

【化 4 9 9】



(III-IIb)

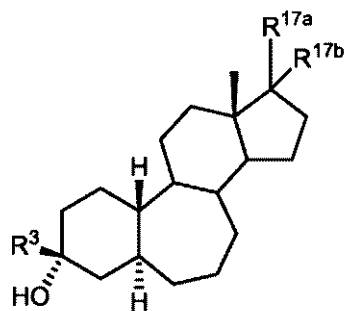
10

の化合物である、上記項 3 3 3 ~ 3 4 2 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 3 4 4)

前記化合物が、式 ( I I I - I I c )

【化 5 0 0】



(III-IIc)

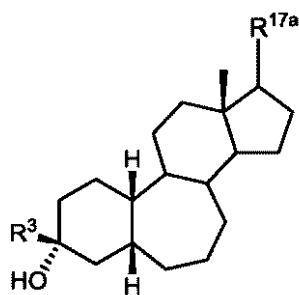
20

の化合物である、上記項 3 3 3 ~ 3 4 2 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 3 4 5)

前記化合物が、式 ( I I I - I I d )

【化 5 0 1】



(III-IIId)

40

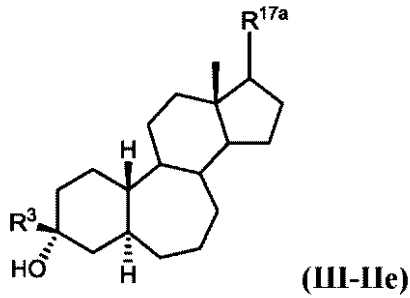
の化合物である、上記項 3 3 3 ~ 3 4 2 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 3 4 6)

前記化合物が、式 ( I I I - I I e )

50

【化 5 0 2】



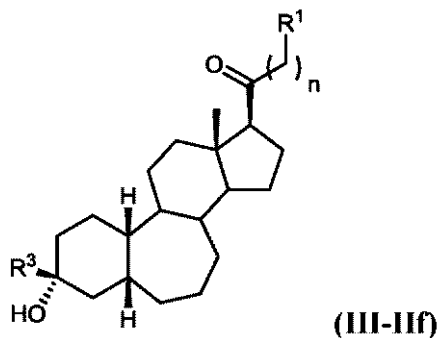
10

の化合物である、上記項 3 3 3 ~ 3 4 2 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 3 4 7)

前記化合物が、式 (III-II f)

【化 5 0 3】



20

の化合物であり、

ここで、 $R^1$  は、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または  $-S(=O)_2OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{A1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

30

40

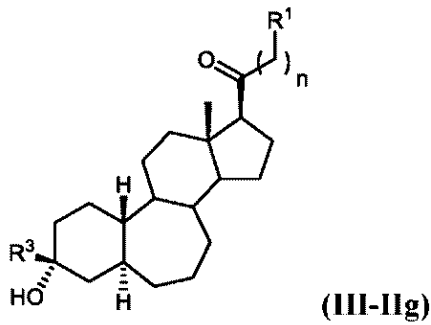
$n$  は、0、1、2、または 3 である、上記項 3 3 3 ~ 3 4 2 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 3 4 8)

50

前記化合物が、式 (III-Ilg)

【化 504】



10

の化合物であり、

ここで、 $R^1$  は、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または  $-S(=O)_2OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{A1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

20

30

$n$  は、0、1、2、または 3 である、上記項 333 ~ 342 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

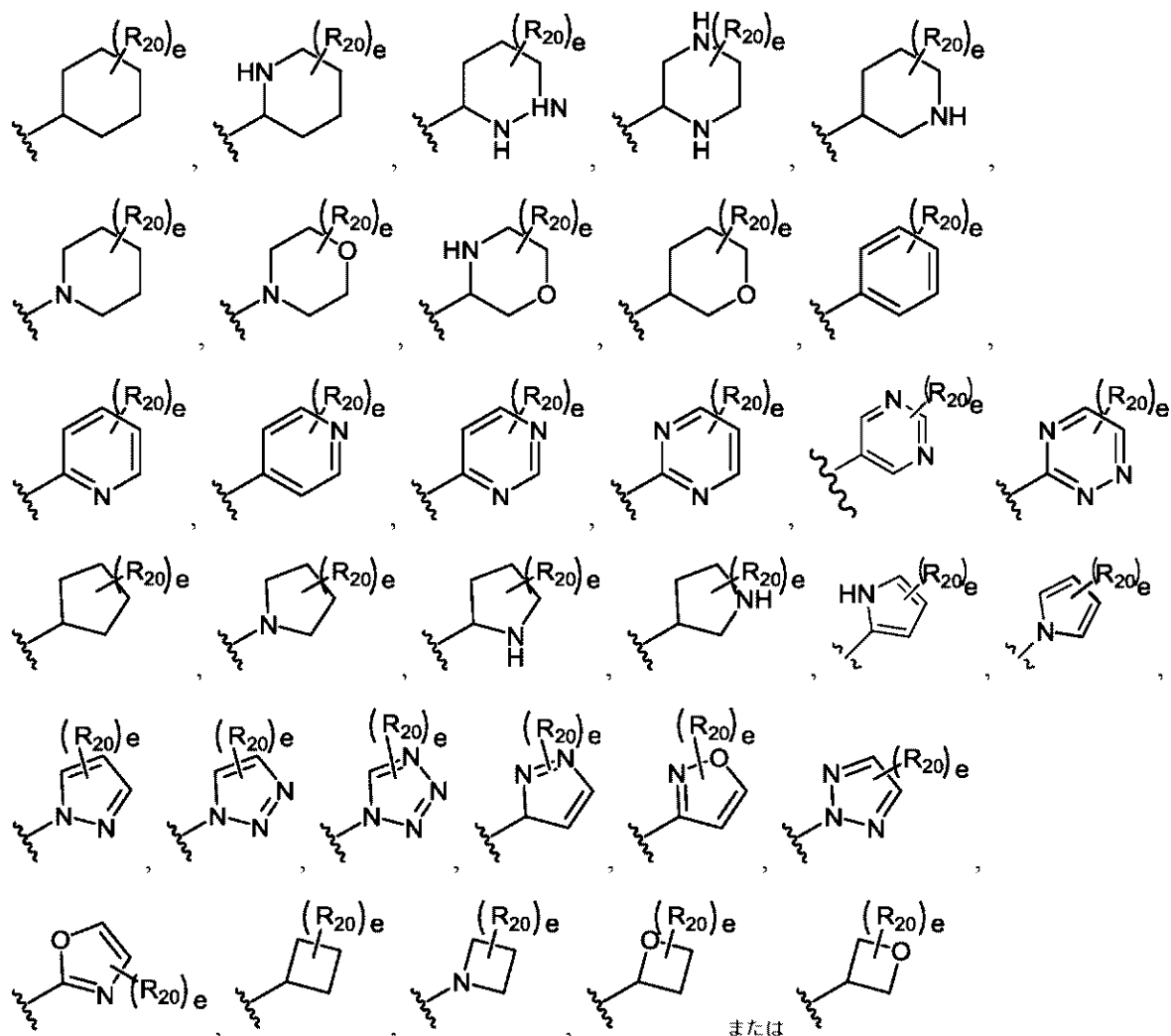
(項 349)

$R^1$  が、

40

50

## 【化 5 0 5】



10

20

30

40

であり、

ここで  $R_{20}$  の各々の存在は独立して、ハロゲン、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OS}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、または  $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ ；置換もしくは非置換  $\text{C}_{1\sim 6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $\text{C}_{2\sim 6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_{2\sim 6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_{3\sim 4}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3～4 員ヘテロシクリルであるか、または必要に応じて 2 つの  $\text{R}^{\text{GA}}$  が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の 3～4 員炭素環または複素環式環を形成し；

ここで  $\text{R}^{\text{GA}}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $\text{C}_{1\sim 6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $\text{C}_{2\sim 6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_{2\sim 6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_{3\sim 6}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3～6 員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $\text{R}^{\text{GA}}$  が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の炭素環または複素環式環を形成し；

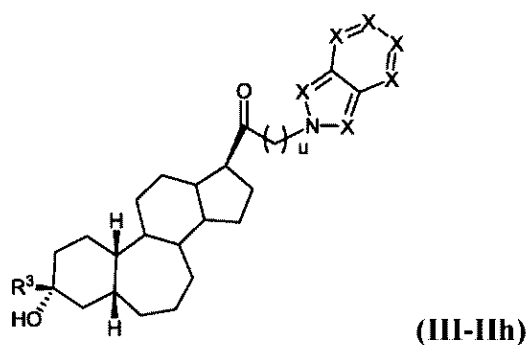
$e$  は、0、1、2、3、4、または 5 である、上記項 347 または 348 に記載の化合物。

(項 350)

50

前記化合物が、式 (III-Ih) - (III-Ih)

【化506】



10

の化合物であり、

ここで、 $u$  は、0、1、または2であり、各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

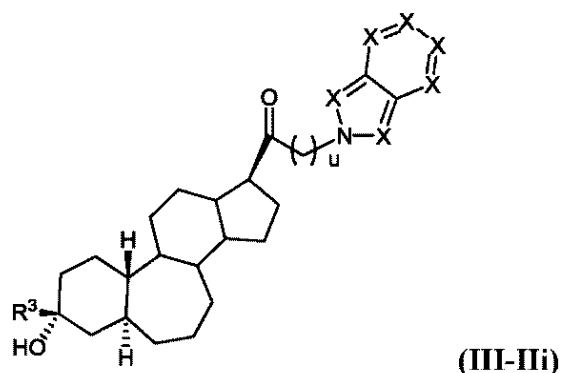
$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項294に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

20

(項351)

前記化合物が、式 (III-Ii) - (III-Ii)

【化507】



30

の化合物であり、

ここで、 $u$  は、0、1、または2であり、各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸

40

50

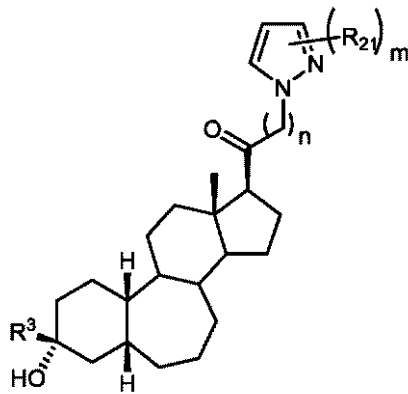


素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{GA}$ 基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項294に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項352)

前記化合物が、式(III-Ij)

【化508】



10

の化合物であり、

ここで、mは、0、1、2、または3であり；

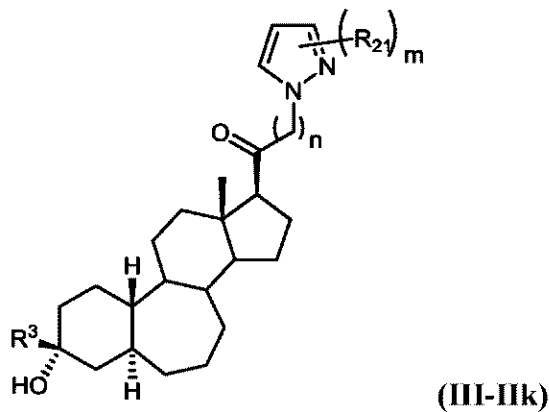
nは、0、1、または2であり；

各 $R^{21}$ は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項347に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項353)

前記化合物が、式(III-Ik)

【化509】



30

の化合物であり、

ここで、mは、0、1、2、または3であり；nは、0、1、2、または3であり；

各 $R^{21}$ は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項348に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項354)

$R^{21}$ が、-CNである、上記項352または353に記載の化合物。

(項355)

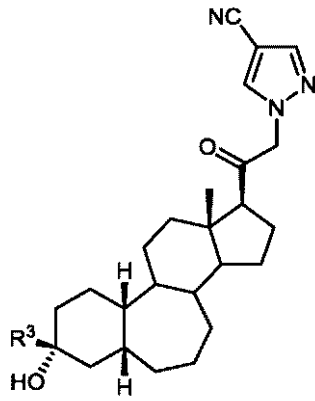
mが1であり、nが1である、上記項352～354のいずれか1項に記載の化合物。

(項356)

前記化合物が、式(III-IL)

50

【化 5 1 0】



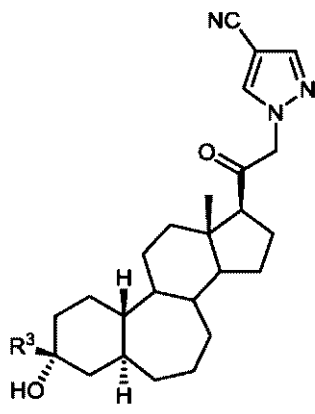
10

の化合物である、上記項 3 4 7 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 3 5 7)

前記化合物が、式 (III-II m)

【化 5 1 1】



20

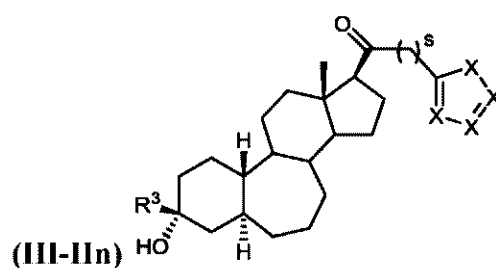
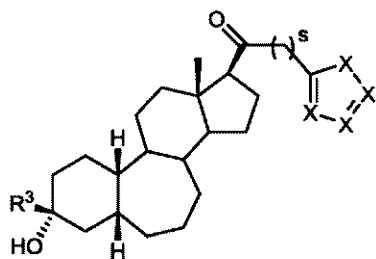
の化合物である、上記項 3 4 8 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩

30

(項 3 5 8)

前記化合物が、式 (III-II n) または式 (III-II o)

【化 5 1 2】



40

の化合物であり、

ここで、 $s$  は、0、1、または2であり；各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルキニル、置換もしくは

50

は非置換 C<sub>3</sub> ~ 6 カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ~ 6 員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの R<sup>G A</sup> 基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項 294 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

( 項 3 5 9 )

R<sup>3</sup>が、置換もしくは非置換アルキルである、上記項333～358のいずれか1項に記載の化合物。

( 項 3 6 0 )

R<sup>3</sup> が、非置換アルキルである、上記項 3 3 3 ~ 3 5 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 3 6 1 )

R<sup>3</sup> が、 -CH<sub>3</sub>である、上記項 333 ~ 360 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 3 6 2 )

上記項 294 ~ 361 のいずれか 1 項に記載の化合物および薬学的に受容可能な添加剤を含む薬学的組成物。

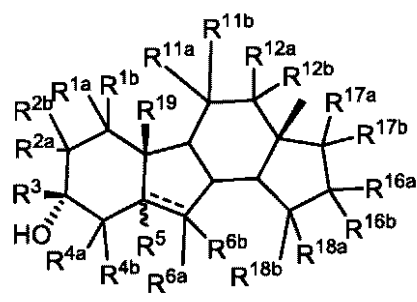
( 項 3 6 3 )

R<sup>16a</sup>およびR<sup>16b</sup>またはR<sup>17a</sup>およびR<sup>17b</sup>が、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カルボシクリル、置換もしくは非置換アリールである、上記項302に記載の化合物。

( 項 3 6 4 )

C N S 関連障害の処置を必要とする被験体において C N S 関連障害を処置する方法であって、前記被験体に式 ( I V - I ) :

【化 5 1 3】



(IV-1)

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩を投与する工程を含み、式 (I V - I) において、

R<sup>5</sup> は、水素または置換もしくは非置換メチルであるか、または

【化 5 1 4】

が二重結合である場合、 $R^5$  は存在せず；

R<sup>3</sup> 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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

R<sup>19</sup> 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<sup>6a</sup> および R<sup>6b</sup> の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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か、または R<sup>6a</sup> および R<sup>6b</sup> が一緒になってオキソ (= O) 基を形成し

$$R^{1a}, R^{1b}, R^{12a}, R^{12b}, R^{2a}, R^{2b}, R^{4a}, R^{4b}, R^{11a}, R^{11b}$$

$1^b$ 、 $R^{18a}$ 、および $R^{18b}$ の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{D1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成するか；または $R^{1a}$ および $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$ および $R^{12b}$ 、 $R^{2a}$ および $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$ および $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$ および $R^{11b}$ 、ならびに $R^{18a}$ および $R^{18b}$ のいずれか1つが一緒になってオキソ( $=O$ )基を形成し；

10

$R^{16a}$ 、 $R^{16b}$ 、 $R^{17a}$ 、および $R^{17b}$ の各々は、各々独立して、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、 $-SO_2R^{A2}$ 、 $-C(O)R^{A2}$ であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

20

30

ここで、

【化515】

は、単結合または二重結合を表し、二重結合が存在する場合、 $R^5$ および $R^{6a}$ または $R^{6b}$ の一方は存在しない、方法。

40

(項365)

前記CNS関連障害が、睡眠障害、気分障害、統合失調症スペクトラム障害、痙攣障害、記憶および/もしくは認知の障害、運動障害、人格障害、自閉症スペクトラム障害、疼痛、外傷性脳損傷、脈管疾患、物質乱用障害および/もしくは離脱症候群、耳鳴、またはてんかん発作重積状態である、上記項364に記載の方法。

(項366)

前記CNS関連障害が、産後うつである、上記項364または365に記載の方法。

(項367)

前記CNS関連障害が、大うつ病性障害である、上記項364～366のいずれか1項に記載の方法。

(項368)

50

前記 C N S 関連障害に、長期投与されるかまたは急性に投与される、上記項 3 6 4 ~ 3 6 7 のいずれか 1 項に記載の方法。

(項 3 6 9)

前記 C N S 関連障害に、経口投与、静脈内投与、経皮投与、鼻腔内投与、または皮下投与される、上記項 3 6 4 ~ 3 6 8 のいずれか 1 項に記載の方法。

(項 3 7 0)

前記 C N S 関連障害に経口投与される、上記項 3 6 4 ~ 3 6 9 のいずれか 1 項に記載の方法。

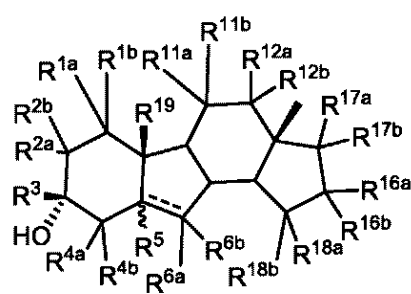
(項 3 7 1)

前記 C N S 関連障害に静脈内投与される、上記項 3 6 4 ~ 3 7 0 のいずれか 1 項に記載の方法。 10

(項 3 7 2)

式 (I V - I) :

【化 5 1 6】



(IV-I)

20

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であって、

式 (I V - I) において、

$R^5$  は、水素または置換もしくは非置換メチルであるか、または

【化 5 1 7】

-----

が二重結合である場合、 $R^5$  は存在せず；

30

$R^3$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$R^{19}$  は、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；

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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か、または  $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が一緒になってオキソ (= O) 基を形成し；

$R^{1a}$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$ 、 $R^{12b}$ 、 $R^{2a}$ 、 $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$ 、 $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$ 、 $R^{11b}$ 、 $R^{18a}$ 、および  $R^{18b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{D1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成するか；または  $R^{1a}$  および  $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$  および  $R^{12b}$ 、 $R^{2a}$  およ 40 50

び  $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$  および  $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$  および  $R^{11b}$ 、ならびに  $R^{18a}$  および  $R^{18b}$  のいずれか 1 つが一緒になってオキソ (=O) 基を形成し；

$R^{16a}$ 、 $R^{16b}$ 、 $R^{17a}$ 、および  $R^{17b}$  の各々は、各々独立して、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または  $-S(=O)_2OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、 $-SO_2R^{A2}$ 、 $-C(O)R^{A2}$  であるか、または 2 つの  $R^{A1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

ここで、

【化 5 1 8】

-----

は、単結合または二重結合を表し、二重結合が存在する場合、 $R^5$  および  $R^{6a}$  または  $R^{6b}$  の一方は存在しない、化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 3 7 3)

$R^{2a}$  および  $R^{2b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 3 7 2 に記載の化合物。

(項 3 7 4)

$R^{4a}$  および  $R^{4b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 3 7 2 または 3 7 3 に記載の化合物。

(項 3 7 5)

$R^{11a}$  および  $R^{11b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロ

10

20

30

40

50

シクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 372 ~ 374 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 376)

$R^{16a}$ および $R^{16b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 372 ~ 375 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 377)

$R^{6a}$ および $R^{6b}$ が独立して、水素、ハロゲン、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、上記項 372 ~ 376 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 378)

$R^{12a}$ および $R^{12b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 372 ~ 377 のいずれか 1 項に記載の化合物。

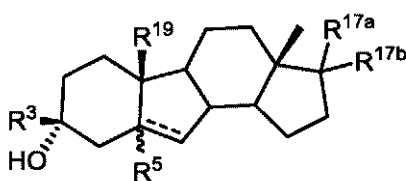
(項 379)

$R^{17a}$ および $R^{17b}$ が、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、または $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 372 ~ 378 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 380)

前記化合物が、式 (IV - Ia)

【化 519】

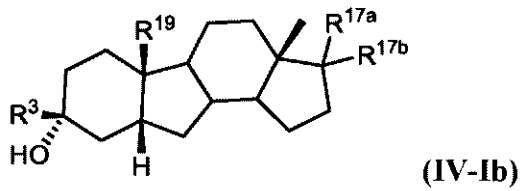


(IV-Ia)

の化合物である、上記項 372 ~ 379 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

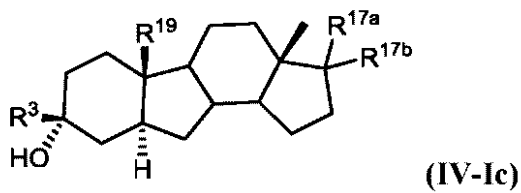
(項 381)

前記化合物が、式 ( I V - I b )  
【化 5 2 0】



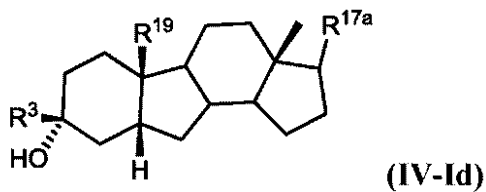
の化合物である、上記項 3 7 2 ~ 3 8 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。  
( 項 3 8 2 )

前記化合物が、式 ( I V - I c )  
【化 5 2 1】



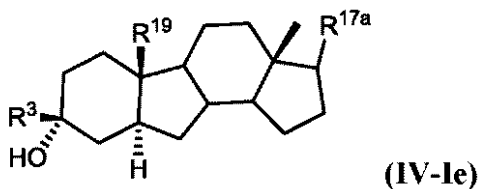
の化合物である、上記項 3 7 2 ~ 3 8 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。  
( 項 3 8 3 )

前記化合物が、式 ( I V - I d )  
【化 5 2 2】



の化合物である、上記項 3 7 2 ~ 3 8 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。  
( 項 3 8 4 )

前記化合物が、式 ( I V - I e )  
【化 5 2 3】



の化合物である、上記項 3 7 2 ~ 3 8 0 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。  
( 項 3 8 5 )

前記化合物が、式 ( I V - I f )

10

20

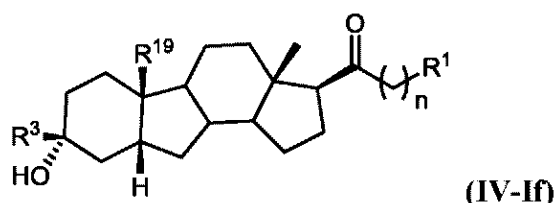
30

40

50



## 【化 5 2 4】



の化合物であり、

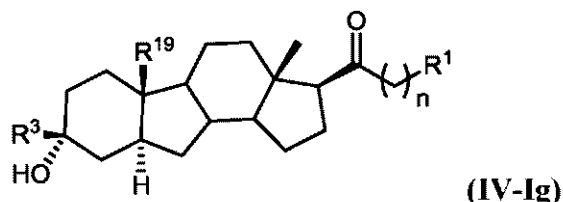
ここで、 $R^1$  は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$n$  は、0、1、2、または3である、上記項 372 ~ 380 のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 386)

前記化合物が、式 (IV - I g)

## 【化 5 2 5】



の化合物であり、

ここで、 $R^1$  は、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$A^2$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

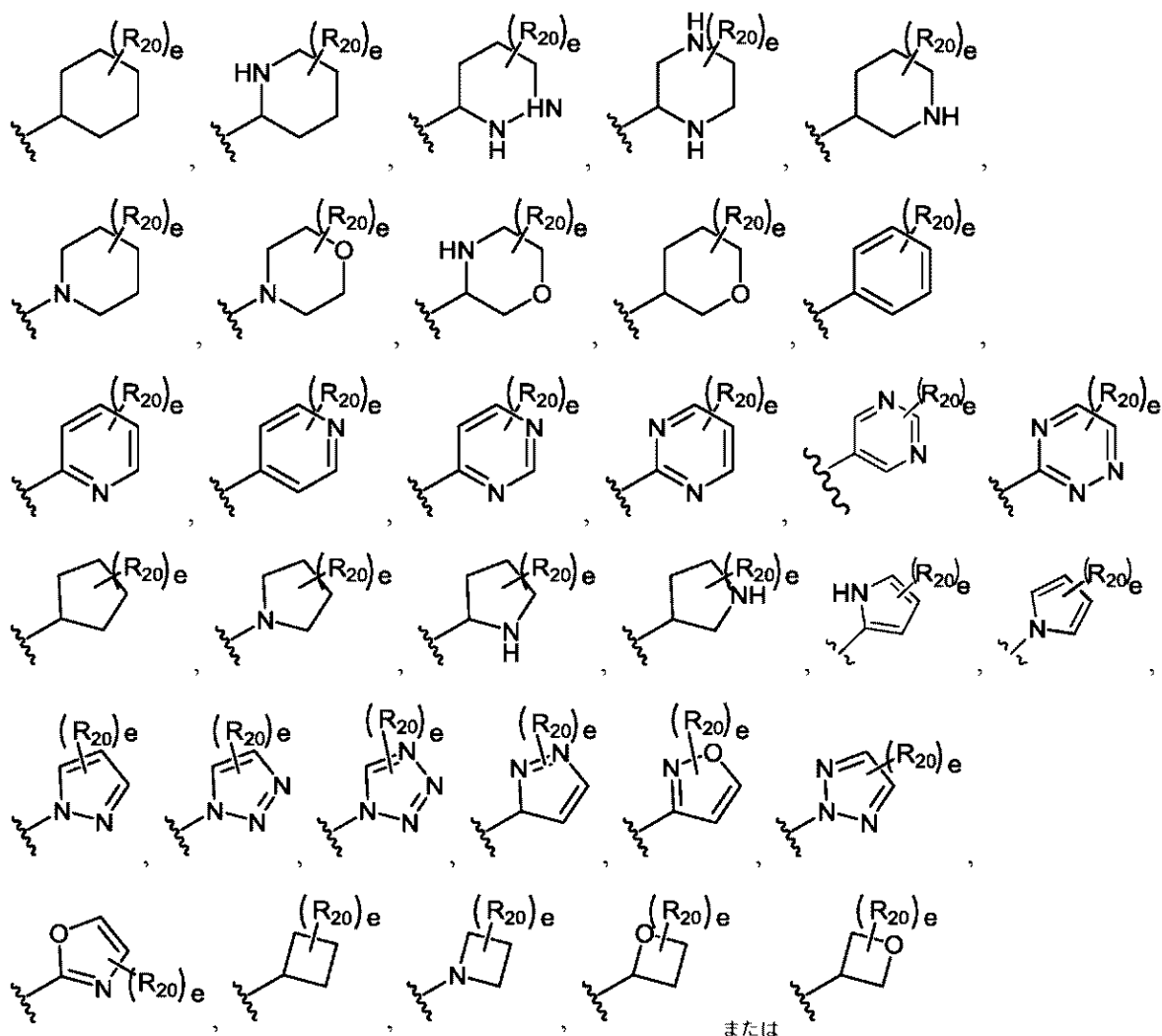
10

$n$ は、0、1、2、または3である、上記項372～380のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項387)

$R^1$ が、

【化526】



20

30

40

であり、

ここで $R_{20}$ の各々の存在は独立して、ハロゲン、 $-NO_2$ 、 $-CN$ 、 $-OR^{GA}$ 、 $-N(R^{GA})_2$ 、 $-C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-OC(=O)R^{GA}$ 、 $-OC(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-N(R^{GA})C(=O)R^{GA}$ 、 $-OC(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-N(R^{GA})C(=O)OR^{GA}$ 、 $-S(=O)_2R^G$

50

$A$ 、 $-S(=O)_2OR^{GA}$ 、 $-OS(=O)_2R^{GA}$ 、 $-S(=O)_2N(R^G A)_2$ 、または $-N(R^{GA})S(=O)_2R^{GA}$ ；置換もしくは非置換 $C_1 \sim 6$ アルキル、置換もしくは非置換 $C_2 \sim 6$ アルケニル、置換もしくは非置換 $C_2 \sim 6$ アルキニル、置換もしくは非置換 $C_3 \sim 4$ カルボシクリル、置換もしくは非置換の $3 \sim 4$ 員ヘテロシクリルであるか、または必要に応じて2つの $R^{GA}$ が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の $3 \sim 4$ 員炭素環または複素環式環を形成し；

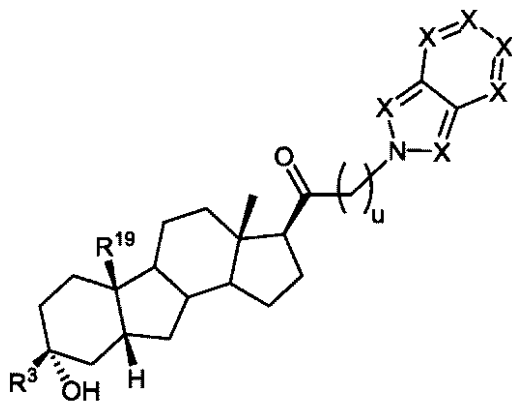
ここで $R^{GA}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換 $C_1 \sim 6$ アルキル、置換もしくは非置換 $C_2 \sim 6$ アルケニル、置換もしくは非置換 $C_2 \sim 6$ アルキニル、置換もしくは非置換 $C_3 \sim 6$ カルボシクリル、置換もしくは非置換の $3 \sim 6$ 員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{GA}$ 基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の炭素環または複素環式環を形成し；

$e$  は、0、1、2、3、4、または5である、上記項385または386に記載の化合物。

(項388)

前記化合物が、式(IV-Ih)

【化527】



(IV-Ih)

の化合物であり、

ここで、 $u$  は、0、1、または2であり、各 $X$ は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または $N(R^N)-$ であり、ここで $R^N$ は独立して、水素、置換もしくは非置換 $C_1 \sim 6$ アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$ であり；

$R^{GA}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換 $C_1 \sim 6$ アルキル、置換もしくは非置換 $C_2 \sim 6$ アルケニル、置換もしくは非置換 $C_2 \sim 6$ アルキニル、置換もしくは非置換 $C_3 \sim 6$ カルボシクリル、置換もしくは非置換の $3 \sim 6$ 員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{GA}$ 基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項364に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項389)

前記化合物が、式(IV-Ii)

10

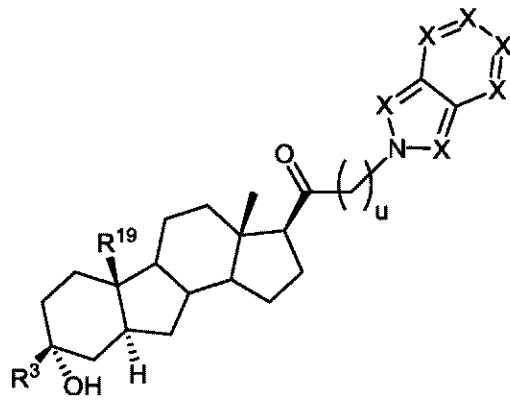
20

30

40

50

【化 5 2 8】



10

の化合物であり、

ここで、 $u$ は、0、1、または2であり、各 $X$ は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または $N(R^N)-$ であり、ここで $R^N$ は独立して、水素、置換もしくは非置換 $C_1 \sim 6$ アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$ であり；

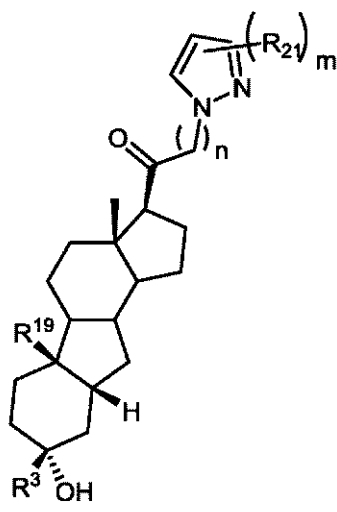
$R^{GA}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換 $C_1 \sim 6$ アルキル、置換もしくは非置換 $C_2 \sim 6$ アルケニル、置換もしくは非置換 $C_2 \sim 6$ アルキニル、置換もしくは非置換 $C_3 \sim 6$ カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{GA}$ 基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項364に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

20

(項390)

前記化合物が、式(IV-Ij)

【化 5 2 9】



30

40

の化合物であり、

ここで、 $m$ は、0、1、2、または3であり；

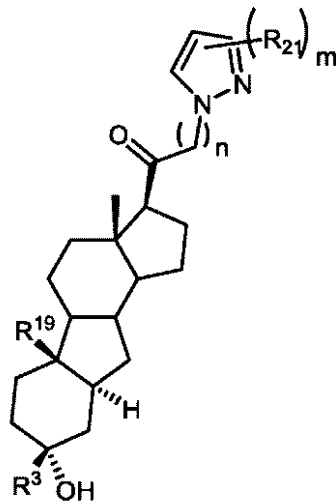
各 $R^{21}$ は独立して、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項385に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項391)

前記化合物が、式(IV-Ik)

50

【化 5 3 0】



(IV-1k)

10

の化合物であり、

ここで、 $m$ は、0、1、2、または3であり；

各  $R^{21}$  は独立して、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項 3 8 6 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

20

(項 3 9 2)

$R^{21}$  が、 $-CN$ である、上記項 3 9 0 または 3 9 1 に記載の化合物。

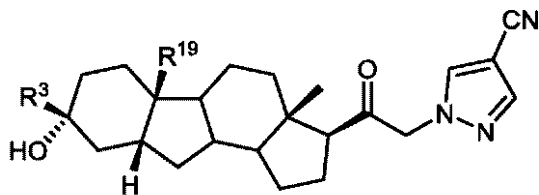
(項 3 9 3)

$m$ が1であり、 $n$ が1である、上記項 3 9 0 ~ 3 9 2 のいずれか1項に記載の化合物。

(項 3 9 4)

前記化合物が、式 (IV - I L)

【化 5 3 1】



(IV-1L)

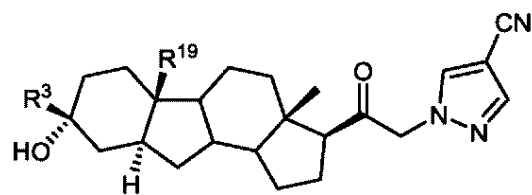
30

の化合物である、上記項 3 8 5 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 3 9 5)

前記化合物が、式 (IV - I m)

【化 5 3 2】



(IV-1m)

40

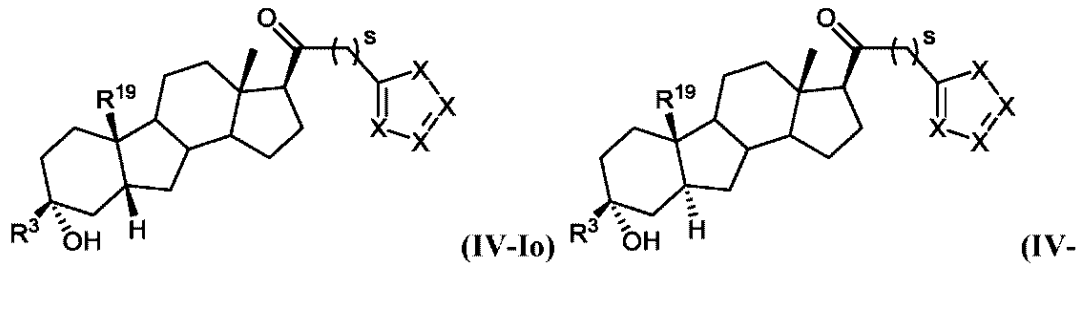
の化合物である、上記項 3 8 6 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 3 9 6)

前記化合物が、式 (IV - I n) または式 (IV - I o)

50

【化 5 3 3】



10

の化合物であり、

ここで、 $s$  は、0、1、または2であり；各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項364に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

20

(項397)

$R^3$  が、置換もしくは非置換アルキルである、上記項372～396のいずれか1項に記載の化合物。

(項398)

$R^3$  が、非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキルである、上記項372～397のいずれか1項に記載の化合物。

30

(項399)

$R^3$  が、 $-CH_3$  である、上記項372～398のいずれか1項に記載の化合物。

(項400)

$R^{19}$  が、置換もしくは非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim C_6$  アルケニル、または置換もしくは非置換  $C_2 \sim C_6$  アルキニルである、上記項372～399のいずれか1項に記載の化合物。

(項401)

$R^{19}$  が、非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキルである、上記項372～400のいずれか1項に記載の化合物。

(項402)

40

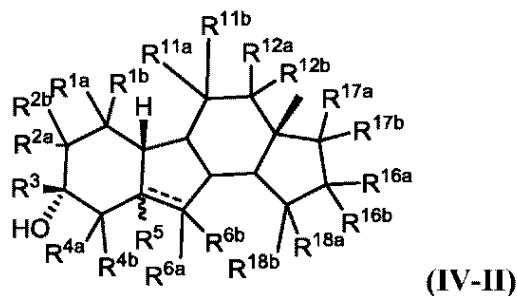
$R^{19}$  が、 $-CH_3$  である、上記項372～401のいずれか1項に記載の化合物。

(項403)

式(IV-II)：

50

【化 5 3 4】



10

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であって、  
式 (IV - II) において、

$R^5$  は、水素または置換もしくは非置換メチルであるか、または

【化 5 3 5】

-----

が二重結合である場合、 $R^5$  は存在せず；

$R^3$  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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールで

20

あり；  
 $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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か、または  $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が一緒になってオキソ (= O) 基を形成し

；  
 $R^{1a}$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$ 、 $R^{12b}$ 、 $R^{2a}$ 、 $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$ 、 $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$ 、 $R^{11b}$ 、 $R^{18a}$ 、および  $R^{18b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{D1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成するか；または  $R^{1a}$  および  $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$  および  $R^{12b}$ 、 $R^{2a}$  および  $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$  および  $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$  および  $R^{11b}$ 、ならびに  $R^{18a}$  および  $R^{18b}$  のいずれか 1 つが一緒になってオキソ (= O) 基を形成し；

30

$R^{16a}$ 、 $R^{16b}$ 、 $R^{17a}$ 、および  $R^{17b}$  の各々は、各々独立して、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または  $-S(=O)_2OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換も

40

50

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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、 $-SO_2R^{A2}$ 、 $-C(O)R^{A2}$ であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

ここで、

【化536】

10

-----

は、単結合または二重結合を表し、二重結合が存在する場合、 $R^5$ および $R^{6a}$ または $R^{6b}$ の一方は存在しない、化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項404)

$R^{2a}$ および $R^{2b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項403に記載の化合物。

20

(項405)

$R^{4a}$ および $R^{4b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項403または404に記載の化合物。

30

(項406)

$R^{11a}$ および $R^{11b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであるか、または $R^{11a}$ および $R^{11b}$ が一緒になってオキソ基を形成する、上記項403～405のいずれか1項に記載の化合物。

40

(項407)

$R^{16a}$ および $R^{16b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換も

50



くは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 4 0 3 ~ 4 0 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 0 8)

$R^{7a}$ 、 $R^{7b}$ 、 $R^{7aa}$ 、および  $R^{7bb}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであるか、または  $R^{7a}$  および  $R^{7b}$  または  $R^{7aa}$  および  $R^{7bb}$  のいずれかが一緒になってオキソ ( $=O$ ) を形成する、上記項 4 0 3 ~ 4 0 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項 4 0 9)

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が独立して、水素、ハロゲン、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、上記項 4 0 3 ~ 4 0 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 1 0)

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 4 0 3 ~ 4 0 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 4 1 1)

$R^{17a}$  および  $R^{17b}$  が、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、 $-ORA^1$ 、 $-SRA^1$ 、 $-N(RA^1)_2$ 、 $-N(RA^1)$ 、 $-CN(RA^1)_2$ 、 $-C(O)RA^1$ 、 $-OC(=O)RA^1$ 、 $-OC(=O)ORA^1$ 、 $-OC(=O)SRA^1$ 、または  $-OC(=O)N(RA^1)_2$  であり、ここで  $RA^1$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 4 0 3 ~ 4 1 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

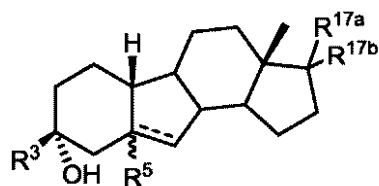
30

(項 4 1 2)

前記化合物が、式 (IV - II a)

【化 5 3 7】

40



(IV-IIa)

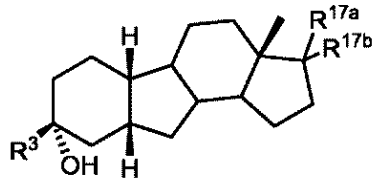
の化合物である、上記項 4 0 3 ~ 4 1 1 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 4 1 3)

前記化合物が、式 (IV - II b)

50

【化 5 3 8】



(IV-IIb)

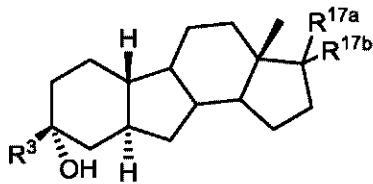
の化合物である、上記項 4 0 3 ~ 4 1 2 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

10

(項 4 1 4)

前記化合物が、式 ( I V - I I c )

【化 5 3 9】



(IV-IIc)

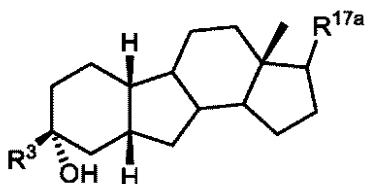
の化合物である、上記項 4 0 3 ~ 4 1 2 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

20

(項 4 1 5)

前記化合物が、式 ( I V - I I d )

【化 5 4 0】



(IV-IId)

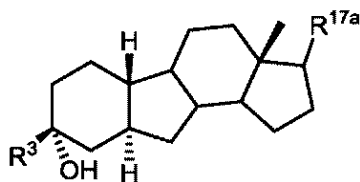
30

の化合物である、上記項 4 0 3 ~ 4 1 2 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 4 1 6)

前記化合物が、式 ( I V - I I e )

【化 5 4 1】



(IV-IIe)

40

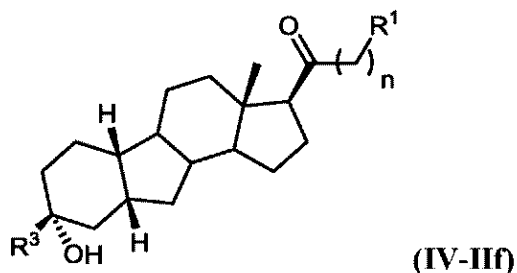
の化合物である、上記項 4 0 3 ~ 4 1 2 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 4 1 7)

前記化合物が、式 ( I V - I I f )

50

## 【化 5 4 2】



の化合物であり、

10

ここで、 $R^1$ は、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

20

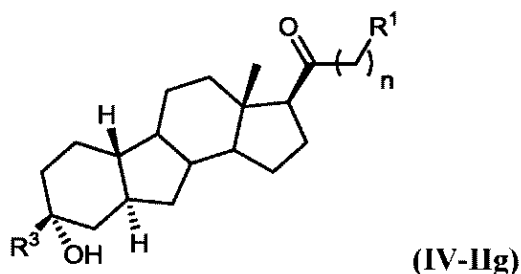
$n$ は、0、1、2、または3である、上記項403～412のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

30

(項418)

前記化合物が、式(IV-II g)

## 【化 5 4 3】



40

の化合物であり、

ここで、 $R^1$ は、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N$

50

( $R^{A1}$ )<sub>2</sub>、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

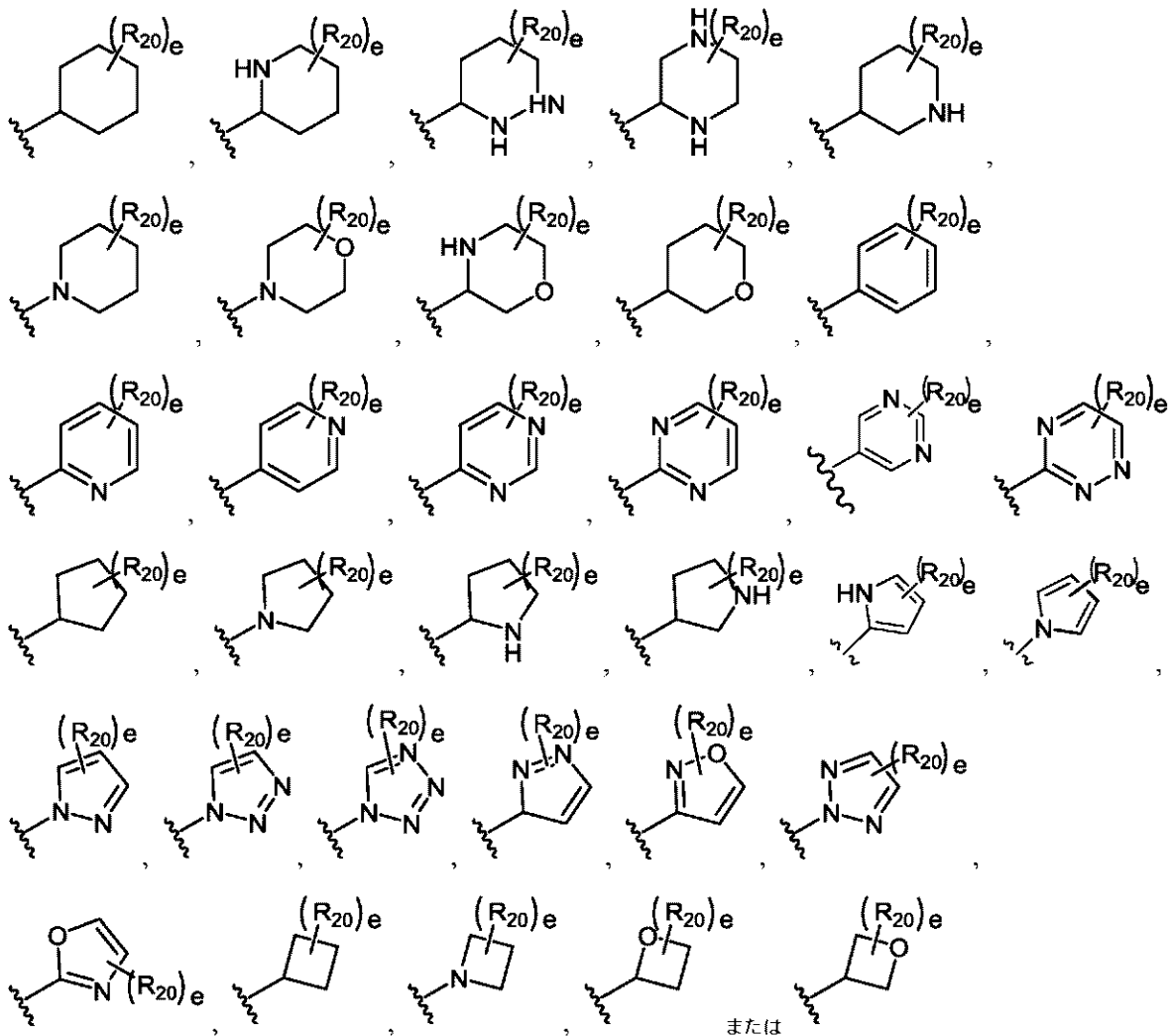
10

$n$ は、0、1、2、または3である、上記項403～412のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項419)

$R^1$ が、

【化544】



20

30

40

であり、

ここで $R_{20}$ の各々の存在は独立して、ハロゲン、 $-NO_2$ 、 $-CN$ 、 $-OR^{GA}$ 、 $-N(R^{GA})_2$ 、 $-C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-OC(=O)R^{GA}$ 、-

50

$\text{OC}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、  
 $-\text{OC}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、  
 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OS}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、  
 または  $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ ；置換もしくは非置換  $\text{C}_1 \sim 6$  アルキル、置換  
 もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしく  
 は非置換  $\text{C}_3 \sim 4$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ～ 4 員ヘテロシクリルである  
 か、または必要に応じて 2 つの  $\text{R}^{\text{GA}}$  が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の  
 3 ～ 4 員炭素環または複素環式環を形成し；

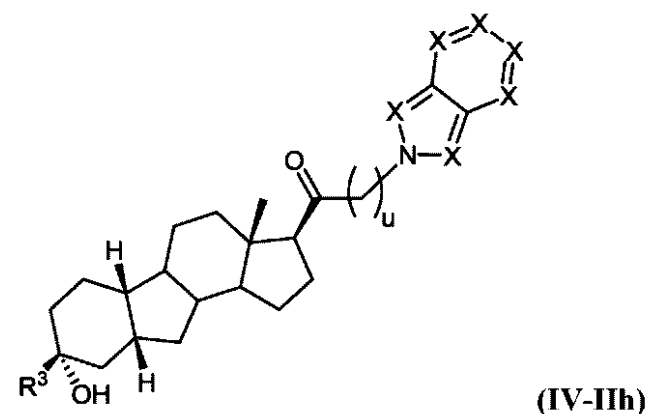
ここで  $\text{R}^{\text{GA}}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $\text{C}_1 \sim 6$  アルキル、  
 置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルキニル、置換  
 もしくは非置換  $\text{C}_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ～ 6 員ヘテロシクリル  
 、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場  
 合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $\text{R}^{\text{GA}}$  基が介  
 在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の炭素環または複素環式環を形成し；

$e$  は、0、1、2、3、4、または 5 である、上記項 4 1 7 または 4 1 8 に記載の化合  
 物。

(項 4 2 0)

前記化合物が、式 (IV - IIh)

【化 5 4 5】



の化合物であり、

ここで、 $u$  は、0、1、または 2 であり、各  $X$  は独立して、 $-\text{C}(\text{R}^{\text{N}})-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^{\text{N}})_2-$ 、  
 $-\text{S}-$ 、 $-\text{N}-$ 、または  $\text{N}(\text{R}^{\text{N}})-$  であり、ここで  $\text{R}^{\text{N}}$  は独立して、水素、  
 置換もしくは非置換  $\text{C}_1 \sim 6$  アルキル、 $\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、  
 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、または  $-\text{S}(=\text{O})_2\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$  であり；

$\text{R}^{\text{GA}}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $\text{C}_1 \sim 6$  アルキル、置換も  
 しくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしく  
 は非置換  $\text{C}_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ～ 6 員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸  
 素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $\text{R}^{\text{GA}}$  基が介在原子  
 と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成  
 する、上記項 3 6 4 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 4 2 1)

前記化合物が、式 (IV - IIi)

10

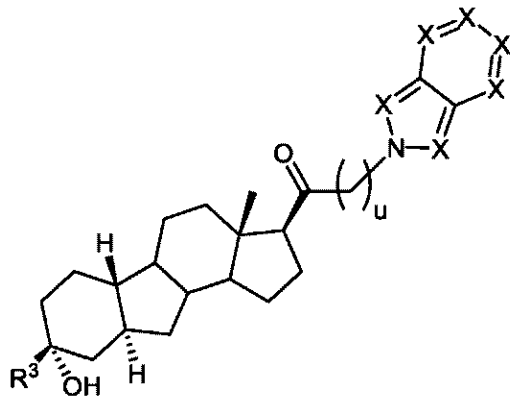
20

30

40

50

【化 5 4 6】



10

の化合物であり、

ここで、 $u$ は、0、1、または2であり、各 $X$ は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または $N(R^N)-$ であり、ここで $R^N$ は独立して、水素、置換もしくは非置換 $C_1 \sim 6$ アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$ であり；

$R^{GA}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換 $C_1 \sim 6$ アルキル、置換もしくは非置換 $C_2 \sim 6$ アルケニル、置換もしくは非置換 $C_2 \sim 6$ アルキニル、置換もしくは非置換 $C_3 \sim 6$ カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{GA}$ 基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項364に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

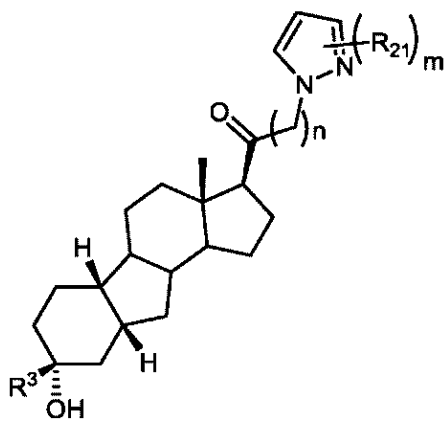
20

(項422)

前記化合物が、式(IV-IIj)

【化 5 4 7】

30



40

の化合物であり、

ここで、 $m$ は、0、1、2、または3であり；

$n$ は、0、1、2、または3であり；

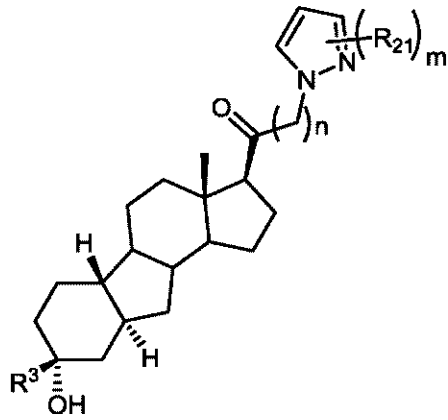
各 $R^{21}$ は独立して、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項417に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項423)

前記化合物が、式(IV-IIk)

50

【化 5 4 8】



10

の化合物であり、

ここで、 $m$ は、0、1、2、または3であり；

$n$ は、0、1、2、または3であり；

各  $R^{21}$  は独立して、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項 4 1 8 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

20

(項 4 2 4)

$R^{21}$  が、 $-CN$  である、上記項 4 2 2 または 4 2 3 に記載の化合物。

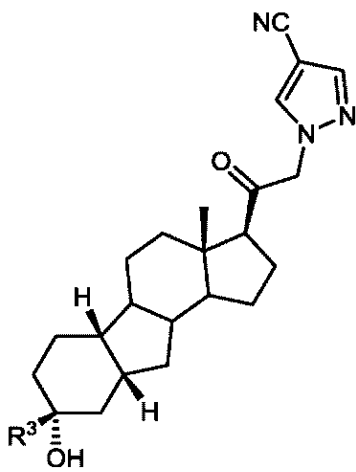
(項 4 2 5)

$m$  が 1 であり、 $n$  が 1 である、上記項 4 2 2 ~ 4 2 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 2 6)

前記化合物が、式 (IV - III L)

【化 5 4 9】



30

40

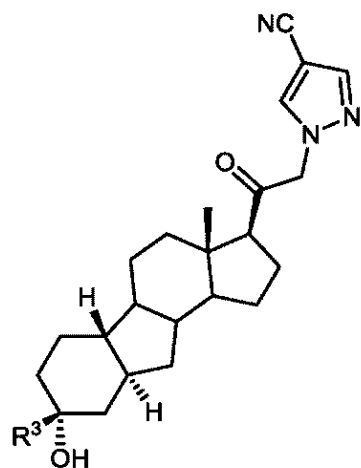
の化合物である、上記項 4 2 2 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 4 2 7)

前記化合物が、式 (IV - III m)

50

【化 5 5 0】



(IV-IIm)

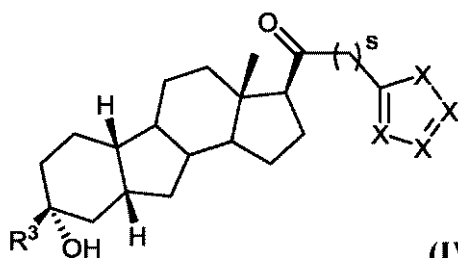
10

の化合物である、上記項 4 2 3 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

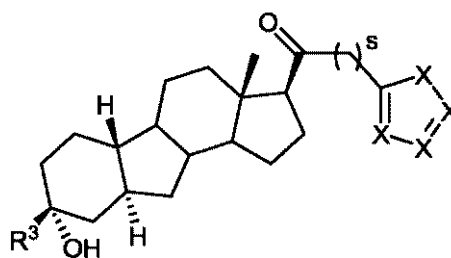
(項 4 2 8)

前記化合物が、式 (IV - II n) または式 (IV - II o)

【化 5 5 1】



(IV-II n) または



(IV-II o)

20

の化合物であり、

ここで、s は、0、1、または 2 であり；各 X は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

30

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_{3-6}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ~ 6 員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項 3 6 4 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

40

(項 4 2 9)

$R^3$  が、置換もしくは非置換アルキルである、上記項 4 0 3 ~ 4 2 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 3 0)

$R^3$  が、非置換  $C_{1-6}$  アルキルである、上記項 4 0 3 ~ 4 2 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 3 1)

$R^3$  が、 $-CH_3$  である、上記項 4 0 3 ~ 4 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

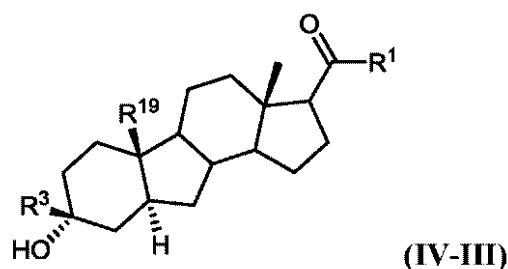
(項 4 3 2)

50



式 (IV - III) :

【化 5 5 2】



10

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であって、  
式 (IV - III) において、

$R^1$  は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換シクロアルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または  $-S(=O)_2OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{A1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

20

30

$R^3$  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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$R^{19}$  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ルケニル、置換もしくは非置換アルキニルである、  
化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 4 3 3)

$R^1$  が、置換もしくは非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキルである、上記項 4 3 2 に記載の化合物。

40

(項 4 3 4)

$R^1$  が、 $-CH_3$  である、上記項 4 3 2 または 4 3 3 に記載の化合物。

(項 4 3 5)

$R^{19}$  が、置換もしくは非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim C_6$  アルケニル、または置換もしくは非置換  $C_2 \sim C_6$  アルキニルである、上記項 4 3 2 ~ 4 3 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 3 6)

$R^{19}$  が、非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキルである、上記項 4 3 2 ~ 4 3 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 3 7)

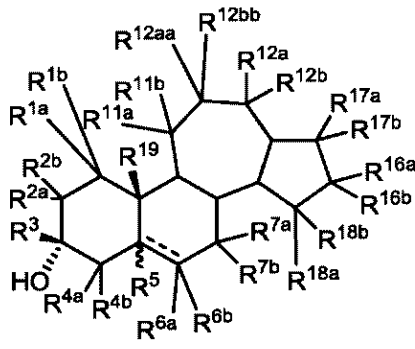
50

$R^3$  が、水素または非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキルである、上記項 4 2 3 ~ 4 2 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 4 3 8 )

C N S 関連障害の処置を必要とする被験体において C N S 関連障害を処置する方法であって、前記被験体に式 ( V - I ) :

【化 5 5 3】



(V-I)

10

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩を投与する工程を含み、式 ( V - I ) において、

$R^5$  は、水素または置換もしくは非置換メチルであるか、または

20

【化 5 5 4】

が二重結合である場合、 $R^5$  は存在せず；

$R^3$  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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$R^{19}$  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ルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルであり；

30

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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か、または  $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が一緒になってオキソ ( = O ) 基を形成し；

$R^{1a}$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$ 、 $R^{12b}$ 、 $R^{12aa}$ 、 $R^{12bb}$ 、 $R^{2a}$ 、 $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$ 、 $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$ 、 $R^{11b}$ 、 $R^{18a}$ 、および  $R^{18b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、- O R<sup>D1</sup>、- O C ( = O ) R<sup>D1</sup>、- N H<sub>2</sub>、- N ( R<sup>D1</sup> )<sub>2</sub>、または - N R<sup>D1</sup> C ( = O ) R<sup>D1</sup> であり、ここで R<sup>D1</sup> の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの R<sup>D1</sup> 基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成するか；または  $R^{1a}$  および  $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$  および  $R^{12b}$ 、 $R^{2a}$  および  $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$  および  $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$  および  $R^{11b}$ 、 $R^{12aa}$  および  $R^{12bb}$ 、ならびに  $R^{18a}$  および  $R^{18b}$  のいずれか 1 つが一緒になってオキソ ( = O ) 基を形成し；

40

$R^{7a}$  および  $R^{7b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシ

50

クリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{D1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成し；または $R^{7a}$ および $R^{7b}$ が一緒になってオキソ( $=O$ )基を形成し；

$R^{16a}$ 、 $R^{16b}$ 、 $R^{17a}$ 、および $R^{17b}$ の各々は、各々独立して、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、 $-SO_2R^{A2}$ 、 $-C(O)R^{A2}$ であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

ここで、

【化555】

は、単結合または二重結合を表し、二重結合が存在する場合、 $R^5$ および $R^{6a}$ または $R^{6b}$ の一方は存在しない、方法。

(項439)

前記CNS関連障害が、睡眠障害、気分障害、統合失調症スペクトラム障害、痙攣障害、記憶および/もしくは認知の障害、運動障害、人格障害、自閉症スペクトラム障害、疼痛、外傷性脳損傷、脈管疾患、物質乱用障害および/もしくは離脱症候群、耳鳴、またはてんかん発作重積状態である、上記項1に記載の方法。

(項440)

前記CNS関連障害が、産後うつである、上記項438または439に記載の方法。

(項441)

前記CNS関連障害が、大うつ病性障害である、上記項438～440のいずれか1項に記載の方法。

(項442)

前記CNS関連障害に、長期投与されるかまたは急性に投与される、上記項438～441のいずれか1項に記載の方法。

(項443)

前記CNS関連障害に、経口投与、静脈内投与、経皮投与、鼻腔内投与、または皮下投与

される、上記項 4 3 8 ~ 4 4 2 のいずれか 1 項に記載の方法。

(項 4 4 4)

前記 C N S 関連障害に経口投与される、上記項 4 3 8 ~ 4 4 3 のいずれか 1 項に記載の方法。

(項 4 4 5)

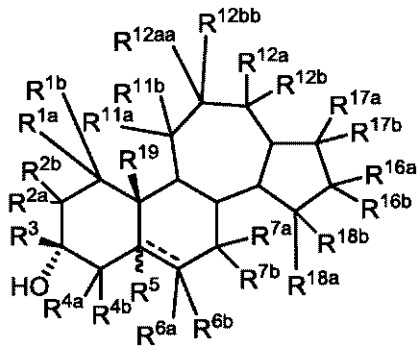
前記 C N S 関連障害に静脈内投与される、上記項 4 3 8 ~ 4 4 4 のいずれか 1 項に記載の方法。

(項 4 4 6)

式 (V - I) :

【化 5 5 6】

10



(V-I)

20

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であって、

式 (V - I) において、

$R^5$  は、水素または置換もしくは非置換メチルであるか、または

【化 5 5 7】

が二重結合である場合、 $R^5$  は存在せず；

$R^3$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

30

$R^{19}$  は、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；

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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か、または  $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が一緒になってオキソ (= O) 基を形成し；

$R^{1a}$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$ 、 $R^{12b}$ 、 $R^{12aa}$ 、 $R^{12bb}$ 、 $R^{2a}$ 、 $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$ 、 $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$ 、 $R^{11b}$ 、 $R^{18a}$ 、および  $R^{18b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{D1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成するか；または  $R^{1a}$  および  $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$  および  $R^{12b}$ 、 $R^{2a}$  および  $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$  および  $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$  および  $R^{11b}$ 、 $R^{12aa}$  および  $R^{12bb}$ 、ならびに  $R^{18a}$  および  $R^{18b}$  のいずれか 1 つと一緒に

40

50

なってオキソ (= O) 基を形成し ;

$R^{7a}$  および  $R^{7b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{D1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成し ; または  $R^{7a}$  および  $R^{7b}$  が一緒になってオキソ (= O) 基を形成し ;

10

$R^{16a}$ 、 $R^{16b}$ 、 $R^{17a}$ 、および  $R^{17b}$  の各々は、各々独立して、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または  $-S(=O)_2OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、 $-SO_2R^{A2}$ 、 $-C(O)R^{A2}$  であるか、または 2 つの  $R^{A1}$  基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し ;  $R^{A2}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり ;

20

30

ここで、

【化 5 5 8】

-----

は、単結合または二重結合を表し、二重結合が存在する場合、 $R^5$  および  $R^{6a}$  または  $R^{6b}$  の一方は存在しない、化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 4 4 7)

$R^{2a}$  および  $R^{2b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 4 4 6 に記載の化合物。

40

(項 4 4 8)

$R^{4a}$  および  $R^{4b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシク

50

リル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 4 4 6 または 4 4 7 に記載の化合物。

(項 4 4 9)

$R^{11a}$  および  $R^{11b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 4 4 6 ~ 4 4 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項 4 5 0)

$R^{16a}$  および  $R^{16b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 4 4 6 ~ 4 4 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 4 5 1)

$R^{7a}$  および  $R^{7b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 4 4 6 ~ 4 5 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

(項 4 5 2)

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が独立して、水素、ハロゲン、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、上記項 4 4 6 ~ 4 5 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 5 3)

$R^{12a}$ 、 $R^{12b}$ 、 $R^{12aa}$ 、および  $R^{12bb}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 4 4 6 ~ 4 5 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

(項 4 5 4)

$R^{17a}$  および  $R^{17b}$  が、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N$

50

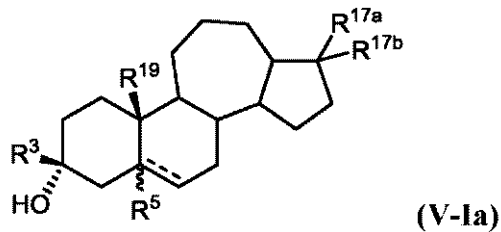
( $R^{A1}$ )、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、または $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 4 4 6 ~ 4 5 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 5 5)

前記化合物が、式 (V - I a)

【化 5 5 9】

10



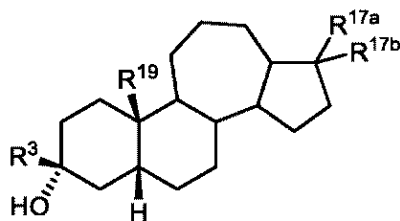
の化合物である、上記項 4 4 6 ~ 4 5 4 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

20

(項 4 5 6)

前記化合物が、式 (V - I b)

【化 5 6 0】



30

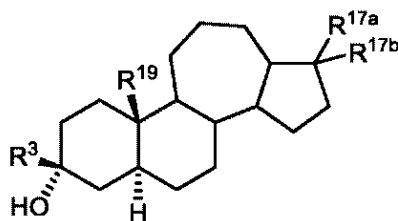
(V-Ib)

の化合物である、上記項 4 4 6 ~ 4 5 5 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 4 5 7)

前記化合物が、式 (V - I c)

【化 5 6 1】



40

(V-Ic)

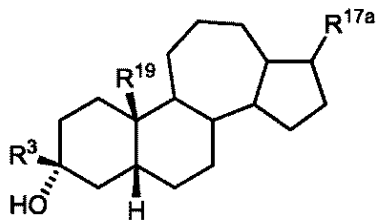
の化合物である、上記項 4 4 6 ~ 4 5 5 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

50

(項 4 5 8)

前記化合物が、式 (V - I d)

【化 5 6 2】



10

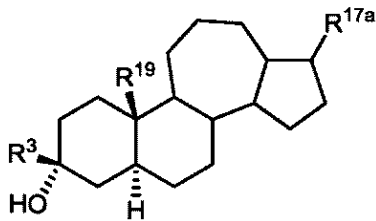
(V-I d)

の化合物である、上記項 4 4 6 ~ 4 5 5 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 4 5 9)

式 (V - I) の前記化合物が、式 (V - I e)

【化 5 6 3】



20

(V-I e)

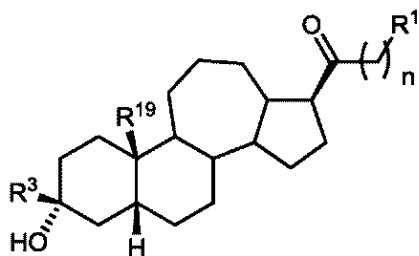
の化合物である、上記項 4 4 6 ~ 4 5 5 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

30

(項 4 6 0)

前記化合物が、式 (V - I f)

【化 5 6 4】



(V-I f)

40

の化合物であり、

ここで、 $R^1$  は、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2$

50



$OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

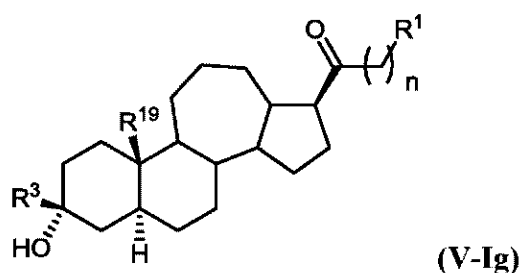
10

$n$ は、0、1、または2である、上記項446～455のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項461)

前記化合物が、式(V-Ig)

【化565】



20

の化合物であり、

ここで、 $R^1$ は、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

30

40

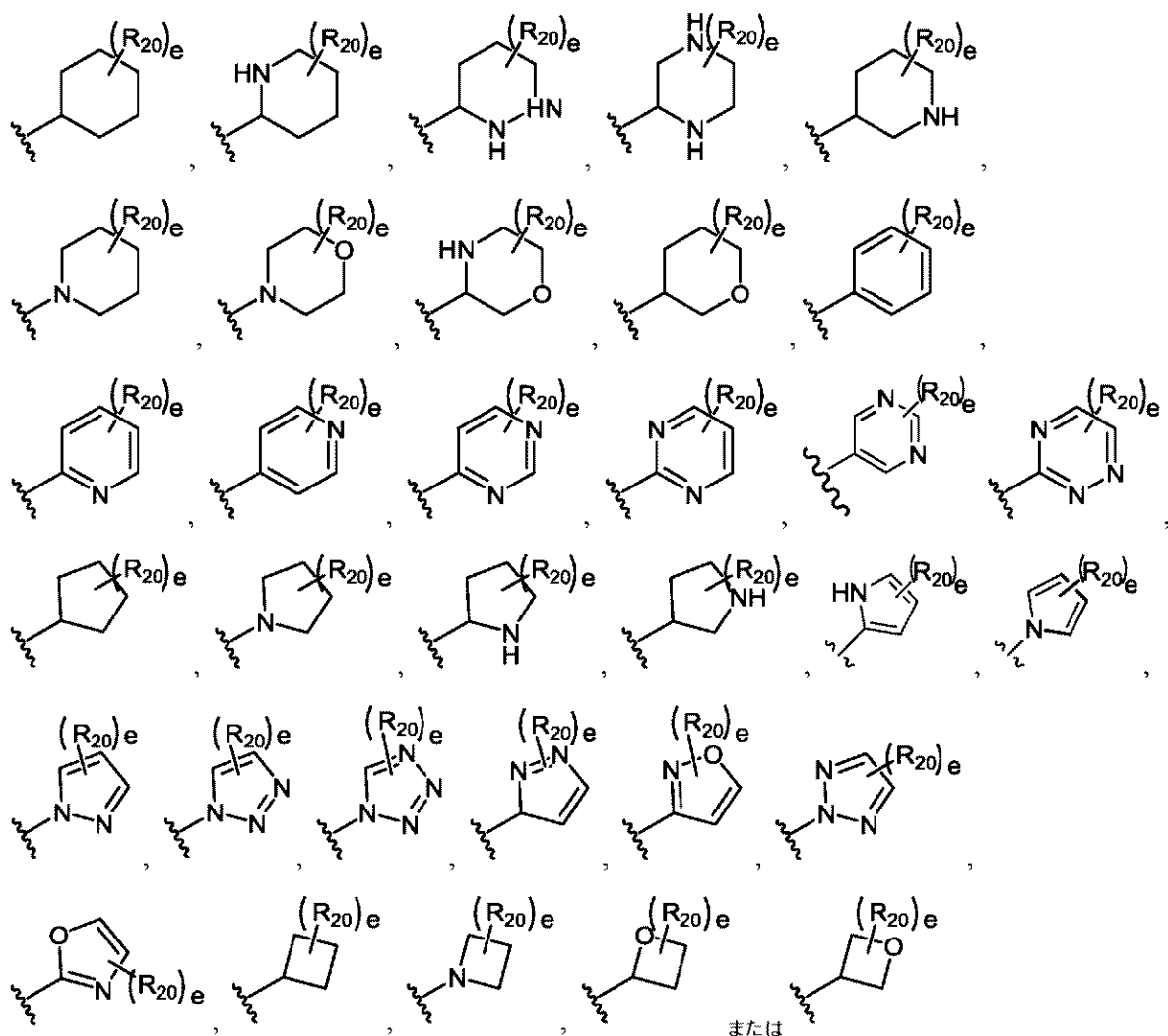
$n$ は、0、1、2、または3である、上記項446～455のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項462)

$R^1$ が、

50

【化 5 6 6】



10

20

30

であり、

ここで  $R_{20}$  の各々の存在は独立して、ハロゲン、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OS}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、または  $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ ；置換もしくは非置換  $\text{C}_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_3 \sim 4$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ～ 4 員ヘテロシクリルであるか、または必要に応じて 2 つの  $\text{R}^{\text{GA}}$  が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の 3 ～ 4 員炭素環または複素環式環を形成し；

40

ここで  $\text{R}^{\text{GA}}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $\text{C}_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $\text{C}_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ～ 6 員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $\text{R}^{\text{GA}}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の炭素環または複素環式環を形成し；

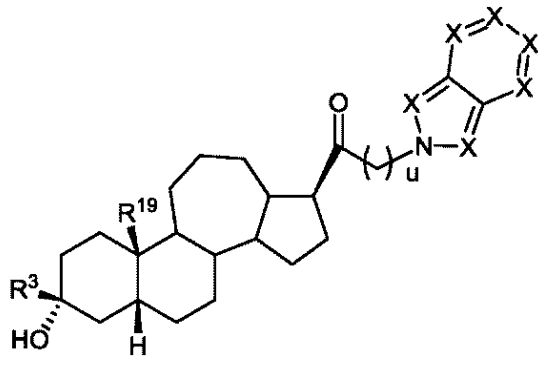
$e$  は、0、1、2、3、4、または 5 である、上記項 460 または 461 に記載の化合物。

50

(項 4 6 3)

式 (V - I) の前記化合物が、式 (V - I h)

【化 5 6 7】



10

の化合物であり、

ここで、 $u$  は、0、1、または2であり、各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

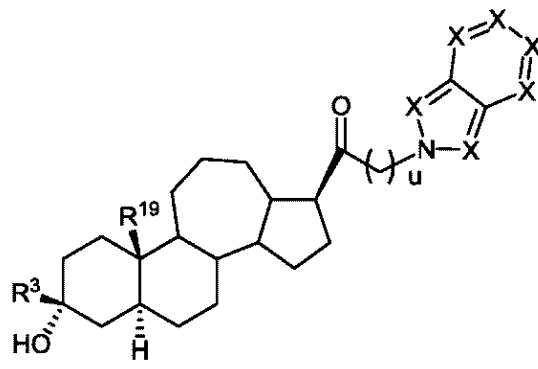
20

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項 4 3 8 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 4 6 4)

式 (V - I) の前記化合物が、式 (V - I i)

【化 5 6 8】



30

の化合物であり、

ここで、 $u$  は、0、1、または2であり、各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、置換

40

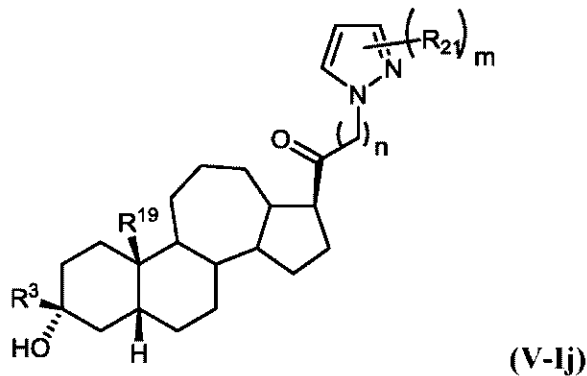
50

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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{GA}$ 基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項438に記載の化合物。

(項465)

前記化合物が、式(V-Ij)

【化569】



10

の化合物であり、

ここで、mは、0、1、2、または3であり；nは、0、1、または2であり；

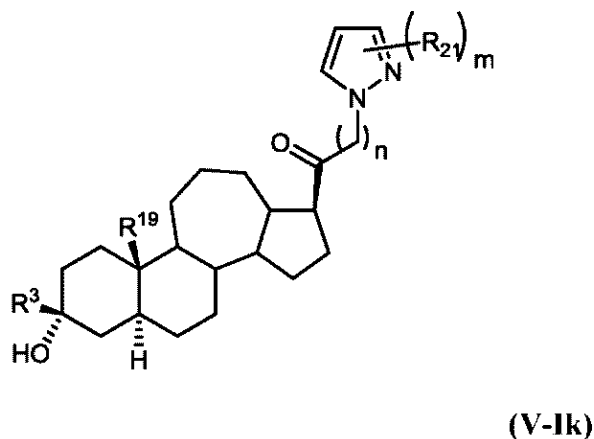
20

各 $R^{21}$ は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項460に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項466)

前記化合物が、式(V-Ik)

【化570】



30

の化合物であり、

ここで、mは、0、1、2、または3であり；nは、0、1、または2であり；

40

各 $R^{21}$ は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項461に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項467)

$R^{21}$ が、-CNである、上記項465または466に記載の化合物。

(項468)

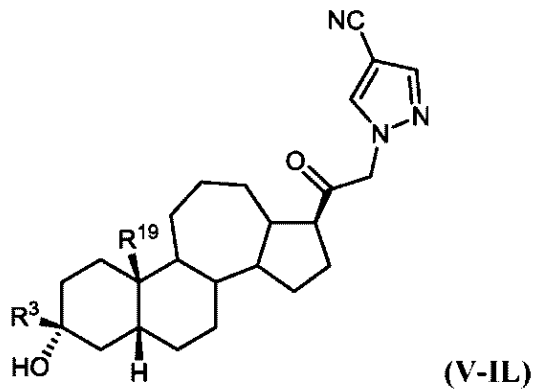
mが1であり、nが1である、上記項465～467のいずれか1項に記載の化合物。

(項469)

前記化合物が、式(V-IL)

50

【化 5 7 1】



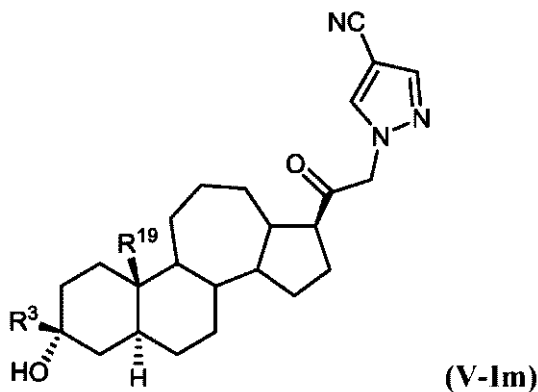
10

の化合物である、上記項 4 6 0 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 4 7 0)

前記化合物が、式 (V - I m)

【化 5 7 2】



20

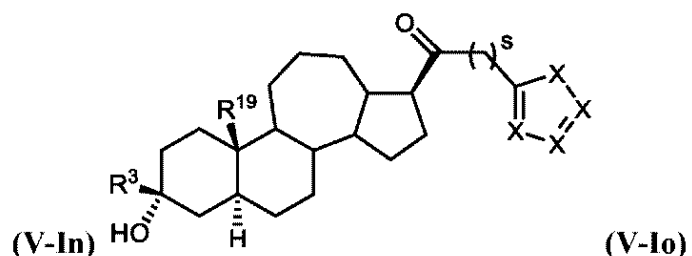
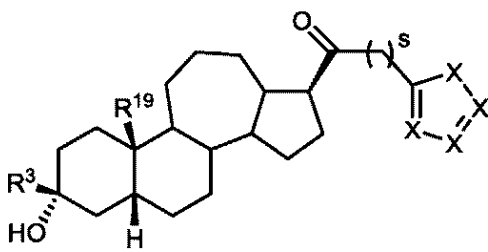
の化合物である、上記項 4 6 1 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

30

(項 4 7 1)

前記化合物が、式 (V - I n) または式 (V - I o)

【化 5 7 3】



40

の化合物であり、

ここで、s は、0、1、または 2 であり；各 X は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1-6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_{2-6}$  アルキニル、置換もしくは

50

は非置換  $C_3 \sim C_6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の  $3 \sim 6$  員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項 4 3 8 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 4 7 2)

$R^3$  が、置換もしくは非置換アルキルである、上記項 4 4 6 ~ 4 7 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 7 3)

$R^3$  が、非置換アルキルである、上記項 4 4 6 ~ 4 7 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

(項 4 7 4)

$R^3$  が、 $-CH_3$  である、上記項 4 4 6 ~ 4 7 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 7 5)

$R^{19}$  が、置換もしくは非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim C_6$  アルケニル、または置換もしくは非置換  $C_2 \sim C_6$  アルキニルである、上記項 4 4 6 ~ 4 7 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 7 6)

$R^{19}$  が、非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキルである、上記項 4 4 6 ~ 4 7 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 7 7)

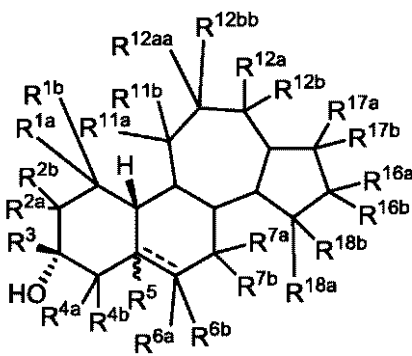
20

$R^{19}$  が、 $-CH_3$  である、上記項 4 4 6 ~ 4 7 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 7 8)

式 (V - II) :

【化 5 7 4】



(V-II)

30

の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であって、

式 (V - II) において、

$R^5$  は、水素または置換もしくは非置換メチルであるか、または

【化 5 7 5】

-----

40

が二重結合である場合、 $R^5$  は存在せず；

$R^3$  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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、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か、または  $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が一緒になってオキソ (= O) 基を形成し；

50

$R^{1a}$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$ 、 $R^{12b}$ 、 $R^{12aa}$ 、 $R^{12bb}$ 、 $R^{2a}$ 、 $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$ 、 $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$ 、 $R^{11b}$ 、 $R^{18a}$ 、および $R^{18b}$ の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{D1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成するか；または $R^{1a}$ および $R^{1b}$ 、 $R^{12a}$ および $R^{12b}$ 、 $R^{2a}$ および $R^{2b}$ 、 $R^{4a}$ および $R^{4b}$ 、 $R^{11a}$ および $R^{11b}$ 、 $R^{12aa}$ および $R^{12bb}$ 、ならびに $R^{18a}$ および $R^{18b}$ のいずれか1つが一緒になってオキソ( $=O$ )基を形成し；

10

$R^{7a}$ および $R^{7b}$ の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで $R^{D1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{D1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換複素環式環を形成し；または $R^{7a}$ および $R^{7b}$ が一緒になってオキソ( $=O$ )基を形成し；

20

$R^{16a}$ 、 $R^{16b}$ 、 $R^{17a}$ 、および $R^{17b}$ の各々は、各々独立して、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-ORA^1$ 、 $-SRA^1$ 、 $-N(RA^1)_2$ 、 $-N(RA^1)$ 、 $-CN(RA^1)_2$ 、 $-C(O)RA^1$ 、 $-OC(=O)RA^1$ 、 $-OC(=O)ORA^1$ 、 $-OC(=O)SRA^1$ 、 $-OC(=O)N(RA^1)_2$ 、 $-SC(=O)RA^2$ 、 $-SC(=O)ORA^1$ 、 $-SC(=O)SRA^1$ 、 $-SC(=O)N(RA^1)_2$ 、 $-NHC(=O)RA^1$ 、 $-NHC(=O)ORA^1$ 、 $-NHC(=O)SRA^1$ 、 $-NHC(=O)N(RA^1)_2$ 、 $-OS(=O)_2RA^2$ 、 $-OS(=O)_2ORA^1$ 、 $-S-S(=O)_2RA^2$ 、 $-S-S(=O)_2ORA^1$ 、 $-S(=O)RA^2$ 、 $-SO_2RA^2$ 、または $-S(=O)_2ORA^1$ であり、ここで $RA^1$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基、 $-SO_2RA^2$ 、 $-C(O)RA^2$ であるか、または2つの $RA^1$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $RA^2$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

30

40

ここで、

【化576】

=====

は、単結合または二重結合を表し、二重結合が存在する場合、 $R^5$ および $R^{6a}$ または $R$

50

$6^b$  の一方は存在しない、化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 479)

$R^{2a}$  および  $R^{2b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 478 に記載の化合物。

10

(項 480)

$R^{4a}$  および  $R^{4b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 478 または 479 に記載の化合物。

20

(項 481)

$R^{11a}$  および  $R^{11b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであるか、または  $R^{11a}$  および  $R^{11b}$  が一緒になってオキシ基を形成する、上記項 478 ~ 480 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

(項 482)

$R^{16a}$  および  $R^{16b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 478 ~ 481 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

(項 483)

$R^{7a}$  および  $R^{7b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであるか、または  $R^{7a}$  および  $R^{7b}$  または  $R^{7aa}$  および  $R^{7bb}$  のいずれかが一緒になってオキシ(=O)を形成する、上記項 478 ~ 482 のいずれか 1 項に記載の化合物。

50

(項 484)



$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が独立して、水素、ハロゲン、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、上記項 478 ~ 483 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 485)

$R^{12a}$ 、 $R^{12b}$ 、 $R^{12aa}$ 、および  $R^{12bb}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシル、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ヘテロシクリル、または置換もしくは非置換アルキニル、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ 、または  $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$  であり、ここで  $R^{D1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 478 ~ 484 のいずれか 1 項に記載の化合物。

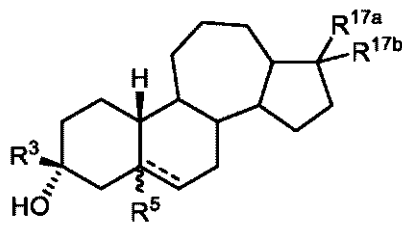
(項 486)

$R^{17a}$  および  $R^{17b}$  が、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、または  $-OC(=O)N(R^{A1})_2$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項 478 ~ 485 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 487)

前記化合物が、式 (V-IIa)

【化 577】



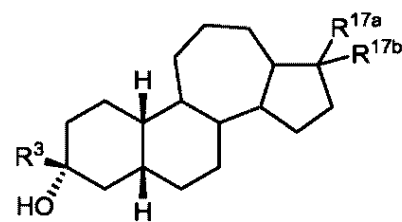
(V-IIa)

の化合物である、上記項 478 ~ 486 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 488)

前記化合物が、式 (V-IIb)

【化 578】



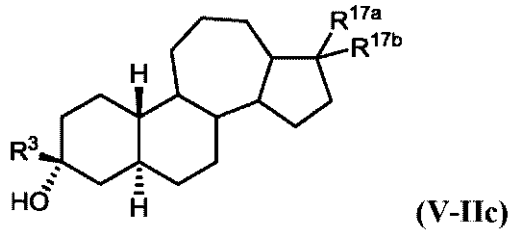
(V-IIb)

の化合物である、上記項 478 ~ 487 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 489)

前記化合物が、式 (V-IIc)

【化 5 7 9】

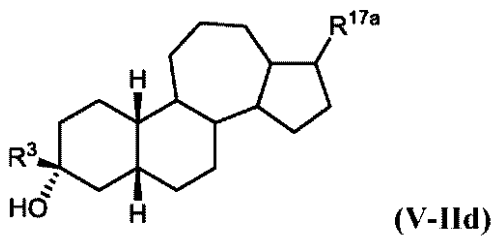


の化合物である、上記項 4 7 8 ~ 4 8 7 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。 10

(項 4 9 0)

前記化合物が、式 ( V - I I d )

【化 5 8 0】



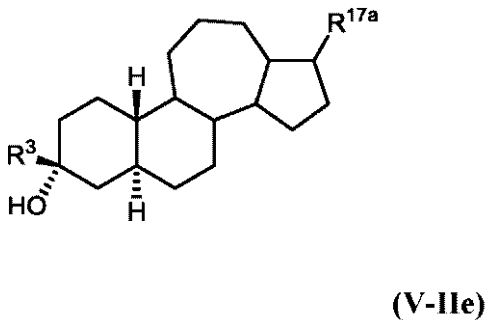
20

の化合物である、上記項 4 7 8 ~ 4 8 7 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 4 9 1)

前記化合物が、式 ( V - I I e )

【化 5 8 1】



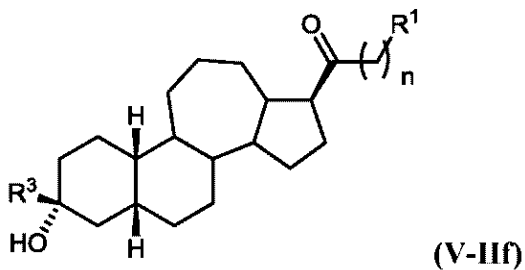
30

の化合物である、上記項 4 7 8 ~ 4 8 7 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 4 9 2)

前記化合物が、式 ( V - I I f )

【化 5 8 2】



50

の化合物であり、

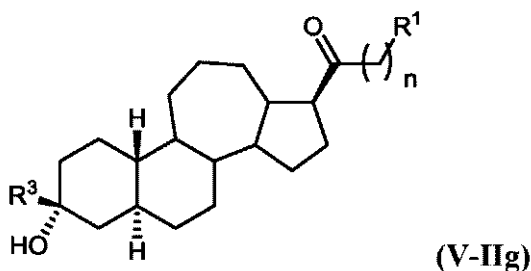
ここで、 $R^1$ は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$n$ は、0、1、2、または3である、上記項478～487のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項493)

前記化合物が、式(V-IIg)

【化583】



の化合物であり、

ここで、 $R^1$ は、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2OR^{A1}$ であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^{A1}$ 基が一緒になって置換もしくは非置換

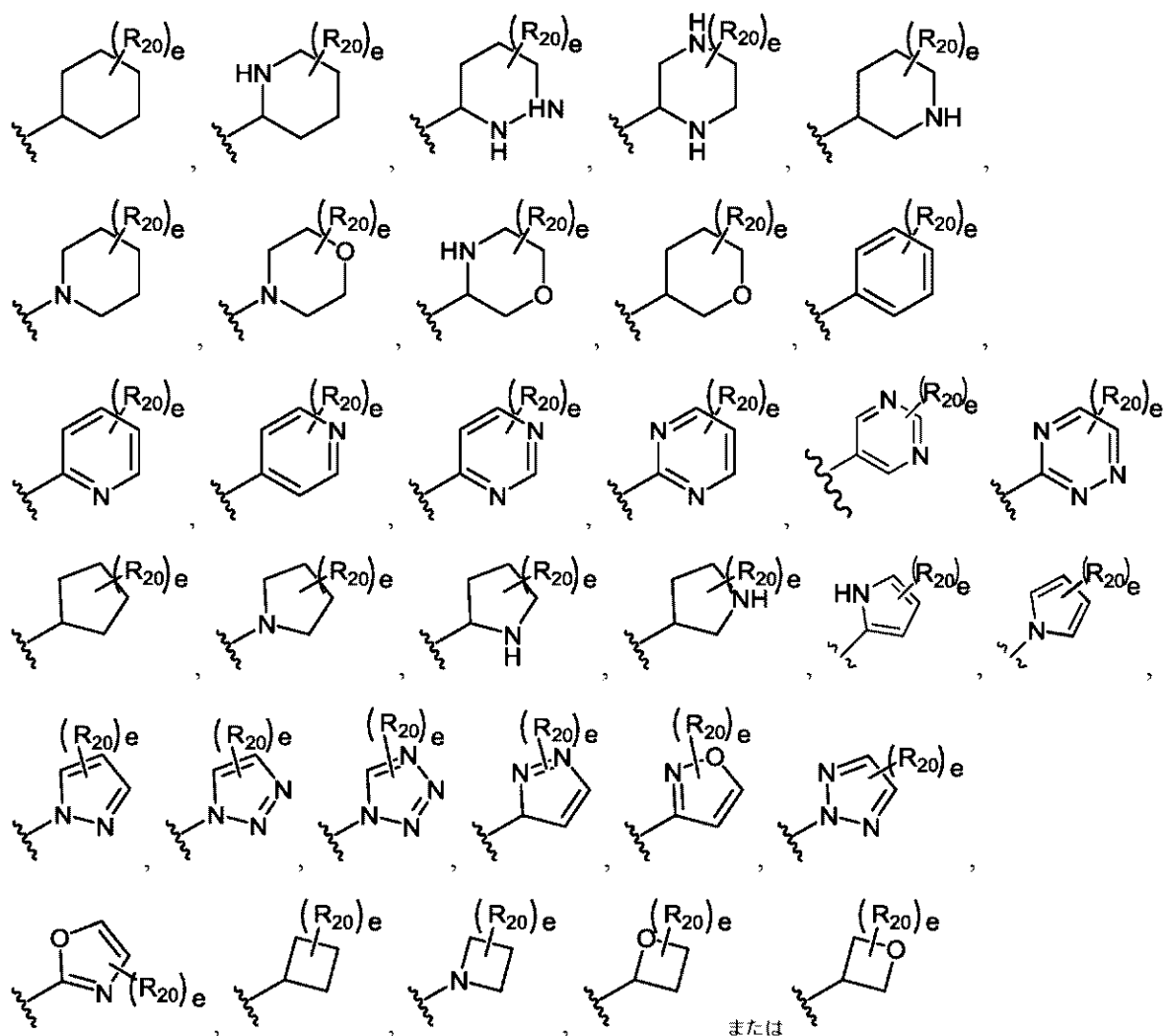
の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$ は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$n$ は、0、1、2、または3である、上記項478～487のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項494)

$R^1$ が、

【化584】



であり、

ここで $R_{20}$ の各々の存在は独立して、ハロゲン、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{OR}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{OS}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})_2$ 、または $-\text{N}(\text{R}^{\text{GA}})\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{GA}}$ ；置換もしくは非置換 $\text{C}_{1-6}$ アルキル、置換もしくは非置換 $\text{C}_{2-6}$ アルケニル、置換もしくは非置換 $\text{C}_{2-6}$ アルキニル、置換もしくは非置換 $\text{C}_{3-4}$ カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～4員ヘテロシクリルであるか、または必要に応じて2つの $\text{R}^{\text{GA}}$ が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の3～4員炭素環または複素環式環を形成し；

ここで $\text{R}^{\text{GA}}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換 $\text{C}_{1-6}$ アルキル、

置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ～ 6 員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換の炭素環または複素環式環を形成し；

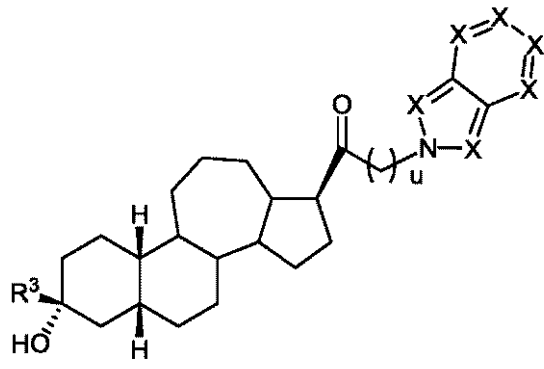
e は、0、1、2、3、4、または 5 である、上記項 492 または 493 に記載の化合物。

(項 495)

前記化合物が、式 (V-IIh)

【化 585】

10



(V-IIh)

20

の化合物であり、

ここで、u は、0、1、または 2 であり、各 X は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

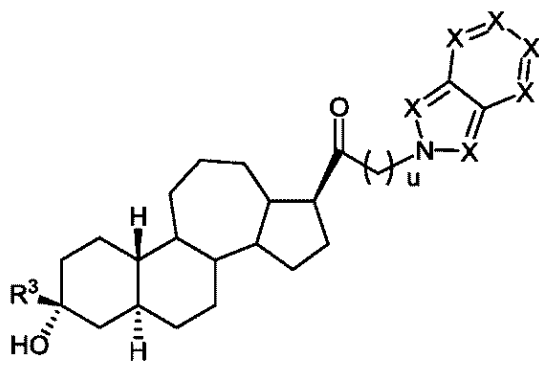
$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ～ 6 員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項 438 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

30

(項 496)

前記化合物が、式 (V-IIi)

【化 586】



(V-IIi)

40

の化合物であり、

ここで、u は、0、1、または 2 であり、各 X は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

50

$N$ )<sub>2</sub> -、-S-、-N-、または  $N(R^N)$  - であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

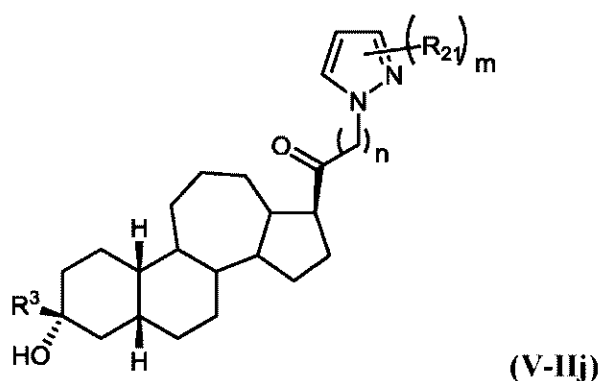
$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ～ 6 員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項 438 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

10

(項 497)

前記化合物が、式 (V-IIj)

【化 587】



20

の化合物であり、

ここで、 $m$  は、0、1、2、または 3 であり；

$n$  は、0、1、または 2 であり；

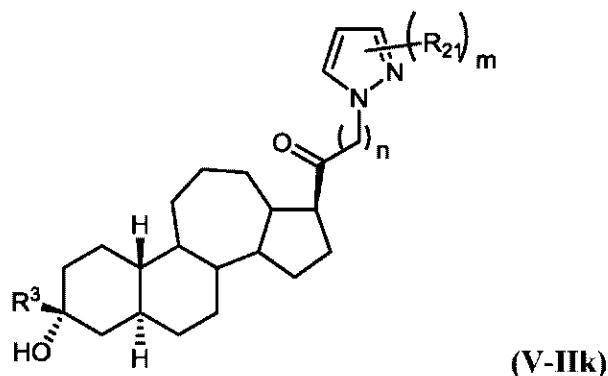
各  $R^{21}$  は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項 492 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

30

(項 498)

前記化合物が、式 (V-IIk)

【化 588】



40

の化合物であり、

ここで、 $m$  は、0、1、2、または 3 であり；

各  $R^{21}$  は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項 493 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

50

(項 4 9 9 )

$R^{21}$  が、 $-CN$  である、上記項 4 9 7 または 4 9 8 に記載の化合物。

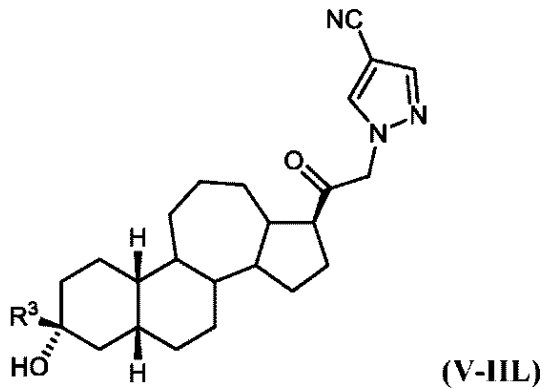
(項 5 0 0 )

$m$  が 1 であり、 $n$  が 1 である、上記項 4 9 7 ~ 4 9 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 5 0 1 )

前記化合物が、式 ( V - I I L )

【化 5 8 9 】



10

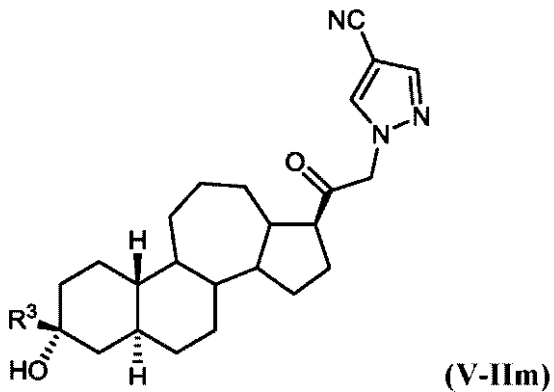
の化合物である、上記項 4 9 2 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

20

(項 5 0 2 )

前記化合物が、式 ( V - I I m )

【化 5 9 0 】



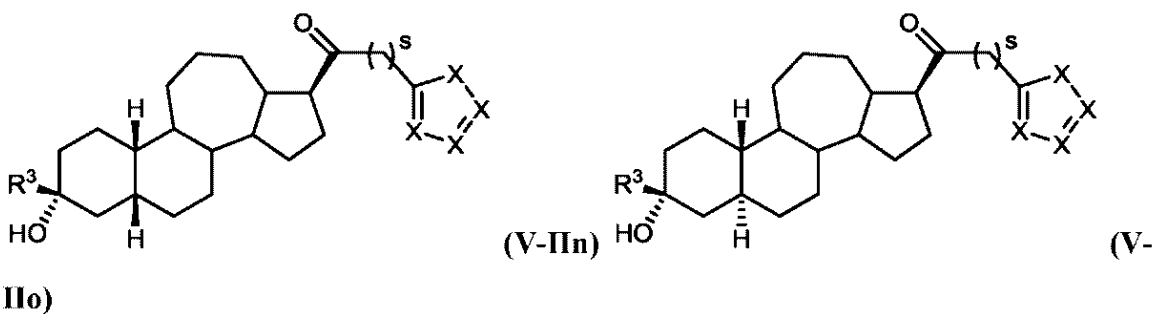
30

の化合物である、上記項 4 9 3 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 5 0 3 )

前記化合物が、式 ( V - I I n ) または式 ( V - I I o )

【化 5 9 1 】



40

の化合物であり、

ここで、 $s$  は、0、1、または 2 であり；各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)-$ 、 $-C(R^N)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)-$  であり、ここで  $R^N$  は独立して

50

、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の  $3 \sim 6$  員ヘテロシクリル、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、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にあって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成する、上記項 438 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

10

(項 504)

$R^3$  が、置換もしくは非置換アルキルである、上記項 478 ~ 503 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 505)

$R^3$  が、非置換アルキルである、上記項 478 ~ 504 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 506)

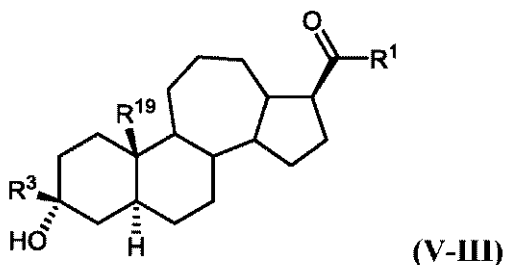
$R^3$  が、 $-CH_3$  である、上記項 478 ~ 505 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 507)

式 (V - III)：

【化 592】

20



の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であって、

式 (V - III) において、

30

$R^1$  は、水素、ハロゲン、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または  $-S(=O)_2OR^{A1}$  であり、ここで  $R^{A1}$  の各々の存在は独立して、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、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、酸素原子に結合する場合の酸素保護基、硫黄原子に結合する場合の硫黄保護基、窒素原子に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{A1}$  基と一緒にあって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し； $R^{A2}$  は、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カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

40

$R^3$  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ルケニル、置換も

50



しくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$R^{19}$  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ルケニル、または置換もしくは非置換アルキニルである、  
化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 508)

$R^1$  が、置換もしくは非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキルである、上記項 502 に記載の化合物。

(項 509)

$R^1$  が、非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキルである、上記項 502 または 503 に記載の化合物。

10

(項 510)

$R^1$  が、 $-CH_3$  である、上記項 502 ~ 504 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 511)

$R^{19}$  が、置換もしくは非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim C_6$  アルケニル、または置換もしくは非置換  $C_2 \sim C_6$  アルキニルである、上記項 502 ~ 505 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 512)

$R^{19}$  が、非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキルである、上記項 502 ~ 506 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 513)

20

$R^3$  が、水素または非置換  $C_1 \sim C_6$  アルキルである、上記項 502 ~ 507 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

40

50