

【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】

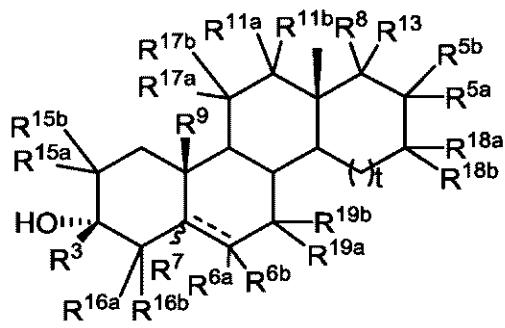
【特許請求の範囲】

【請求項1】

50

式 ( I - I ) :

【化 4 2 4】



(I-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 ) 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> ~ C<sub>3</sub> アルキルであり；

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

20

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、- S R<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>、- O C (= O) R<sup>A1</sup>、- O C (= O) O R<sup>A1</sup>、- O C (= O) S R<sup>A1</sup>、- O C (= O) N (R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、- S C (= O) R<sup>A2</sup>、- S C (= O) O R<sup>A1</sup>、- S C (= O) S R<sup>A1</sup>、- S C (= O) N (R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、- NH C (= O) R<sup>A1</sup>、- N H C (= O) O R<sup>A1</sup>、- N H C (= O) S R<sup>A1</sup>、- N H C (= O) N (R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、- O S (= O)<sub>2</sub> R<sup>A2</sup>、- O S (= O)<sub>2</sub> O R<sup>A1</sup>、- S - S (= O)<sub>2</sub> R<sup>A2</sup>、- S - S (= O)<sub>2</sub> O R<sup>A1</sup>、- S (= O) R<sup>A2</sup>、- S O<sub>2</sub> R<sup>A2</sup>、または - S (= O)<sub>2</sub> O R<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、- S O<sub>2</sub> R<sup>A2</sup>、- C (O) R<sup>A2</sup> であるか、または 2 つの R<sup>A1</sup> 基が一緒に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

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、- S R<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>、- O C (= O) R<sup>A1</sup>、- O C (= O) O R<sup>A1</sup>、- O C (= O) S R<sup>A1</sup>、- O C (= O) N (R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、- S C (= O) R<sup>A2</sup>、- S C (= O) O R<sup>A1</sup>、- S C (= O) S R<sup>A1</sup>、- S C (= O) N (R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、- N H C (= O) R<sup>A1</sup>、- N H C (= O) O R<sup>A1</sup>、- N H C (= O) S R<sup>A1</sup>、- N H C (= O) N (R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、- O S (= O)<sub>2</sub> R<sup>A2</sup>、- O S (= O)<sub>2</sub> O R<sup>A1</sup>、- S - S (= O)<sub>2</sub> R<sup>A2</sup>、- S -

40

- S (= O)<sub>2</sub> O R<sup>A1</sup> であり；

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426】

---

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 $C_{1~3}$ アルキルまたは非置換 $C_{1~3}$ アルコキシ- $C_{1~3}$ 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<sup>8</sup>またはR<sup>13</sup>が、-C(O)R<sup>A1</sup>であり、ここでR<sup>A1</sup>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<sup>8</sup>が、水素であり、R<sup>13</sup>が、-C(O)R<sup>A1</sup>、-C(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、または-C(=O)NH(R<sup>A1</sup>)であり、そしてR<sup>A1</sup>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<sub>2</sub>R<sup>A2</sup>、-C(O)R<sup>A2</sup>であるか、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、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<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

20

30

40

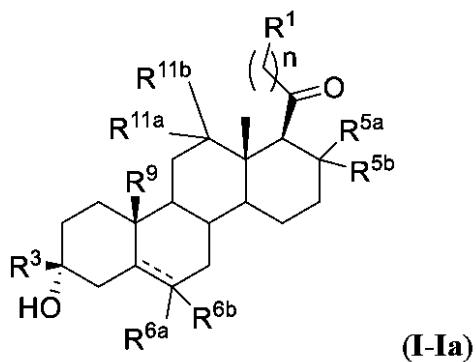
**【請求項 1 4】**

R<sup>8</sup>が、水素であり、そしてR<sup>13</sup>が、-N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>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>であるか、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、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<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 1 5】**

前記式(I-I)の化合物が、式(I-Ia)

**【化 6 1 0】**



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<sup>1</sup>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<sup>A1</sup>、-SR<sup>A1</sup>、-N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-N(R<sup>A1</sup>)、-OC(

50

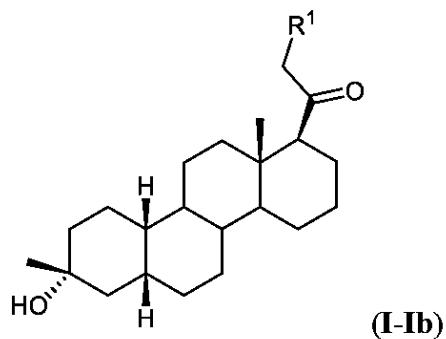
$= O) R^A 1$ 、 $- O C ( = O ) O R^A 1$ 、 $- O C ( = O ) S R^A 1$ 、 $- O C ( = O ) N ( R^A 1 )_2$ 、 $- S C ( = O ) R^A 2$ 、 $- S C ( = O ) O R^A 1$ 、 $- S C ( = O ) S R^A 1$ 、 $- S C ( = O ) N ( R^A 1 )_2$ 、 $- N H C ( = O ) R^A 1$ 、 $- N H C ( = O ) O R^A 1$ 、 $- N H C ( = O ) S R^A 1$ 、 $- N H C ( = O ) N ( R^A 1 )_2$ 、 $- O S ( = O )_2 R^A 2$ 、 $- S - S ( = O )_2 R^A 1$ 、 $- S ( = O ) R^A 2$ 、 $- S O_2 R^A 2$ 、または $- S ( = O )_2 O R^A 1$ であり、ここで $R^A 1$ 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 $R^A 1$ 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； $R^A 2$ 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；

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】



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】

$R^1$ が、

10

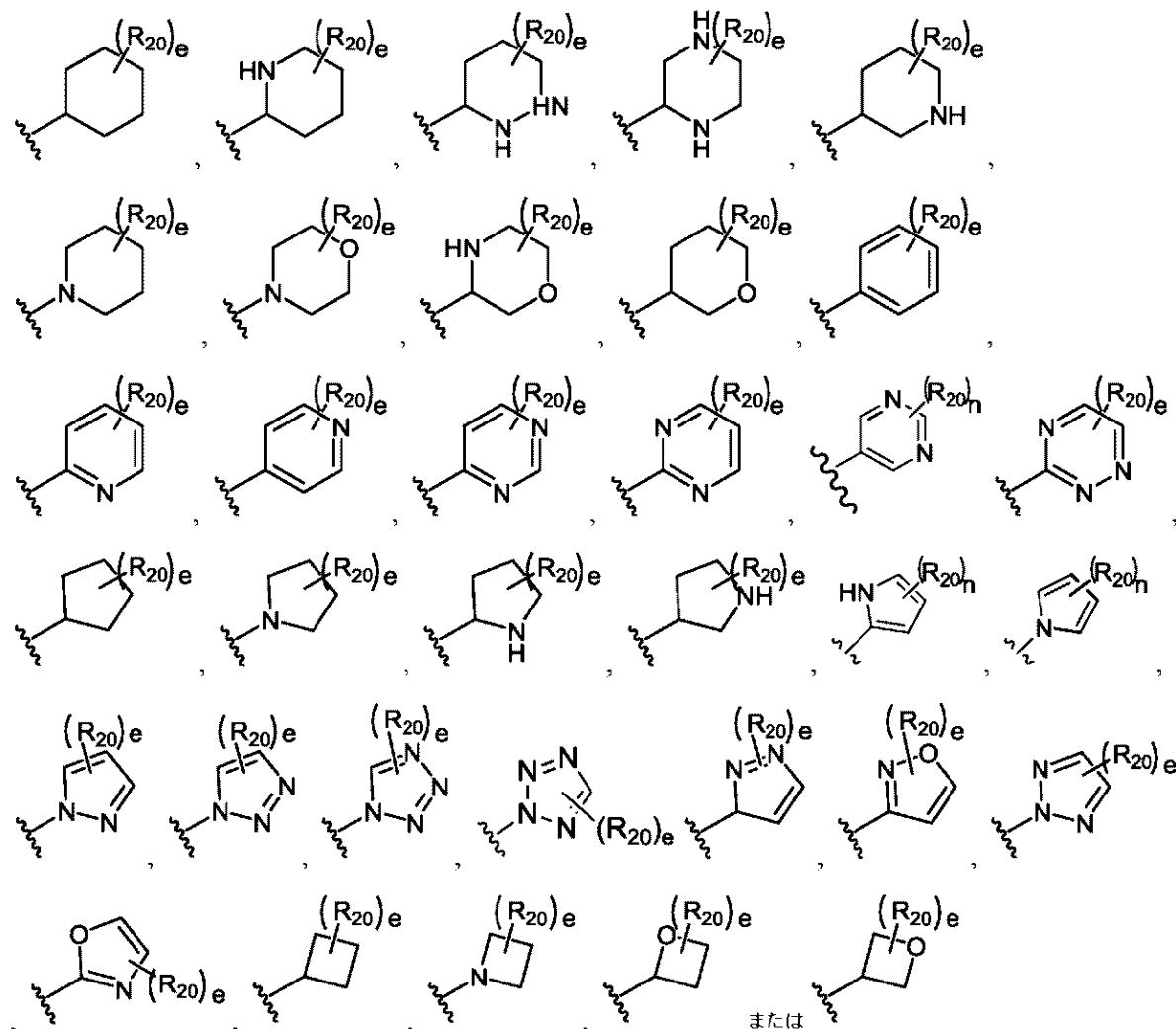
20

30

40

50

## 【化430】



であり、

ここで  $R_{20}$  の各々の存在は独立して、ハロゲン、 $-NO_2$ 、 $-CN$ 、 $-OR^{GA}$ 、 $-N(R^{GA})_2$ 、 $-C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-OC(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-N(R^{GA})C(=O)R^{GA}$ 、 $-OC(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-N(R^{GA})C(=O)OR^{GA}$ 、 $-S(=O)_2R^G$ 、 $-S(=O)_2OR^{GA}$ 、 $-OS(=O)_2R^{GA}$ 、 $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$ 、または $-N(R^{GA})S(=O)_2R^{GA}$ ；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  $C_{3~4}$  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  $R^{GA}$  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  $C_{3~6}$  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  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にになって、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18】

前記式(I-I)の化合物が、式(I-Id)

10

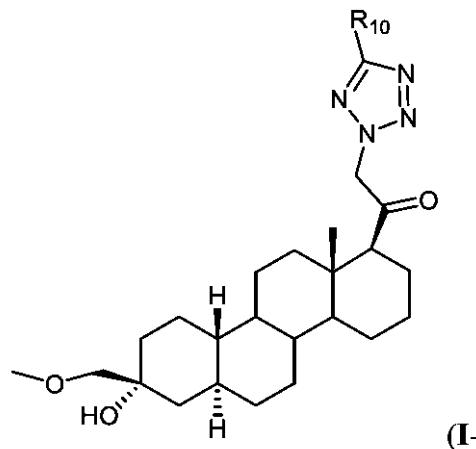
20

30

40

50

## 【化 6 1 2】



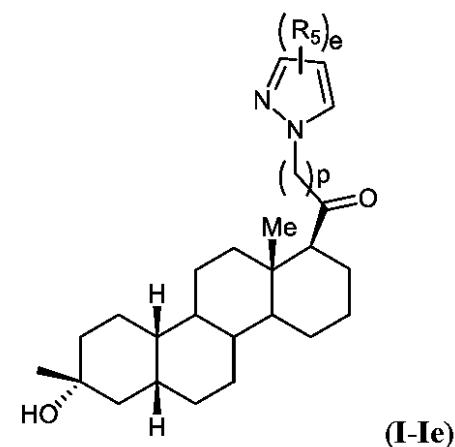
の化合物またはその薬学的に受容可能な塩であり、

ここで、R<sub>10</sub>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 1 9】

前記式(I-I)<sub>d</sub>の化合物が、式(I-Ie)

## 【化 6 1 3】



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<sub>5</sub>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 2 0】

前記式(I-I)<sub>d</sub>の化合物が、式(I-If)

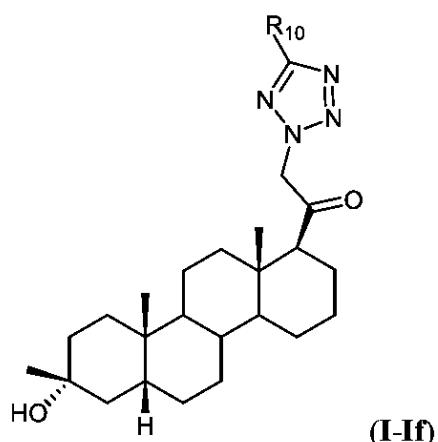
30

30

40

50

## 【化 6 1 4】



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<sub>10</sub>は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、ヒドロキシリル、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21】

## 【表21-1】

20

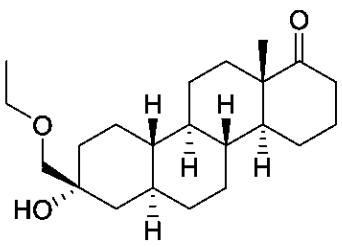
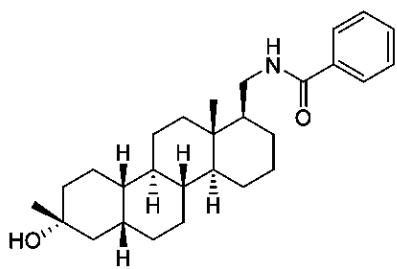
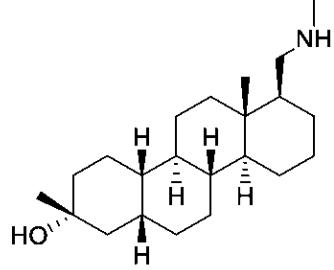
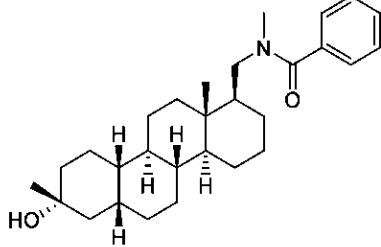
	<b>I-A7</b>
	<b>I-A8</b>

30

40

50

【表 2 1 - 2】

	I-B6
	I-C4
	I-C5
	I-C6

10

20

30

40

50

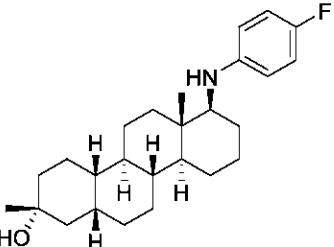
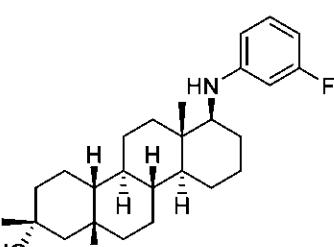
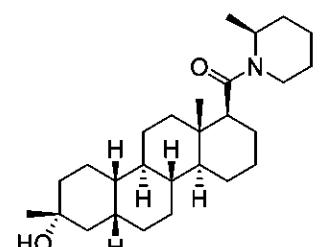
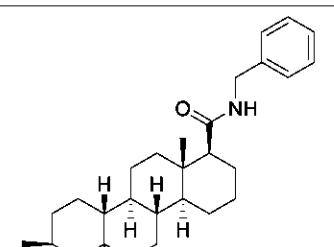
【表 2 1 - 3】

	I-7	10
	I-8	
	I-9	20
	I-10	30

40

50

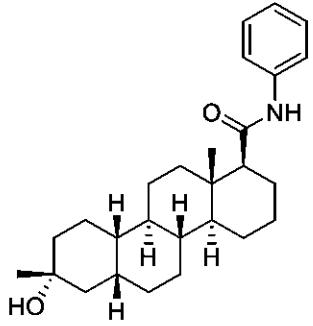
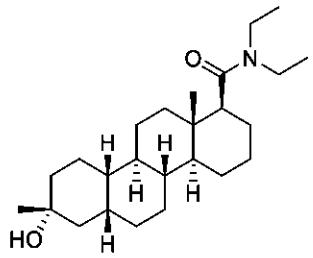
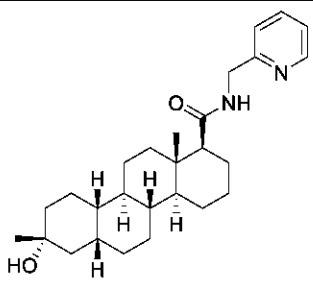
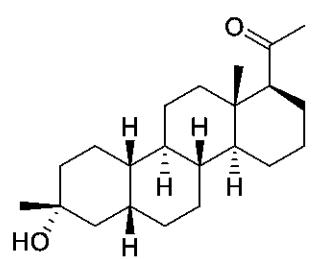
【表 2 1 - 4】

	I-11	10
	I-12	
	I-E4	20
	I-14	30

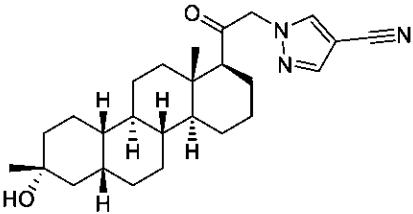
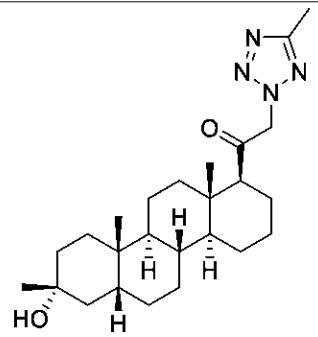
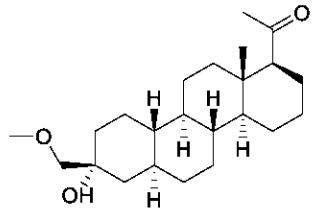
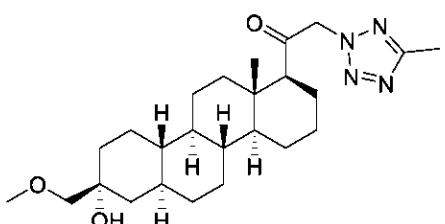
40

50

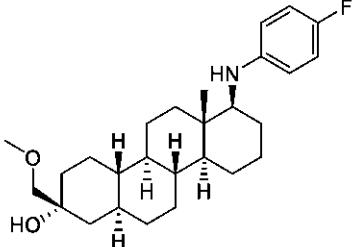
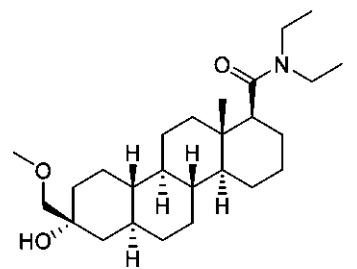
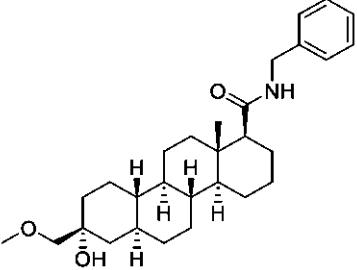
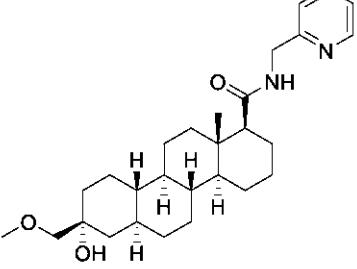
【表 2 1 - 5】

	I-15	10
	I-16	
	I-17	20
	I-D7	30
		40
		50

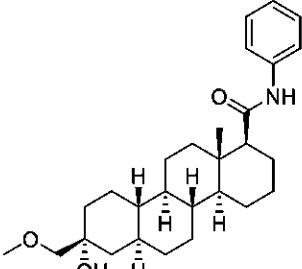
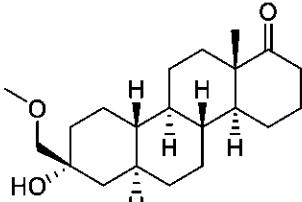
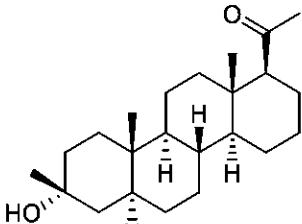
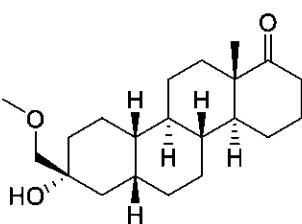
【表 2 1 - 6】

	I-D9	
	I-20	10
	I-G14	20
	I-G16	30
		40
		50

【表 2 1 - 7】

	I-23	
	I-M3	10
	I-25	20
	I-26	30
		40
		50

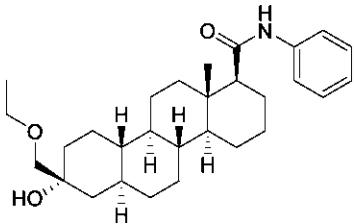
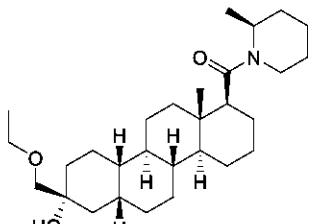
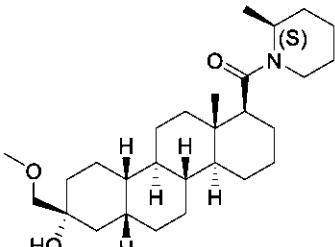
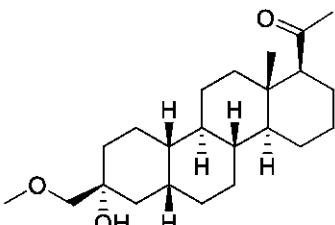
【表 2 1 - 8】

	I-27	10
	I-H5	
	I-K2	20
	I-L6	30

40

50

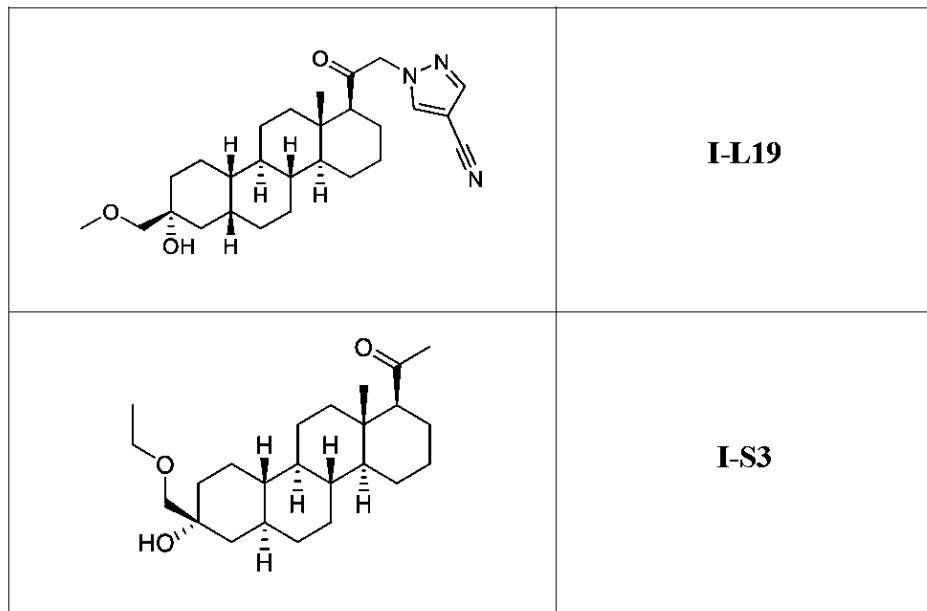
【表 2 1 - 9】

	I-B11	
	I-P9	10
	I-L14	20
	I-L17	30

40

50

【表 2 1 - 1 0 A】



10

20

30

40

50

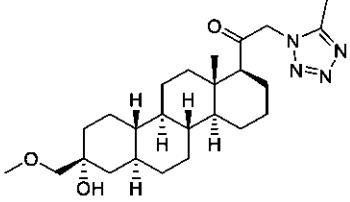
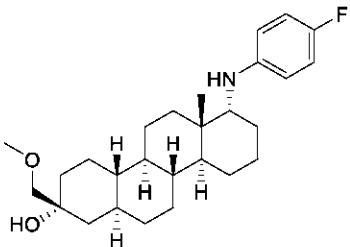
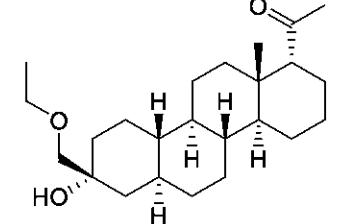
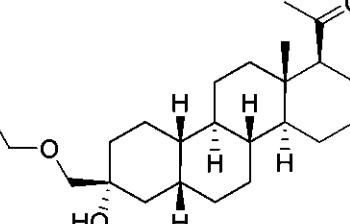
【表 2 1 - 1 1】

	I-10a	10
	I-11a	
	I-D7a	20
	I-20a	30

40

50

【表 2 1 - 1 2】

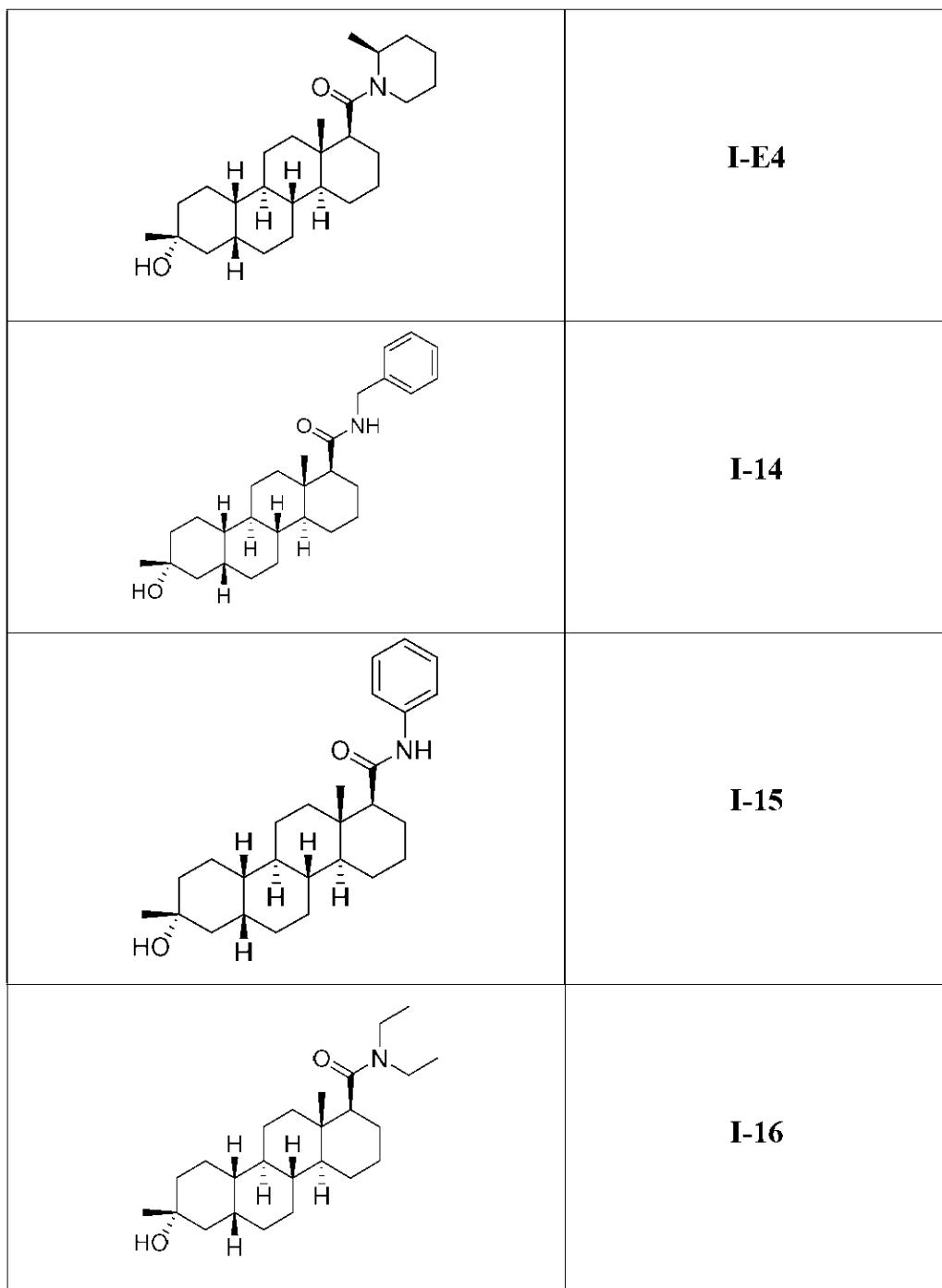
	I-G16a	
	I-23a	10
	I-S3a	20
	I-U11	30

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

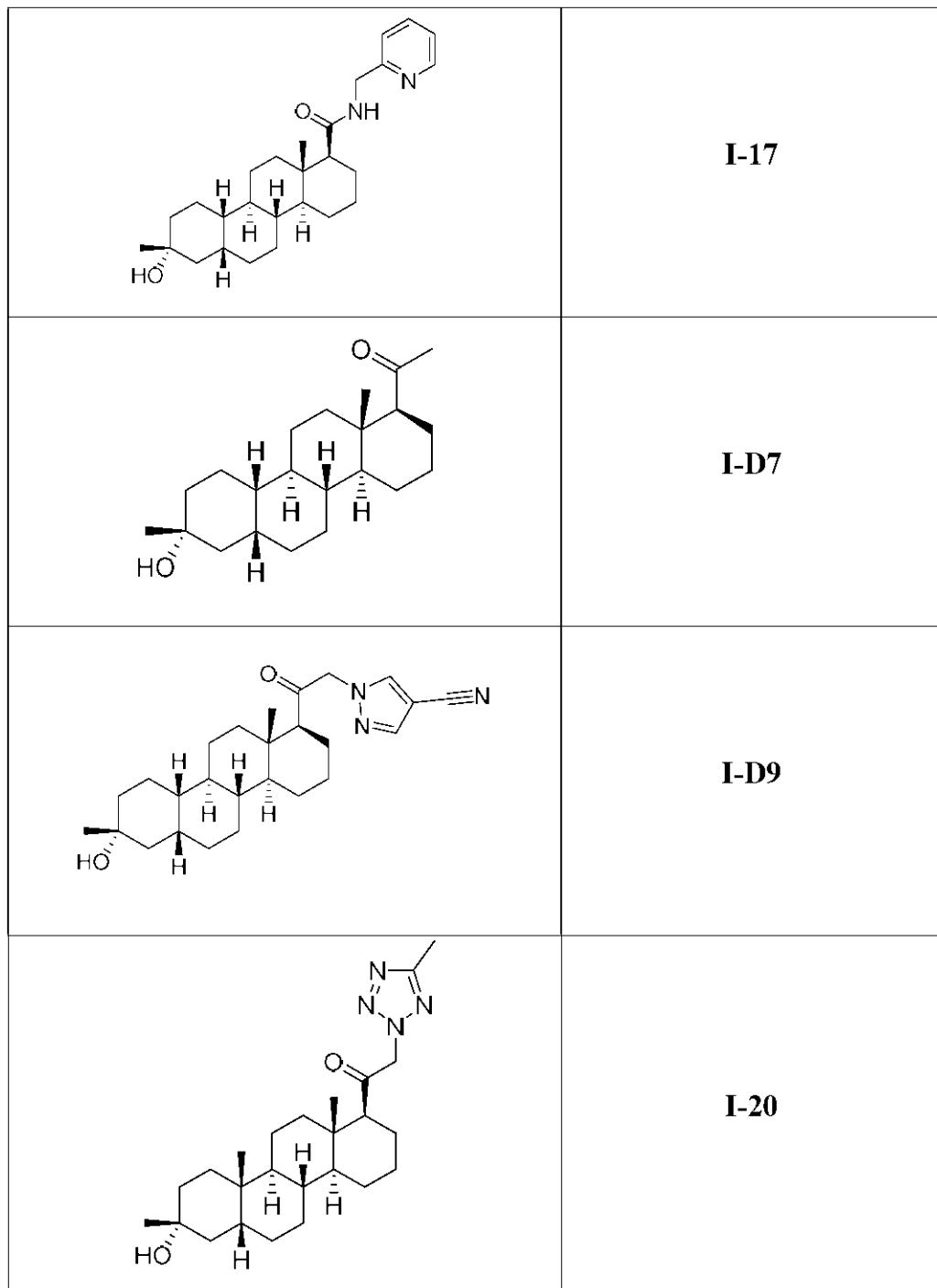
【化 2 2 - 1】



40

50

【化 2 2 - 2】



10

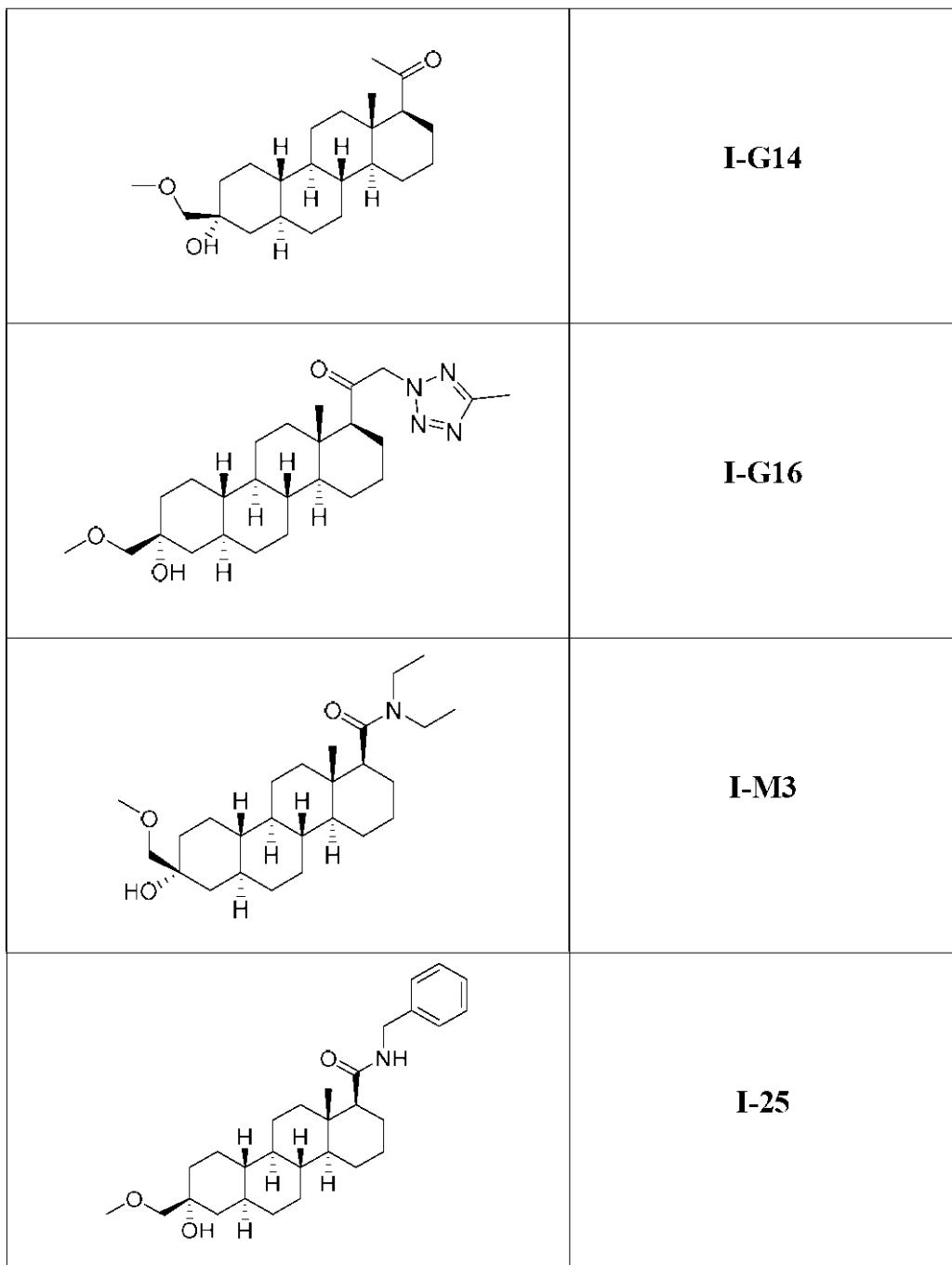
20

30

40

50

【化 2 2 - 3】



10

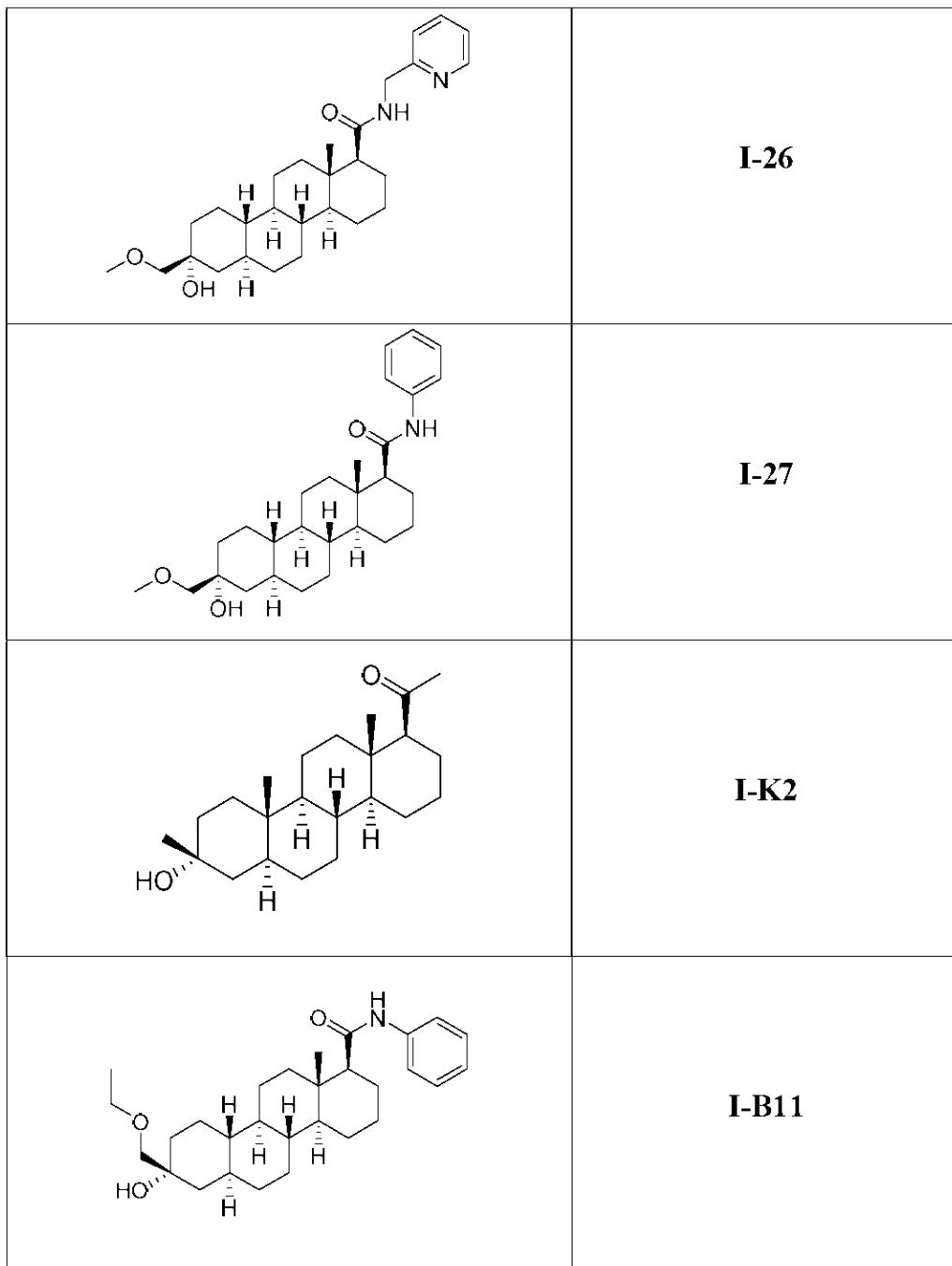
20

30

40

50

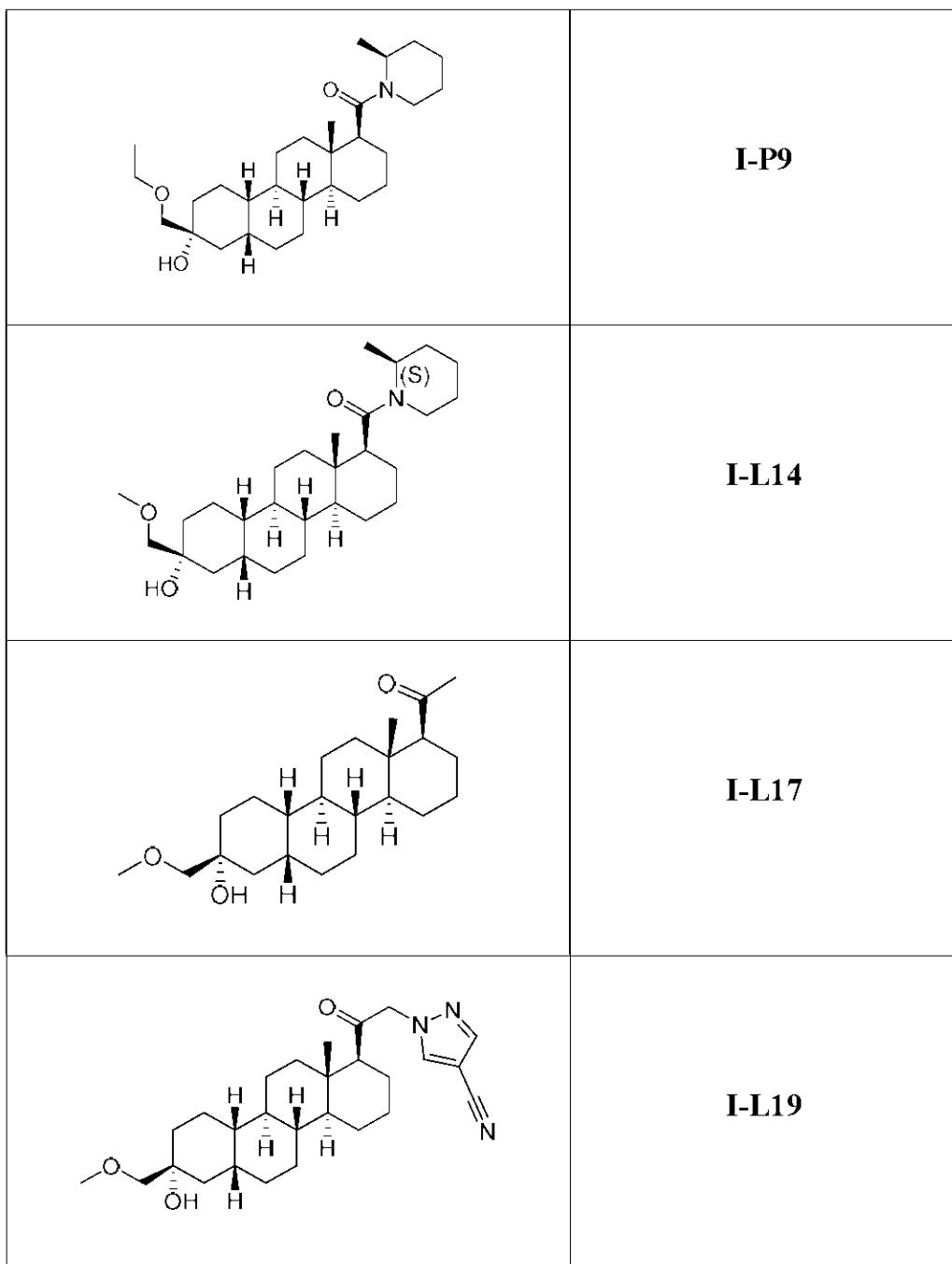
【化 2 2 - 4】



40

50

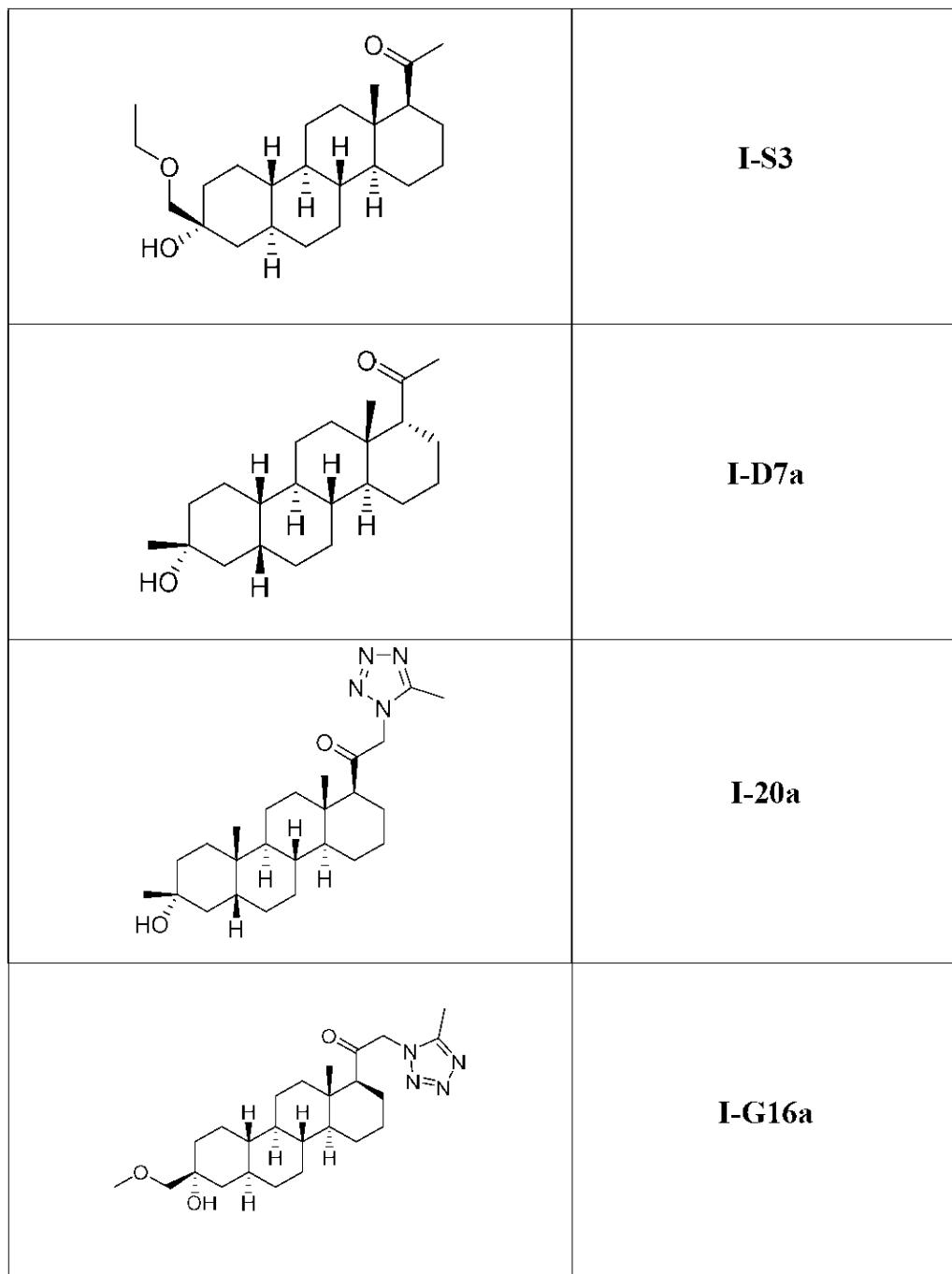
【化 2 2 - 5】



40

50

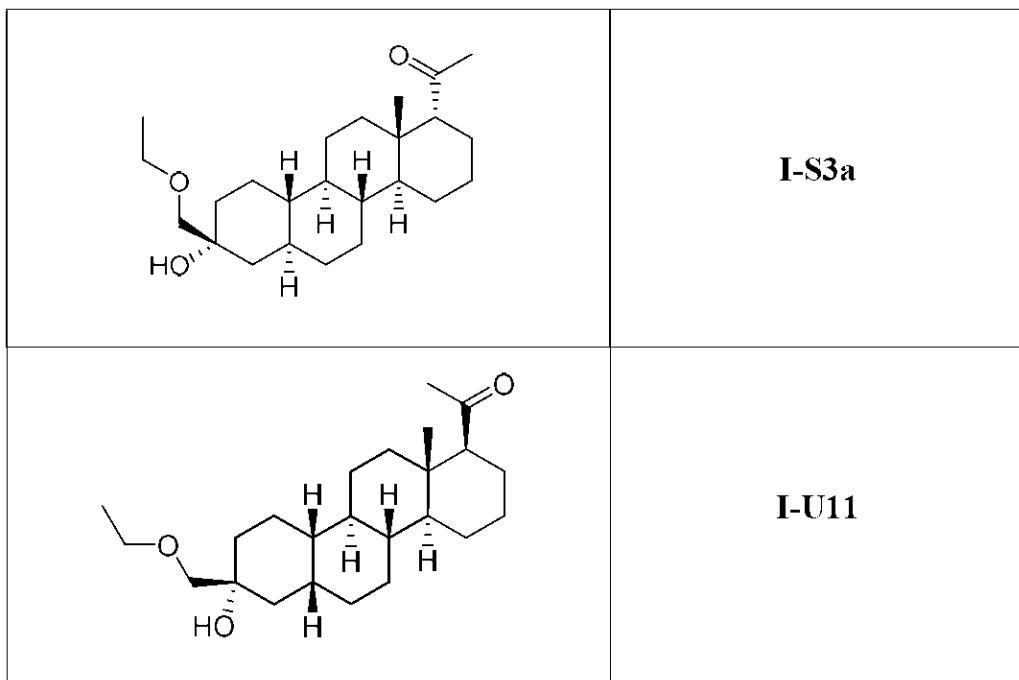
【化 2 2 - 6】



40

50

【化22-7】



10

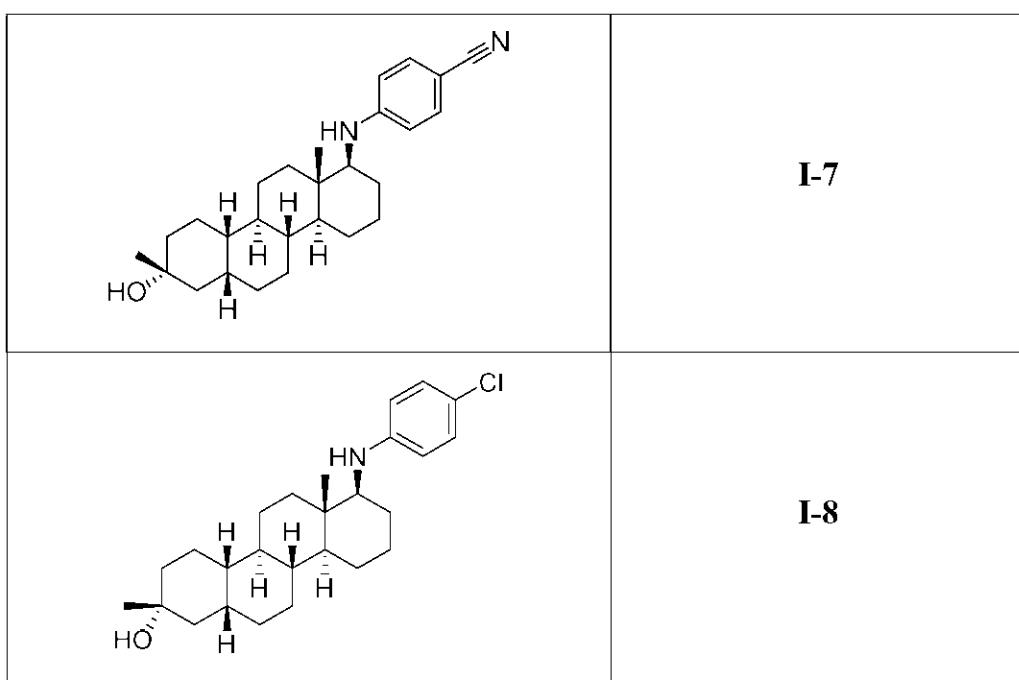
20

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21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23】

前記化合物が、以下

【化23-1】

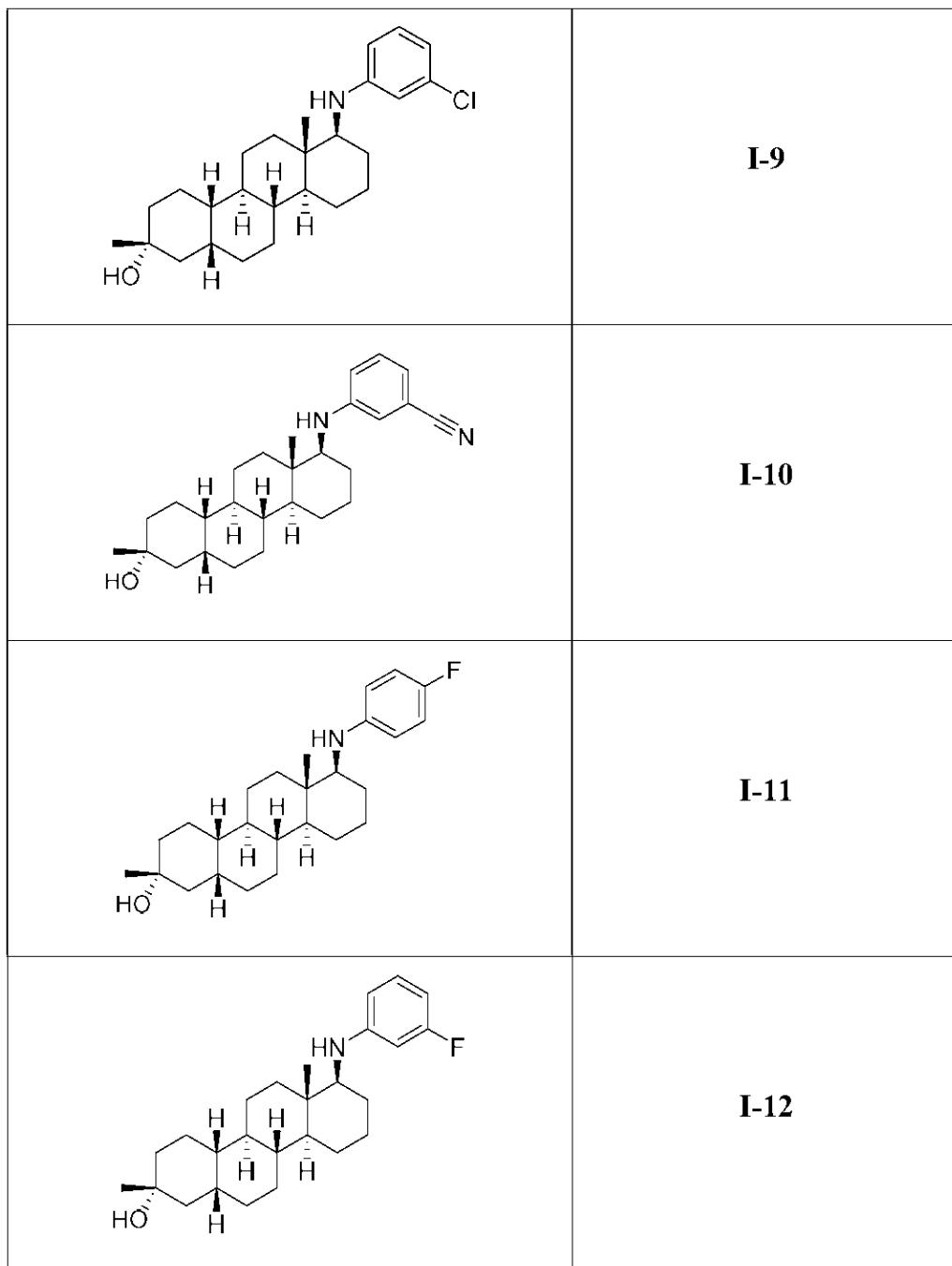


30

40

50

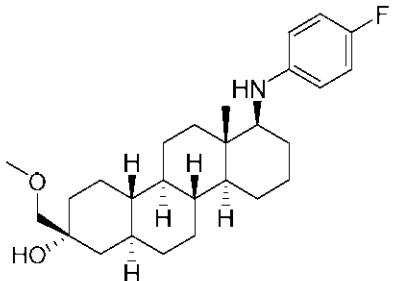
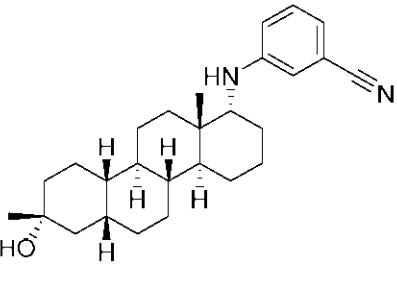
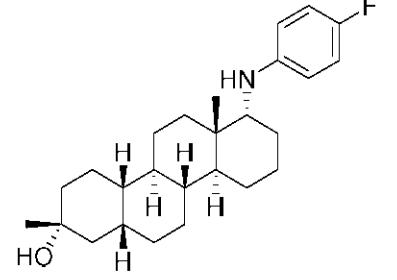
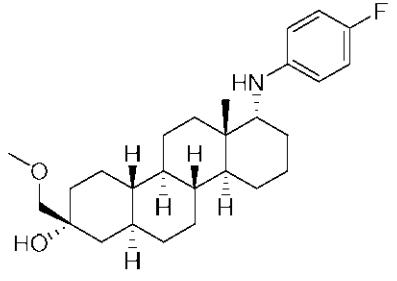
【化 2 3 - 2】



40

50

## 【化 2 3 - 3】

	<b>I-23</b> <span style="float: right;">10</span>
	<b>I-10a</b>
	<b>I-11a</b> <span style="float: right;">20</span>
	<b>I-23a</b> <span style="float: right;">30</span>

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 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】

40

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

20

30

40

50

**【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。

**【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。

**【誤訳訂正7】**

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0 4 2 4

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0 4 2 4】

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（II - I）、式（II - II）、式（III - I）、式（III - II）、式（IV - I）、式（IV - II）、式（V - II）、式（V - III）または式（VI - 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。

【誤訳訂正 8】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0 4 3 1

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0 4 3 1】

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、様々なビヒクリ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。

【誤訳訂正 9】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0 4 3 6

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0 4 3 6】

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。

【誤訳訂正 10】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0 4 4 2

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0 4 4 2】

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。

【誤訳訂正 11】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0 4 4 3

10

20

30

40

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。10

【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润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、またはリングル液が挙げられるが、これらに限定されない。20

【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と指し、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。30

【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。

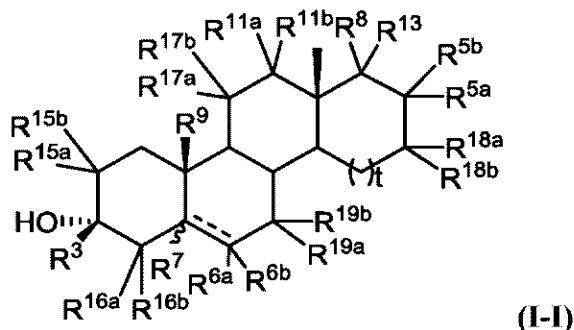
(項1)

式(I-I)：

40

50

## 【化424】



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425】

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；

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、ヒドロキシリル、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、ヒドロキシリル、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；

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<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>；

40

20

30

40

50

$A^1$ )<sub>2</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>R<sup>A</sup><sup>2</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>OR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>A</sup><sup>2</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>OR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>OR<sup>A</sup><sup>1</sup>であり、ここでR<sup>A</sup><sup>1</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>A</sup><sup>2</sup>、-C(O)R<sup>A</sup><sup>2</sup>であるか、または2つのR<sup>A</sup><sup>1</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>A</sup><sup>2</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るか；

またはR<sup>8</sup>およびR<sup>13</sup>が一緒になってオキソ(=O)基を形成し、ここでR<sup>8</sup>およびR<sup>13</sup>が一緒になってオキソ(=O)基を形成する場合、R<sup>3</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る；

ここで、R<sup>5a</sup>、R<sup>5b</sup>、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、-OR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-SRA<sup>1</sup>、-N(R<sup>A</sup><sup>1</sup>)<sub>2</sub>、-N(R<sup>A</sup><sup>1</sup>)、-CN(R<sup>A</sup><sup>1</sup>)<sub>2</sub>、-C(O)R<sup>A</sup><sup>1</sup>、-C(=O)N(R<sup>A</sup><sup>1</sup>)<sub>2</sub>、-OC(=O)R<sup>A</sup><sup>1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-OC(=O)SRA<sup>1</sup>、-OC(=O)N(R<sup>A</sup><sup>1</sup>)<sub>2</sub>、-SC(=O)R<sup>A</sup><sup>2</sup>、-SC(=O)OR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-SC(=O)SR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-SC(=O)N(R<sup>A</sup><sup>1</sup>)<sub>2</sub>、-NH<sub>2</sub>、-NHC(=O)R<sup>A</sup><sup>1</sup>、-NHC(=O)OR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-NHC(=O)SRA<sup>1</sup>、-NHC(=O)N(R<sup>A</sup><sup>1</sup>)<sub>2</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>OR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>A</sup><sup>2</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>OR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-S(=O)R<sup>A</sup><sup>2</sup>、-SO<sub>2</sub>R<sup>A</sup><sup>2</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>OR<sup>A</sup><sup>1</sup>でなければならず；

ここで、R<sup>8</sup>とR<sup>13</sup>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<sup>6a</sup>またはR<sup>6b</sup>の一方およびR<sup>7</sup>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<sup>15a</sup>およびR<sup>15b</sup>が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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>D</sup><sup>1</sup>、-OC(=O)R<sup>D</sup><sup>1</sup>、-NH<sub>2</sub>、-N(R<sup>D</sup><sup>1</sup>)<sub>2</sub>、または-NR<sup>D</sup><sup>1</sup>C(=O)R<sup>D</sup><sup>1</sup>であり、ここでR<sup>D</sup><sup>1</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に記載の化合物。

#### (項3)

R<sup>15a</sup>およびR<sup>15b</sup>が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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>D</sup><sup>1</sup>、-OC(=O)R<sup>D</sup><sup>1</sup>、-NH<sub>2</sub>、または-N(R<sup>D</sup><sup>1</sup>)<sub>2</sub>であり、ここでR<sup>D</sup><sup>1</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、置換もしくは

10

20

30

40

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<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。

(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<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>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<sub>3</sub>、-CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-OH、-OCH<sub>3</sub>、または-CH(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>である、上記項1~7のいずれか1項に記載の化合物。

(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、ヒドロキシリル、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。

(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、ヒドロキシリル、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<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。

(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

10

20

30

40

50

る、上記項1～12のいずれか1項に記載の化合物。

(項14)

$R^{16a}$ および $R^{16b}$ の各々が独立して、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルコキシハロ、または-OHである、上記項1～13のいずれか1項に記載の化合物。

(項15)

$R^{16a}$ または $R^{16b}$ 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1～14のいずれか1項に記載の化合物。

(項16)

$R^{17a}$ または $R^{17b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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1～15のいずれか1項に記載の化合物。 10

(項17)

$R^{17a}$ または $R^{17b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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1～16のいずれか1項に記載の化合物。 20

(項18)

$R^{17a}$ 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<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1～17のいずれか1項に記載の化合物。 30

(項19)

$R^{17a}$ および $R^{17b}$ の両方が水素である、上記項1～18のいずれか1項に記載の化合物。

(項20)

$R^{17a}$ 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1～19のいずれか1項に記載の化合物。

(項21)

$R^{17a}$ および $R^{17b}$ の各々が独立して、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルコキシハロ、または-OHである、上記項1～20のいずれか1項に記載の化合物。 40

(項22)

$R^{17a}$ または $R^{17b}$ 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1～21のいずれか1項に記載の化合物。

(項23)

$R^{18a}$ または $R^{18b}$ が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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1～22のいずれか1項に記載の化合物。 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1～22のいずれか1項に記載の化合物。

(項24)

$R^{18a}$ 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<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1～23のいずれか1項に記載の化合物。 10

(項25)

$R^{18a}$ 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<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1～24のいずれか1項に記載の化合物。 20

(項26)

$R^{18a}$ および $R^{18b}$ の両方が水素である、上記項1～25のいずれか1項に記載の化合物。 20

(項27)

$R^{18a}$ 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1～26のいずれか1項に記載の化合物。

(項28)

$R^{18a}$ および $R^{18b}$ の各々が独立して、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルコキシハロ、または-OHである、上記項1～27のいずれか1項に記載の化合物。

(項29)

$R^{18a}$ または $R^{18b}$ が、-CH<sub>3</sub>、-CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-OH、-OCH<sub>3</sub>、または-CH(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>である、上記項1～28のいずれか1項に記載の化合物。 30

(項30)

$R^{19a}$ 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<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1～29のいずれか1項に記載の化合物。

(項31)

$R^{19a}$ 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<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1～30のいずれか1項に記載の化合物。 40

(項32)

$R^{19a}$ 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<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、

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1～31のいずれか1項に記載の化合物。

(項33)

$R^{19a}$ および $R^{19b}$ の両方が水素である、上記項1～32のいずれか1項に記載の化合物。

(項34)

$R^{19a}$ 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1～33のいずれか1項に記載の化合物。

(項35)

$R^{19a}$ 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1～34のいずれか1項に記載の化合物。

10

(項36)

$R^{19a}$ または $R^{19b}$ が、-CH<sub>3</sub>、-CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-OH、-OCH<sub>3</sub>、または-CH(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>である、上記項1～35のいずれか1項に記載の化合物。

(項37)

$R^7$ が、シス位の水素である、上記項1～36のいずれか1項に記載の化合物。

(項38)

$R^7$ が、トランス位の水素である、上記項1～37のいずれか1項に記載の化合物。

20

(項39)

$R^7$ が、シス位のメチルである、上記項1～38のいずれか1項に記載の化合物。

(項40)

$R^7$ が、トランス位のメチルである、上記項1～39のいずれか1項に記載の化合物。

(項41)

tが、1である、上記項1～40のいずれか1項に記載の化合物。

(項42)

tが、2である、上記項1～41のいずれか1項に記載の化合物。

(項43)

$R^3$ 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1～42のいずれか1項に記載の化合物。

30

(項44)

$R^3$ 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1～43のいずれか1項に記載の化合物。

(項45)

$R^3$ が、置換もしくは非置換アルキルである、上記項1～44のいずれか1項に記載の化合物。

(項46)

$R^3$ が、水素である、上記項1～45のいずれか1項に記載の化合物。

40

(項47)

$R^3$ が、置換アルキルである、上記項1～46のいずれか1項に記載の化合物。

(項48)

$R^3$ が、非置換アルキルである、上記項1～47のいずれか1項に記載の化合物。

(項49)

$R^3$ が、メチルである、上記項1～48のいずれか1項に記載の化合物。

(項50)

$R^9$ が、水素である、上記項1～49のいずれか1項に記載の化合物。

(項51)

$R^9$ が、置換アルキルである、上記項1～50のいずれか1項に記載の化合物。

50

(項 5 2)

R<sup>9</sup>が、非置換アルキルである、上記項1～51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1～52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1～53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1～54のいずれか1項に記載の化合物。

(項 5 6)

R<sup>6 a</sup>およびR<sup>6 b</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1～55のいずれか1項に記載の化合物。 10

(項 5 7)

R<sup>6 a</sup>およびR<sup>6 b</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1～56のいずれか1項に記載の化合物。

(項 5 8)

R<sup>6 a</sup>およびR<sup>6 b</sup>が独立して、水素または置換アルキルである、上記項1～57のいずれか1項に記載の化合物。

(項 5 9)

R<sup>6 a</sup>およびR<sup>6 b</sup>が独立して、水素または非置換アルキルである、上記項1～58のいずれか1項に記載の化合物。 20

(項 6 0)

R<sup>6 a</sup>およびR<sup>6 b</sup>の両方が水素である、上記項1～59のいずれか1項に記載の化合物。

(項 6 1)

R<sup>6 a</sup>が、ハロまたはアルキルであり、R<sup>6 b</sup>は、水素である、上記項1～60のいずれか1項に記載の化合物。

(項 6 2)

R<sup>6 a</sup>およびR<sup>6 b</sup>の両方がハロである、上記項1～61のいずれか1項に記載の化合物。 30

(項 6 3)

R<sup>6 a</sup>およびR<sup>6 b</sup>の両方がアルキルである、上記項1～62のいずれか1項に記載の化合物。

(項 6 4)

R<sup>6 a</sup>およびR<sup>6 b</sup>が一緒になってオキソ基を形成する、上記項1～63のいずれか1項に記載の化合物。

(項 6 5)

R<sup>11 a</sup>またはR<sup>11 b</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>D 1</sup>、-OC(=O)R<sup>D 1</sup>、-NH<sub>2</sub>、-N(R<sup>D 1</sup>)<sub>2</sub>、または-NR<sup>D 1</sup>C(=O)R<sup>D 1</sup>であり、ここでR<sup>D 1</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1～67のいずれか1項に記載の化合物。 40

(項 6 6)

R<sup>11 a</sup>またはR<sup>11 b</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>D 1</sup>、-OC(=O)R<sup>D 1</sup>、-NH<sub>2</sub>、または-N(R<sup>D 1</sup>)<sub>2</sub>であり、ここでR<sup>D 1</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1～67のいずれか1項に記載の化合物。 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<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、-ORA<sup>1</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>、または-OC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>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、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<sup>A1</sup>、-C(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OC(=O)R<sup>A1</sup>、または-OC(=O)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、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<sup>A1</sup>であり、ここでR<sup>A1</sup>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、-ORA<sup>1</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>、-OC(=O)R<sup>A1</sup>、または-OC(=O)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、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。

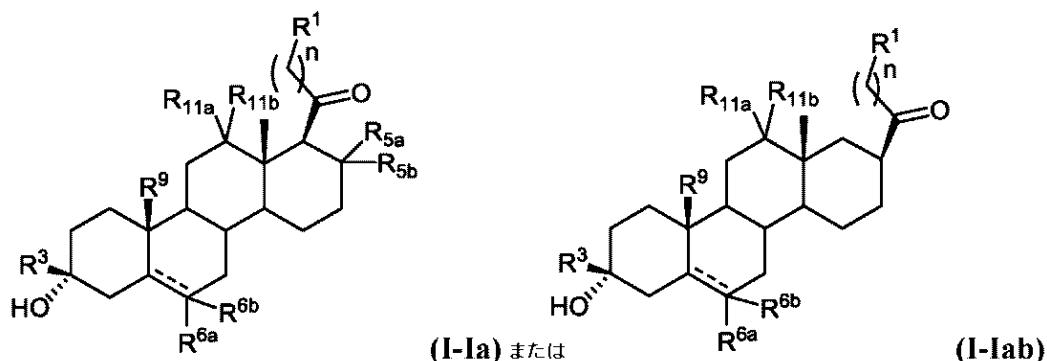
(項 7 7 )

$R^{5a}$  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 - Ia) または式 (I - Ib)

【化 4 2 7】



20

30

40

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；

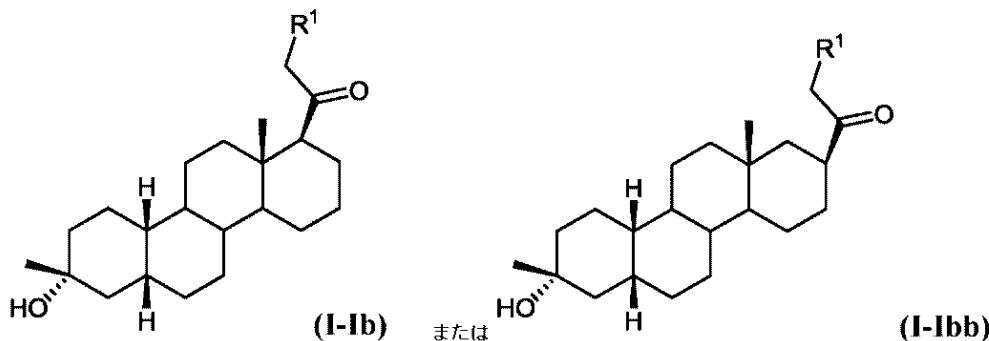
$n$  は、0、1、2、または 3 である、上記項 1 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 7 9 )

前記化合物が、式 (I - Ib) または式 (I - Ibb)

50

## 【化428】



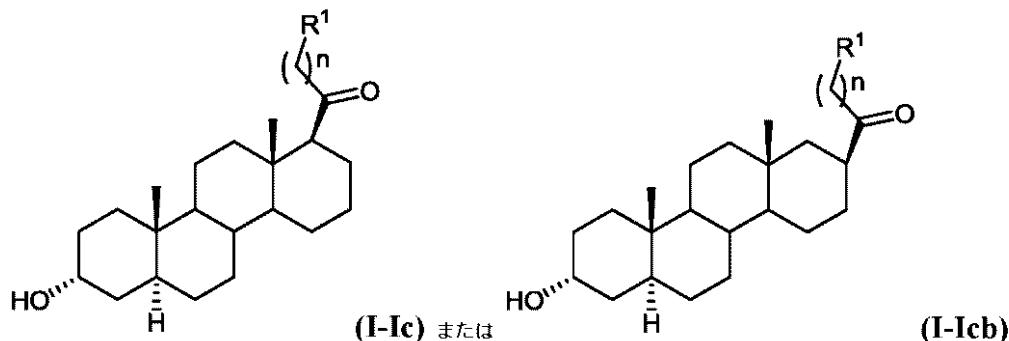
10

の化合物である、上記項78に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項80)

前記化合物が、式(I-Ic)または式(I-Icb)

## 【化429】



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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)$   
 $OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^A$   
 $^2$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHCO(=O)R^{A1}$ 、 $-NHCO(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHCO(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHCO(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S$   
 $-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^A$   
 $^2$ 、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ヘテロアリール、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78に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項81)

$R^1$ 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

40

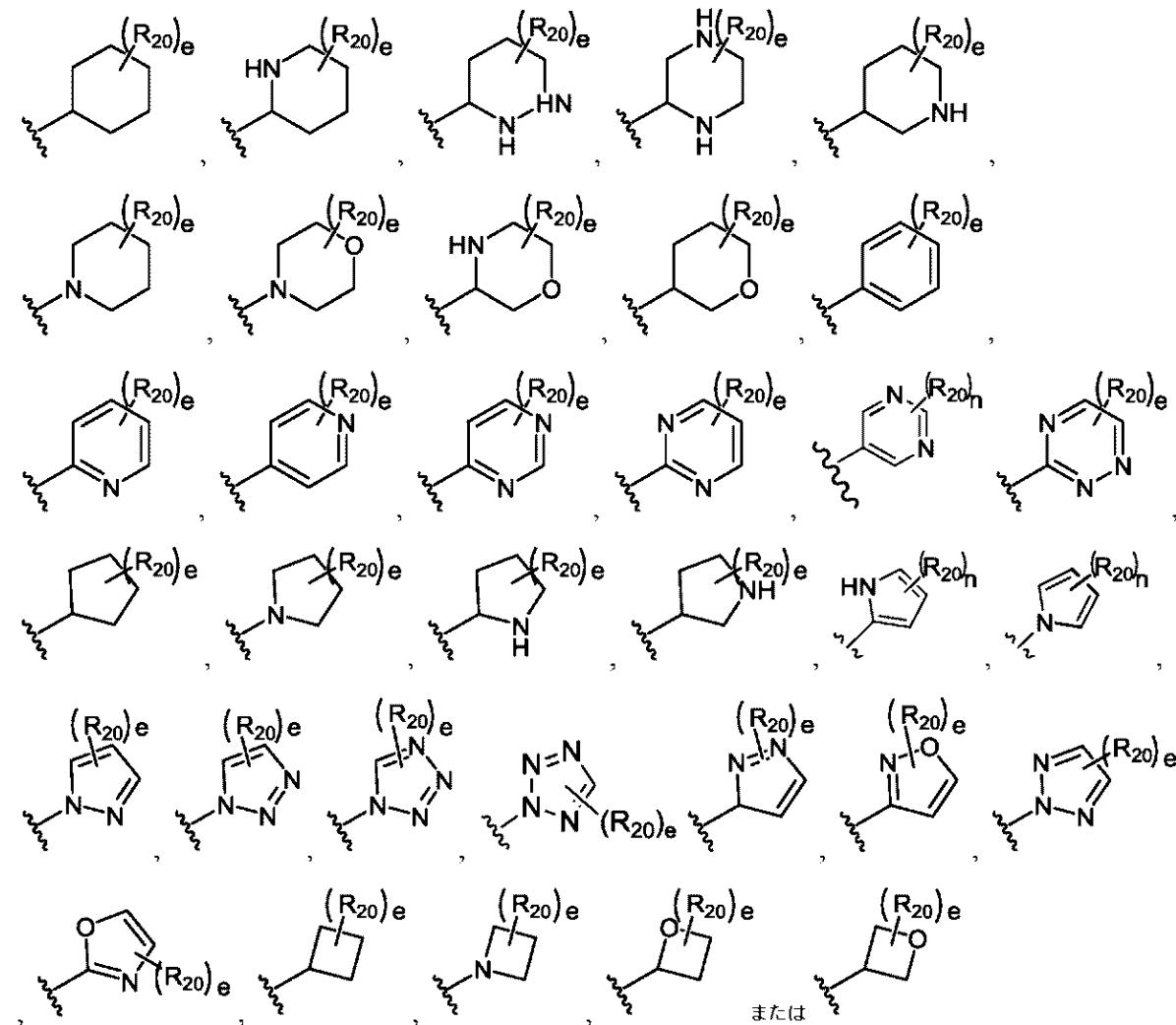
50

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】



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>～6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になって、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になって、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；

10

20

30

40

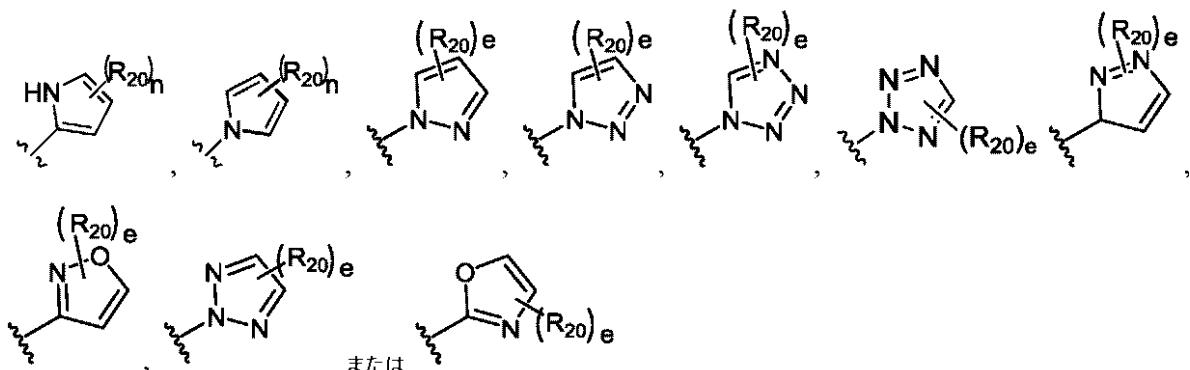
50

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 8 3 )

R<sup>1</sup> が、

【化 4 3 1】



であり、

ここで  $R_{20}$  の各々の存在は独立して、ハロゲン、-NO<sub>2</sub>、-CN、-ORGA、-N(RGA)<sub>2</sub>、-C(=O)RGA、-C(=O)ORG A、-OC(=O)RGA、-OC(=O)ORG A、-C(=O)N(RGA)<sub>2</sub>、-N(RGA)C(=O)RGA、-OC(=O)N(RGA)<sub>2</sub>、-N(RGA)C(=O)ORG A、-S(=O)<sub>2</sub>RGA、-S(=O)<sub>2</sub>ORG A、-OS(=O)<sub>2</sub>RGA、-S(=O)<sub>2</sub>N(RGA)<sub>2</sub>、または-N(RGA)S(=O)<sub>2</sub>RGA；置換もしくは非置換C<sub>1~6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3~4</sub>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RGAが介在原子と一緒にになって、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：

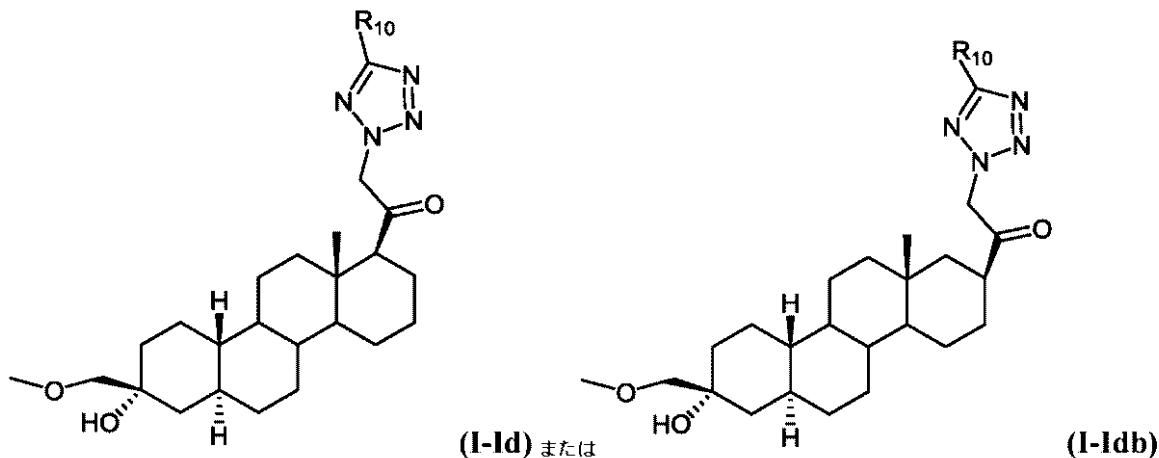
ここで  $R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1 \sim 6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_{2 \sim 6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_{2 \sim 6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_{3 \sim 6}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3 ~ 6 員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にになって、置換もしくは非置換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 7 8 ~ 8 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 8 4 )

前記化合物が、式(I-Id)または式(I-Idb)

## 【化432】



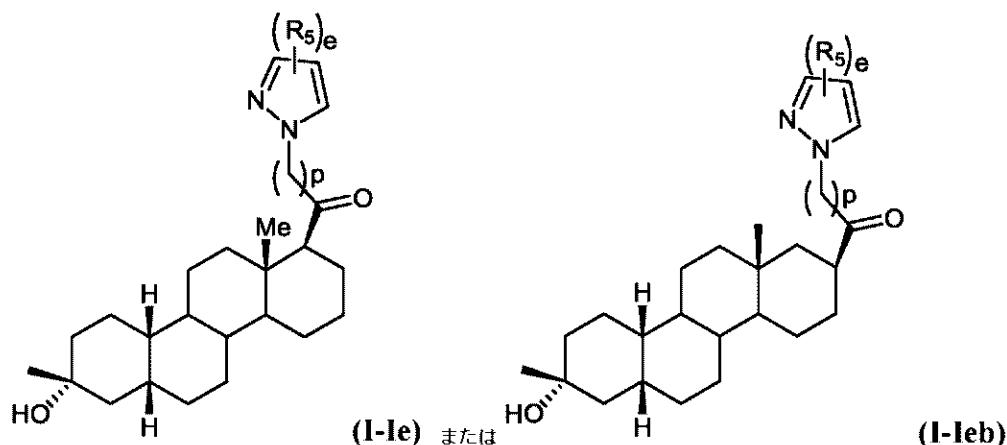
10

の化合物であり、

ここで、R<sub>10</sub>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85)

前記化合物が、式(I-Ie)または式(I-leb)

## 【化433】



20

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<sub>5</sub>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。

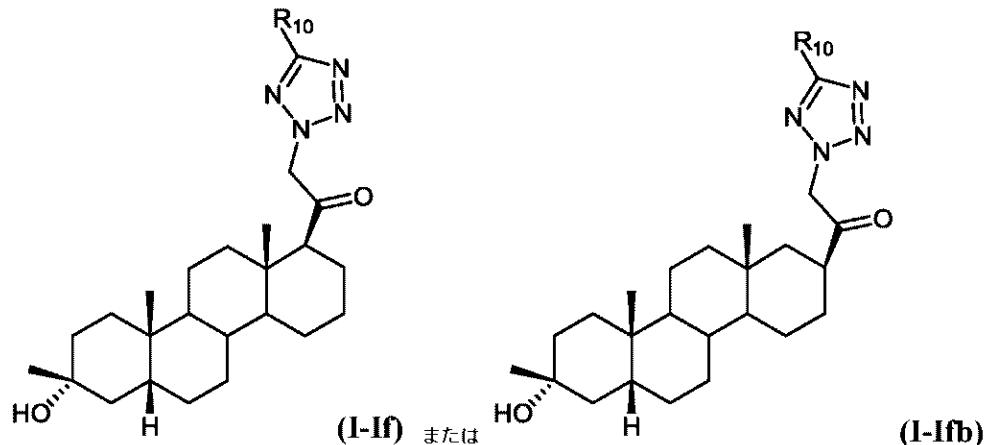
(項86)

前記化合物が、式(I-If)または式(I-ifb)

40

50

## 【化434】

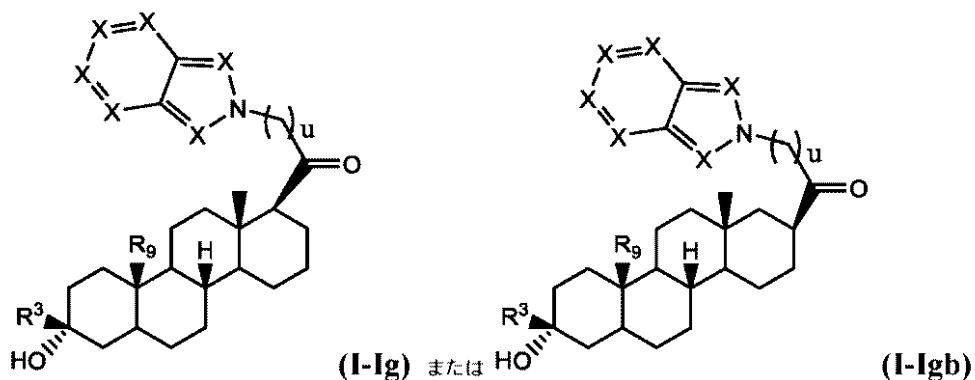


の化合物であり、

ここで、R<sub>10</sub>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435】



の化合物であり、

ここで、各Xは独立して、-C(R<sup>N</sup>)-、-C(R<sup>N</sup>)<sub>2</sub>-、-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>1~6</sub>アルキル、C(=O)R<sup>G A</sup>、-C(=O)OR<sup>G A</sup>、-C(=O)N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G A</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>であり；

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>1~6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3~6</sub>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になって、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；

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)

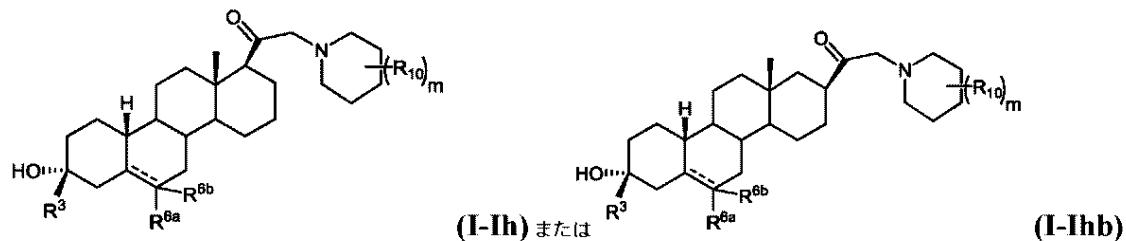
前記化合物が、式(I-Ih)または式(I-Ihb)

30

40

50

## 【化436】



の化合物であり、

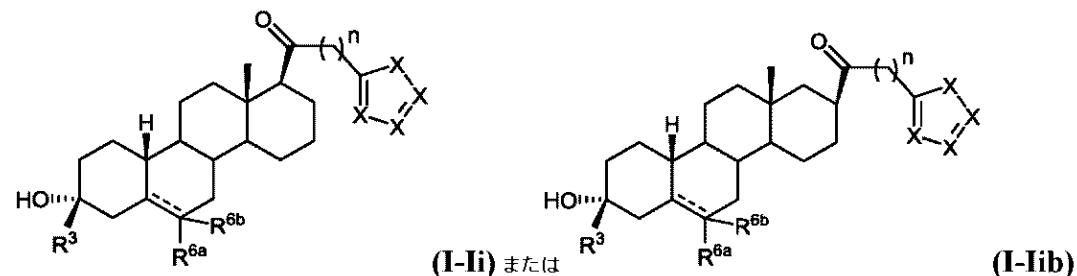
10

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89)

前記化合物が、式(I-Ii)または式(I-Iib)

## 【化437】



の化合物であり、

20

ここで、各  $X$  は独立して、-C( $R^N$ )-、-C( $R^N$ )<sub>2</sub>-、-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<sup>GA</sup>、-C(=O)N( $R^{GA}$ )<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub> $R^{GA}$ 、または-S(=O)<sub>2</sub>N( $R^{GA}$ )<sub>2</sub> であり；

30

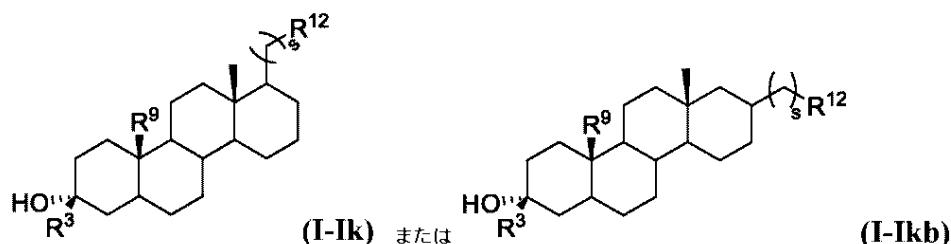
$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_2 \sim 6$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_3 \sim 6$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にになって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロアリール環を形成し、 $n$  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90)

前記化合物が、(I-Ik)または式(I-Ikb)

40

## 【化438】



の化合物であり、

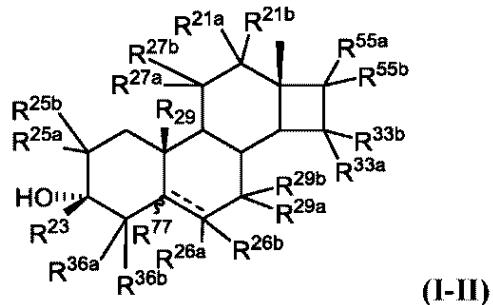
50

ここで、 $s$  は、0、1、または2であり； $R^{12}$  は、 $-N(R^a b)_2$ 、 $-OR^a b$  であり、ここで  $R^a b$  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】



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、

$R^7$  は、水素またはメチルであるか、または

20

【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、ヒドロキシリル、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；

$R^{21a}$ 、 $R^{21b}$ 、 $R^{25a}$ 、 $R^{25b}$ 、 $R^{36a}$ 、 $R^{36b}$ 、 $R^{27a}$ 、 $R^{27b}$ 、 $R^{29}$ 、 $R^{33a}$ 、 $R^{33b}$ 、 $R^{35a}$ 、 $R^{35b}$ 、 $R^{23}$ 、 $R^{77}$ 、 $R^{26a}$ 、 $R^{26b}$ 、 $R^{29a}$ 、 $R^{29b}$ 、 $R^{36a}$ 、 $R^{36b}$ 、 $R^{21a}$  および  $R^{21b}$  の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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、-O R<sup>A 1</sup>、-S R<sup>A 1</sup>、-N(R<sup>A 1</sup>)<sub>2</sub>、-N(R<sup>A 1</sup>)、-CN(R<sup>A 1</sup>)<sub>2</sub>、-C(O)R<sup>A 1</sup>、-C(=O)N(R<sup>A 1</sup>)<sub>2</sub>、-OC(=O)R<sup>A 1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A 1</sup>、-OC(=O)SR<sup>A 1</sup>、-OC(=O)N(R<sup>A 1</sup>)<sub>2</sub>、-SC(=O)R<sup>A 2</sup>、-SC(=O)OR<sup>A 1</sup>、-SC(=O)SR<sup>A 1</sup>、-SC(=O)N(R<sup>A 1</sup>)<sub>2</sub>、-NHC(=O)R<sup>A 1</sup>、-NHC(=O)OR<sup>A 1</sup>、-NHC(=O)SR<sup>A 1</sup>、-NHC(=O)N(R<sup>A 1</sup>)<sub>2</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>R<sup>A 2</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>OR<sup>A 1</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>A 2</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>、-S(=O)R<sup>A 2</sup>、-SO<sub>2</sub>R<sup>A 2</sup>、また  
は-S(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>であり、ここでR<sup>A 1</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>A 2</sup>、-C(O)R<sup>A 2</sup>であるか、または2つのR<sup>A 1</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>A 2</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；

ここで、

【化441】

10

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<sup>2 6 a</sup>またはR<sup>2 6 b</sup>の一方は存在せず、単結合が環B内に存在する場合、C<sub>5</sub>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<sup>2 5 a</sup>およびR<sup>2 5 b</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>D 1</sup>、-OC(=O)R<sup>D 1</sup>、-NH<sub>2</sub>、-N(R<sup>D 1</sup>)<sub>2</sub>、または-NR<sup>D 1</sup>C(=O)R<sup>D 1</sup>であり、ここでR<sup>D 1</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91に記載の化合物。

30

(項93)

R<sup>2 5 a</sup>およびR<sup>2 5 b</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>D 1</sup>、-OC(=O)R<sup>D 1</sup>、-NH<sub>2</sub>、または-N(R<sup>D 1</sup>)<sub>2</sub>であり、ここでR<sup>D 1</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<sup>2 5 a</sup>およびR<sup>2 5 b</sup>が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、-OR<sup>D 1</sup>、-OC(=O)R<sup>D 1</sup>、-NH<sub>2</sub>、-N(R<sup>D 1</sup>)<sub>2</sub>、または-NR<sup>D 1</sup>C(=O)R<sup>D 1</sup>であり、ここでR<sup>D 1</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<sup>2 5 a</sup>およびR<sup>2 5 b</sup>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 -  $CH(C_3H_3)_2$  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、ヒドロキシリル、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 100 )

$R^{36a}$  または  $R^{36b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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 101 )

$R^{36a}$  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 ~ 100 のいずれか 1 項に記載の化合物。 30

(項 102 )

$R^{36a}$  および  $R^{36b}$  の両方が水素である、上記項 9 1 ~ 101 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 103 )

$R^{36a}$  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 ~ 102 のいずれか 1 項に記載の化合物。 40

(項 104 )

$R^{36a}$  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 ~ 103 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 105 )

$R^{36a}$  または  $R^{36b}$  が、-  $CH_3$ 、-  $CH_2CH_3$ 、- OH、-  $OCH_3$ 、または -  $CH(C_3H_3)_2$  である、上記項 9 1 ~ 104 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 106 )

$R^{27a}$  または  $R^{27b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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<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91～105のいずれか1項に記載の化合物。

(項107)

R<sup>27a</sup>またはR<sup>27b</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<sup>27a</sup>またはR<sup>27b</sup>が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、-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<sup>27a</sup>およびR<sup>27b</sup>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<sup>27a</sup>およびR<sup>27b</sup>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<sup>27a</sup>およびR<sup>27b</sup>の各々が独立して、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>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<sup>27a</sup>またはR<sup>27b</sup>が、-CH<sub>3</sub>、-CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-OH、-OCH<sub>3</sub>、または-CH(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>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<sup>29a</sup>またはR<sup>29b</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<sup>29a</sup>またはR<sup>29b</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)

10

20

30

40

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、 $-OR^D_1$ 、 $-O\bar{C}(=O)R^D_1$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^D_1)_2$ 、または $-NR^D_1C(=O)R^D_1$ であり、ここで  $R^D_1$  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、 $C_1~C_6$  アルキル、 $C_1~C_6$  ハロアルキル、 $C_1~C_6$  アルコキシ、 $C_1~C_6$  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 $-CH(C_2H_5)_2$  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、 $-OR^D_1$ 、 $-O\bar{C}(=O)R^D_1$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^D_1)_2$ 、または $-NR^D_1C(=O)R^D_1$  であり、ここで  $R^D_1$  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、 $-OR^D_1$ 、 $-O\bar{C}(=O)R^D_1$ 、 $-NH_2$ 、または $-N(R^D_1)_2$  であり、ここで  $R^D_1$  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、 $-OR^D_1$ 、 $-O\bar{C}(=O)R^D_1$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^D_1)_2$ 、または $-NR^D_1C(=O)R^D_1$  であり、ここで  $R^D_1$  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、 $C_1~C_6$  アルキル、 $C_1~C_6$  ハロア

10

20

30

40

50

ルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルコキシハロ、または-OHである、上記項91～124のいずれか1項に記載の化合物。

(項126)

R<sup>21a</sup>またはR<sup>21b</sup>が、-CH<sub>3</sub>、-CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-OH、-OCH<sub>3</sub>、または-CH(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>である、上記項91～125のいずれか1項に記載の化合物。

(項127)

R<sup>77</sup>が、シス位の水素である、上記項91～126のいずれか1項に記載の化合物。

(項128)

R<sup>77</sup>が、トランス位の水素である、上記項91～127のいずれか1項に記載の化合物。

10

(項129)

R<sup>77</sup>が、シス位のメチルである、上記項91～128のいずれか1項に記載の化合物。

(項130)

R<sup>77</sup>が、トランス位のメチルである、上記項91～129のいずれか1項に記載の化合物。

(項131)

R<sup>23</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91～130のいずれか1項に記載の化合物。

(項132)

R<sup>23</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91～131のいずれか1項に記載の化合物。

20

(項133)

R<sup>23</sup>が、置換もしくは非置換アルキルである、上記項91～132のいずれか1項に記載の化合物。

(項134)

R<sup>23</sup>が、水素である、上記項91～133のいずれか1項に記載の化合物。

(項135)

R<sup>23</sup>が、置換アルキルである、上記項91～134のいずれか1項に記載の化合物。

30

(項136)

R<sup>23</sup>が、非置換アルキルである、上記項91～135のいずれか1項に記載の化合物。

(項137)

R<sup>23</sup>が、メチルである、上記項91～136のいずれか1項に記載の化合物。

(項138)

R<sup>29</sup>が、水素である、上記項91～137のいずれか1項に記載の化合物。

(項139)

R<sup>29</sup>が、置換アルキルである、上記項91～138のいずれか1項に記載の化合物。

(項140)

R<sup>29</sup>が、非置換アルキルである、上記項91～139のいずれか1項に記載の化合物。

40

(項141)

R<sup>29</sup>が、メチルである、上記項91～140のいずれか1項に記載の化合物。

(項142)

R<sup>29</sup>が、-OCH<sub>3</sub>である、上記項91～141のいずれか1項に記載の化合物。

(項143)

R<sup>29</sup>が、エチルである、上記項91～142のいずれか1項に記載の化合物。

(項144)

R<sup>26a</sup>およびR<sup>26b</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91～143のいずれか1項に記載の化合物。

50

(項145)

$R^{26a}$  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91～144のいずれか1項に記載の化合物。

(項146)

$R^{26a}$  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91～145のいずれか1項に記載の化合物。

(項147)

$R^{26a}$  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91～146のいずれか1項に記載の化合物。

(項148)

$R^{26a}$  および  $R^{26b}$  の両方が水素である、上記項91～147のいずれか1項に記載の化合物。

(項149)

$R^{26a}$  が、ハロまたはアルキルであり、 $R^{26b}$  が、水素である、上記項91～148のいずれか1項に記載の化合物。

(項150)

$R^{26a}$  および  $R^{26b}$  の両方がハロである、上記項91～149のいずれか1項に記載の化合物。

(項151)

$R^{26a}$  および  $R^{26b}$  の両方がアルキルである、上記項91～150のいずれか1項に記載の化合物。

(項152)

$R^{26a}$  および  $R^{26b}$  が一緒にになってオキソ基を形成する、上記項91～151のいずれか1項に記載の化合物。

(項153)

$R^{55a}$  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91～152のいずれか1項に記載の化合物。

(項154)

$R^{55a}$  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91～153のいずれか1項に記載の化合物。

(項155)

$R^{55a}$  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91～154のいずれか1項に記載の化合物。

(項156)

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155に記載の化合物。

(項157)

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155に記載の化合物。

(項158)

10

20

30

40

50

R<sup>33a</sup>およびR<sup>33b</sup>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<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>、-OC(=O)R<sup>A1</sup>、または-OC(=O)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、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<sup>33a</sup>およびR<sup>33b</sup>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<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>、-OC(=O)R<sup>A1</sup>、または-OC(=O)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。

20

(項160)

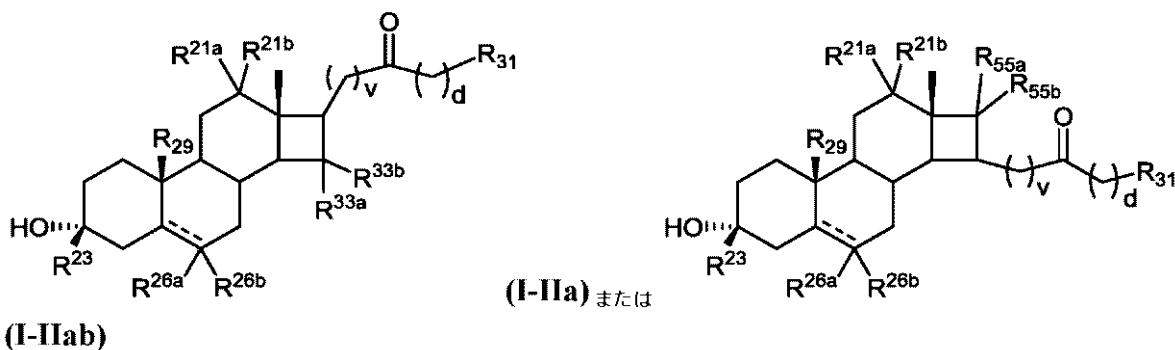
R<sup>33a</sup>およびR<sup>33b</sup>が各々、水素である、上記項91～159のいずれか1項に記載の化合物。

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<sup>31</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、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>)、-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>、-NHCO(=O)R<sup>A1</sup>、-NHCO(=O)OR<sup>A1</sup>、-NHCO(=O)SR<sup>A1</sup>、-NHCO(=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、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

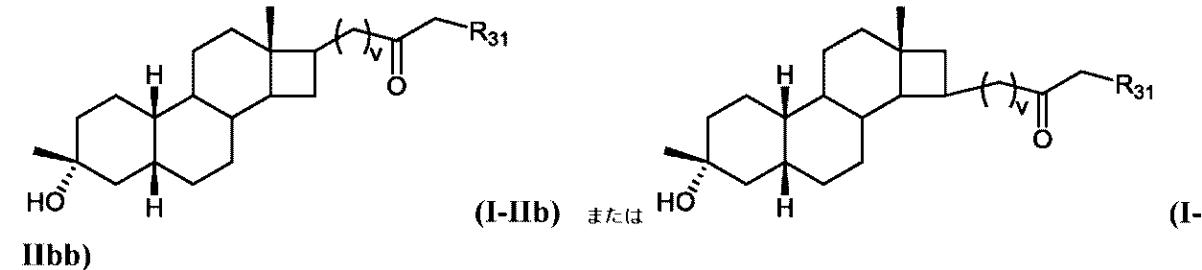
る場合の窒素保護基であるか、または2つのR<sup>A1</sup>基が一緒になって置換もしくは非置換の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し；R<sup>A2</sup>は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

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<sub>31</sub>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<sup>A1</sup>、-SR<sup>A1</sup>、-N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-N(R<sup>A1</sup>)、-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>、-NHCO(=O)R<sup>A1</sup>、-NHCO(=O)OR<sup>A1</sup>、-NHCO(=O)SR<sup>A1</sup>、-NHCO(=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(=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であるか、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；

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<sup>31</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<sup>31</sup>が、

10

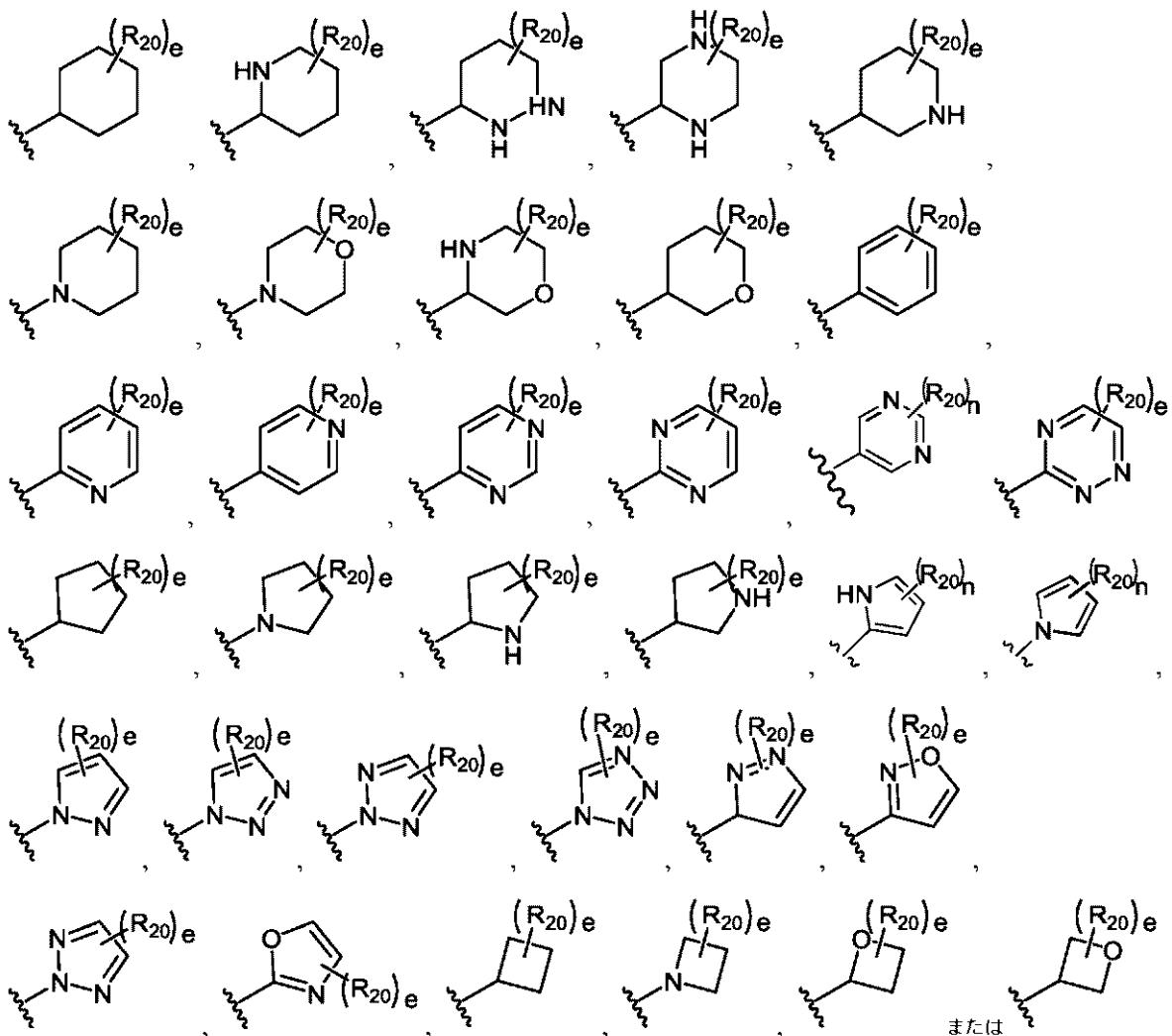
20

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、-NO<sub>2</sub>、-CN、-ORGA、-N(RGA)<sub>2</sub>、-C(=O)RGA、-C(=O)ORG A、-OC(=O)RGA、-OC(=O)ORG A、-C(=O)N(RGA)<sub>2</sub>、-N(RGA)C(=O)RGA、-OC(=O)N(RGA)<sub>2</sub>、-N(RGA)C(=O)ORG A、-S(=O)<sub>2</sub>RGA、-S(=O)<sub>2</sub>ORG A、-OS(=O)<sub>2</sub>RGA、-S(=O)<sub>2</sub>N(RGA)<sub>2</sub>、または-N(RGA)S(=O)<sub>2</sub>RGA；置換もしくは非置換C<sub>1~6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3~4</sub>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RGAが介在原子と一緒にになって、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；

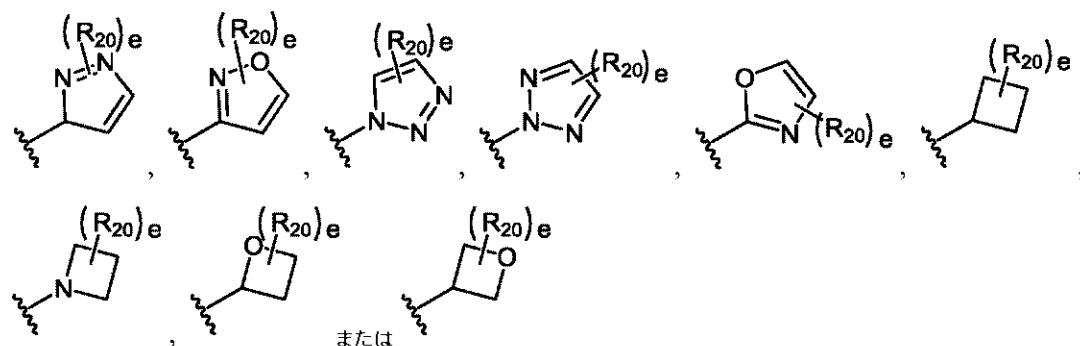
ここで  $R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1\sim 6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_{2\sim 6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_{2\sim 6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_{3\sim 6}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3~6 員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にになって、置換もしくは非置換の炭素環また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 1 6 5 )

$R^{3 \sim 1}$  が、

【化 4 4 5】



10

であり、

ここで  $R_{20}$  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>、-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>1～6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2～6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2～6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3～4</sub>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になって、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 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>1～6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2～6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2～6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3～6</sub>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になって、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-IIId)または式(I-IIIdb)

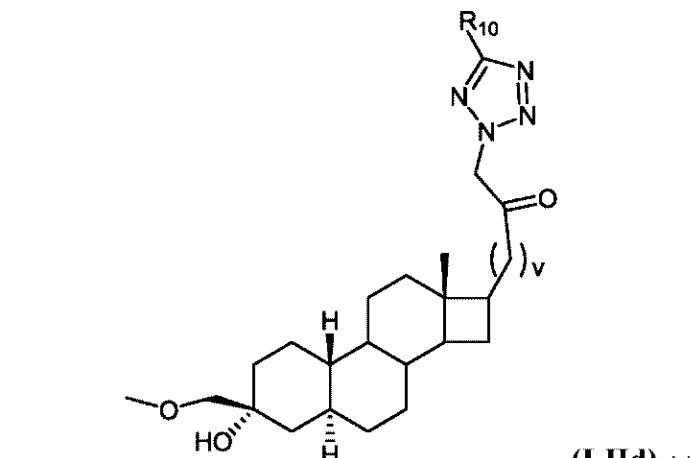
20

30

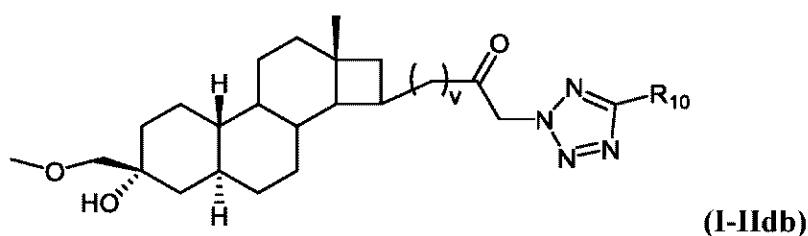
40

50

## 【化446】



(I-IIId) または



(I-IIdb)

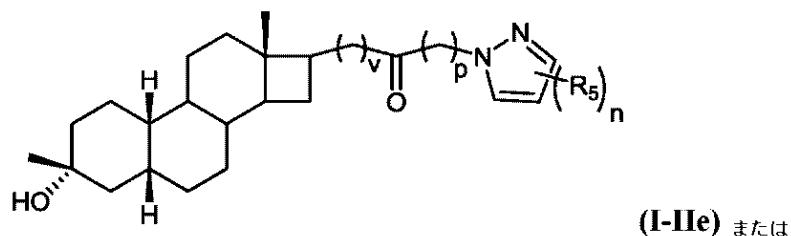
の化合物であり、

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。

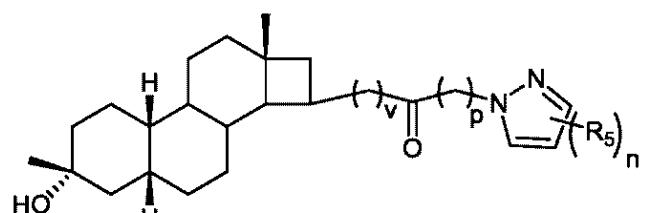
(項167)

前記化合物が、式(I-IIId)または式(I-IIdb)

## 【化447】



(I-IIe) または



(I-IIeb)

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；

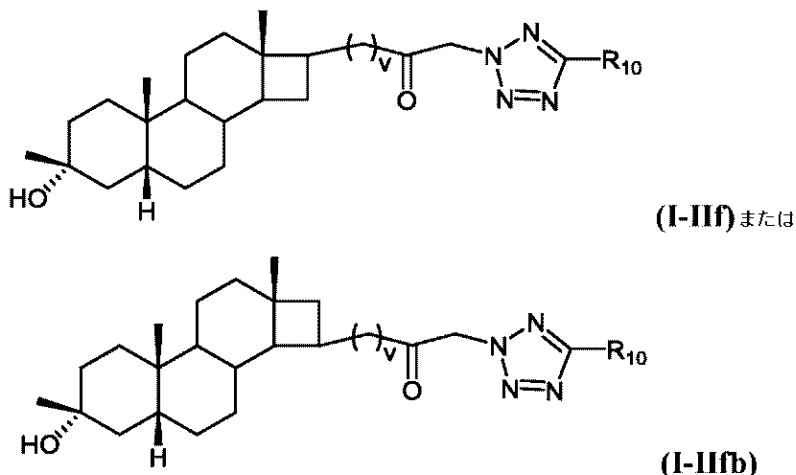
$R_5$  の各々は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項91に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項168)

前記化合物が、式(I-IIIf)または式(I-IIIfb)

50

## 【化448】



10

の化合物であり、

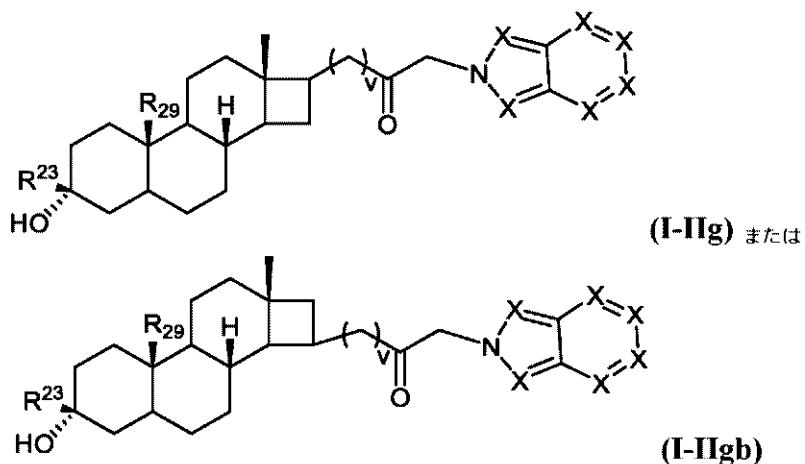
ここで、 $v$  は、0、1、2、または3であり； $R_{10}$  は独立して、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、ヒドロキシリル、またはシアノである、上記項91に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項169)

20

前記化合物が、式(I-IIIfg)または式(I-IIIfgb)

## 【化449】



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 $C_{1\sim 6}$ 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；

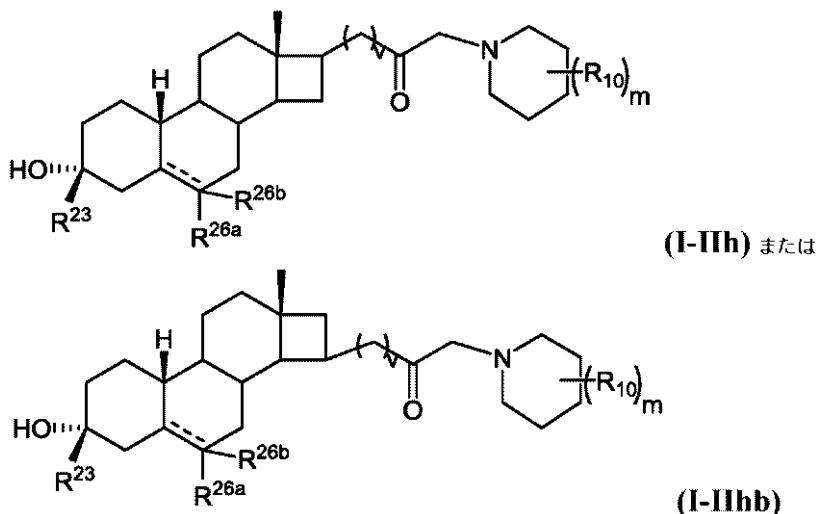
40

$R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換 $C_{1\sim 6}$ 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になって、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-IIf)または式(I-IIIfb)  
【化450】



10

の化合物であり、

ここで、 $\nu$ の各々は、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、またはシアノであり；

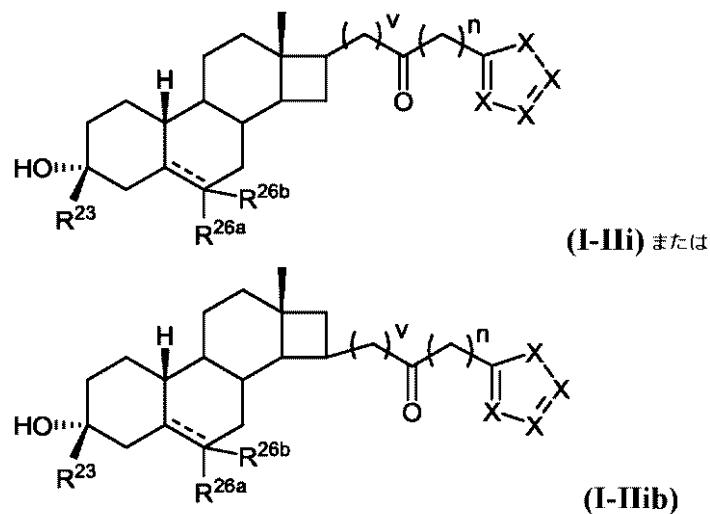
20

$m$ 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-IIIfi)または式(I-IIIfib)

【化451】



30

の化合物であり、

ここで、 $\nu$ 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>1~6</sub>アルキル、C(=O)R<sup>G</sup>A、-C(=O)OR<sup>G</sup>A、-C(=O)N(R<sup>G</sup>A)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G</sup>A、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G</sup>A)<sub>2</sub>であり；

R<sup>G</sup>Aの各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換C<sub>1~6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3~6</sub>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<sup>G A</sup>基が介在原子と一緒にになって、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)

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。  
20

(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<sup>3</sup>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。

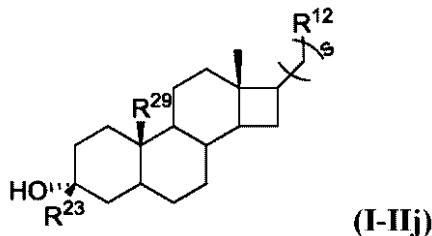
(項181)

R<sup>8</sup>またはR<sup>13</sup>が-C(=O)CH<sub>3</sub>である場合、R<sup>3</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】



の化合物であり、

ここで、sは、0、1、または2であり；R<sup>12</sup>は、-N(R<sup>a b</sup>)<sub>2</sub>、-OR<sup>a b</sup>であり、ここでR<sup>a b</sup>の各々は独立して、H、置換もしくは非置換アルキル、-SO<sub>2</sub>(R<sup>15</sup>)、-C(=O)R<sup>15</sup>であり、ここでR<sup>15</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アリールである、

10

20

30

40

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 183)

$R^8$  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。

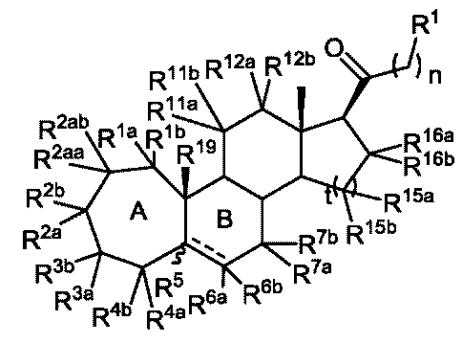
(項 184)

$R^8$  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 185)

式 (II-I - II) :

【化 453-1】



10

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 - II) 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 453-2】

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、ヒドロキシリ、置換も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、 $-ORA^1$ 、 $-SRA^1$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-OC(=O)RA^1$ 、 $-OC(=O)$   
 $OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^A$   
 $^2$ 、 $-SC(=O)ORA^1$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHCO(=O)RA^1$ 、 $-NHCO(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHCO(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHCO(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2RA^2$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)_2RA^2$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)RA^2$ 、 $-SO_2RA^2$ 、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<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；

R<sup>1a</sup>、R<sup>1b</sup>、R<sup>2a</sup>、R<sup>2b</sup>、R<sup>2aa</sup>、R<sup>2ab</sup>、R<sup>3a</sup>、R<sup>3b</sup>、R<sup>4a</sup>、R<sup>4b</sup>、R<sup>7a</sup>、R<sup>7b</sup>、R<sup>11a</sup>、R<sup>11b</sup>、R<sup>12a</sup>、またはR<sup>12b</sup>の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ニトロ、アジド、ヒドロキシリ、置換もしくは非置換アルキル、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するか；またはR<sup>2a</sup>およびR<sup>2b</sup>、R<sup>3a</sup>およびR<sup>3b</sup>、R<sup>4a</sup>およびR<sup>4b</sup>、R<sup>7a</sup>およびR<sup>7b</sup>、R<sup>11a</sup>およびR<sup>11b</sup>、ならびにR<sup>12a</sup>およびR<sup>12b</sup>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<sup>1a</sup>、R<sup>1b</sup>、R<sup>2a</sup>、R<sup>2b</sup>、R<sup>2aa</sup>、R<sup>2ab</sup>、R<sup>3a</sup>、R<sup>3b</sup>、R<sup>4a</sup>、またはR<sup>4b</sup>の少なくとも1つは、ヒドロキシリであり；

R<sup>15a</sup>、R<sup>15b</sup>、R<sup>16a</sup>、およびR<sup>16b</sup>の各々は、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリ、置換もしくは非置換アルキル、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>、-OC(=O)R<sup>A1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A1</sup>、-OC(=O)S<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)S<sup>R<sup>A1</sup></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>O<sup>R<sup>A1</sup></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>であるか、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；

ここで、nが0であり、tが1であり、R<sup>19</sup>がメチルであり、R<sup>5</sup>が水素であり、R<sup>3a</sup>がヒドロキシリであり、環Bが二重結合を有し、R<sup>6a</sup>、R<sup>6b</sup>、R<sup>1a</sup>、R<sup>1b</sup>、R<sup>2a</sup>、R<sup>2b</sup>、R<sup>2aa</sup>、R<sup>2ab</sup>、R<sup>3b</sup>、R<sup>4a</sup>、R<sup>4b</sup>、R<sup>7a</sup>、R<sup>7b</sup>、R<sup>11a</sup>、R<sup>11b</sup>、R<sup>12a</sup>、R<sup>12b</sup>、R<sup>15a</sup>、R<sup>15b</sup>、R<sup>16a</sup>、およびR<sup>16b</sup>が各々水素である場合、R<sup>1</sup>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<sup>6a</sup>またはR<sup>6b</sup>の一方およびR<sup>5</sup>は存在しない、化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

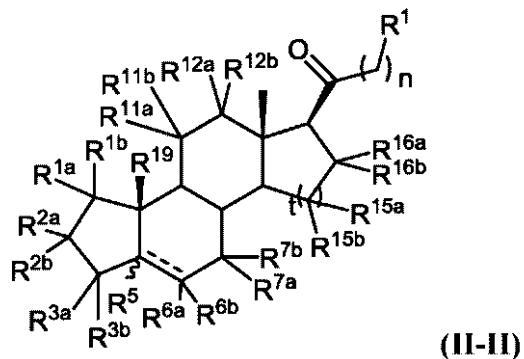
(項185)

R<sup>19</sup>が、水素である、式(II-II)の化合物。

(項186)

式(II-II)：

【化454】



10

20

30

40

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-II)において、

可変基は、式(II-II)に記載される通りに定義され；ここでR<sup>1a</sup>、R<sup>1b</sup>、R<sup>2a</sup>、R<sup>2b</sup>、R<sup>3a</sup>、またはR<sup>3b</sup>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<sup>2a</sup>およびR<sup>2b</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185または186に記載の化合物。

(項188)

R<sup>2a</sup>およびR<sup>2b</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<sup>2a</sup>およびR<sup>2b</sup>が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、-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<sup>2a</sup>およびR<sup>2b</sup>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)

50

$R^{2a}$  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<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 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、ヒドロキシリル、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  $R^{D1}$  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、ヒドロキシリル、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  $R^{D1}$  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<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  $R^{D1}$  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<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 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、ヒドロキシリル、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  $R^{D1}$  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<sup>1a</sup> および R<sup>1b</sup> が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリ、置換も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<sup>1a</sup> および R<sup>1b</sup> が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、-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。 20

(項 204)

R<sup>1a</sup> および R<sup>1b</sup> 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<sup>1a</sup> および R<sup>1b</sup> 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<sup>1a</sup> および R<sup>1b</sup> の各々が独立して、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>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<sup>1a</sup> および R<sup>1b</sup> が、-CH<sub>3</sub>、-CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-OH、-OCH<sub>3</sub>、または-CH(C<sub>1</sub>～C<sub>3</sub>)<sub>2</sub> 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<sup>4a</sup> または R<sup>4b</sup> が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリ、置換もしくは非置換アルキル、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<sup>4a</sup> および R<sup>4b</sup> が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリ、置換も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<sup>4a</sup> および R<sup>4b</sup> が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、-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> 50

<sup>1</sup> であり、ここで R<sup>D 1</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<sup>4a</sup> および R<sup>4b</sup> 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<sup>4a</sup> および R<sup>4b</sup> 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<sup>4a</sup> および R<sup>4b</sup> の各々が独立して、水素、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> 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。

11

(項 214)

R<sup>4a</sup> および R<sup>4b</sup> 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 185 ~ 213 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 215)

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、ヒドロキシリル、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 185 ~ 214 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

(項 216)

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、ヒドロキシリル、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<sup>11a</sup> または R<sup>11b</sup> が、各々独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、-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<sup>11a</sup> または R<sup>11b</sup> 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<sup>11a</sup> または R<sup>11b</sup> 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<sup>11a</sup> または R<sup>11b</sup> の各々が独立して、水素、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> 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 )

$R^{11^a}$  または  $R^{11^b}$  が、 -  $C H_3$ 、 -  $C H_2 C H_3$ 、 -  $O H$ 、 -  $O C H_3$ 、 または -  $C H(C H_3)_2$  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 )

$R^{11^a}$  および  $R^{11^b}$  が一緒に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 )

$R^{15^a}$  または  $R^{15^b}$  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、 -  $O R^{D1}$ 、 -  $O C(=O)R^{D1}$ 、 -  $NH_2$ 、 -  $N(R^{D1})_2$ 、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 )

$R^{16^a}$  または  $R^{16^b}$  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、 -  $O R^{D1}$ 、 -  $O C(=O)R^{D1}$ 、 -  $NH_2$ 、 -  $N(R^{D1})_2$ 、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 )

$R^7^a$  または  $R^7^b$  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、 -  $O R^{D1}$ 、 -  $O C(=O)R^{D1}$ 、 -  $NH_2$ 、 -  $N(R^{D1})_2$ 、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 )

$R^7^a$  および  $R^7^b$  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 )

$R^7^a$  および  $R^7^b$  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 )

$R^7^a$  および  $R^7^b$  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 -  $O H$  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 )

$R^7^a$  または  $R^7^b$  が、 -  $C H_3$ 、 -  $C H_2 C H_3$ 、 -  $O H$ 、 -  $O C H_3$ 、 または -  $C H(C H_3)_2$  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、  $C_1$  9 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 )

R<sup>5</sup>が、C19位に対してトランス位の水素である、上記項185～230のいずれか1項に記載の化合物。

(項232)

R<sup>5</sup>が、C19位に対してシス位のメチルである、上記項185～231のいずれか1項に記載の化合物。

(項233)

R<sup>5</sup>が、C19位に対してトランス位のメチルである、上記項185～232のいずれか1項に記載の化合物。

(項234)

nが、1である、上記項185～233のいずれか1項に記載の化合物。 10

(項235)

nが、2である、上記項185～234のいずれか1項に記載の化合物。

(項236)

R<sup>3a</sup>またはR<sup>3b</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185～235のいずれか1項に記載の化合物。

(項237)

R<sup>3a</sup>またはR<sup>3b</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185～236のいずれか1項に記載の化合物。 20

(項238)

R<sup>3a</sup>またはR<sup>3b</sup>が、置換もしくは非置換アルキルである、上記項185～237のいずれか1項に記載の化合物。

(項239)

R<sup>3a</sup>またはR<sup>3b</sup>が、水素である、上記項185～238のいずれか1項に記載の化合物。

(項240)

R<sup>3a</sup>またはR<sup>3b</sup>が、置換アルキルである、上記項185～239のいずれか1項に記載の化合物。

(項241)

R<sup>3a</sup>またはR<sup>3b</sup>が、非置換アルキルである、上記項185～240のいずれか1項に記載の化合物。 30

(項242)

R<sup>3a</sup>またはR<sup>3b</sup>が、メチルである、上記項185～241のいずれか1項に記載の化合物。

(項243)

R<sup>19</sup>が、エチルである、上記項185～242のいずれか1項に記載の化合物。

(項244)

R<sup>19</sup>が、置換アルキルである、上記項185～243のいずれか1項に記載の化合物。

(項245)

R<sup>19</sup>が、非置換アルキルである、上記項185～244のいずれか1項に記載の化合物。 40

(項246)

R<sup>19</sup>が、置換C<sub>2</sub>～C<sub>6</sub>アルキルである、上記項185～245のいずれか1項に記載の化合物。

(項247)

R<sup>19</sup>が、非置換C<sub>2</sub>～C<sub>6</sub>アルキルである、上記項185～246のいずれか1項に記載の化合物。

(項248)

R<sup>19</sup>が、置換C<sub>2</sub>～C<sub>6</sub>アルケニルである、上記項185～247のいずれか1項に記

50

載の化合物。

(項 249)

$R^{19}$  が、非置換  $C_2 \sim C_6$  アルケニルである、上記項 185 ~ 248 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 250)

$R^{19}$  が、置換  $C_2 \sim C_6$  アルキニルである、上記項 185 ~ 249 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 251)

$R^{6a}$  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 185 ~ 250 のいずれか 1 項に記載の化合物。 10

(項 252)

$R^{6a}$  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 185 ~ 251 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 253)

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の両方が水素である、上記項 185 ~ 252 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 254)

$R^{6a}$  が、ハロまたはアルキルであり、 $R^{6b}$  が、水素である、上記項 185 ~ 253 のいずれか 1 項に記載の化合物。 20

(項 255)

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の両方がハロである、上記項 185 ~ 254 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 256)

$R^{6a}$  および  $R^{6b}$  の両方がアルキルである、上記項 185 ~ 255 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 257)

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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 ~ 256 のいずれか 1 項に記載の化合物。 30

(項 258)

$R^{12a}$  および  $R^{12b}$  が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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 ~ 257 のいずれか 1 項に記載の化合物。 40

(項 259)

$R^{12a}$  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 ~ 258 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 260)

50

R<sup>12a</sup>およびR<sup>12b</sup>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<sup>12a</sup>およびR<sup>12b</sup>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<sup>12a</sup>およびR<sup>12b</sup>の各々が独立して、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>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<sup>12a</sup>およびR<sup>12b</sup>が、-CH<sub>3</sub>、-CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-OH、-OCH<sub>3</sub>、または-CH(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>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<sup>12a</sup>およびR<sup>12b</sup>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<sup>12a</sup>およびR<sup>12b</sup>が一緒に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。

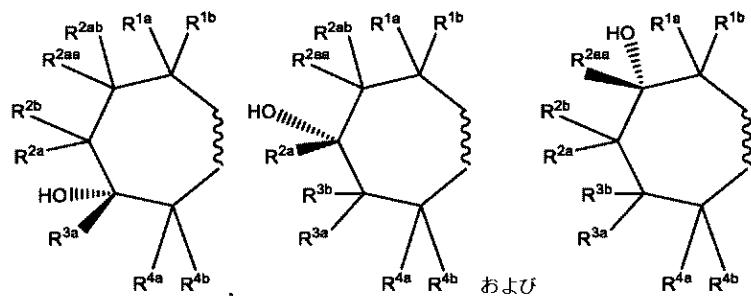
(項266)

R<sup>12a</sup>およびR<sup>12b</sup>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】



10

20

30

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<sup>1</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。

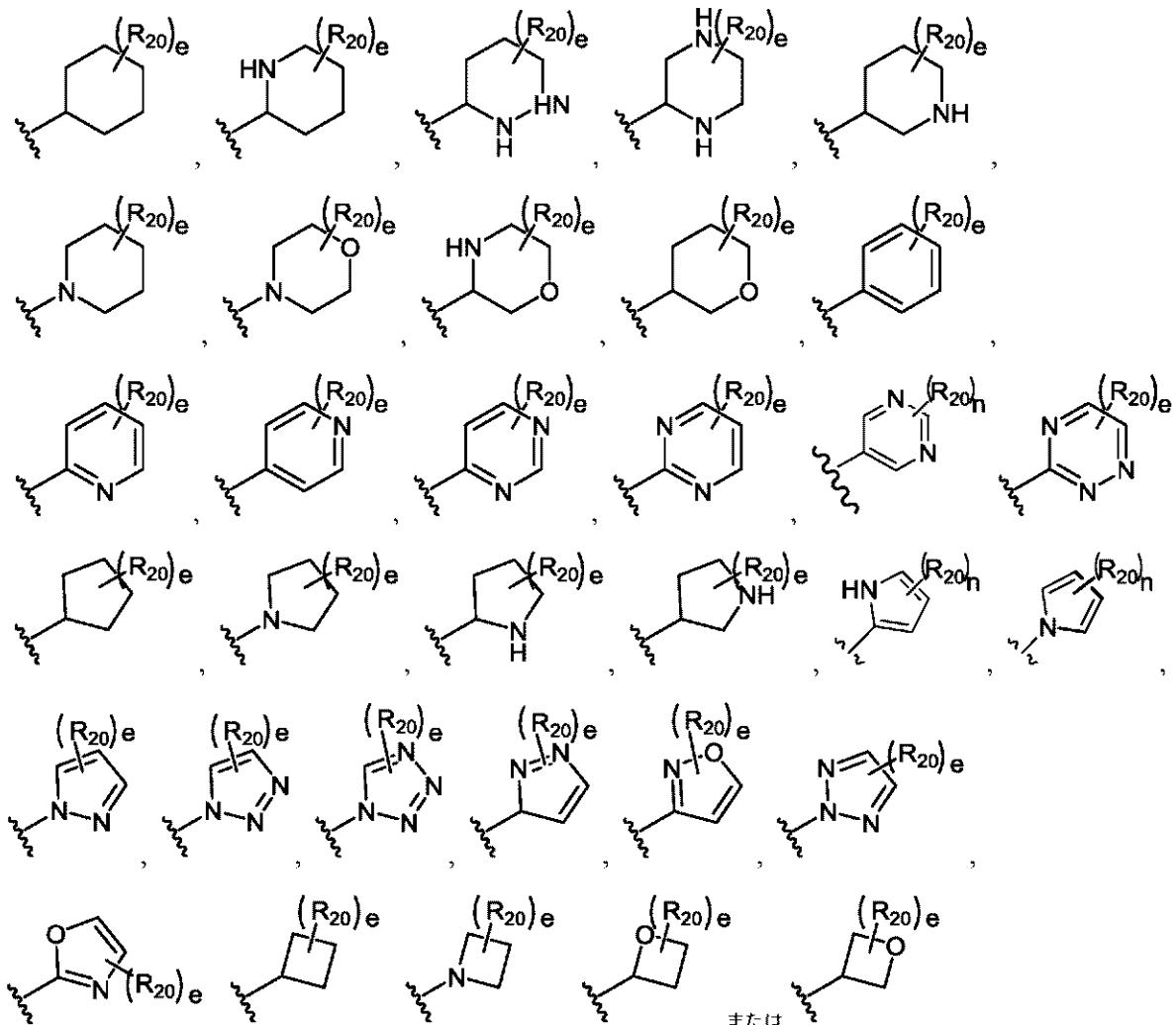
(項269)

R<sup>1</sup>が、

40

50

【化457】



であり、

ここで  $R_{20}$  の各々の存在は独立して、ハロゲン、 $-NO_2$ 、 $-CN$ 、 $-OR^{GA}$ 、 $-N(R^{GA})_2$ 、 $-C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-OC(=O)R^{GA}$ 、 $-OC(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-N(R^{GA})C(=O)R^{GA}$ 、 $-OCC(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-N(R^{GA})C(=O)OR^{GA}$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、 $-S(=O)_2OR^{GA}$ 、 $-OS(=O)_2R^{GA}$ 、 $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$ 、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 3~4 員ヘテロシクリル、 $C_{5\sim 10}$  置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換の 5~10 員ヘテロアリールであるか、または必要に応じて 2 つの  $R^{GA}$  が介在原子と一緒にになって、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；

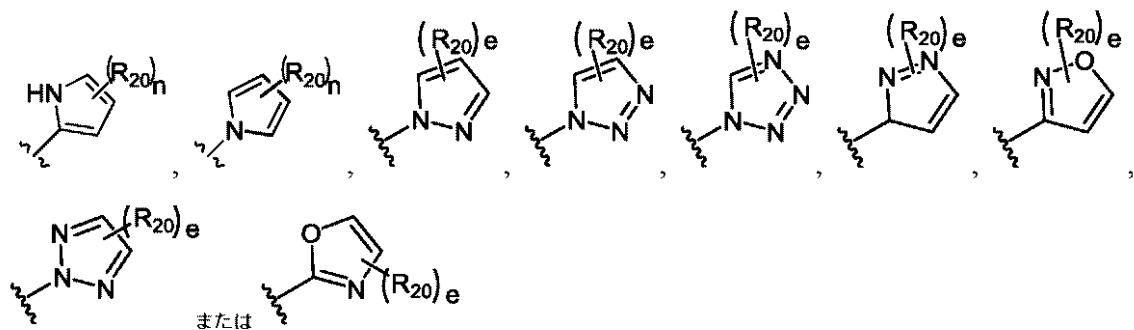
ここで  $R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1\sim 6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_{2\sim 6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_{2\sim 6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_{3\sim 6}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3~6 員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にになって、置換もしくは非置換の炭素環また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

e は、0、1、2、3、4、または5であり、n は、0、1、2、3、4、または5である、上記項 185~268 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 270)

R<sup>1</sup> が、

【化 458】



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>、-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>~<sub>6</sub> アルキル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub>~<sub>6</sub> アルケニル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub>~<sub>6</sub> アルキニル、置換もしくは非置換 C<sub>3</sub>~<sub>4</sub> 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、C<sub>5</sub>~<sub>10</sub> 置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換の 5~10 員ヘテロアリールであるか、または必要に応じて 2 つの R<sup>GA</sup> が介在原子と一緒にになって、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 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>~<sub>6</sub> アルキル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub>~<sub>6</sub> アルケニル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub>~<sub>6</sub> アルキニル、置換もしくは非置換 C<sub>3</sub>~<sub>6</sub> 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になって、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) :

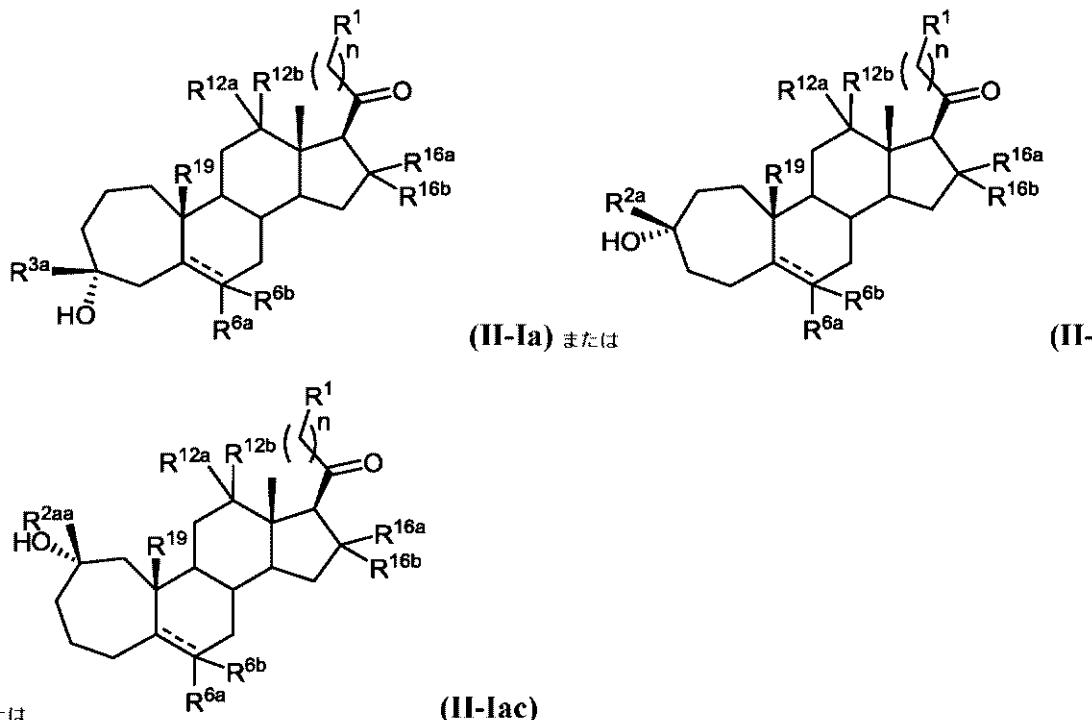
20

30

40

50

## 【化459】



10

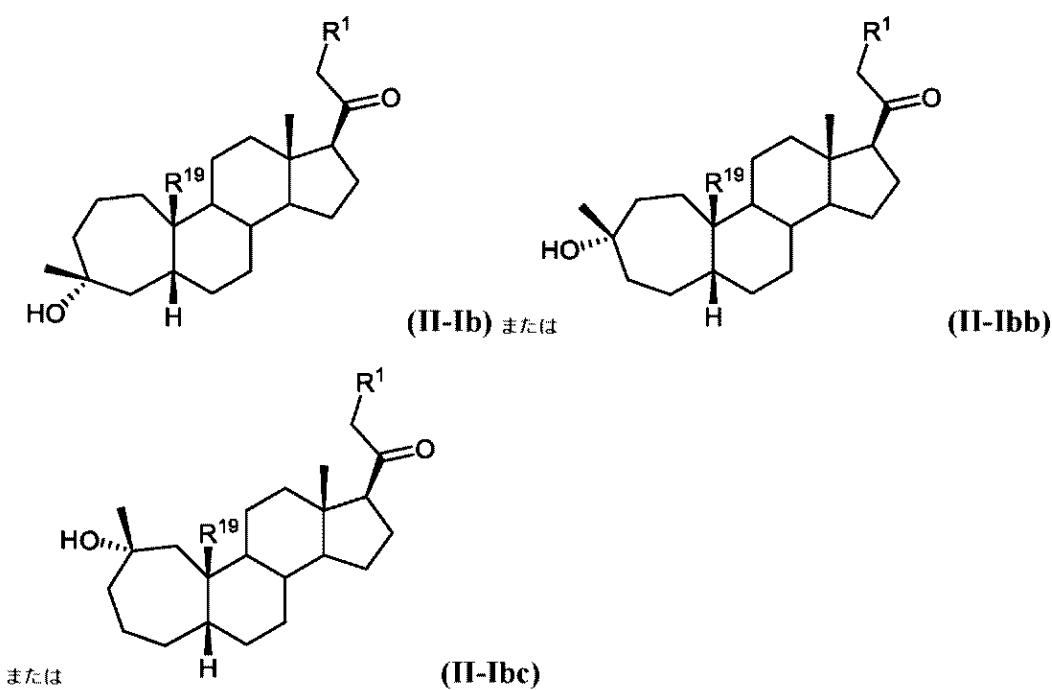
20

の化合物である、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272)

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

## 【化460】



30

40

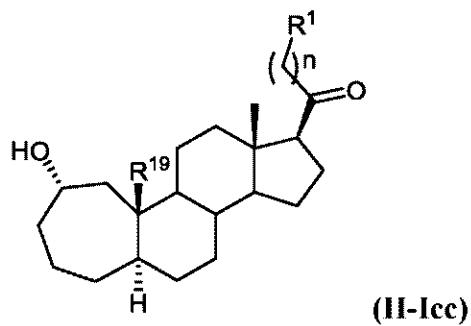
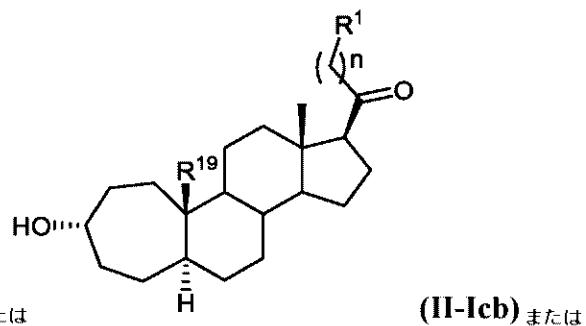
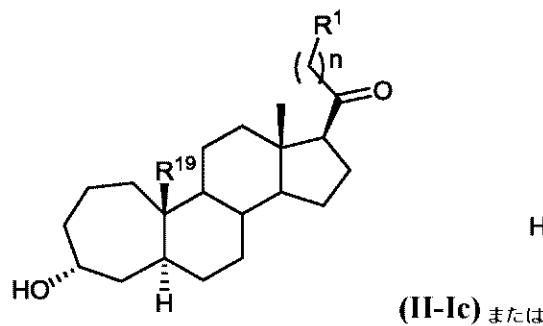
の化合物である、上記項185に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項273)

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

50

## 【化461】



10

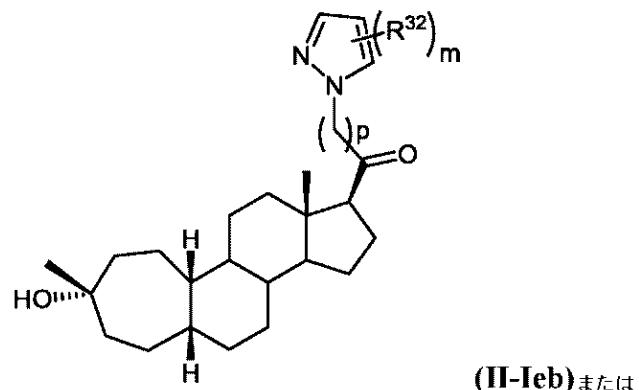
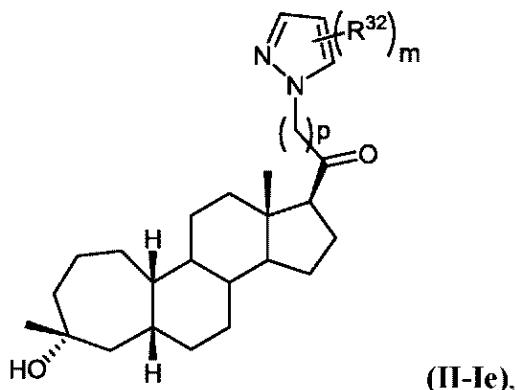
20

の化合物である、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。

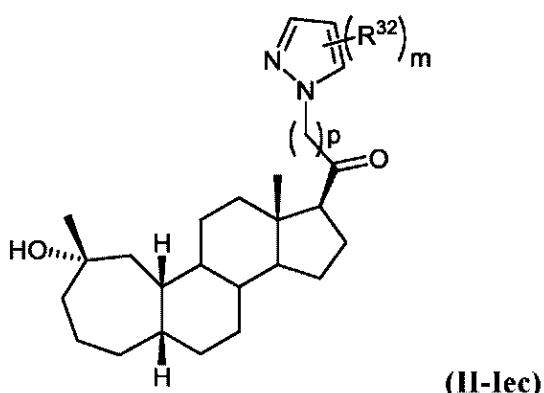
(項274)

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

【化462】



30



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；

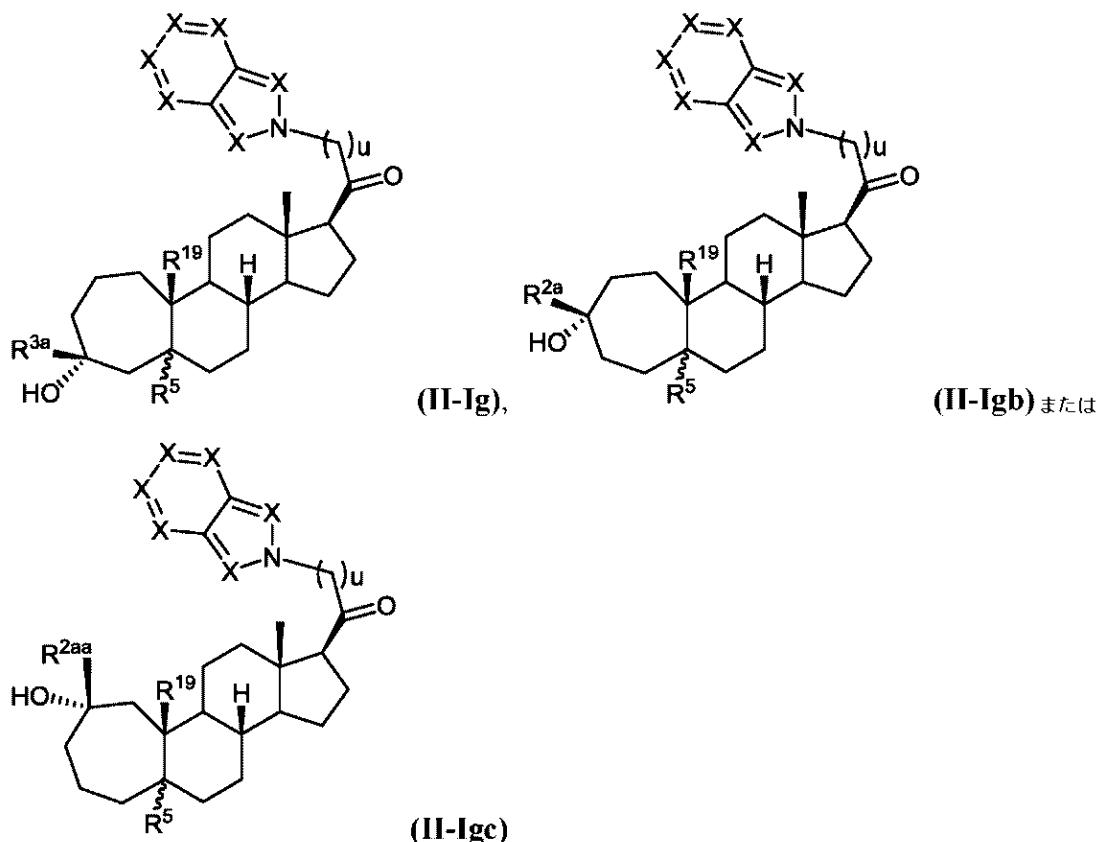
50

$R^3$  の各々は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシリ、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 2 7 5 )

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

【化 4 6 3】



の化合物であり、

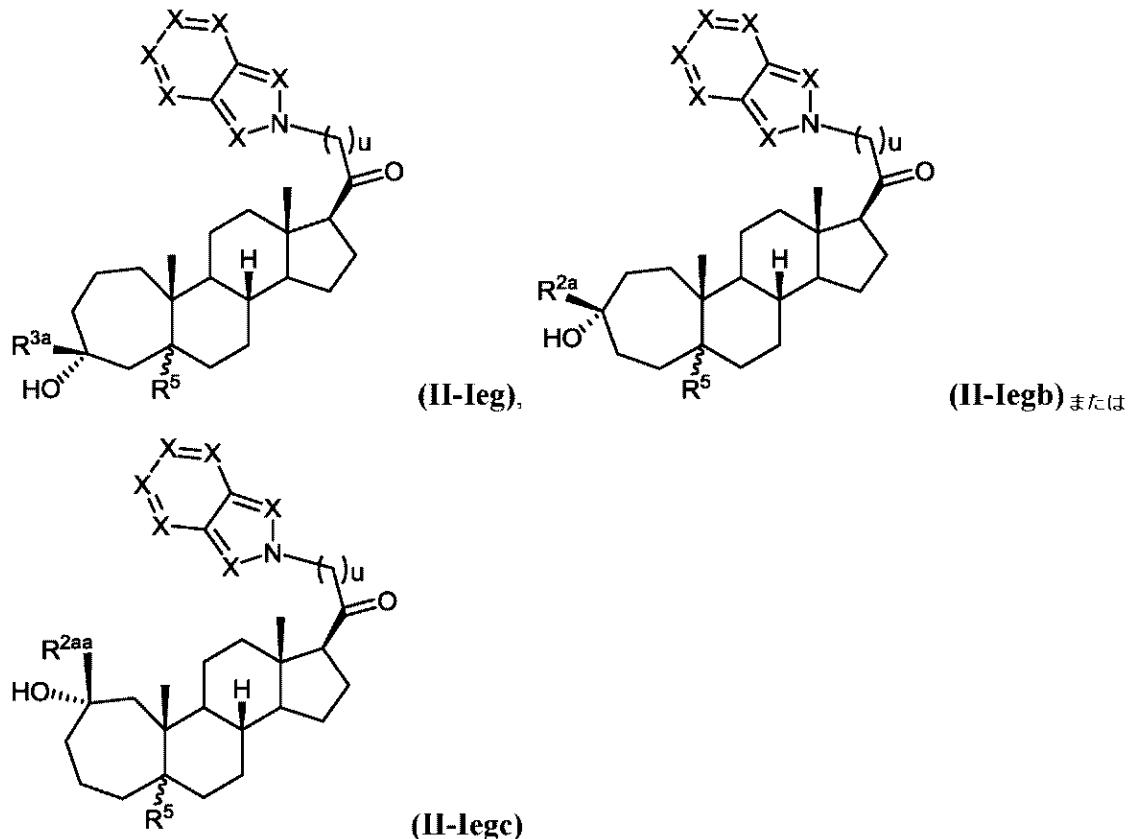
ここで、 $u$  は、0、1、または2であり、各  $X$  は独立して、 $-C(R^N)$ 、 $-C(R^N)_2$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)$  であり、ここで  $R^N$  は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_1 \sim 6$  アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または  $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$  であり；

R<sup>G</sup>Aの各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換C<sub>1～6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2～6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2～6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3～6</sub>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</sup>A基が介在原子と一緒にになって、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 2 7 6 )

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

【化464】



10

20

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<sup>N</sup>)-、-C(R<sup>N</sup>)<sub>2</sub>-、-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>~<sub>6</sub>アルキル、C(=O)R<sup>G A</sup>、-C(=O)OR<sup>G A</sup>、-C(=O)N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G A</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>であり；

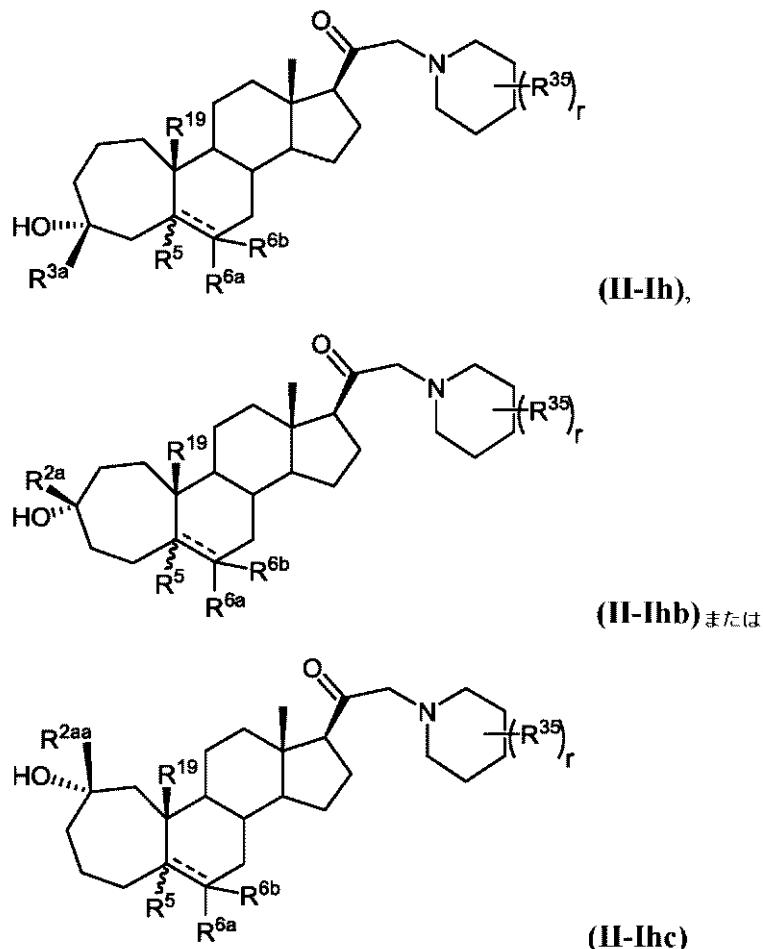
R<sup>G A</sup>の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換C<sub>1</sub>~<sub>6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2</sub>~<sub>6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2</sub>~<sub>6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3</sub>~<sub>6</sub>カルボシクリル、置換もしくは非置換の3~6員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つのR<sup>G A</sup>基が介在原子と一緒にになって、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-I)の前記化合物が、式(II-Ih)、(II-Ihb)、または(II-Ihc)

50

【化465】



10

20

40

の化合物であり、

ここで、R<sup>35</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。

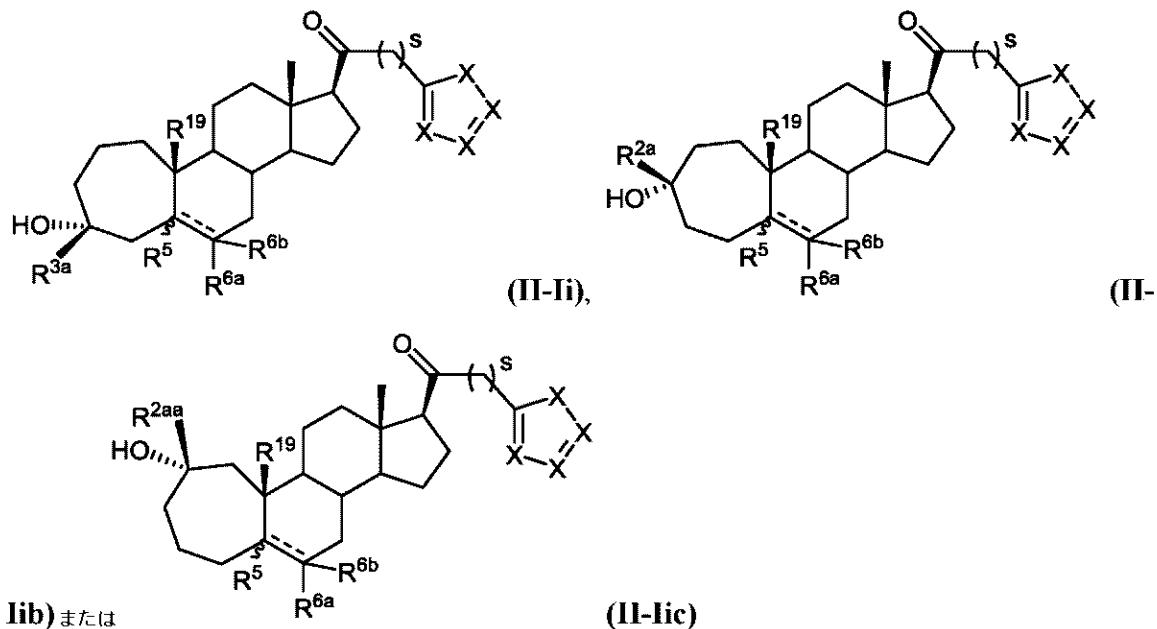
(項278)

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

30

50

## 【化466】



10

20

30

40

の化合物であり、

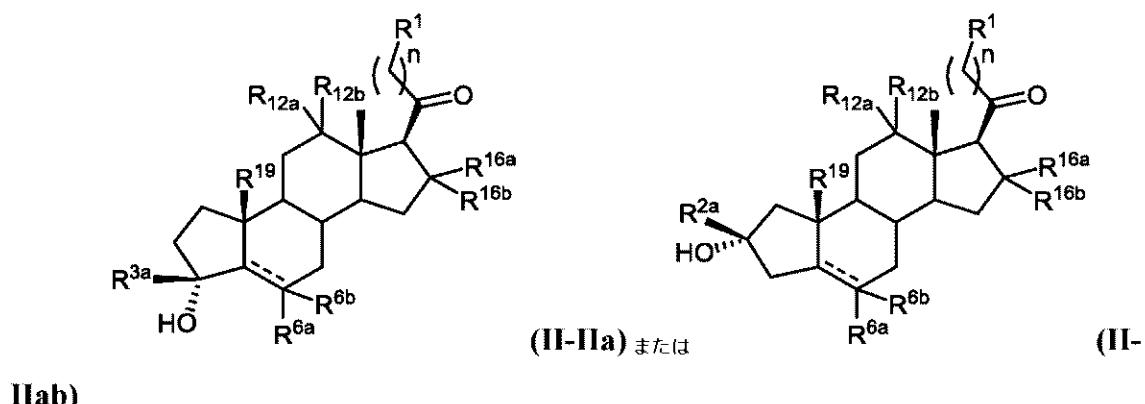
ここで、sは、0、1、または2であり；各Xは独立して、-C(R<sup>N</sup>)-、-C(R<sup>N</sup>)<sub>2</sub>-、-O-、-S-、-N-、またはN(R<sup>N</sup>)-であり、ここでR<sup>N</sup>は独立して水素、置換もしくは非置換C<sub>1</sub>～6アルキル、C(=O)R<sup>G</sup>A、-C(=O)OR<sup>G</sup>A、-C(=O)N(R<sup>G</sup>A)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G</sup>A、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R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

R<sup>G</sup>A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</sup>A基が介在原子と一緒にになって、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279)

式(I I - I I )の前記化合物が、式(I I - I I a)または(I I - I I a b)：

## 【化467】



(IIab)

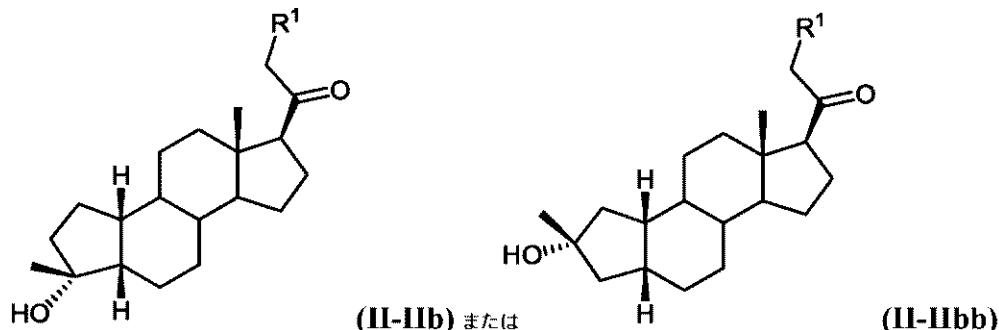
の化合物である、上記項186に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項280)

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

50

## 【化468】

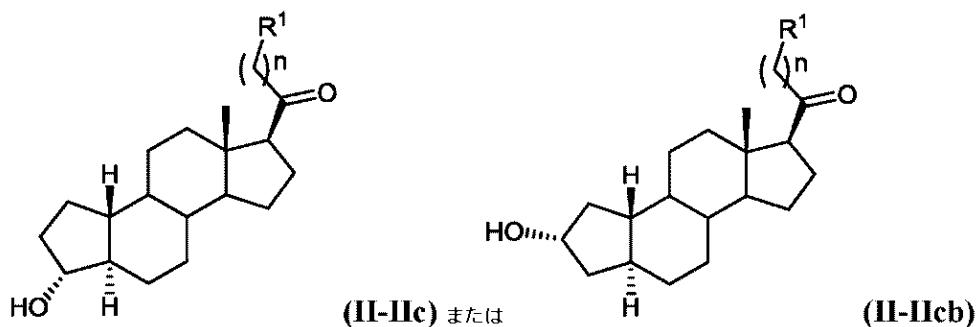


10

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281)

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

## 【化469】

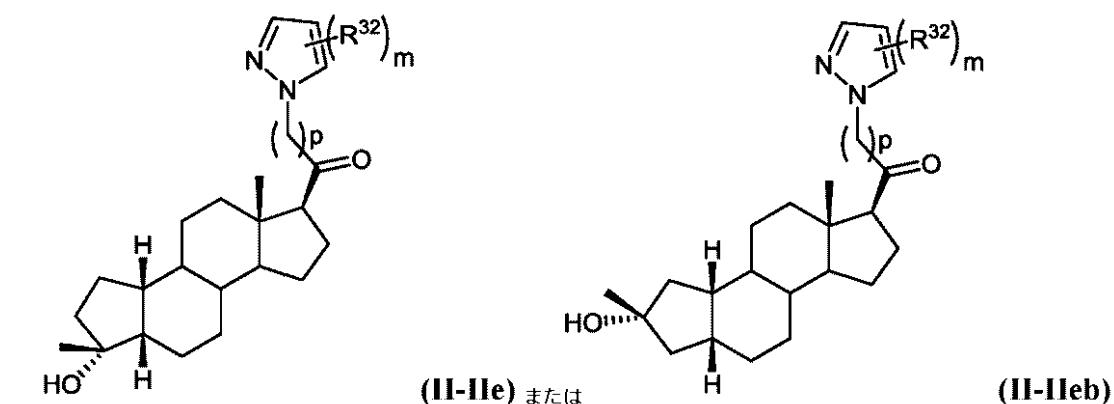


20

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282)

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

## 【化470】



30

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186に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

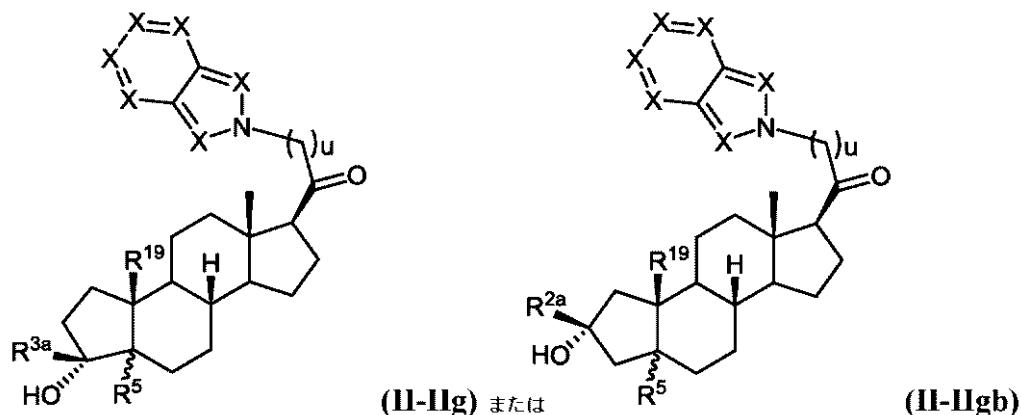
## (項283)

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

40

50

## 【化471】



10

の化合物であり、

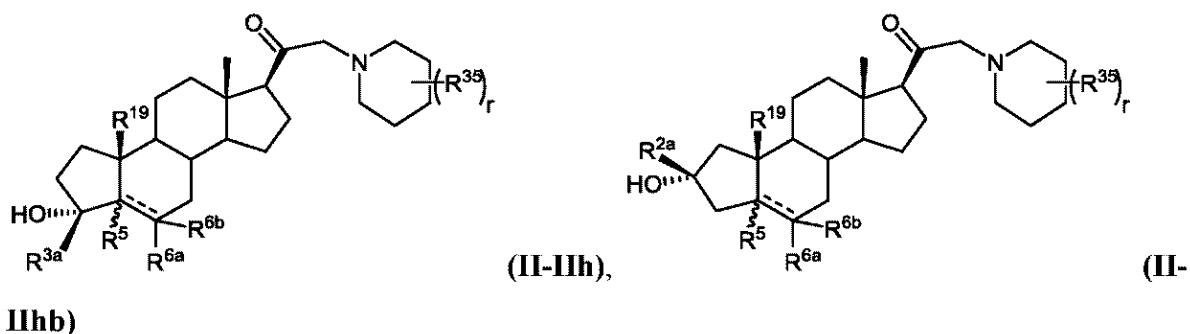
ここで、 $u$ は、0、1、または2であり、各 $X$ は独立して、-C(R<sup>N</sup>)-、-C(R<sup>N</sup>)<sub>2</sub>-、-S-、-N-、またはN(R<sup>N</sup>)-であり、ここでR<sup>N</sup>は独立して、水素、置換もしくは非置換C<sub>1~6</sub>アルキル、C(=O)R<sup>G</sup>A、-C(=O)OR<sup>G</sup>A、-C(=O)N(R<sup>G</sup>A)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G</sup>A、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R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

$R^G A$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換C<sub>1~6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3~6</sub>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</sup>A基が介在原子と一緒にになって、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。

(項284)

式(I I - I I )の前記化合物が、式(I I - I I h)または(I I - I I h b)

## 【化472】



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、ヒドロキシリル、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。

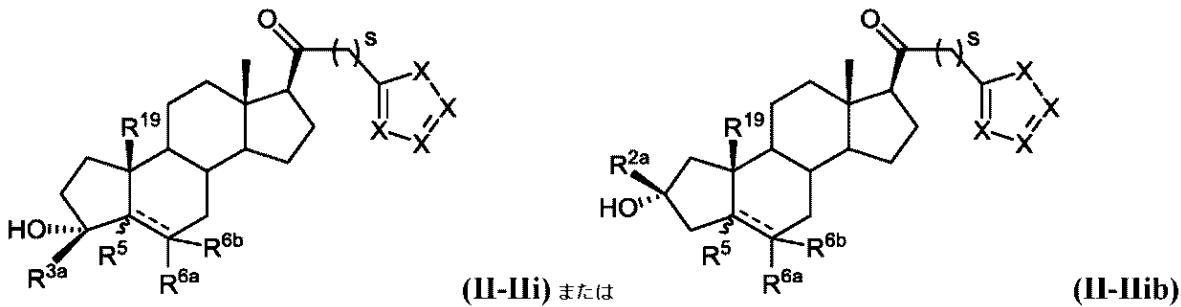
(項285)

式(I I - I I )の前記化合物が、式(I I - I I i)または(I I - I I i b)

40

50

## 【化473】



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<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>G</sup>A、-C(=O)OR<sup>G</sup>A、-C(=O)N(R<sup>G</sup>A)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G</sup>A、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G</sup>A)<sub>2</sub>であり；

R<sup>G</sup>A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</sup>A基が介在原子と一緒にになって、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。

40

(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。

(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)

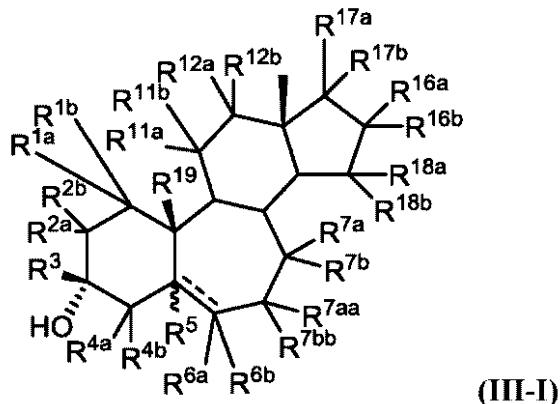
前記大うつ病性障害が、重度の大うつ病性障害である、上記項287に記載の方法。

(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(I)～(I)：

50

## 【化474】



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(I I I - 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475】

20

が二重結合である場合、R<sup>5</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；

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、ヒドロキシリ、置換も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>1a</sup>、R<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup>、R<sup>12b</sup>、R<sup>2a</sup>、R<sup>2b</sup>、R<sup>4a</sup>、R<sup>4b</sup>、R<sup>11a</sup>、R<sup>11b</sup>、R<sup>17a</sup>、R<sup>17b</sup>、R<sup>16a</sup>、R<sup>16b</sup>、R<sup>18a</sup>、R<sup>18b</sup>、R<sup>7a</sup>、R<sup>7b</sup>、R<sup>7aa</sup>、R<sup>7bb</sup>、R<sup>5</sup>、R<sup>6a</sup>、R<sup>6b</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>2a</sup>、R<sup>1b</sup>、R<sup>18a</sup>、R<sup>18b</sup>、R<sup>7a</sup>、R<sup>7b</sup>、R<sup>7aa</sup>、R<sup>7bb</sup>、R<sup>5</sup>、R<sup>6a</sup>、R<sup>6b</sup>の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリ、置換もしくは非置換アルキル、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、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するか；またはR<sup>1a</sup>およびR<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup>およびR<sup>12b</sup>、R<sup>2a</sup>およびR<sup>2b</sup>、R<sup>4a</sup>およびR<sup>4b</sup>、R<sup>11a</sup>およびR<sup>11b</sup>、ならびにR<sup>18a</sup>およびR<sup>18b</sup>のいずれか1つが一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

R<sup>7a</sup>、R<sup>7b</sup>、R<sup>7aa</sup>、およびR<sup>7bb</sup>の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリ、置換もしくは非置換アルキル、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、または

30

40

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<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>7a</sup>およびR<sup>7b</sup>ならびにR<sup>7aa</sup>およびR<sup>7bb</sup>のいずれか1つが一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

R<sup>16a</sup>、R<sup>16b</sup>、R<sup>17a</sup>、およびR<sup>17b</sup>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<sup>1</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>、-OC(=O)R<sup>A1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A1</sup>、-OC(=O)SR<sup>A1</sup>、-OC(=O)NR<sup>A1</sup><sub>2</sub>、-SC(=O)R<sup>A2</sup>、-SC(=O)ORA<sup>1</sup>、-SC(=O)SR<sup>A1</sup>、-SC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-NH<sub>2</sub>C(=O)R<sup>A1</sup>、-NH<sub>2</sub>C(=O)ORA<sup>1</sup>、-NH<sub>2</sub>C(=O)SR<sup>A1</sup>、-NH<sub>2</sub>C(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>R<sup>A2</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>A2</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>、-S(=O)R<sup>A2</sup>、-SO<sub>2</sub>R<sup>A2</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</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>であるか、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るか、またはR<sup>17a</sup>およびR<sup>17b</sup>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<sup>5</sup>およびR<sup>6a</sup>またはR<sup>6b</sup>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

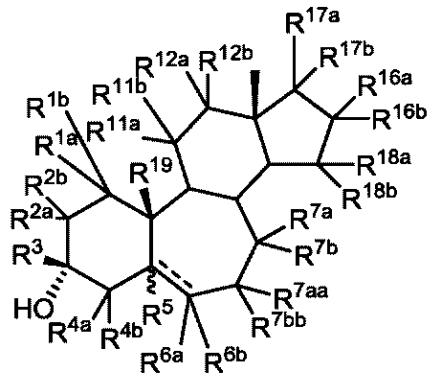
(項 301)

前記 CNS 関連障害に静脈内投与される、上記項 294～300 のいずれか 1 項に記載の方法。

(項 302)

式 (I I I - I) :

【化 477】



(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、

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

20

【化 478】

-----

が二重結合である場合、R<sup>5</sup> は存在せず；

R<sup>3</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；

R<sup>19</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、または置換もしくは非置換アルキニルであり；

30

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

R<sup>1</sup>a、R<sup>1</sup>b、R<sup>12</sup>a、R<sup>12</sup>b、R<sup>2</sup>a、R<sup>2</sup>b、R<sup>4</sup>a、R<sup>4</sup>b、R<sup>11</sup>a、R<sup>1</sup>  
b、R<sup>18</sup>a、および R<sup>18</sup>b の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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するか；または R<sup>1</sup>a および R<sup>1</sup>b、R<sup>12</sup>a および R<sup>12</sup>b、R<sup>2</sup>a および R<sup>2</sup>b、R<sup>4</sup>a および R<sup>4</sup>b、R<sup>11</sup>a および R<sup>11</sup>b、ならびに R<sup>18</sup>a および R<sup>18</sup>b 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<sup>7</sup>a、R<sup>7</sup>b、R<sup>7</sup>aa、および R<sup>7</sup>bb の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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>、-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、 $-ORA^1$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SRA^1$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SRA^1$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHCO(=O)R^{A1}$ 、 $-NHCO(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHCO(=O)SRA^1$ 、 $-NHCO(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2ORA^1$ 、 $-SS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-SS(=O)_2ORA^1$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、または $-S(=O)_2ORA^1$ であり、ここで $R^A$ 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； $R^A$ 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、ヒドロキシリル、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、ヒドロキシリル、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。

10

20

30

40

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302～303のいずれか1項に記載の化合物。

(項305)

$R^{16}a$ および $R^{16}b$ 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302～304のいずれか1項に記載の化合物。  
10

(項306)

$R^7a$ 、 $R^7b$ 、 $R^{7a}a$ 、および $R^{7b}b$ 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302～305のいずれか1項に記載の化合物。  
20

(項307)

$R^6a$ 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302～306のいずれか1項に記載の化合物。

(項308)

$R^{12}a$ および $R^{12}b$ 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302～307のいずれか1項に記載の化合物。  
30

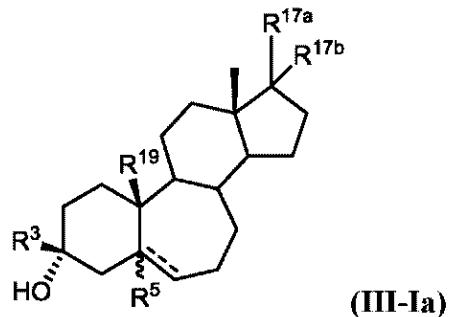
(項309)

$R^{17}a$ および $R^{17}b$ 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、 $-ORA^1$ 、 $-SRA^1$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-N(R^{A1})$ 、 $-CN(R^{A1})_2$ 、 $-C(O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、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302～308のいずれか1項に記載の化合物。  
40

(項310)

前記化合物が、式(I I I - I a)

## 【化480】



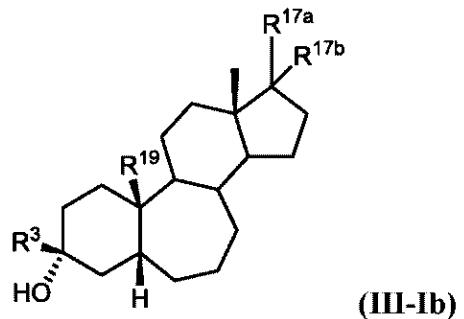
10

の化合物である、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311)

前記化合物が、式(III-Ib)

## 【化481】



20

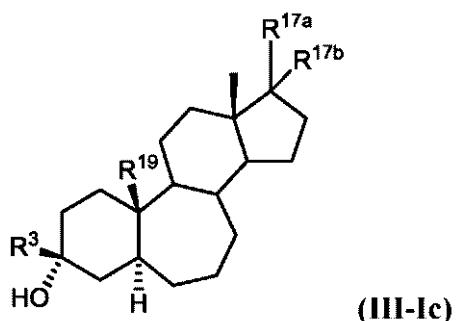
の化合物である、上記項302～310のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項312)

前記化合物が、式(III-Ic)

30

## 【化482】



40

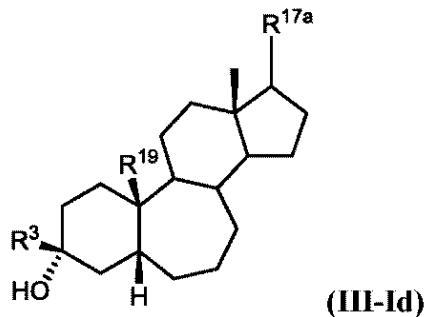
の化合物である、上記項302～309のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項313)

前記化合物が、式(III-Id)

50

## 【化483】



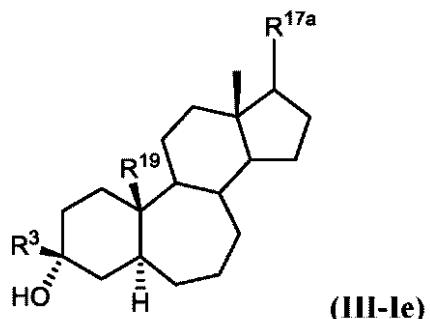
10

の化合物である、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314)

前記化合物が、式(IICI-Ie)

## 【化484】



20

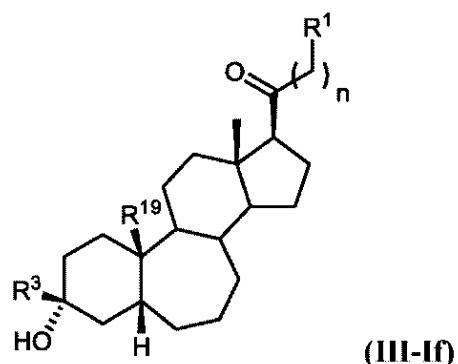
の化合物である、上記項302～309のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項315)

前記化合物が、式(IICI-If)

30

## 【化485】



40

の化合物であり、

ここで、R<sup>1</sup>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<sup>A1</sup>、-SR<sup>A1</sup>、-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>、-NHCO(=O)R<sup>A1</sup>、-NHCO(=O)OR<sup>A1</sup>、-NHCO(=O)SR<sup>A1</sup>

50

$S R^A_1$ 、 $-NHC(=O)N(R^A_1)_2$ 、 $-OS(=O)_2R^A_2$ 、 $-OS(=O)_2OR^A_1$ 、 $-S-S(=O)_2R^A_2$ 、 $-S-S(=O)_2OR^A_1$ 、 $-SO_2R^A_2$ 、または $-S(=O)_2OR^A_1$ であり、ここで $R^A_1$ 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であるか、または2つの $R^A_1$ 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； $R^A_2$ 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；

10

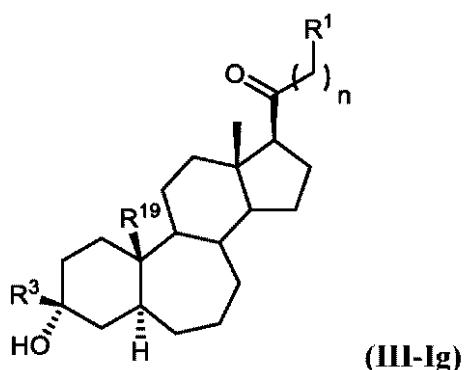
$n$ は、0、1、または2である、上記項302～309のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

20

(項316)

前記化合物が、式(I-II-Ig)

【化486】



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、 $-OR^A_1$ 、 $-SR^A_1$ 、 $-N(R^A_1)_2$ 、 $-OC(=O)R^A_1$ 、 $-OC(=O)OR^A_1$ 、 $-OC(=O)SR^A_1$ 、 $-OC(=O)N(R^A_1)_2$ 、 $-SC(=O)R^A_2$ 、 $-SC(=O)OR^A_1$ 、 $-SC(=O)SR^A_1$ 、 $-SC(=O)N(R^A_1)_2$ 、 $-NHC(=O)R^A_1$ 、 $-NHC(=O)OR^A_1$ 、 $-NHC(=O)SR^A_1$ 、 $-NHC(=O)N(R^A_1)_2$ 、 $-OS(=O)_2R^A_2$ 、 $-OS(=O)_2OR^A_1$ 、 $-S-S(=O)_2R^A_2$ 、 $-S-S(=O)_2OR^A_1$ 、 $-S(=O)R^A_2$ 、 $-SO_2R^A_2$ 、または $-S(=O)_2OR^A_1$ であり、ここで $R^A_1$ 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であるか、または2つの $R^A_1$ 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； $R^A_2$ 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

$n$ 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。

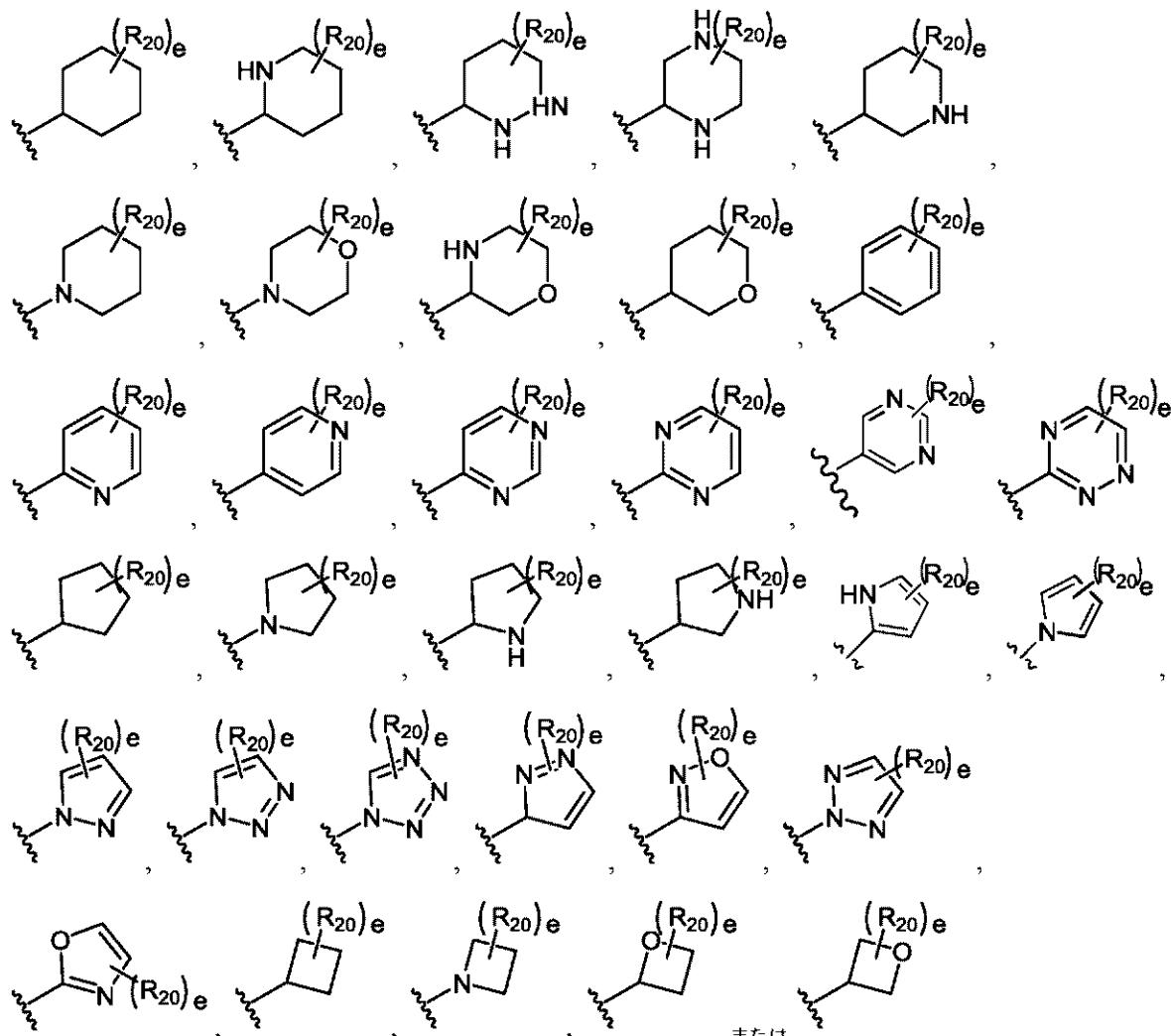
40

50

(項 3 1 7 )

R<sup>1</sup> が、

【化 4 8 7】



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>、-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>~6 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になって、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 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になって、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

40

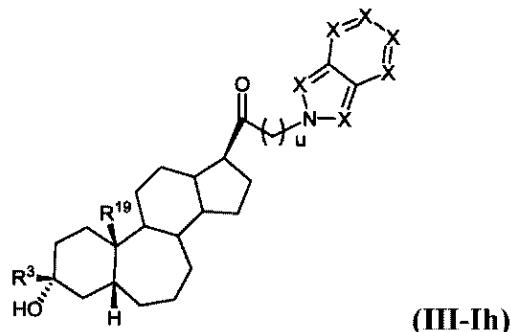
50

物。

(項 3 1 8 )

前記化合物が、式 (I I I - I h )

【化 4 8 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( $R^N$ )<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<sub>1</sub>~<sub>6</sub>アルキル、C(=O) $R^{GA}$ 、-C(=O)OR<sup>GA</sup>、-C(=O)N( $R^{GA}$ )<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub> $R^{GA}$ 、または-S(=O)<sub>2</sub>N( $R^{GA}$ )<sub>2</sub>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<sub>1</sub>~<sub>6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2</sub>~<sub>6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2</sub>~<sub>6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3</sub>~<sub>6</sub>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になって、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。

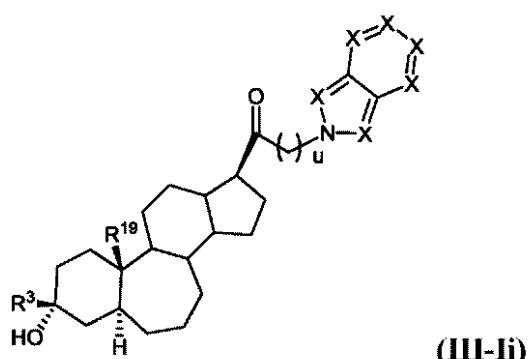
20

(項 3 1 9 )

前記化合物が、式 (I I I - I i )

【化 4 8 9】

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( $R^N$ )<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<sub>1</sub>~<sub>6</sub>アルキル、C(=O) $R^{GA}$ 、-C(=O)OR<sup>GA</sup>、-C(=O)N( $R^{GA}$ )<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub> $R^{GA}$ 、または-S(=O)<sub>2</sub>N( $R^{GA}$ )<sub>2</sub>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<sub>1</sub>~<sub>6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2</sub>~<sub>6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2</sub>~<sub>6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3</sub>~<sub>6</sub>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

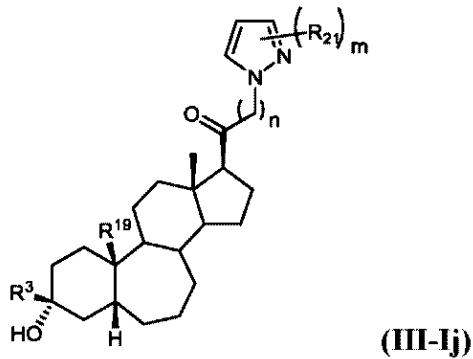
50

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<sup>G A</sup>基が介在原子と一緒にになって、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-II-I-j)

【化490】



10

の化合物であり、

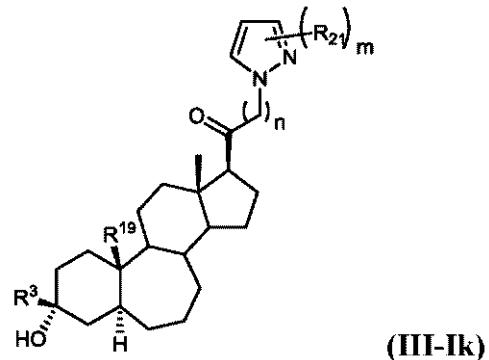
ここで、mは、0、1、2、または3であり；nは、0、1、または2であり；

各R<sup>21</sup>は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシリル、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。

(項321)

前記化合物が、式(I-II-I-k)

【化491】



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<sup>21</sup>は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシリル、またはシアノである、上記項316に記載の化合物。

(項322)

R<sup>21</sup>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。

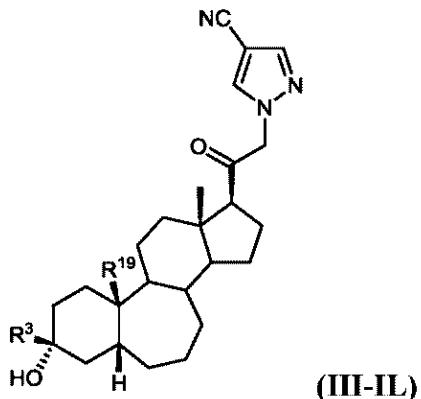
(項324)

前記化合物が、式(I-II-I-L)

40

50

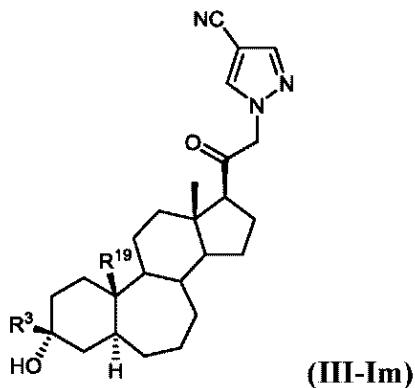
## 【化492】



の化合物である、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。  
(項325)

前記化合物が、式(I-II-I m)

## 【化493】



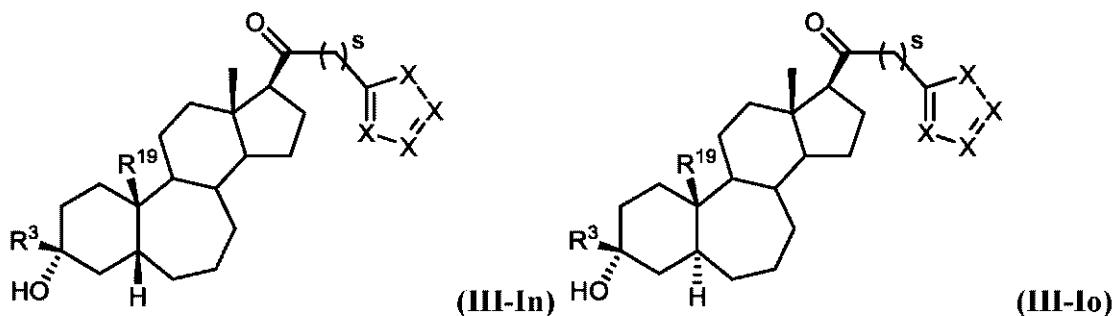
の化合物である、上記項316のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

30

(項326)

前記化合物が、式(I-II-I n)または式(I-II-I o)

## 【化494】



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<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>G</sup>A、-C(=O)OR<sup>G</sup>A、-C(=O)N(R<sup>G</sup>A)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G</sup>A、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G</sup>A)<sub>2</sub>であり；

R<sup>G</sup>A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

50

しくは非置換 C<sub>2</sub> ~ C<sub>6</sub> アルケニル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキニル、置換もしくは非置換 C<sub>3</sub> ~ C<sub>6</sub> 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になって、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<sup>3</sup> 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。 10

( 項 328 )

R<sup>3</sup> 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<sup>3</sup> が、-CH<sub>3</sub> 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<sup>19</sup> が、置換もしくは非置換 C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub> ~ C<sub>6</sub> アルケニル、または置換もしくは非置換 C<sub>2</sub> ~ C<sub>6</sub> 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<sup>19</sup> が、非置換 C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> 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。 20

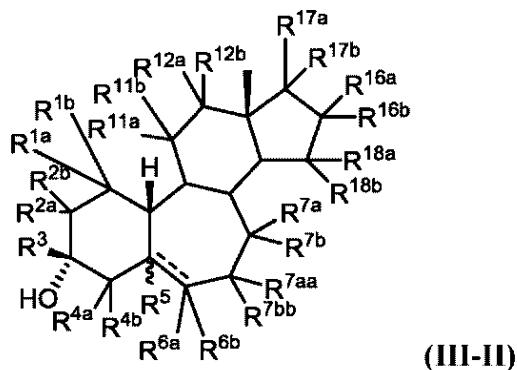
( 項 332 )

R<sup>19</sup> が、-CH<sub>3</sub> 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 - II ) :

【 化 495 】



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 - II )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 496 】

が二重結合である場合、R<sup>5</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；

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、ヒドロキシリル、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<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>1a</sup>、R<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup>、R<sup>12b</sup>、R<sup>2a</sup>、R<sup>2b</sup>、R<sup>4a</sup>、R<sup>4b</sup>、R<sup>11a</sup>、R<sup>11b</sup>、R<sup>18a</sup>、およびR<sup>18b</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するか；またはR<sup>1a</sup>およびR<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup>およびR<sup>12b</sup>、R<sup>2a</sup>およびR<sup>2b</sup>、R<sup>4a</sup>およびR<sup>4b</sup>、R<sup>11a</sup>およびR<sup>11b</sup>、ならびにR<sup>18a</sup>およびR<sup>18b</sup>のいずれか1つが一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

R<sup>7a</sup>、R<sup>7b</sup>、R<sup>7aa</sup>、およびR<sup>7bb</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>7a</sup>およびR<sup>7b</sup>ならびにR<sup>7aa</sup>およびR<sup>7bb</sup>のいずれか1つが一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

R<sup>16a</sup>、R<sup>16b</sup>、R<sup>17a</sup>、およびR<sup>17b</sup>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<sup>1</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)RA<sup>1</sup>、-OC(=O)RA<sup>1</sup>、-OC(=O)NR<sup>A1</sup>、-SC(=O)ORA<sup>1</sup>、-SC(=O)SRA<sup>1</sup>、-SC(=O)SRA<sup>1</sup>、-SC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-NHC(=O)RA<sup>1</sup>、-NHC(=O)ORA<sup>1</sup>、-NHC(=O)SRA<sup>1</sup>、-NHC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>、-S(=O)RA<sup>2</sup>、-SO<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>であり、ここでRA<sup>1</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>RA<sup>2</sup>、-C(O)RA<sup>2</sup>であるか、または2つのRA<sup>1</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；RA<sup>2</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；

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<sup>5</sup>およびR<sup>6a</sup>またはR<sup>6b</sup>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<sup>2a</sup>およびR<sup>2b</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333に記載の化合物。

10

(項335)

R<sup>4a</sup>およびR<sup>4b</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333または334に記載の化合物。

20

(項336)

R<sup>11a</sup>および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か、またはR<sup>11a</sup>およびR<sup>11b</sup>が一緒に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<sup>16a</sup>およびR<sup>16b</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333～336のいずれか1項に記載の化合物。

40

(項338)

R<sup>7a</sup>、R<sup>7b</sup>、R<sup>7aa</sup>、およびR<sup>7bb</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か、またはR<sup>7a</sup>およびR<sup>7b</sup>またはR<sup>7aa</sup>およびR<sup>7bb</sup>のいずれかが一緒にになってオキソ(=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339)

$R^{6a}$ 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333～338のいずれか1項に記載の化合物。

(項340)

$R^{12a}$ 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、 $-OR^D_1$ 、 $-OC(=O)R^D_1$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^D_1)_2$ 、または $-NR^D_1C(=O)R^D_1$ であり、ここで $R^D_1$ 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333～339のいずれか1項に記載の化合物。  
10

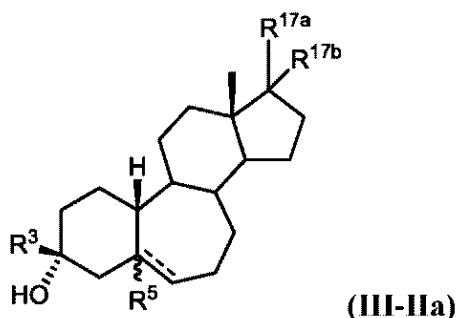
(項341)

$R^{17a}$ 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、 $-ORA^1$ 、 $-SRA^1$ 、 $-N(R^A_1)_2$ 、 $-N(R^A_1)$ 、 $-CN(R^A_1)_2$ 、 $-C(O)R^A_1$ 、 $-OC(=O)R^A_1$ 、 $-OC(=O)OR^A_1$ 、 $-OC(=O)SR^A_1$ 、または $-OC(=O)N(R^A_1)_2$ であり、ここで $R^A_1$ 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333～340のいずれか1項に記載の化合物。  
20

(項342)

前記化合物が、式(IICI-IId)

【化498】



の化合物である、上記項333～341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。

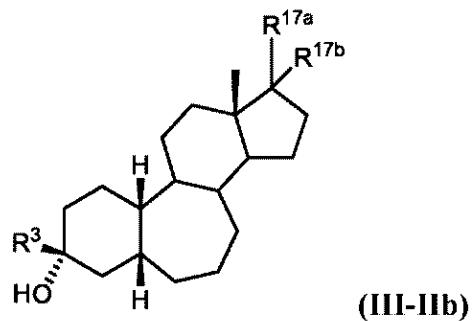
(項343)

前記化合物が、式(IICI-IIb)

40

50

## 【化499】



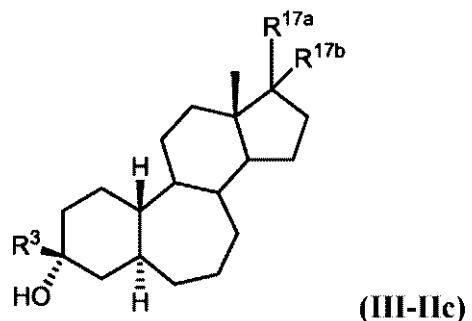
10

の化合物である、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344)

前記化合物が、式(IICI-IIdc)

## 【化500】



20

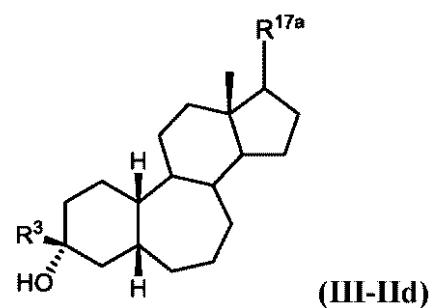
の化合物である、上記項333～342のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項345)

前記化合物が、式(IICI-IId)

30

## 【化501】



40

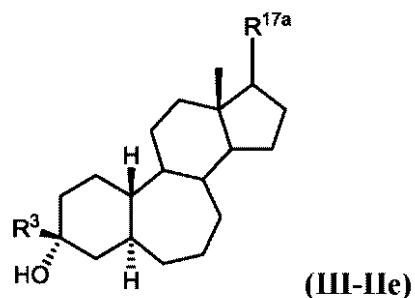
の化合物である、上記項333～342のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項346)

前記化合物が、式(IICI-IIde)

50

## 【化 5 0 2】



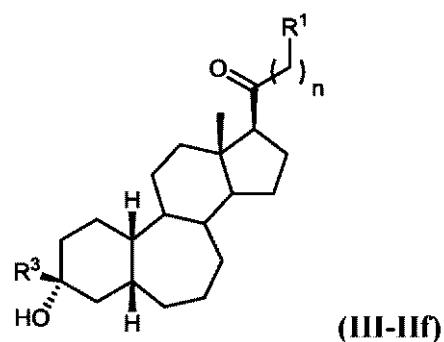
10

の化合物である、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 347)

前記化合物が、式 (III-II - IIIf)

【化 5 0 3】



20

の化合物であり、

ここで、R<sup>1</sup>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<sup>A1</sup>、-SR<sup>A1</sup>、-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>、-NHCO(=O)R<sup>A1</sup>、-NHCO(=O)OR<sup>A1</sup>、-NHCO(=O)SR<sup>A1</sup>、-NHCO(=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であるか、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；

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。

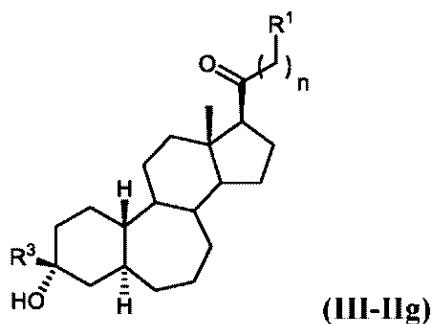
(項 348)

40

50

前記化合物が、式(III-IIg)である。

【化504】



10

の化合物であり、

ここで、R<sup>1</sup>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<sup>A1</sup>、-SR<sup>A1</sup>、-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であるか、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；

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<sup>1</sup>が、

20

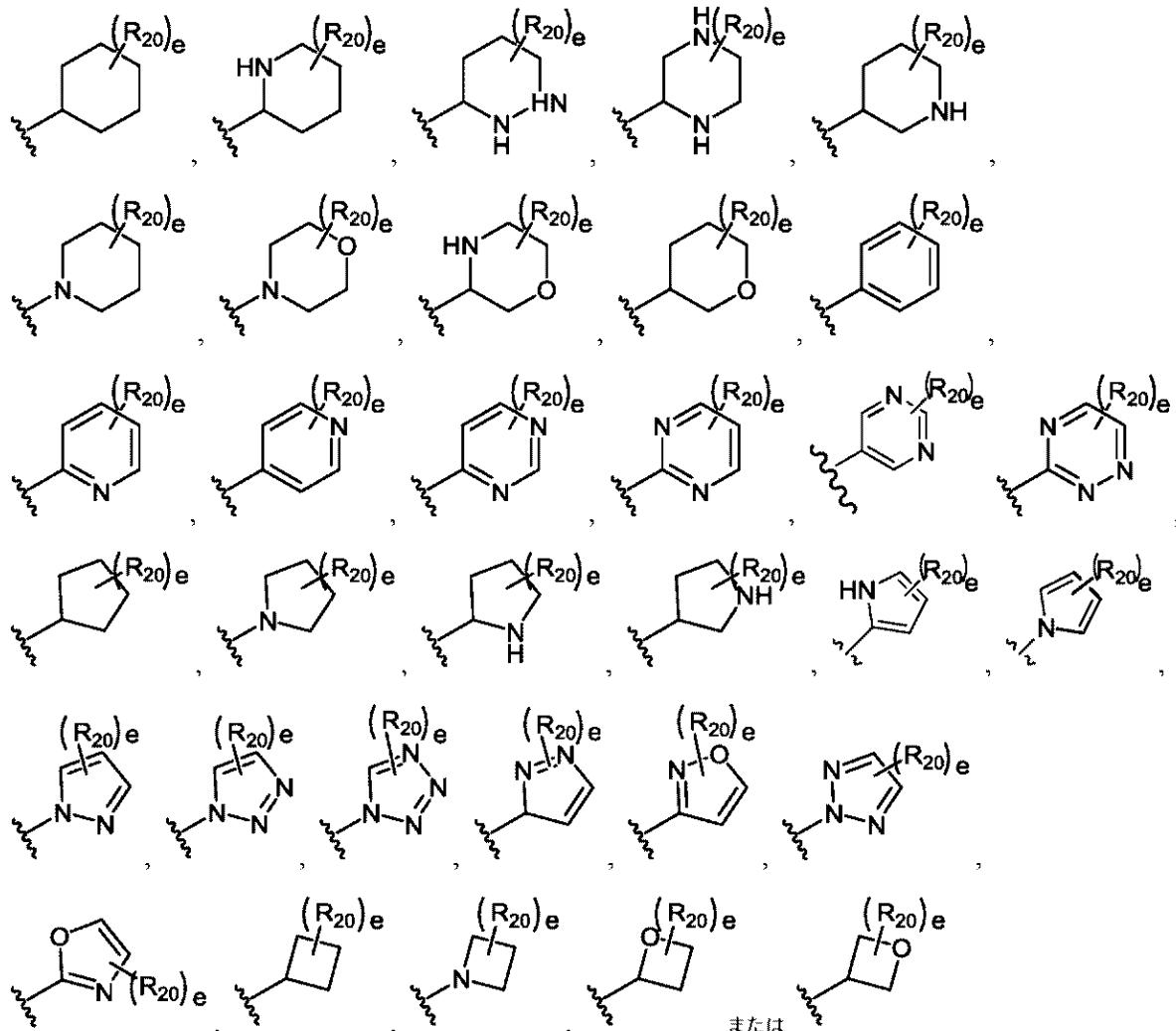
30

30

40

50

## 【化 5 0 5】



であり、

ここで  $R_{20}$  の各々の存在は独立して、ハロゲン、 $-NO_2$ 、 $-CN$ 、 $-OR^{GA}$ 、 $-N(R^{GA})_2$ 、 $-C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-OC(=O)R^{GA}$ 、 $-OC(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-N(R^{GA})C(=O)R^{GA}$ 、 $-OC(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-N(R^{GA})C(=O)OR^{GA}$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、 $-S(=O)_2OR^{GA}$ 、 $-OS(=O)_2R^{GA}$ 、 $-S(=O)_2N(R^{GA})_2$ 、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  $C_{3\sim 6}$  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  $R^{GA}$  が介在原子と一緒にになって、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  $R^{GA}$  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になって、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；

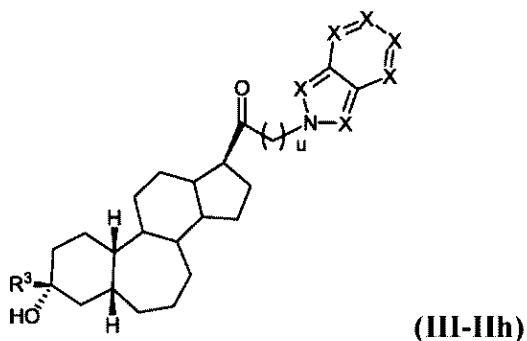
e は、0、1、2、3、4、または5である、上記項347または348に記載の化合物。

(項350)

50

前記化合物が、式(III-I - III-h)

【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<sup>N</sup>)-、-C(R<sup>N</sup>)<sub>2</sub>-、-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>1~6</sub>アルキル、C(=O)R<sup>G A</sup>、-C(=O)OR<sup>G A</sup>、-C(=O)N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G A</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>であり；

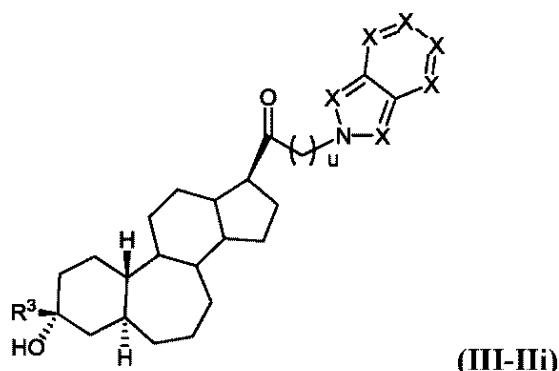
R<sup>G A</sup>の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換C<sub>1~6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3~6</sub>カルボシクリル、置換もしくは非置換の3~6員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つのR<sup>G A</sup>基が介在原子と一緒にになって、置換もしくは非置換のヘテロシクリル環またはヘテロ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-I - III-i)

【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<sup>N</sup>)-、-C(R<sup>N</sup>)<sub>2</sub>-、-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>1~6</sub>アルキル、C(=O)R<sup>G A</sup>、-C(=O)OR<sup>G A</sup>、-C(=O)N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G A</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>であり；

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>1~6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3~6</sub>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

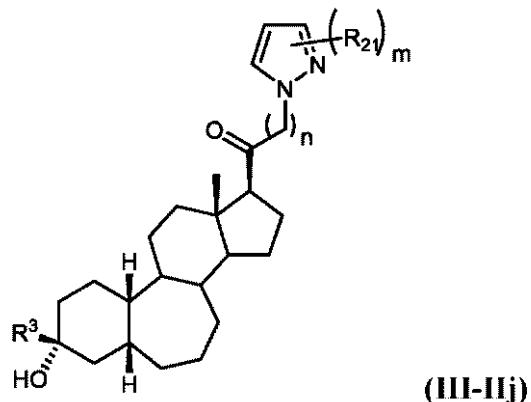
50

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<sup>G A</sup>基が介在原子と一緒にになって、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-I - IIIj)

【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；

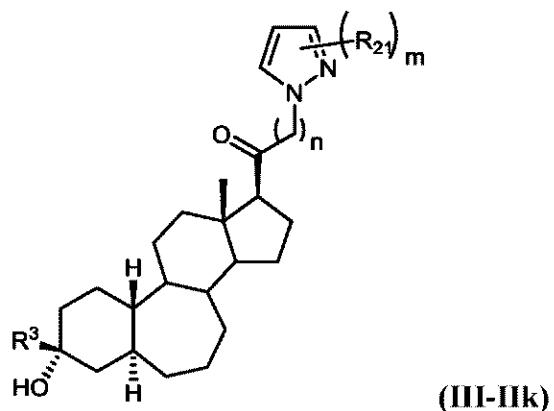
nは、0、1、または2であり；

各R<sup>21</sup>は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシリル、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-I - IIIk)

【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<sup>21</sup>は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシリル、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<sup>21</sup>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。

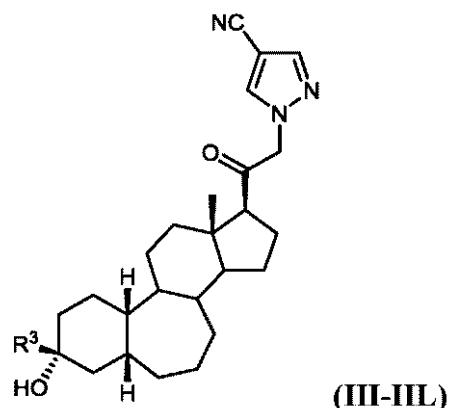
(項356)

前記化合物が、式(III-I - IIIl)

40

50

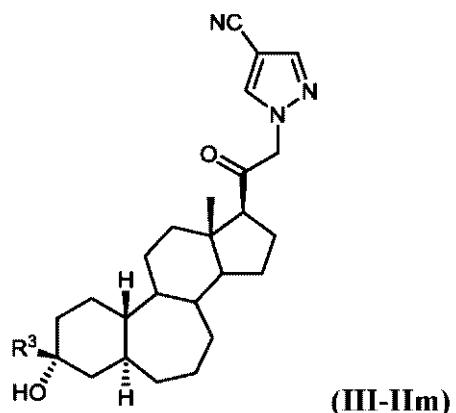
## 【化 5 1 0】



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 (I I I - I I m)

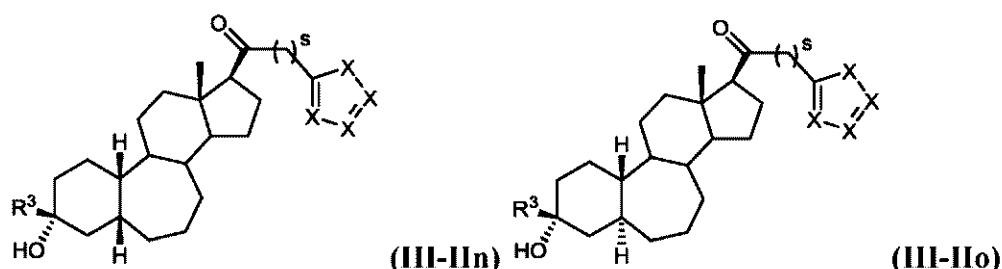
## 【化 5 1 1】



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  
(項 3 5 8)

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

## 【化 5 1 2】



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<sup>N</sup>)<sub>2</sub>、-O-、-S-、-N-、またはN(R<sup>N</sup>)<sub>2</sub> 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>~<sub>6</sub>アルキル、C(=O)R<sup>G</sup>A、-C(=O)OR<sup>G</sup>A、-C(=O)N(R<sup>G</sup>A)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G</sup>A、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G</sup>A)<sub>2</sub> であり；

R<sup>G</sup>A 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>~<sub>6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2</sub>~<sub>6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2</sub>~<sub>6</sub>アルキニル、置換もしく

は非置換 C<sub>3</sub>～<sub>6</sub>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になって、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359)

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360)

R<sup>3</sup>が、非置換アルキルである、上記項333～359のいずれか1項に記載の化合物。 10

(項361)

R<sup>3</sup>が、-C<sub>3</sub>H<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362)

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。

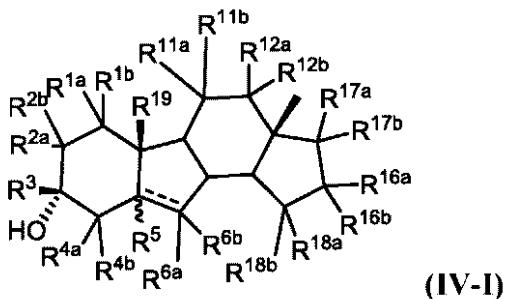
(項363)

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。 20

(項364)

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つて、前記被験体に式(IV-I)：

【化513】



30

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(IV-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514】

が二重結合である場合、R<sup>5</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； 40

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、ヒドロキシリル、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>が一緒にになってオキソ(=O)基を形成し；

R<sup>1a</sup>、R<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup>、R<sup>12b</sup>、R<sup>2a</sup>、R<sup>2b</sup>、R<sup>4a</sup>、R<sup>4b</sup>、R<sup>11a</sup>、R<sup>1</sup>

40

50

1 b、R<sup>1 8 a</sup>、およびR<sup>1 8 b</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>D 1</sup>、-OC(=O)R<sup>D 1</sup>、-NH<sub>2</sub>、-N(R<sup>D 1</sup>)<sub>2</sub>、または-NR<sup>D 1</sup>C(=O)R<sup>D 1</sup>であり、ここでR<sup>D 1</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>D 1</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<sup>1 a</sup>およびR<sup>1 b</sup>、R<sup>1 2 a</sup>およびR<sup>1 2 b</sup>、R<sup>2 a</sup>およびR<sup>2 b</sup>、R<sup>4 a</sup>およびR<sup>4 b</sup>、R<sup>1 1 a</sup>およびR<sup>1 1 b</sup>、ならびにR<sup>1 8 a</sup>およびR<sup>1 8 b</sup>のいずれか1つが一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

R<sup>1 6 a</sup>、R<sup>1 6 b</sup>、R<sup>1 7 a</sup>、およびR<sup>1 7 b</sup>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<sup>1</sup>、-SR<sup>A 1</sup>、-N(R<sup>A 1</sup>)<sub>2</sub>、-N(R<sup>A 1</sup>)、-CN(R<sup>A 1</sup>)<sub>2</sub>、-C(O)RA<sup>1</sup>、-OC(=O)RA<sup>1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A 1</sup>、-OC(=O)SR<sup>A 1</sup>、-OC(=O)N(R<sup>A 1</sup>)<sub>2</sub>、-SC(=O)RA<sup>2</sup>、-SC(=O)OR<sup>A 1</sup>、-SC(=O)SR<sup>A 1</sup>、-SC(=O)N(R<sup>A 1</sup>)<sub>2</sub>、-NHC(=O)RA<sup>1</sup>、-NHC(=O)OR<sup>A 1</sup>、-NHC(=O)SR<sup>A 1</sup>、-NHC(=O)N(R<sup>A 1</sup>)<sub>2</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>、-S(=O)RA<sup>2</sup>、-SO<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>であり、ここでR<sup>A 1</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>RA<sup>2</sup>、-C(O)RA<sup>2</sup>であるか、または2つのR<sup>A 1</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>A 2</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；

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<sup>5</sup>およびR<sup>6 a</sup>またはR<sup>6 b</sup>の一方は存在しない、方法。

#### (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)

10

20

30

40

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。

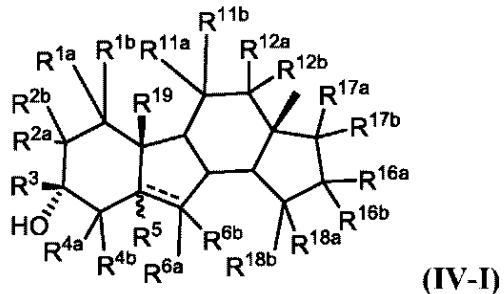
( 項 3 7 1 )

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 】



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<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 7 】

30

が二重結合である場合、R<sup>5</sup> は存在せず；

R<sup>3</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；

R<sup>19</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、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、ヒドロキシリル、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>1a</sup>、R<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup>、R<sup>12b</sup>、R<sup>2a</sup>、R<sup>2b</sup>、R<sup>4a</sup>、R<sup>4b</sup>、R<sup>11a</sup>、R<sup>11b</sup>、R<sup>18a</sup>、および R<sup>18b</sup> の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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するか；または R<sup>1a</sup> および R<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup> および R<sup>12b</sup>、R<sup>2a</sup> およ 40

40

50

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

R<sup>16</sup>a、R<sup>16</sup>b、R<sup>17</sup>a、および R<sup>17</sup>b 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<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>、-OC(=O)R<sup>A1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A1</sup>、-OC(=O)SRA<sup>1</sup>、-OC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-NH<sub>2</sub>、-NHCO<sup>A1</sup>、-NHCO<sup>A1</sup>OR<sup>A1</sup>、-NHCO<sup>A1</sup>SRA<sup>1</sup>、-NHCO<sup>A1</sup>N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>R<sup>A2</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>、-SS(=O)<sub>2</sub>R<sup>A2</sup>、-SS(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>、-S(=O)R<sup>A2</sup>、-SO<sub>2</sub>R<sup>A2</sup>、または -S(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</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> であるか、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；

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<sup>5</sup> および R<sup>6</sup>a または R<sup>6</sup>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 3 7 3)

R<sup>2</sup>a および R<sup>2</sup>b 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 -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である、上記項 3 7 2 に記載の化合物。

(項 3 7 4)

R<sup>4</sup>a および R<sup>4</sup>b 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 -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<sup>11</sup>a および R<sup>11</sup>b 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。

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<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372～374のいずれか1項に記載の化合物。

(項376)

R<sup>16a</sup>およびR<sup>16b</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372～375のいずれか1項に記載の化合物。

(項377)

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372～376のいずれか1項に記載の化合物。

(項378)

R<sup>12a</sup>およびR<sup>12b</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372～377のいずれか1項に記載の化合物。

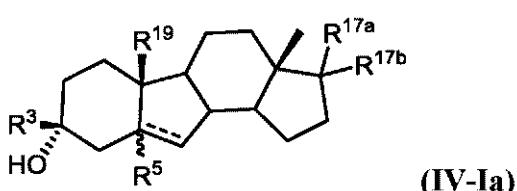
(項379)

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、-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>、-OC(=O)R<sup>A1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A1</sup>、-OC(=O)SR<sup>A1</sup>、または-OC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>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、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】



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)

10

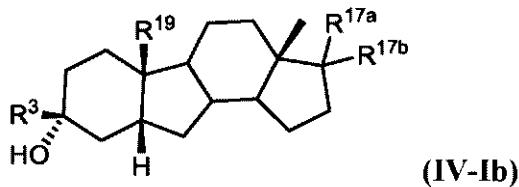
20

30

40

50

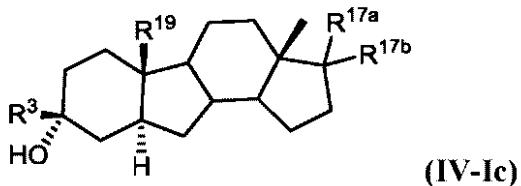
前記化合物が、式 (IV - I b )  
【化 5 2 0】



の化合物である、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。 10

(項 382)

前記化合物が、式 (IV - I c )  
【化 5 2 1】

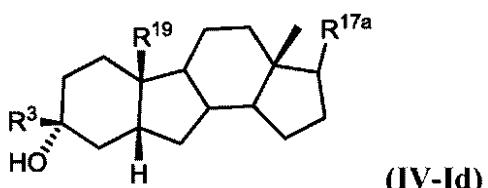


20

の化合物である、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 383)

前記化合物が、式 (IV - I d )  
【化 5 2 2】

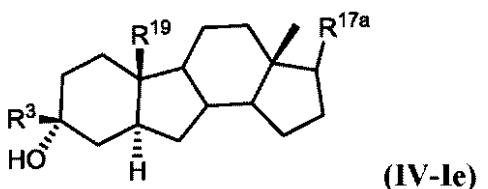


30

の化合物である、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 384)

前記化合物が、式 (IV - I e )  
【化 5 2 3】



40

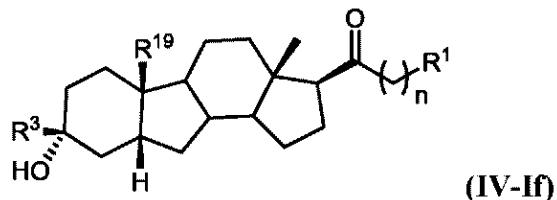
の化合物である、上記項 372 ~ 380 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 385)

前記化合物が、式 (IV - I f )

50

## 【化524】



の化合物であり、

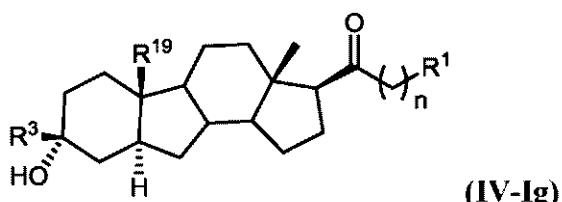
ここで、 $R^1$ は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、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-Ig)

## 【化525】



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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHC(=O)R^{A1}$ 、 $-NHC(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、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；

10

20

30

40

50

$A^2$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、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；

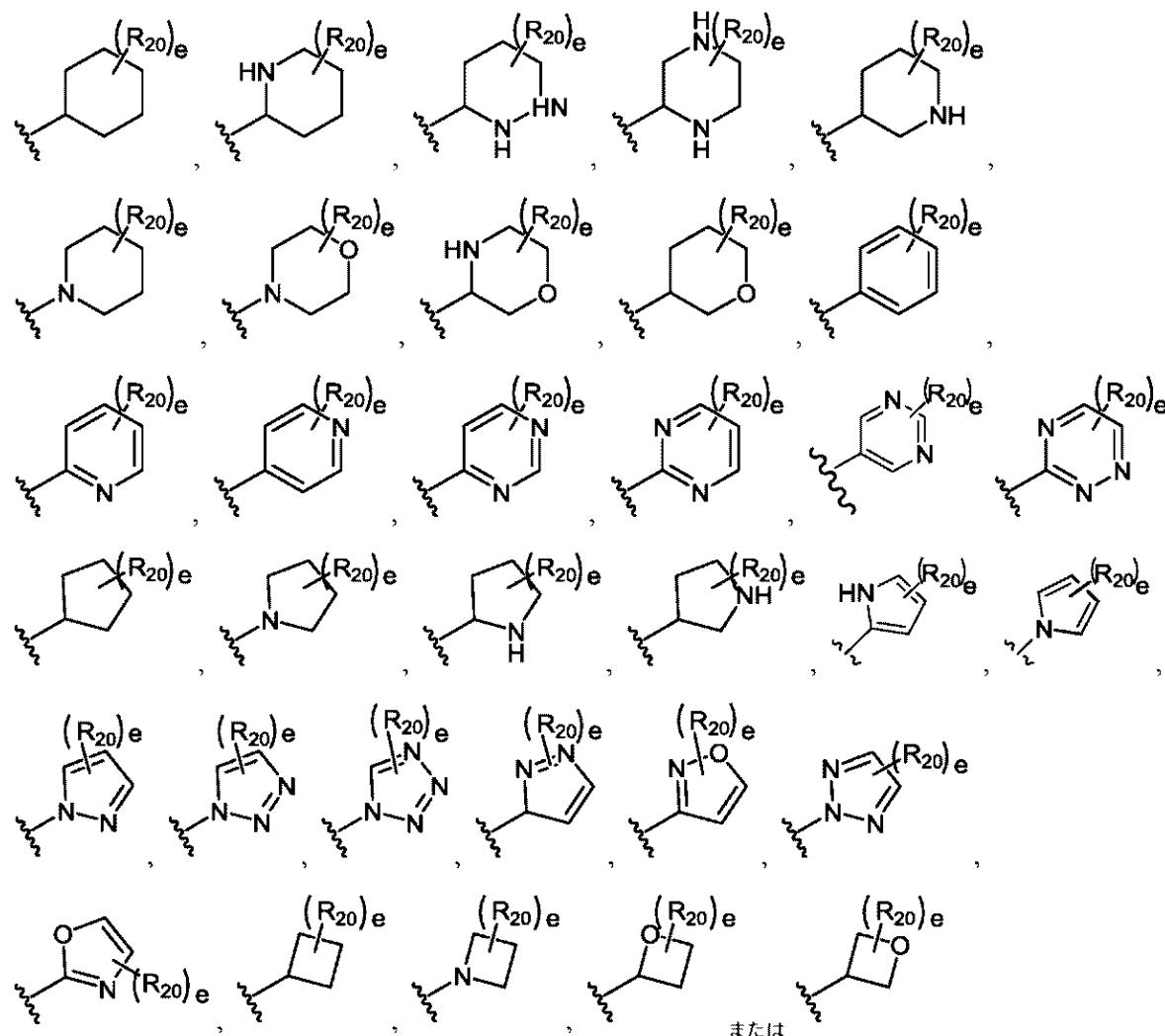
10

$n$ 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

$A$ 、 $-S(=O)_{2}OR^{GA}$ 、 $-OS(=O)_{2}R^{GA}$ 、 $-S(=O)_{2}N(R^G)$   
 $A$ )<sub>2</sub>、または $-N(R^{GA})S(=O)_{2}R^{GA}$ ；置換もしくは非置換C<sub>1～6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2～6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2～6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3～4</sub>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になって、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；

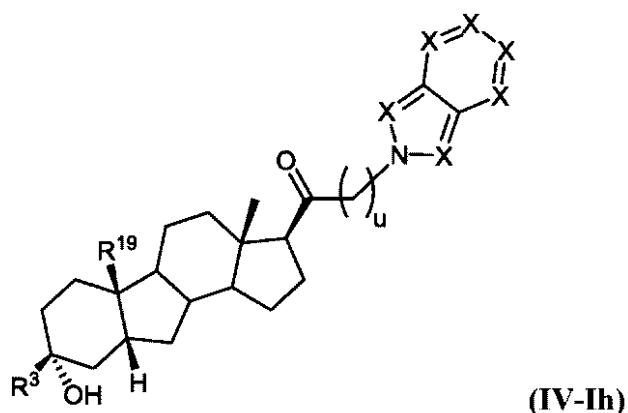
ここでR<sup>GA</sup>の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換C<sub>1～6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2～6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2～6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3～6</sub>カルボシクリル、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つのR<sup>GA</sup>基が介在原子と一緒にになって、置換もしくは非置換の炭素環または複素環式環を形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

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】



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<sup>N</sup>は独立して、水素、置換もしくは非置換C<sub>1～6</sub>アルキル、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^{GA}$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_{2}R^{GA}$ 、または $-S(=O)_{2}N(R^{GA})_2$ 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>1～6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2～6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2～6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3～6</sub>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になって、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

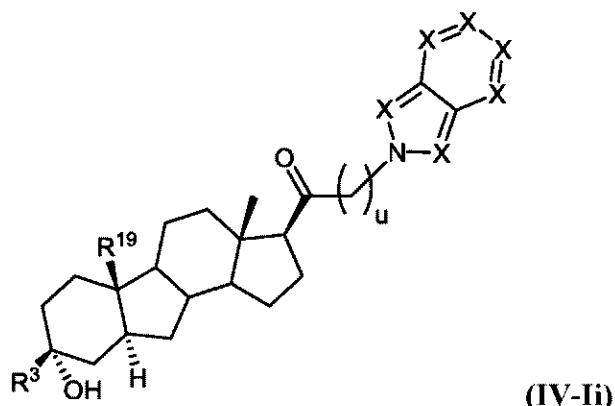
20

30

40

50

## 【化 5 2 8】



10

の化合物であり、

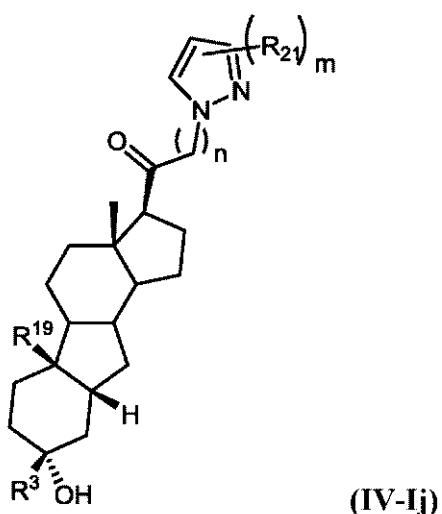
ここで、 $u$ は、0、1、または2であり、各Xは独立して、-C(R<sup>N</sup>)-、-C(R<sup>N</sup>)<sub>2</sub>-、-S-、-N-、またはN(R<sup>N</sup>)-であり、ここでR<sup>N</sup>は独立して、水素、置換もしくは非置換C<sub>1~6</sub>アルキル、C(=O)R<sup>G A</sup>、-C(=O)OR<sup>G A</sup>、-C(=O)N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G A</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R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

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>1~6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3~6</sub>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になって、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390)

前記化合物が、式(IV-Ij)

## 【化 5 2 9】



30

の化合物であり、

ここで、mは、0、1、2、または3であり；

各R<sup>21</sup>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。

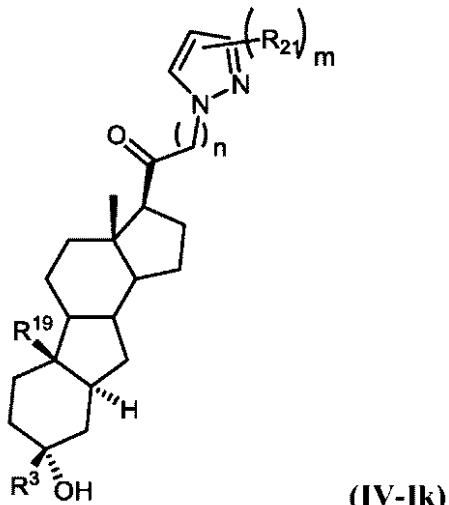
(項391)

前記化合物が、式(IV-Ik)

40

50

## 【化 5 3 0】



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<sup>2</sup>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386に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

20

(項392)

R<sup>2</sup>が、-CNである、上記項390または391に記載の化合物。

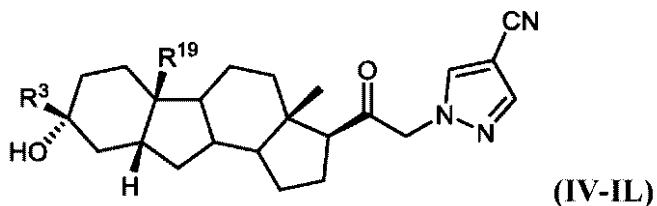
(項393)

mが1であり、nが1である、上記項390～392のいずれか1項に記載の化合物。

(項394)

前記化合物が、式(IV-IL)

【化531】



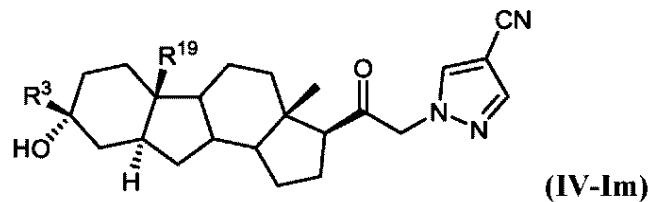
30

の化合物である、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395)

前記化合物が、式(IV-Im)

【化532】



40

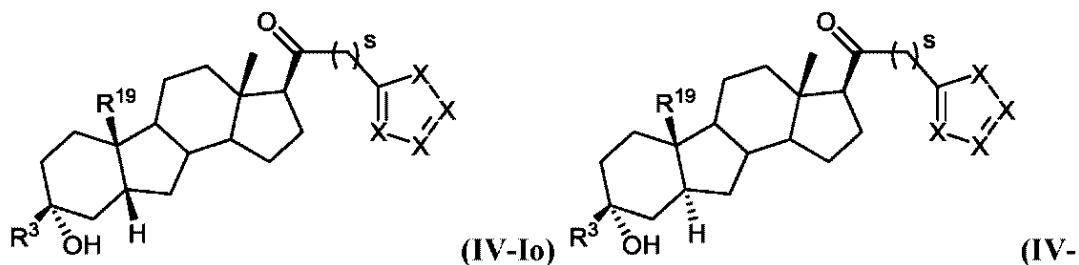
の化合物である、上記項386に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項396)

前記化合物が、式(IV-In)または式(IV-Io)

50

【化 5 3 3】



In)

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<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>G</sup>A、-C(=O)OR<sup>G</sup>A、-C(=O)N(R<sup>G</sup>A)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G</sup>A、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G</sup>A)<sub>2</sub>であり；

R<sup>G</sup>Aの各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換C<sub>1～6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2～6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2～6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3～6</sub>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</sup>A基が介在原子と一緒にになって、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。

20

( 項 3 9 7 )

$R^3$  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。

30

( 項 3 9 8 )

R<sup>3</sup>が、非置換C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>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 3 9 9 )

(図 3-4-4)  $\text{B}_3^3$  が  $-\text{CH}_3$  である。上記項 3-7-2 ~ 3-9-8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

( 項 4 0 0 )

$R_1^1 \sim R_1^9$  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  $C_3 \sim C_6$  アル

40

ケニル、また

のいずれか 1 項に記載の化合物。  
(項 401)

40

R 19 が 非

（項 1-2-3）

40

( 項 4 0 2 )

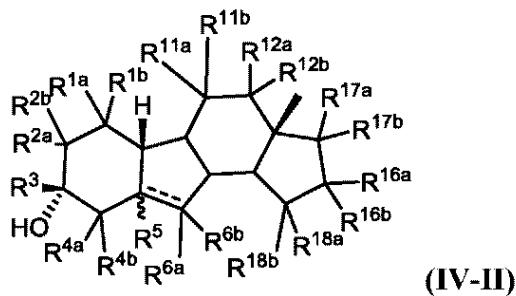
R<sub>1</sub> が  $\text{CH}_3$  の場合、上記項 3, 2~40-1 のいずれか 1 項に記載の化合物。  
(項 1, 2, 3)

40

（項405）

式 ( 1 v - 1 1 ) :

## 【化534】



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 V - I 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535】

が二重結合である場合、R<sup>5</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；

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、ヒドロキシリル、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>1a</sup>、R<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup>、R<sup>12b</sup>、R<sup>2a</sup>、R<sup>2b</sup>、R<sup>4a</sup>、R<sup>4b</sup>、R<sup>11a</sup>、R<sup>11b</sup>、R<sup>18a</sup>、およびR<sup>18b</sup>の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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するか；またはR<sup>1a</sup>およびR<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup>およびR<sup>12b</sup>、R<sup>2a</sup>およびR<sup>2b</sup>、R<sup>4a</sup>およびR<sup>4b</sup>、R<sup>11a</sup>およびR<sup>11b</sup>、ならびにR<sup>18a</sup>およびR<sup>18b</sup>のいずれか1つが一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

R<sup>16a</sup>、R<sup>16b</sup>、R<sup>17a</sup>、およびR<sup>17b</sup>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<sup>1</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)RA<sup>1</sup>、-OC(=O)RA<sup>1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A1</sup>、-OC(=O)SR<sup>A1</sup>、-OC(=O)NR<sup>A1</sup>、-SC(=O)RA<sup>2</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)RA<sup>1</sup>、-NHC(=O)OR<sup>A1</sup>、-NHC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、-S-S(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>、-S(=O)RA<sup>2</sup>、-SO<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</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

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、 $-SO_2R^A_2$ 、 $-C(O)R^A_2$ であるか、または2つの $R^A_1$ 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； $R^A_2$ 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；

ここで、

10

【化536】

-----

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、ヒドロキシリ、置換もしくは非置換アルキル、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 $-N^{D1}C(=O)R^{D1}$ 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。

(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、ヒドロキシリ、置換もしくは非置換アルキル、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 $-N^{D1}C(=O)R^{D1}$ 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。

(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、ヒドロキシリ、置換もしくは非置換アルキル、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 $-N^{D1}C(=O)R^{D1}$ 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。

(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、ヒドロキシリ、置換もしくは非置換アルキル、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 $-N^{D1}C(=O)R^{D1}$ 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403～405のいずれか1項に記載の化合物。

40  
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 403～406 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 408)

R<sup>7a</sup>、R<sup>7b</sup>、R<sup>7aa</sup>、および R<sup>7bb</sup> が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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か、または R<sup>7a</sup> および R<sup>7b</sup> または R<sup>7aa</sup> および R<sup>7bb</sup> のいずれかが一緒にになってオキソ(=O)を形成する、上記項 403～407 のいずれか 1 項に記載の化合物。10

(項 409)

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 403～408 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 410)

R<sup>12a</sup> および R<sup>12b</sup> が、各々独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、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 403～409 のいずれか 1 項に記載の化合物。20

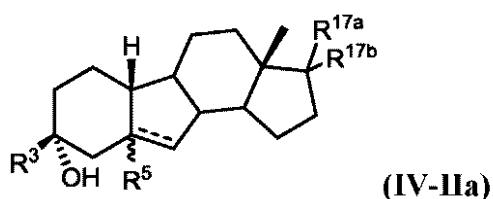
(項 411)

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、-ORA<sup>1</sup>、-SRA<sup>1</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>、-OC(=O)R<sup>A1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A1</sup>、-OC(=O)SRA<sup>1</sup>、または -OC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub> 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、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 403～410 のいずれか 1 項に記載の化合物。30

(項 412)

前記化合物が、式 (IV-IIa)

【化 537】

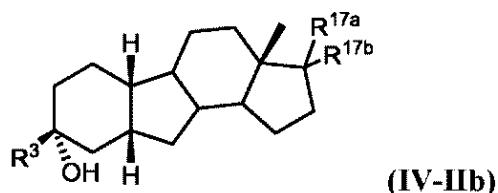


の化合物である、上記項 403～411 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 413)

前記化合物が、式 (IV-IIb)

## 【化538】

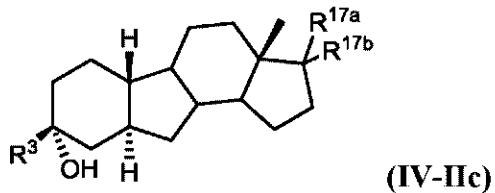


の化合物である、上記項403～412のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。  
10

(項414)

前記化合物が、式(IV-IIc)

## 【化539】

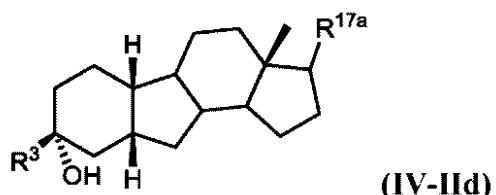


の化合物である、上記項403～412のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。  
20

(項415)

前記化合物が、式(IV-IId)

## 【化540】



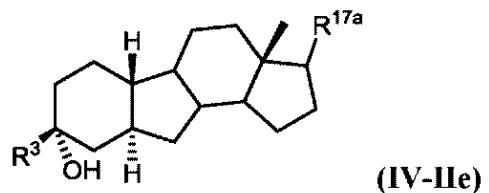
30

の化合物である、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416)

前記化合物が、式(IV-IIe)

## 【化541】



40

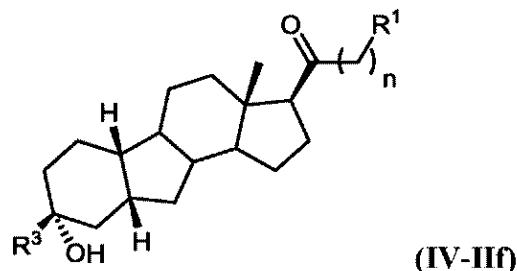
の化合物である、上記項403～412のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項417)

前記化合物が、式(IV-IIIf)

50

## 【化542】



の化合物であり、

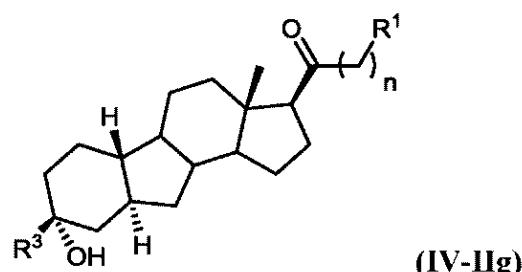
ここで、 $R^1$ は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHCO(=O)R^{A1}$ 、 $-NHCO(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHCO(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHCO(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、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418)

前記化合物が、式(IV-IIg)

【化543】



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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NHCO(=O)R^{A1}$ 、 $-NHCO(=O)OR^{A1}$ 、 $-NHCO(=O)SR^{A1}$ 、 $-NHCO(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、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；

50

(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であるか、または2つのR<sup>A1</sup>基が一緒に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：

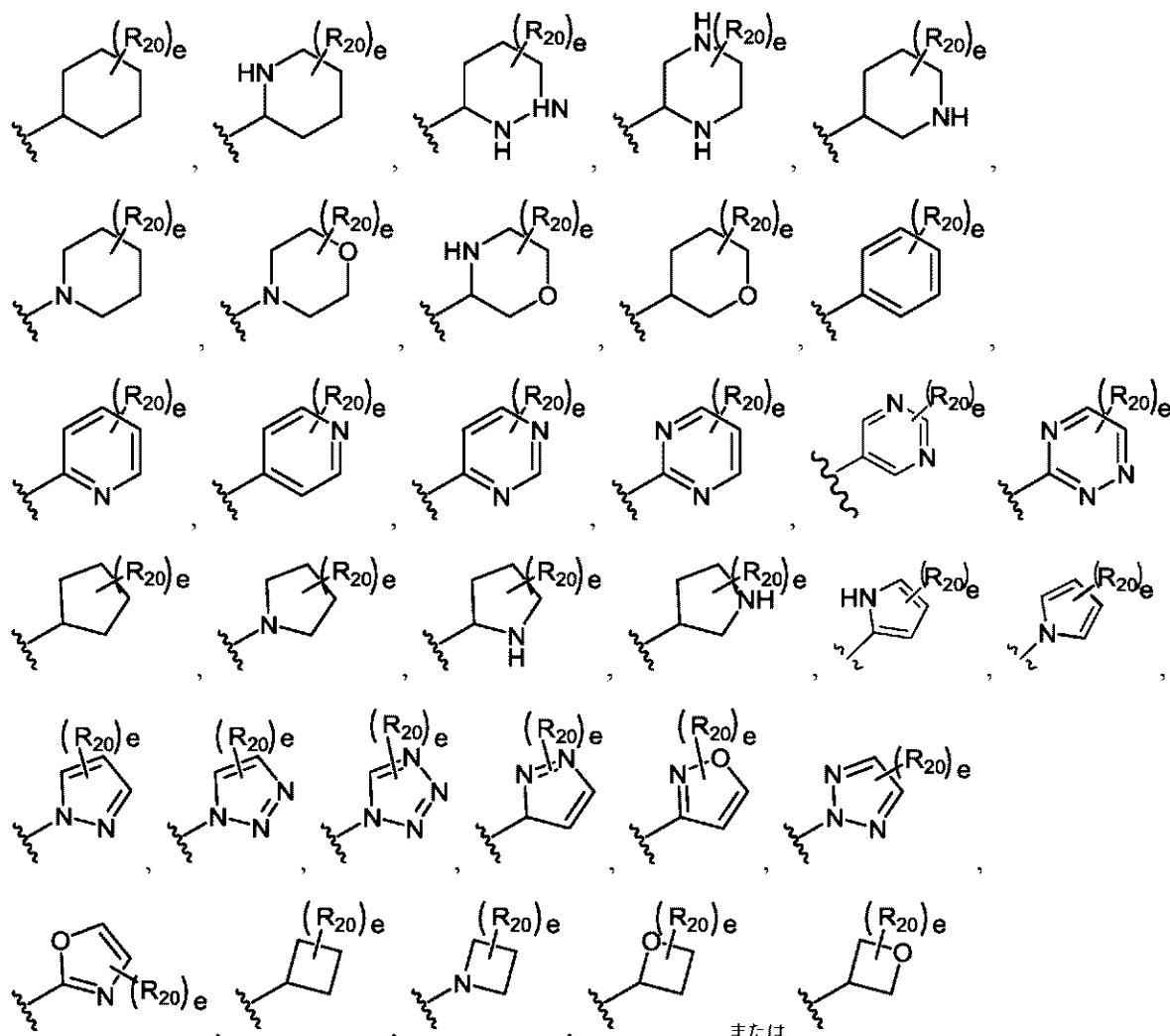
10

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 4 1 9 )

R<sup>1</sup> が、

【化 5 4 4】



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、 $-NO_2$ 、 $-CN$ 、 $-ORG_A$ 、 $-N(ORG_A)_2$ 、 $-C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)ORG_A$ 、 $-OC(=O)R^{GA}$ 、 $-$

50

$O C ( = O ) O R^G A$ 、 $- C ( = O ) N ( R^G A )_2$ 、 $- N ( R^G A ) C ( = O ) R^G A$ 、  
 $- O C ( = O ) N ( R^G A )_2$ 、 $- N ( R^G A ) C ( = O ) O R^G A$ 、 $- S ( = O )_2 R^G A$ 、  
 $- S ( = O )_2 O R^G A$ 、 $- O S ( = O )_2 R^G A$ 、 $- S ( = O )_2 N ( R^G A )_2$ 、  
 または $- N ( R^G A ) S ( = O )_2 R^G A$ ；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 $C_{3~4}$ 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 $R^G A$ が介在原子と一緒にになって、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；

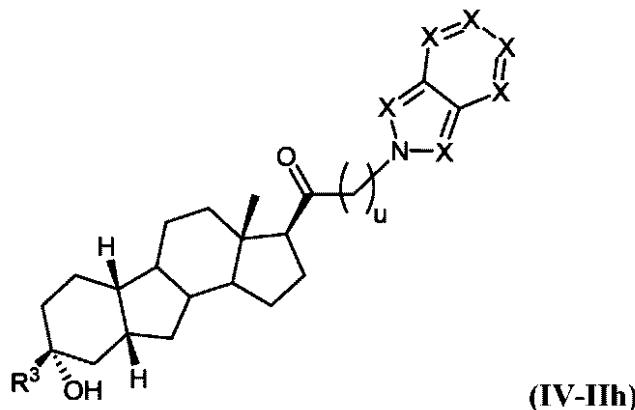
ここで $R^G A$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換 $C_{1~6}$ アルキル、  
 置換もしくは非置換 $C_{2~6}$ アルケニル、置換もしくは非置換 $C_{2~6}$ アルキニル、置換もしくは非置換 $C_{3~6}$ カルボシクリル、置換もしくは非置換の3~6員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または2つの $R^G A$ 基が介在原子と一緒にになって、置換もしくは非置換の炭素環または複素環式環を形成し；

eは、0、1、2、3、4、または5である、上記項417または418に記載の化合物。

(項420)

前記化合物が、式(IV-IIh)

【化545】



20

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 $C_{1~6}$ アルキル、 $C ( = O ) R^G A$ 、 $- C ( = O ) O R^G A$ 、 $- C ( = O ) N ( R^G A )_2$ 、 $- S ( = O )_2 R^G A$ 、または $- S ( = O )_2 N ( R^G A )_2$ であり；

$R^G A$ 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 $R^G A$ 基が介在原子と一緒にになって、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。

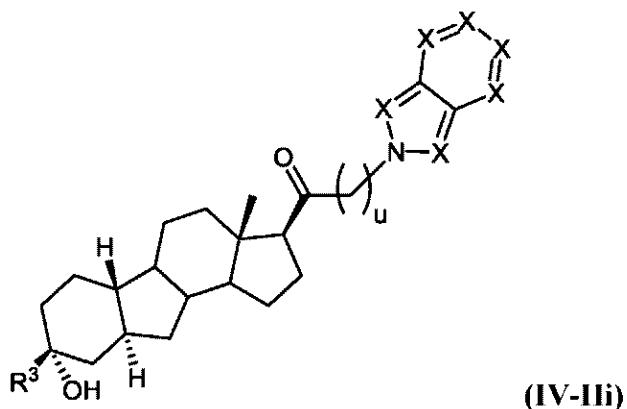
(項421)

前記化合物が、式(IV-IIi)

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<sup>N</sup>)-、-C(R<sup>N</sup>)<sub>2</sub>-、-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>1~6</sub>アルキル、C(=O)R<sup>G A</sup>、-C(=O)OR<sup>G A</sup>、-C(=O)N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G A</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>であり；

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>1~6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3~6</sub>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になって、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。

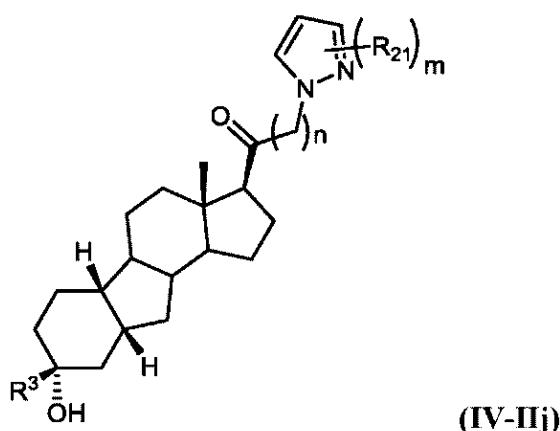
(項422)

前記化合物が、式(IV-IIj)

## 【化 5 4 7】

20

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；

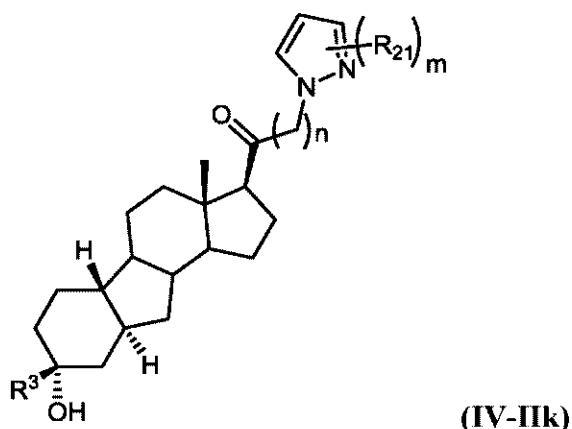
各R<sup>21</sup>は独立して、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、ヒドロキシル、またはシアノである、上記項417に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項423)

前記化合物が、式(IV-IIk)

50

## 【化 5 4 8】



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<sup>21</sup>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418に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項424)

R<sup>21</sup>が、-CNである、上記項422または423に記載の化合物。

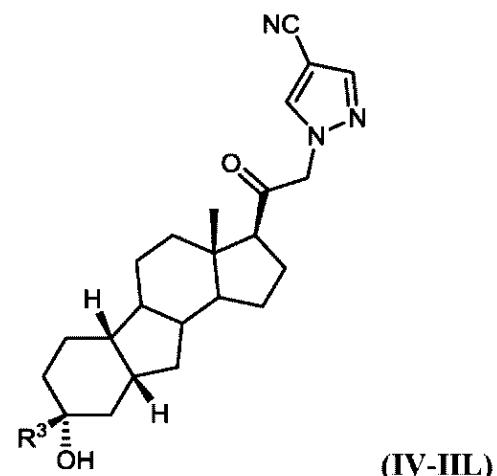
(項425)

mが1であり、nが1である、上記項422～424のいずれか1項に記載の化合物。

(項426)

前記化合物が、式(IV-IIl)

## 【化549】

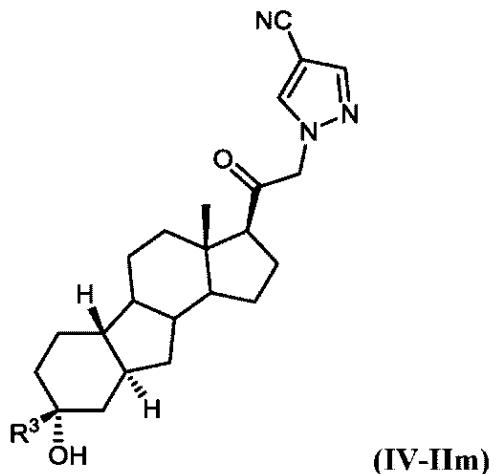


の化合物である、上記項422に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項427)

前記化合物が、式(IV-IIm)

## 【化 5 5 0】



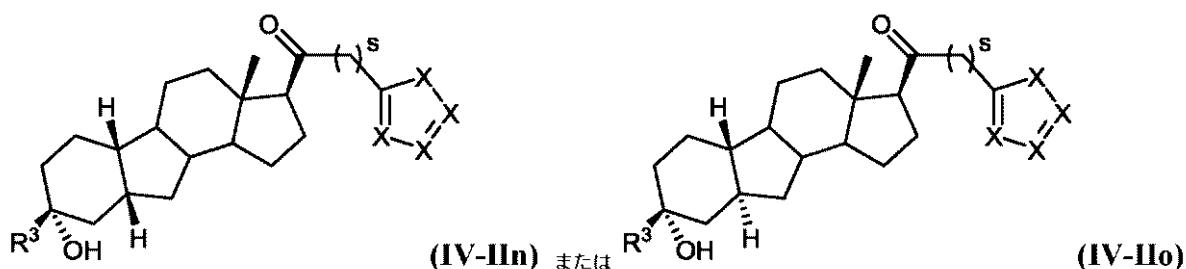
10

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-IIn) または式 (IV-IIo)

## 【化 5 5 1】



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<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>G</sup>A、-C(=O)OR<sup>G</sup>A、-C(=O)N(R<sup>G</sup>A)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G</sup>A、または -S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G</sup>A)<sub>2</sub> であり；

R<sup>G</sup>A 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</sup>A 基が介在原子と一緒にになって、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 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 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<sup>3</sup> が、非置換 C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub> 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<sup>3</sup> が、-CH<sub>3</sub> 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)

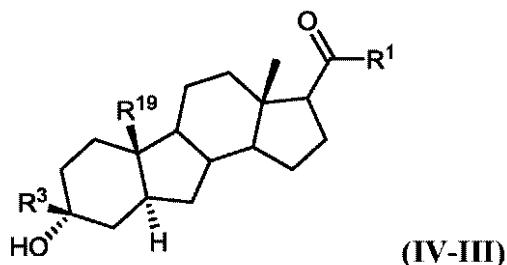
30

40

50

式(IV-I) :

【化552】



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-I)において、

R<sup>1</sup>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C、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>、-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>、-NHCO(=O)R<sup>A1</sup>、-NHCO(=O)OR<sup>A1</sup>、-NHCO(=O)SR<sup>A1</sup>、-NHCO(=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>、-SS(=O)<sub>2</sub>R<sup>A2</sup>、-SS(=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であるか、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；

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、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433)

R<sup>1</sup>が、置換もしくは非置換C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルである、上記項432に記載の化合物。

(項434)

R<sup>1</sup>が、-CH<sub>3</sub>である、上記項432または433に記載の化合物。

(項435)

R<sup>19</sup>が、置換もしくは非置換C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2</sub>～C<sub>6</sub>アルケニル、または置換もしくは非置換C<sub>2</sub>～C<sub>6</sub>アルキニルである、上記項432～434のいずれか1項に記載の化合物。

(項436)

R<sup>19</sup>が、非置換C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルである、上記項432～435のいずれか1項に記載の化合物。

(項437)

20

30

40

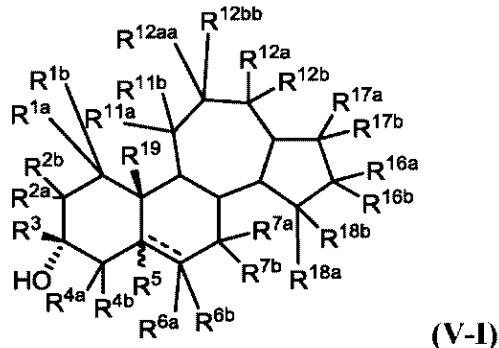
50

R<sup>3</sup> が、水素または非置換 C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキルである、上記項 423 ~ 425 のいずれか 1 項に記載の化合物。

( 項 438 )

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つて、前記被験体に式 (V-I) :

【化 553】



10

20

30

40

50

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<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 554】

が二重結合である場合、R<sup>5</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；

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<sup>1a</sup>、R<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup>、R<sup>12b</sup>、R<sup>12aa</sup>、R<sup>12bb</sup>、R<sup>2a</sup>、R<sup>2b</sup>、R<sup>4a</sup>、R<sup>4b</sup>、R<sup>11a</sup>、R<sup>11b</sup>、R<sup>18a</sup>、および R<sup>18b</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アルキニル、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 -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<sup>1a</sup> および R<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup> および R<sup>12b</sup>、R<sup>2a</sup> および R<sup>2b</sup>、R<sup>4a</sup> および R<sup>4b</sup>、R<sup>11a</sup> および R<sup>11b</sup>、R<sup>12aa</sup> および R<sup>12bb</sup>、ならびに R<sup>18a</sup> および R<sup>18b</sup> のいずれか 1 つが一緒になってオキソ (=O) 基を形成し；

R<sup>7a</sup> および R<sup>7b</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>7a</sup>およびR<sup>7b</sup>が一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

R<sup>16a</sup>、R<sup>16b</sup>、R<sup>17a</sup>、およびR<sup>17b</sup>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<sup>1</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)RA<sup>1</sup>、-OC(=O)RA<sup>1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A1</sup>、-OC(=O)SRA<sup>1</sup>、-OC(=O)NR<sup>A1</sup>、-SC(=O)RA<sup>2</sup>、-SC(=O)OR<sup>A1</sup>、-SC(=O)SRA<sup>1</sup>、-SC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-NHC(=O)RA<sup>1</sup>、-NHC(=O)ORA<sup>1</sup>、-NHC(=O)SRA<sup>1</sup>、-NHC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>、-S(=O)RA<sup>2</sup>、-SO<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>であり、ここでRA<sup>1</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>RA<sup>2</sup>、-C(O)RA<sup>2</sup>であるか、または2つのRA<sup>1</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；RA<sup>2</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；

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<sup>5</sup>およびR<sup>6a</sup>またはR<sup>6b</sup>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

10

20

30

40

50

される、上記項 438 ~ 442 のいずれか 1 項に記載の方法。

(項 444)

前記 CNS 関連障害に経口投与される、上記項 438 ~ 443 のいずれか 1 項に記載の方法。

(項 445)

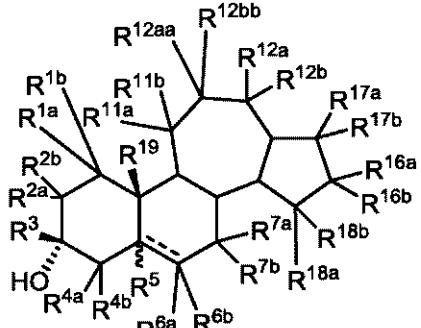
前記 CNS 関連障害に静脈内投与される、上記項 438 ~ 444 のいずれか 1 項に記載の方法。

(項 446)

式 (V-I) :

【化 556】

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<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 557】

30

が二重結合である場合、R<sup>5</sup> は存在せず；

R<sup>3</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；

R<sup>19</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、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、ヒドロキシリル、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>1a</sup>、R<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup>、R<sup>12b</sup>、R<sup>12aa</sup>、R<sup>12bb</sup>、R<sup>2a</sup>、R<sup>2b</sup>、R<sup>4a</sup>、R<sup>4b</sup>、R<sup>11a</sup>、R<sup>11b</sup>、R<sup>18a</sup>、および R<sup>18b</sup> の各々は独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシリル、置換もしくは非置換アルキル、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するか；または R<sup>1a</sup> および R<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup> および R<sup>12b</sup>、R<sup>2a</sup> および R<sup>2b</sup>、R<sup>4a</sup> および R<sup>4b</sup>、R<sup>11a</sup> および R<sup>11b</sup>、R<sup>12aa</sup> および R<sup>12bb</sup>、ならびに R<sup>18a</sup> および R<sup>18b</sup> のいずれか 1 つが一緒に

40

50

なってオキソ(=O)基を形成し；

R<sup>7a</sup>およびR<sup>7b</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>7a</sup>およびR<sup>7b</sup>が一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

R<sup>16a</sup>、R<sup>16b</sup>、R<sup>17a</sup>、およびR<sup>17b</sup>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<sup>1</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)RA<sup>1</sup>、-OC(=O)RA<sup>1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A1</sup>、-OC(=O)SRA<sup>1</sup>、-SC(=O)RA<sup>2</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)RA<sup>1</sup>、-NHC(=O)OR<sup>A1</sup>、-NHC(=O)SRA<sup>1</sup>、-NHC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>、-S(=O)RA<sup>2</sup>、-SO<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</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>RA<sup>2</sup>、-C(O)RA<sup>2</sup>であるか、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；

ここで、

【化558】

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<sup>5</sup>およびR<sup>6a</sup>またはR<sup>6b</sup>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447)

R<sup>2a</sup>およびR<sup>2b</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446に記載の化合物。

(項448)

R<sup>4a</sup>およびR<sup>4b</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

10

20

30

40

50

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446または447に記載の化合物。

(項449)

R<sup>11a</sup>および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446～448のいずれか1項に記載の化合物。  
10

(項450)

R<sup>16a</sup>およびR<sup>16b</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446～449のいずれか1項に記載の化合物。  
20

(項451)

R<sup>7a</sup>およびR<sup>7b</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446～450のいずれか1項に記載の化合物。  
30

(項452)

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446～451のいずれか1項に記載の化合物。

(項453)

R<sup>12a</sup>、R<sup>12b</sup>、R<sup>12aa</sup>、およびR<sup>12bb</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446～452のいずれか1項に記載の化合物。  
40

(項454)

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、-ORA<sup>1</sup>、-SRA<sup>1</sup>、-N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-N  
50

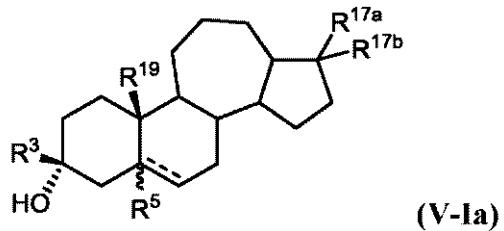
( $R^{A1}$ )、-CN( $R^{A1}$ )<sub>2</sub>、-C(O)R $^{A1}$ 、-OC(=O)R $^{A1}$ 、-OC(=O)OR $^{A1}$ 、-OC(=O)SR $^{A1}$ 、または-OC(=O)N( $R^{A1}$ )<sub>2</sub>であり、ここで $R^{A1}$ の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールである、上記項446～453のいずれか1項に記載の化合物。

(項455)

前記化合物が、式(V-Ia)

【化559】

10



(V-Ia)

の化合物である、上記項446～454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。

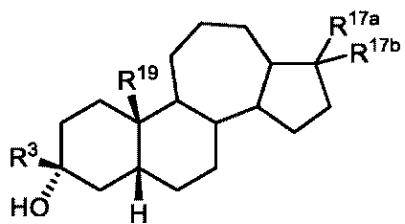
20

(項456)

前記化合物が、式(V-Ib)

【化560】

30



(V-Ib)

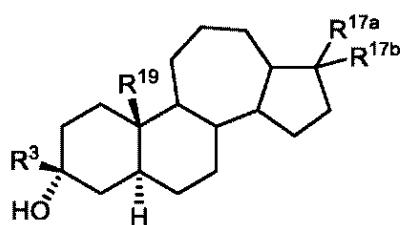
の化合物である、上記項446～455のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項457)

前記化合物が、式(V-Ic)

【化561】

40



(V-Ic)

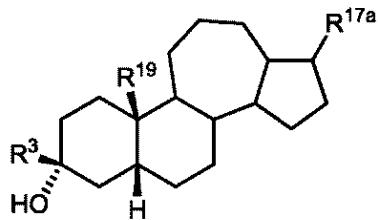
の化合物である、上記項446～455のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

50

(項 4 5 8 )

前記化合物が、式 (V - I d )

【化 5 6 2】



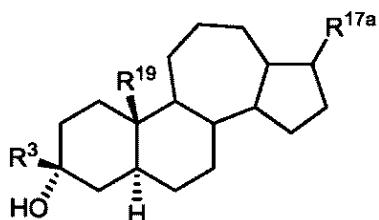
(V-I d)

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】



(V-I e)

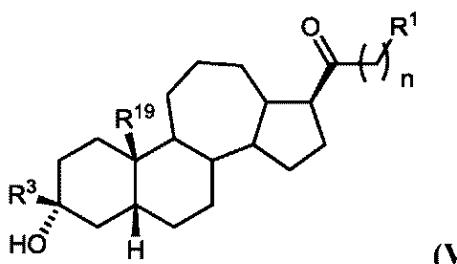
の化合物である、上記項 4 4 6 ~ 4 5 5 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

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<sup>1</sup>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<sup>A</sup><sup>1</sup>、-SR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-N(R<sup>A</sup><sup>1</sup>)<sub>2</sub>、-OC(=O)R<sup>A</sup><sup>1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-OC(=O)SR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-OC(=O)N(R<sup>A</sup><sup>1</sup>)<sub>2</sub>、-SC(=O)R<sup>A</sup><sup>2</sup>、-SC(=O)OR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-SC(=O)SR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-SC(=O)N(R<sup>A</sup><sup>1</sup>)<sub>2</sub>、-NHCO(=O)R<sup>A</sup><sup>1</sup>、-NHCO(=O)OR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-NHCO(=O)SR<sup>A</sup><sup>1</sup>、-NHCO(=O)N(R<sup>A</sup><sup>1</sup>)<sub>2</sub>、-OS(=O)R<sup>A</sup><sup>2</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>

50

$\text{O R}^{\text{A}1}$ 、 $-\text{S}-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{A}2}$ 、 $-\text{S}-\text{S}(=\text{O})_2\text{O R}^{\text{A}1}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})\text{R}^{\text{A}2}$ 、 $-\text{SO}_2\text{R}^{\text{A}2}$ 、または $-\text{S}(=\text{O})_2\text{O R}^{\text{A}1}$ であり、ここで $\text{R}^{\text{A}1}$ 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であるか、または2つの $\text{R}^{\text{A}1}$ 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； $\text{R}^{\text{A}2}$ 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；

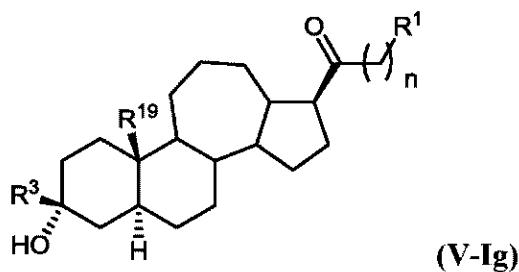
10

$n$ 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、 $\text{R}^1$ 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、 $-\text{OR}^{\text{A}1}$ 、 $-\text{SR}^{\text{A}1}$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{A}1})_2$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{R}^{\text{A}1}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{OR}^{\text{A}1}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{SR}^{\text{A}1}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{A}1})_2$ 、 $-\text{SC}(=\text{O})\text{R}^{\text{A}2}$ 、 $-\text{SC}(=\text{O})\text{OR}^{\text{A}1}$ 、 $-\text{SC}(=\text{O})\text{SR}^{\text{A}1}$ 、 $-\text{SC}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{A}1})_2$ 、 $-\text{NHC}(=\text{O})\text{R}^{\text{A}1}$ 、 $-\text{NHC}(=\text{O})\text{OR}^{\text{A}1}$ 、 $-\text{NHC}(=\text{O})\text{SR}^{\text{A}1}$ 、 $-\text{NHC}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{A}1})_2$ 、 $-\text{OS}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{A}2}$ 、 $-\text{OS}(=\text{O})_2\text{OR}^{\text{A}1}$ 、 $-\text{S}-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{\text{A}2}$ 、 $-\text{S}-\text{S}(=\text{O})_2\text{OR}^{\text{A}1}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})\text{R}^{\text{A}2}$ 、 $-\text{SO}_2\text{R}^{\text{A}2}$ 、または $-\text{S}(=\text{O})_2\text{OR}^{\text{A}1}$ であり、ここで $\text{R}^{\text{A}1}$ 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であるか、または2つの $\text{R}^{\text{A}1}$ 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； $\text{R}^{\text{A}2}$ 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

$n$ 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。

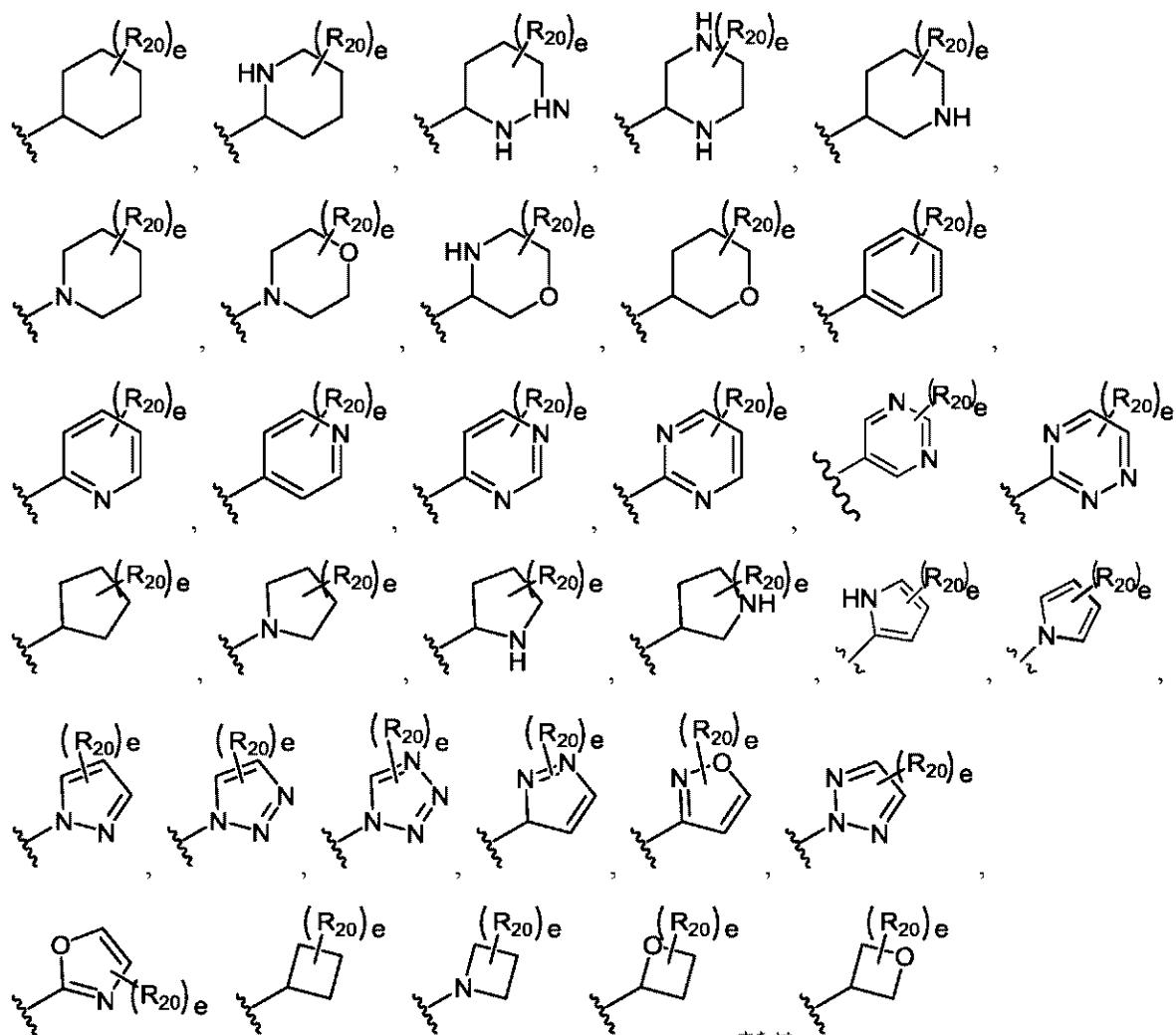
40

(項462)

$\text{R}^1$ が、

50

【化 5 6 6】



であり、

ここで  $R_{20}$  の各々の存在は独立して、ハロゲン、-NO<sub>2</sub>、-CN、-ORG<sub>A</sub>、-N(RGA)<sub>2</sub>、-C(=O)RGA、-C(=O)ORG<sub>A</sub>、-OC(=O)RGA、-OC(=O)ORG<sub>A</sub>、-C(=O)N(RGA)<sub>2</sub>、-N(RGA)C(=O)RGA、-OC(=O)N(RGA)<sub>2</sub>、-N(RGA)C(=O)ORG<sub>A</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>RGA、-S(=O)<sub>2</sub>ORG<sub>A</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>RGA、-S(=O)<sub>2</sub>N(RGA)<sub>2</sub>、または-N(RGA)S(=O)<sub>2</sub>RGA；置換もしくは非置換C<sub>1~6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3~4</sub>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RGAが介在原子と一緒にになって、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；

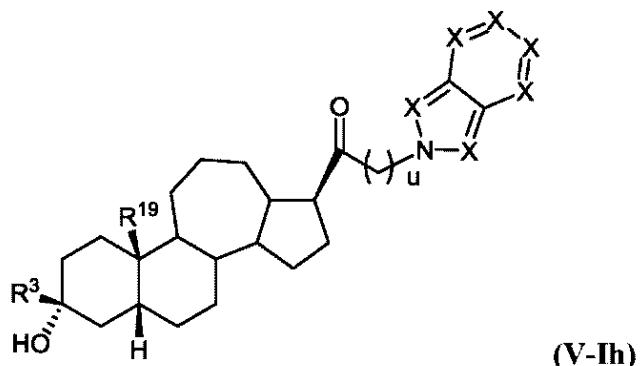
ここで  $R^{GA}$  の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換  $C_{1\sim 6}$  アルキル、置換もしくは非置換  $C_{2\sim 6}$  アルケニル、置換もしくは非置換  $C_{2\sim 6}$  アルキニル、置換もしくは非置換  $C_{3\sim 6}$  カルボシクリル、置換もしくは非置換の 3~6 員ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素に結合する場合の酸素保護基、窒素に結合する場合の窒素保護基であるか、または 2 つの  $R^{GA}$  基が介在原子と一緒にになって、置換もしくは非置換の炭素環また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

(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<sup>N</sup>)-、-C(R<sup>N</sup>)<sub>2</sub>-、-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>~<sub>6</sub>アルキル、C(=O)R<sup>G A</sup>、-C(=O)OR<sup>G A</sup>、-C(=O)N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G A</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>であり；

20

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>~<sub>6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2</sub>~<sub>6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2</sub>~<sub>6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3</sub>~<sub>6</sub>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になって、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。

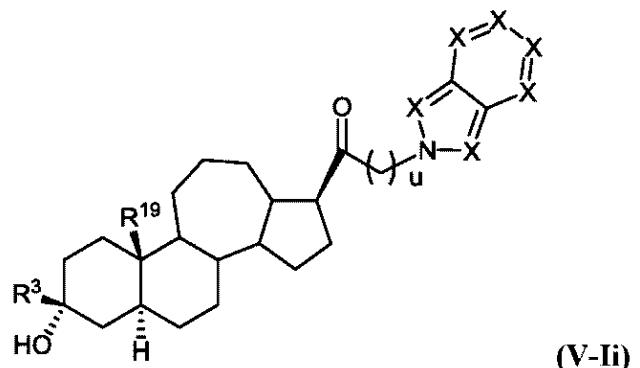
20

(項 4 6 4 )

式 (V - I) の前記化合物が、式 (V - I i)

【化 5 6 8】

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<sup>N</sup>)-、-C(R<sup>N</sup>)<sub>2</sub>-、-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>~<sub>6</sub>アルキル、C(=O)R<sup>G A</sup>、-C(=O)OR<sup>G A</sup>、-C(=O)N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G A</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>であり；

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>~<sub>6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2</sub>~<sub>6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2</sub>~<sub>6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3</sub>~<sub>6</sub>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

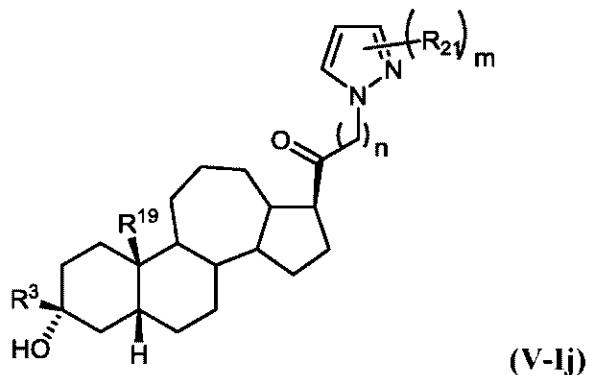
50

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<sup>G A</sup>基が介在原子と一緒にになって、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、

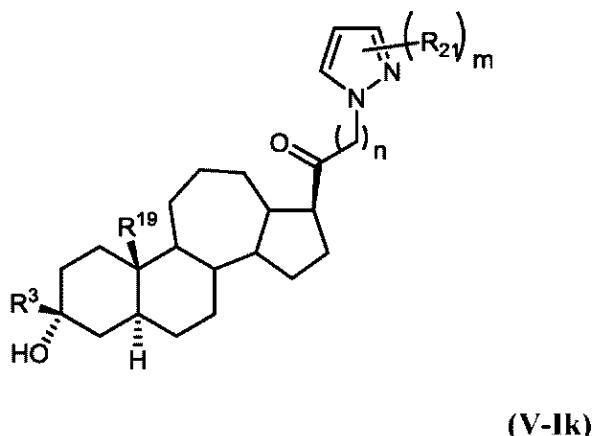
ここで、mは、0、1、2、または3であり；nは、0、1、または2であり；

各R<sup>21</sup>は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシリル、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；

各R<sup>21</sup>は独立して、ハロゲン、アルキル、ヒドロキシリル、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<sup>21</sup>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。

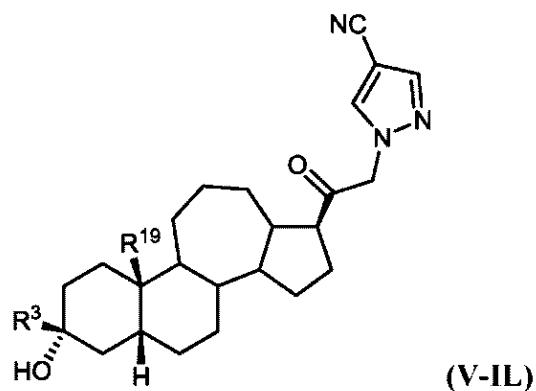
(項469)

前記化合物が、式(V-IL)

40

50

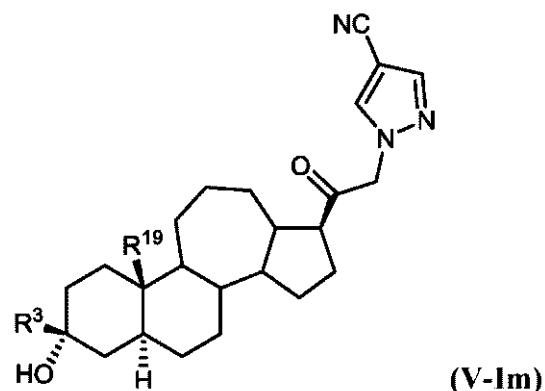
## 【化 5 7 1】



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】

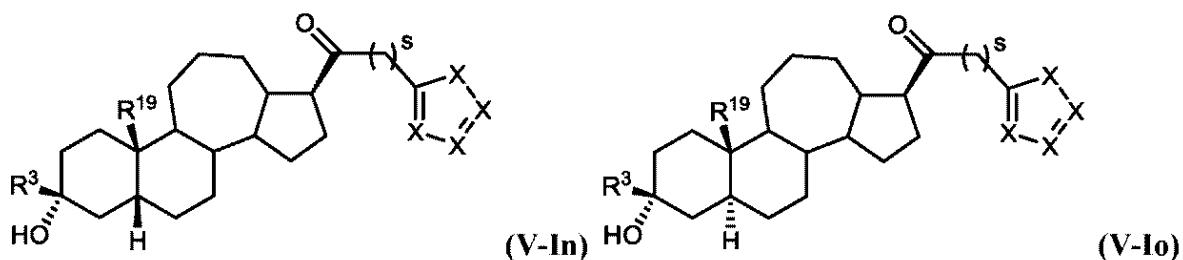


の化合物である、上記項 4 6 1 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。  
30

(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】



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、 $C(=O)R^{GA}$ 、 $-C(=O)OR^G$ 、 $-C(=O)N(R^{GA})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{GA}$ 、または $-S(=O)_2N(R^G)^2$ 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

50

は非置換 C<sub>3</sub> ~ C<sub>6</sub> 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になって、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<sup>3</sup> 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<sup>3</sup> 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<sup>3</sup> が、-C<sub>3</sub>H<sub>3</sub> 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<sup>19</sup> が、置換もしくは非置換 C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキル、置換もしくは非置換 C<sub>2</sub> ~ C<sub>6</sub> アルケニル、または置換もしくは非置換 C<sub>2</sub> ~ C<sub>6</sub> 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<sup>19</sup> が、非置換 C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> 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。

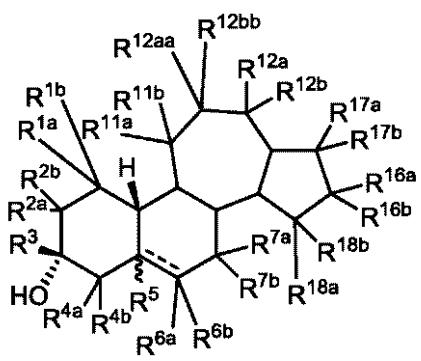
( 項 4 7 7 )

R<sup>19</sup> が、-C<sub>3</sub>H<sub>3</sub> 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。 20

( 項 4 7 8 )

式 ( V - I I ) :

【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 - I 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 7 5】

40

が二重結合である場合、R<sup>5</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；

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> が一緒にになってオキソ (=O) 基を形成し；

50

R<sup>1a</sup>、R<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup>、R<sup>12b</sup>、R<sup>12aa</sup>、R<sup>12bb</sup>、R<sup>2a</sup>、R<sup>2b</sup>、R<sup>4a</sup>、R<sup>4b</sup>、R<sup>11a</sup>、R<sup>11b</sup>、R<sup>18a</sup>、およびR<sup>18b</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するか；またはR<sup>1a</sup>およびR<sup>1b</sup>、R<sup>12a</sup>およびR<sup>12b</sup>、R<sup>2a</sup>およびR<sup>2b</sup>、R<sup>4a</sup>およびR<sup>4b</sup>、R<sup>11a</sup>およびR<sup>11b</sup>、R<sup>12aa</sup>およびR<sup>12bb</sup>、ならびにR<sup>18a</sup>およびR<sup>18b</sup>のいずれか1つが一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

R<sup>7a</sup>およびR<sup>7b</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>7a</sup>およびR<sup>7b</sup>が一緒になってオキソ(=O)基を形成し；

R<sup>16a</sup>、R<sup>16b</sup>、R<sup>17a</sup>、およびR<sup>17b</sup>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<sup>1</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)RA<sup>1</sup>、-OC(=O)RA<sup>1</sup>、-OC(=O)OR<sup>A1</sup>、-OC(=O)SRA<sup>1</sup>、-OC(=O)NR<sup>A1</sup>、-SC(=O)RA<sup>2</sup>、-SC(=O)OR<sup>A1</sup>、-SC(=O)SRA<sup>1</sup>、-SC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-NHC(=O)RA<sup>1</sup>、-NHC(=O)OR<sup>A1</sup>、-NHC(=O)SRA<sup>1</sup>、-NHC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</sup>、-S(=O)RA<sup>2</sup>、-SO<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>ORA<sup>1</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>RA<sup>2</sup>、-C(O)RA<sup>2</sup>であるか、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；

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<sup>5</sup>およびR<sup>6a</sup>またはR<sup>50</sup>

<sup>6</sup> 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 4 7 9)

R<sup>2 a</sup> および R<sup>2 b</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>D 1</sup>、-OC(=O)R<sup>D 1</sup>、-NH<sub>2</sub>、-N(R<sup>D 1</sup>)<sub>2</sub>、または-NR<sup>D 1</sup>C(=O)R<sup>D 1</sup>であり、ここで R<sup>D 1</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 4 7 8 に記載の化合物。

10

(項 4 8 0)

R<sup>4 a</sup> および R<sup>4 b</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>D 1</sup>、-OC(=O)R<sup>D 1</sup>、-NH<sub>2</sub>、-N(R<sup>D 1</sup>)<sub>2</sub>、または-NR<sup>D 1</sup>C(=O)R<sup>D 1</sup>であり、ここで R<sup>D 1</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 4 7 8 または 4 7 9 に記載の化合物。

20

(項 4 8 1)

R<sup>1 1 a</sup> および R<sup>1 1 b</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>D 1</sup>、-OC(=O)R<sup>D 1</sup>、-NH<sub>2</sub>、-N(R<sup>D 1</sup>)<sub>2</sub>、または-NR<sup>D 1</sup>C(=O)R<sup>D 1</sup>であり、ここで R<sup>D 1</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か、または R<sup>1 1 a</sup> および R<sup>1 1 b</sup> が一緒にになってオキソ基を形成する、上記項 4 7 8 ~ 4 8 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

(項 4 8 2)

R<sup>1 6 a</sup> および R<sup>1 6 b</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>D 1</sup>、-OC(=O)R<sup>D 1</sup>、-NH<sub>2</sub>、-N(R<sup>D 1</sup>)<sub>2</sub>、または-NR<sup>D 1</sup>C(=O)R<sup>D 1</sup>であり、ここで R<sup>D 1</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 4 7 8 ~ 4 8 1 のいずれか 1 項に記載の化合物。

(項 4 8 3)

R<sup>7 a</sup> および R<sup>7 b</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>D 1</sup>、-OC(=O)R<sup>D 1</sup>、-NH<sub>2</sub>、-N(R<sup>D 1</sup>)<sub>2</sub>、または-NR<sup>D 1</sup>C(=O)R<sup>D 1</sup>であり、ここで R<sup>D 1</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か、または R<sup>7 a</sup> および R<sup>7 b</sup> または R<sup>7 a a</sup> および R<sup>7 b b</sup> のいずれかが一緒にになってオキソ(=O)を形成する、上記項 4 7 8 ~ 4 8 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

(項 4 8 4)

50

$R^{6a}$  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、ヒドロキシリル、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、 $-OR^D_1$ 、 $-OC(=O)R^D_1$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^D_1)_2$ 、または  $-NR^D_1C(=O)R^D_1$  であり、ここで  $R^D_1$  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 478 ~ 484 のいずれか 1 項に記載の化合物。  
10

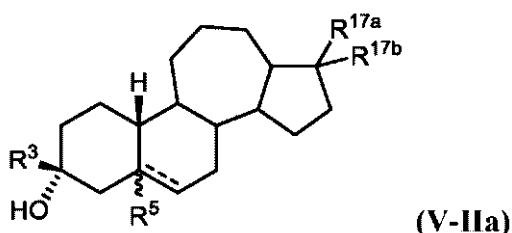
(項 486)

$R^{17a}$  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、 $-ORA^1$ 、 $-SRA^1$ 、 $-N(R^A_1)_2$ 、 $-N(R^A_1)$ 、 $-CN(R^A_1)_2$ 、 $-C(O)R^A_1$ 、 $-OC(=O)R^A_1$ 、 $-OC(=O)OR^A_1$ 、 $-OC(=O)SR^A_1$ 、または  $-OC(=O)N(R^A_1)_2$  であり、ここで  $R^A_1$  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 478 ~ 485 のいずれか 1 項に記載の化合物。  
20

(項 487)

前記化合物が、式 (V-IIa)

【化 577】

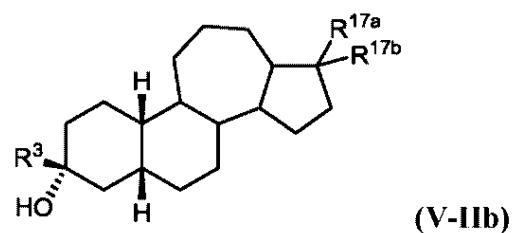


の化合物である、上記項 478 ~ 486 のいずれか 1 項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 488)

前記化合物が、式 (V-IIb)

【化 578】



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)

10

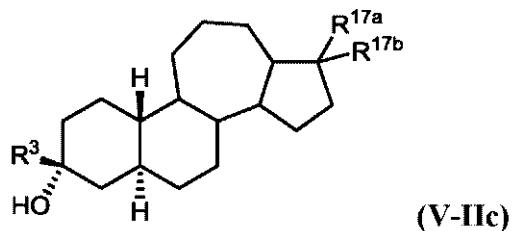
20

30

40

50

## 【化579】

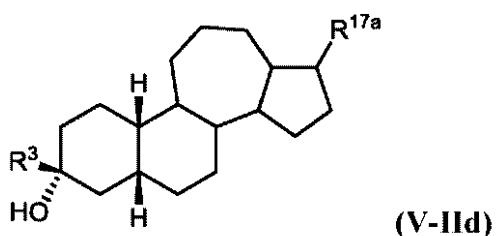


の化合物である、上記項478～487のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。 10

(項490)

前記化合物が、式(V-IIId)

## 【化580】



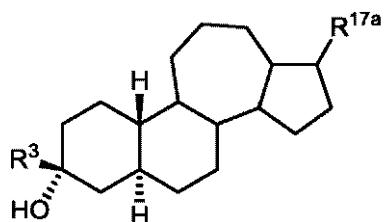
20

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491)

前記化合物が、式(V-IIIf)

## 【化581】



30

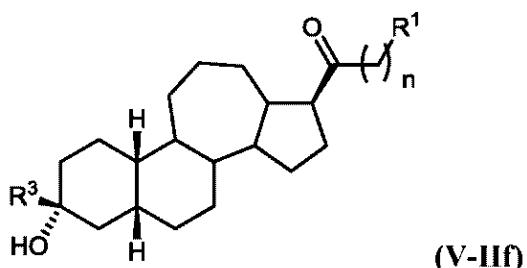
(V-IIIf)

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492)

前記化合物が、式(V-IIIf)

## 【化582】



50

の化合物であり、

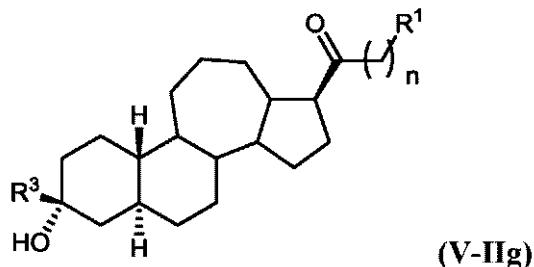
ここで、 $R^1$ は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-OC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NH_C(=O)R^{A1}$ 、 $-NH_C(=O)OR^{A1}$ 、 $-NH_C(=O)SR^{A1}$ 、 $-NH_C(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、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、 $-OR^{A1}$ 、 $-SR^{A1}$ 、 $-N(R^{A1})_2$ 、 $-OC(=O)R^{A1}$ 、 $-OC(=O)OR^{A1}$ 、 $-OC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)R^{A2}$ 、 $-SC(=O)OR^{A1}$ 、 $-SC(=O)SR^{A1}$ 、 $-SC(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-NH_C(=O)R^{A1}$ 、 $-NH_C(=O)OR^{A1}$ 、 $-NH_C(=O)SR^{A1}$ 、 $-NH_C(=O)N(R^{A1})_2$ 、 $-OS(=O)_2R^{A2}$ 、 $-OS(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S-S(=O)_2R^{A2}$ 、 $-S-S(=O)_2OR^{A1}$ 、 $-S(=O)R^{A2}$ 、 $-SO_2R^{A2}$ 、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

10

20

30

40

50

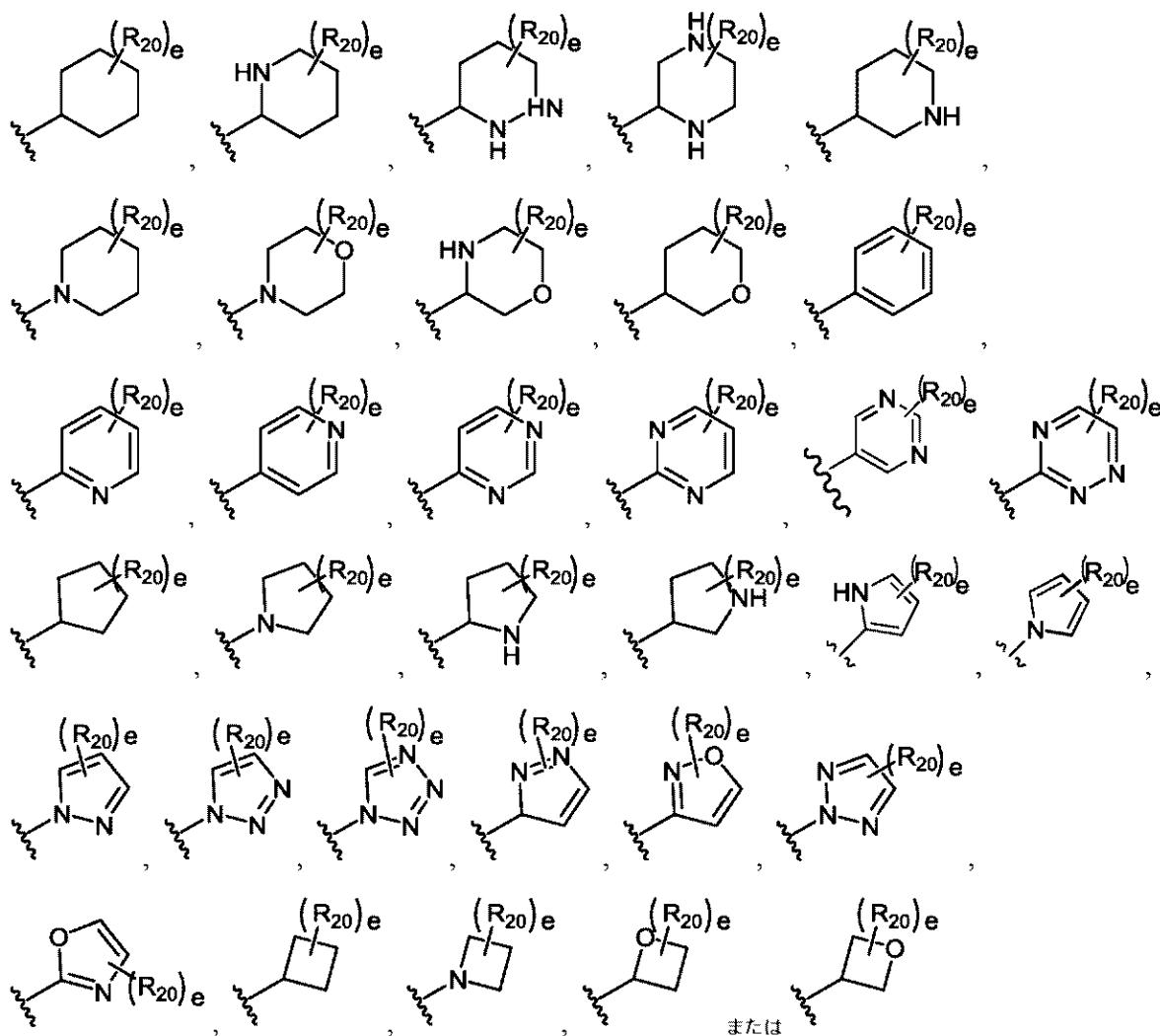
の複素環式環またはヘテロアリール環を形成し；R<sup>2</sup>は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、または置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

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 4 9 4 )

R 1 が、

【化 5 8 4】



であり、

ここで  $R_{20}$  の各々の存在は独立して、ハロゲン、-NO<sub>2</sub>、-CN、-ORGA、-N(RGA)<sub>2</sub>、-C(=O)RGA、-C(=O)ORG A、-OC(=O)RGA、-OC(=O)ORG A、-C(=O)N(RGA)<sub>2</sub>、-N(RGA)C(=O)RGA、-OC(=O)N(RGA)<sub>2</sub>、-N(RGA)C(=O)ORG A、-S(=O)<sub>2</sub>RGA、-S(=O)<sub>2</sub>ORGA、-OS(=O)<sub>2</sub>RGA、-S(=O)<sub>2</sub>N(RGA)<sub>2</sub>、または-N(RGA)S(=O)<sub>2</sub>RGA；置換もしくは非置換C<sub>1~6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルケニル、置換もしくは非置換C<sub>2~6</sub>アルキニル、置換もしくは非置換C<sub>3~4</sub>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RGAが介在原子と一緒にになって、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 RGA の各々の存在は独立して、水素、置換もしくは非置換 C<sub>1~6</sub> 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になって、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；

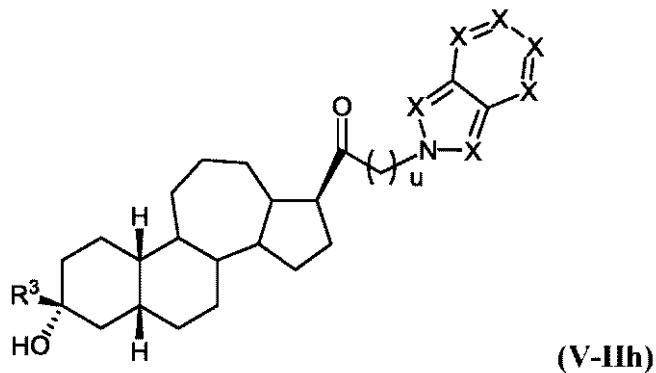
e は、0、1、2、3、4、または 5 である、上記項 492 または 493 に記載の化合物。

(項 495)

前記化合物が、式 (V - IIIh)

【化 585】

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<sup>N</sup>) -、-C(R<sup>N</sup>)<sub>2</sub> -、-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>G A</sup>、-C(=O)OR<sup>G A</sup>、-C(=O)N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G A</sup>、または -S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub> あり；

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になって、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。

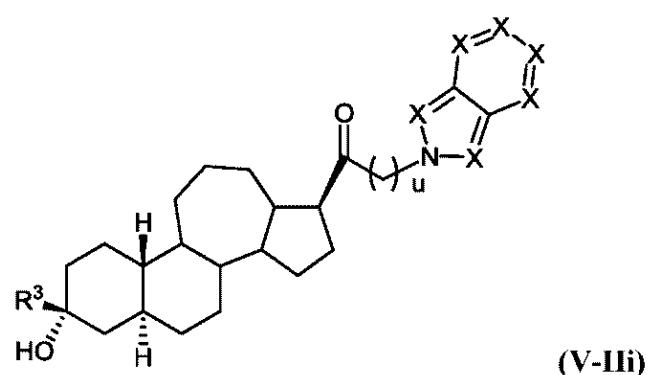
30

(項 496)

前記化合物が、式 (V - IIIi)

【化 586】

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<sup>N</sup>) -、-C(R<sup>N</sup>)<sub>2</sub> -

50

$N^-_2$  -、 -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になって、 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。

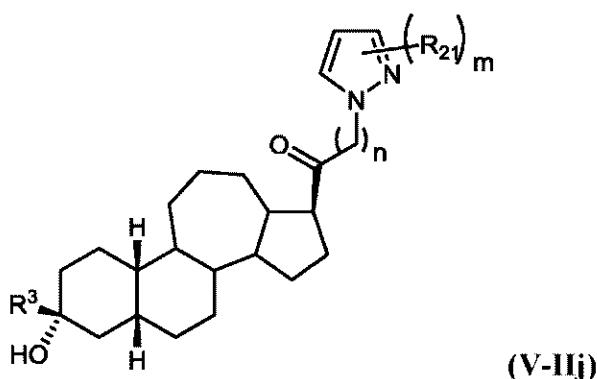
10

20

(項 497)

前記化合物が、 式 (V-IIj)

【化 587】



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、 ヒドロキシリル、 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。

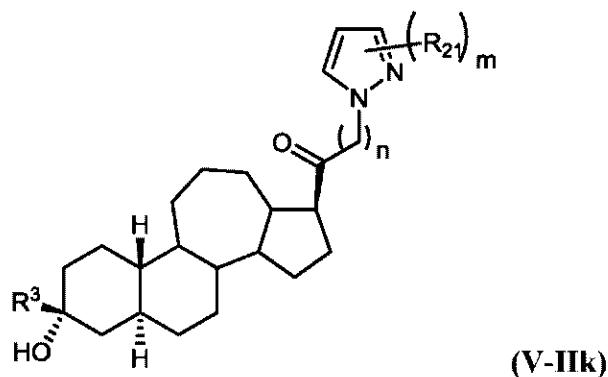
30

40

(項 498)

前記化合物が、 式 (V-IIk)

【化 588】



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、 ヒドロキシリル、 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<sup>2-1</sup>が、 -CNである、上記項497または498に記載の化合物。

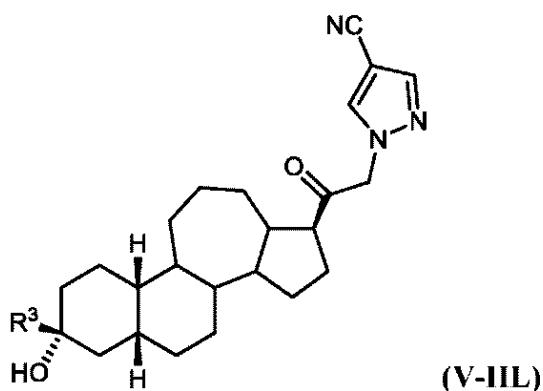
( 項 5 0 0 )

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-II-L)

【化 5 8 9】

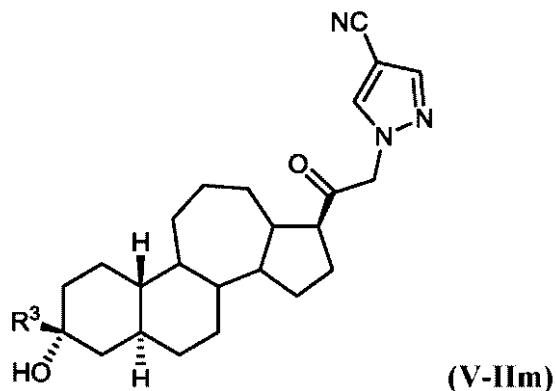


の化合物である、上記項 4 9 2 に記載の化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

( 項 5 0 2 )

前記化合物が、式 (V - IIm)

【化 5 9 0】

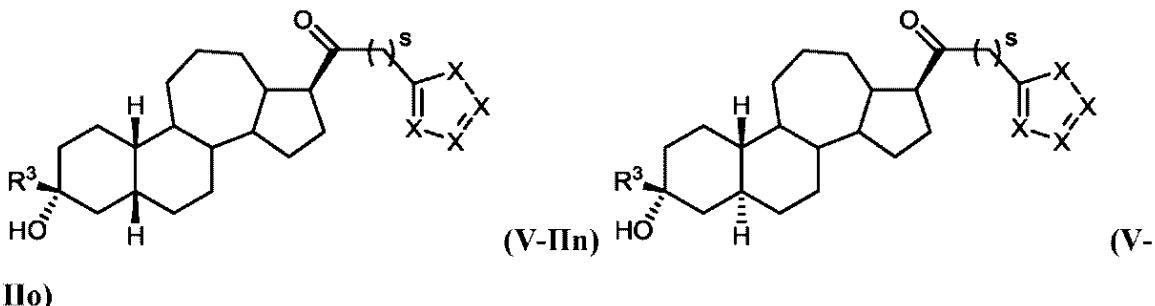


の化食食物である、上記項 4 9 3 に記載の化食食物またはその薬学的に優容可能な塩。

( 項 5 0 3 )

前記化合物が、式 (V-IIn) または式 (V-IIo)

【化 5 9 1】



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、 $-C(R^N)$  -、 $-C(R^{N-1})$  -、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N-$ 、または  $N(R^N)$  - であり、ここで  $R^N$  は独立して

10

、水素、置換もしくは非置換C<sub>1</sub>～6アルキル、C(=O)R<sup>G A</sup>、-C(=O)OR<sup>G A</sup>、-C(=O)N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>G A</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>N(R<sup>G A</sup>)<sub>2</sub>であり；

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になって、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<sup>3</sup>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<sup>3</sup>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。

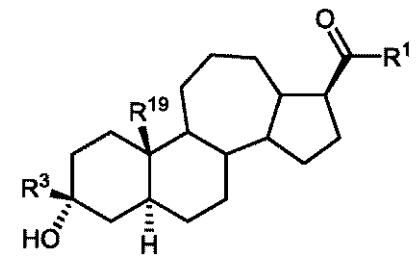
(項506)

R<sup>3</sup>が、-CH<sub>3</sub>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-I I I)：

【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-I I I)において、

30

R<sup>1</sup>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<sup>A1</sup>、-SR<sup>A1</sup>、-N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OC(=O)RA<sup>1</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)RA<sup>2</sup>、-SC(=O)OR<sup>A1</sup>、-SC(=O)SR<sup>A1</sup>、-SC(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-NHCO(=O)RA<sup>1</sup>、-NHCO(=O)OR<sup>A1</sup>、-NHCO(=O)SR<sup>A1</sup>、-NHCO(=O)N(R<sup>A1</sup>)<sub>2</sub>、-OS(=O)<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、-OS(=O)<sub>2</sub>OR<sup>A1</sup>、-SS(=O)<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、-SS(=O)<sub>2</sub>OR<sup>A1</sup>、-SO<sub>2</sub>RA<sup>2</sup>、または-S(=O)<sub>2</sub>OR<sup>A1</sup>であり、ここでRA<sup>1</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であるか、または2つのRA<sup>1</sup>基が一緒に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<sup>2</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；

40

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

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<sup>1~9</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る、

化合物またはその薬学的に受容可能な塩。

(項 508)

R<sup>1</sup>が、置換もしくは非置換C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキルである、上記項502に記載の化合物。

(項 509)

R<sup>1</sup>が、非置換C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>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<sup>1</sup>が、-CH<sub>3</sub>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<sup>1~9</sup>が、置換もしくは非置換C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>アルキル、置換もしくは非置換C<sub>2</sub>～C<sub>6</sub>アルケニル、または置換もしくは非置換C<sub>2</sub>～C<sub>6</sub>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<sup>1~9</sup>が、非置換C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>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。 20

(項 513)

R<sup>3</sup>が、水素または非置換C<sub>1</sub>～C<sub>6</sub>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。

20

30

40

50