

【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20年6月19日(2008.6.19)

【公表番号】特表2007-532665(P2007-532665A)

【公表日】平成19年11月15日(2007.11.15)

【年通号数】公開・登録公報2007-044

【出願番号】特願2007-508496(P2007-508496)

【国際特許分類】

C 07 F	9/09	(2006.01)
A 61 K	31/662	(2006.01)
A 61 P	31/18	(2006.01)
A 61 P	43/00	(2006.01)
C 07 H	17/07	(2006.01)
A 61 K	31/7048	(2006.01)
C 07 F	9/38	(2006.01)
C 07 F	9/40	(2006.01)

【F I】

C 07 F	9/09	C S P U
A 61 K	31/662	
A 61 P	31/18	
A 61 P	43/00	1 1 1
C 07 H	17/07	
A 61 K	31/7048	
C 07 F	9/38	B
C 07 F	9/38	C
C 07 F	9/40	B
C 07 F	9/40	C

【手続補正書】

【提出日】平成20年4月7日(2008.4.7)

【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】

ホスホネート基を含む、HIVインテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項2】

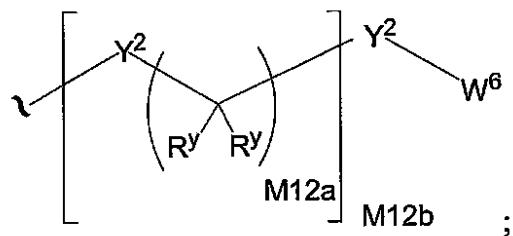
1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基を含む、請求項1に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物；

ここで：

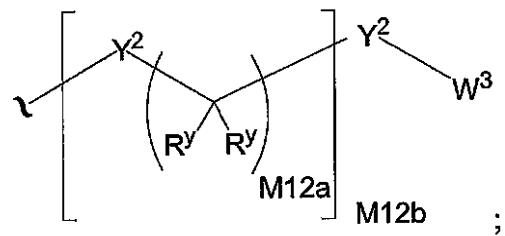
A⁰は、A¹、A²またはW³である；

A¹は、以下である：

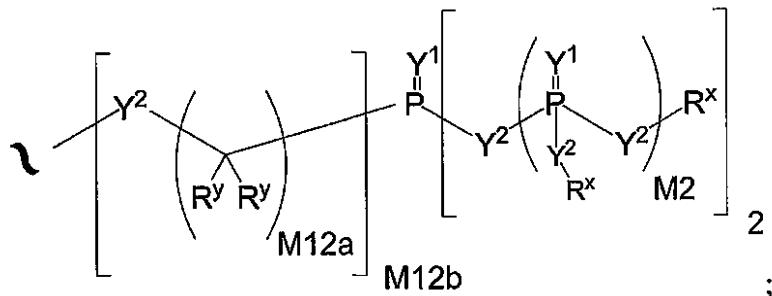
【化1】

A²は、以下である：

【化2】

A³は、以下である：

【化3】



ここで：

Y¹は、別個に、O、S、NR^x、N(O)(R^x)、N(OR^x)、N(O)(OR^x)またはN(N(R^x)₂)である；

Y²は、別個に、結合、O、NR^x、N(O)(R^x)、N(OR^x)、N(O)(OR^x)、N(N(R^x)₂)、S(O)(スルホキシド)、S(O)₂(スルホン)、S(スルフィド)またはS-S(ジスルフィド)である；

M2は、0、1または2である；

M12aは、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11または12である；そして

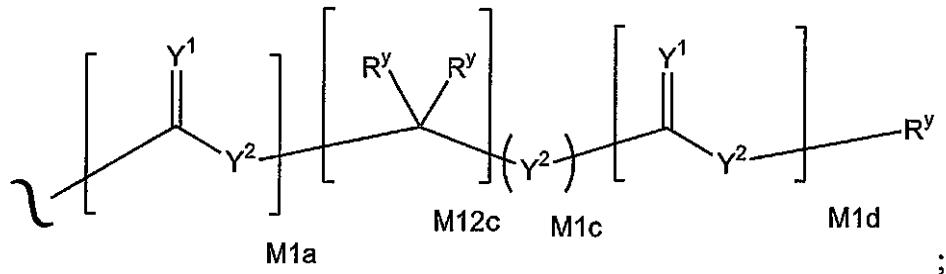
M12bは、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11または12である；

R^yは、別個に、H、C₁~C₁₈アルキル、C₁~C₁₈置換アルキル、C₂~C₁₈アルケニル、C₂~C₁₈置換アルケニル、C₂~C₁₈アルキニル、C₂~C₁₈置換アルキニル、C₆~C₂₀アリール、C₆~C₂₀置換アリール、または保護基であるか、または炭素原子において一緒になる場合、2個の隣接R^y基は、炭素環または複素環を形成する；または炭素原子において一緒にになって、2個の隣接R^y基は、環；例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチルまたはシクロヘキシルを形成する；また

は該環は、1個またはそれ以上のヘテロ原子を含有し得、複素環、例えば、ピペラジニル、ピペリジニル、ピラニルまたはテトラヒドロフリルを形成する；

R^x は、別個に、H、C₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ 置換アルキル、C₂ ~ C₁₈ アルケニル、C₂ ~ C₁₈ 置換アルケニル、C₂ ~ C₁₈ アルキニル、C₂ ~ C₁₈ 置換アルキニル、C₆ ~ C₂₀ アリール、C₆ ~ C₂₀ 置換アリール、または保護基、または次式である：

【化 4】



ここで、M 1 a、M 1 c および M 1 d は、別個に、0 または 1 であり、そして M 1 2 c は、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11 または 12 である；

W³ は、W⁴ またはW⁵ である；

W^4 は、 R^5 、 $-C(Y^1)R^5$ 、 $-C(Y^1)W^5$ 、 $-SO_2R^5$ または $-SO_2W^5$ である：

W^5 は、炭素環または複素環であり、ここで、 W^5 は、別個に、0 個～3 個の R^2 基で置換されている：

W³a は、W⁴a またはW⁵a である：

W⁴a は、R⁵a、-C(Y¹)R⁵a、-C(Y¹)W⁵a、-SO₂R⁵a または -SO₂W⁵a である：

W^{5^a} は、多価置換炭素環または複素環であり、ここで、 W^{5^a} は、別個に、0個～3個の R^2 基で置換されている：

W⁶ は、1 個、2 個または 3 個の A³ 基で別個に置換された W³_a である。

R^1 は、 副個に H または 1 個 ~ 1.8 個の炭素原子のアルキルである：

R^2 は、別個に、H、または R^3 または R^4 であり、ここで、各 R^4 は、別個に、0 個～3 個の R^3 基で置換されている；または炭素原子において一緒になって、2 個の R^2 基は、環；例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチルまたはシクロヘキシリルを形成する；必要に応じて、該環は、0 個～3 個の R^3 基で置換され得る：

R^3 は、 R^{3a} 、 R^{3b} 、 R^{3c} または R^{3d} であるが、但し、 R^3 がヘテロ原子に結合されているとき、 R^3 は R^{3c} または R^{3d} である：

Br^3a は $\text{E}-\text{Cl}-\text{Br}-\text{T}-\text{C}\text{N}-\text{N}-$ または $-\text{N}\text{O}_2$ である。

R³ b は Y¹ である：

R^3 は、 $-R^x$ 、 $-N(R^x)_2$ 、 $-SR^x$ 、 $-S(O)R^x$ 、 $-S(O)_2R^x$ 、
 $-S(O)(OR^x)$ 、 $-S(O)_2(OR^x)$ 、 $-OC(Y^1)R^x$ 、 $-OC(Y^1)OR^x$ 、
 $-OC(Y^1)N(R^x)_2$ 、 $-SC(Y^1)R^x$ 、 $-SC(Y^1)OR^x$ 、
 $-SC(Y^1)N(R^x)_2$ 、 $-N(R^x)C(Y^1)R^x$ 、 $-N(R^x)C(Y^1)OR^x$
 \times または $-N(Y^1)N(R^x)_2$ である；

R^{3-d} は、 $-C(Y^1)R^\times$ 、 $-C(Y^1)OR^\times$ または $-C(Y^1)N(R^\times)_2$ である：

R^4 は、1 個～18 個の塩素原子のアルキル、2 個～18 個の塩素原子のアルケニル、

たは2個～18個の炭素原子のアルキニルである：

R^5 は、 R^4 であり、ここで、各 R^4 は、0個～3個の R^3 基で置換されている；そして

R^5 は、別個に、1 個～18 個の炭素原子のアルキレン、2 個～18 個の炭素原子の

アルケニレン、または2個～18個の炭素原子のアルキニレンであり、該アルキレン、アルケニレンまたはアルキニレンのいずれか1個は、0個～3個のR³基で置換されている；

Rは、別個に、H、C₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈置換アルキル、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈置換アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₂～C₁₈置換アルキニル、C₆～C₂₀アリール、C₆～C₂₀置換アリール、C₂～C₂₀複素環、C₂～C₂₀置換複素環、ホスホネート、ホスフェート、ポリエチレンオキシ、保護基、L-A³、およびプロドラッグ部分から選択される；

置換アルキル、置換アルケニル、置換アルキニル、置換アリールおよび置換複素環は、別個に、1個またはそれ以上の置換基で置換されており、該置換基は、F、Cl、Br、I、OH、アミノ(-NH₂)、アンモニウム(-NH₃⁺)、アルキルアミノ(-NR)、ジアルキルアミノ(-NR₂)、トリアルキルアンモニウム(-NR₃⁺)、C₁～C₈アルキル、C₁～C₈アルキルハライド、カルボキシレート、チオール(-SH)、サルフェート(-OSO₃R)、スルファメート、スルホネート(-SO₃R)、5員～7員環スルタム、C₁～C₈アルキルスルホネート、C₁～C₈アルキルアミノ、4-ジアルキルアミノビリジニウム、C₁～C₈アルキルヒドロキシル、C₁～C₈アルキルチオール、アルキルスルホン(-SO₂R)、アリールスルホン(-SO₂Ar)、アリールスルホキシド(-SOAr)、アリールチオ(-SAr)、スルホンアミド(-SO₂NR₂)、アルキルスルホキシド(-SOR)、エステル(-COOR)、アミド(-C(=O)NR₂)、5員～7員環ラクタム、5員～7員環ラクトン、ニトリル(-CN)、アジド(-N₃)、ニトロ(-NO₂)、C₁～C₈アルコキシ(-OR)、C₁～C₈アルキル、C₁～C₈置換アルキル、C₆～C₂₀アリール、C₆～C₂₀置換アリール、C₂～C₂₀複素環、およびC₂～C₂₀置換複素環、ホスホネート、ホスフェート、ポリエチレンオキシ、およびプロドラッグ部分から選択される；そして

Lは、結合、O、S、S-S(ジスルフィド)、S(=O)(スルホキシド)、S(=O)₂(スルホン)、-S(=O)₂N(R)-(スルホンアミド)、NR、N-OR、C₁～C₁₂アルキレン、C₁～C₁₂置換アルキレン、C₂～C₁₂アルケニレン、C₂～C₁₂置換アルケニレン、C₂～C₁₂アルキニレン、C₂～C₁₂置換アルキニレン、-(CR₂)_nO(CR₂)_n-、-C(=O)NH-、-OC(=O)NH-、-NHC(=O)NH-、C(=O)、-C(=O)NH(CH₂)_n-または-(CH₂CH₂O)_n-であり、ここで、nは、1、2、3、4、5または6であり得る；

ここで、少なくとも1個のA⁰基は、A¹基である、

化合物。

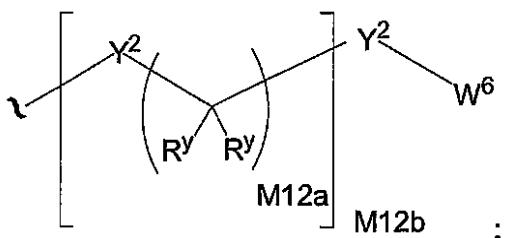
【請求項3】

1個またはそれ以上の共有結合されたA¹基を含む、請求項1に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物；

ここで：

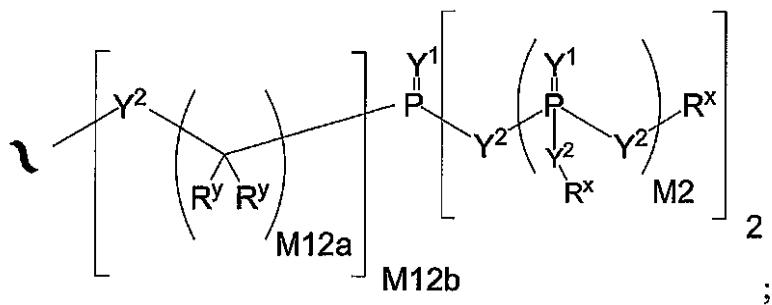
A¹は、以下である：

【化5】



A³は、以下である：

【化6】



ここで：

Y¹ は、別個に、O、S、NR^x、N(O)(R^x)、N(OR^x)、N(O)(OR^x)またはN(N(R^x)₂)である；

Y² は、別個に、結合、O、NR^x、N(O)(R^x)、N(OR^x)、N(O)(OR^x)、N(N(R^x)₂)、S(O) (スルホキシド)、S(O)₂ (スルホン)、S (スルフィド) またはS-S (ジスルフィド) である；

M2 は、0、1 または 2 である；

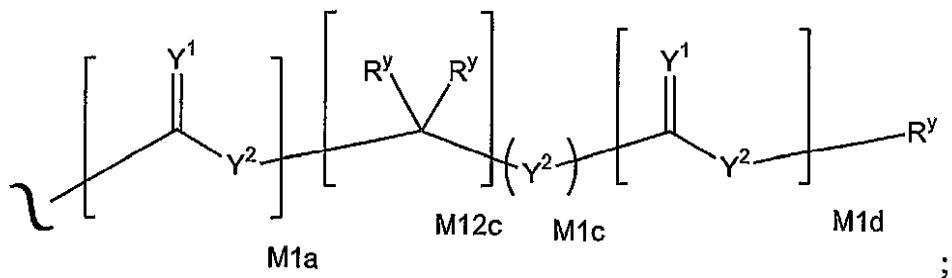
M12a は、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11 または 12 である；そして

M12b は、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11 または 12 である；

RY は、別個に、H、C₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ 置換アルキル、C₂ ~ C₁₈ アルケニル、C₂ ~ C₁₈ 置換アルケニル、C₂ ~ C₁₈ アルキニル、C₂ ~ C₁₈ 置換アルキニル、C₆ ~ C₂₀ アリール、C₆ ~ C₂₀ 置換アリール、または保護基であるか、または炭素原子において一緒になる場合、2個の隣接 RY 基は、炭素環または複素環を形成する；または炭素原子において一緒にになって、2個の隣接 RY 基は、環；例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチルまたはシクロヘキシルを形成する；または該環は、1個またはそれ以上のヘテロ原子を含有し得、複素環、例えば、ピペラジニル、ピペリジニル、ピラニルまたはテトラヒドロフリルを形成する；

R^x は、別個に、H、C₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ 置換アルキル、C₂ ~ C₁₈ アルケニル、C₂ ~ C₁₈ 置換アルケニル、C₂ ~ C₁₈ アルキニル、C₂ ~ C₁₈ 置換アルキニル、C₆ ~ C₂₀ アリール、C₆ ~ C₂₀ 置換アリール、または保護基、または次式である：

【化7】



ここで、M1a、M1c および M1d は、別個に、0 または 1 であり、そして M12c は、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11 または 12 である；

W^{3a} は、W^{4a} または W^{5a} である；

W^{4a} は、R^{5a}、-C(Y¹)R^{5a}、-C(Y¹)W^{5a}、-SO₂R^{5a} または -SO₂W^{5a} である；

W^{5a} は、多価置換炭素環または複素環であり、ここで、W^{5a} は、別個に、0 個 ~ 3

個の R² 基で置換されている；

W⁶ は、1 個、2 個または 3 個の A³ 基で別個に置換された W^{3 a} である；

R¹ は、別個に、H、または 1 個～18 個の炭素原子のアルキルである；

R² は、別個に、H、R³ または R⁴ であり、ここで、各 R⁴ は、別個に、0 個～3 個の R³ 基で置換されている；または炭素原子において一緒にになって、2 個の R² 基は、環；例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチルまたはシクロヘキシルを形成する；必要に応じて、該環は、0 個～3 個の R³ 基で置換され得る；

R³ は、R^{3 a}、R^{3 b}、R^{3 c} または R^{3 d} であるが、但し、R³ がヘテロ原子に結合されているとき、R³ は、R^{3 c} または R^{3 d} である；

R^{3 a} は、F、Cl、Br、I、-CN、N₃ または -NO₂ である；

R^{3 b} は、Y¹ である；

R^{3 c} は、-R^x、-N(R^x)₂、-SR^x、-S(O)R^x、-S(O)₂R^x、-S(O)(OR^x)、-S(O)₂(OR^x)、-OC(Y¹)R^x、-OC(Y¹)OR^x、-OC(Y¹)N(R^x)₂、-SC(Y¹)R^x、-SC(Y¹)OR^x、-SC(Y¹)N(R^x)₂、-N(R^x)C(Y¹)R^x、-N(R^x)C(Y¹)OR^x または -N(Y¹)N(R^x)₂ である；

R^{3 d} は、-C(Y¹)R^x、-C(Y¹)OR^x または -C(Y¹)N(R^x)₂ である；

R⁴ は、1 個～18 個の炭素原子のアルキル、2 個～18 個の炭素原子のアルケニル、または 2 個～18 個の炭素原子のアルキニルである；

R⁵ は、R⁴ であり、ここで、各 R⁴ は、0 個～3 個の R³ 基で置換されている；そして

R^{5 a} は、別個に、1 個～18 個の炭素原子のアルキレン、2 個～18 個の炭素原子のアルケニレン、または 2 個～18 個の炭素原子のアルキニレンであり、該アルキレン、アルケニレンまたはアルキニレンのいずれか 1 個は、0 個～3 個の R³ 基で置換されている；

R は、別個に、H、C₁～C₁₈ アルキル、C₁～C₁₈ 置換アルキル、C₂～C₁₈ アルケニル、C₂～C₁₈ 置換アルケニル、C₂～C₁₈ アルキニル、C₂～C₁₈ 置換アルキニル、C₆～C₂₀ アリール、C₆～C₂₀ 置換アリール、C₂～C₂₀ 複素環、C₂～C₂₀ 置換複素環、ホスホネート、ホスフェート、ポリエチレンオキシ、保護基、L-A³、およびプロドラッグ部分からなる群から選択される；

置換アルキル、置換アルケニル、置換アルキニル、置換アリールおよび置換複素環は、別個に、1 個またはそれ以上の置換基で置換されており、該置換基は、F、Cl、Br、I、OH、アミノ(-NH₂)、アンモニウム(-NH₃⁺)、アルキルアミノ(-NH R)、ジアルキルアミノ(-NR₂)、トリアルキルアンモニウム(-NR₃⁺)、C₁～C₈ アルキル、C₁～C₈ アルキルハライド、カルボキシレート、チオール(-SH)、サルフェート(-OSO₃R)、スルファメート、スルホネート(-SO₃R)、5 員～7 員環スルタム、C₁～C₈ アルキルスルホネート、C₁～C₈ アルキルアミノ、4-ジアルキルアミノピリジニウム、C₁～C₈ アルキルヒドロキシル、C₁～C₈ アルキルチオール、アルキルスルホン(-SO₂R)、アリールスルホン(-SO₂Ar)、アリールスルホキシド(-SOAr)、アリールチオ(-SAr)、スルホンアミド(-SO₂NR₂)、アルキルスルホキシド(-SOR)、エステル(-COOR)、アミド(-C(=O)NR₂)、5 員～7 員環ラクタム、5 員～7 員環ラクトン、ニトリル(-CN)、アジド(-N₃)、ニトロ(-NO₂)、C₁～C₈ アルコキシ(-OR)、C₁～C₈ アルキル、C₁～C₈ 置換アルキル、C₆～C₂₀ アリール、C₆～C₂₀ 置換アリール、C₂～C₂₀ 複素環、および C₂～C₂₀ 置換複素環、ホスホネート、ホスフェート、ポリエチレンオキシ、およびプロドラッグ部分から選択される；そして

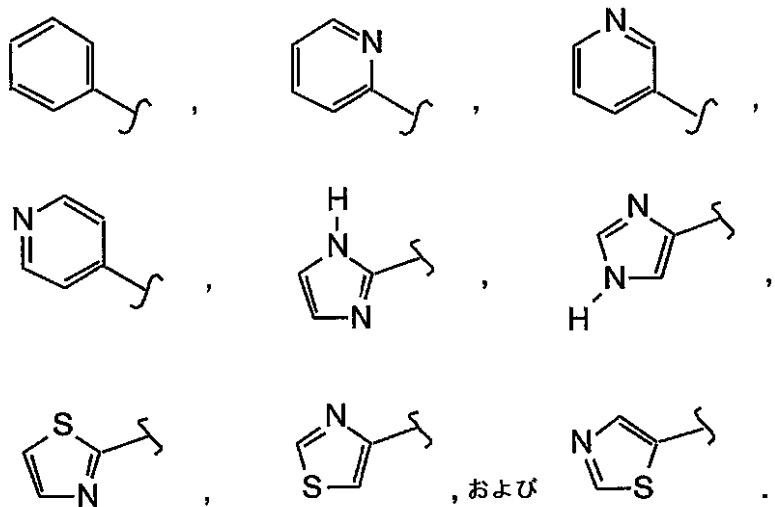
L は、結合、O、S、S-S(ジスルフィド)、S(=O)(スルホキシド)、S(=O)₂(スルホン)、-S(=O)₂N(R)-(スルホンアミド)、NR、N-OR、C₁～C₁₂ アルキレン、C₁～C₁₂ 置換アルキレン、C₂～C₁₂ アルケニレン、C

$C_2 \sim C_{12}$ 置換アルケニレン、 $C_2 \sim C_{12}$ アルキニレン、 $C_2 \sim C_{12}$ 置換アルキニレン、 $- (C_1 R_2)_n O (C_1 R_2)_n -$ 、 $- C (= O) NH -$ 、 $- OC (= O) NH -$ 、 $- NH C (= O) NH -$ 、 $C (= O) -$ 、 $- C (= O) NH (CH_2)_n -$ または $- (CH_2 C H_2 O)_n -$ であり、ここで、 n は、1、2、3、4、5 または 6 であり得る、化合物。

【請求項 4】

炭素環および複素環が、別個に、以下から選択される、請求項 2 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

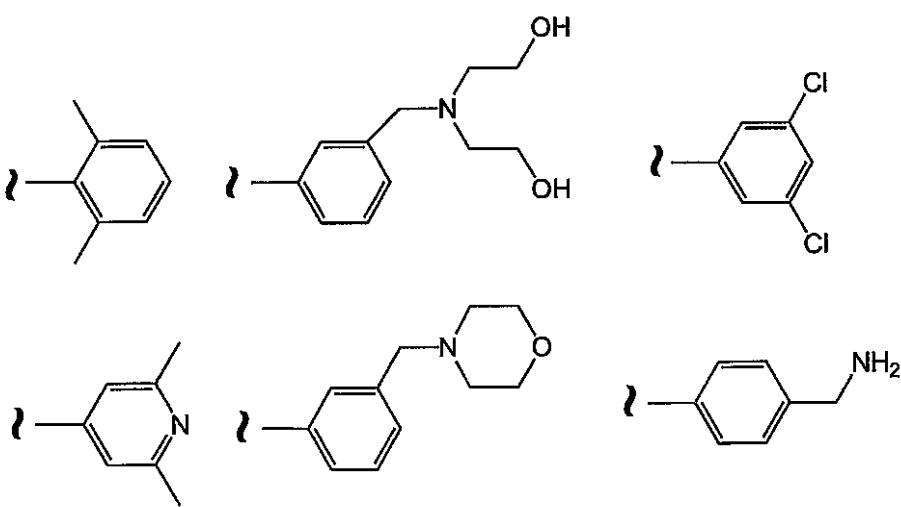
【化 8】



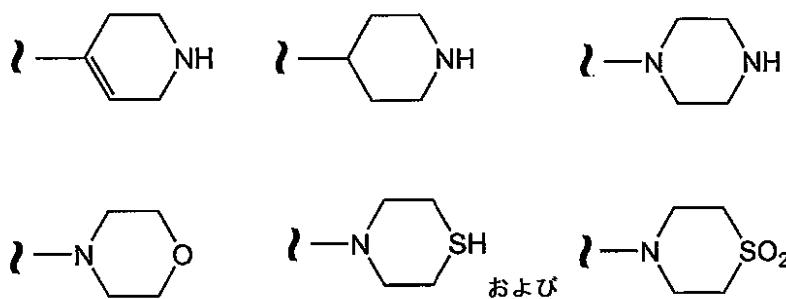
【請求項 5】

炭素環が、以下から選択される、請求項 2 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 9】



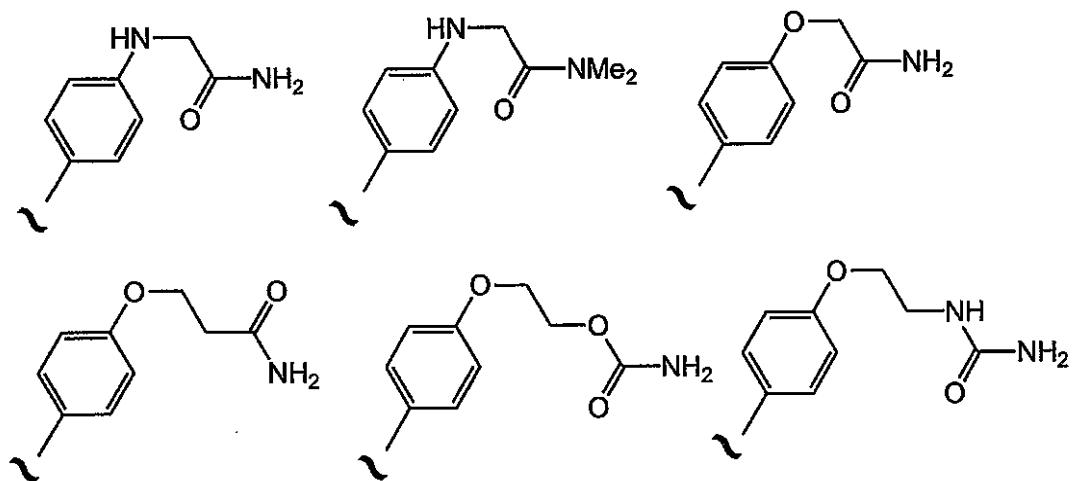
【化10】



【請求項6】

置換アリールが、以下から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

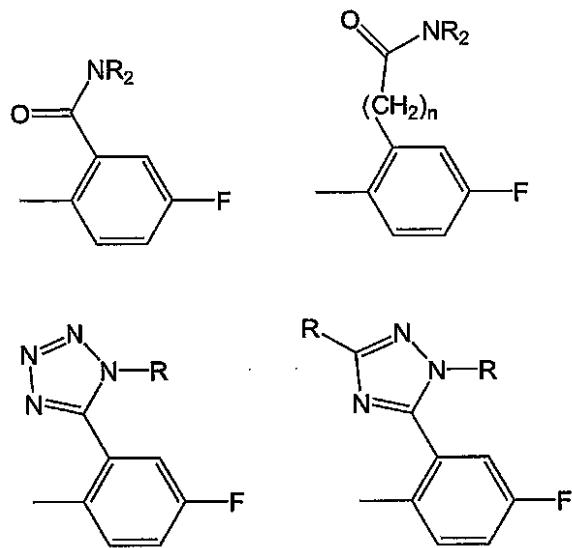
【化11】



【請求項7】

置換アリールが、以下から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

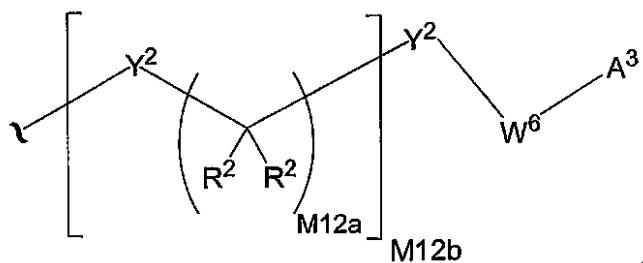
【化12】



ここで、nは、1～6である、
化合物。

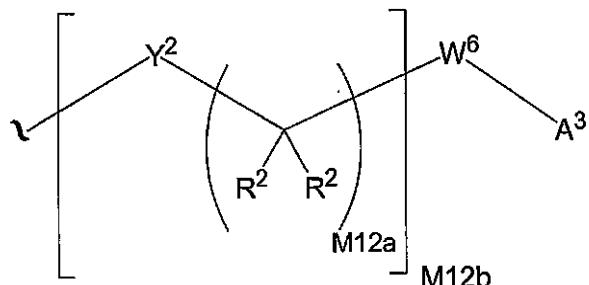
【請求項8】

A^1 が、次式である、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：
【化 1 3】



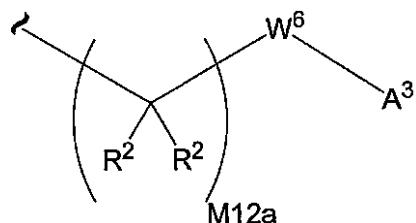
【請求項 9】

A^1 が、次式である、請求項 8 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：
【化 1 4】



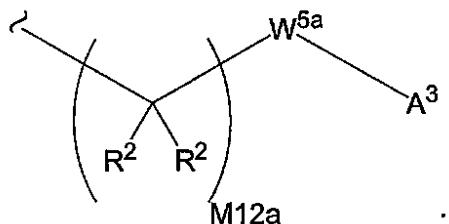
【請求項 10】

A^1 が、次式である、請求項 9 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：
【化 1 5】



【請求項 11】

A^1 が、次式である、請求項 10 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：
【化 1 6】

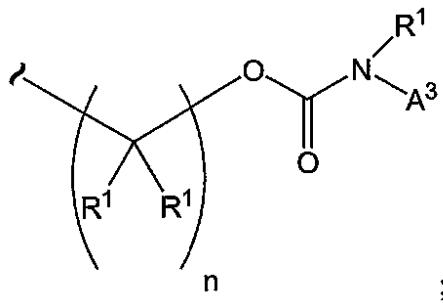


ここで、 W^{5a} は、炭素環または複素環であり、そして W^{5a} は、別個に、0 個または 1 個の R^2 基で置換されている、化合物。

【請求項 12】

A^1 が、次式である、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化17】



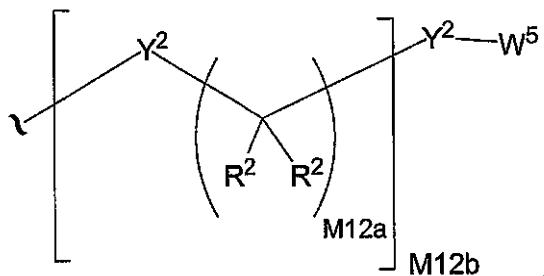
;

ここで、nは、1～18の整数である、化合物。

【請求項13】

A²が、次式である、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化18】



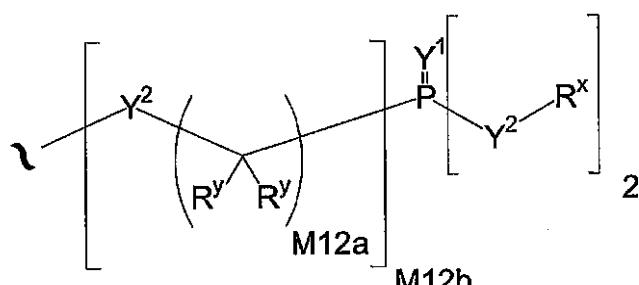
【請求項14】

A²が、フェニル、置換フェニル、ベンジル、置換ベンジル、ピリジルまたは置換ピリジルである、請求項13に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項15】

A³が、次式である、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

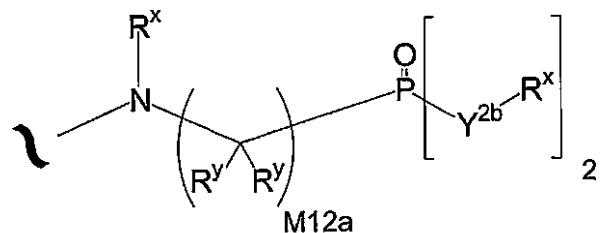
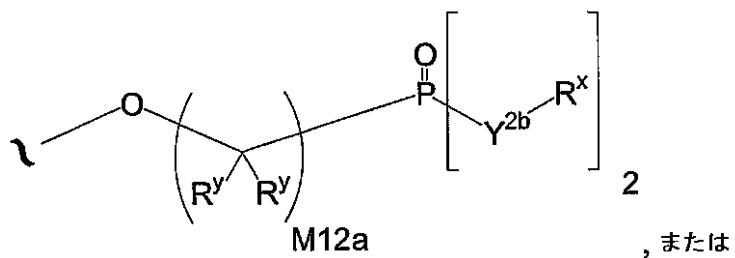
【化19】



【請求項16】

A³が、次式である、請求項15に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化20】

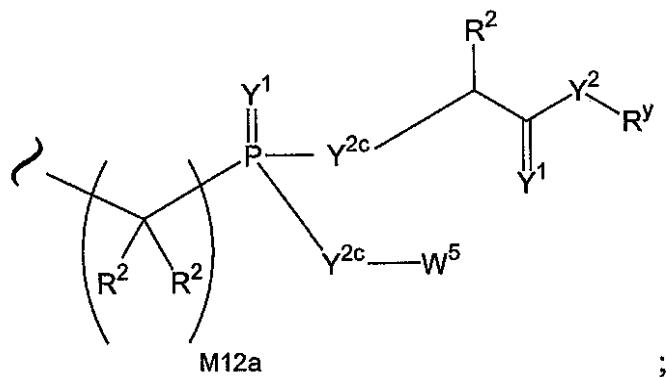


ここで、 Y^{2b} は、別個に、酸素（O）または窒素（N（R^x））である、化合物。

【請求項17】

A³ が、次式である、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化21】



ここで、W⁵ は、フェニルまたは置換フェニルであり、そして Y^{2c} は、別個に、O、N（R^y）またはSである、化合物。

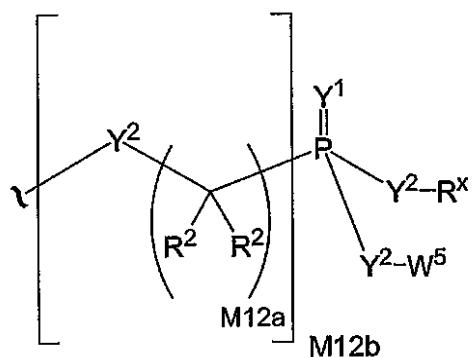
【請求項18】

R² が、H であり、M12a が、1 であり、そして Y^{2c} が、別個に、O または N（R^y）である、請求項17に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項19】

A³ が、次式である、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化22】

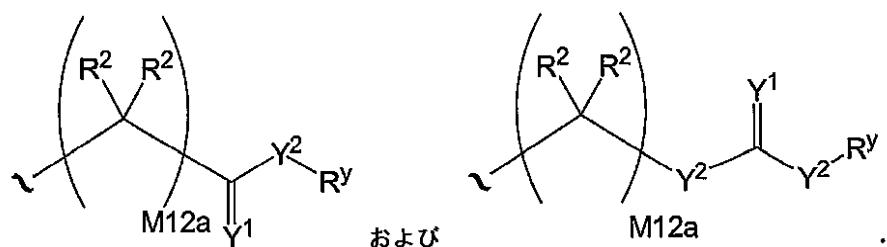


ここで、 W^5 は、フェニルまたは置換フェニルである、化合物。

【請求項20】

R^x が、以下から選択される、請求項19に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

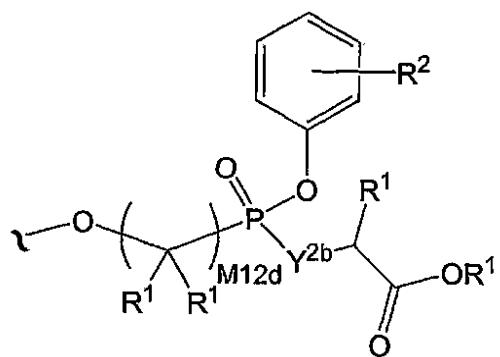
【化23】



【請求項21】

A^3 が、次式である、請求項20に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化24】

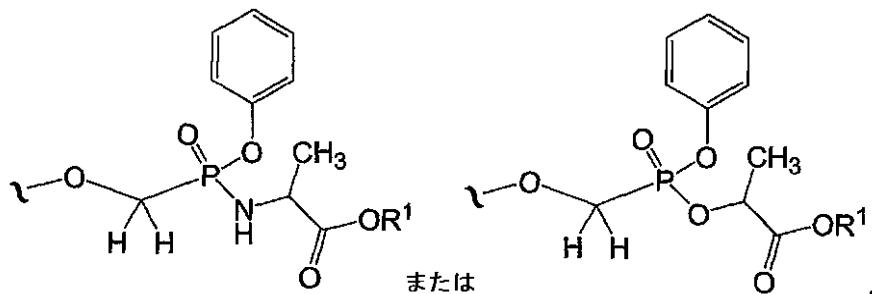


ここで、 Y^{2b} は、O または N (R^x) ; $M12d$ は、1、2、3、4、5、6、7 または 8 である；そして該フェニル炭素環は、0 個 ~ 3 個の R^2 基で置換されている、化合物。

【請求項22】

A^3 が、次式である、請求項21に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

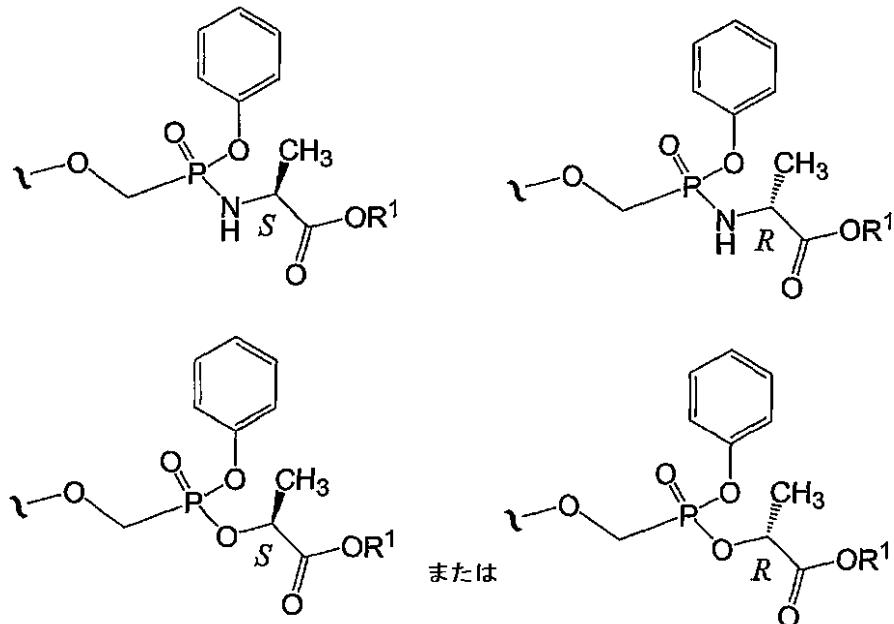
【化 2 5】



【請求項 2 3】

A³ が、次式である、請求項 22 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

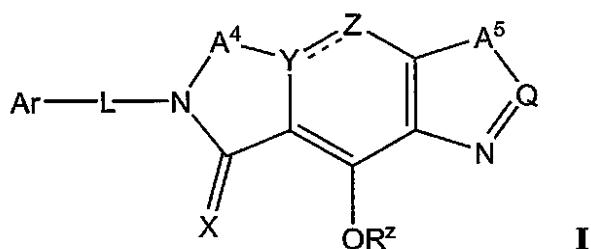
【化 2 6】



【請求項 24】

式工から選択される、請求項2または3に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物

【化 2 7】

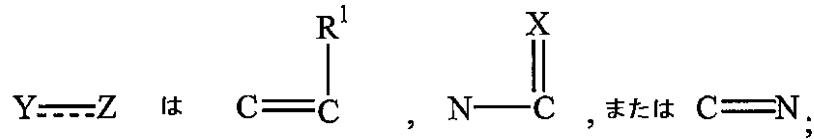


ここで：

A^4 および A^5 は、それぞれ別個に、5員環、6員環または7員環を形成する部分である；または A^4 および A^5 は、別個に、 O 、 S 、 NR 、 $C(R^2)_2$ 、 CR^2OR 、 $CR^2OC(=O)R$ 、 $C(=O)$ 、 $C(=S)$ 、 CR^2SR 、 $C(=NR)$ 、 $C(R^2)_2 - C(R^3)_2$ 、 $C(R^2) = C(R^3)$ 、 $C(R^2)_2 - O$ 、 $NR - C(R^3)_2$ 、 $N = C(R^3)$ 、 $N = N$ 、 $SO_2 - NR$ 、 $C(=O)C(R^3)_2$ 、 $C(=O)NR$ 、 $C(R^2)_2 - C(R^3)_2 - C(R^3)_2$ 、 $C(R^2) = C(R^3) - C(R^3)_2$ 、 $C(R^2)C(=O)NR$ 、 $C(R^2)C(=S)NR$ 、 $C(R^2) = N - C(R^3)_2$ 、 C

(R²) = N - NR および N = C (R³) - NR からなる群から選択される；
Q は、 N、 + NR または CR⁴ である；

【化 2 8】



X は、 O、 S、 NH、 NR、 N - OR、 N - NR₂、 N - CR₂OR または N - CR₂NR₂ であり得る；

R² は、 H；ベンジヒドリル (CHPh₂)、トリアルキルシリル (R₃Si)、2-トリメチルシロキシエチル、アルコキシメチル (CH₂OR) およびエステル (C(=O)R) から選択される保護基；またはプロドラッグ部分である；

R¹、R²、R³ および R⁴ は、それぞれ別個に、H、F、Cl、Br、I、OH、-NH₂、-NH₃⁺、-NHR、-NR₂、-NR₃⁺、C₁~C₈アルキルハライド、カルボキシレート、サルフェート、スルファメート、スルホネート、5員~7員環スルタム、C₁~C₈アルキルスルホネート、C₁~C₈アルキルアミノ、4-ジアルキルアミノピリジニウム、C₁~C₈アルキルヒドロキシル、C₁~C₈アルキルチオール、-SO₂R、-SO₂Ar、-SOAr、-SR、-SAr、-SO₂NR₂ (スルホンアミド)、-SOR、-CO₂R、-C(=O)NR₂、5員~7員環ラクタム、5員~7員環ラクトン、-CN、-N₃、-NO₂、C₁~C₈アルコキシ、C₁~C₈トリフルオロアルキル、C₁~C₈アルキル、C₁~C₈置換アルキル、C₃~C₁₂炭素環、C₃~C₁₂置換炭素環、C₆~C₂₀アリール、C₆~C₂₀置換アリール、C₂~C₂₀ヘテロアリール、C₂~C₂₀置換ヘテロアリール、ポリエチレンオキシ、ホスホネート、ホスフェート、プロドラッグ部分、-OC(=O)OR、-OC(=O)NR₂、-OC(=S)NR₂、-OC(=O)NRNR₂、-OC(=O)R、-C(=O)NRN₂、-C(=O)R、-OSO₂NR₂ (スルファメート)、-NRSO₂R、-NR₂C(=S)NR₂、-OSO₂R (スルホネート)、-P(=O)(OR)₂、-P(=O)(OR)(NR₂)₂、-P(=S)(OR)₂、-P(=S)(OR)(NR₂)₂、-P(=S)(NR₂)₂ からなる群から選択され、それらのプロドラッグ置換形状を含む；そして

単一炭素上で一緒になるとき、2個のR² または2個のR³ は、スピロ環を形成し得る；そして

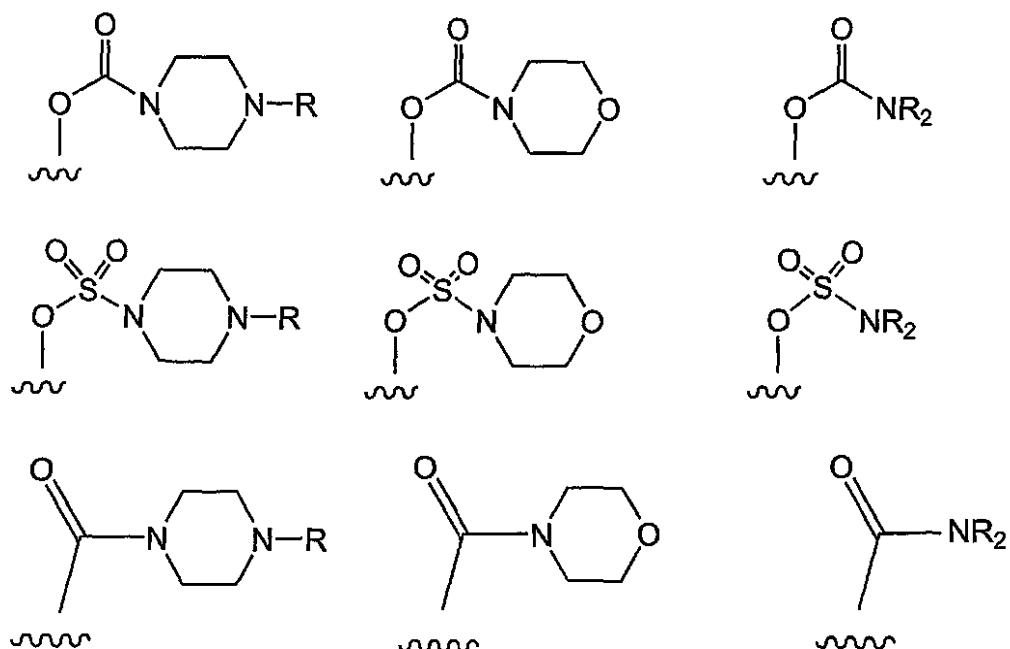
Ar は、C₃~C₁₂炭素環、C₃~C₁₂置換炭素環、C₆~C₂₀アリール、C₆~C₂₀置換アリール、C₂~C₂₀ヘテロアリールまたはC₂~C₂₀置換ヘテロアリールである；

これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰ 基で置換されている、化合物。

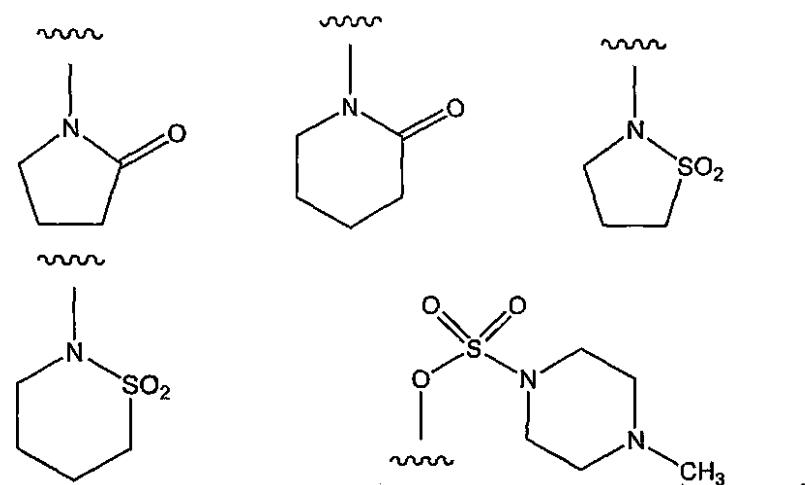
【請求項 2 5】

R¹、R²、R³ および R⁴ が、以下の構造を含む、請求項 2 4 に記載の式 I を有する請求項 2 または 3 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 29】



【化 30】

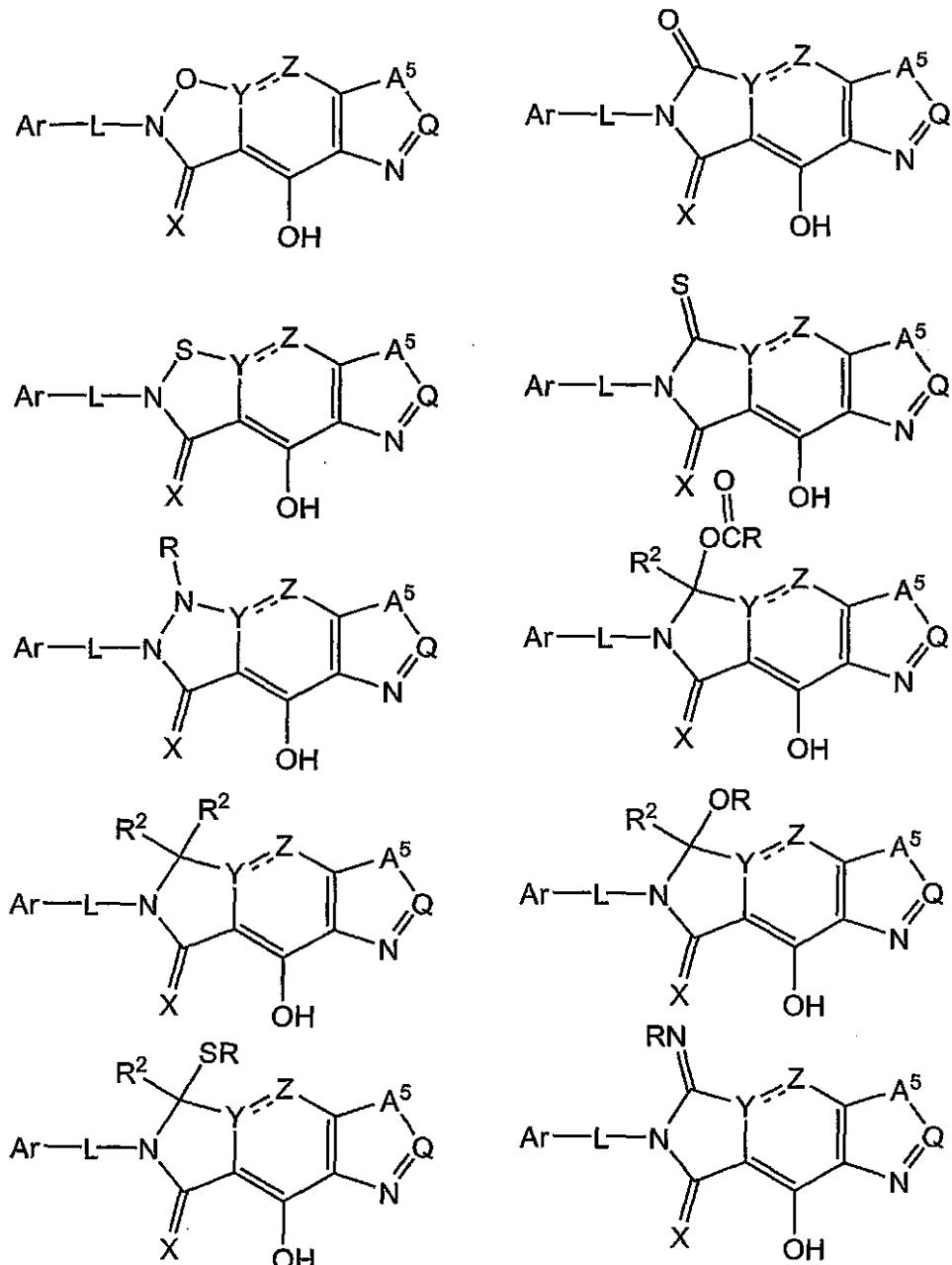


ここで、波線は、三環式構造上の共有結合点を示す；そして
これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、
化合物。

【請求項 26】

以下の構造から選択される、請求項 24 に記載の式 I の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

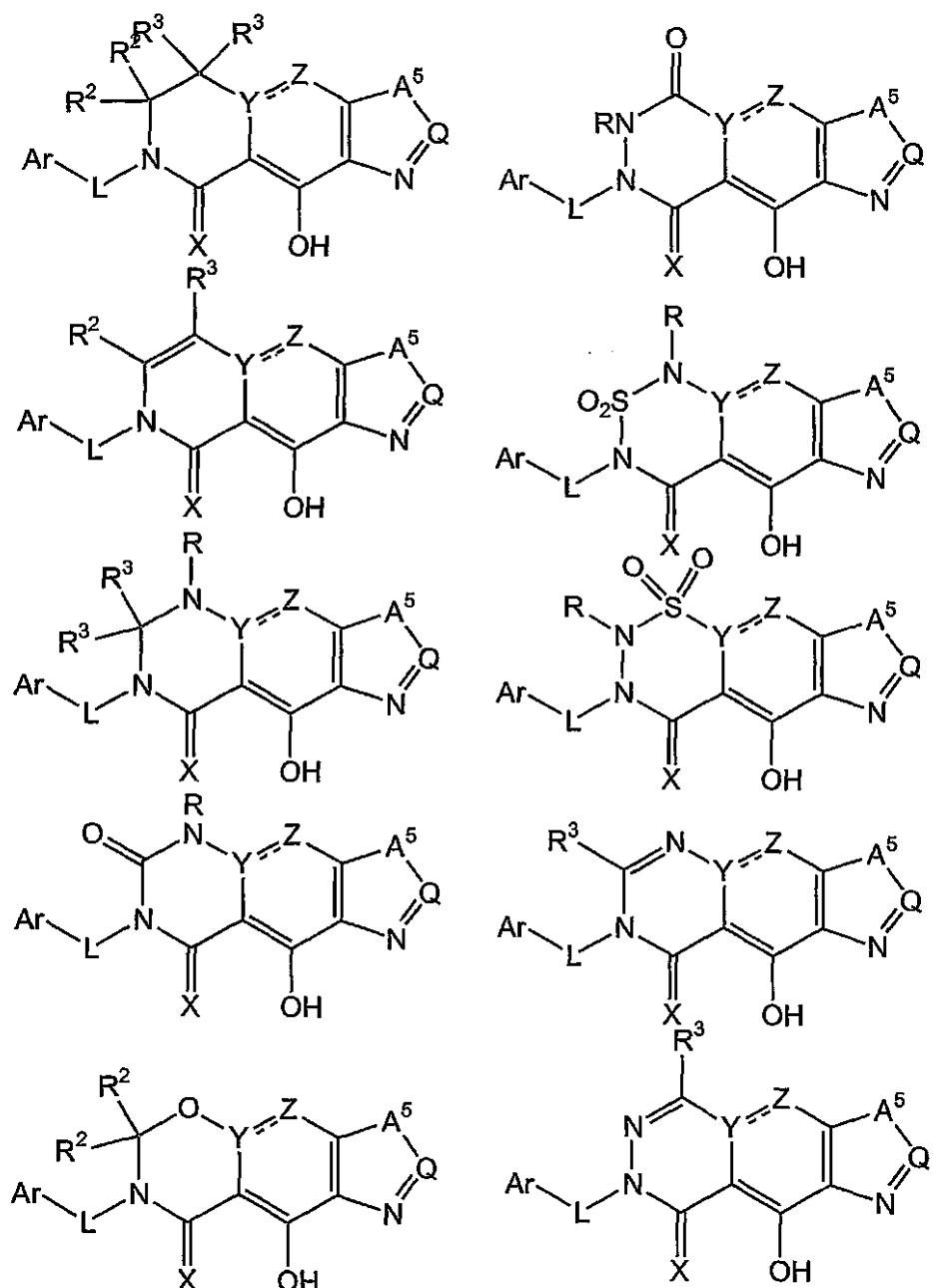
【化 3 1】



【請求項 2 7】

以下の構造から選択される、請求項 2 4 に記載の式 I の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

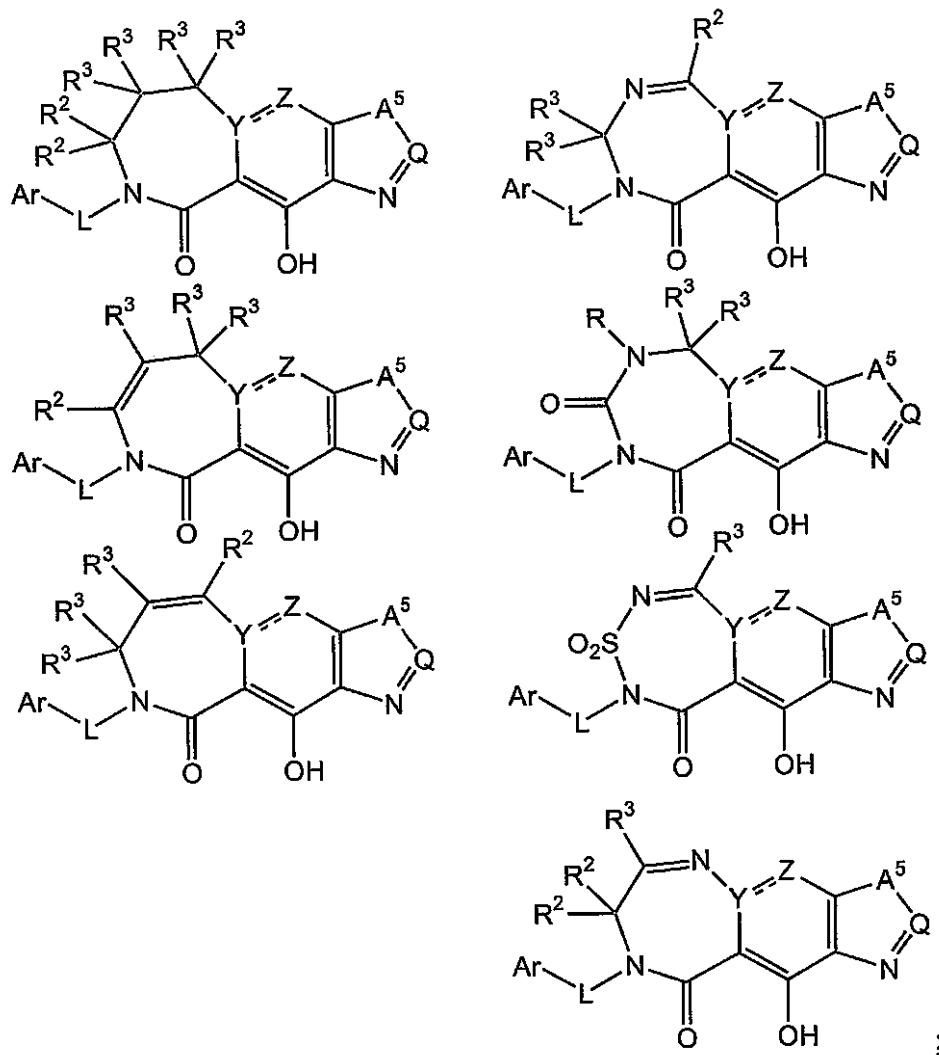
【化32】



【請求項28】

前記化合物が、次式を有する、請求項24に記載の式Iの請求項2または3に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 3 3】

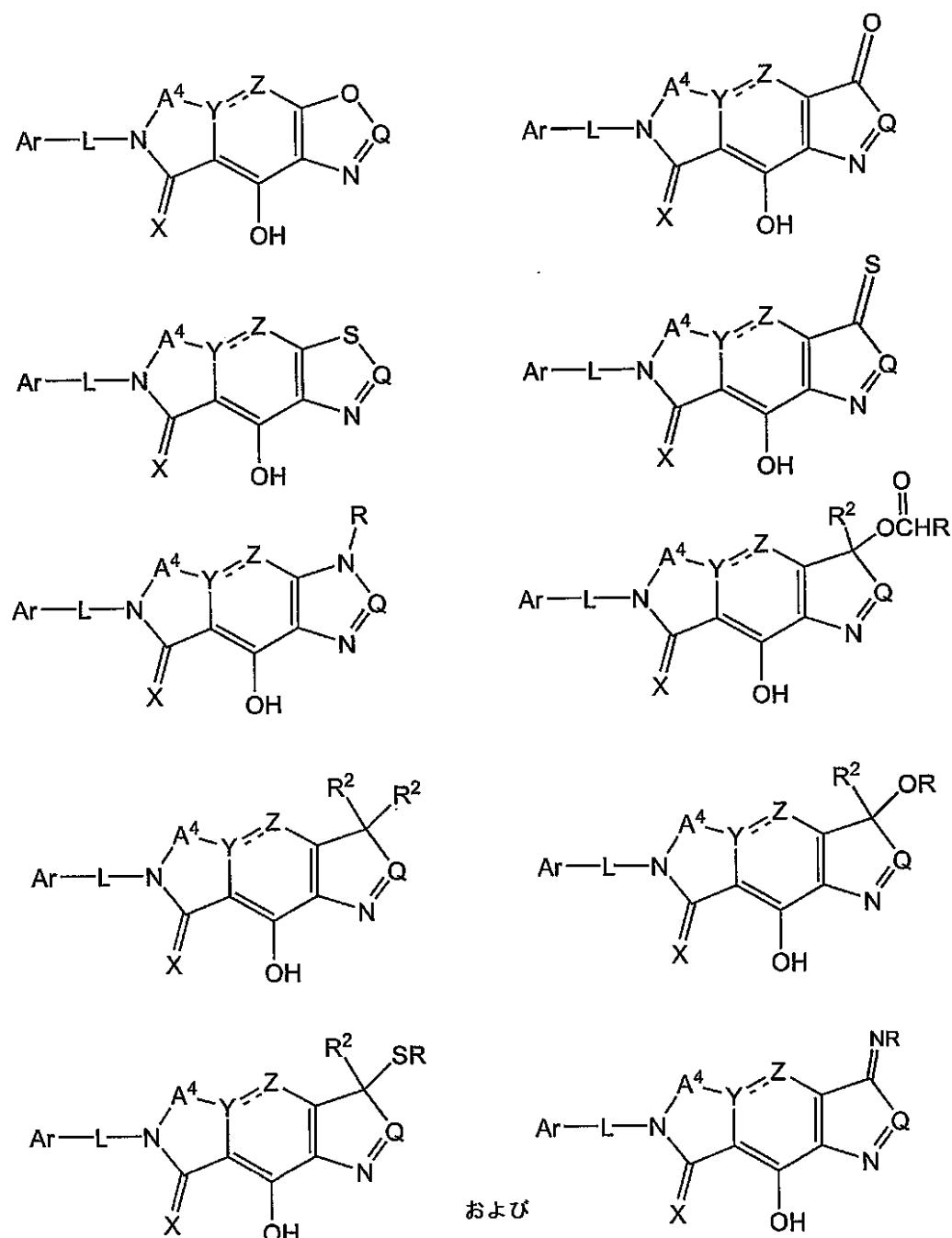


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項 2 9】

以下の構造から選択される、請求項 2 4 に記載の式 I の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

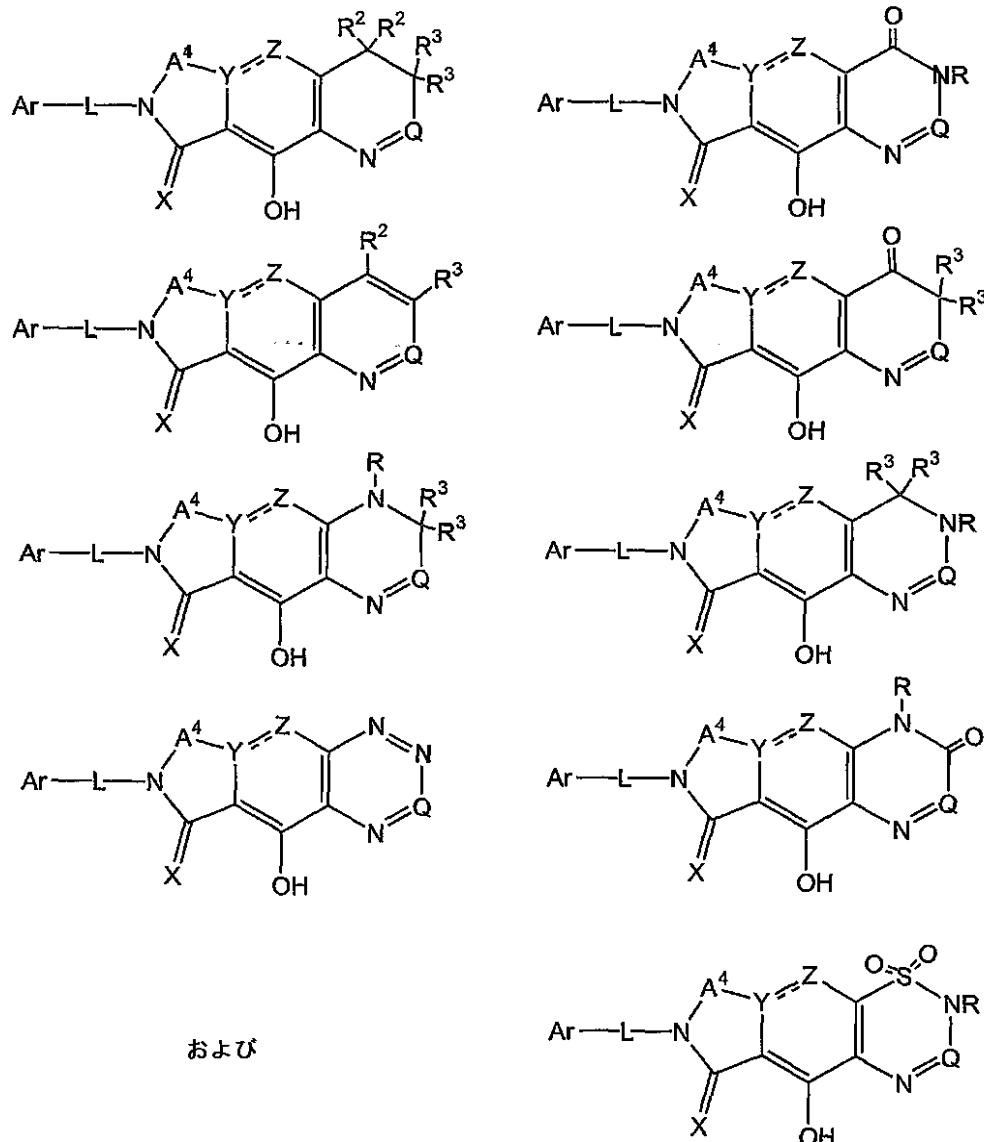
【化 3 4】



【請求項 3 0】

以下の構造から選択される、請求項 2 4 に記載の式 I の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

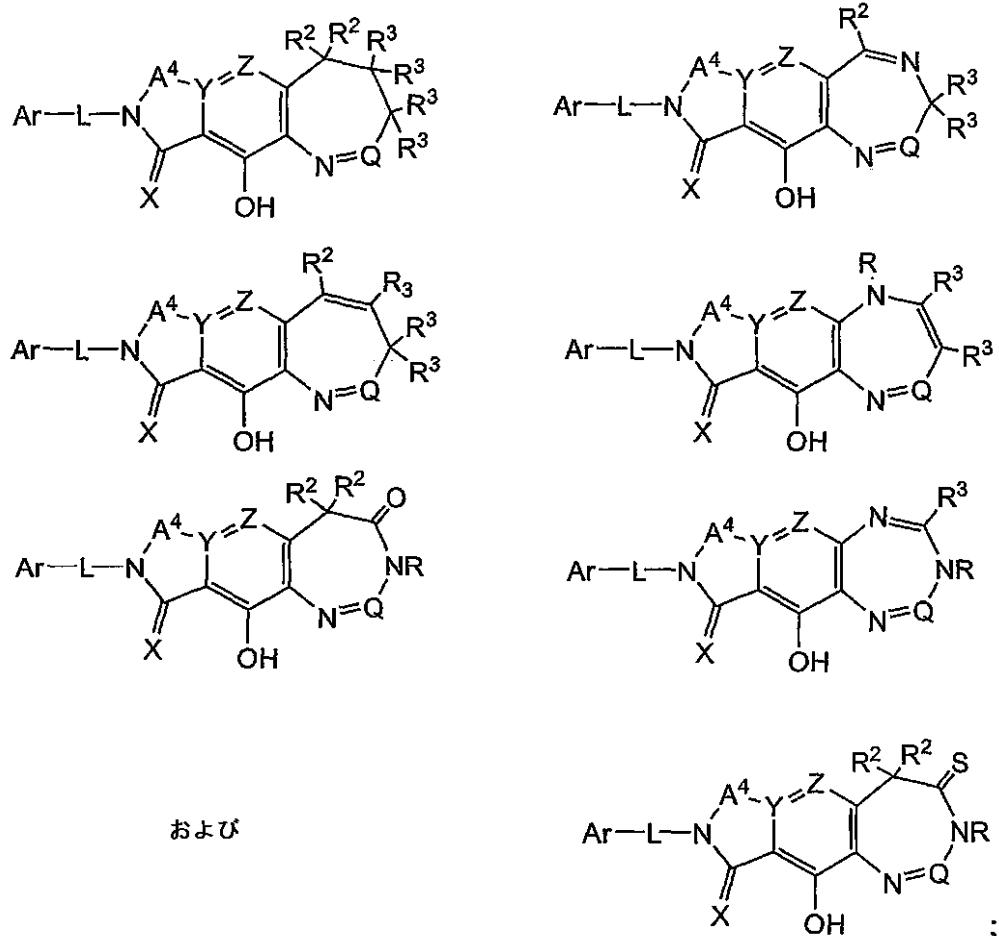
【化 3 5】



【請求項 3 1】

前記化合物が、次式を有する、請求項 2 4 に記載の式 I を有する請求項 2 または 3 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化36】

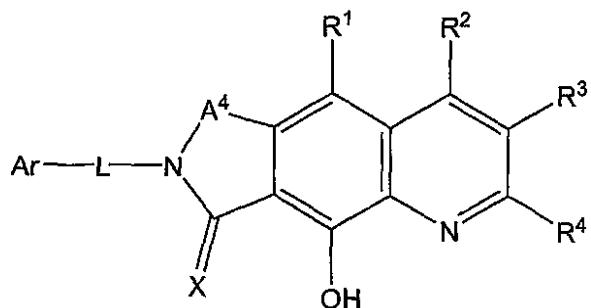


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

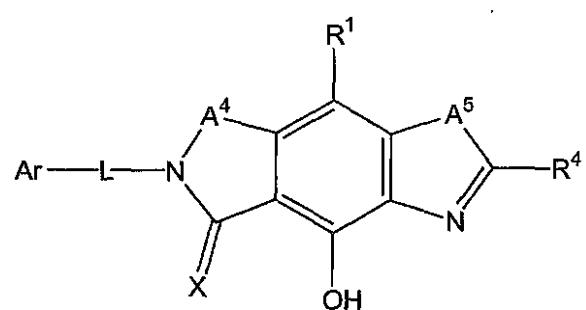
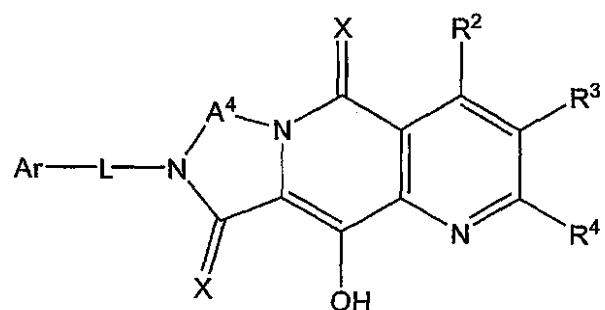
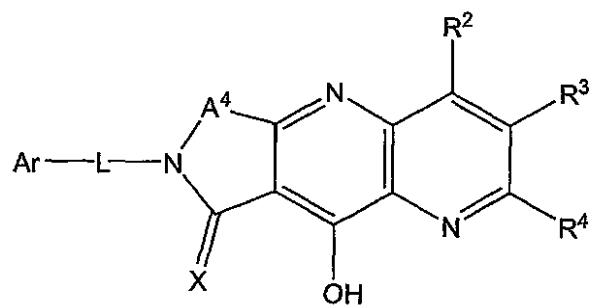
【請求項32】

以下の構造から選択される、請求項24に記載の式IのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化37】



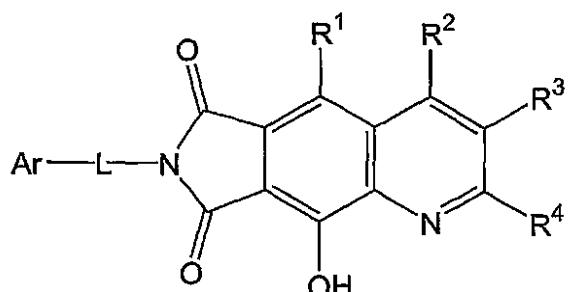
【化38】



【請求項33】

以下の構造から選択される、請求項24に記載の式IのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

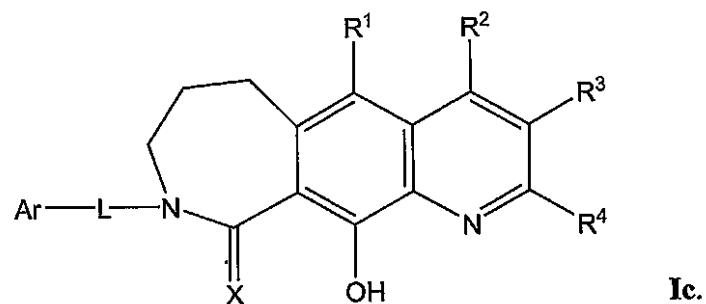
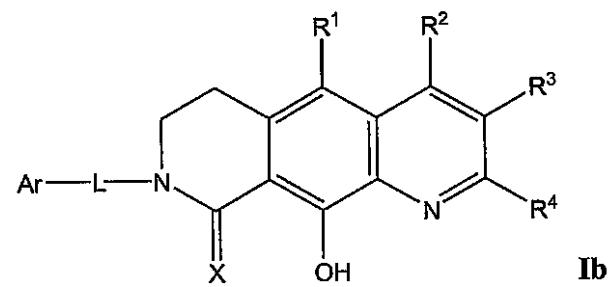
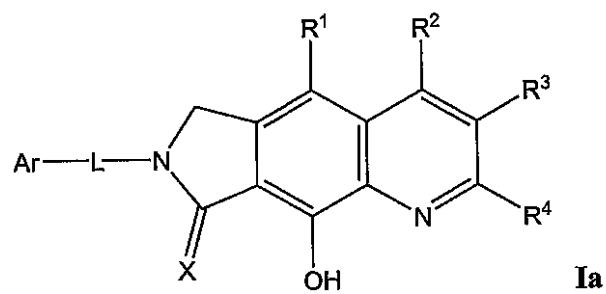
【化39】



【請求項34】

以下の構造から選択される、請求項24に記載の式IのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

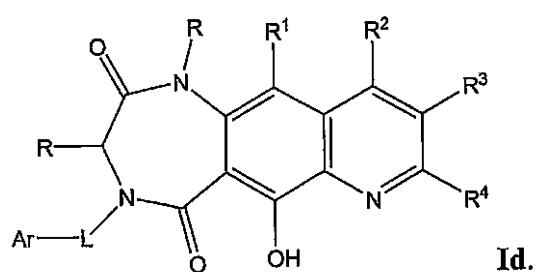
【化40】



【請求項35】

以下の構造から選択される、請求項24に記載の式IのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

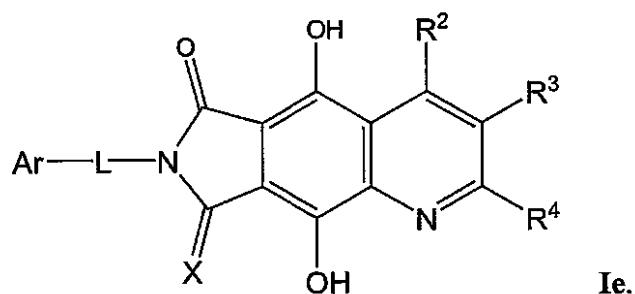
【化41】



【請求項36】

以下の構造から選択される、請求項24に記載の式IのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

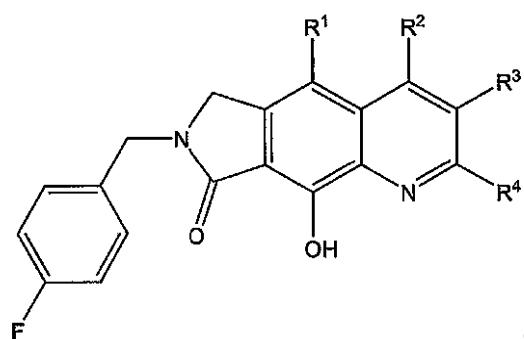
【化42】



【請求項37】

以下の構造から選択される、請求項24に記載の式IのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

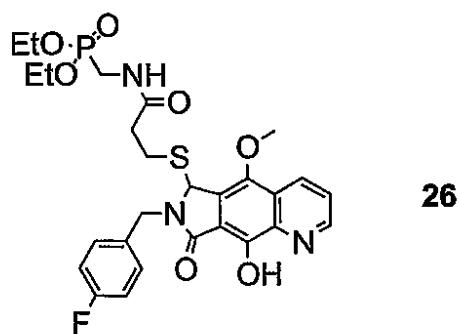
【化43】



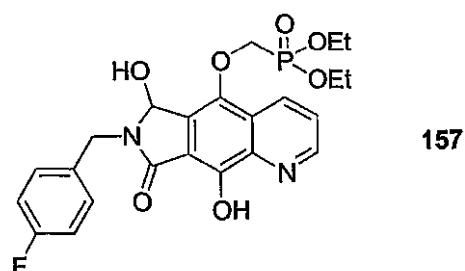
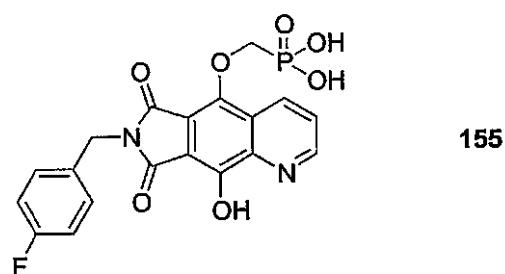
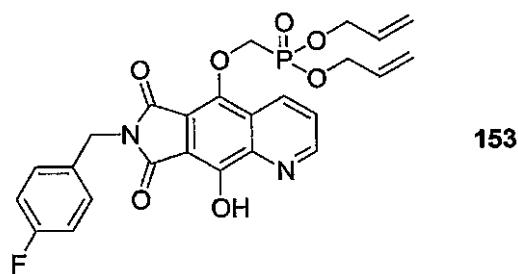
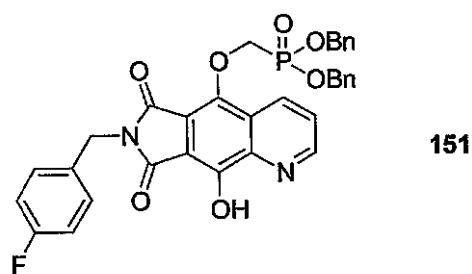
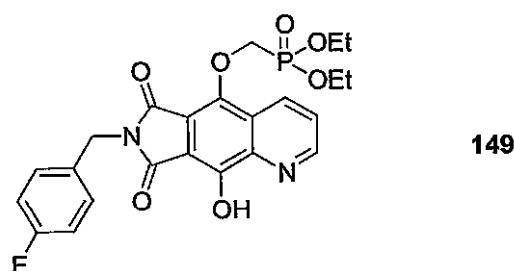
【請求項38】

以下の構造から選択される、請求項24に記載の式IのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

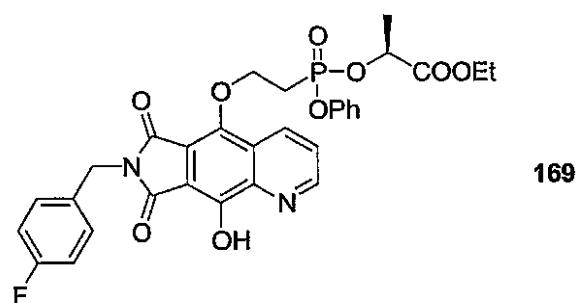
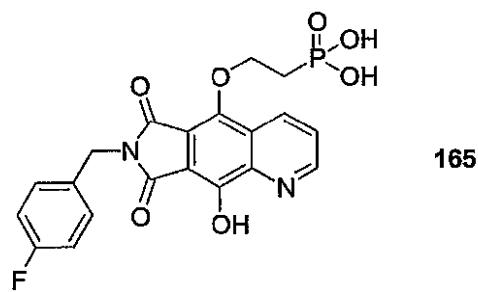
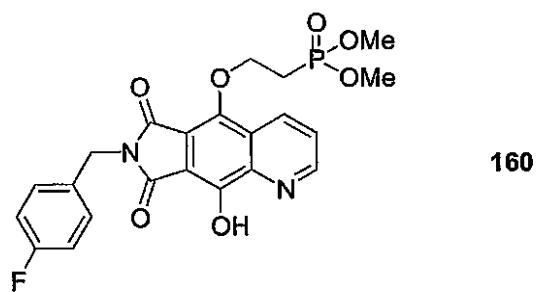
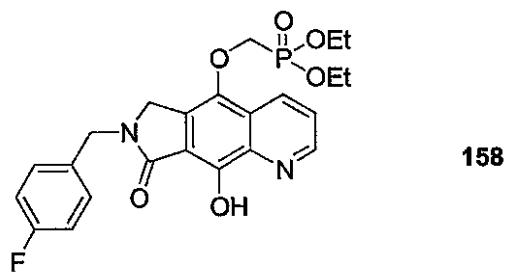
【化44】



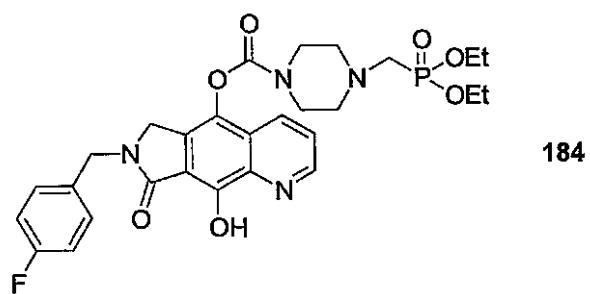
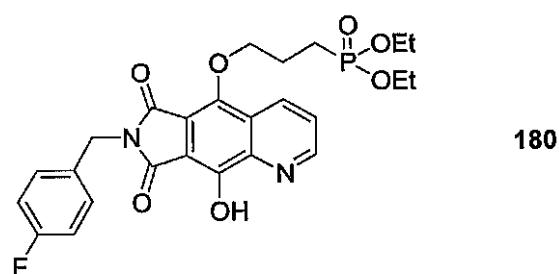
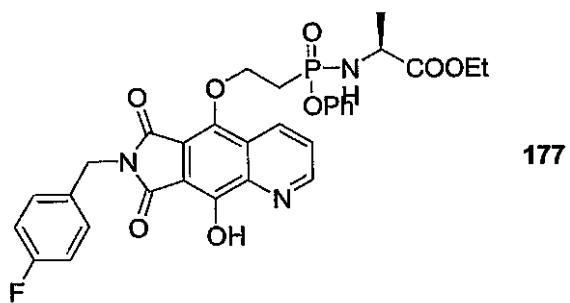
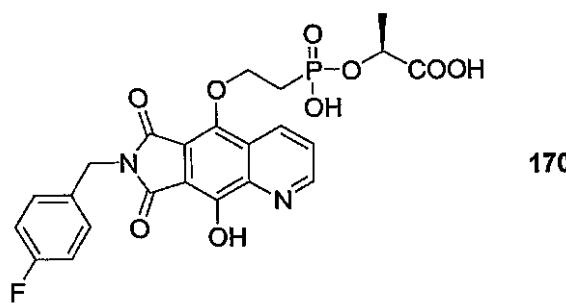
【化45】



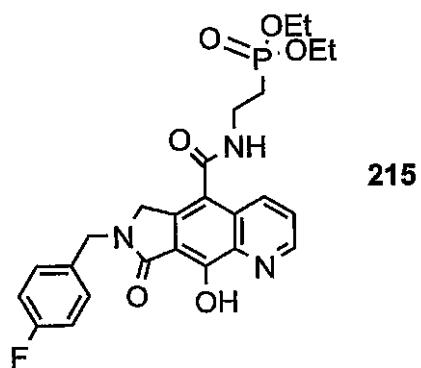
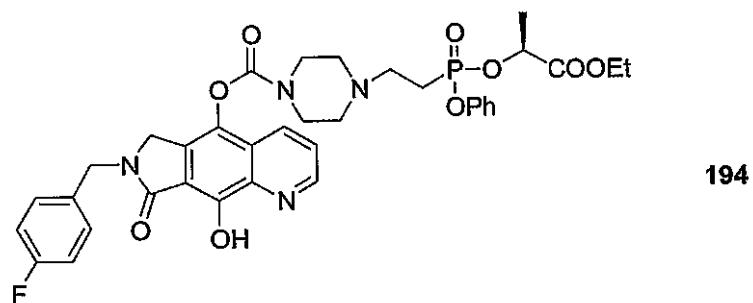
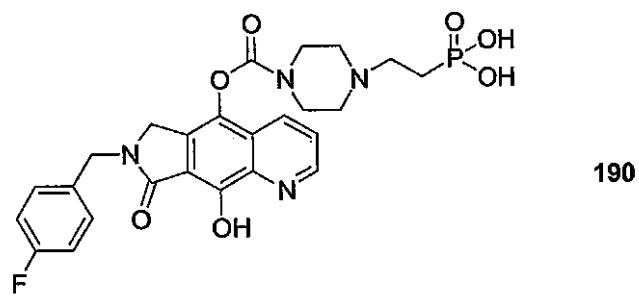
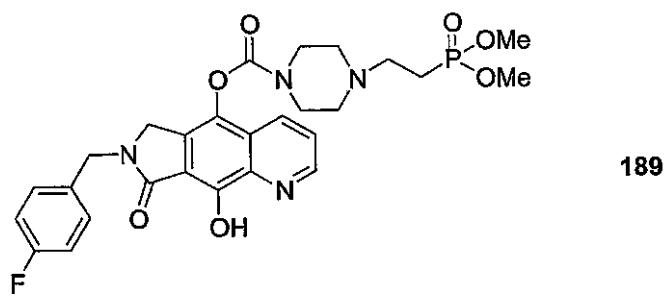
【化46】



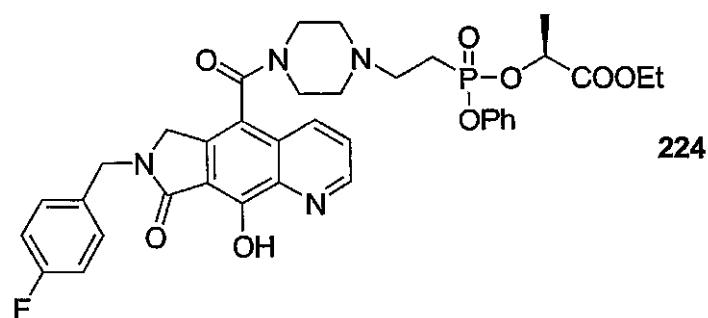
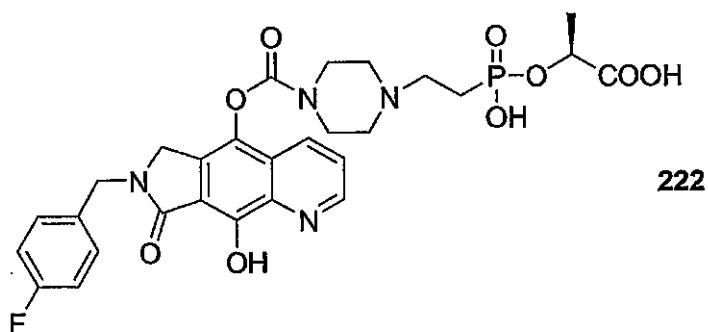
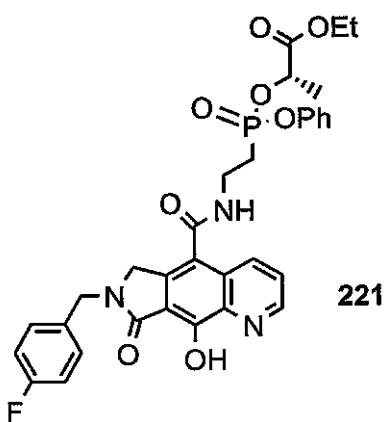
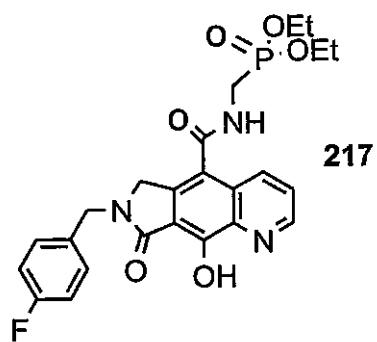
【化 4 7】



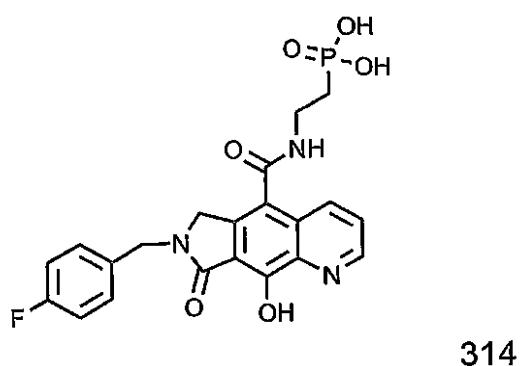
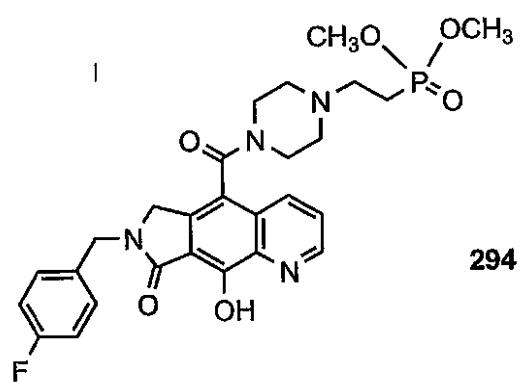
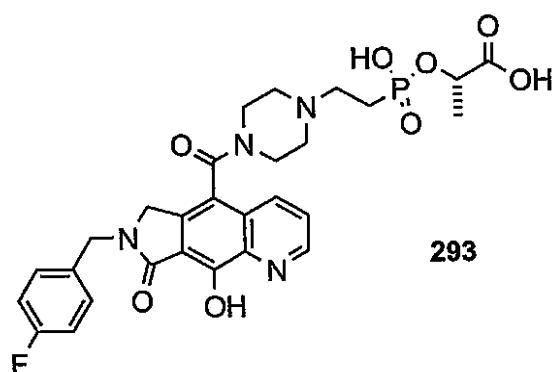
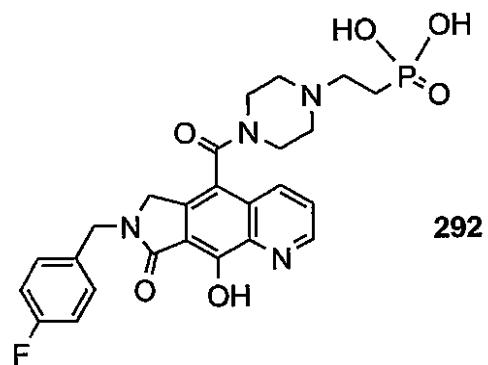
【化48】



【化49】

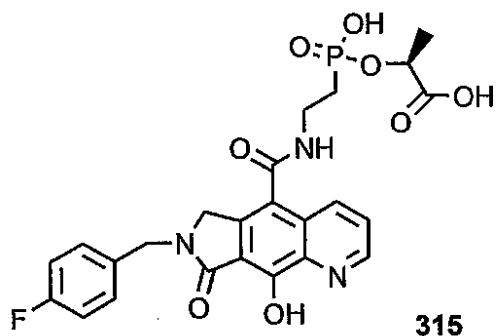


【化 5 0 】



【化51】

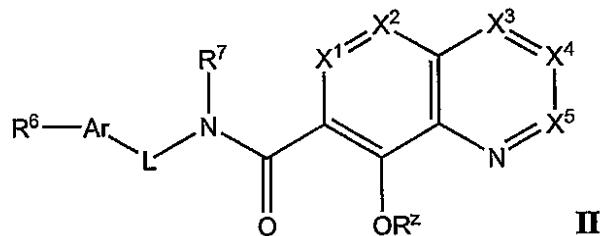
および



【請求項39】

式IIから選択される、請求項2または3に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化52】



ここで：

X¹は、CR¹、NRまたはNである；X²は、CR²、NRまたはNである；X³は、CR³、NRまたはNである；X⁴は、CR⁴、NRまたはNである；X⁵は、CR⁵、NRまたはNである；X¹、X²、X³、X⁴およびX⁵の少なくとも1個は、NRまたはNである；

R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶およびR⁷は、別個に、H、F、Cl、Br、I、OH、-NH₂、-NH₃⁺、-NHR、-NR₂、-NR₃⁺、C₁～C₈アルキルハライド、カルボキシレート、サルフェート、スルファメート、スルホネート、5員～7員環スルタム、C₁～C₈アルキルスルホネート、C₁～C₈アルキルアミノ、4-ジアルキルアミノピリジニウム、C₁～C₈アルキルヒドロキシル、C₁～C₈アルキルチオール、-SO₂R、-SO₂Ar、-SOAr、-SR、-SAr、-SO₂NR₂（スルホンアミド）、-SOR、-CO₂R、-C(=O)NR₂、5員～7員環ラクタム、5員～7員環ラクトン、-CN、-N₃、-NO₂、C₁～C₈アルコキシ、C₁～C₈トリフルオロアルキル、C₁～C₈アルキル、C₁～C₈置換アルキル、C₃～C₁₂炭素環、C₃～C₁₂置換炭素環、C₆～C₂₀アリール、C₆～C₂₀置換アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₂₀置換ヘテロアリール、ポリエチレンオキシ、ホスホネート、ホスフェート、プロドラッグ部分、-OC(=O)OR、-OC(=O)NR₂、-OC(=S)NR₂、-OC(=O)NRNR₂、-OC(=O)R、-C(=O)NRNR₂、-C(=O)R、-OSO₂NR₂（スルファメート）、-NRSO₂R、-NRC(=S)NR₂、-OSO₂R（スルホネート）、-P(=O)(OR)₂、-P(=O)(OR)(NR₂)、-P(=O)(NR₂)₂、-P(=S)(OR)₂、-P(=S)(OR)(NR₂)、-P(=S)(NR₂)₂からなる群から選択され、それらのプロドラッグ置換形状を含む；

R、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶およびR⁷の少なくとも1個は、ホスホネ-

ト基を含む；ここで、該ホスホネート基は、プロドラッグ部分であり得る；または該ホスホネート基は、式 I I の環炭素 (C R¹、C R²、C R³、C R⁴ または C R⁵) に直接結合される；

R² は、H、保護基またはプロドラッグ部分である；

A r は、C₃ ~ C₁₂ 炭素環、C₃ ~ C₁₂ 置換炭素環、C₆ ~ C₂₀ アリール、C₆ ~ C₂₀ 置換アリール、C₂ ~ C₂₀ ヘテロアリールまたはC₂ ~ C₂₀ 置換ヘテロアリールである；そして

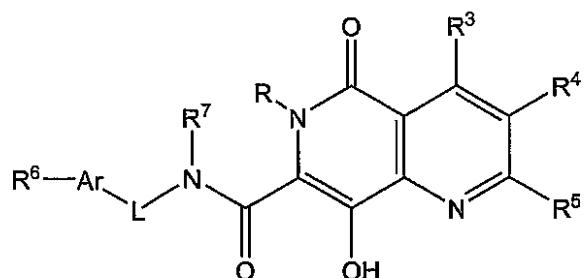
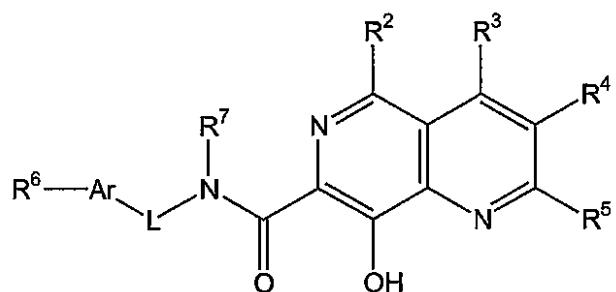
A r は、L と 1 個またはそれ以上のR⁶ とに共有結合されている；そして

これは、1 個またはそれ以上の共有結合されたA⁰ 基で置換されている、化合物。

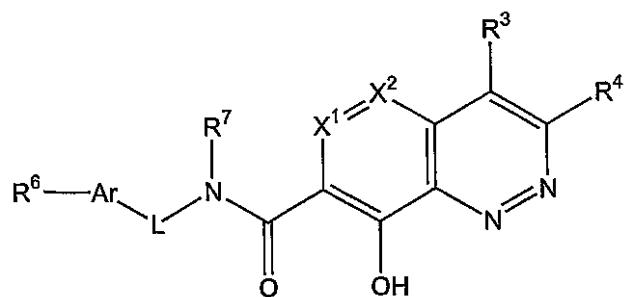
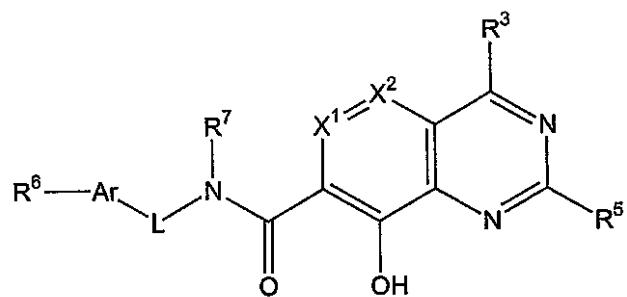
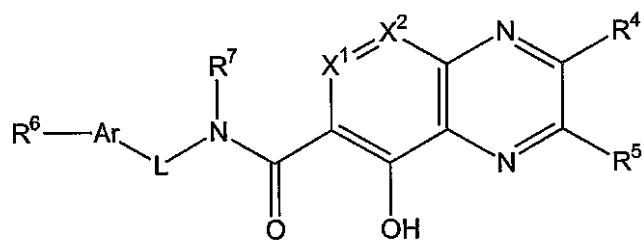
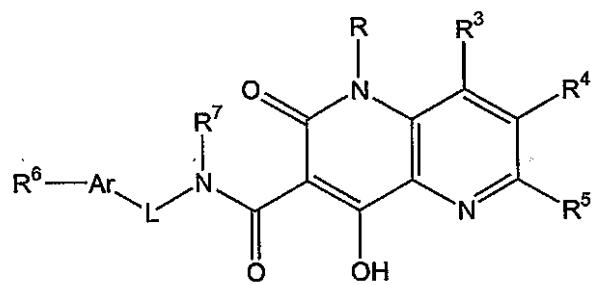
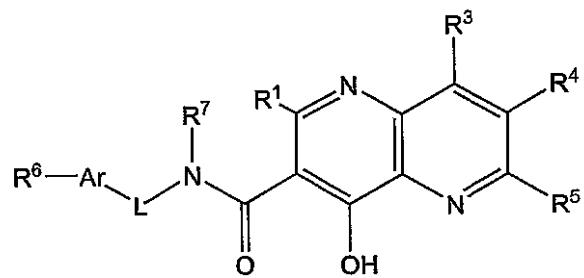
【請求項 40】

以下の構造から選択される、請求項 39 に記載の式 I I の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

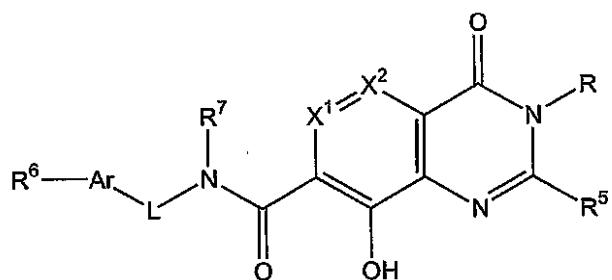
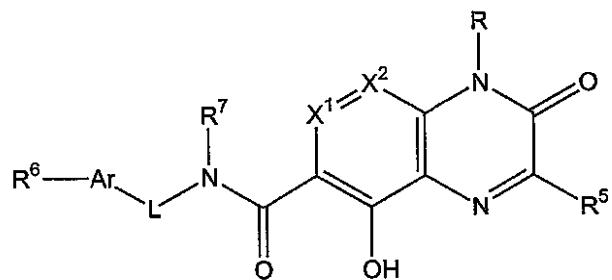
【化 53】



【化 5 4】



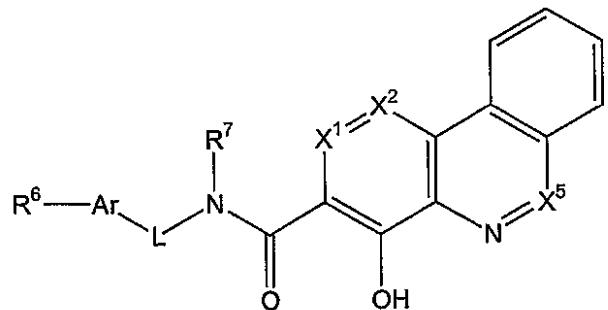
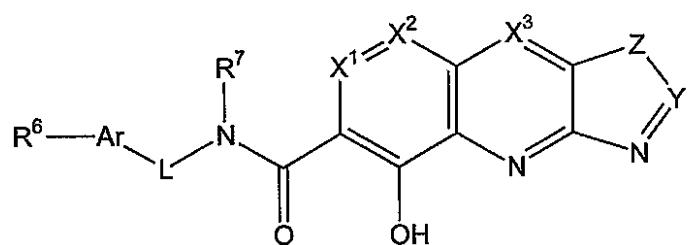
【化 5 5】



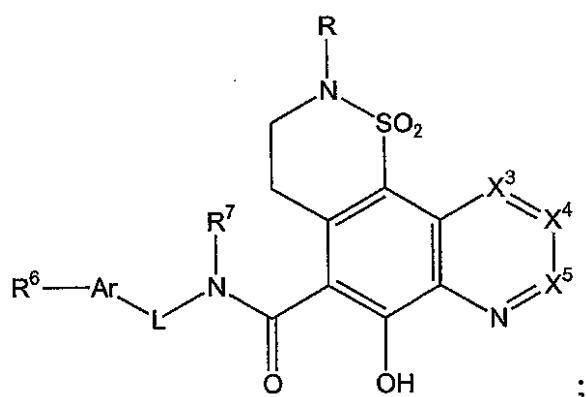
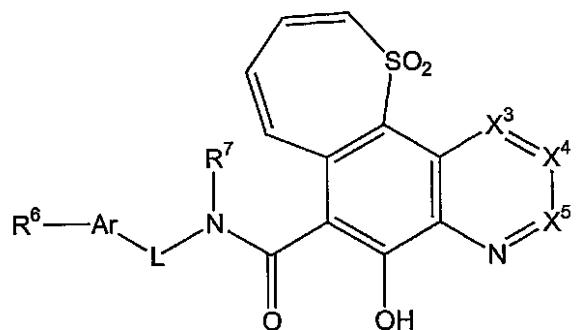
【請求項 4 1】

前記化合物が、次式を有する請求項 3 9 に記載の式 II を有する、請求項 2 または 3 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 5 6】



【化57】

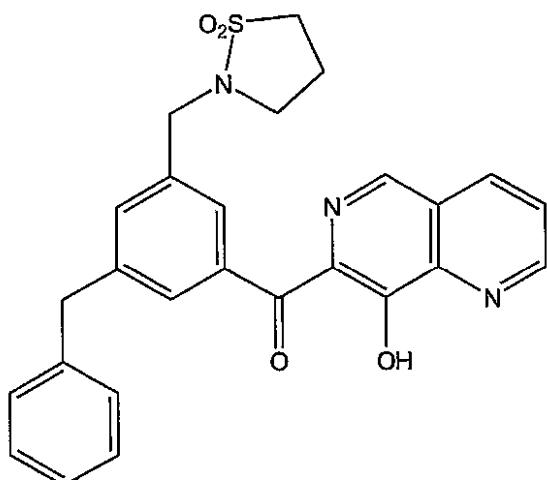


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項42】

前記化合物が、次式を有する請求項39に記載の式IIを有する、請求項2または3に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化58】



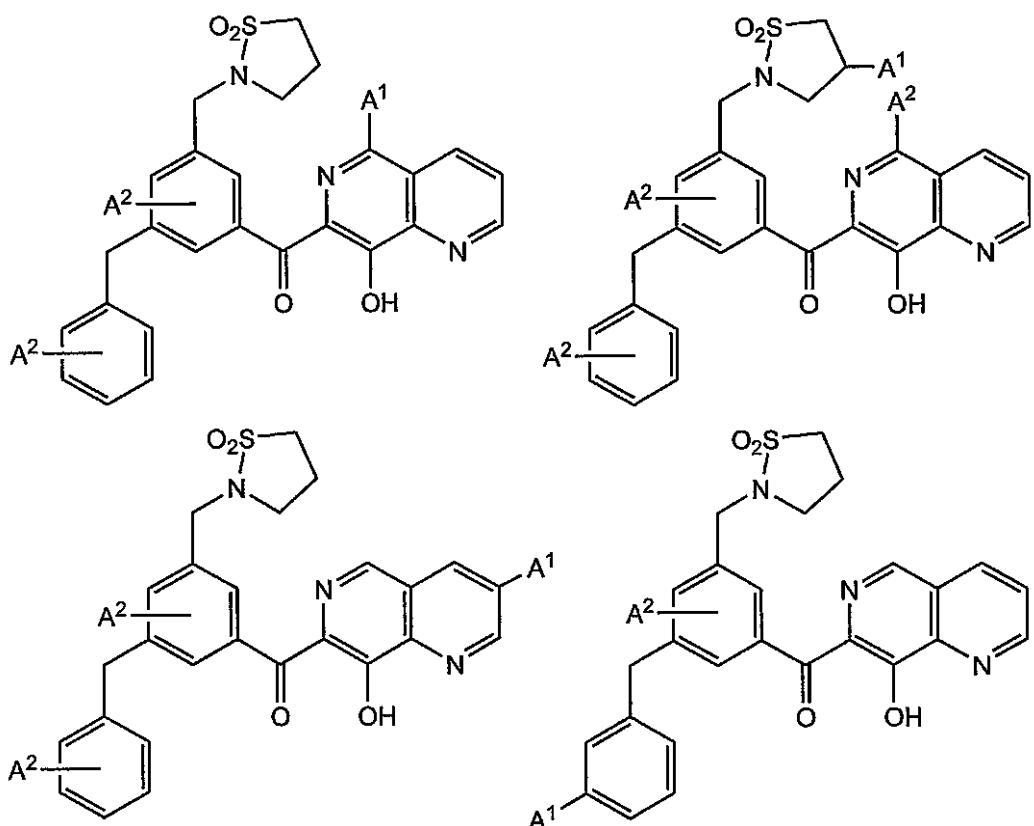
ここで、少なくとも1個のアリールまたはスルタム環炭素原子は、 A^1 基で置換されており、そして任意のアリールまたはスルタム環炭素原子は、 A^2 基で置換され得る、化合物。

【請求項43】

以下の構造から選択される、請求項42に記載の式IIのHIVインテグラーゼ阻害剤化

合物：

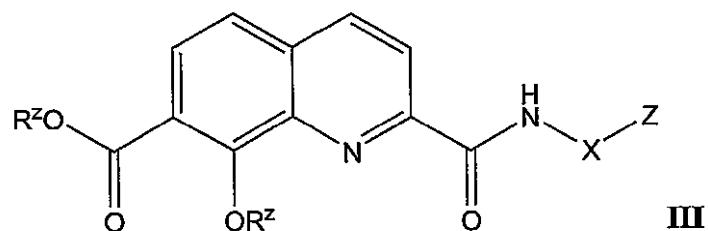
【化59】



【請求項44】

式I I Iから選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化60】



ここで、

R^zは、H、保護基またはプロドラッグ部分である；

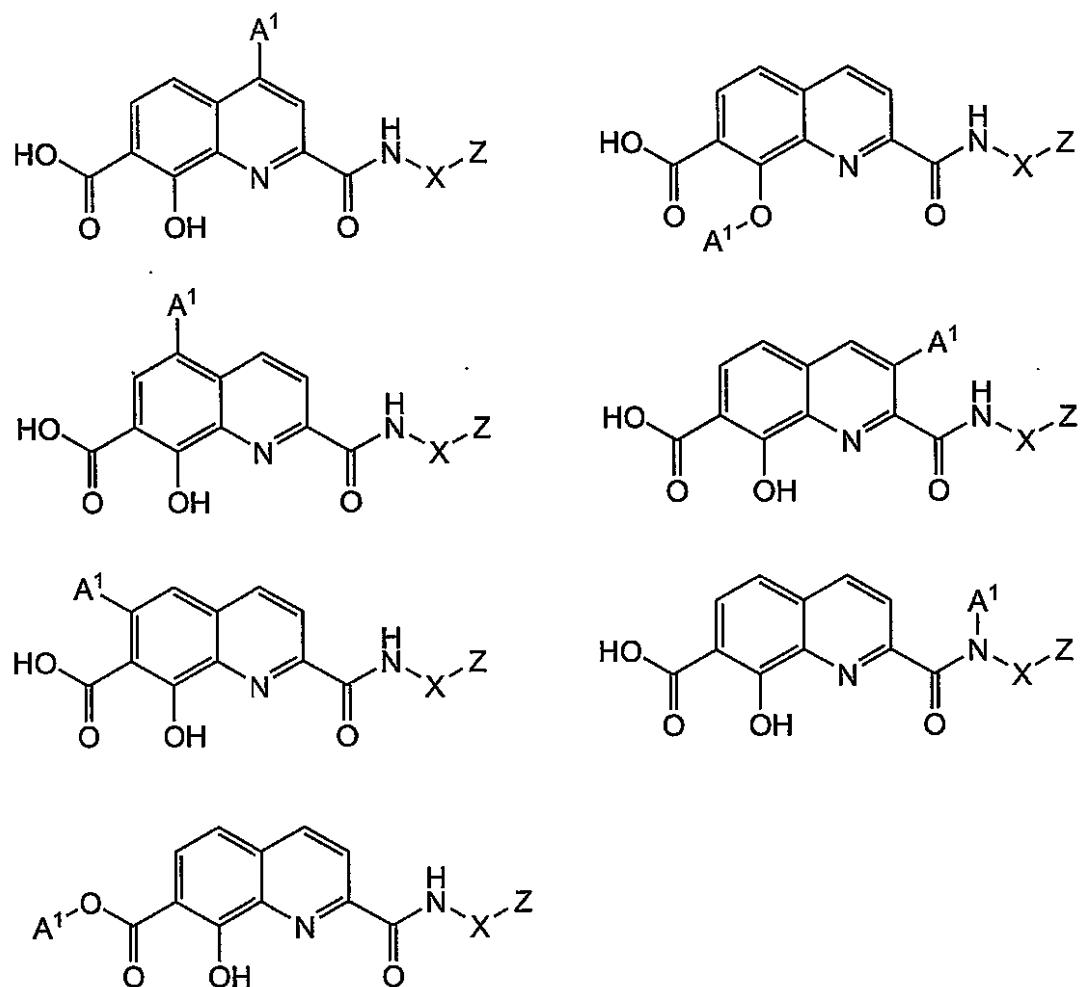
Xは、Lである；そして

Zは、C₃～C₁₂炭素環、C₃～C₁₂置換炭素環、C₆～C₂₀アリール、C₆～C₂₀置換アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリールまたはC₂～C₂₀置換ヘテロアリールである；これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

【請求項45】

以下の構造から選択される、請求項44に記載の式I I IのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

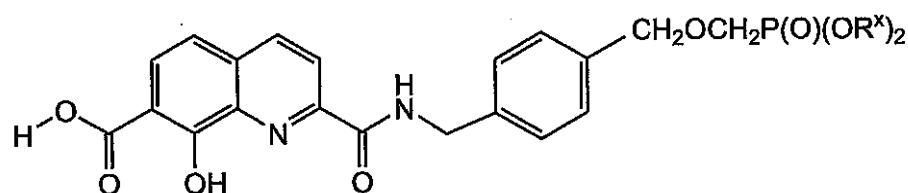
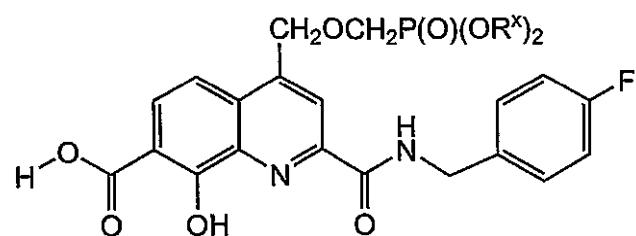
【化61】



【請求項46】

以下の構造から選択される、請求項45に記載の式I I IのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

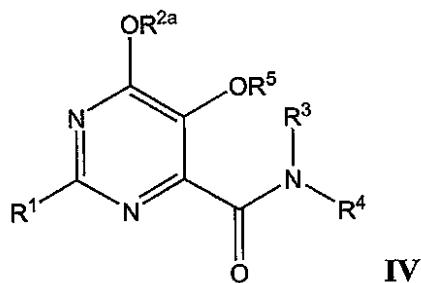
【化62】



【請求項47】

式I Vから選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化63】



ここで：

R^1 は、H、F、Cl、Br、I、OH、OR、アミノ(-NH₂)、アンモニウム(-NH₃⁺)、アルキルアミノ(-NHR)、ジアルキルアミノ(-NR₂)、トリアルキルアンモニウム(-NR₃⁺)、カルボキシル(-CO₂H)、サルフェート、スルファメート、スルホネート、5員～7員環スルタム、4-ジアルキルアミノピリジニウム、アルキルスルホン(-SO₂R)、アリールスルホン(-SO₂Ar)、アリールスルホキシド(-SOAr)、アリールチオ(-SAr)、スルホンアミド(-SO₂NR₂)、アルキルスルホキシド(-SOR)、ホルミル(-CHO)、エステル(-CO₂R)、アミド(-C(=O)NR₂)、5員～7員環ラクタム、5員～7員環ラクトン、ニトリル(-CN)、アジド(-N₃)、ニトロ(-NO₂)、C₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈置換アルキル、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈置換アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₂～C₁₈置換アルキニル、C₆～C₂₀アリール、C₆～C₂₀置換アリール、C₂～C₂₀複素環、およびC₂～C₂₀置換複素環、ホスホネート、ホスフェート、ポリエチレンオキシ、保護基、およびプロドラッグ部分から選択される；

R^{2a} および R^5 は、それぞれ別個に、H、サルフェート、スルファメート、スルホネート、5員～7員環スルタム、4-ジアルキルアミノピリジニウム、アルキルスルホン(-SO₂R)、アリールスルホン(-SO₂Ar)、アリールスルホキシド(-SOAr)、アリールチオ(-SAr)、スルホンアミド(-SO₂NR₂)、アルキルスルホキシド(-SOR)、ホルミル(-CHO)、エステル(-CO₂R)、アミド(-C(=O)NR₂)、5員～7員環ラクタム、5員～7員環ラクトン、ニトリル(-CN)、アジド(-N₃)、ニトロ(-NO₂)、C₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈置換アルキル、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈置換アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₂～C₁₈置換アルキニル、C₆～C₂₀アリール、C₆～C₂₀置換アリール、C₂～C₂₀複素環、C₂～C₂₀置換複素環、ホスホネート、ホスフェート、ポリエチレンオキシ、保護基、およびプロドラッグ部分からなる群から選択される；

R^3 および R^4 は、それぞれ別個に、H、OH、OR、アミノ(-NH₂)、アンモニウム(-NH₃⁺)、アルキルアミノ(-NHR)、ジアルキルアミノ(-NR₂)、トリアルキルアンモニウム(-NR₃⁺)、カルボキシル(-CO₂H)、サルフェート、スルファメート、スルホネート、5員～7員環スルタム、4-ジアルキルアミノピリジニウム、アルキルスルホン(-SO₂R)、アリールスルホン(-SO₂Ar)、アリールスルホキシド(-SOAr)、アリールチオ(-SAr)、スルホンアミド(-SO₂NR₂)、アルキルスルホキシド(-SOR)、ホルミル(-CHO)、エステル(-CO₂R)、アミド(-C(=O)NR₂)、5員～7員環ラクタム、5員～7員環ラクトン、ニトリル(-CN)、アジド(-N₃)、ニトロ(-NO₂)、C₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈置換アルキル、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈置換アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₂～C₁₈置換アルキニル、C₆～C₂₀アリール、C₆～C₂₀置換アリール、C₂～C₂₀複素環、C₂～C₂₀置換複素環、ホスホネート、ホスフェート、ポリエチレンオキシ、保護基、およびプロドラッグ部分から選択される；

R は、別個に、H、C₁～C₈アルキル、C₁～C₈置換アルキル、C₂～C₁₈アル

ケニル、C₂～C₁₈置換アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₂～C₁₈置換アルキニル、C₆～C₂₀アリール、C₆～C₂₀置換アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、およびC₂～C₂₀置換ヘテロアリールからなる群から選択される；

R、R¹、R^{2a}、R³、R⁴またはR⁵は、別個に、A¹、A³またはL-A³を含む；そして

R、R¹、R^{2a}、R³、R⁴およびR⁵の少なくとも1個は、ホスホネート基を含む；

ここで、該化合物は、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

【請求項48】

R¹、R^{2a}、R³、R⁴およびR⁵が、別個に、-C(=S)NR₂、-C(=O)OR、-C(=O)NR₂、-C(=O)NRR₂、-C(=O)R、-SO₂NR₂、-NRSO₂R、-NRC(=S)NR₂、-SR、-S(OR)R、-SO₂R、-SO₂R、-P(=O)(OR)₂、-P(=O)(OR)(NR₂)、-P(=O)(NR₂)₂、-P(=S)(OR)₂、-P(=S)(OR)(NR₂)₂および-P(=S)(NR₂)₂からなる群から選択される；

これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている；

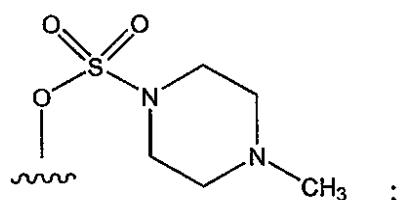
それらのプロドラッグ置換形状を含む、

請求項47に記載の式IVを有する、請求項2または3に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項49】

R¹、R^{2a}、R³、R⁴およびR⁵が、個々にまたは組み合わせて、4員～7員環ラクタム、カーボネートまたはスルタム、または以下の構造を有するピペラジニルスルファメートを形成する、請求項47に記載の式IVを有する、請求項2または3に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化64】



これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

【請求項50】

R¹、R^{2a}、R³、R⁴およびR⁵が、別個に、-OC(=S)NR₂、-OC(=O)OR、-OC(=O)NR₂、-OC(=O)NRR₂、-OC(=O)R、-OP(=O)(OR)₂、-OP(=O)(OR)(NR₂)、-OP(=O)(NR₂)₂、-OP(=S)(OR)₂、-OP(=S)(OR)(NR₂)および-OP(=S)(NR₂)₂からなる群から選択され、

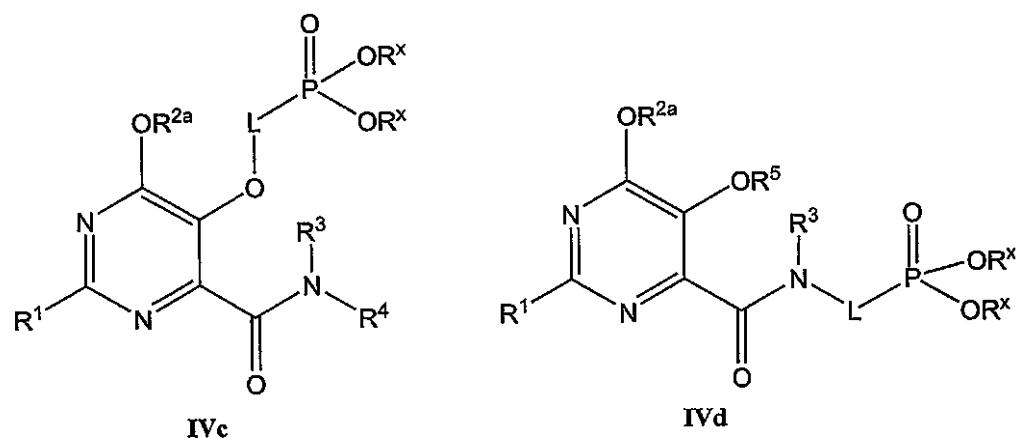
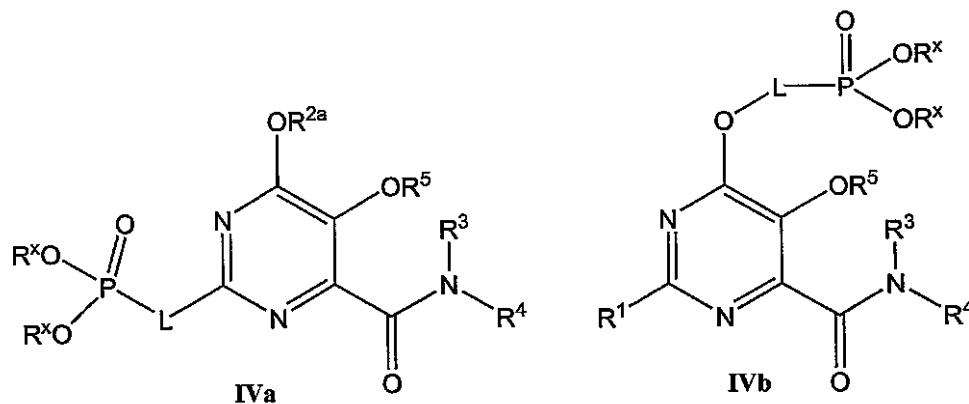
該化合物が、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている；

それらのプロドラッグ置換形状を含む、請求項47に記載の式IVを有する、請求項2または3に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項51】

以下の構造から選択される、請求項47に記載の式IVのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

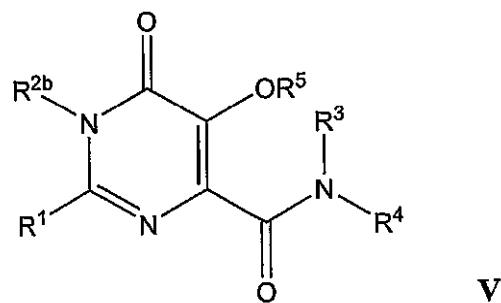
【化65】



【請求項52】

式IVから選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化66】



ここで：

R¹は、H、F、Cl、Br、I、OH、OR、アミノ(-NH₂)、アンモニウム(-NH₃⁺)、アルキルアミノ(-NHR)、ジアルキルアミノ(-NR₂)、トリアルキルアンモニウム(-NR₃⁺)、カルボキシル(-CO₂H)、サルフェート、スルファメート、スルホネート、5員～7員環スルタム、4-ジアルキルアミノピリジニウム、アルキルスルホン(-SO₂R)、アリールスルホン(-SO₂Ar)、アリールスルホキシド(-SOAr)、アリールチオ(-SAr)、スルホンアミド(-SO₂NR₂)、アルキルスルホキシド(-SOR)、ホルミル(-CHO)、エステル(-CO₂R)、アミド(-C(=O)NR₂)、5員～7員環ラクタム、5員～7員環ラクトン、ニトリル(-CN)、アジド(-N₃)、ニトロ(-NO₂)、C₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈置換アルキル、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈置換アルケニル、C₂～

C_{1-8} アルキニル、 C_2-C_{1-8} 置換アルキニル、 C_6-C_{2-0} アリール、 C_6-C_{2-0} 置換アリール、 C_2-C_{2-0} 複素環、および C_2-C_{2-0} 置換複素環、ホスホネート、ホスフェート、ポリエチレンオキシ、保護基、およびプロドラッグ部分からなる群から選択される；

R^5 は、H、サルフェート、スルファメート、スルホネート、5員～7員環スルタム、4-ジアルキルアミノピリジニウム、アルキルスルホン(-SO₂R)、アリールスルホン(-SO₂Ar)、アリールスルホキシド(-SOAr)、アリールチオ(-SAr)、スルホンアミド(-SO₂NR₂)、アルキルスルホキシド(-SOR)、ホルミル(-CHO)、エステル(-CO₂R)、アミド(-C(=O)NR₂)、5員～7員環ラクタム、5員～7員環ラクトン、ニトリル(-CN)、アジド(-N₃)、ニトロ(-NO₂)、 C_1-C_{1-8} アルキル、 C_1-C_{1-8} 置換アルキル、 C_2-C_{1-8} アルケニル、 C_2-C_{1-8} 置換アルケニル、 C_2-C_{1-8} アルキニル、 C_2-C_{1-8} 置換アルキニル、 C_6-C_{2-0} アリール、 C_6-C_{2-0} 置換アリール、 C_2-C_{2-0} 複素環、 C_2-C_{2-0} 置換複素環、ホスホネート、ホスフェート、ポリエチレンオキシ、保護基、およびプロドラッグ部分からなる群から選択される；

R^{2b} 、 R^3 および R^4 は、それぞれ別個に、H、OH、OR、アミノ(-NH₂)、アンモニウム(-NH₃⁺)、アルキルアミノ(-NHR)、ジアルキルアミノ(-NR₂)、トリアルキルアンモニウム(-NR₃⁺)、カルボキシル(-CO₂H)、サルフェート、スルファメート、スルホネート、5員～7員環スルタム、4-ジアルキルアミノピリジニウム、アルキルスルホン(-SO₂R)、アリールスルホン(-SO₂Ar)、アリールスルホキシド(-SOAr)、アリールチオ(-SAr)、スルホンアミド(-SO₂NR₂)、アルキルスルホキシド(-SOR)、ホルミル(-CHO)、エステル(-CO₂R)、アミド(-C(=O)NR₂)、5員～7員環ラクタム、5員～7員環ラクトン、ニトリル(-CN)、アジド(-N₃)、ニトロ(-NO₂)、 C_1-C_{1-8} アルキル、 C_1-C_{1-8} 置換アルキル、 C_2-C_{1-8} アルケニル、 C_2-C_{1-8} 置換アルケニル、 C_2-C_{1-8} アルキニル、 C_2-C_{1-8} 置換アルキニル、 C_6-C_{2-0} アリール、 C_6-C_{2-0} 置換アリール、 C_2-C_{2-0} 複素環、 C_2-C_{2-0} 置換複素環、ホスホネート、ホスフェート、ポリエチレンオキシ、保護基、およびプロドラッグ部分からなる群から選択される；

R は、別個に、H、 C_1-C_8 アルキル、 C_1-C_8 置換アルキル、 C_2-C_{1-8} アルケニル、 C_2-C_{1-8} 置換アルケニル、 C_2-C_{1-8} アルキニル、 C_2-C_{1-8} 置換アルキニル、 C_6-C_{2-0} アリール、 C_6-C_{2-0} 置換アリール、 C_2-C_{2-0} ヘテロアリール、および C_2-C_{2-0} 置換ヘテロアリールからなる群から選択される；

R 、 R^1 、 R^{2b} 、 R^3 、 R^4 または R^5 は、別個に、A¹、A³ またはL-A³ を含む；そして

R 、 R^1 、 R^{2b} 、 R^3 、 R^4 および R^5 の少なくとも1個は、A⁰ 基を含む、化合物。

【請求項 5 3】

R^1 、 R^{2b} 、 R^3 、 R^4 および R^5 が、別個に、-C(=S)NR₂、-C(=O)O R、-C(=O)NR₂、-C(=O)N R N R₂、-C(=O)R、-SO₂NR₂、-N R SO₂R、-N R C(=S)NR₂、-S R、-S(O)R、-SO₂R、-P(=O)(OR)₂、-P(=O)(OR)(NR₂)、-P(=O)(NR₂)₂、-P(=S)(OR)₂、-P(=S)(OR)(NR₂)₂ および-P(=S)(NR₂)₂ からなる群から選択される；

これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰ 基で置換されている；

それらのプロドラッグ置換形状を含む。

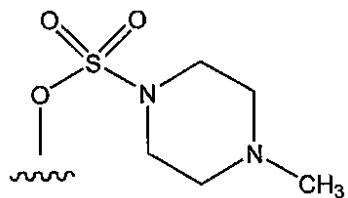
請求項 5 2 に記載の式Vを有する、請求項 2 または3 に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 5 4】

R^1 、 R^{2b} 、 R^{2b} 、 R^3 、 R^4 および R^5 が、個々にまたは組み合わせて、4員～7

員環ラクタム、カーボネートまたはスルタム、または以下の構造を有するピペラジニルスルファメートを形成する、請求項 5 2 に記載の式 V を有する、請求項 2 または 3 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 6 7】



これは、1個またはそれ以上の共有結合された A⁰ 基で置換されている；
それらのプロドラッグ置換形状を含む、
化合物。

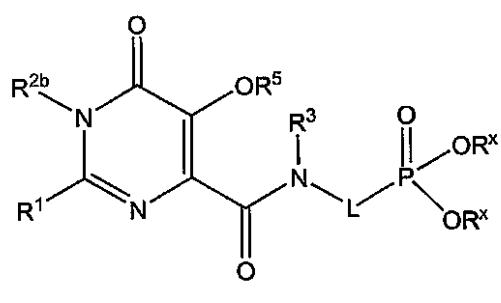
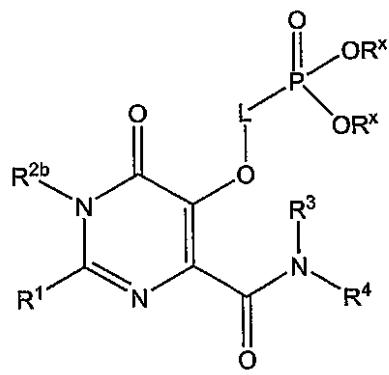
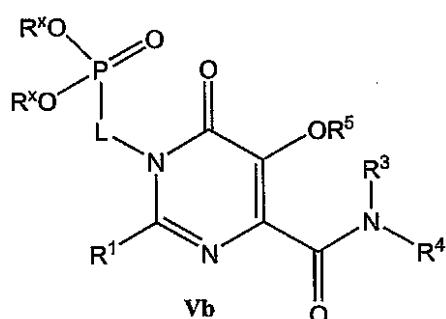
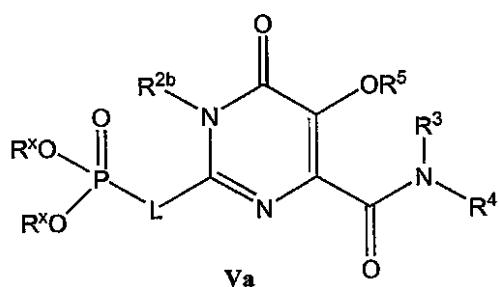
【請求項 5 5】

R¹ が、-OC(=S)NR₂、-OC(=O)OR、-OC(=O)NR₂、-OC(=O)NRNR₂、-OC(=O)R、-OP(=O)(OR)₂、-OP(=O)(OR)(NR₂)、-OP(=O)(NR₂)₂、-OP(=S)(OR)₂、-OP(=S)(OR)(NR₂) および -OP(=S)(NR₂)₂ からなる群から選択され、
該化合物が、1個またはそれ以上の共有結合された A⁰ 基で置換されている；
それらのプロドラッグ置換形状を含む、請求項 5 2 に記載の式 V を有する、請求項 2 または 3 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 5 6】

以下の構造から選択される、請求項 5 2 に記載の式 V の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

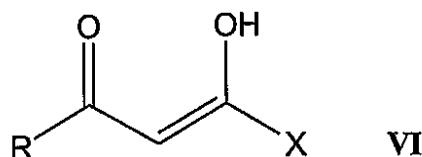
【化 6 8】



【請求項 5 7】

式V I から選択される、請求項2に記載のH I Vインテグラーーゼ阻害剤化合物：

【化69】



ここで、

Rは、C₁～C₈アルキル、C₁～C₈置換アルキル、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈置換アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₂～C₁₈置換アルキニル、C₆～C₂₀アリール、C₆～C₂₀置換アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、またはC₂～C₂₀置換ヘテロアリール、C₁～C₈アルキルアミノ、C₁～C₈置換アルキルアミノ、C₂～C₁₈アルケニルアミノ、C₂～C₁₈置換アルケニルアミノ、C₂～C₁₈アルキニルアミノ、C₂～C₁₈置換アルキニルアミノ、C₆～C₂₀アリールアミノ、C₆～C₂₀置換アリールアミノ、C₂～C₂₀ヘテロアリールアミノ、またはC₂～C₂₀置換ヘテロアリールアミノである；

Xは、カルボン酸またはエステル基、酸性プロトンを備えた部分（例えば、テトラゾールまたはトリアゾール）、置換アミド、アリール、置換アリール、ヘテロアリールまたはヘテロアリールである；そして

該式V I 化合物は、少なくとも1個のA⁰基を含む、

化合物。

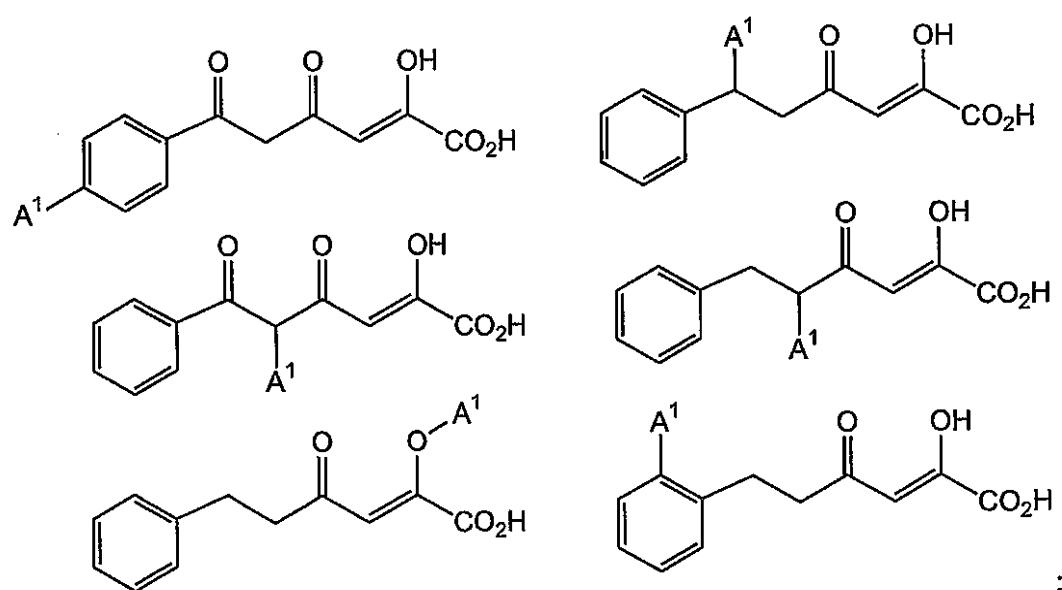
【請求項58】

Rが、チオフェニル、チオイミダゾリル、ベンゾチオフェニル、ナフトチオフェニル、ピロリジニル、ピラゾリル、インダニル、インドリル、セサミルおよびベンゾキサゾリルである、請求項57に記載の式V I のH I Vインテグラーーゼ阻害剤化合物。

【請求項59】

以下の構造から選択される請求項57に記載の式V I を有する、請求項2または3に記載のH I Vインテグラーーゼ阻害剤化合物：

【化70】

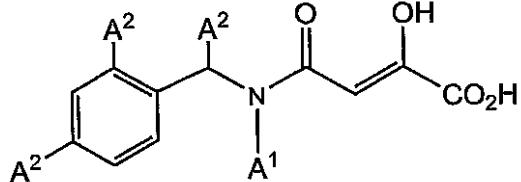
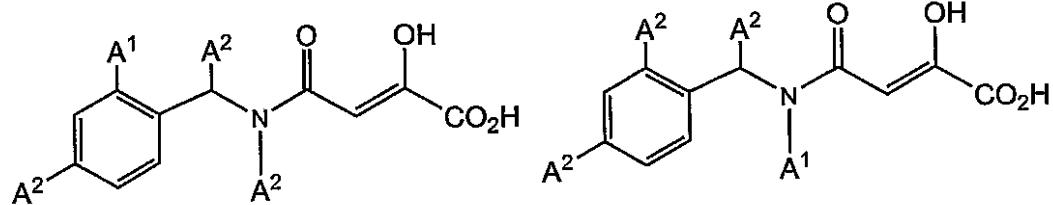
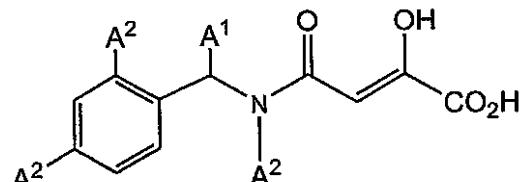
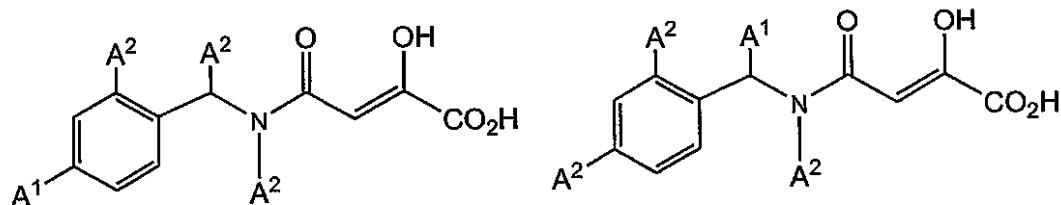


これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

【請求項 6 0】

以下の構造から選択される請求項 5 7 に記載の式 V I を有する、請求項 2 または 3 に記載の H I V インテグラーーゼ阻害剤化合物：

【化 7 1】

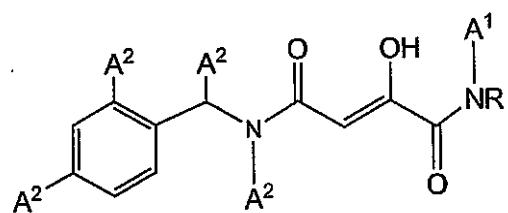
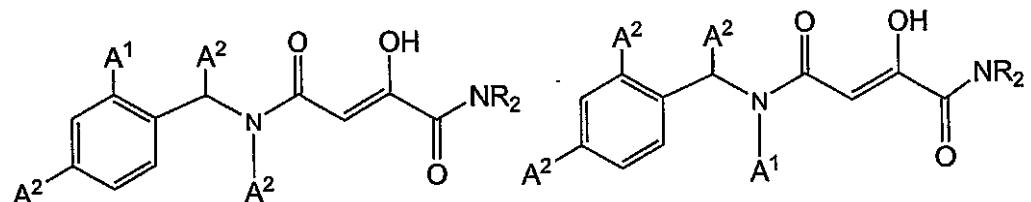
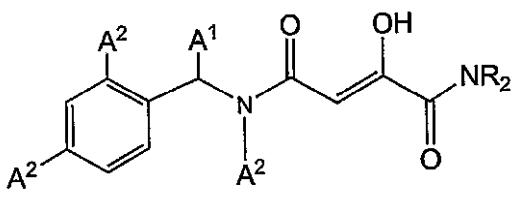
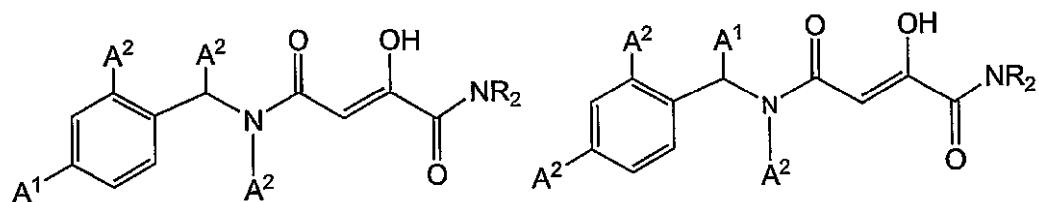


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A⁰ 基で置換されている、化合物。

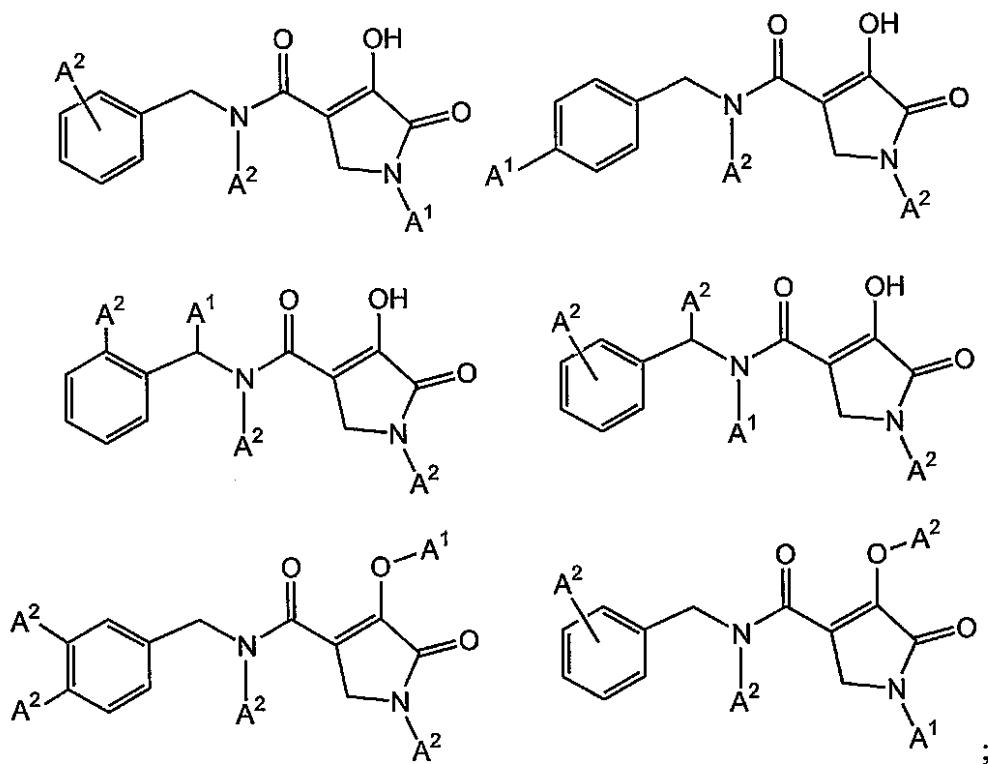
【請求項 6 1】

以下の構造から選択される請求項 5 7 に記載の式 V I を有する、請求項 2 または 3 に記載の H I V インテグラーーゼ阻害剤化合物：

【化 7 2】



【化73】

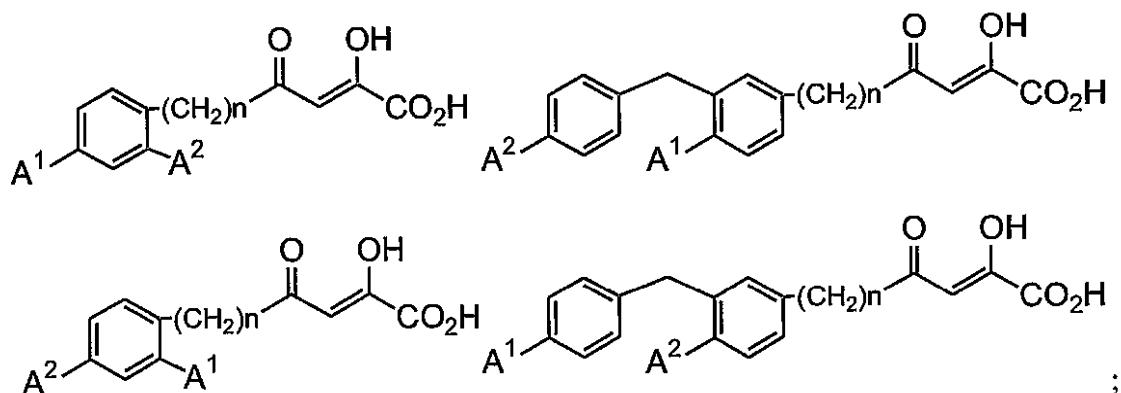


これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

【請求項62】

以下の構造から選択される請求項57に記載の式V Iを有する、請求項2または3に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化74】



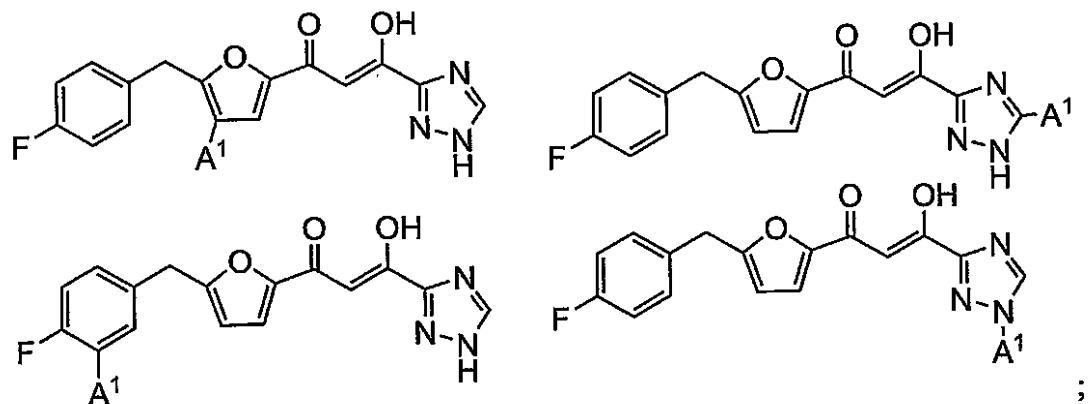
ここで、nは、1、2、3、4、5または6であり得る；

これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

【請求項63】

以下の構造から選択される請求項57に記載の式V Iを有する、請求項2または3に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化75】

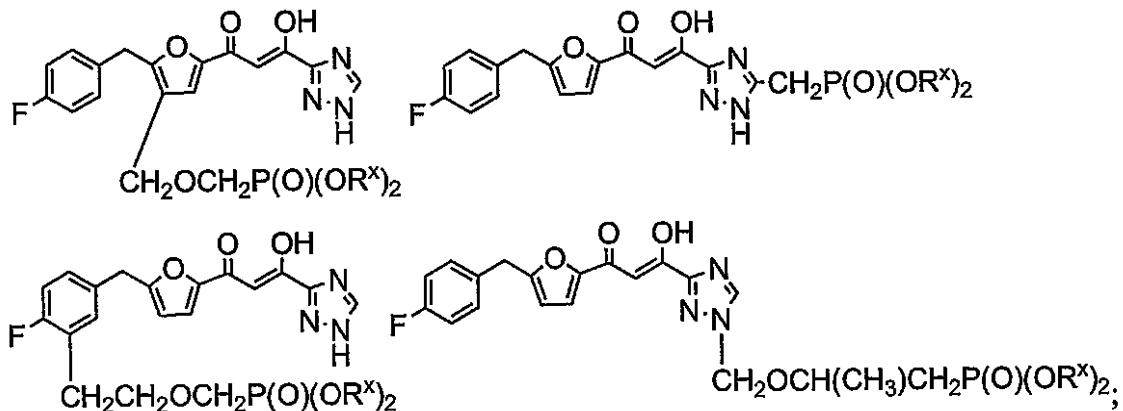


これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

【請求項64】

以下の構造から選択される請求項57に記載の式V Iを有する、請求項2または3に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化76】

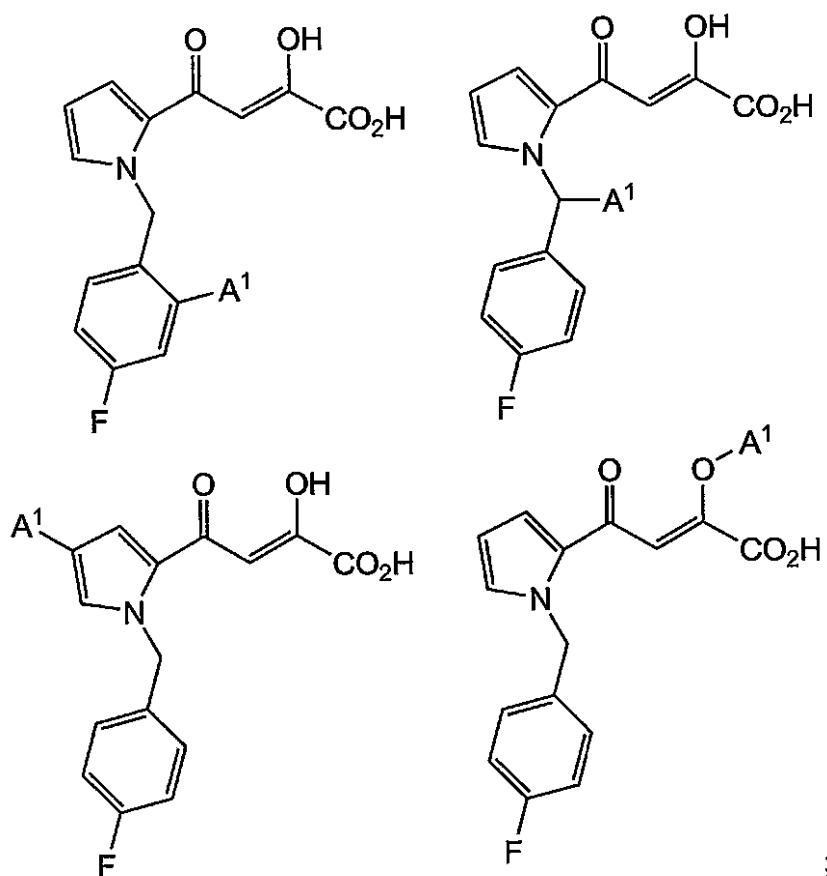


これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

【請求項65】

以下の構造から選択される請求項57に記載の式V Iを有する、請求項2または3に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化77】

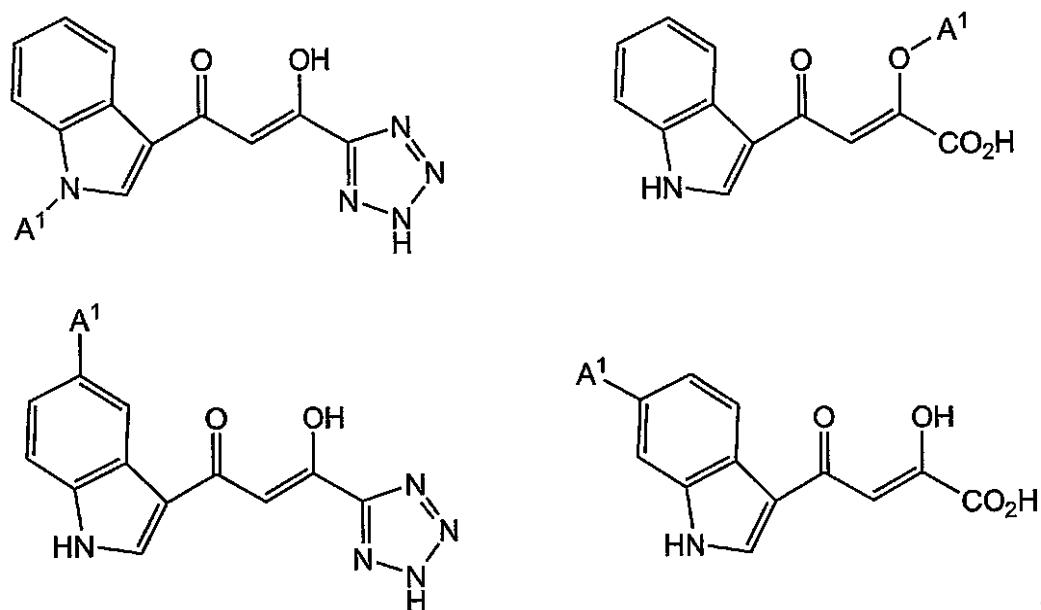


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項66】

以下の構造から選択される請求項57に記載の式VIIを有する、HIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

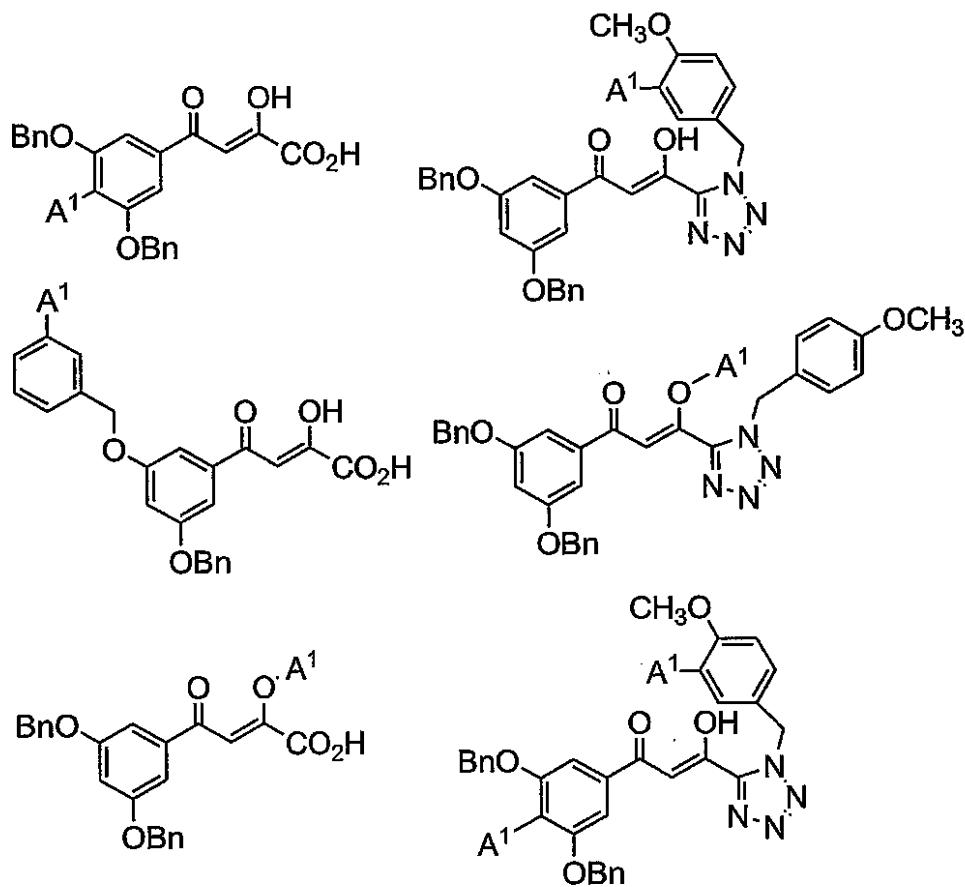
【化78】



【請求項67】

以下の構造から選択される請求項 5 7 に記載の式 V I を有する、請求項 2 または 3 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 7 9】



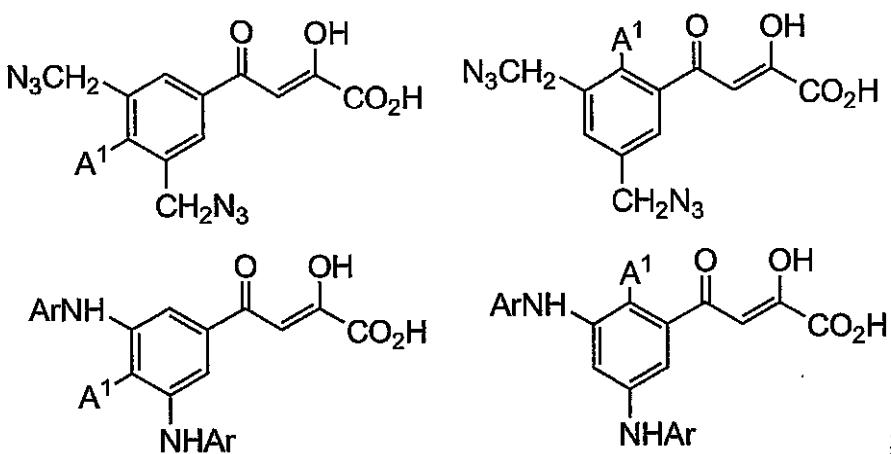
;

これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項 6 8】

以下の構造から選択される請求項 5 7 に記載の式 V I を有する、請求項 2 または 3 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 8 0】



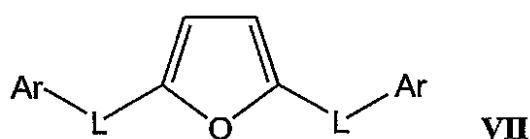
;

これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項 6 9】

式 V I I から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 8 1】



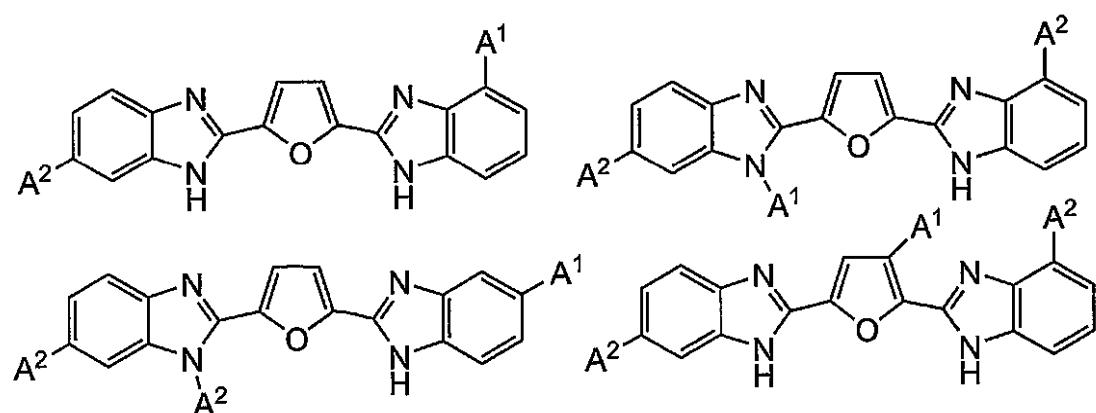
ここで、Arは、C₃～C₁₂炭素環、C₃～C₁₂置換炭素環、C₆～C₂₀アリール、C₆～C₂₀置換アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリールまたはC₂～C₂₀置換ヘテロアリールである；そして

該式 V I I 化合物は、少なくとも 1 個の A⁰ 基を含む、化合物。

【請求項 7 0】

以下の構造から選択される、請求項 6 9 に記載の式 V I I の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

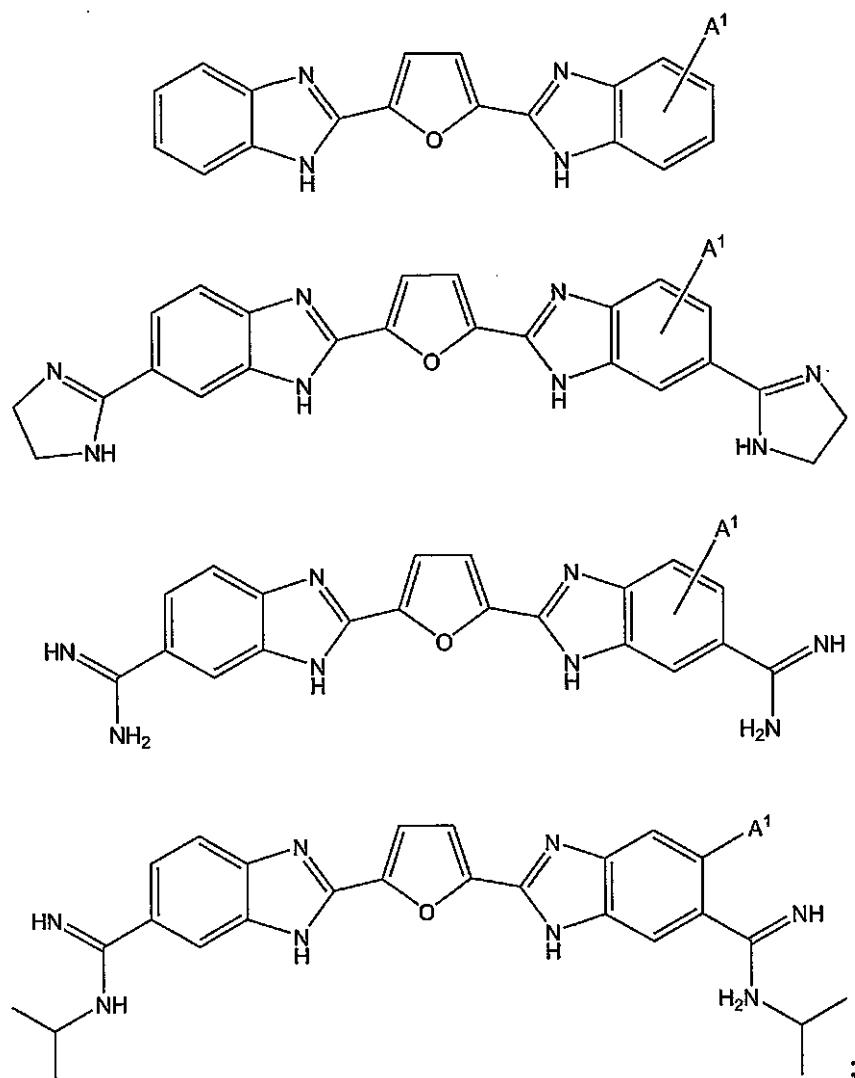
【化 8 2】



【請求項 7 1】

以下の構造から選択される請求項 6 9 に記載の式 V I I を有する、請求項 2 または 3 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 8 3】

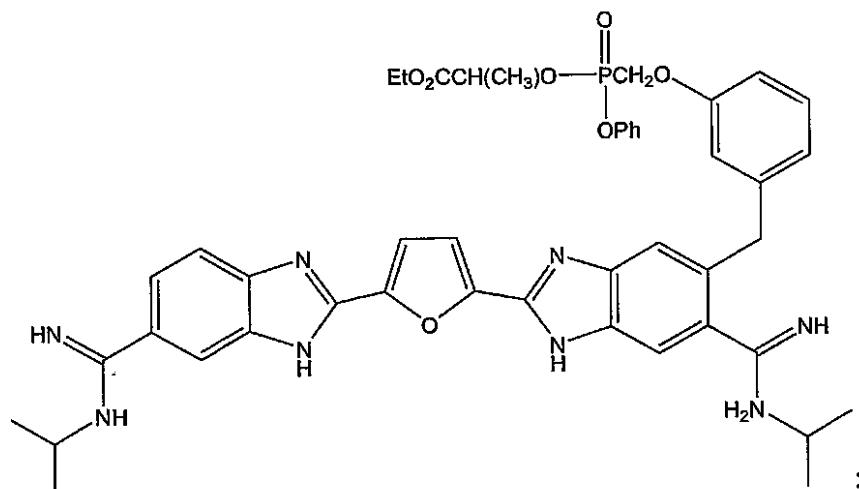


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項 7 2】

以下の構造を有する請求項 6 9 に記載の式 V I I を有する、請求項 2 または 3 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 8 4】

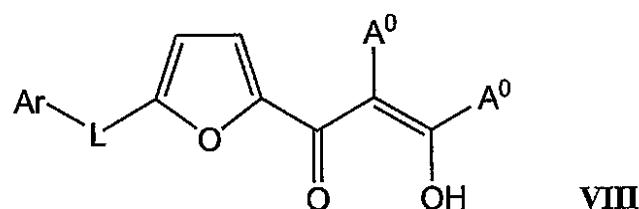


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項 7 3】

式VIIIから選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 8 5】

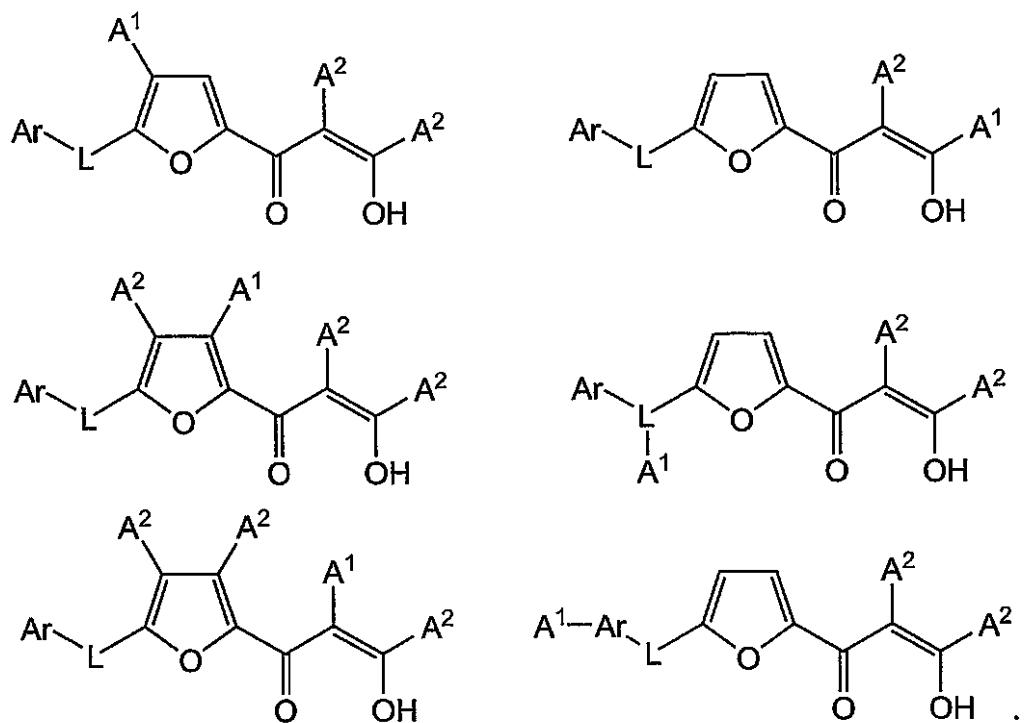


ここで、Arは、 $C_3 \sim C_{12}$ 炭素環、 $C_3 \sim C_{12}$ 置換炭素環、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリールまたは $C_2 \sim C_{20}$ 置換ヘテロアリールである；そして該式VIII化合物は、少なくとも1個の A^0 基を含む、化合物。

【請求項 7 4】

以下の構造を有する、請求項73に記載の式VIIIのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 8 6】

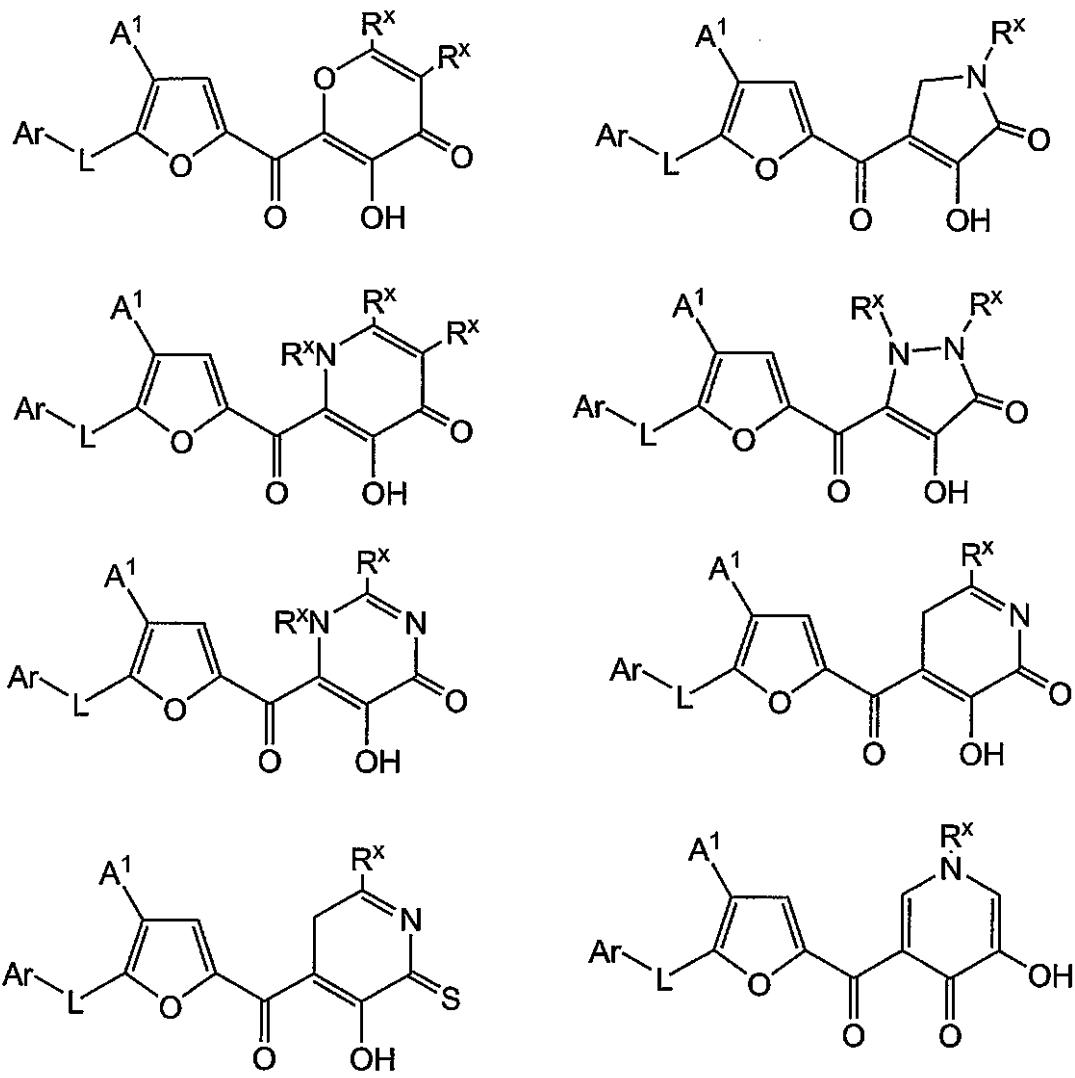


これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

【請求項 7 5】

以下の構造を有する請求項7 3に記載の式V I I Iを有する、請求項2または3に記載のH I Vインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 8 7】

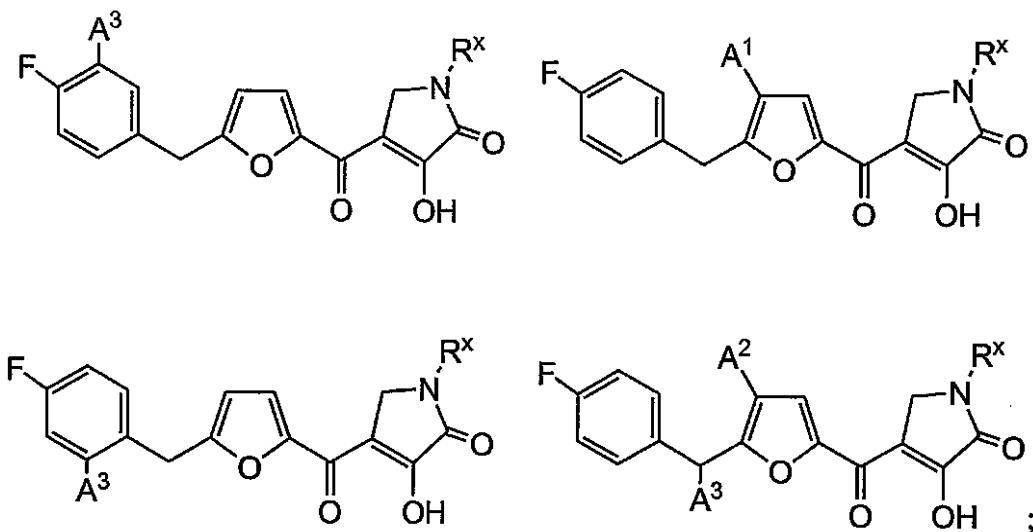


これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

【請求項 7 6】

以下の構造を有する請求項 7 3 に記載の式 V I I I を有する、請求項 2 または 3 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化88】

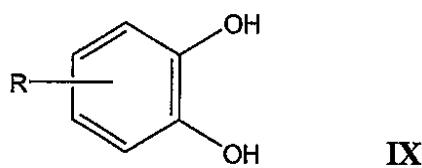


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項77】

式IXから選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化89】



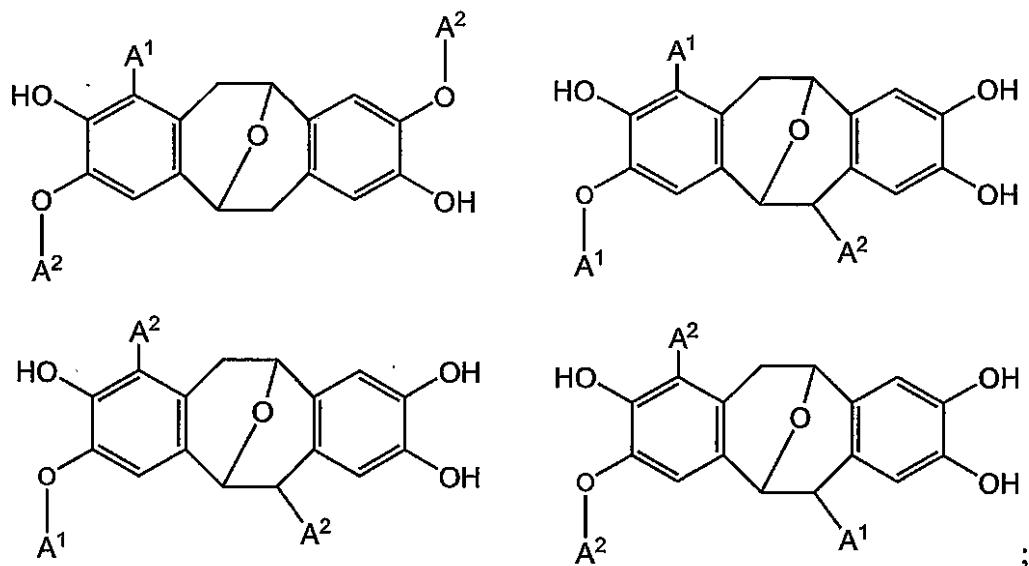
ここで、Rは、単結合または縮合環系を介してカテコール部分に共有結合されたHIVインテグラーゼ阻害剤足場であり、そして該式IX化合物は、少なくとも1個の A^0 基を含む、

化合物。

【請求項78】

以下の構造を有する請求項77に記載の式IXを有する、請求項2または3に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化90】

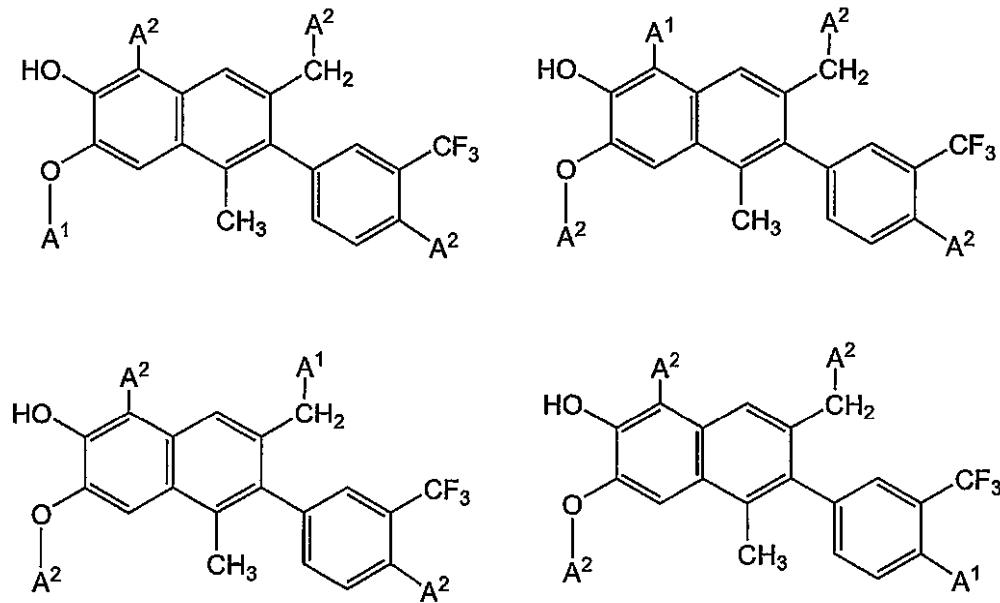


これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

【請求項79】

以下の構造から選択される、請求項77に記載の式IXのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

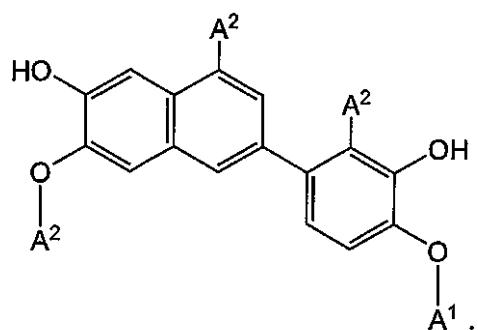
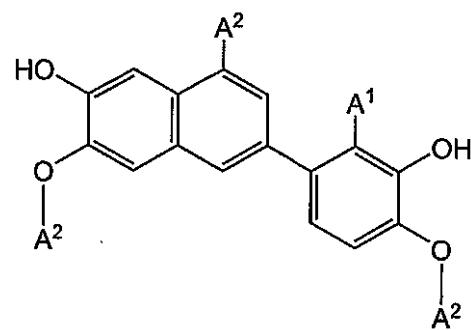
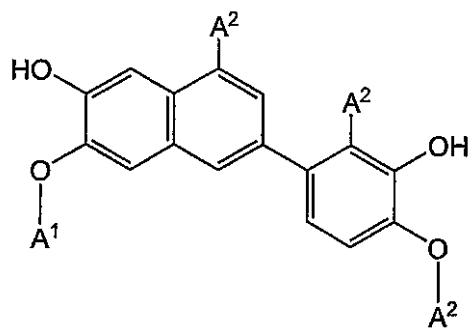
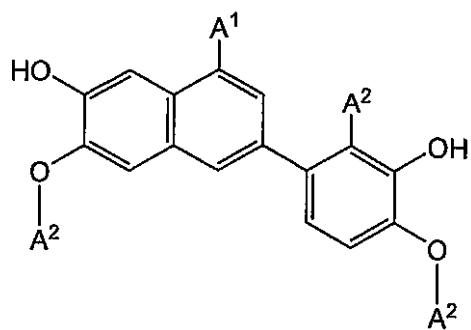
【化91】



【請求項80】

以下の構造から選択される、請求項77に記載の式IXのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

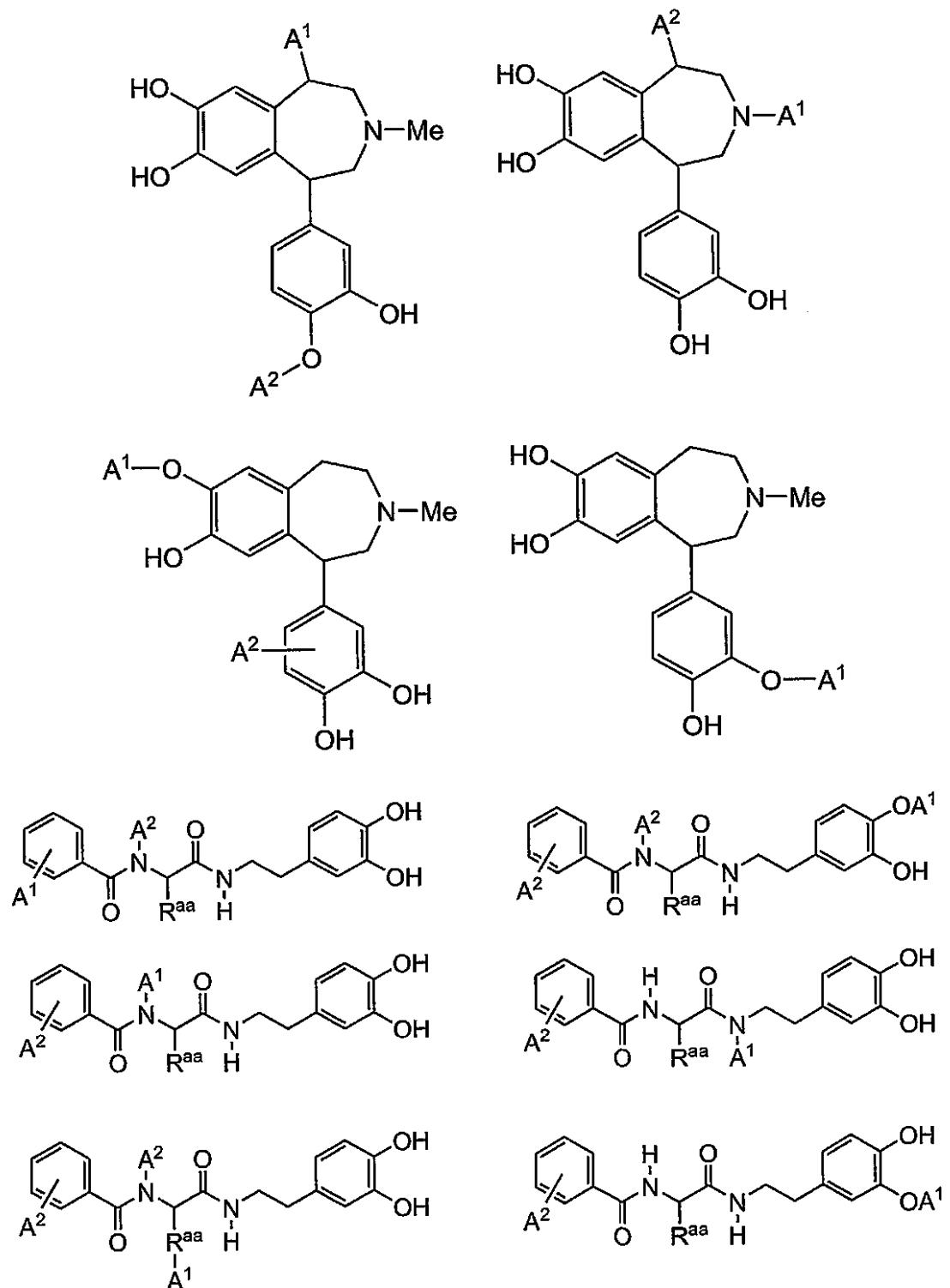
【化92】



【請求項 81】

以下の構造から選択される、請求項 77 に記載の式 IX の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化93】

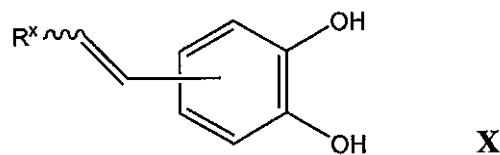


ここで、 R^{aa} は、アミノ酸側鎖であり、プロリンを含む、化合物。

【請求項82】

式Xから選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化94】



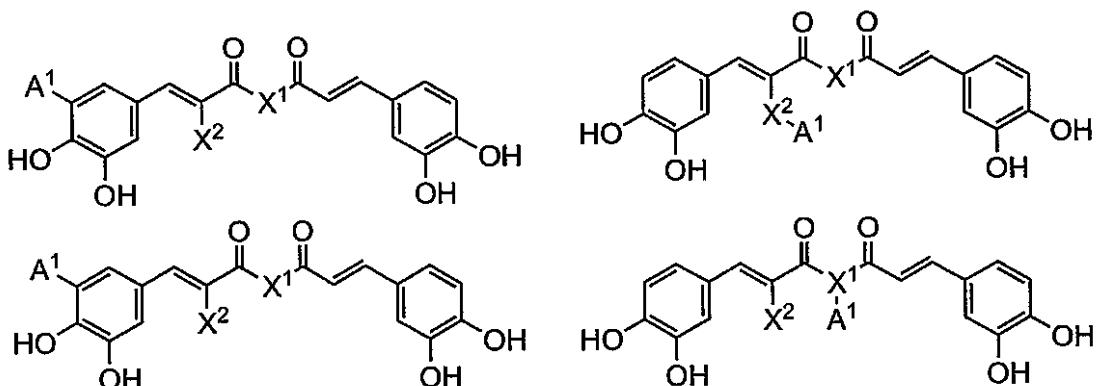
ここで、 R^x は、単結合または縮合環系を介してスチリルカテコール部分に共有結合された H I V インテグラーゼ阻害剤足場であり、そして該式 X 化合物は、少なくとも 1 個のホスホネート基を含む、

化合物。

【請求項 8 3】

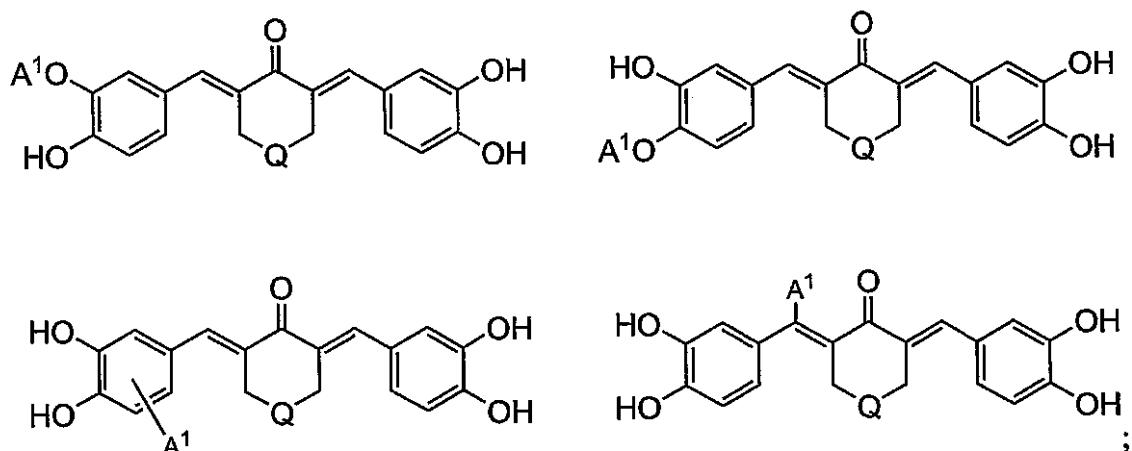
以下の構造から選択される、請求項 8 2 に記載の式 X の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化95】



ここで、 X^1 は、 $-NH(CH_2)_nNH-$ 、アルキルアリーレンまたはアリーレンであり、ここで、 n は、1、2、3、4、5 または 6 である；そして X^2 は、CN、Br または OH であり、そして任意の炭素またはヒドロキシル酸素原子は、別個に、 A^2 で置換され得る；および

【化96】



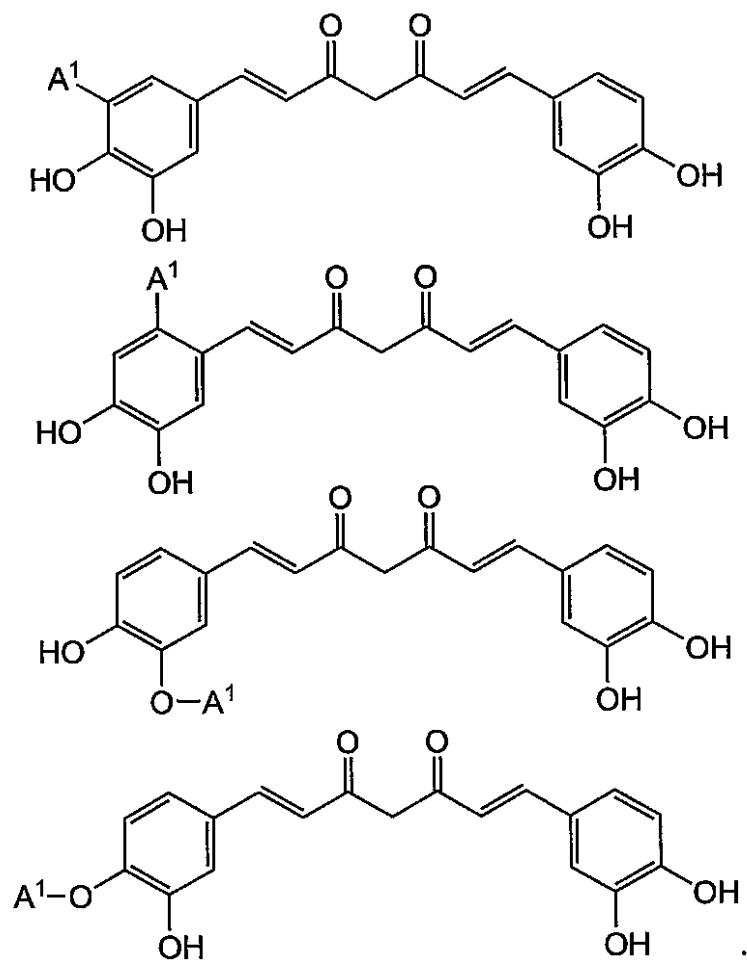
ここで、Q は、 CH_2 、O、S、NH または NR である、化合物。

【請求項 8 4】

以下の構造から選択される、請求項 8 2 に記載の式 X の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物

物 :

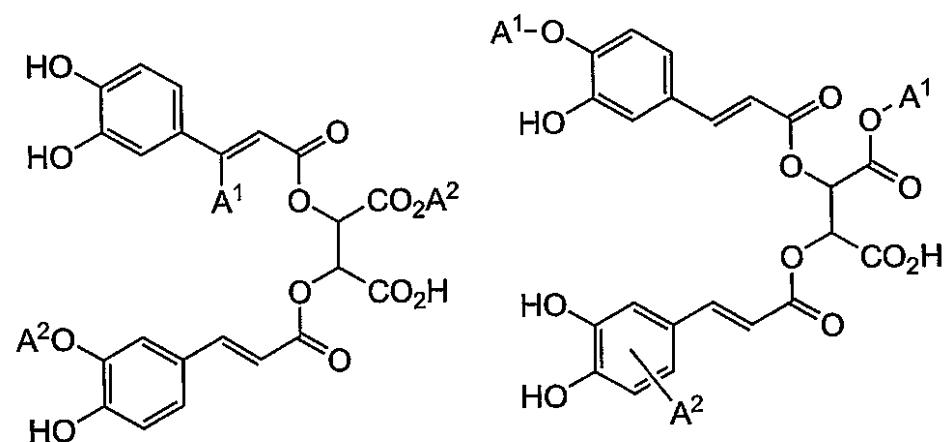
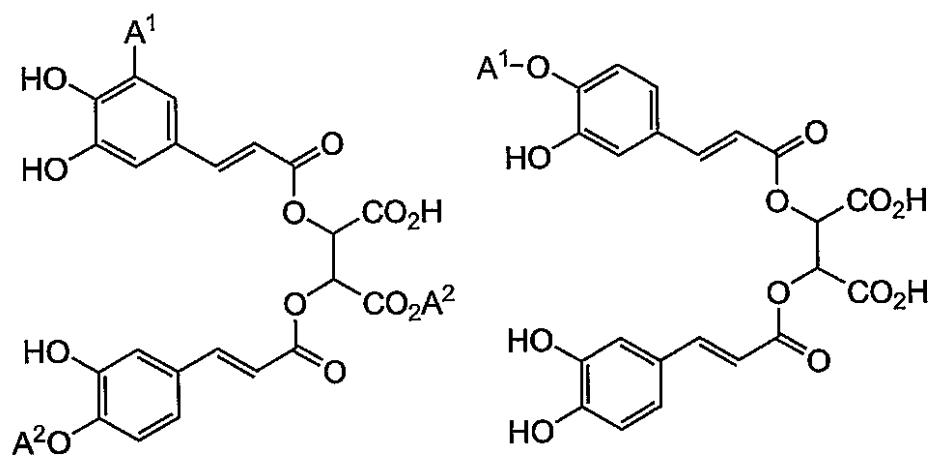
【化 9 7】



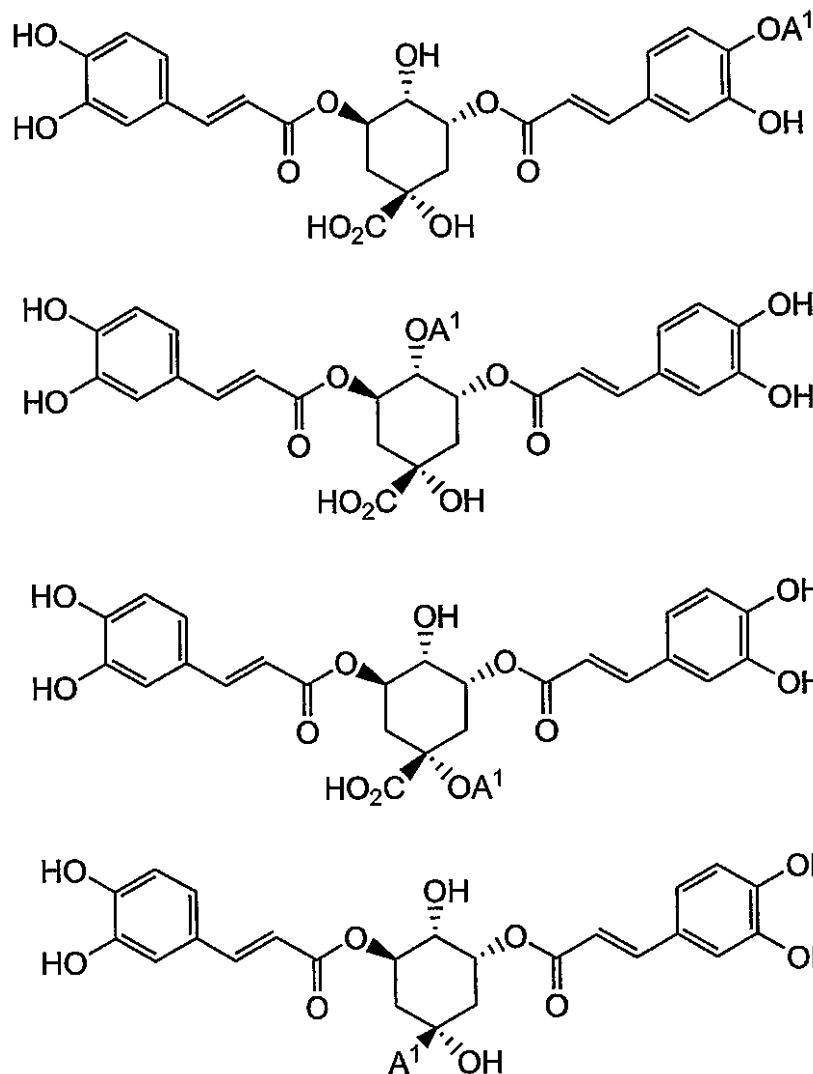
【請求項 8 5】

以下の構造から選択される、請求項 8 2 に記載の式 X の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物 :

【化 9 8】



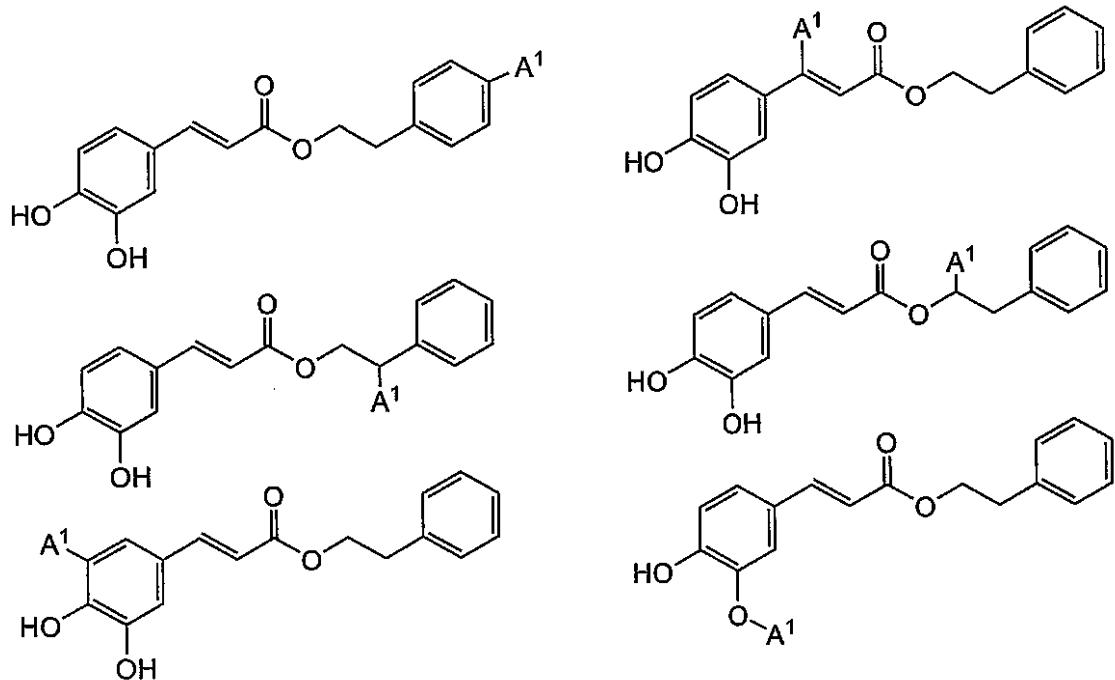
【化 9 9】



【請求項 8 6】

以下の構造から選択される、請求項 8 2 に記載の式 X の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

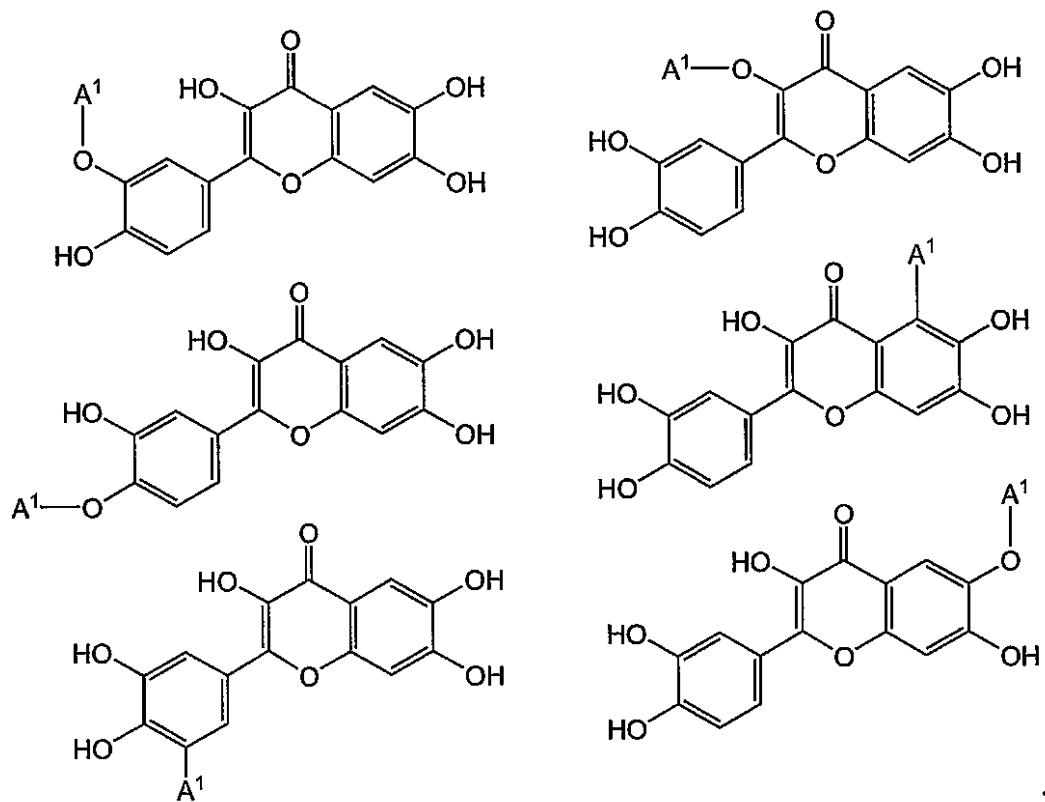
【化 1 0 0】



【請求項 8 7】

以下の構造から選択される、請求項 8 2 に記載の式 X の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

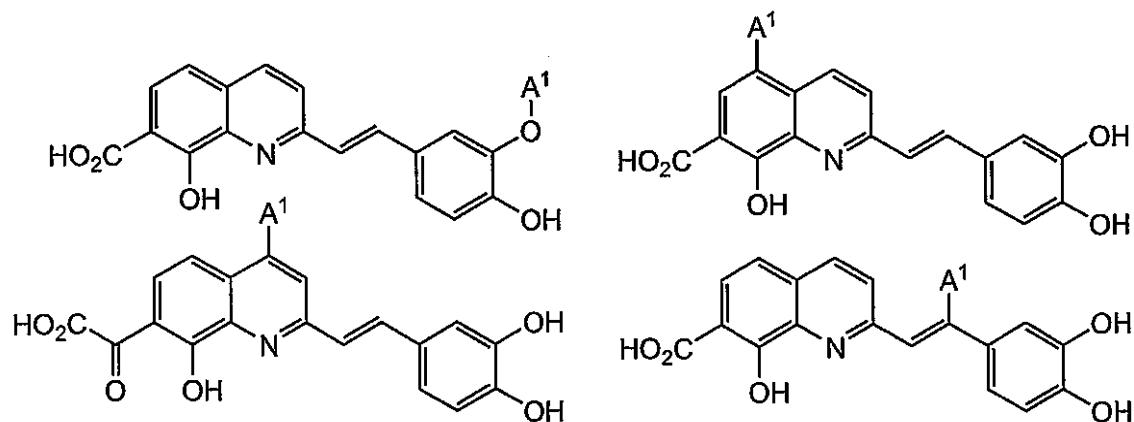
【化 1 0 1】



【請求項 8 8】

以下の構造から選択される、請求項 8 2 に記載の式 X の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

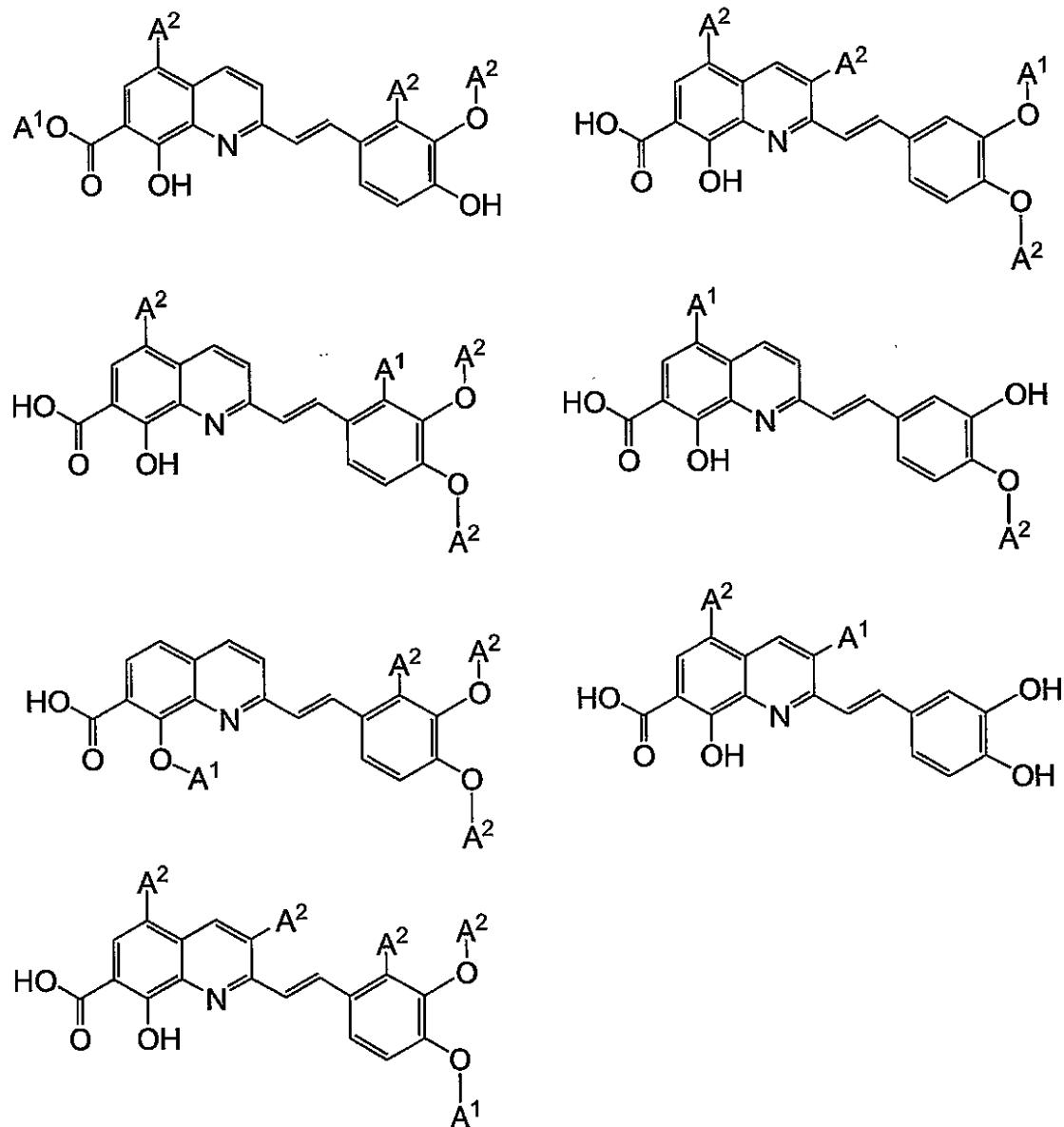
【化102】



【請求項 8 9】

以下の構造から選択される、請求項 8 2 に記載の式 X の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

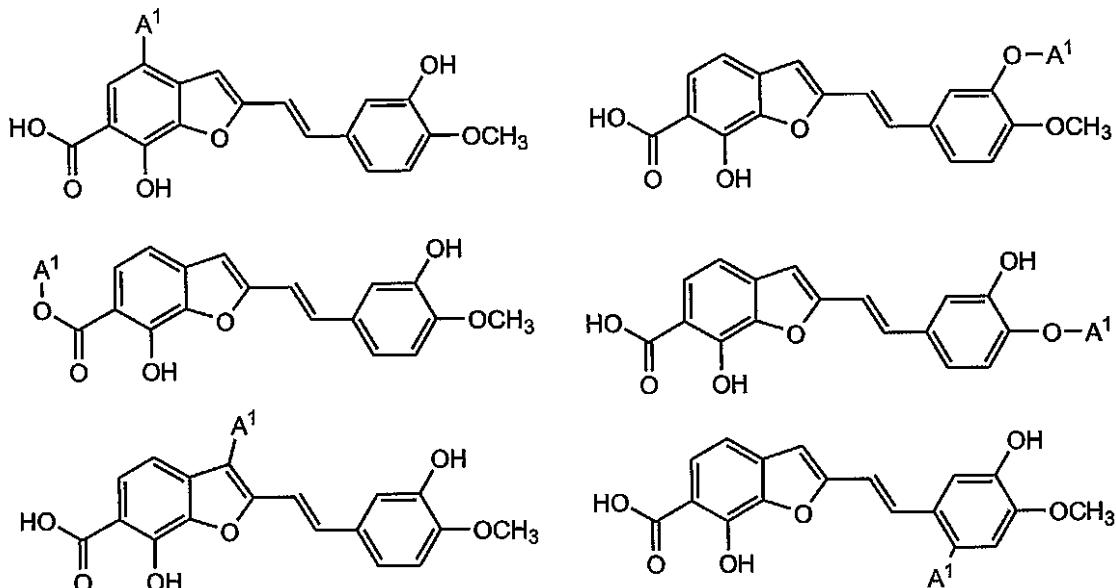
【化103】



【請求項 9 0】

以下の構造から選択される、請求項 8 2 に記載の式 X の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

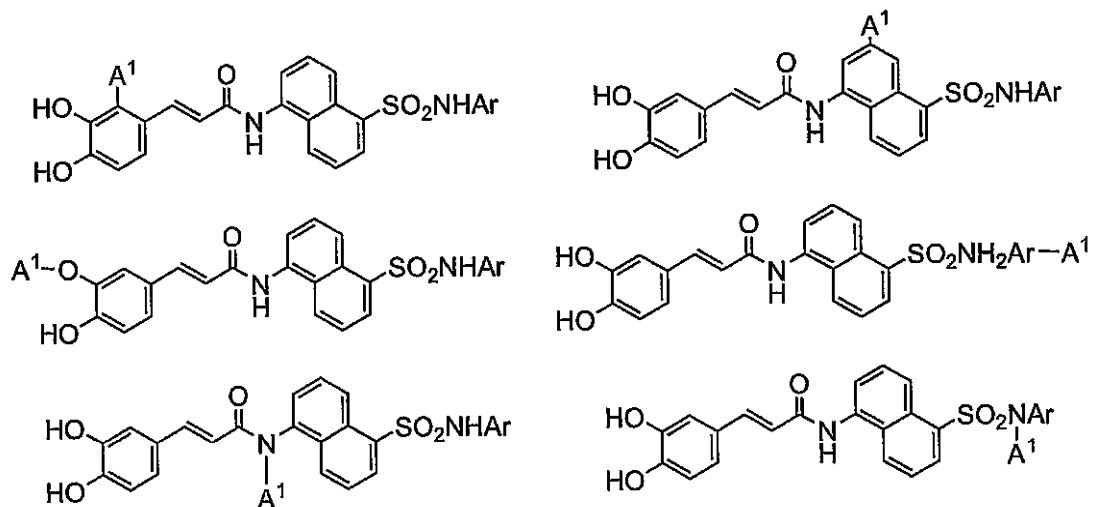
【化 1 0 4】



【請求項 9 1】

以下の構造から選択される、請求項 8 2 に記載の式 X の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

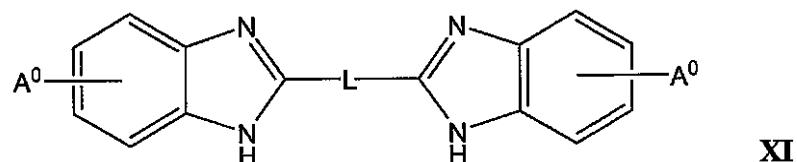
【化 1 0 5】



【請求項 9 2】

式 X I から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 1 0 6】



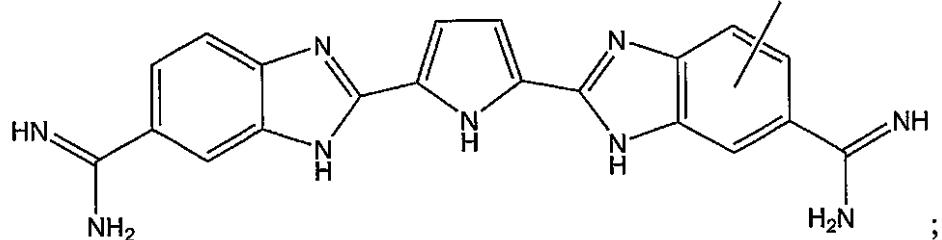
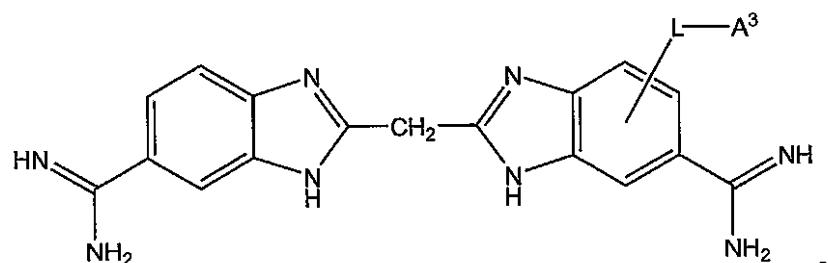
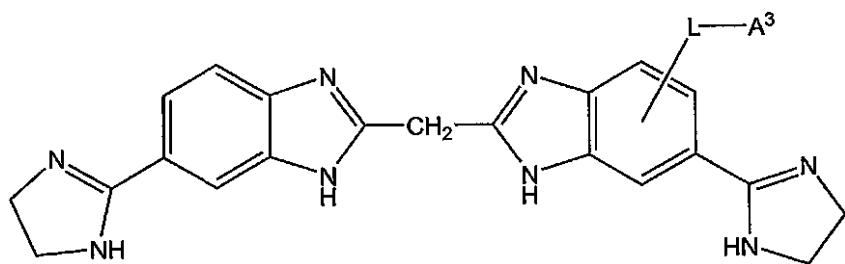
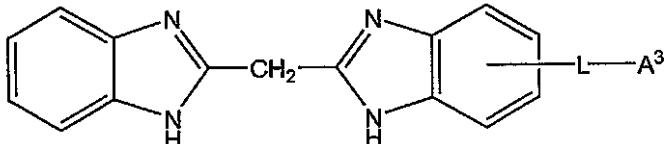
ここで、式 X I 化合物は、さらに、縮合環系で置換され得、L は、リンカーであり、そして該式 X I 化合物は、少なくとも 1 個の A⁰ 基を含む、

化合物。

【請求項 9 3】

以下の構造を有する請求項 9 2 に記載の式 X I を有する、請求項 2 または 3 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 1 0 7 】

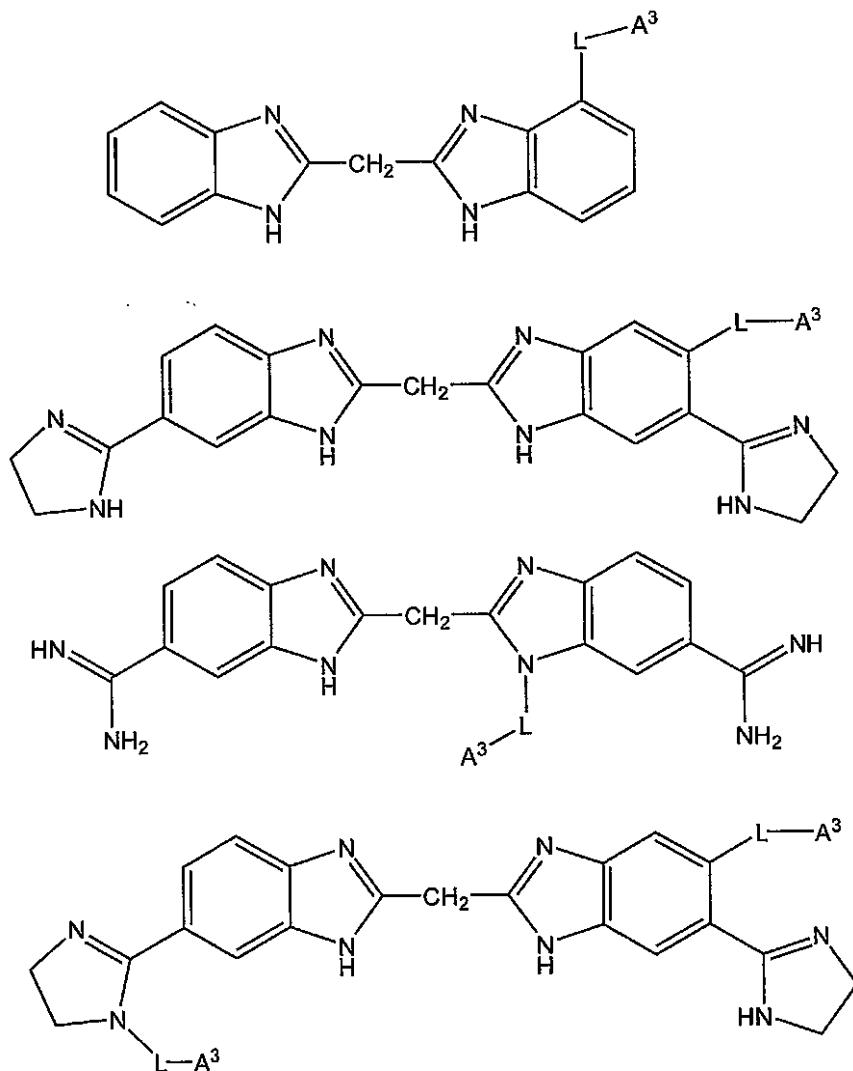


これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

【請求項 9 4】

以下の構造から選択される、請求項 9 3 に記載の式 X I の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

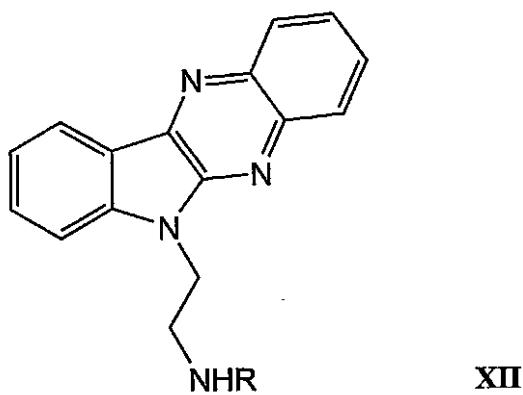
【化108】



【請求項 95】

式XIIから選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化109】

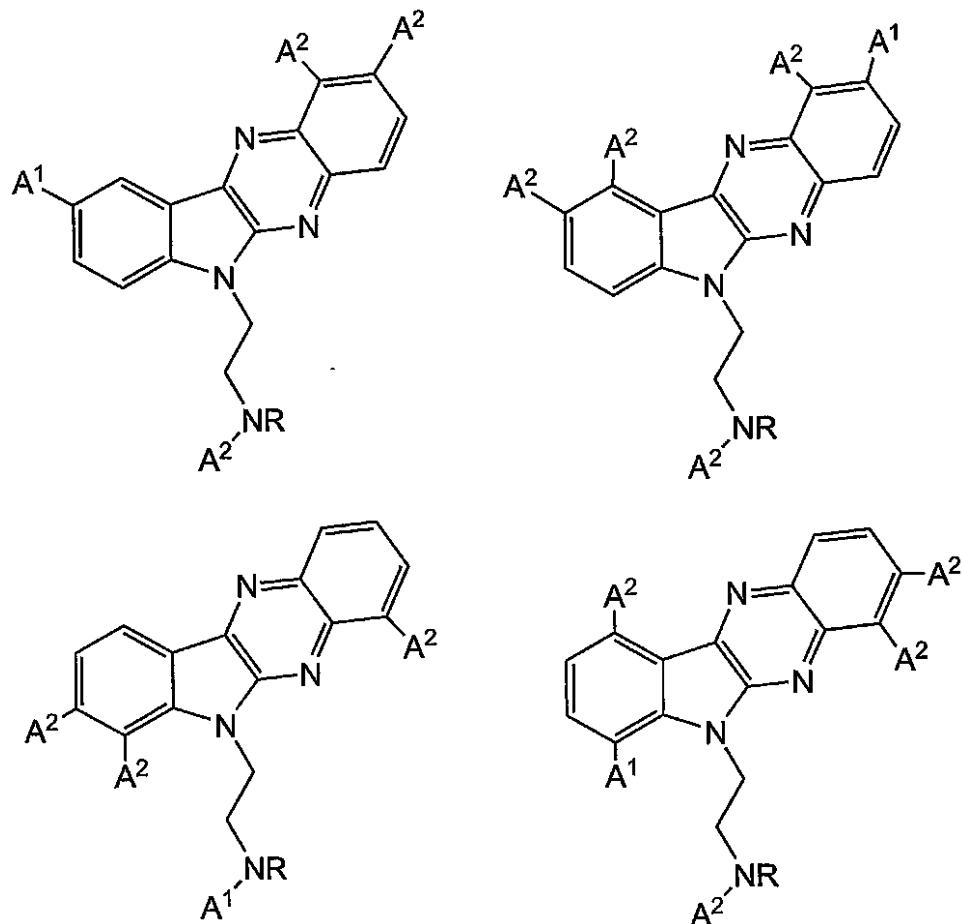


ここで、式XII化合物は、少なくとも1個のホスホネート基を含む、化合物。

【請求項 96】

以下の構造から選択される、請求項95に記載の式XIIのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

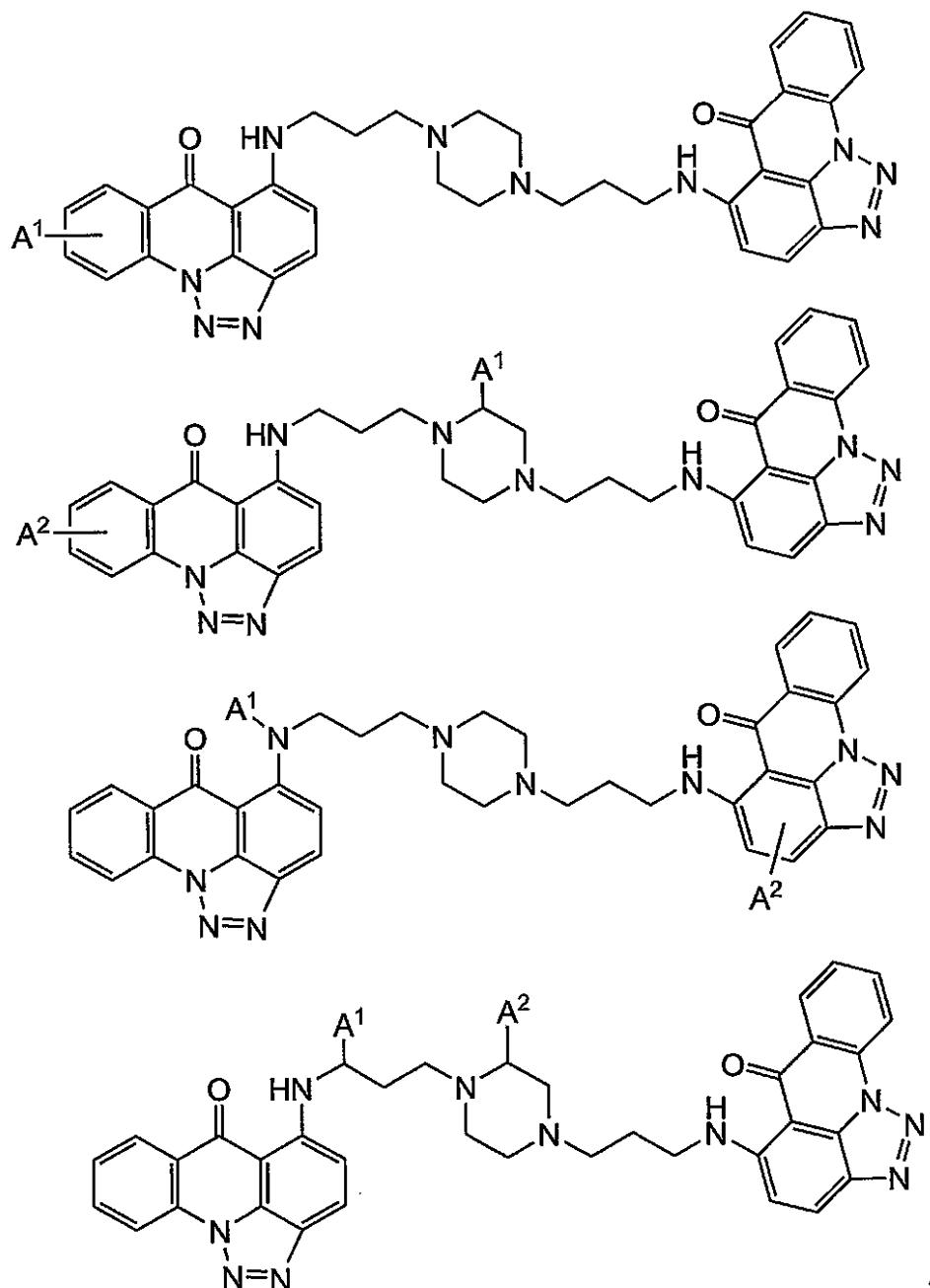
【化 1 1 0】



【請求項 9 7】

式 X I I I の構造から選択される、請求項 2 に記載の H1V インテグラーゼ阻害剤化合物：

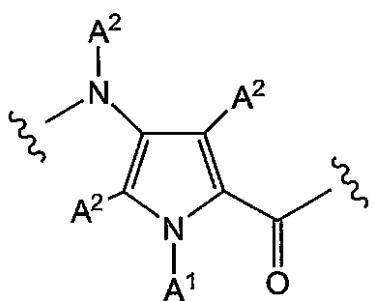
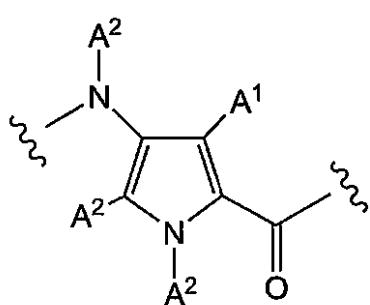
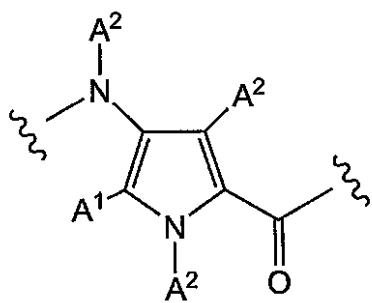
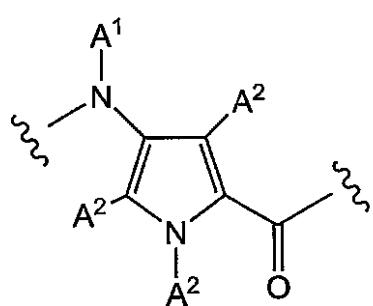
【化 1 1 1】



【請求項 9 8】

式 X-I-V の構造から選択される、請求項 2 に記載の H-I-V インテグラーゼ阻害剤化合物

【化112】



ここで、波線

【化112-a】



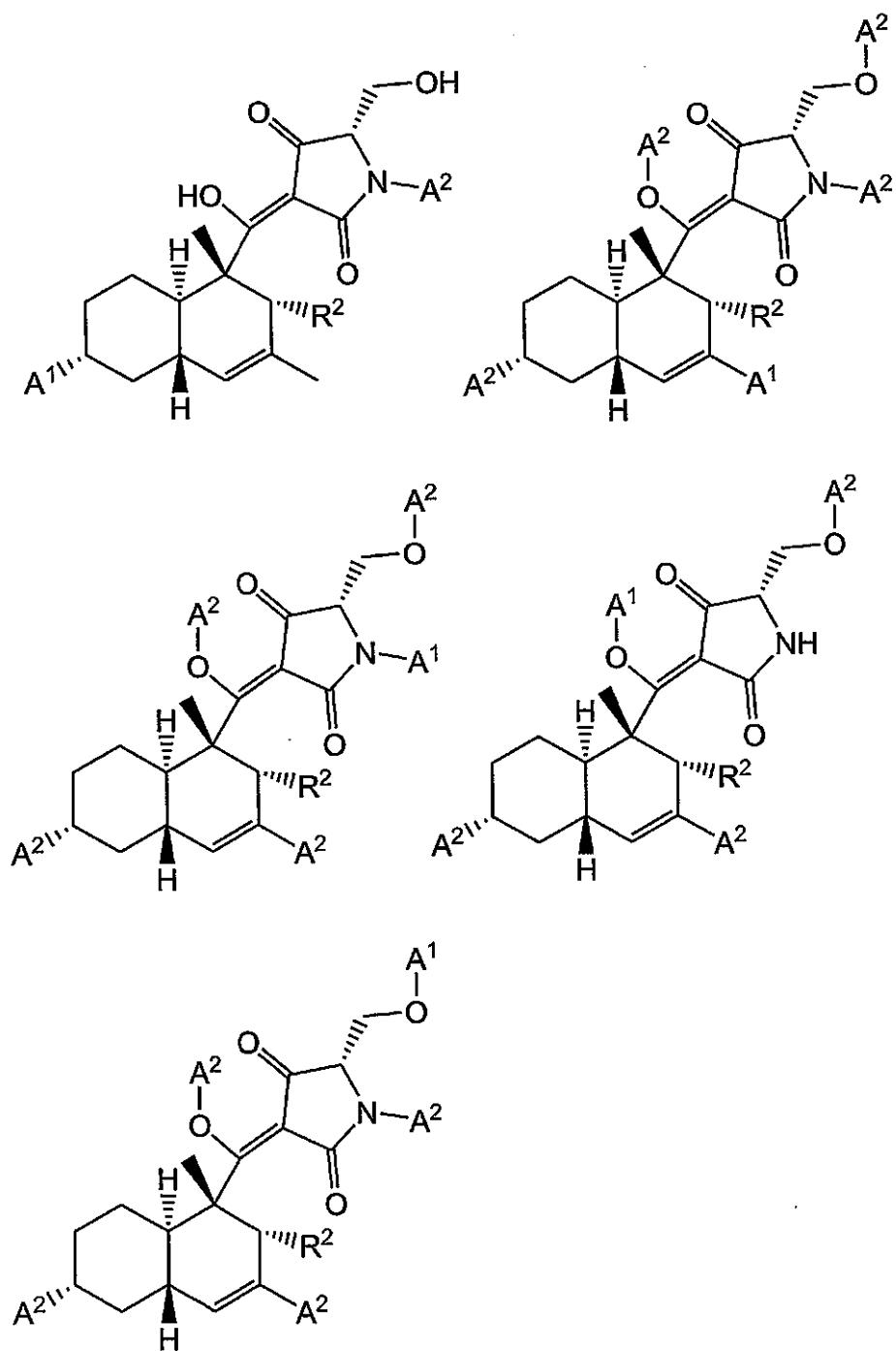
は、描写した構造が繰り返し重合体分子の下部構造であることを示す；そして、ここで、式XIVの化合物は、少なくとも1個のホスホネート基を含む；そして、ここで、該ポリピロールアミド分子内の1個またはそれ以上のピロールアミドモノマー単位は、1つまたはそれ以上の位置において、ホスホネート基で置換されている、

化合物。

【請求項99】

式XVの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

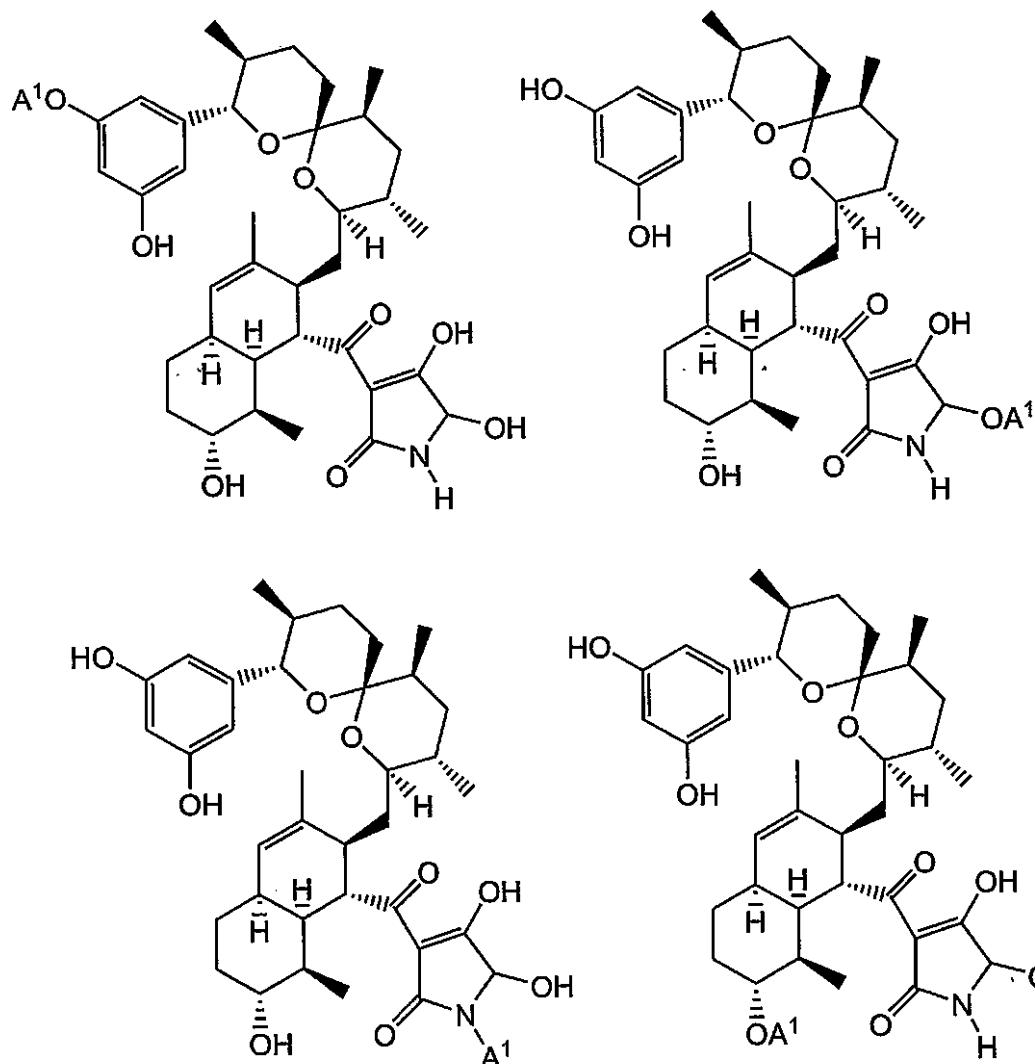
【化 1 1 3】



【請求項 1 0 0】

式 XV の構造から選択される、請求項 9 9 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

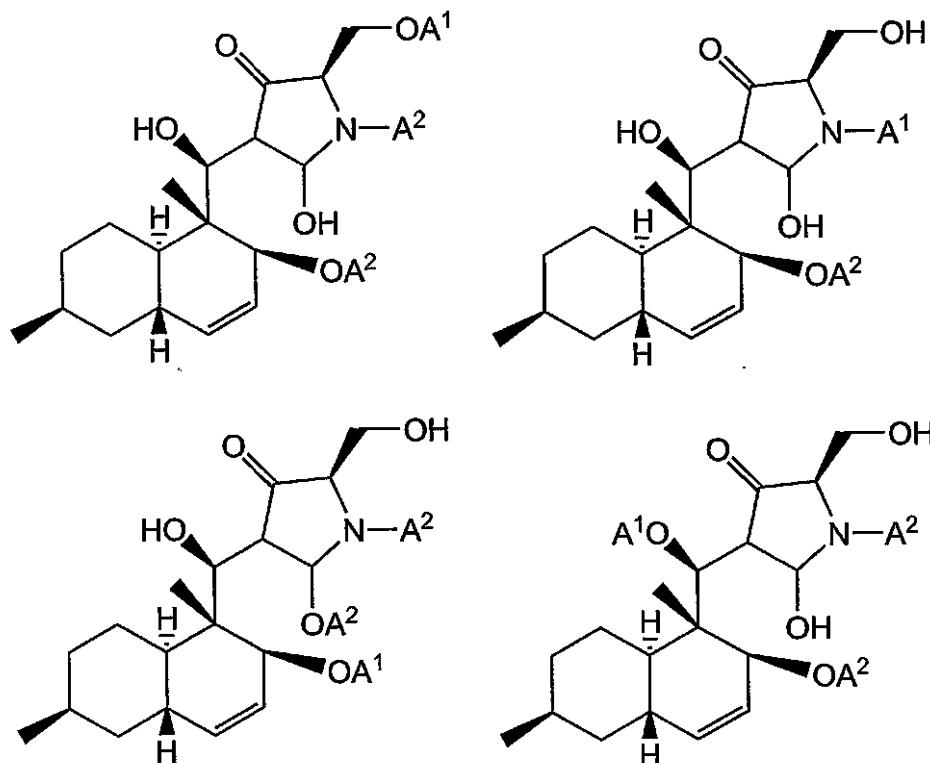
【化 1 1 4】



【請求項 101】

式XVの構造から選択される、請求項99に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

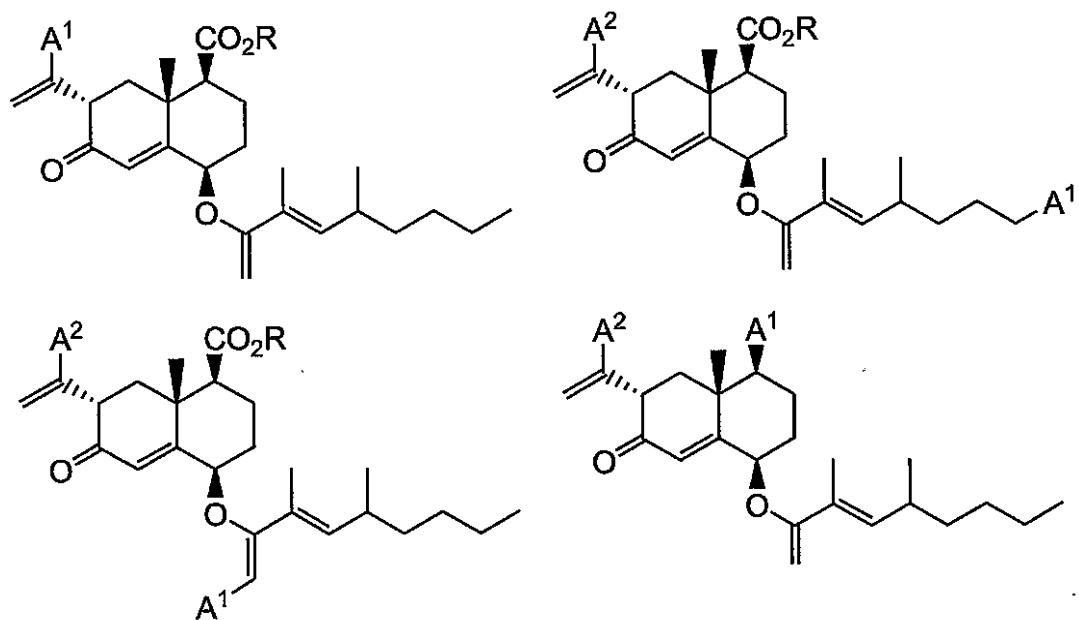
【化 1 1 5】



【請求項 1 0 2】

式 X V I の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

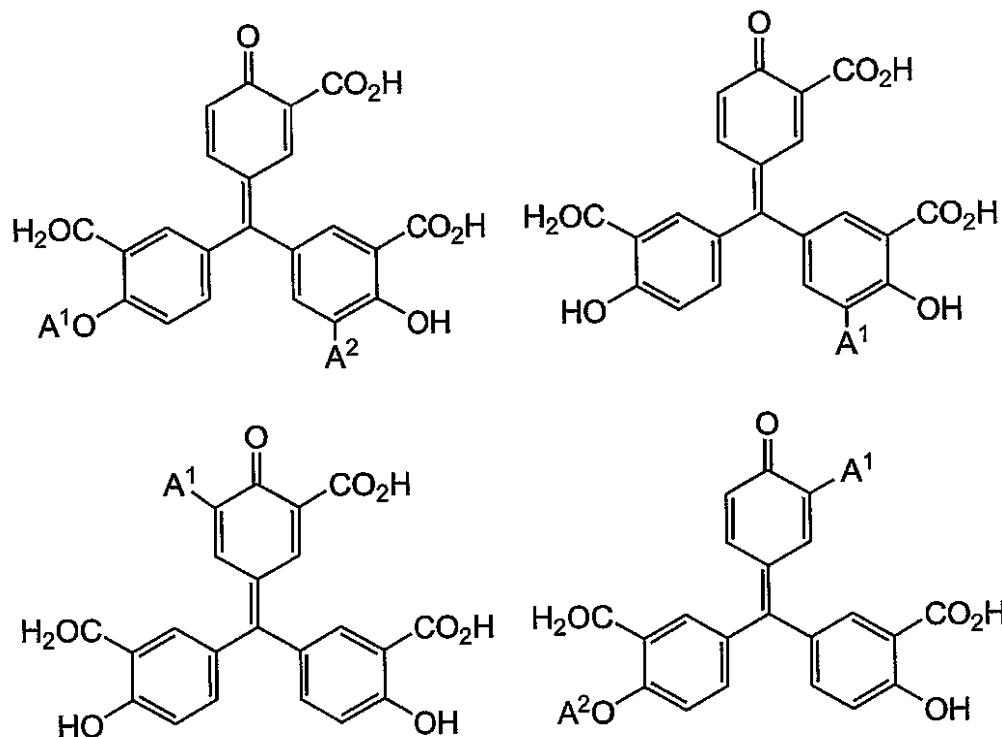
【化 1 1 6】



【請求項 1 0 3】

式 X V I I の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

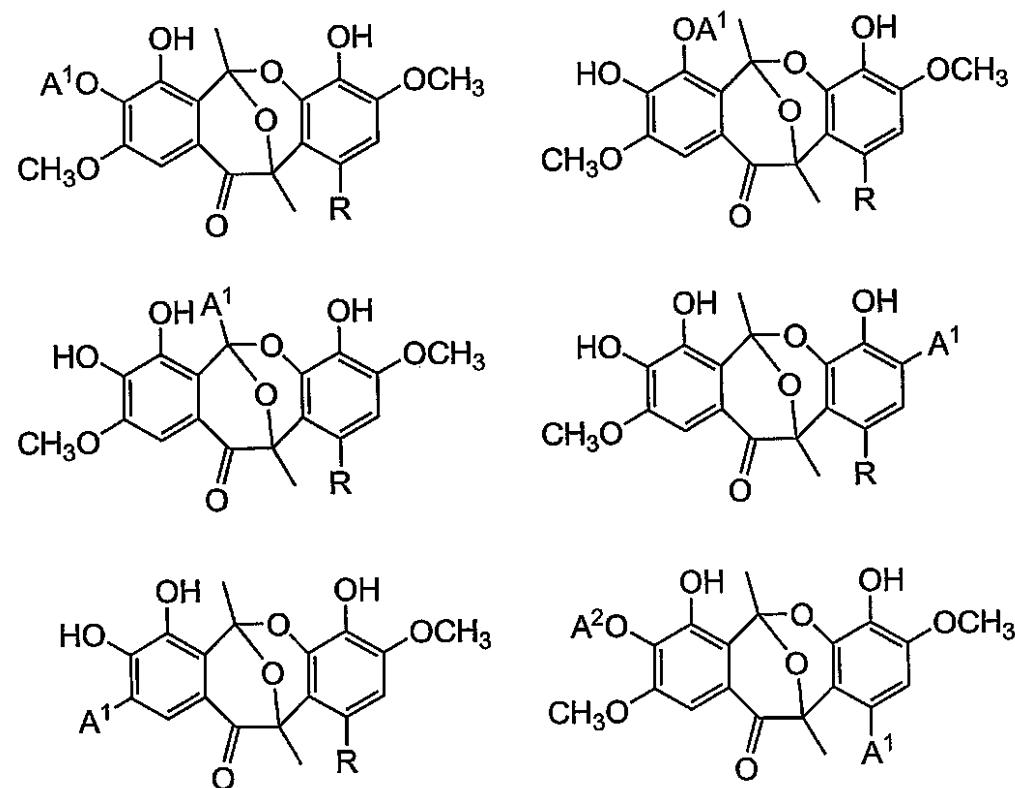
【化117】



【請求項104】

式XVIIIの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

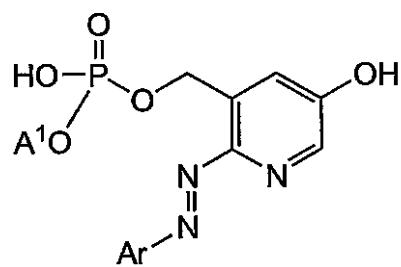
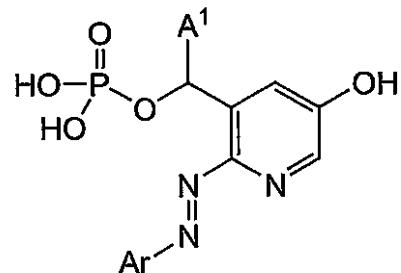
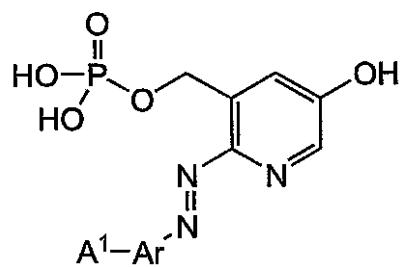
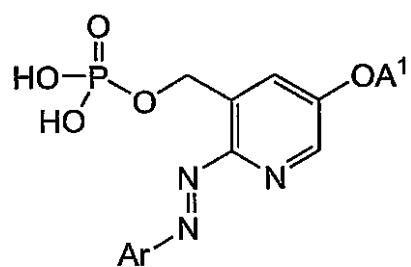
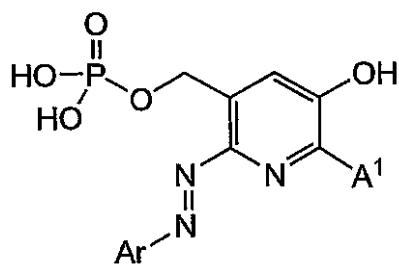
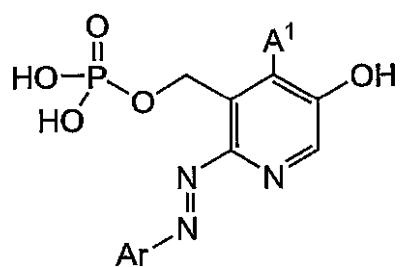
【化118】



【請求項105】

式XIの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

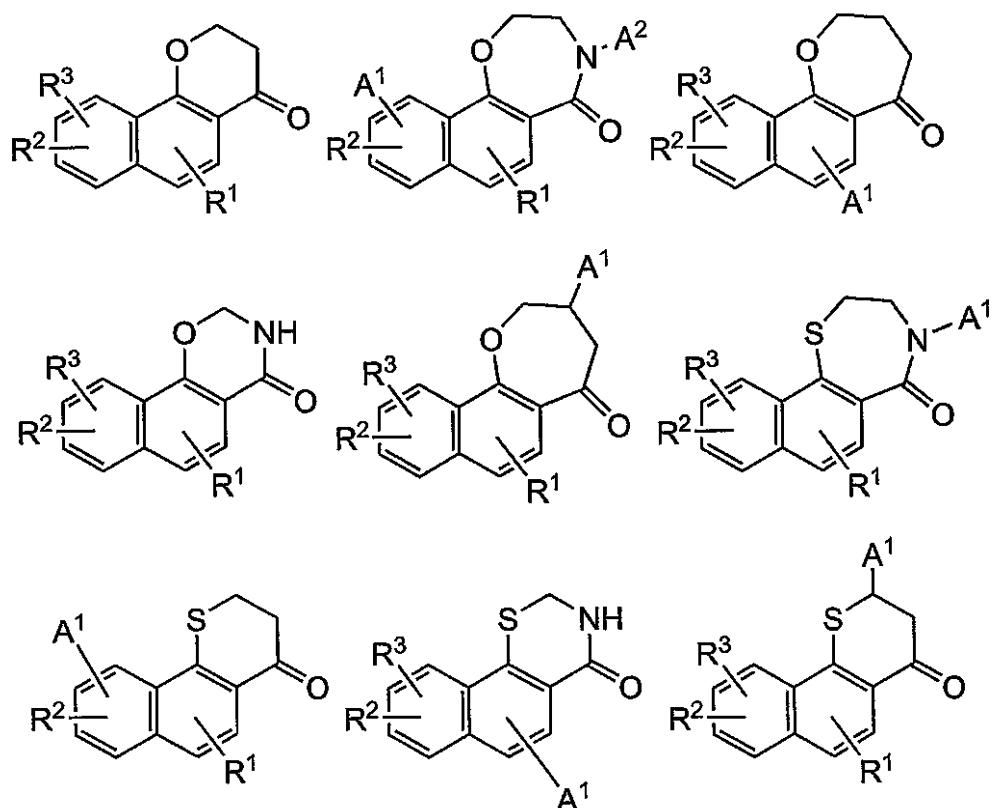
【化 1 1 9】



【請求項 1 0 6】

式 X X の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 1 2 0 】



ここで、R¹は、H、置換または非置換C₁～₆アルキル、ハロ、NO₂、NH₂、CO₂H、置換または非置換アリール、必要に応じてベンゼンで縮合した5員または6員芳香族または不飽和ヘテロシクリル、置換または非置換アリール-カルボニルアミノであり、該ヘテロシクリルは、1個～3個のヘテロ原子を含有し、該ヘテロ原子は、N、SおよびOから選択される；そして

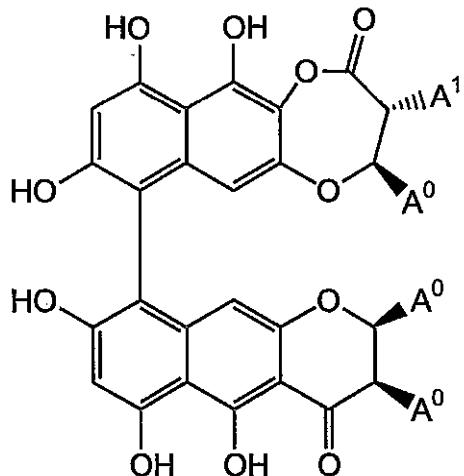
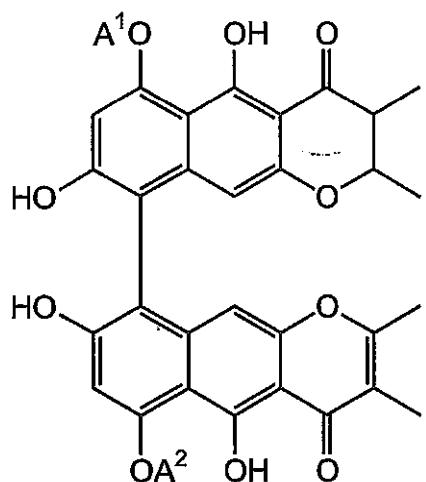
R^2 および R^3 は、別個に、H、C_{1~6}アルキルまたはアルコキシ、ハロ、NH₂、C_{1~6}アルキルアミノ、ジ(C_{1~6}アルキル)アミノ、NO₂、CN、CONH₂、CO₂H、C_{2~7}アルキルカルボニルアミノ、C_{3~13}アルコキシカルボニルアミノアルコキシ、C_{1~6}アミノアルコキシ、C_{3~13}アルキルカルボニルアミノアルコキシである。

化合物。

【請求項 107】

式 $\times \times I$ の構造から選択される、請求項 2 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

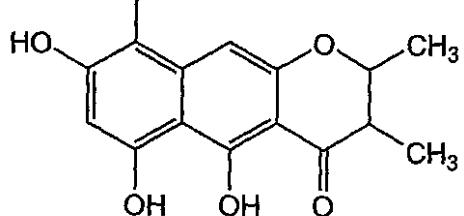
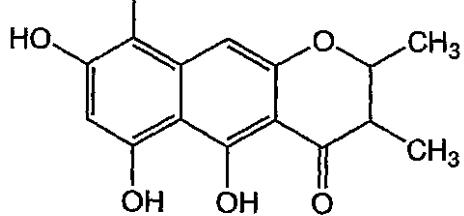
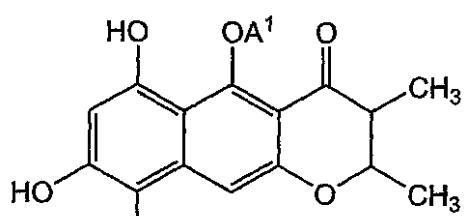
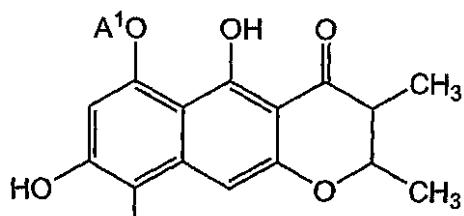
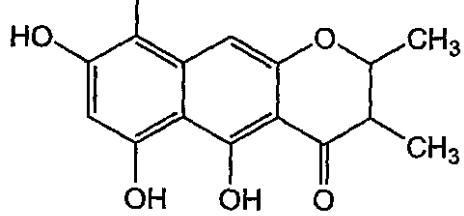
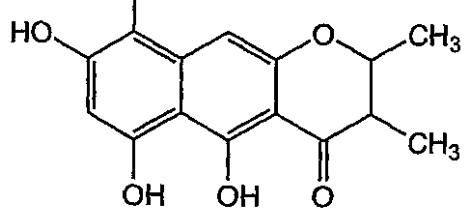
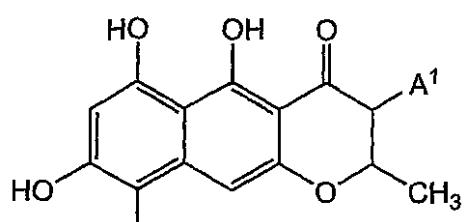
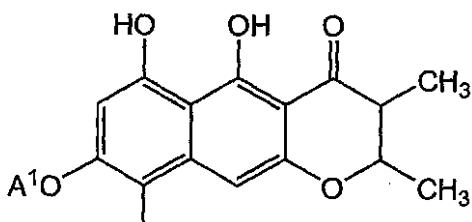
【化121】



【請求項108】

式X X I構造および全てのそれらのアトロブ異性体から選択される、請求項2に記載のH I Vインテグラーゼ阻害剤化合物：

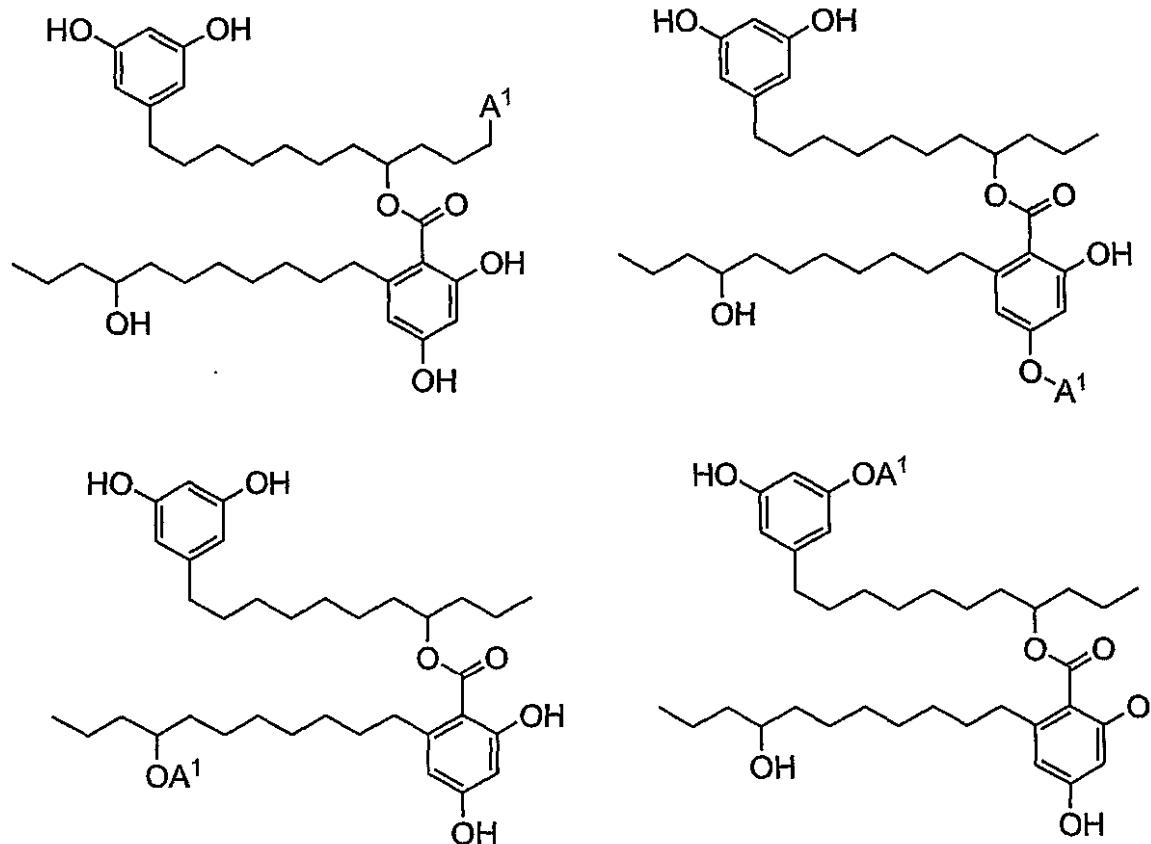
【化122】



【請求項109】

式X X I Iの構造から選択される、請求項2に記載のH I Vインテグラーゼ阻害剤化合物：

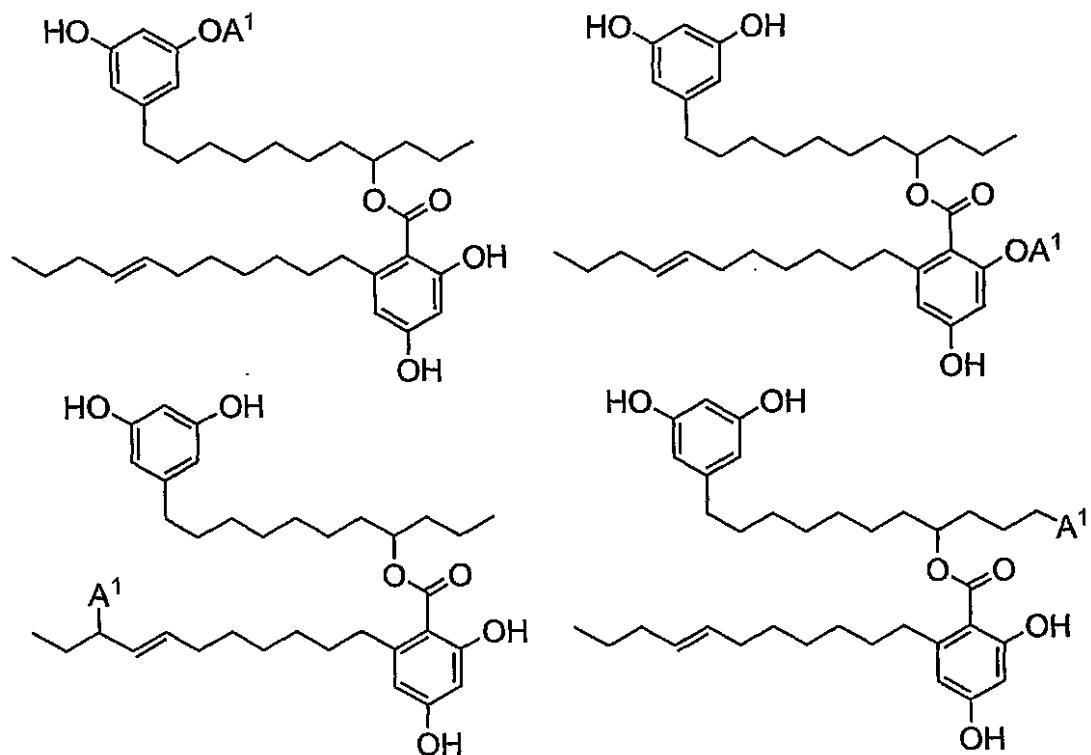
【化123】



【請求項110】

式XIX-Iの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物

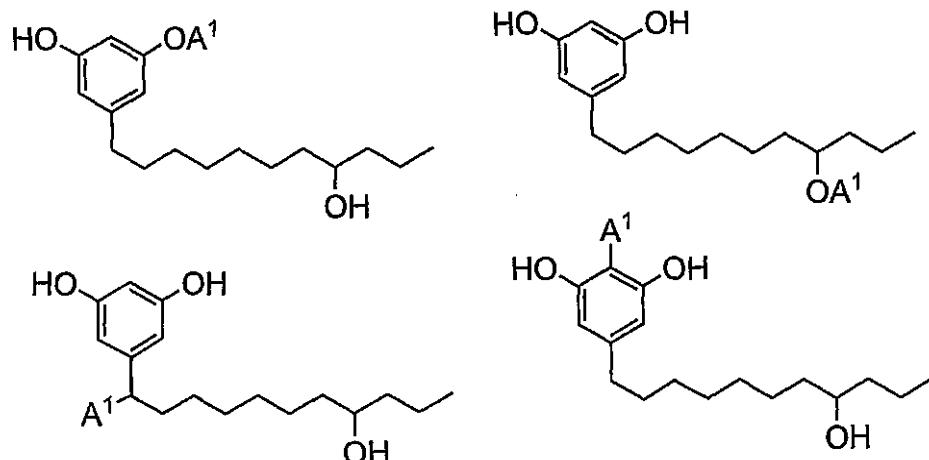
【化124】



【請求項111】

式XIX-Iの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物

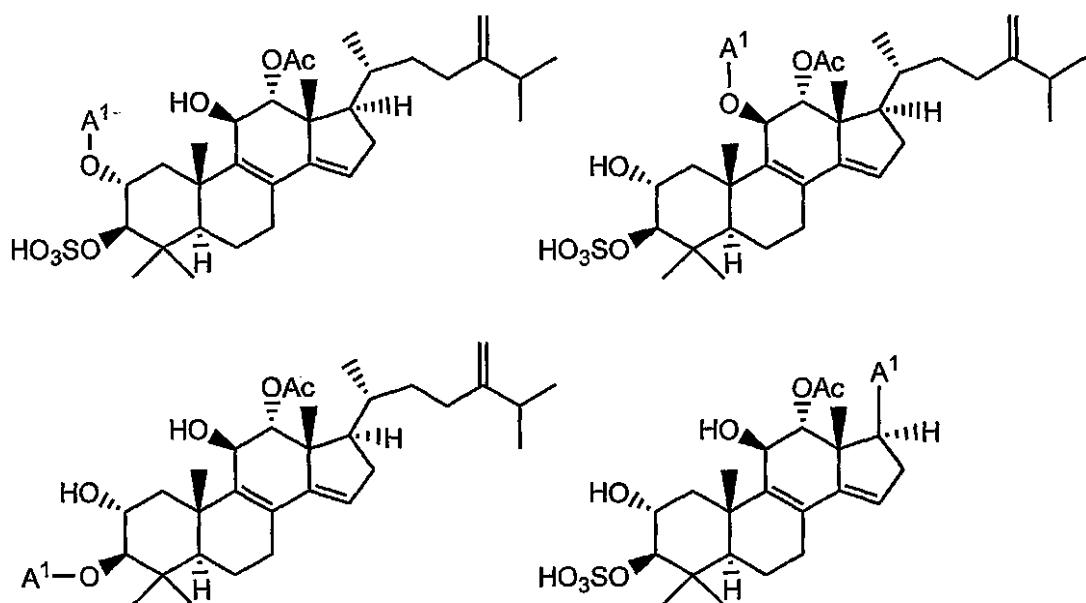
【化 1 2 5】



【請求項 1 1 2】

式 X X I I I の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

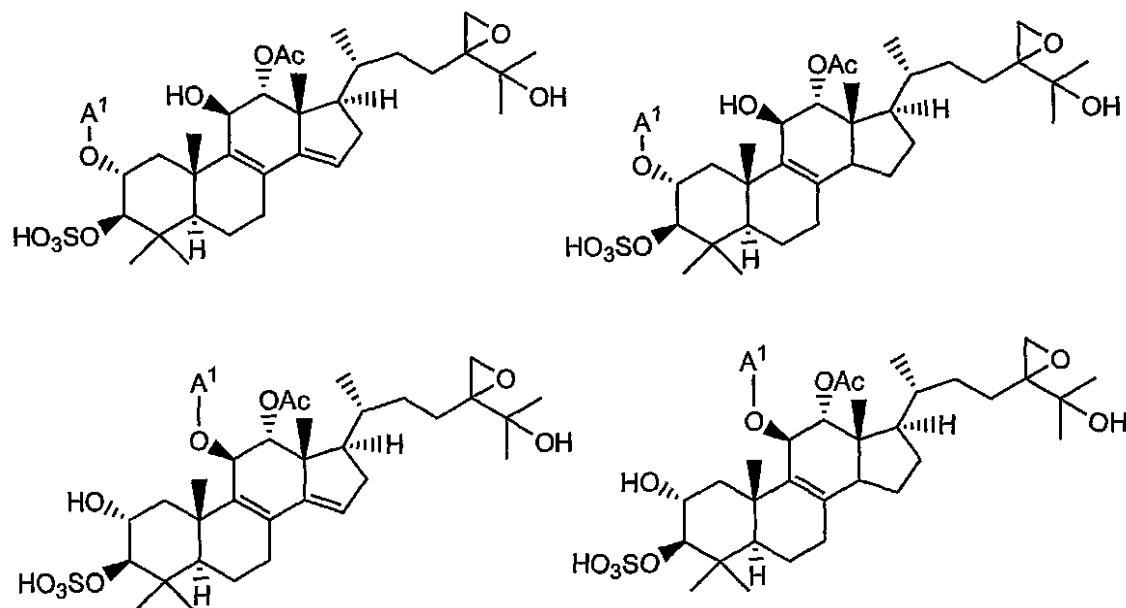
【化 1 2 6】



【請求項 1 1 3】

式 X X I I I の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

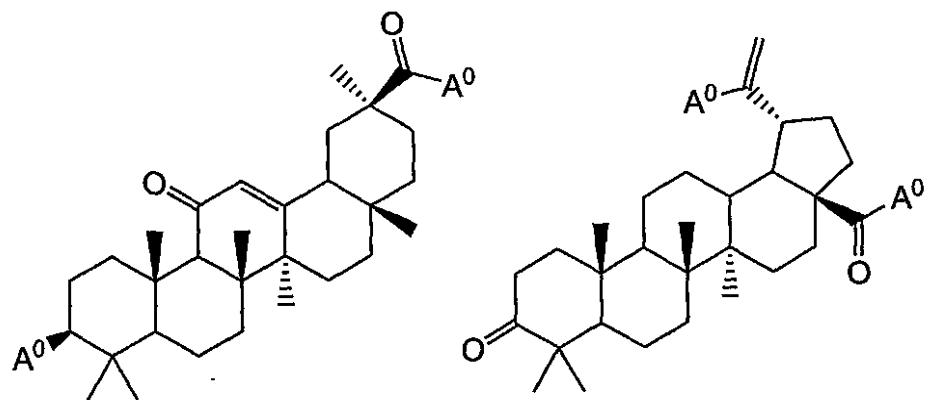
【化127】



【請求項114】

式X-XIVの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

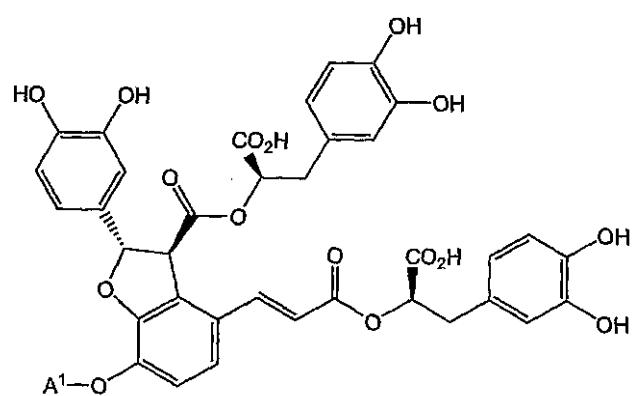
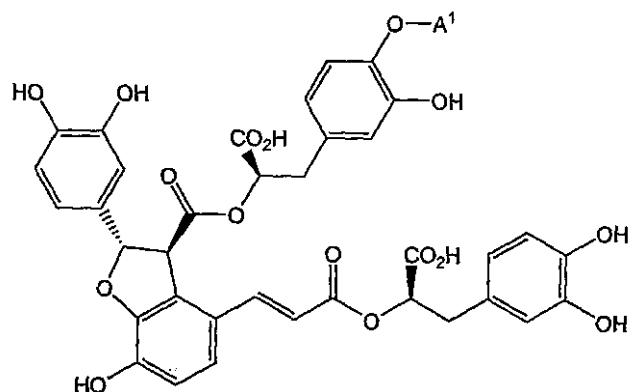
【化128】



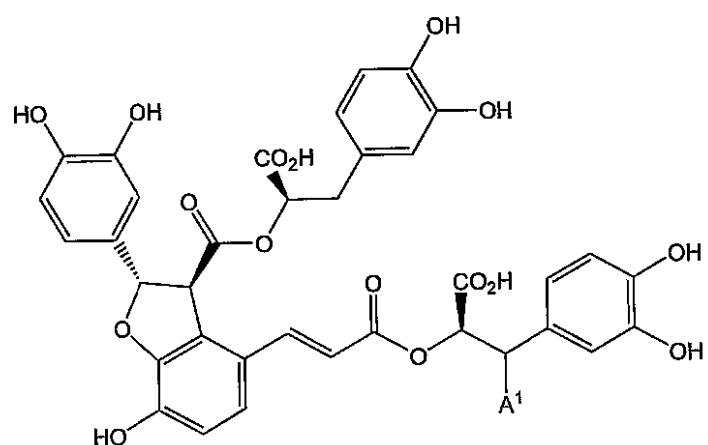
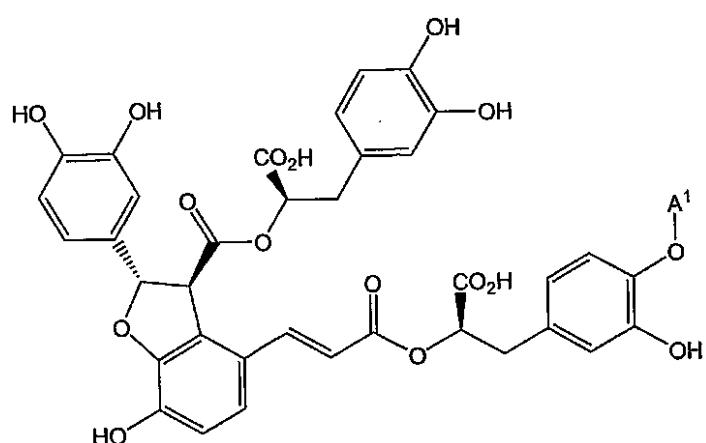
【請求項115】

式X-XIVの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 1 2 9】



【化 1 3 0】

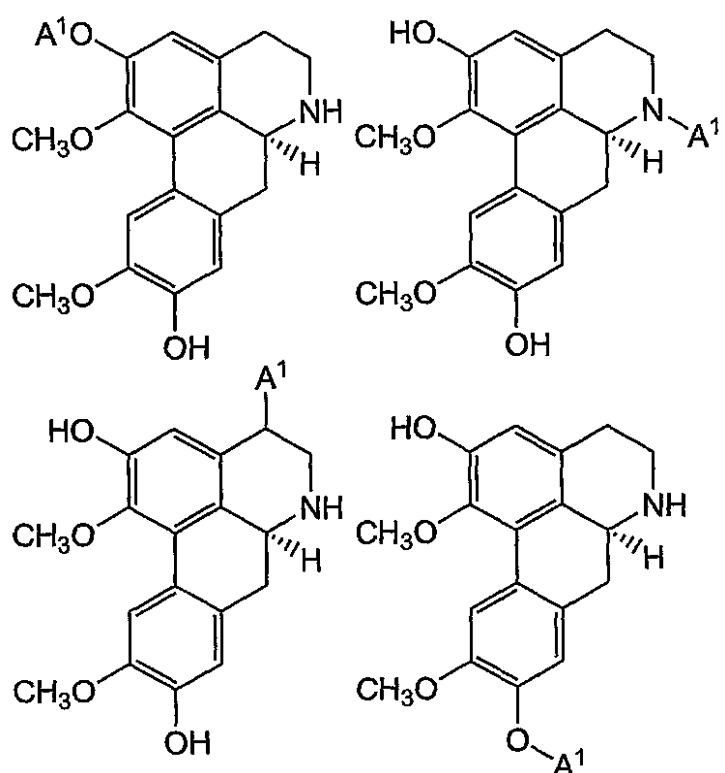


【請求項 1 1 6】

式 X X I V の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物

1

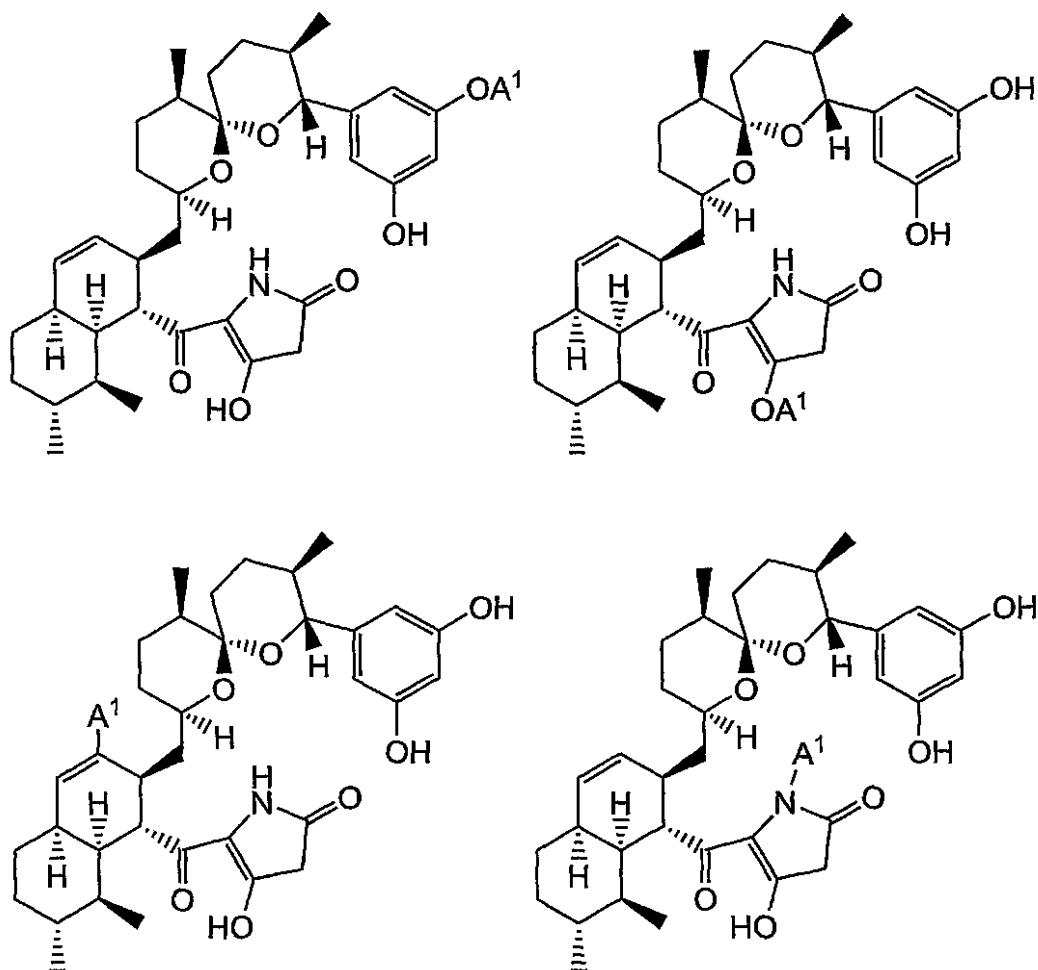
〔化 1 3 1 〕



【請求項 1 1 7】

式 $X \times V$ の構造から選択される、請求項 2 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化132】

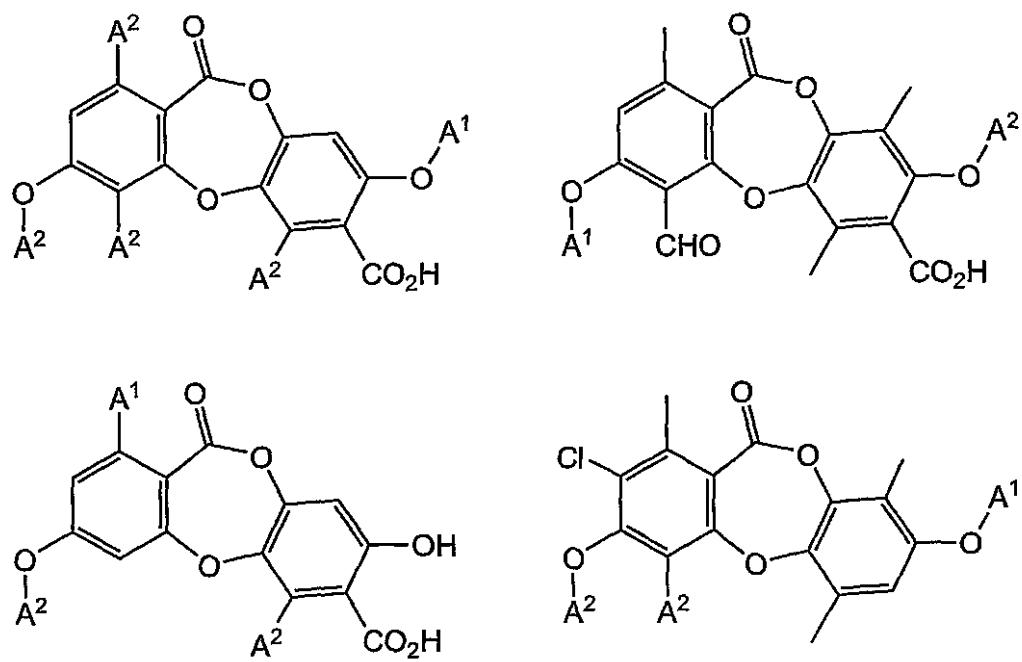


【請求項118】

式X XVIIの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物

:

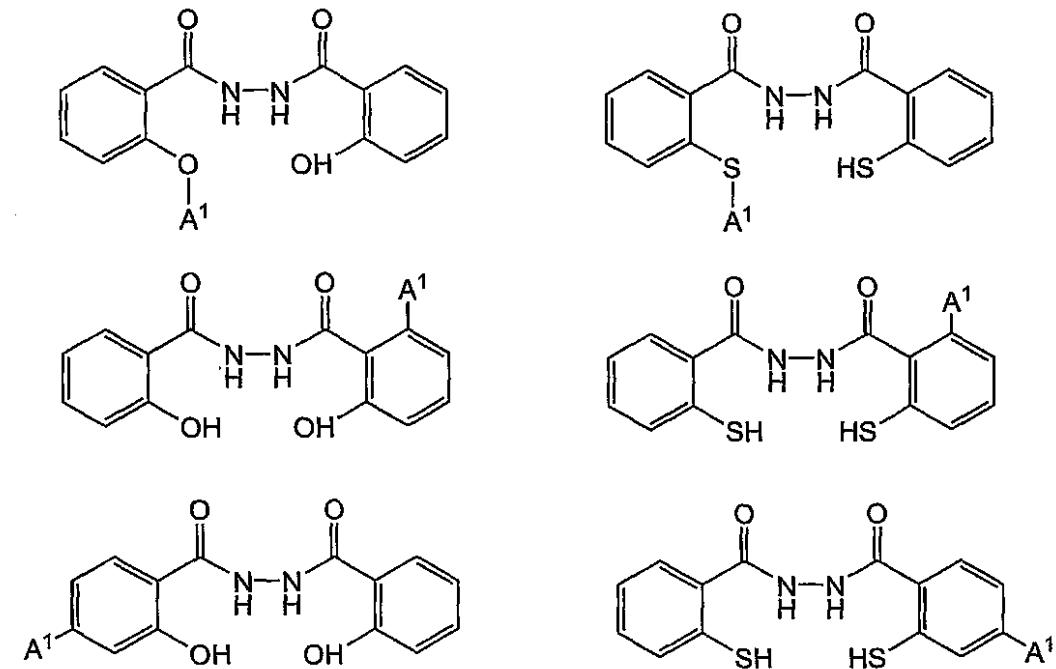
【化133】



【請求項 119】

式 X X V I の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 134】



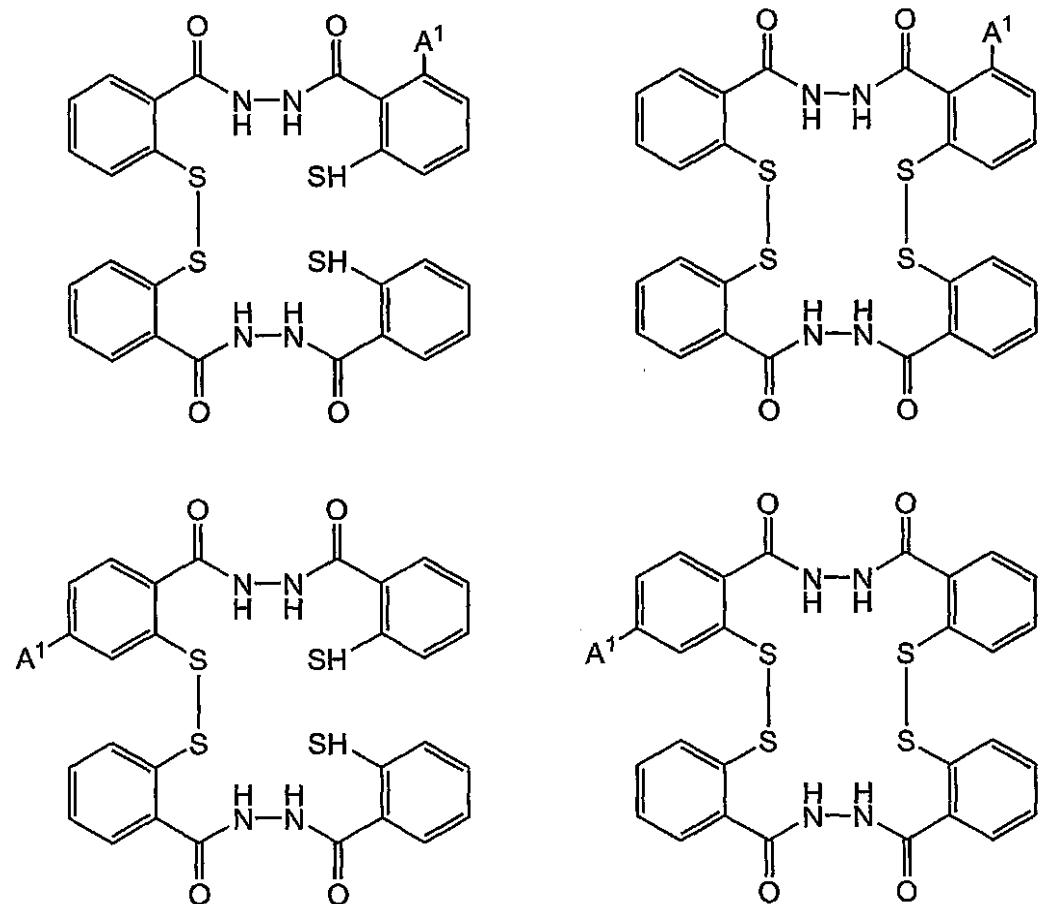
ここで、上記構造におけるフェニル環、N、S またはヒドロキシリ酸素原子の各々は、別個に、A⁰ 基で置換され得る、

化合物。

【請求項 120】

式 X X V I の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 1 3 5】



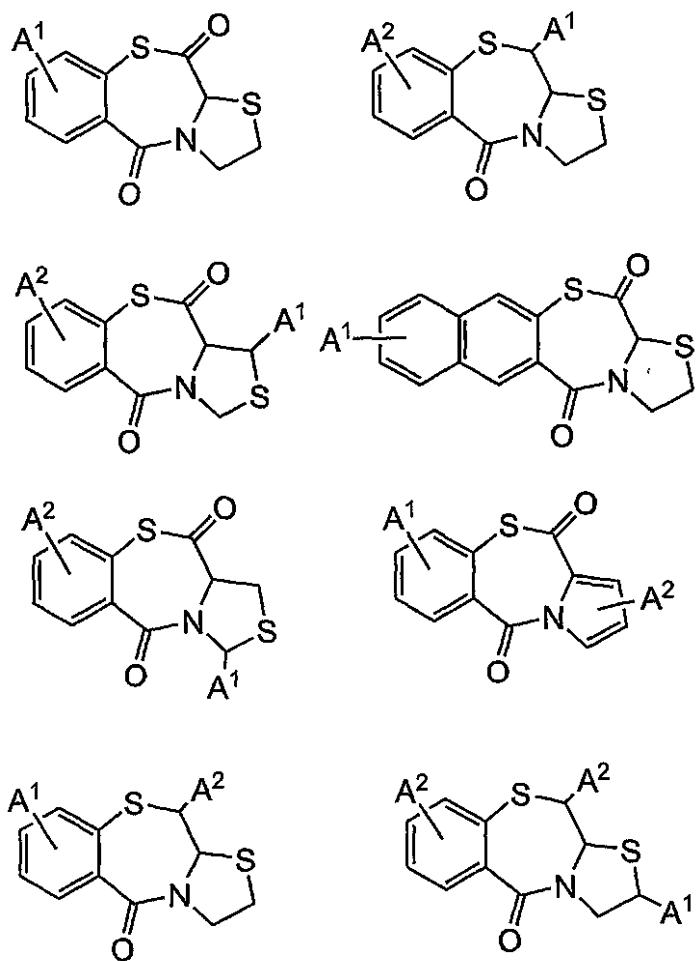
ここで、上記構造におけるフェニル環、N、S またはヒドロキシリ酸素原子の各々は、別個に、 A^0 基で置換され得る、

化合物。

【請求項 1 2 1】

式 X X V I I I の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

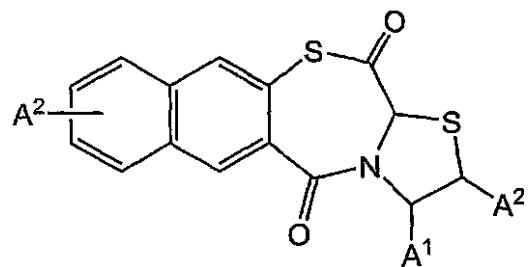
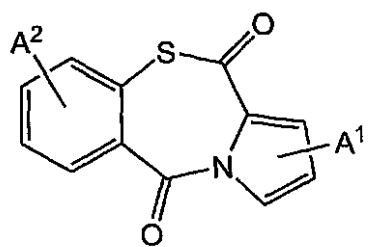
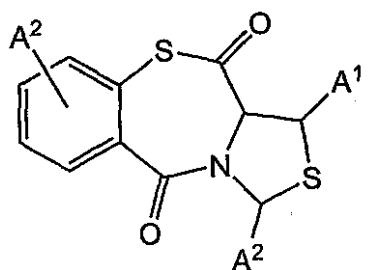
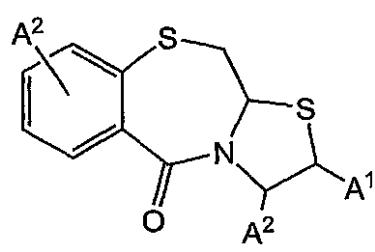
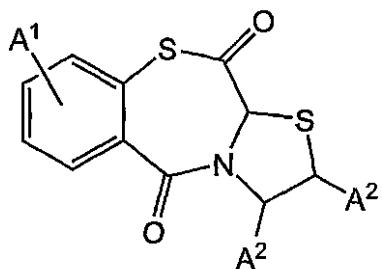
【化 1 3 6】



【請求項 1 2 2】

式 X X V I I I の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

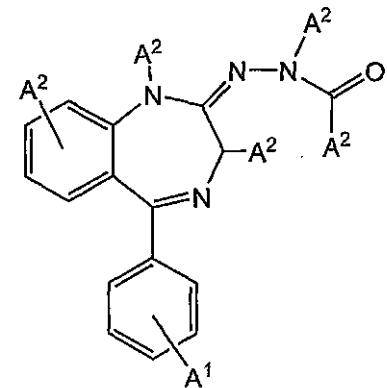
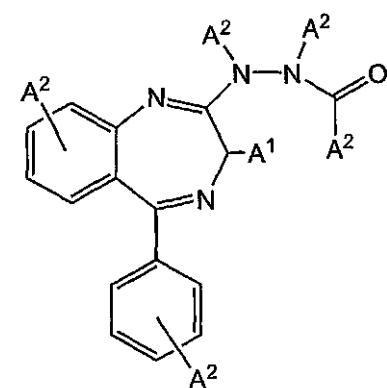
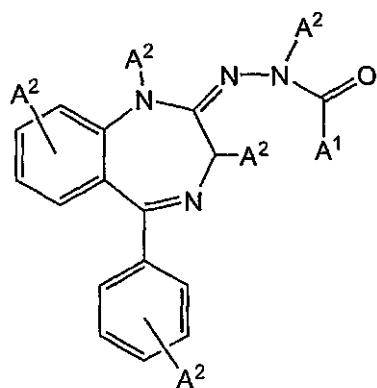
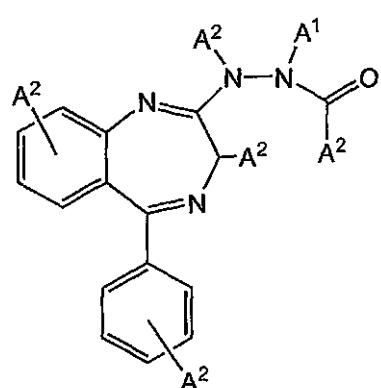
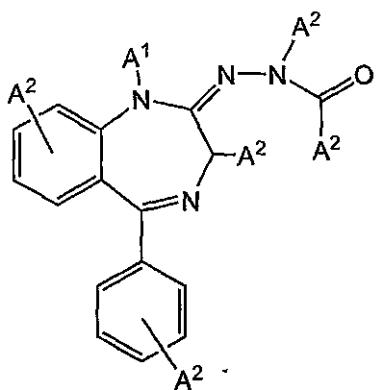
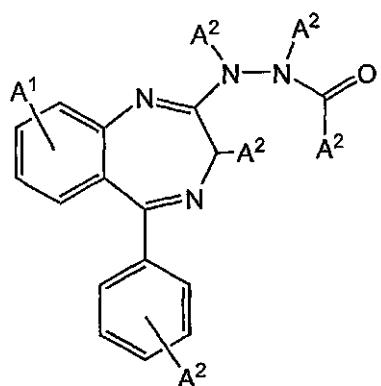
【化 1 3 7】



【請求項 1 2 3】

式 X X I X の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物
：

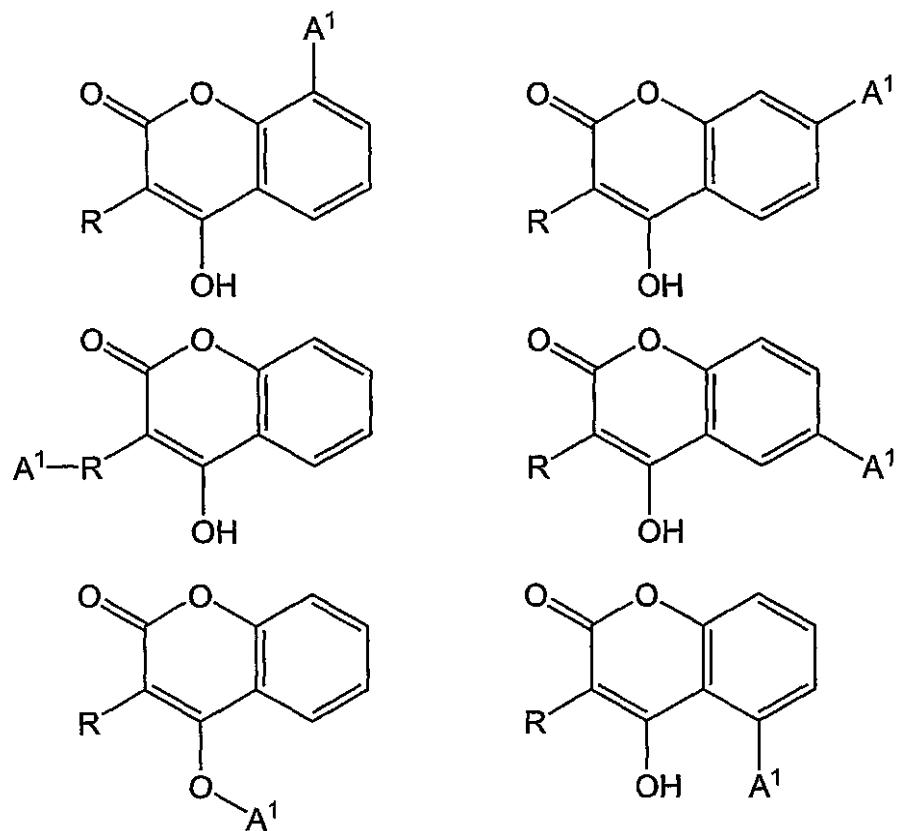
【化 1 3 8】



【 請求項 1 2 4 】

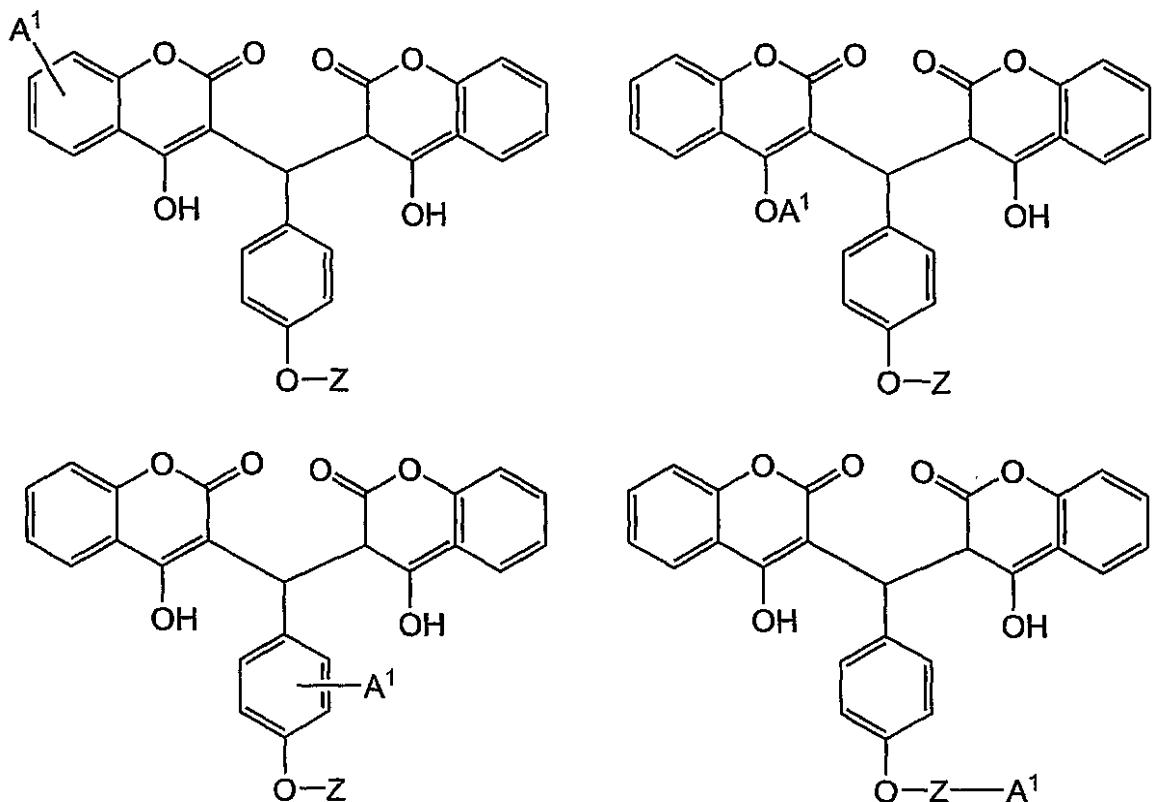
式 X X X の構造から選択される、請求項 2 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化139】



ここで、Rは、H、C₁～C₈アルキル、C₁～C₈置換アルキル、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈置換アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₂～C₁₈置換アルキニル、C₆～C₂₀アリール、C₆～C₂₀置換アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリールまたはC₂～C₂₀置換ヘテロアリールである；そして

【化140】

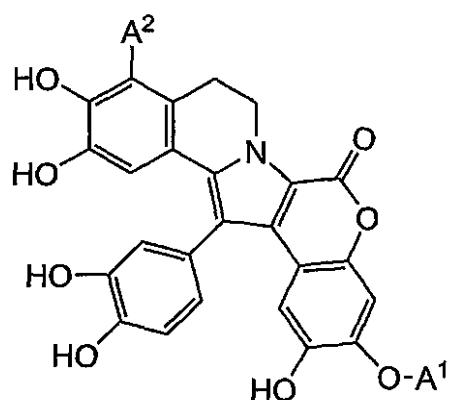
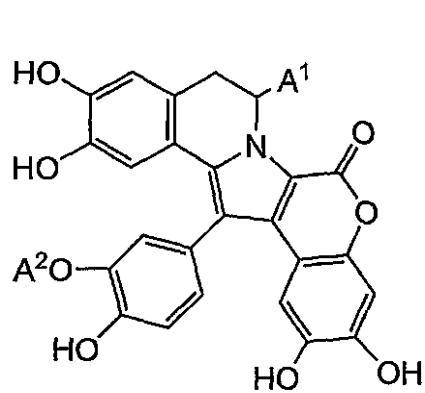
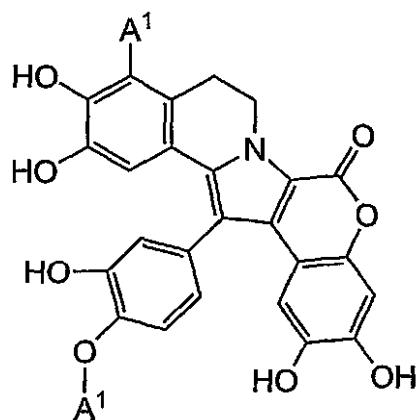
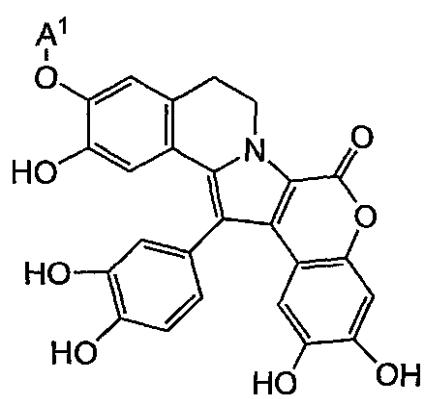
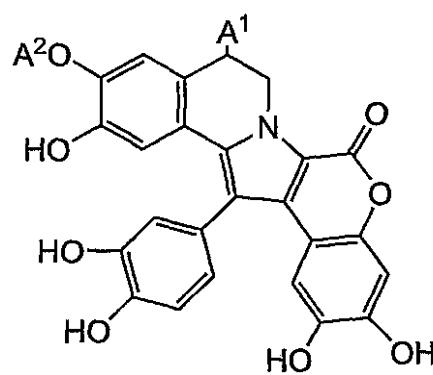
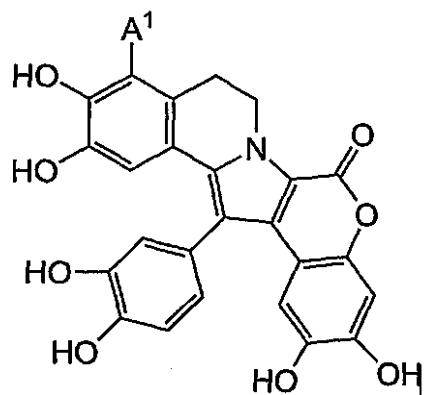


ここで、Zは、-C(=O)Arまたは-SO₂Rである；そして
 Arは、C₃～C₁₂炭素環、C₃～C₁₂置換炭素環、C₆～C₂₀アリール、C₆～C₂₀置換アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリールまたはC₂～C₂₀置換ヘテロアリールである。
 化合物。

【請求項125】

式XXXの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

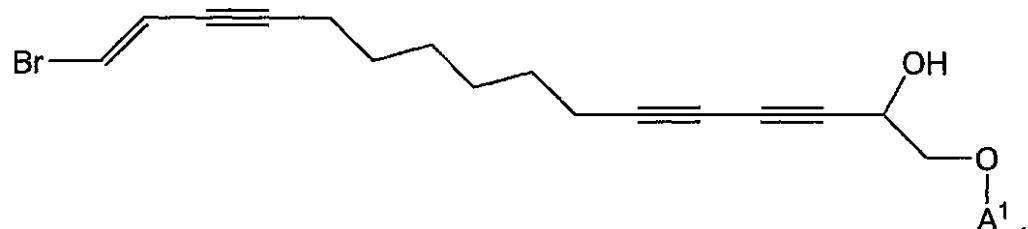
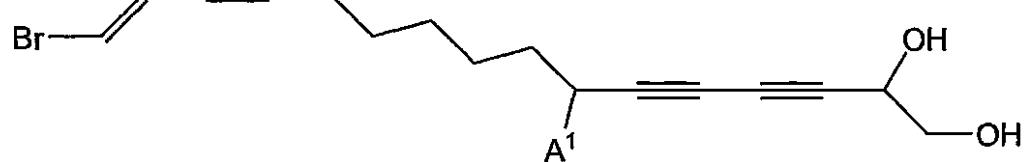
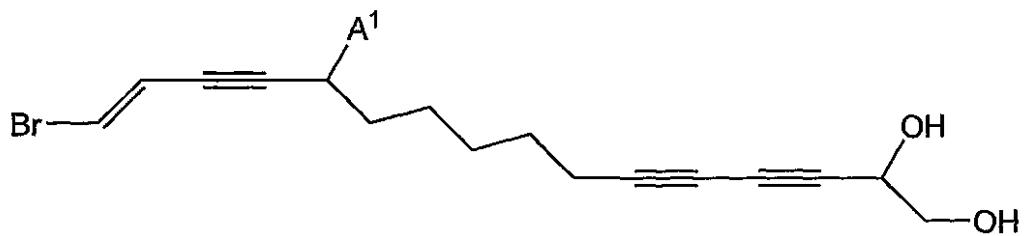
【化141】



【請求項126】

式XXXIの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物
：

【化 1 4 2】

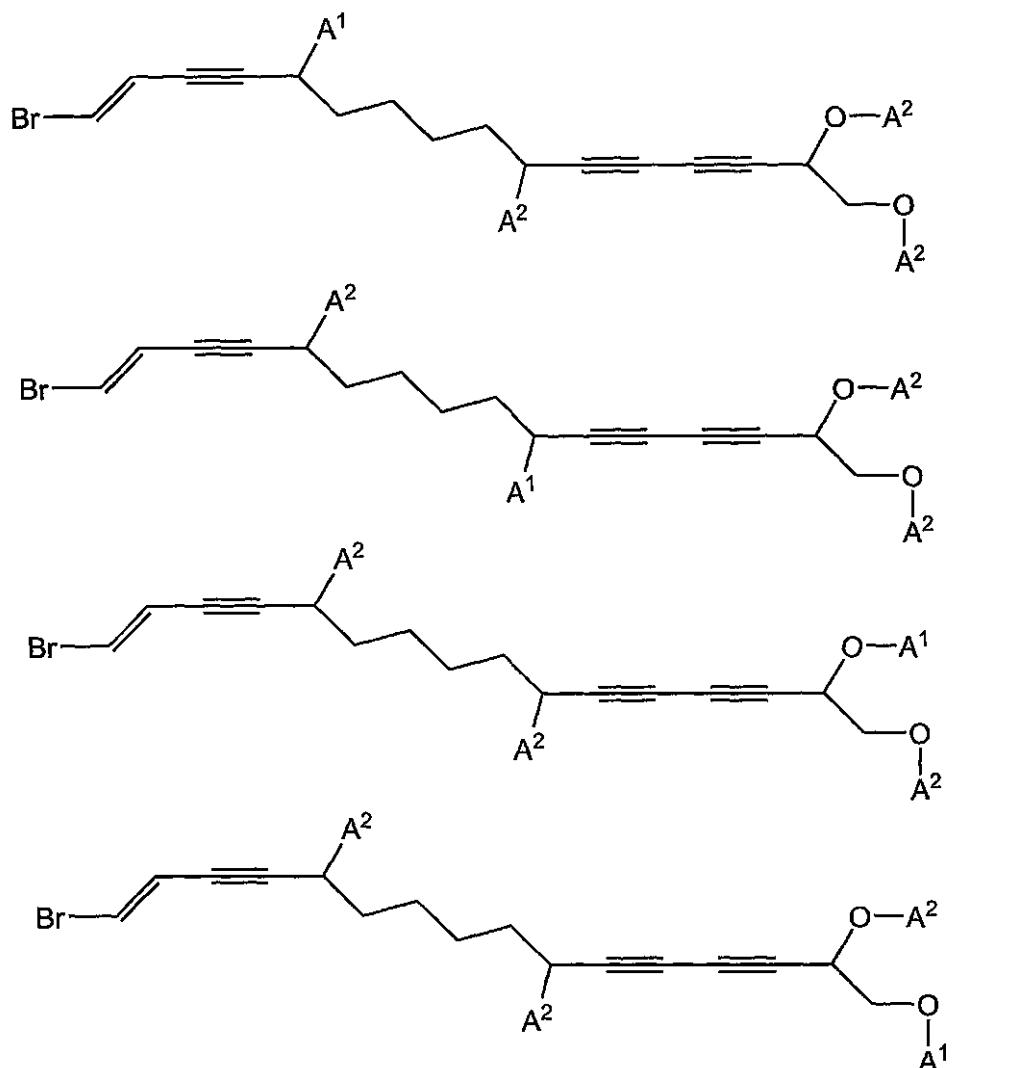


【請求項 1 2 7】

式 X X X I の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物

:

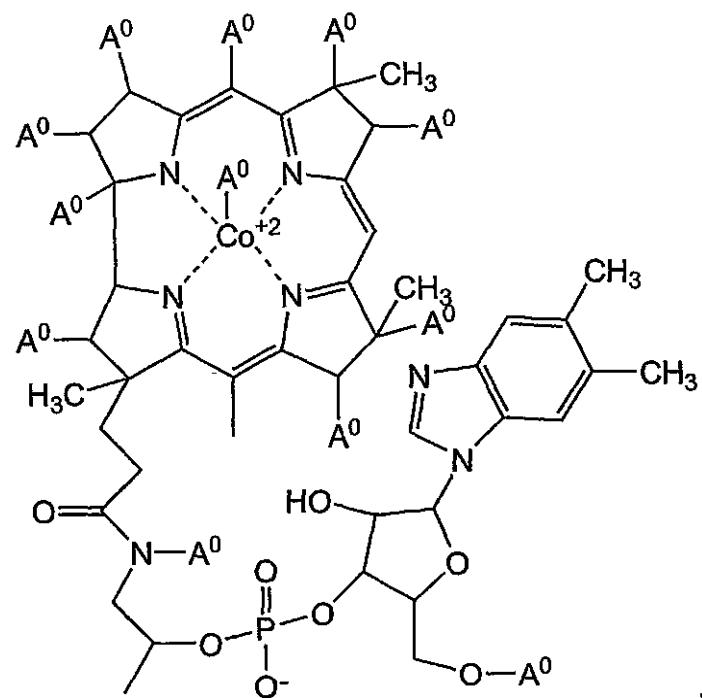
【化 1 4 3】



【請求項 1 2 8】

式 X X X I I の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

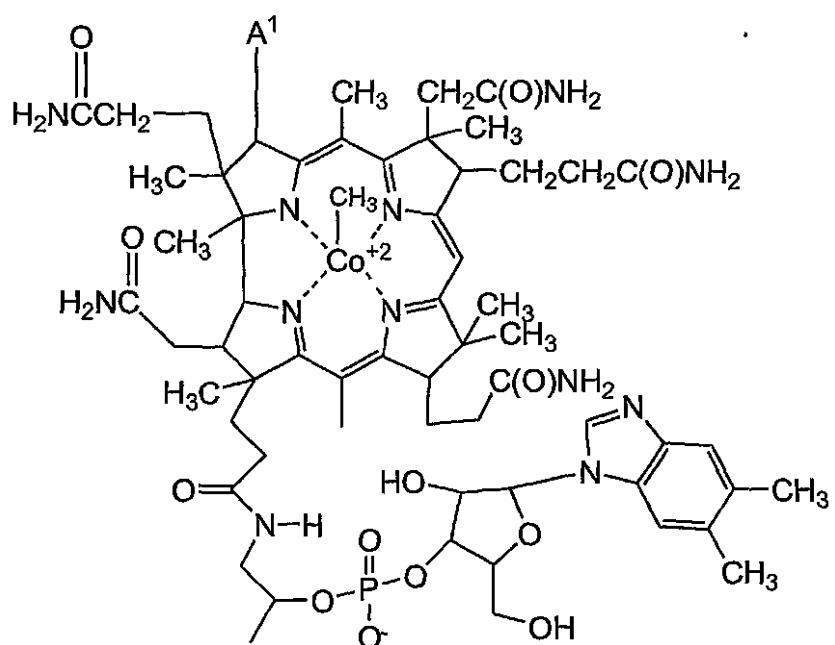
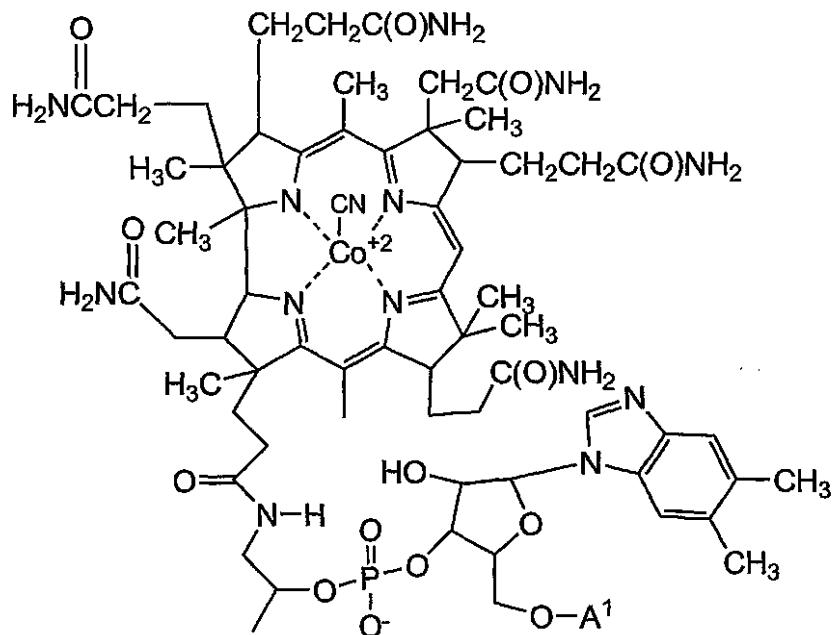
【化 1 4 4】



【請求項 1 2 9】

式 X X X I I の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

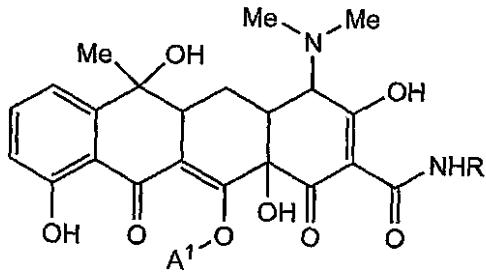
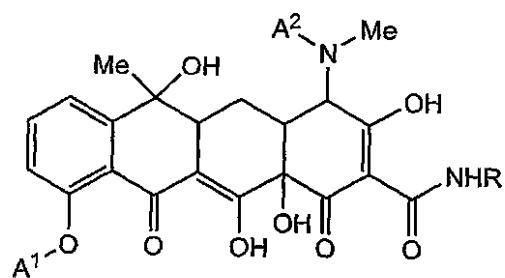
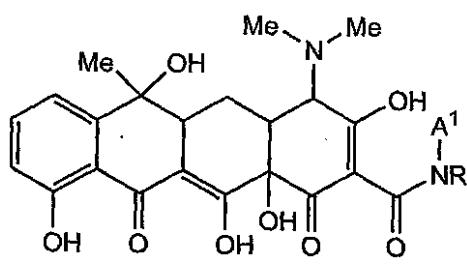
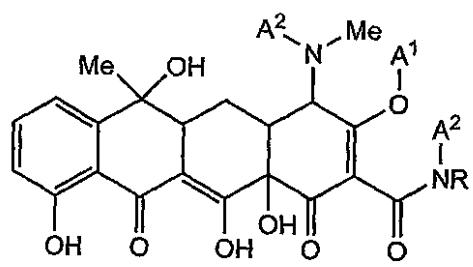
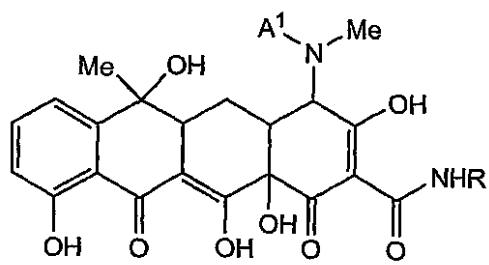
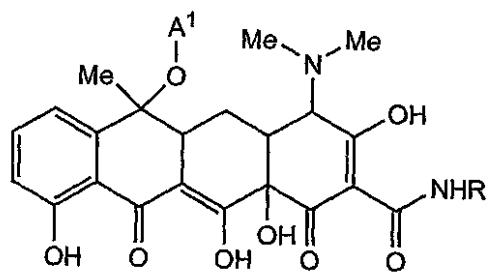
【化 1 4 5 】



【請求項 1 3 0】

式 X-X-X-I-I-I の構造から選択される、請求項 2 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

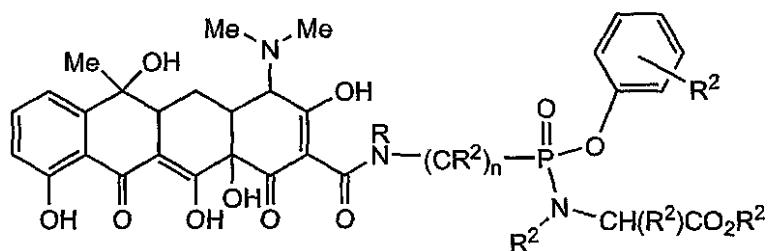
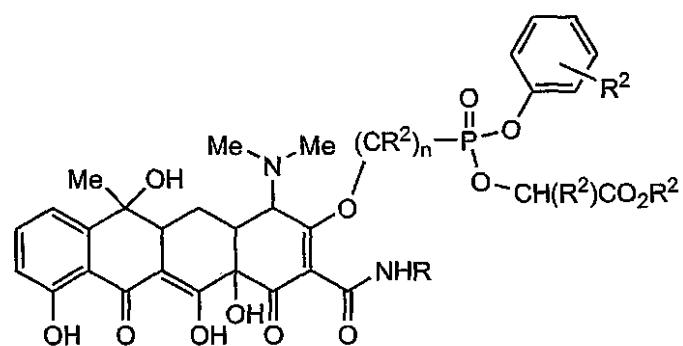
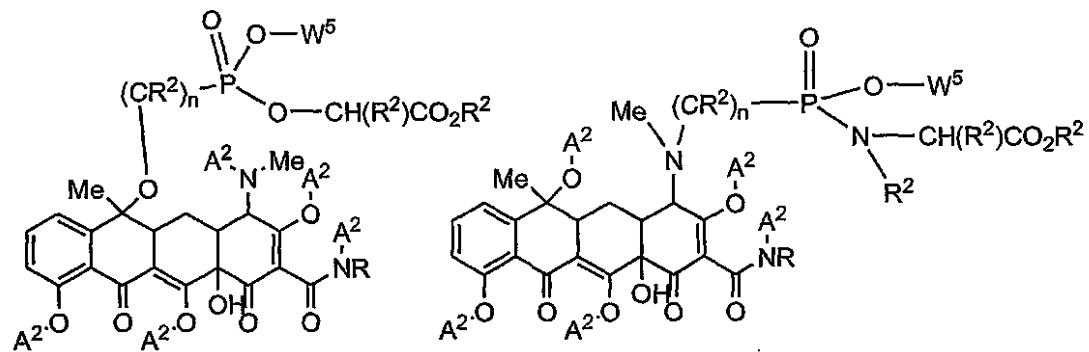
【化 1 4 6】



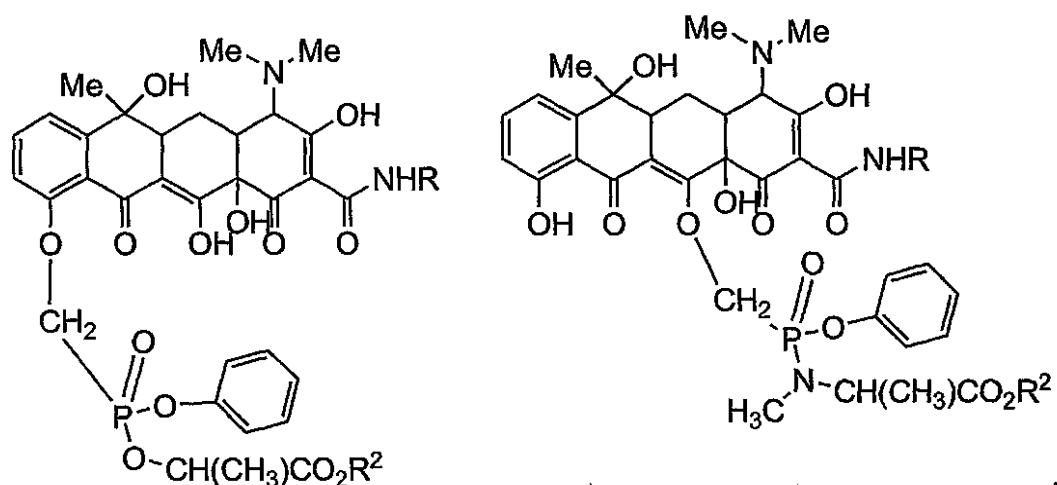
【請求項 1 3 1】

式 X X X I I I の構造から選択される、請求項 1 3 0 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化147】



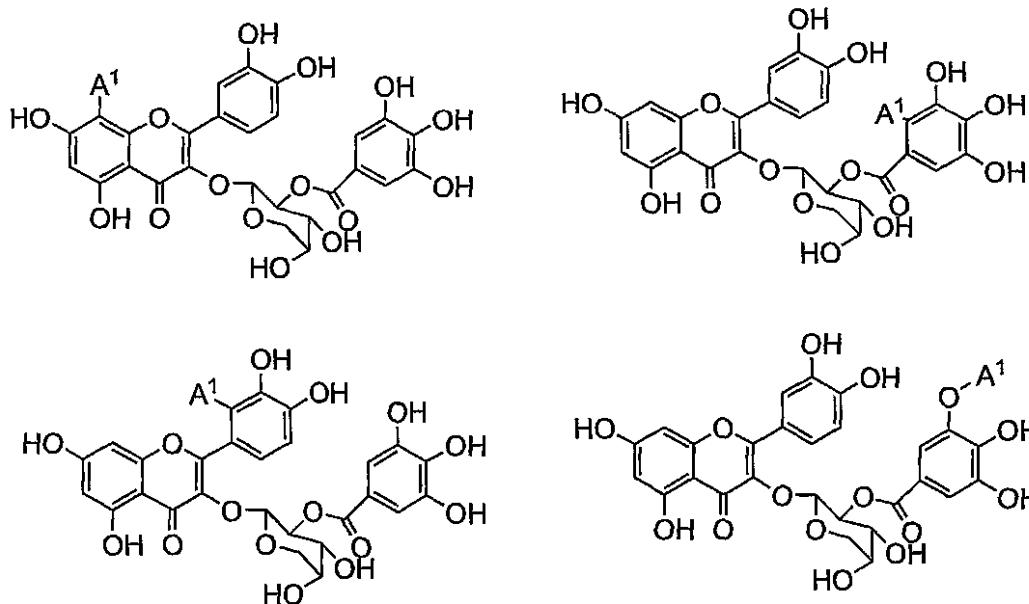
【化147-a】



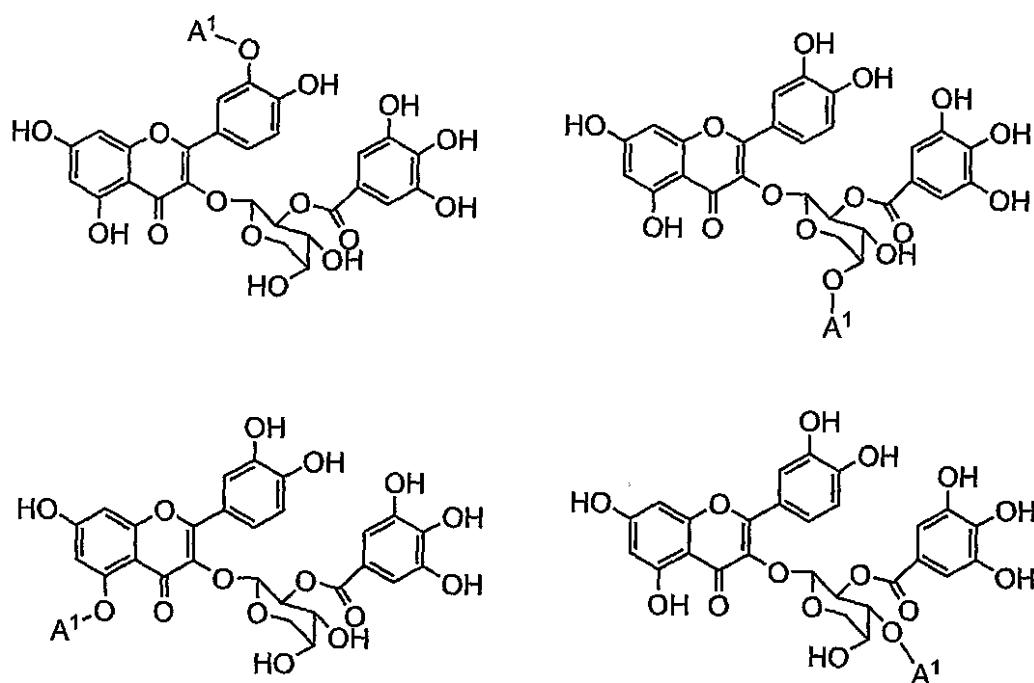
【請求項132】

式X₁X₂X₃I₁I₂I₃の構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 1 4 8】



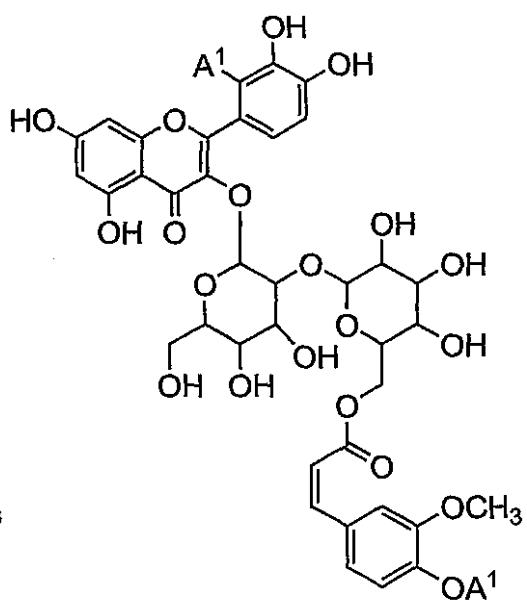
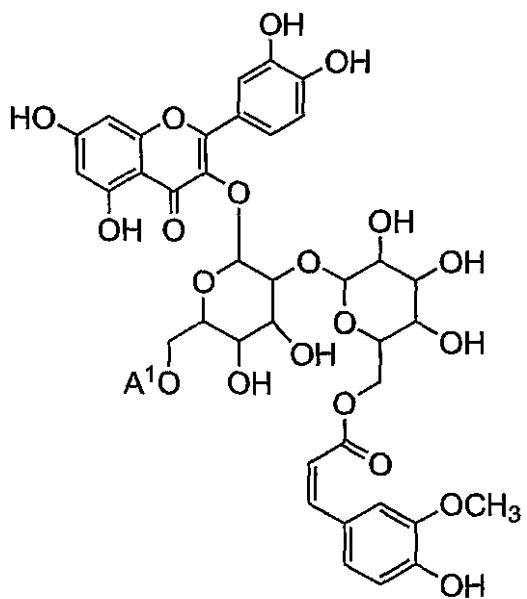
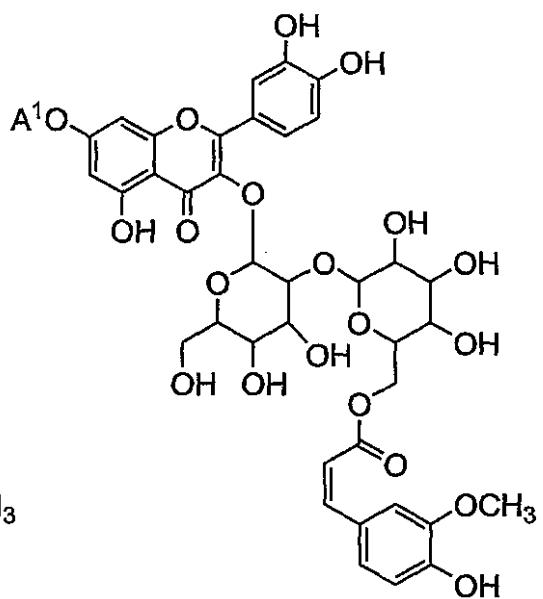
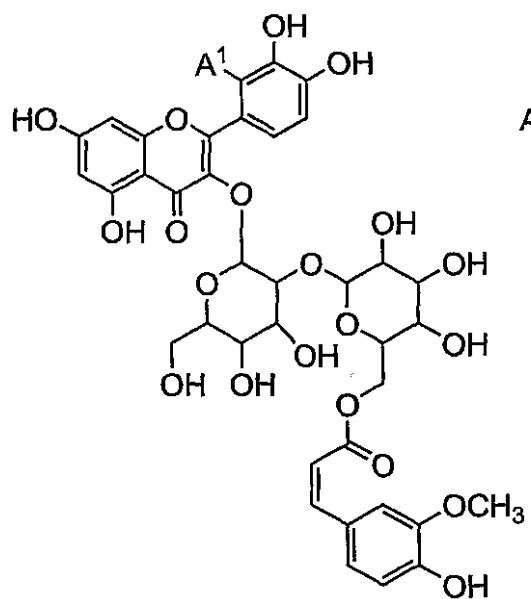
【化 1 4 9】



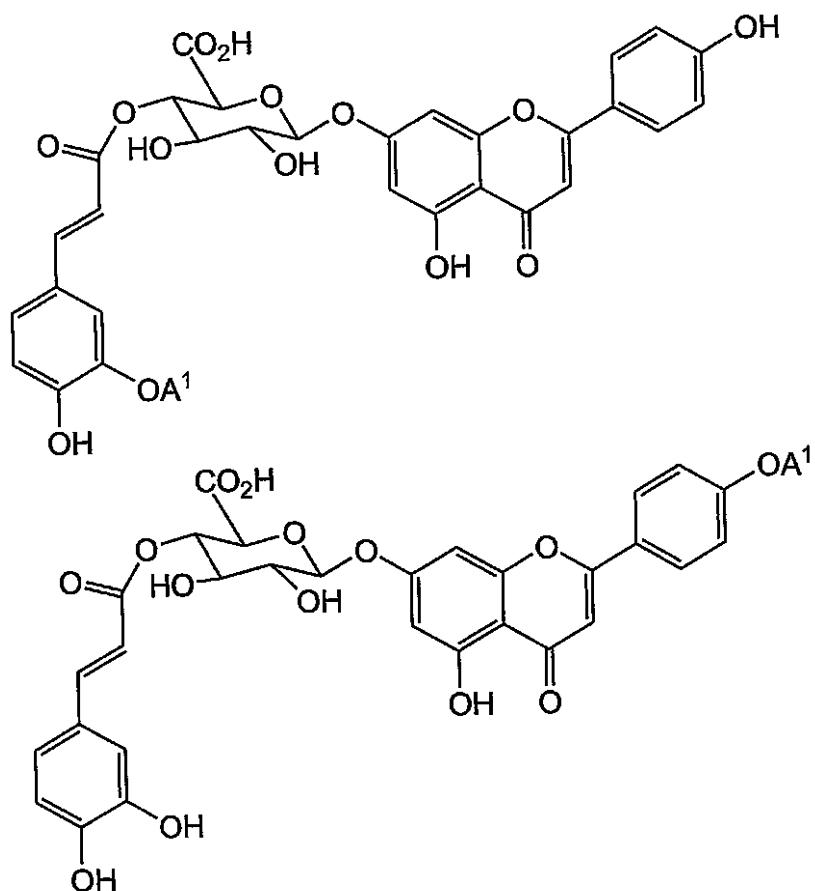
【請求項 1 3 3】

式 X X X I I I の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

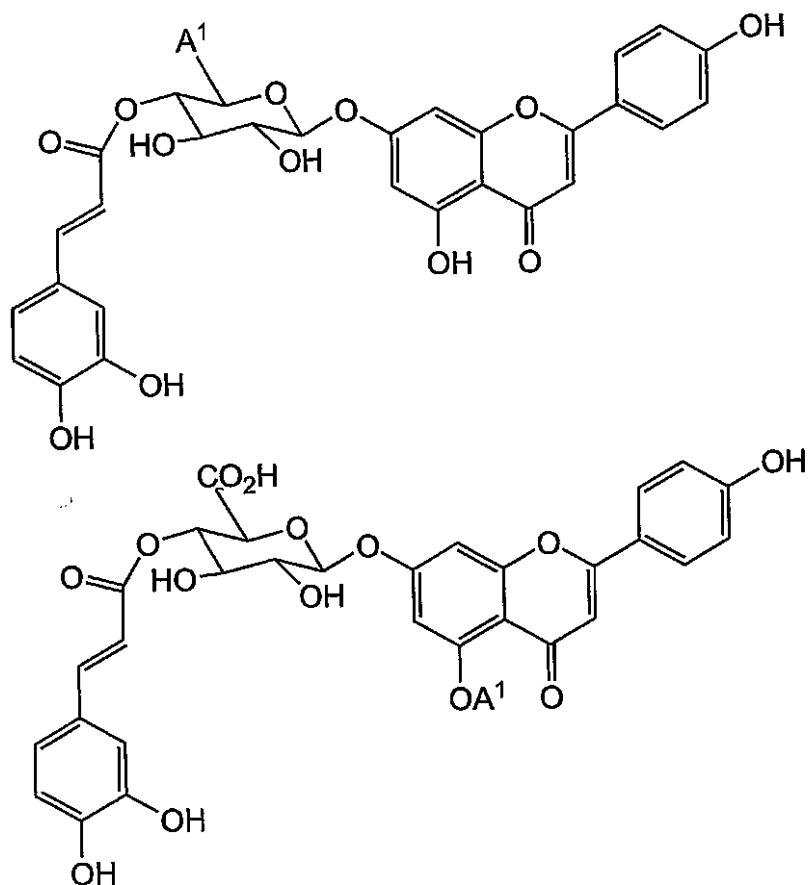
【化 150】



【化 1 5 1】



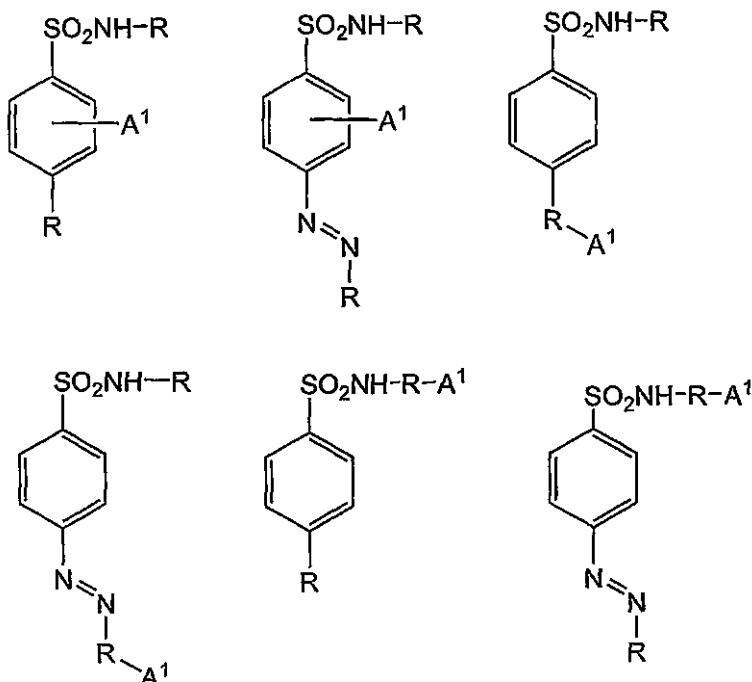
【化 1 5 2】



【請求項 1 3 4】

式 X X X I V の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

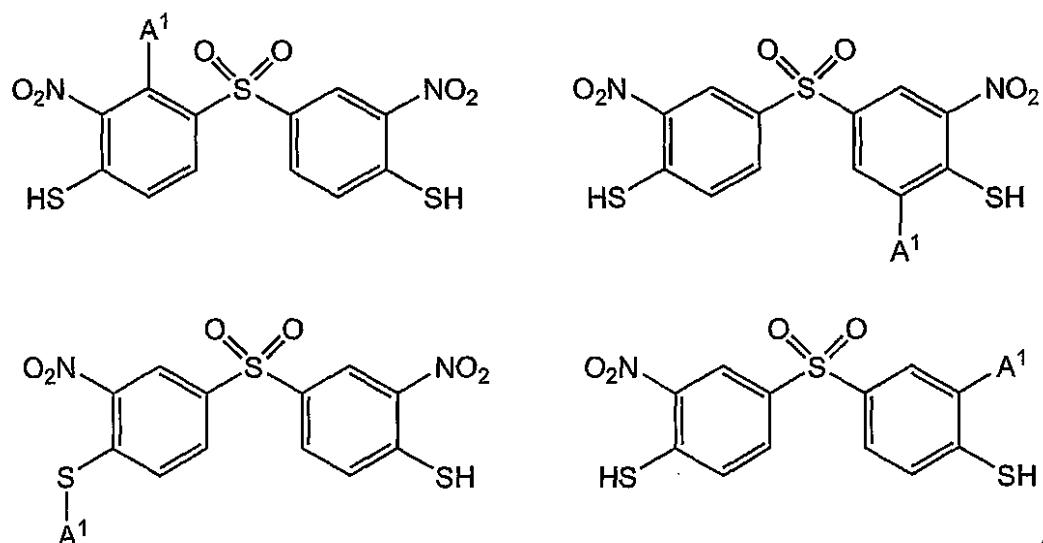
【化 1 5 3】



【請求項 1 3 5】

式XXXIVの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

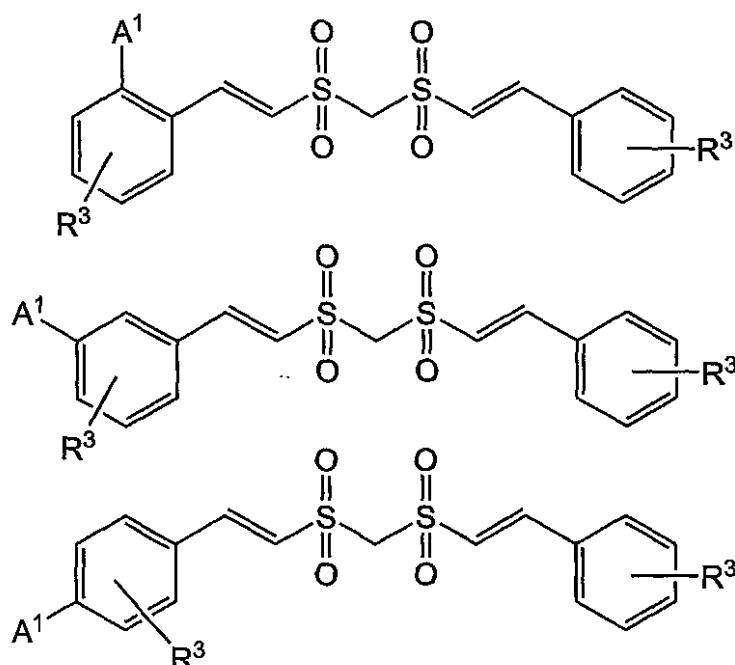
【化154】



【請求項136】

式XXXIVの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

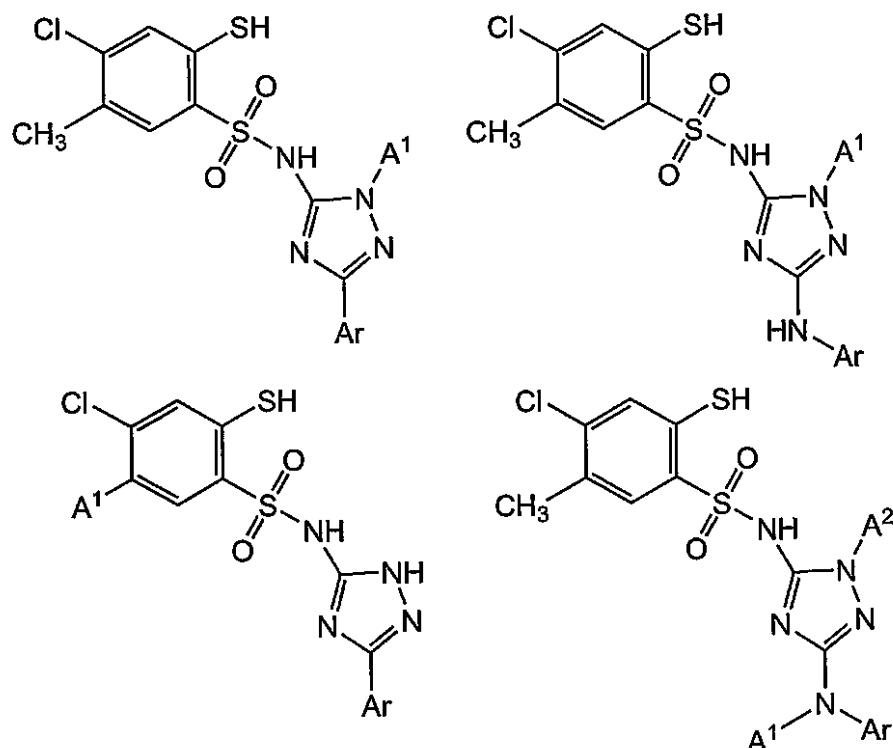
【化155】



【請求項137】

式XXXIVの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 1 5 6 】

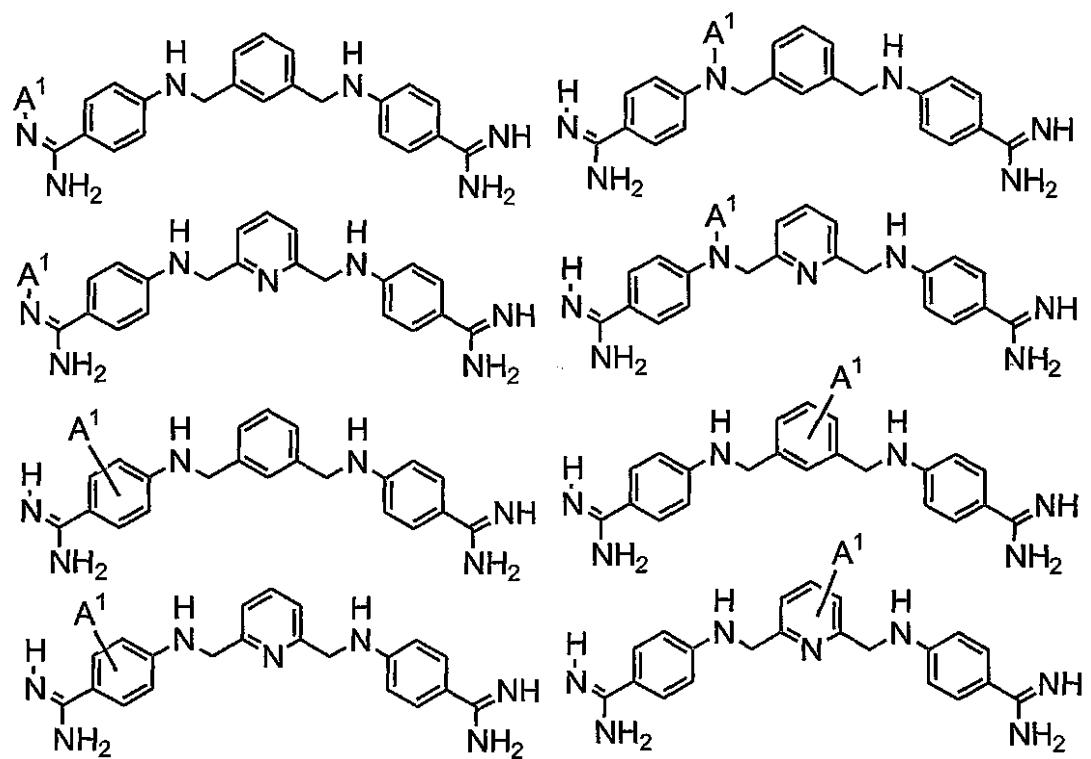


ここで、 A_r は、炭素環または複素環である、化合物。

【請求項 1 3 8】

式 X X X V の構造から選択される、請求項 2 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

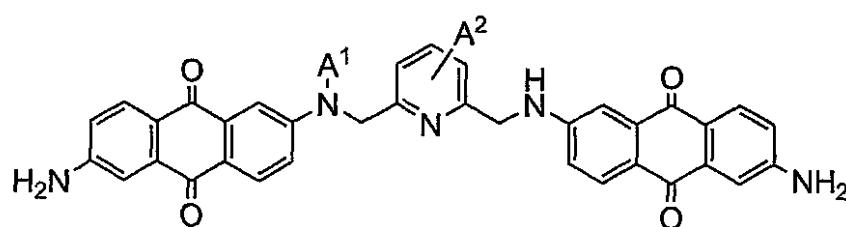
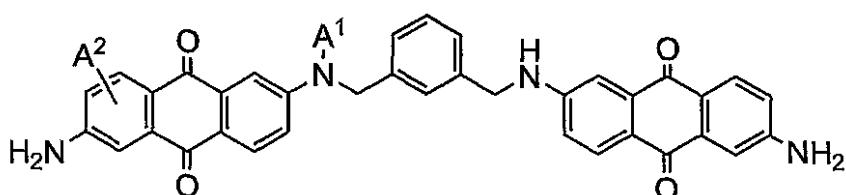
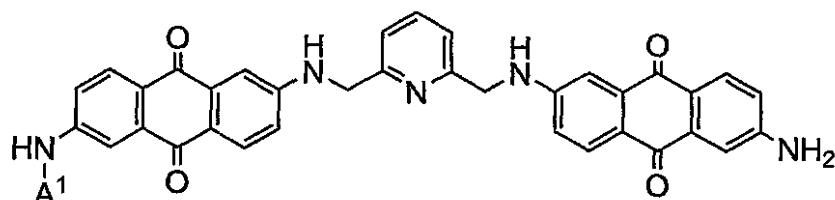
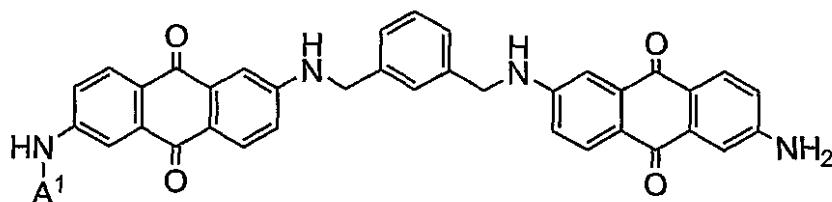
【化 1 5 7 】



【請求項 1 3 9】

式 X X X V の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物
:

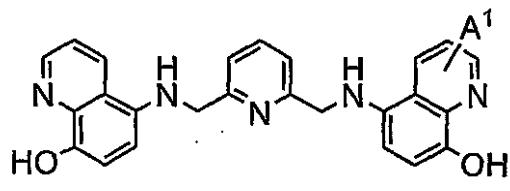
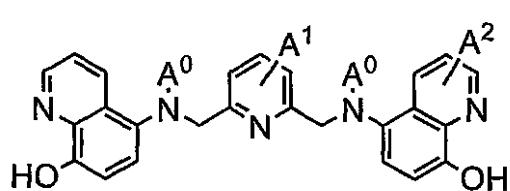
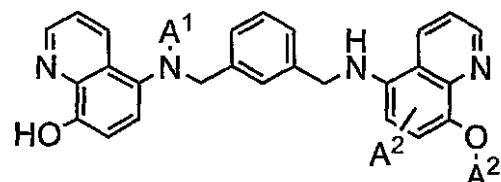
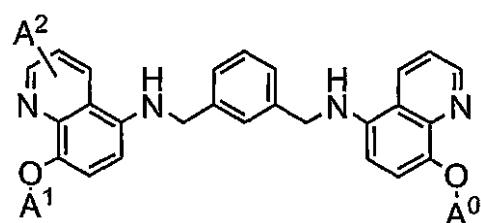
【化 1 5 8】



【請求項 1 4 0】

式 X X X V の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物
:

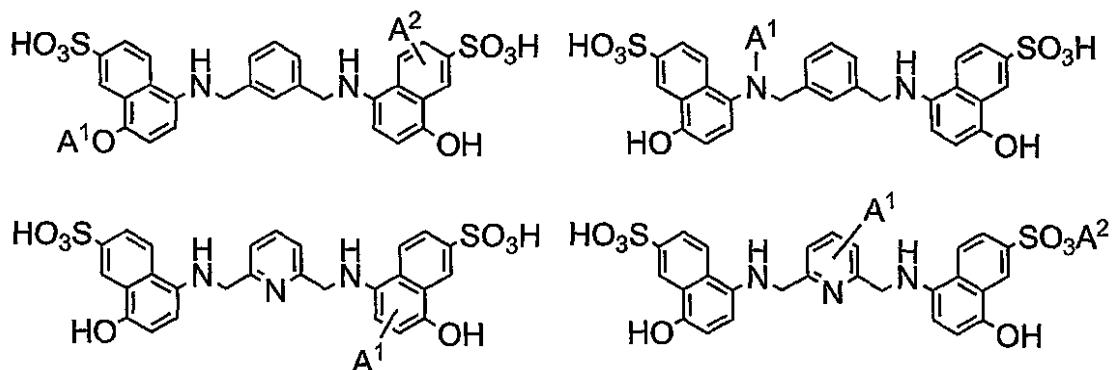
【化 1 5 9】



【請求項 1 4 1】

式 X X X V の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物
:

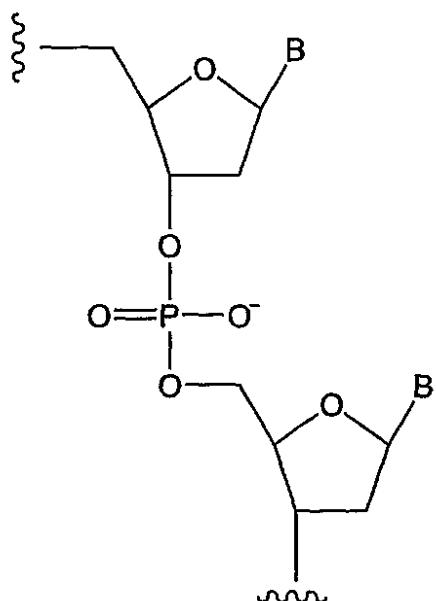
【化160】



【請求項142】

式 XXXV_I の構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化161】

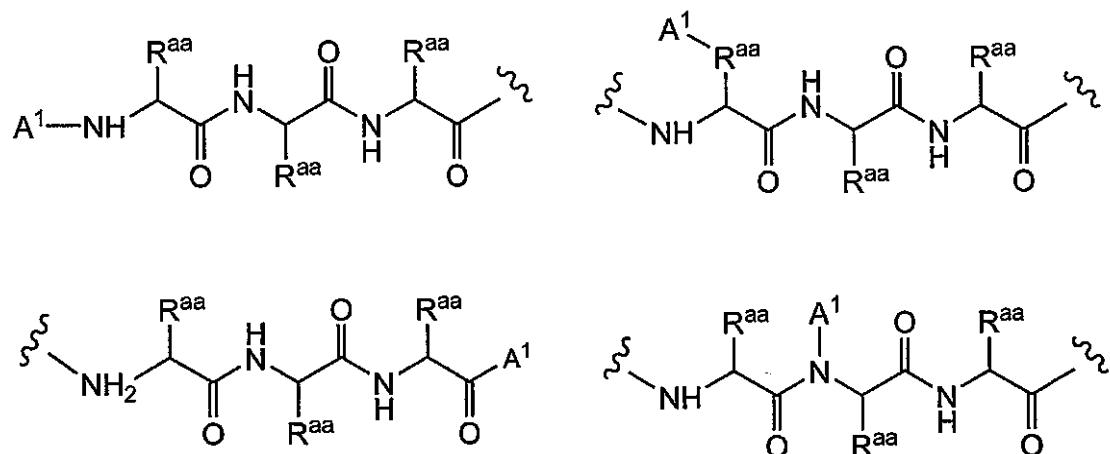


ここで、波線は、分子内の追加ヌクレオチド単位を示す；Bは、核酸塩基であり、そして式 XXXV_I の化合物は、その5'末端、3'末端、インターヌクレオチドホスフェート連鎖、糖、または核酸塩基部分において共有結合された少なくとも1個のA¹基を含む化合物。

【請求項143】

式 XXXV_II の構造を含む、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化162】

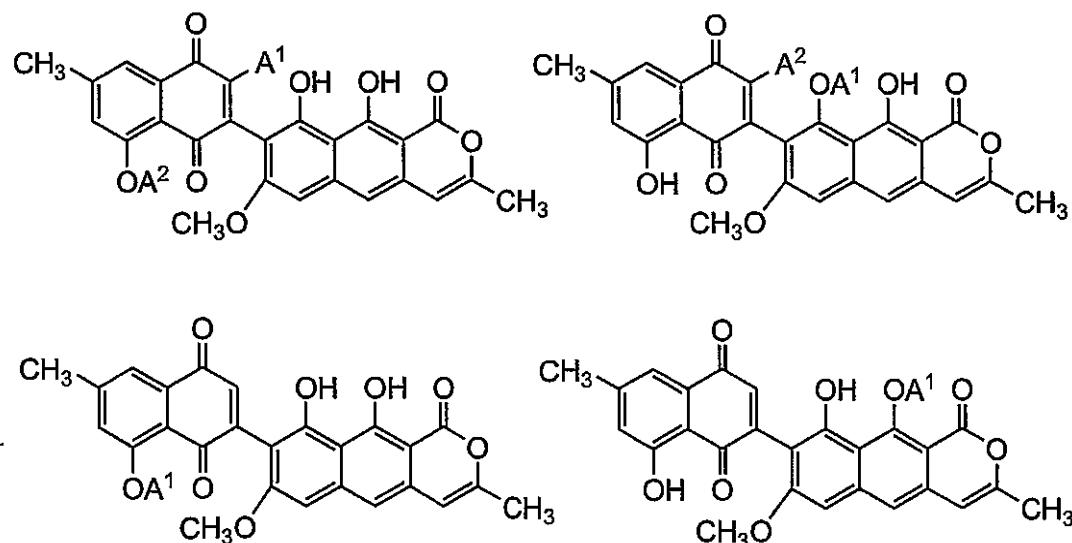


ここで、 R^{aa} は、アミノ酸側鎖である、化合物。

【請求項144】

式XXXVIIIの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

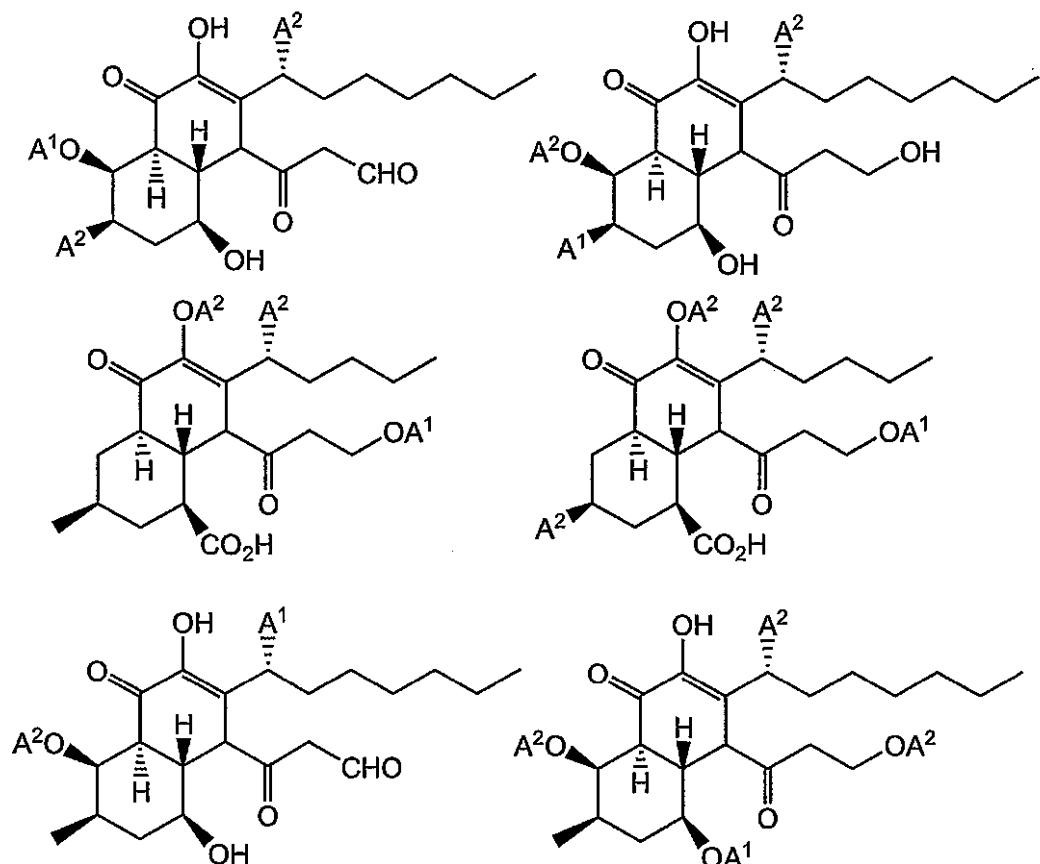
【化163】



【請求項145】

式XXXIXの構造から選択される、請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

【化164】



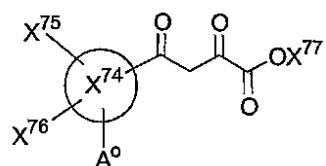
【請求項146】

前記化合物が、4 - (3 - ベンジル - フェニル) - 2 - ヒドロキシ - 4 - オキソ - ブタ - 2 - エン酸、1 - [5 - (4 - フルオロ - ベンジル) - フラン - 2 - イル] - 3 - ヒドロキシ - 3 - (1H - [1, 2, 4] トリアゾール - 3 - イル) - プロペノン、または5 - (1, 1 - ジオキソ - 116 - [1, 2] チアジナン - 2 - イル) - 8 - ヒドロキシ - キノリン - 7 - カルボン酸4 - フルオロ - ベンジルアミドであり、1個またはそれ以上の共有結合された A⁰ 基を含む、請求項2に記載の HIVインテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項147】

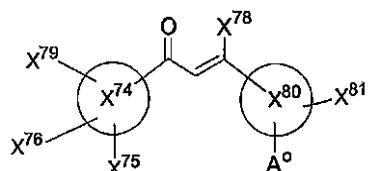
請求項2に記載の HIVインテグラーゼ阻害剤化合物であって、前記化合物は、以下ではない：

【化165】



ここで、X⁷⁴ (-X⁷⁵、-X⁷⁶) は、ベンジルで置換されたフェニルではなく、そしてX⁷⁷ は、水素ではない；または該化合物は、以下ではない。

【化166】



ここで、 X^{7-8} がヒドロキシであり、そして X^{8-0} (- X^{8-1}) が $1H-[1,2,4]$ トリアゾールであるとき、 X^{7-4} (- X^{7-5} 、 - X^{7-6} 、 - X^{7-9}) は、p-フルオロベンジルで置換されたフランではない、

化合物。

【請求項 148】

ヒトPBM Cで蓄積できるホスホネートプロドラッグを含有する、請求項1に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 149】

ヒトPBM Cにおける前記化合物または該化合物の細胞内代謝物のバイアアベイラビリティーが、ホスホネートまたはホスホネートプロドラッグを有しない該化合物の類似物と比較したとき、改善される、請求項148に記載の化合物。

【請求項 150】

ヒトPBM Cにおける前記化合物または該化合物の細胞内代謝物の細胞内半減期が、ホスホネートまたはホスホネートプロドラッグを有しない該化合物の類似物と比較したとき、改善される、請求項148に記載の化合物。

【請求項 151】

前記半減期が、少なくとも約50%改善される、請求項150に記載の化合物。

【請求項 152】

前記半減期が、少なくとも約100%改善される、請求項150に記載の化合物。

【請求項 153】

ヒトPBM Cにおける前記化合物の代謝物の細胞内半減期が、ホスホネートまたはホスホネートプロドラッグを有しない該化合物の類似物と比較したとき、改善される、請求項150に記載の化合物。

【請求項 154】

前記半減期が、少なくとも約50%改善される、請求項152に記載の化合物。

【請求項 155】

前記半減期が、少なくとも約100%改善される、請求項152に記載の化合物。

【請求項 156】

前記半減期が、約100%より大きく改善される、請求項152に記載の化合物。

【請求項 157】

請求項1に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物の治療有効量と、薬学的に受容可能な担体とを含有する、医薬組成物。

【請求項 158】

さらに、HIV阻害薬、抗感染薬および免疫調節剤から選択されるAIDS治療薬の治療有効量を含有する、請求項157に記載の医薬組成物。

【請求項 159】

前記HIV阻害薬が、HIV-プロテアーゼ阻害剤である、請求項158に記載の医薬組成物。

【請求項 160】

前記HIV阻害薬が、ヌクレオシド逆転写酵素阻害剤である、請求項159に記載の組成物。

【請求項 161】

前記HIV阻害薬が、非ヌクレオシド逆転写酵素阻害剤である、請求項159に記載の組成物。

【請求項 162】

医薬組成物を製造する方法であって、請求項1に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物と薬学的に受容可能な担体とを混ぜ合わせる工程を包含する、方法。

【請求項 163】

HIVインテグラーゼを阻害するための組成物であって、請求項1に記載のHIVインテ

グラーーゼ阻害剤化合物の治療有効量を含む、組成物。

【請求項 1 6 4】

HIVによる感染を治療するか、あるいはAIDSまたはARCを治療するための組成物であって、請求項1に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物の治療有効量を含む、組成物。

【請求項 1 6 5】

白血球に影響を与える障害を治療するための組成物であって、ホスホネートプロドラッグを含有する請求項1に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物を含む、組成物。

【請求項 1 6 6】

化合物を白血球に標的化する方法であって、該方法は、以下の工程：

所望の医薬活性および第一構造を有するHIVインテグラーゼ阻害剤化合物を選択する工程；

該第一構造の1個またはそれ以上の原子を、ホスホネート基または初期ホスホネート基を含む有機置換基で置き換えることにより、該第一構造を変性して、第二構造を有する化合物を提供する工程、

を包含する、方法。

【請求項 1 6 7】

白血球の選択性および所望の医薬活性の両方を有するHIVインテグラーゼ阻害剤化合物を製造する方法であって、該方法は、以下の工程：

ホスホネート基または前駆体ホスホネート基を含有する第一構造を有する請求項1に記載の第一分子を化学的に合成する工程であって、ここで、該第一構造は、化合物の第二構造とは異なり、該第二構造は、該第二構造の少なくとも1個の水素原子を有機置換基で置き換えることにより、該所望医薬活性を有することが知られており、該有機置換基は、ホスホネート基または初期ホスホネート基を含む、工程、

を包含する、方法。

【請求項 1 6 8】

前記第一分子が、一連の化学反応により合成され、ここで、前記第二構造の水素が、前記有機置換基で置き換えられる、請求項167に記載の方法。

【請求項 1 6 9】

前記第一分子が、前記第二構造の分子を決して含まない一連の化学反応により、合成される、請求項167に記載の方法。

【請求項 1 7 0】

白血球の内部でHIVインテグラーゼ阻害剤化合物を蓄積するための組成物であって、請求項1に記載の化合物を含有し、検体に投与されることを特徴とする、組成物。

【請求項 1 7 1】

前記検体が、HIVに感染したヒトである、請求項170に記載の組成物。

【請求項 1 7 2】

前記検体が、HIVに感染するリスクがあるヒトである、請求項170に記載の組成物。

【請求項 1 7 3】

動物におけるHIVの症状または影響を治療または予防するための組成物であって、請求項1に記載の化合物の治療有効量を含む処方物を含む、組成物。

【請求項 1 7 4】

前記化合物が、薬学的に受容可能な担体と共に処方される、請求項173に記載の組成物。

【請求項 1 7 5】

HIV感染を治療または予防する医薬を調製するための、請求項1に記載の化合物の使用。

【請求項 1 7 6】

医学的療法または診断で使用するための、請求項1に記載の化合物。

【請求項 1 7 7】

抗炎症活性を有しない、請求項 1、2 または 3 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 178】

免疫調節活性を有しない、請求項 1、2、3 および 177 のいずれかに記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 179】

代謝病に対する活性を有しない、請求項 1、2、3、177 および 178 のいずれかに記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 180】

抗癌活性を有しない、請求項 1、2、3、177、178 および 179 のいずれかに記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 181】

プリンヌクレオシドホスホリラーゼを阻害しない、請求項 1、2、3、177、178、179 および 180 のいずれかに記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 182】

抗キナーゼ活性を有しない、請求項 1、2、3、177、178、179、180 および 181 のいずれかに記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 183】

代謝拮抗物質活性を有しない、請求項 1、2、3、177、178、179、180、181 および 182 のいずれかに記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 184】

抗 - IMPDH 活性を有しない、請求項 1、2、3、177、178、179、180、181、182 および 183 のいずれかに記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 185】

ヌクレオシド活性を有しない、請求項 1、2、3、177、178、179、180、181、182、183 および 184 のいずれかに記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物。