

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 3 部門第 2 区分

【発行日】平成31年1月10日 (2019.1.10)

【公開番号】特開2018-150302(P2018-150302A)

【公開日】平成30年9月27日 (2018.9.27)

【年通号数】公開・登録公報2018-037

【出願番号】特願2018-72831(P2018-72831)

【国際特許分類】

C 0 7 D 471/04 (2006.01)

A 6 1 K 31/4745 (2006.01)

A 6 1 K 31/4747 (2006.01)

C 0 7 D 491/20 (2006.01)

A 6 1 P 1/18 (2006.01)

A 6 1 P 3/00 (2006.01)

A 6 1 P 3/10 (2006.01)

A 6 1 P 21/02 (2006.01)

A 6 1 P 25/00 (2006.01)

A 6 1 P 25/18 (2006.01)

A 6 1 P 25/24 (2006.01)

A 6 1 P 25/28 (2006.01)

A 6 1 P 35/00 (2006.01)

A 6 1 P 35/02 (2006.01)

A 6 1 P 43/00 (2006.01)

C 0 7 D 471/10 (2006.01)

C 1 2 N 9/12 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 D 471/04 1 0 5 A

A 6 1 K 31/4745

A 6 1 K 31/4747

C 0 7 D 491/20 C S P

A 6 1 P 1/18

A 6 1 P 3/00

A 6 1 P 3/10

A 6 1 P 21/02

A 6 1 P 25/00

A 6 1 P 25/18

A 6 1 P 25/24

A 6 1 P 25/28

A 6 1 P 35/00

A 6 1 P 35/02

A 6 1 P 43/00 1 1 1

A 6 1 P 43/00 1 2 1

C 0 7 D 471/10 1 0 2

C 1 2 N 9/12

【手続補正書】

【提出日】平成30年11月20日 (2018.11.20)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

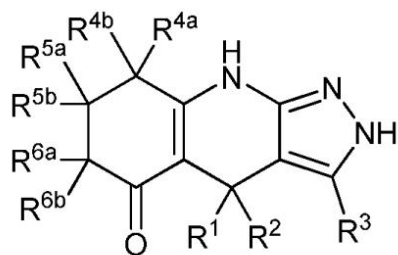
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 I

【化 1】



I

式中、

R^1 および R^2 はそれらの介在原子と一緒に、3～7員の飽和のヘテロ環式の環を形成し、ここで R^1 および R^2 によって形成される環は、環内炭素原子および1～4つの環内ヘテロ原子を有し、環内ヘテロ原子のそれぞれは、独立して、窒素および硫黄からなる群から選択され、ここで R^1 および R^2 によって形成される環は、任意選択で置換されるアリールもしくはヘテロアリール環と任意選択で縮合し、および以下のもので置換される：

(i) 独立して、ハロゲン、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-N_3$ 、 $-SO_2H$ 、 $-SO_3H$ 、 $-OH$ 、 $-OR^{aa}$ 、 $-ON(R^{bb})_2$ 、 $-N(R^{bb})_2$ 、 $-N(R^{bb})_3^+X^-$ 、 $-N(OR^{cc})R^{bb}$ 、 $-SH$ 、 $-SR^{aa}$ 、 $-SSR^{cc}$ 、 $-C(=O)R^{aa}$ 、 $-CO_2H$ 、 $-CHO$ 、 $-C(OR^{cc})_2$ 、 $-CO_2R^{aa}$ 、 $-OC(=O)R^{aa}$ 、 $-OCO_2R^{aa}$ 、 $-C(=O)N(R^{bb})_2$ 、 $-OC(=O)N(R^{bb})_2$ 、 $-NR^{bb}C(=O)R^{aa}$ 、 $-NR^{bb}CO_2R^{aa}$ 、 $-NR^{bb}C(=O)N(R^{bb})_2$ 、 $-C(=NR^{bb})R^{aa}$ 、 $-C(=NR^{bb})OR^{aa}$ 、 $-OC(=NR^{bb})R^{aa}$ 、 $-OC(=NR^{bb})OR^{aa}$ 、 $-C(=NR^{bb})N(R^{bb})_2$ 、 $-OC(=NR^{bb})N(R^{bb})_2$ 、 $-NR^{bb}C(=NR^{bb})N(R^{bb})_2$ 、 $-C(=O)NR^{bb}SO_2R^{aa}$ 、 $-NR^{bb}SO_2R^{aa}$ 、 $-SO_2N(R^{bb})_2$ 、 $-SO_2R^{aa}$ 、 $-SO_2OR^{aa}$ 、 $-OSO_2R^{aa}$ 、 $-S(=O)R^{aa}$ 、 $-OS(=O)R^{aa}$ 、 $-Si(R^{aa})_3$ 、 $-OSi(R^{aa})_3$ 、 $-C(=S)N(R^{bb})_2$ 、 $-C(=O)SR^{aa}$ 、 $-C(=S)SR^{aa}$ 、 $-SC(=S)SR^{aa}$ 、 $-SC(=O)SR^{aa}$ 、 $-OC(=O)SR^{aa}$ 、 $-SC(=O)OR^{aa}$ 、 $-SC(=O)R^{aa}$ 、 $-P(=O)(R^{aa})_2$ 、 $-OP(=O)(R^{aa})_2$ 、 $-OP(=O)(OR^{cc})_2$ 、 $-P(=O)(NR^{bb})_2$ 、 $-OP(=O)(NR^{bb})_2$ 、 $-NR^{bb}P(=O)(OR^{cc})_2$ 、 $-NR^{bb}P(=O)(NR^{bb})_2$ 、 $-P(R^{cc})_2$ 、 $-OP(R^{cc})_2$ 、 $-B(R^{aa})_2$ 、 $-B(OR^{cc})_2$ 、 $-BR^{aa}(OR^{cc})$ 、 C_{1-10} アルキル、 C_{1-10} ペルハロアルキル、 C_{2-10} アルケニル、 C_{2-10} アルキニル、 C_{3-10} カルボシクリル、3～14員ヘテロシクリル、 C_{6-14} アリール、および5～14員ヘテロアリールからなる群から選択される1つ以上の炭素原子置換基（ここでアルキル、アルケニル、アルキニル、カルボシクリル、ヘテロシクリル、アラールキル、アリール、およびヘテロアリールのそれぞれは、独立して、0、1、2、3、4、または5つの R^{dd} 基によって置換される）；および/または

(ii) 独立して、 $-OH$ 、 $-OR^{aa}$ 、 $-N(R^{cc})_2$ 、 $-CN$ 、 $-C(=O)R^{aa}$ 、 $-C(=O)N(R^{cc})_2$ 、 $-CO_2R^{aa}$ 、 $-SO_2R^{aa}$ 、 $-C(=NR^{bb})R^{aa}$ 、 $-C(=NR^{cc})OR^{aa}$ 、 $-C(=NR^{cc})N(R^{cc})_2$ 、 $-$

$\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^{\text{c c}})_2$ 、 $-\text{SO}_2\text{R}^{\text{c c}}$ 、 $-\text{SO}_2\text{OR}^{\text{c c}}$ 、 $-\text{SOR}^{\text{a a}}$ 、 $-\text{C}(=\text{S})\text{N}(\text{R}^{\text{c c}})_2$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{SR}^{\text{c c}}$ 、 $-\text{C}(=\text{S})\text{SR}^{\text{c c}}$ 、 $-\text{P}(=\text{O})(\text{R}^{\text{a a}})_2$ 、 $-\text{P}(=\text{O})(\text{NR}^{\text{c c}})_2$ 、 C_{1-10} アルキル、 C_{1-10} ペルハロアルキル、 C_{2-10} アルケニル、 C_{2-10} アルキニル、 C_{3-10} カルボシクリル、3～14 員ヘテロシクリル、 C_{6-14} アリール、および 5～14 員ヘテロアリールからなる群から選択される 1 つ以上の窒素原子の置換基（ここでアルキル、アルケニル、アルキニル、カルボシクリル、ヘテロシクリル、アラルキル、アリール、およびヘテロアリールのそれぞれは、独立して、0、1、2、3、4、または 5 つの $\text{R}^{\text{d d}}$ 基によって置換される）；

および、任意選択で、炭素原子上にある 2 つのジェミナル水素が、基 = O、= S、= NN($\text{R}^{\text{b b}})_2$ 、= NNR $^{\text{b b}}$ C(=O) $\text{R}^{\text{a a}}$ 、= NNR $^{\text{b b}}$ C(=O) $\text{OR}^{\text{a a}}$ 、= NNR $^{\text{b b}}$ S(=O) $_2\text{R}^{\text{a a}}$ 、= NR $^{\text{b b}}$ 、または = NOR $^{\text{c c}}$ と交換される；

ここで：

$\text{R}^{\text{a a}}$ のそれぞれは、独立して、 C_{1-10} アルキル、 C_{1-10} ペルハロアルキル、 C_{2-10} アルケニル、 C_{2-10} アルキニル、 C_{3-10} カルボシクリル、3～14 員ヘテロシクリル、 C_{6-14} アリール、および 5～14 員ヘテロアリールからなる群から選択されるか、または、2 つの $\text{R}^{\text{a a}}$ 基が一緒になって、3～14 員ヘテロシクリルもしくは 5～14 員ヘテロアリール環を形成し（ここでアルキル、アルケニル、アルキニル、カルボシクリル、ヘテロシクリル、アリール、およびヘテロアリールのそれぞれは、独立して、0、1、2、3、4、または 5 つの $\text{R}^{\text{d d}}$ 基によって置換される）；

$\text{R}^{\text{b b}}$ のそれぞれは、独立して、水素、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{OR}^{\text{a a}}$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{c c}})_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{a a}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{c c}})_2$ 、 $-\text{CO}_2\text{R}^{\text{a a}}$ 、 $-\text{SO}_2\text{R}^{\text{a a}}$ 、 $-\text{C}(=\text{NR}^{\text{c c}})\text{OR}^{\text{a a}}$ 、 $-\text{C}(=\text{NR}^{\text{c c}})\text{N}(\text{R}^{\text{c c}})_2$ 、 $-\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^{\text{c c}})_2$ 、 $-\text{SO}_2\text{R}^{\text{c c}}$ 、 $-\text{SO}_2\text{OR}^{\text{c c}}$ 、 $-\text{SOR}^{\text{a a}}$ 、 $-\text{C}(=\text{S})\text{N}(\text{R}^{\text{c c}})_2$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{SR}^{\text{c c}}$ 、 $-\text{C}(=\text{S})\text{SR}^{\text{c c}}$ 、 $-\text{P}(=\text{O})(\text{R}^{\text{a a}})_2$ 、 $-\text{P}(=\text{O})(\text{NR}^{\text{c c}})_2$ 、 C_{1-10} アルキル、 C_{1-10} ペルハロアルキル、 C_{2-10} アルケニル、 C_{2-10} アルキニル、 C_{3-10} カルボシクリル、3～14 員ヘテロシクリル、 C_{6-14} アリール、および 5～14 員ヘテロアリールからなる群から選択されるか、または、2 つの $\text{R}^{\text{b b}}$ 基が一緒になって、3～14 員ヘテロシクリルもしくは 5～14 員ヘテロアリール環を形成し（ここでアルキル、アルケニル、アルキニル、カルボシクリル、ヘテロシクリル、アリール、およびヘテロアリールのそれぞれは、独立して、0、1、2、3、4、または 5 つの $\text{R}^{\text{d d}}$ 基によって置換される）；

$\text{R}^{\text{c c}}$ のそれぞれは、独立して、水素、 C_{1-10} アルキル、 C_{1-10} ペルハロアルキル、 C_{2-10} アルケニル、 C_{2-10} アルキニル、 C_{3-10} カルボシクリル、3～14 員ヘテロシクリル、 C_{6-14} アリール、および 5～14 員ヘテロアリールからなる群から選択されるか、または、2 つの $\text{R}^{\text{c c}}$ 基が一緒になって、3～14 員ヘテロシクリルもしくは 5～14 員ヘテロアリール環を形成し（ここでアルキル、アルケニル、アルキニル、カルボシクリル、ヘテロシクリル、アリール、およびヘテロアリールのそれぞれは、独立して、0、1、2、3、4、または 5 つの $\text{R}^{\text{d d}}$ 基によって置換される）；

$\text{R}^{\text{d d}}$ のそれぞれは、独立して、ハロゲン、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{N}_3$ 、 $-\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{OR}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{ON}(\text{R}^{\text{f f}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{f f}})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{\text{f f}})_3^+\text{X}^-$ 、 $-\text{N}(\text{OR}^{\text{e e}})\text{R}^{\text{f f}}$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SR}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{SSR}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{CO}_2\text{H}$ 、 $-\text{CO}_2\text{R}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{R}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{OCO}_2\text{R}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{f f}})_2$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{f f}})_2$ 、 $-\text{NR}^{\text{f f}}\text{C}(=\text{O})\text{R}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{NR}^{\text{f f}}\text{CO}_2\text{R}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{NR}^{\text{f f}}\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{R}^{\text{f f}})_2$ 、 $-\text{C}(=\text{N}(\text{R}^{\text{f f}}))\text{OR}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{NR}^{\text{f f}})\text{R}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{OC}(=\text{NR}^{\text{f f}})\text{OR}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{C}(=\text{NR}^{\text{f f}})\text{N}(\text{R}^{\text{f f}})_2$ 、 $-\text{OC}(=\text{NR}^{\text{f f}})\text{N}(\text{R}^{\text{f f}})_2$ 、 $-\text{NR}^{\text{f f}}\text{C}(=\text{NR}^{\text{f f}})\text{N}(\text{R}^{\text{f f}})_2$ 、 $-\text{NR}^{\text{f f}}\text{SO}_2\text{R}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^{\text{f f}})_2$ 、 $-\text{SO}_2\text{R}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{SO}_2\text{OR}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{OSO}_2\text{R}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})\text{R}^{\text{e e}}$ 、 $-\text{Si}(\text{R}^{\text{e e}})_3$ 、 $-\text{OSi}(\text{R}^{\text{e e}})_3$ 、 $-\text{C}(=\text{S})\text{N}(\text{R}^{\text{f f}})_2$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{SR}^{\text{e e}}$ 、

- C(=S)SR^{e e}、-SC(=S)SR^{e e}、-P(=O)(R^{e e})₂、-OP(=O)(R^{e e})₂、-OP(=O)(OR^{e e})₂、C₁₋₆アルキル、C₁₋₆ペルハロアルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルキニル、C₃₋₁₀カルボシクリル、3～10員ヘテロシクリル、C₆₋₁₀アリール、5～10員ヘテロアリールからなる群から選択される(ここでアルキル、アルケニル、アルキニル、カルボシクリル、ヘテロシクリル、アリール、およびヘテロアリールのそれぞれは、独立して、0、1、2、3、4、または5つのR^{g g}基によって置換される)か、または、2つのジェミナルR^{d d}置換基が一緒になって、=Oもしくは=Sを形成し；

R^{e e}のそれぞれは、独立して、C₁₋₆アルキル、C₁₋₆ペルハロアルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルキニル、C₃₋₁₀カルボシクリル、C₆₋₁₀アリール、3～10員ヘテロシクリル、および3～10員ヘテロアリールからなる群から選択され(ここでアルキル、アルケニル、アルキニル、カルボシクリル、ヘテロシクリル、アリール、およびヘテロアリールのそれぞれは、独立して、0、1、2、3、4または5つのR^{g g}基によって置換される)；

R^{f f}のそれぞれは、独立して、水素、C₁₋₆アルキル、C₁₋₆ペルハロアルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルキニル、C₃₋₁₀カルボシクリル、3～10員ヘテロシクリル、C₆₋₁₀アリール、および5～10員ヘテロアリールからなる群から選択されるか、または、2つのR^{f f}基が一緒になって、3～14員ヘテロシクリルもしくは5～14員ヘテロアリール環を形成し(ここでアルキル、アルケニル、アルキニル、カルボシクリル、ヘテロシクリル、アリール、およびヘテロアリールのそれぞれは、独立して、0、1、2、3、4または5つのR^{g g}基によって置換される)；

R^{g g}のそれぞれは、独立して、ハロゲン、-CN、-NO₂、-N₃、-SO₂H、-SO₃H、-OH、-OC₁₋₆アルキル、-ON(C₁₋₆アルキル)₂、-N(C₁₋₆アルキル)₂、-N(C₁₋₆アルキル)₃⁺X⁻、-NH(C₁₋₆アルキル)₂⁺X⁻、-NH₂(C₁₋₆アルキル)⁺X⁻、-NH₃⁺X⁻、-N(OC₁₋₆アルキル)(C₁₋₆アルキル)、-N(OH)(C₁₋₆アルキル)、-NH(OH)、-SH、-SC₁₋₆アルキル、-SS(C₁₋₆アルキル)、-C(=O)(C₁₋₆アルキル)、-CO₂H、-CO₂(C₁₋₆アルキル)、-OC(=O)(C₁₋₆アルキル)、-OCO₂(C₁₋₆アルキル)、-C(=O)NH₂、-C(=O)N(C₁₋₆アルキル)₂、-OC(=O)NH(C₁₋₆アルキル)、-NHC(=O)(C₁₋₆アルキル)、-N(C₁₋₆アルキル)C(=O)(C₁₋₆アルキル)、-NHCOC₂(C₁₋₆アルキル)、-NHC(=O)N(C₁₋₆アルキル)₂、-NHC(=O)NH(C₁₋₆アルキル)、-NHC(=O)NH₂、-C(=NH)O(C₁₋₆アルキル)、-OC(=NH)(C₁₋₆アルキル)、-OC(=NH)OC₁₋₆アルキル、-C(=NH)N(C₁₋₆アルキル)₂、-C(=NH)NH(C₁₋₆アルキル)、-C(=NH)NH₂、-OC(=NH)N(C₁₋₆アルキル)₂、-OC(NH)NH(C₁₋₆アルキル)、-OC(NH)NH₂、-NHC(NH)N(C₁₋₆アルキル)₂、-NHC(=NH)NH₂、-NH₂SO₂(C₁₋₆アルキル)、-SO₂N(C₁₋₆アルキル)₂、-SO₂NH(C₁₋₆アルキル)、-SO₂NH₂、-SO₂C₁₋₆アルキル、-SO₂OC₁₋₆アルキル、-OSO₂C₁₋₆アルキル、-SOC₁₋₆アルキル、-Si(C₁₋₆アルキル)₃、-OSi(C₁₋₆アルキル)₃-C(=S)N(C₁₋₆アルキル)₂、C(=S)NH(C₁₋₆アルキル)、-C(=S)NH₂、-C(=O)S(C₁₋₆アルキル)、-C(=S)SC₁₋₆アルキル、-SC(=S)SC₁₋₆アルキル、-P(=O)(C₁₋₆アルキル)₂、-OP(=O)(C₁₋₆アルキル)₂、-OP(=O)(OC₁₋₆アルキル)₂、C₁₋₆アルキル、C₁₋₆ペルハロアルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルキニル、C₃₋₁₀カルボシクリル、C₆₋₁₀アリール、3～10員ヘテロシクリル、または5～10員ヘテロアリールであるか、または2つのジェミナルR^{g g}置換基が一緒になって、=Oもしくは=Sを形成し；および

X⁻は対イオンである；

R^3 は、水素、ハロ、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、任意選択で置換される脂肪族、任意選択で置換されるフェニル、任意選択で置換されるヘテロシクリル、任意選択で置換されるヘテロアリール、 $-OR^A$ 、 $-N(R^B)_2$ 、 $-SR^A$ 、 $-C(=O)R^A$ 、 $-C(=O)OR^A$ 、 $-C(=O)SR^A$ 、 $-C(=O)N(R^B)_2$ 、 $-OC(=O)R^A$ 、 $-NR^B$ 、 $C(=O)R^A$ 、 $-NR^B$ 、 $C(=O)N(R^B)_2$ 、 $-OC(=O)N(R^B)_2$ 、 $-NR^B$ 、 $C(=O)OR^A$ 、 $-SC(=O)R^A$ 、 $-C(=NR^B)R^A$ 、 $-C(=NR^B)N(R^B)_2$ 、 $-NR^B$ 、 $C(=NR^B)R^B$ 、 $-C(=S)R^A$ 、 $-C(=S)N(R^B)_2$ 、 $-NR^B$ 、 $C(=S)R^A$ 、 $-S(=O)R^A$ 、 $-SO_2R^A$ 、 $-NR^B$ 、 SO_2R^A 、および $-SO_2N(R^B)_2$ からなる群から選択され；

各 R^A は、独立して、水素、任意選択で置換される脂肪族、任意選択で置換されるカルボシクリル、任意選択で置換されるヘテロシクリル、任意選択で置換されるアリール、および任意選択で置換されるヘテロアリールからなる群から選択され；

各 R^B は、独立して、水素、任意選択で置換される脂肪族、任意選択で置換されるカルボシクリル、任意選択で置換されるヘテロシクリル、任意選択で置換されるアリール、および任意選択で置換されるヘテロアリールからなる群から選択され、または、2つの R^B 基はそれらの介在原子と一緒にあって、任意選択で置換されるヘテロ環式の環を形成し；

R^{4a} および R^{4b} は、独立して、水素、ハロ、 $-CN$ 、 $-OR^A$ 、 $-N(R^B)_2$ 、および任意選択で置換される脂肪族からなる群から選択され、または、 R^{4a} および R^{4b} はそれらの介在原子と一緒にあって、任意選択で置換される3～7員の飽和の炭素環式もしくはヘテロ環式の環を形成し；

R^{5a} および R^{5b} は、独立して、水素、ハロ、 $-CN$ 、 $-OR^A$ 、 $-N(R^B)_2$ 、任意選択で置換される脂肪族、任意選択で置換されるアリール、および任意選択で置換されるヘテロアリールからなる群から選択され、または、 R^{5a} および R^{5b} はそれらの介在原子と一緒にあって、任意選択で置換される3～7員の飽和の炭素環式もしくはヘテロ環式の環を形成し；

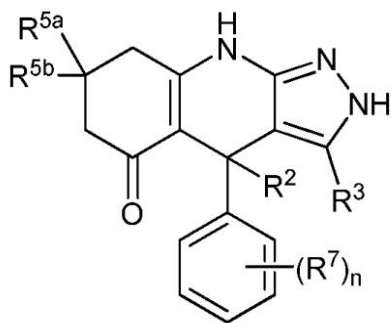
R^{6a} および R^{6b} は、独立して、水素、ハロ、 $-CN$ 、 $-OR^A$ 、 $-N(R^B)_2$ 、および任意選択で置換される脂肪族からなる群から選択され、または、 R^{6a} および R^{6b} はそれらの介在原子と一緒にあって、任意選択で置換される3～7員の飽和の炭素環式もしくはヘテロ環式の環を形成する；

で表される化合物またはその薬理上許容される塩。

【請求項2】

化合物が、式 I I

【化2】



II

式中、

R^2 および R^7 がそれらの介在原子と一緒にあって、3～7員の飽和のヘテロ環式の環を形成し、任意選択で置換される炭素環式もしくはヘテロ環式縮合環を形成し、ここで R^2 および R^7 によって形成される環は、請求項1に記載の(i)および/または(ii)で置換され、およびここで R^2 および R^7 によって形成される環は、環内炭素原子およ

び 1 ~ 4 つの環内ヘテロ原子を有し、環内ヘテロ原子のそれぞれは、独立して、窒素および硫黄からなる群から選択され；

および任意選択で、

追加の R^7 のそれぞれは、独立して、水素、ハロ、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、任意選択で置換される脂肪族、任意選択で置換されるフェニル、任意選択で置換されるヘテロシクリル、任意選択で置換されるヘテロアリール、 $-OR^A$ 、 $-N(R^B)_2$ 、 $-SR^A$ 、 $-C(=O)R^A$ 、 $-C(=O)OR^A$ 、 $-C(=O)SR^A$ 、 $-C(=O)N(R^B)_2$ 、 $-OC(=O)R^A$ 、 $-NR^B C(=O)R^A$ 、 $-NR^B C(=O)N(R^B)_2$ 、 $-OC(=O)N(R^B)_2$ 、 $-NR^B C(=O)OR^A$ 、 $-SC(=O)R^A$ 、 $-C(=NR^B)R^A$ 、 $-C(=NR^B)N(R^B)_2$ 、 $-NR^B C(=NR^B)R^B$ 、 $-C(=S)R^A$ 、 $-C(=S)N(R^B)_2$ 、 $-NR^B C(=S)R^A$ 、 $-S(=O)R^A$ 、 $-SO_2 R^A$ 、 $-NR^B SO_2 R^A$ 、および $-SO_2 N(R^B)_2$ からなる群から選択され；または、2 つの隣接する R^7 基がそれらの介在原子と一緒にあって、任意選択で置換される炭素環式もしくはヘテロ環式縮合環を形成し；

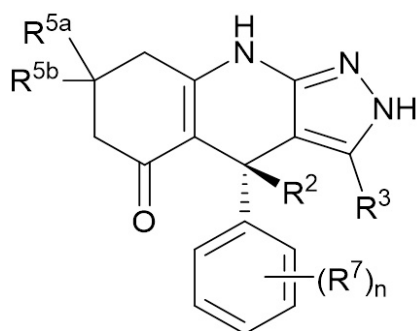
n が 1、2、3、4、または 5 である、

で表されるか、またはその薬理上許容される塩である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

化合物が、式

【化 3】

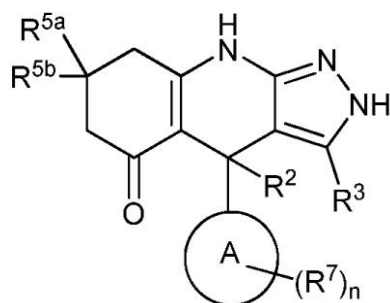


で表されるか、またはその薬理上許容される塩である、請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

化合物が、式 I I I、

【化 4】



III

式中、

環 A は、5 ~ 6 員ヘテロアリールであり；

R^2 および R^7 がそれらの介在原子と一緒にあって、3 ~ 7 員の飽和のヘテロ環式の環を形成し、任意選択で置換される炭素環式もしくはヘテロ環式縮合環を形成し、ここで R^2 および R^7 によって形成される環は、請求項 1 に記載の (i) および / または (i i

)で置換され、およびここで R^2 および R^7 によって形成される環は、環内炭素原子および1～4つの環内ヘテロ原子を有し、環内ヘテロ原子のそれぞれは、独立して、窒素および硫黄からなる群から選択され；

および任意選択で、

追加の R^7 のそれぞれは、独立して、水素、ハロ、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、任意選択で置換される脂肪族、任意選択で置換されるフェニル、任意選択で置換されるヘテロシクリル、任意選択で置換されるヘテロアリール、 $-OR^A$ 、 $-N(R^B)_2$ 、 $-SR^A$ 、 $-C(=O)R^A$ 、 $-C(=O)OR^A$ 、 $-C(=O)SR^A$ 、 $-C(=O)N(R^B)_2$ 、 $-OC(=O)R^A$ 、 $-NR^B C(=O)R^A$ 、 $-NR^B C(=O)N(R^B)_2$ 、 $-OC(=O)N(R^B)_2$ 、 $-NR^B C(=O)OR^A$ 、 $-SC(=O)R^A$ 、 $-C(=NR^B)R^A$ 、 $-C(=NR^B)N(R^B)_2$ 、 $-NR^B C(=NR^B)R^B$ 、 $-C(=S)R^A$ 、 $-C(=S)N(R^B)_2$ 、 $-NR^B C(=S)R^A$ 、 $-S(=O)R^A$ 、 $-SO_2R^A$ 、 $-NR^B SO_2R^A$ 、および $-SO_2N(R^B)_2$ からなる群から選択され；

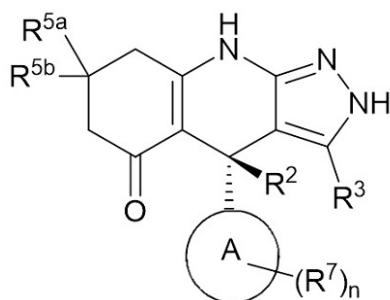
n は、原子価が許す限り、1、2、3、または4である、

またはその薬理上許容される塩である、請求項1に記載の化合物。

【請求項5】

化合物が、式

【化5】



で表されるか、またはその薬理上許容される塩である、請求項4に記載の化合物。

【請求項6】

n が1または2である、請求項2～5のいずれか一項に記載の化合物、またはその薬理上許容される塩。

【請求項7】

R^{4a} および R^{4b} が水素である、請求項1に記載の化合物、またはその薬理上許容される塩。

【請求項8】

R^{6a} および R^{6b} が水素である、請求項1に記載の化合物、またはその薬理上許容される塩。

【請求項9】

R^3 が水素である、請求項1～8のいずれか一項に記載の化合物、またはその薬理上許容される塩。

【請求項10】

R^3 がフルオロである、請求項1～8のいずれか一項に記載の化合物、またはその薬理上許容される塩。

【請求項11】

R^3 が、任意選択で置換される脂肪族である、またはその薬理上許容される塩である、請求項1～8のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項12】

R^3 が、非置換のメチルまたは非置換のトリフルオロメチルである、請求項11に記載の化合物、またはその薬理上許容される塩。

【請求項13】

R³ が、非置換の *tert*-ブチル、非置換のイソブチル、非置換のシクロプロピル、非置換のジフルオロシクロブチルまたは非置換のネオペンチルである、請求項 11 に記載の化合物、またはその薬理上許容される塩。

【請求項 14】

R^{5a} および R^{5b} が非置換メチルであるか、または、R^{5a} および R^{5b} がそれらの介在原子と一緒にあって、任意選択で置換される炭素環式もしくはヘテロ環式縮合環を形成し請求項 1 ~ 13 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 15】

請求項 1 ~ 14 のいずれか一項に記載の化合物またはその薬理上許容される塩、および薬理上許容される添加剤を含む組成物。

【請求項 16】

GSK3 を阻害するための医薬の製造における使用のための組成物であって、

請求項 1 ~ 14 のいずれか一項に記載の化合物、またはその薬理上許容される塩の有効量を含む、前記組成物。

【請求項 17】

GSK3 を阻害する方法であって、

GSK3 を、請求項 1 ~ 14 のいずれか一項に記載の化合物、またはその薬理上許容される塩の有効量と接触させることを含み、ここで GSK3 はインビトロの細胞中にある、前記方法。

【請求項 18】

GSK3 を介する障害を患っている対象において GSK3 を介する障害を治療するための医薬の製造における使用のための組成物であって、

請求項 1 ~ 14 のいずれか一項に記載の化合物、またはその薬理上許容される塩の有効量を含む、前記組成物。

【請求項 19】

GSK3 が、GSK3 である、請求項 16 または 18 に記載の使用のための組成物または請求項 17 に記載の方法。

【請求項 20】

GSK3 が、GSK3 である、請求項 16 または 18 に記載の使用のための組成物または請求項 17 に記載の方法。

【請求項 21】

GSK3 を介する障害が、神経疾患、神経変性疾患、アルツハイマー病、前頭側頭型認知症、筋萎縮性側索硬化症 (ALS)、進行性核上性麻痺、大脳皮質基底核変性、精神疾患、双極性障害、統合失調症、自閉症、脆弱 X 症候群、うつ病、リチウム抵抗性のうつ病、癌、白血病、急性骨髄性白血病、急性リンパ性白血病、慢性骨髄性白血病、慢性リンパ性白血病、多発性骨髄腫、脾癌、代謝障害、または糖尿病である、請求項 18 に記載の使用のための組成物。

【請求項 22】

CK1 を阻害するための医薬の製造における使用のための組成物であって、

請求項 1 ~ 14 のいずれか一項に記載の化合物、またはその薬理上許容される塩の有効量を含む、前記組成物。

【請求項 23】

CK1 を介する障害を患っている対象において CK1 を介する障害を治療するための医薬の製造における使用のための組成物であって、

請求項 1 ~ 14 のいずれか一項に記載の化合物、またはその薬理上許容される塩の有効量を含む、前記組成物。

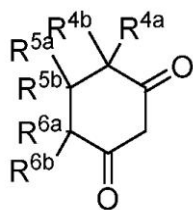
【請求項 24】

請求項 1 ~ 14 のいずれか一項に記載の化合物、またはその塩を調製する方法であって、

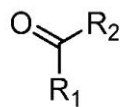
式 A の化合物またはその塩を、式 B の化合物またはその塩および式 C の化合物またはそ

の塩と、好適な条件下において接触させて、式 I の化合物またはその塩を提供することを
 含み、

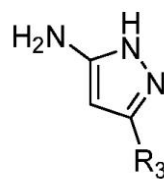
【化 6】



A



B



C;

式中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^{4a} 、 R^{4b} 、 R^{5a} 、 R^{5b} 、 R^{6a} および R^{6b} は、請求項
 1 ~ 14 のいずれか一項に記載されたとおりである、
 前記方法。