

【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 0 7 F 9/09 (2006.01)

A 6 1 K 31/662 (2006.01)

A 6 1 P 31/18 (2006.01)

A 6 1 P 43/00 (2006.01)

C 0 7 H 17/07 (2006.01)

A 6 1 K 31/7048 (2006.01)

C 0 7 F 9/38 (2006.01)

C 0 7 F 9/40 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 F 9/09 C S P U

A 6 1 K 31/662

A 6 1 P 31/18

A 6 1 P 43/00 1 1 1

C 0 7 H 17/07

A 6 1 K 31/7048

C 0 7 F 9/38 B

C 0 7 F 9/38 C

C 0 7 F 9/40 B

C 0 7 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、H I V インテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 2】

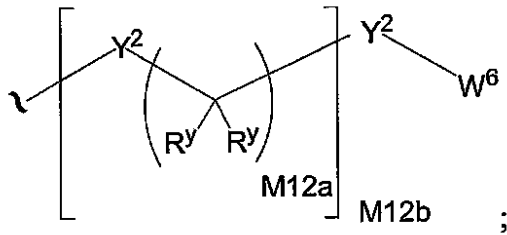
1 個またはそれ以上の共有結合された A⁰ 基を含む、請求項 1 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物；

ここで：

A⁰ は、A¹、A² または W³ である；

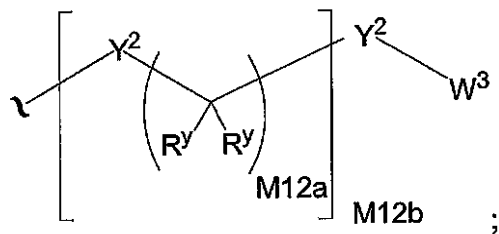
A¹ は、以下である：

【化 1】



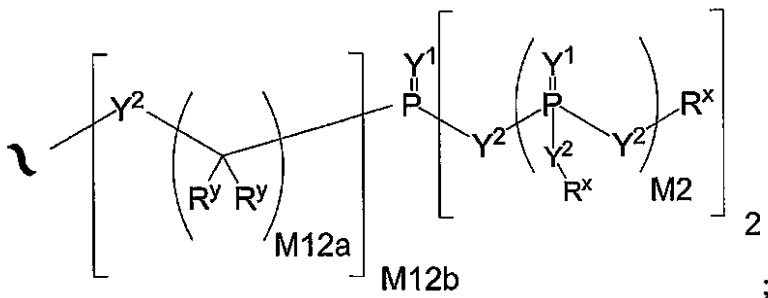
A² は、以下である：

【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

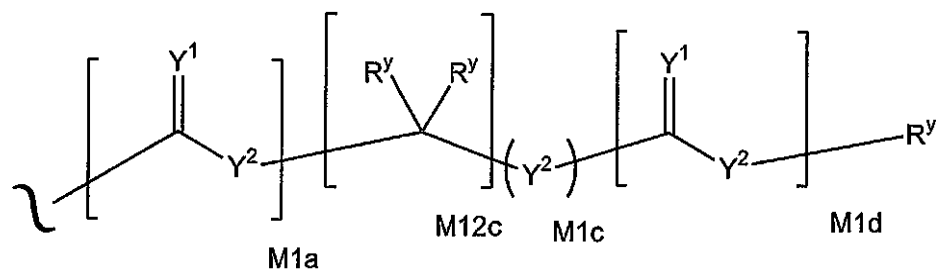
M12b は、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11 または 12 である；

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 、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ 置換アルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルキニル、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 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、 $M1a$ 、 $M1c$ 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^3 は、 W^4 または W^5 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；

W^{3a} は、 W^{4a} または W^{5a} である；

W^{4a} は、 R^{5a} 、 $-C(Y^1)R^{5a}$ 、 $-C(Y^1)W^{5a}$ 、 $-SO_2R^{5a}$ または $-SO_2W^{5a}$ 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 R^2 基で置換されている；

W^6 は、1 個、2 個または 3 個の A^3 基で別個に置換された W^{3a} である；

R^1 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；

R^2 は、別個に、 H 、 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；

R^{3a} は、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $-CN$ 、 N_3 または $-NO_2$ である；

R^{3b} は、 Y^1 である；

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

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

R^4 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；

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^{5a} 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 R^3 基で置換されている；

R は、別個に、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ 置換アルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルキニル、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ 複素環、 $C_2 \sim C_{20}$ 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、 $L-A^3$ 、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 ($-NH_2$)、アンモニウム ($-NH_3^+$)、アルキルアミノ ($-NHR$)、ジアルキルアミノ ($-NR_2$)、トリアルキルアンモニウム ($-NR_3^+$)、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ 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 ($-OSO_3R$)、スルファメート、スルホネート ($-SO_3R$)、5 員 ~ 7 員環スルタム、 $C_1 \sim C_8$ アルキルスルホネート、 $C_1 \sim C_8$ アルキルアミノ、4 - ジアルキルアミノピリジニウム、 $C_1 \sim C_8$ アルキルヒドロキシル、 $C_1 \sim C_8$ アルキルチオール、アルキルスルホン ($-SO_2R$)、アリールスルホン ($-SO_2Ar$)、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 ($-SO_2NR_2$)、アルキルスルホキシド ($-SOR$)、エステル ($-COOR$)、アミド ($-C(=O)NR_2$)、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 ($-N_3$)、ニトロ ($-NO_2$)、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ ($-OR$)、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ 置換アルキル、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ 複素環、および $C_2 \sim C_{20}$ 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、 $C_1 \sim C_{12}$ アルキレン、 $C_1 \sim C_{12}$ 置換アルキレン、 $C_2 \sim C_{12}$ アルケニレン、 $C_2 \sim C_{12}$ 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、 $-(CR_2)_nO(CR_2)_n-$ 、 $-C(=O)NH-$ 、 $-OC(=O)NH-$ 、 $-NHC(=O)NH-$ 、 $C(=O)-$ 、 $-C(=O)NH(CH_2)_n-$ または $-(CH_2CH_2O)_n-$ 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 A^0 基は、 A^1 基である、化合物。

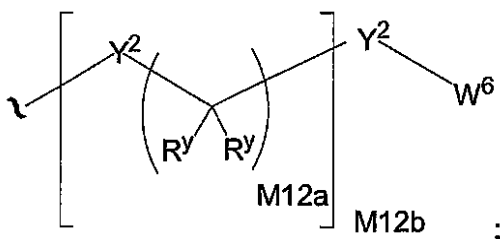
【請求項 3】

1 個またはそれ以上の共有結合された A^1 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：

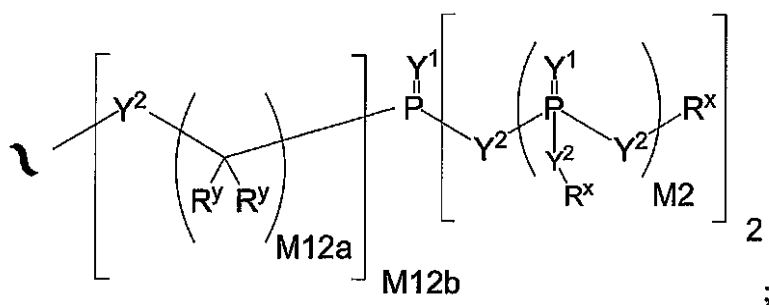
A^1 は、以下である：

【化 5】



A^3 は、以下である：

【化 6】



ここで：

Y^1 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；

Y^2 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；

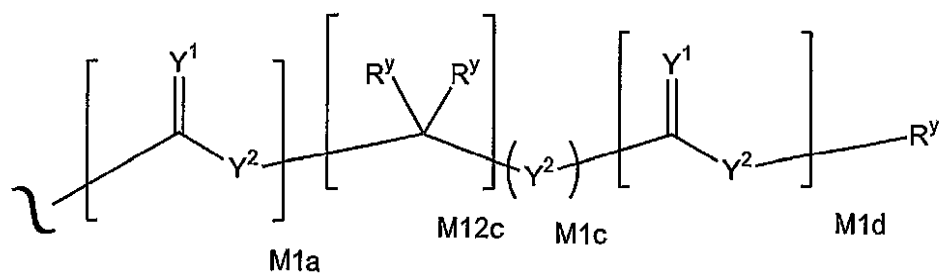
$M12a$ は、 1 、 2 、 3 、 4 、 5 、 6 、 7 、 8 、 9 、 10 、 11 または 12 である；そして

$M12b$ 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 、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ 置換アルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルキニル、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 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 、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ 置換アルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルキニル、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 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} 、 $-C(Y^1)R^{5a}$ 、 $-C(Y^1)W^{5a}$ 、 $-SO_2R^{5a}$ または $-SO_2W^{5a}$ 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 R^2 基で置換されている；

W^6 は、1 個、2 個または 3 個の A^3 基で別個に置換された W^{3a} である；

R^1 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；

R^2 は、別個に、H、 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；

R^{3a} は、F、Cl、Br、I、 $-CN$ 、 N_3 または $-NO_2$ である；

R^{3b} は、 Y^1 である；

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

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

R^4 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；

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^{5a} 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 R^3 基で置換されている；

R は、別個に、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ 置換アルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルキニル、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ 複素環、 $C_2 \sim C_{20}$ 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、 $L-A^3$ 、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 ($-NH_2$)、アンモニウム ($-NH_3^+$)、アルキルアミノ ($-NHR$)、ジアルキルアミノ ($-NR_2$)、トリアルキルアンモニウム ($-NR_3^+$)、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ 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 ($-OSO_3R$)、スルファメート、スルホネート ($-SO_3R$)、5 員～7 員環スルタム、 $C_1 \sim C_8$ アルキルスルホネート、 $C_1 \sim C_8$ アルキルアミノ、4 - ジアルキルアミノピリジニウム、 $C_1 \sim C_8$ アルキルヒドロキシル、 $C_1 \sim C_8$ アルキルチオール、アルキルスルホン ($-SO_2R$)、アリールスルホン ($-SO_2Ar$)、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 ($-SO_2NR_2$)、アルキルスルホキシド ($-SOR$)、エステル ($-COOR$)、アミド ($-C(=O)NR_2$)、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 ($-N_3$)、ニトロ ($-NO_2$)、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ ($-OR$)、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ 置換アルキル、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ 複素環、および $C_2 \sim C_{20}$ 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

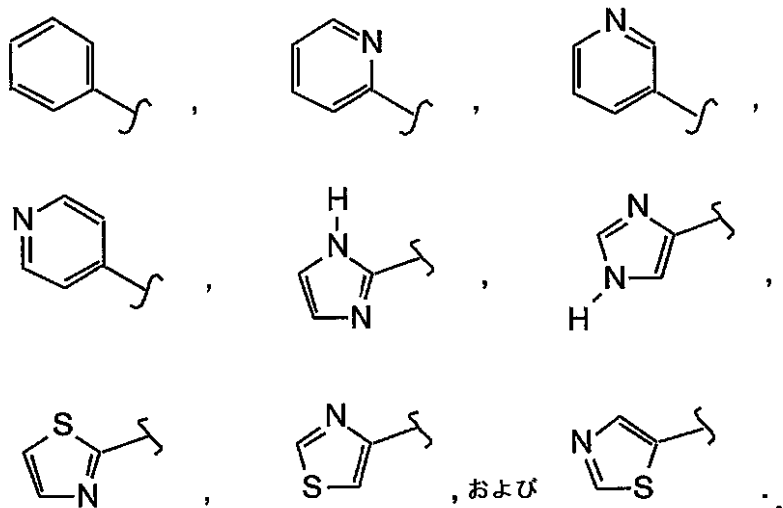
L は、結合、O、S、 $S-S$ (ジスルフィド)、 $S(=O)$ (スルホキシド)、 $S(=O)_2$ (スルホン)、 $-S(=O)_2N(R)-$ (スルホンアミド)、 NR 、 $N-OR$ 、 $C_1 \sim C_{12}$ アルキレン、 $C_1 \sim C_{12}$ 置換アルキレン、 $C_2 \sim C_{12}$ アルケニレン、C

$C_2 \sim C_{12}$ 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、 $-(CR_2)_nO(CR_2)_n-$ 、 $-C(=O)NH-$ 、 $-OC(=O)NH-$ 、 $-NHC(=O)NH-$ 、 $C(=O)$ 、 $-C(=O)NH(CH_2)_n-$ または $-(CH_2CH_2O)_n-$ 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：

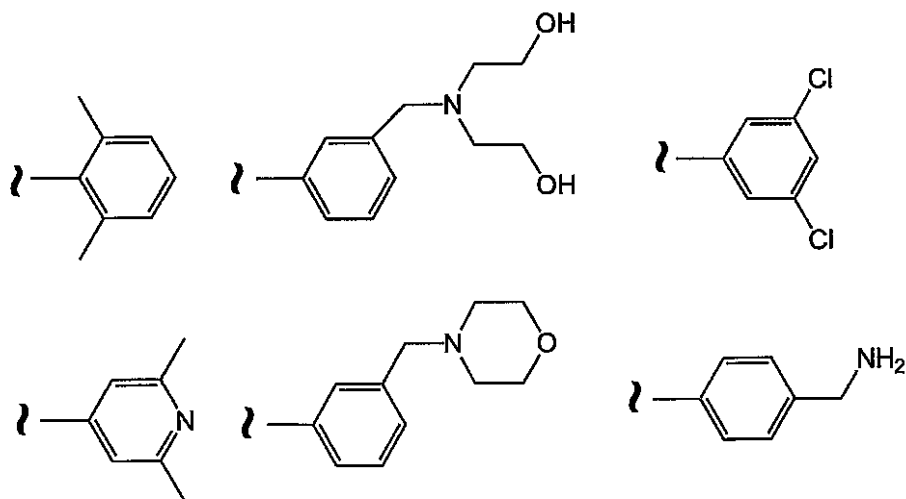
【化 8】



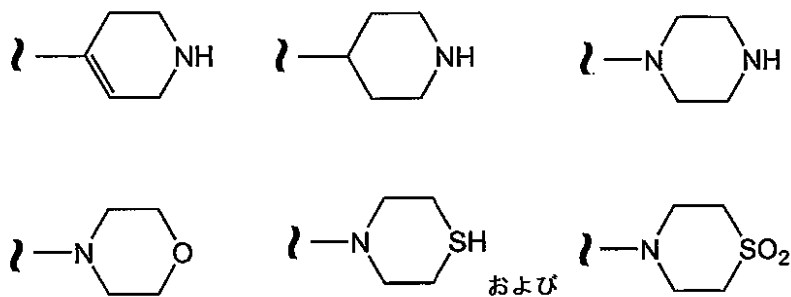
【請求項 5】

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】



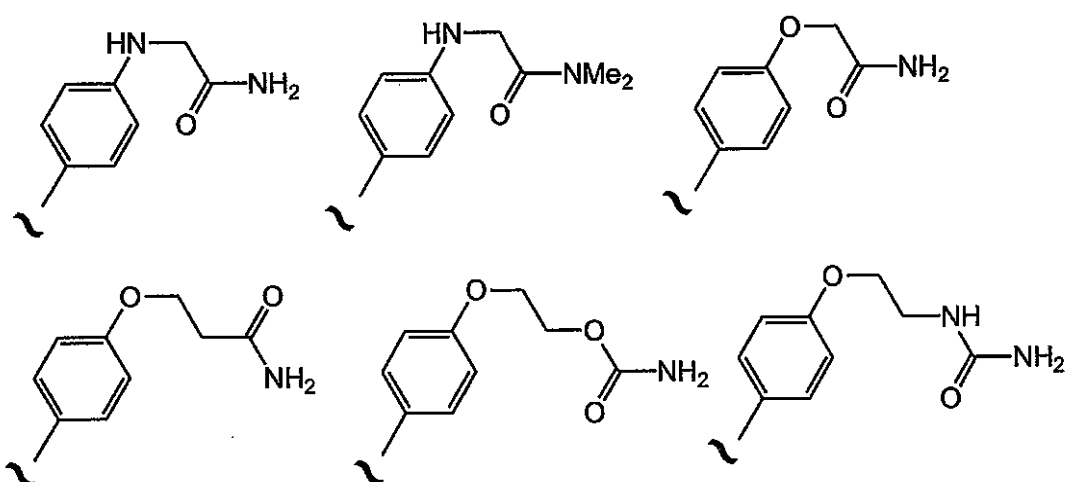
【化 1 0】



【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：

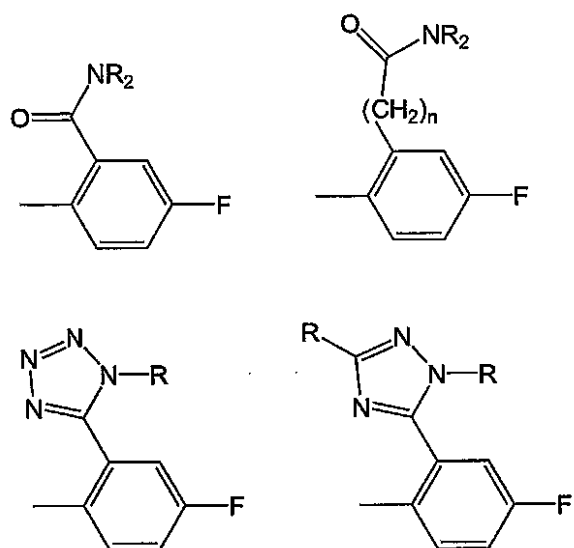
【化 1 1】



【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 1 2】

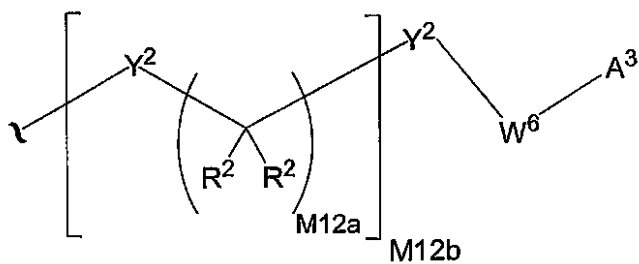


ここで、 n は、1 ~ 6 である、
化合物。

【請求項 8】

A¹ 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：

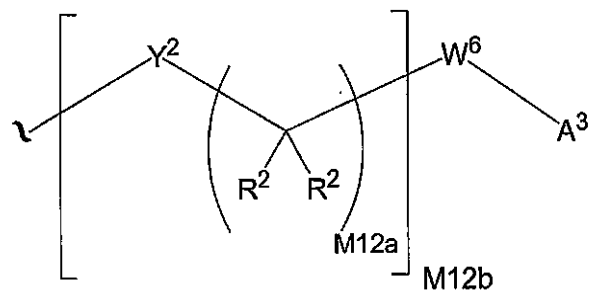
【化 1 3】



【請求項 9】

A¹ が、次式である、請求項 8 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

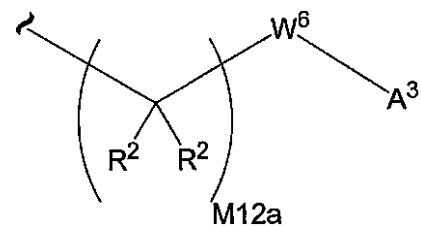
【化 1 4】



【請求項 10】

A¹ が、次式である、請求項 9 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

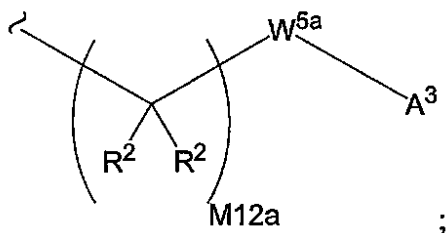
【化 1 5】



【請求項 11】

A¹ が、次式である、請求項 10 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 1 6】

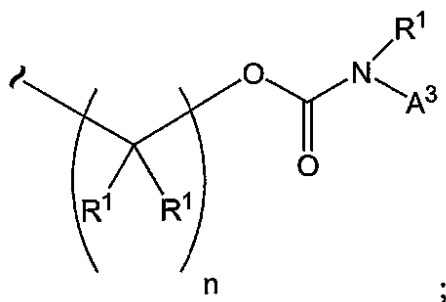


ここで、W^{5 a} は、炭素環または複素環であり、そして W^{5 a} は、別個に、0 個または 1 個の R² 基で置換されている、化合物。

【請求項 12】

A¹ 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 1 7】

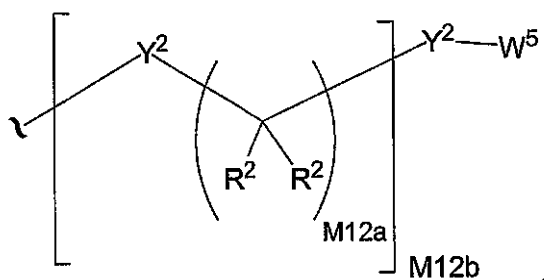


ここで、 n は、1 ~ 18 の整数である、
化合物。

【請求項 1 3】

A^2 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 1 8】



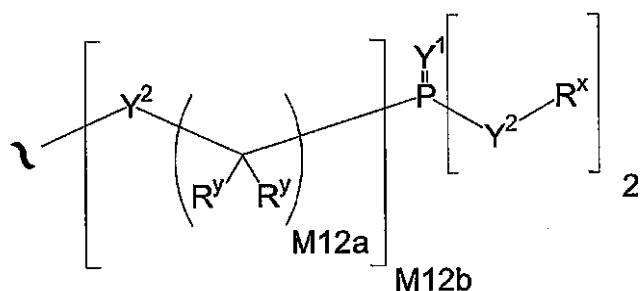
【請求項 1 4】

A^2 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 1 3 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 1 5】

A^3 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：

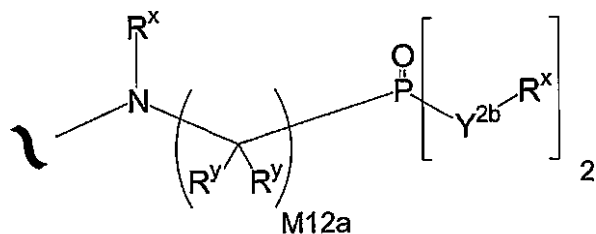
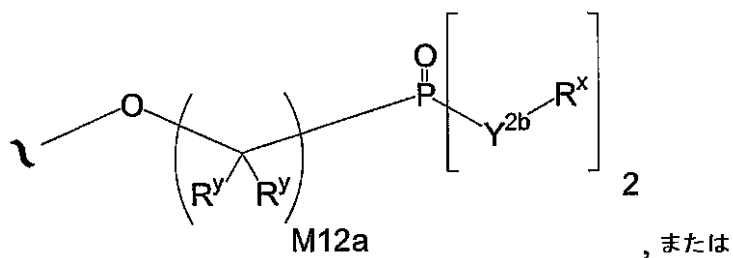
【化 1 9】



【請求項 1 6】

A^3 が、次式である、請求項 1 5 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 2 0】

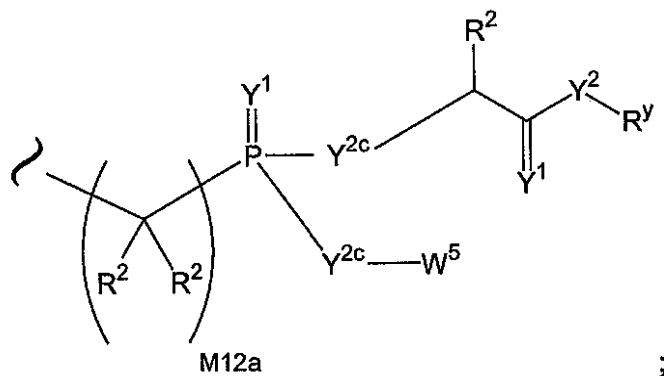


ここで、 Y^{2b} は、別個に、酸素（O）または窒素（ $N(R^x)$ ）である、化合物。

【請求項 17】

A^3 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 2 1】



ここで、 W^5 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。

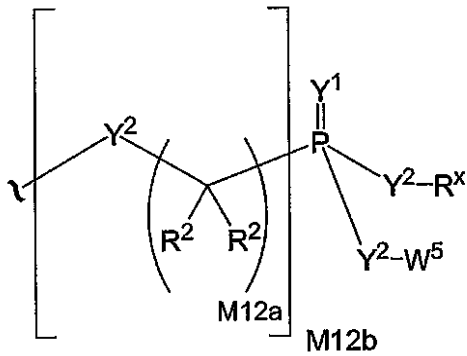
【請求項 18】

R^2 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】

A^3 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 2 2】

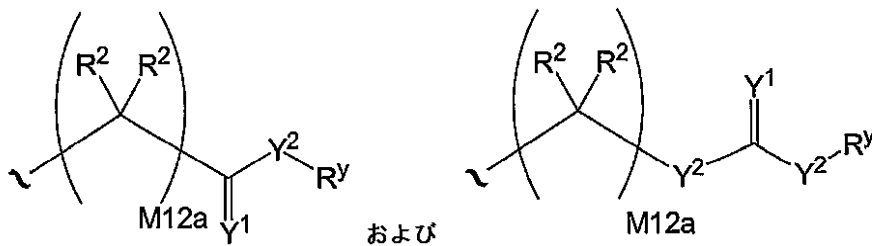


ここで、 W^5 は、フェニルまたは置換フェニルである、化合物。

【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：

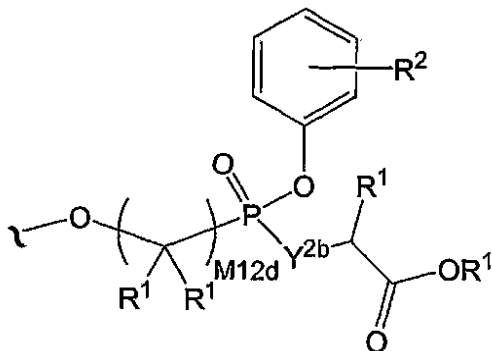
【化 2 3】



【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 2 4】

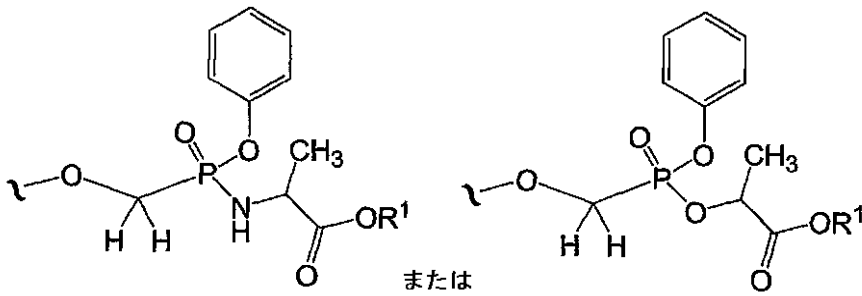


ここで、 Y^{2b} は、O または $N(R^x)$ ； $M12d$ は、1、2、3、4、5、6、7 または 8 である；そして該フェニル炭素環は、0 個～3 個の R^2 基で置換されている、化合物。

【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：

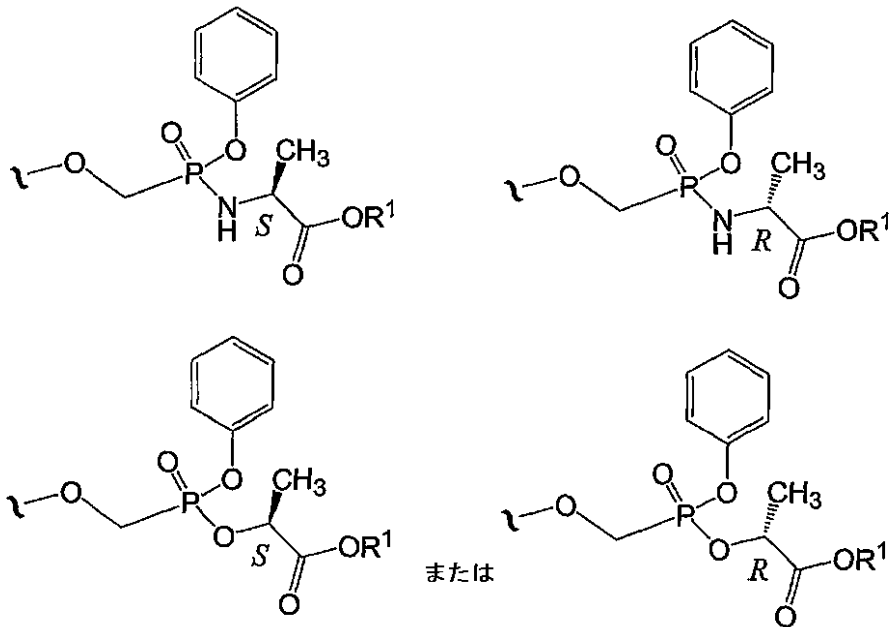
【化 2 5】



【請求項 2 3】

A³ が、次式である、請求項 2 2 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

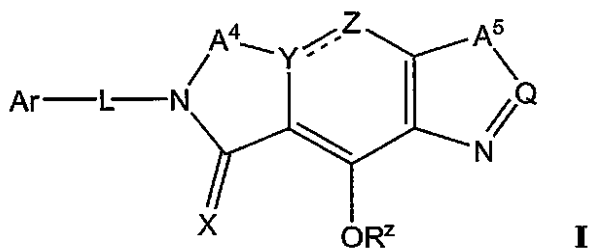
【化 2 6】



【請求項 2 4】

式 I 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】



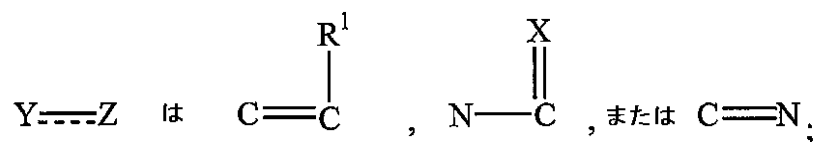
ここで：

A⁴ および A⁵ 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 A⁴ および A⁵ は、別個に、O、S、NR、C(R²)₂、CR²OR、CR²OC(=O)R、C(=O)、C(=S)、CR²SR、C(=NR)、C(R²)₂-C(R³)₂、C(R²)=C(R³)、C(R²)₂-O、NR-C(R³)₂、N=C(R³)、N=N、SO₂-NR、C(=O)C(R³)₂、C(=O)NR、C(R²)₂-C(R³)₂-C(R³)₂、C(R²)=C(R³)-C(R³)₂、C(R²)C(=O)NR、C(R²)C(=S)NR、C(R²)=N-C(R³)₂、C

(R^2) = N - NR および $N = C(R^3) - NR$ からなる群から選択される；

Q は、N、 $+NR$ または CR^4 である；

【化 28】



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

R^2 は、H；ベンジヒドリル (CHPh₂)、トリアルキシルシリル (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；

R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 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톤、-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；そして

単一炭素上で一緒になるとき、2 個の R^2 または 2 個の R^3 は、スピロ環を形成し得る；そして

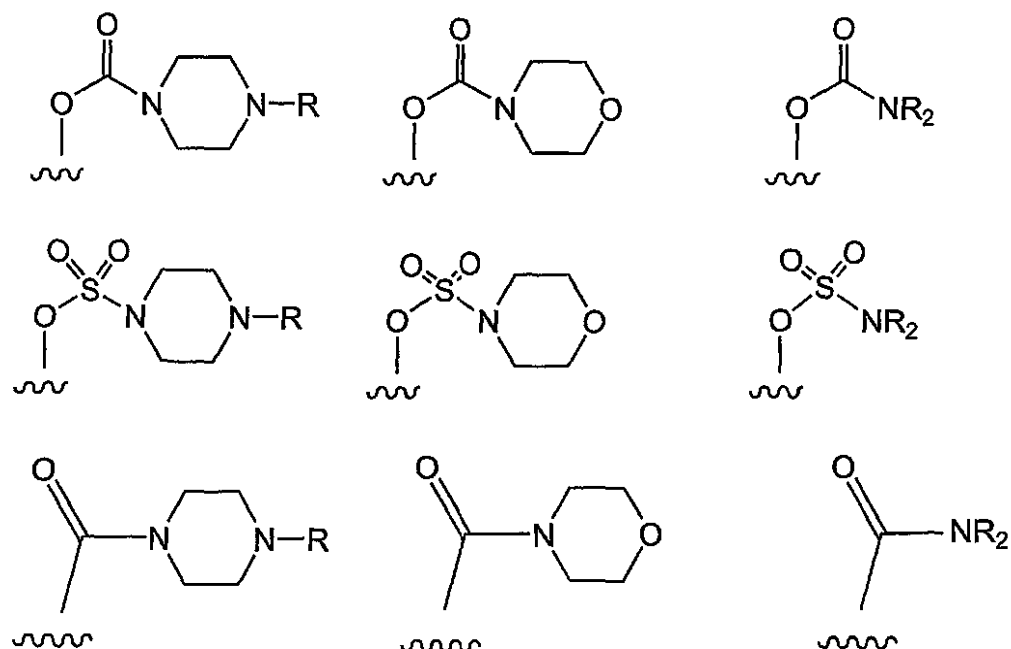
Ar は、C₃ ~ C₁₂ 炭素環、C₃ ~ C₁₂ 置換炭素環、C₆ ~ C₂₀ アリール、C₆ ~ C₂₀ 置換アリール、C₂ ~ C₂₀ ヘテロアリールまたは C₂ ~ C₂₀ 置換ヘテロアリールである；

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。

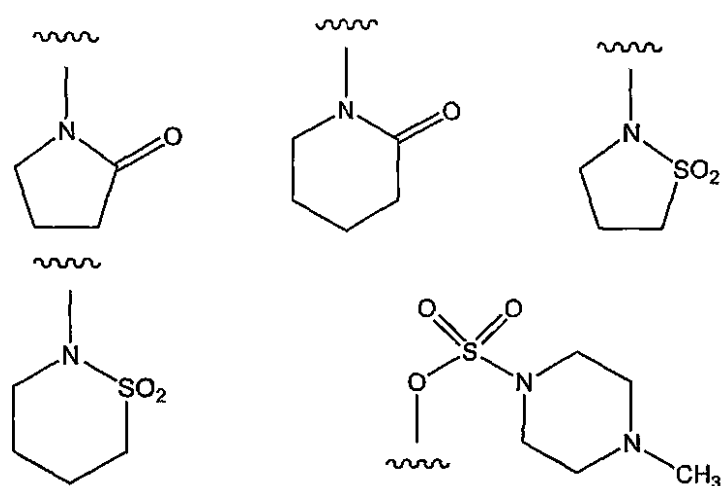
【請求項 25】

R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 が、以下の構造を含む、請求項 24 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 2 9】



【化 3 0】

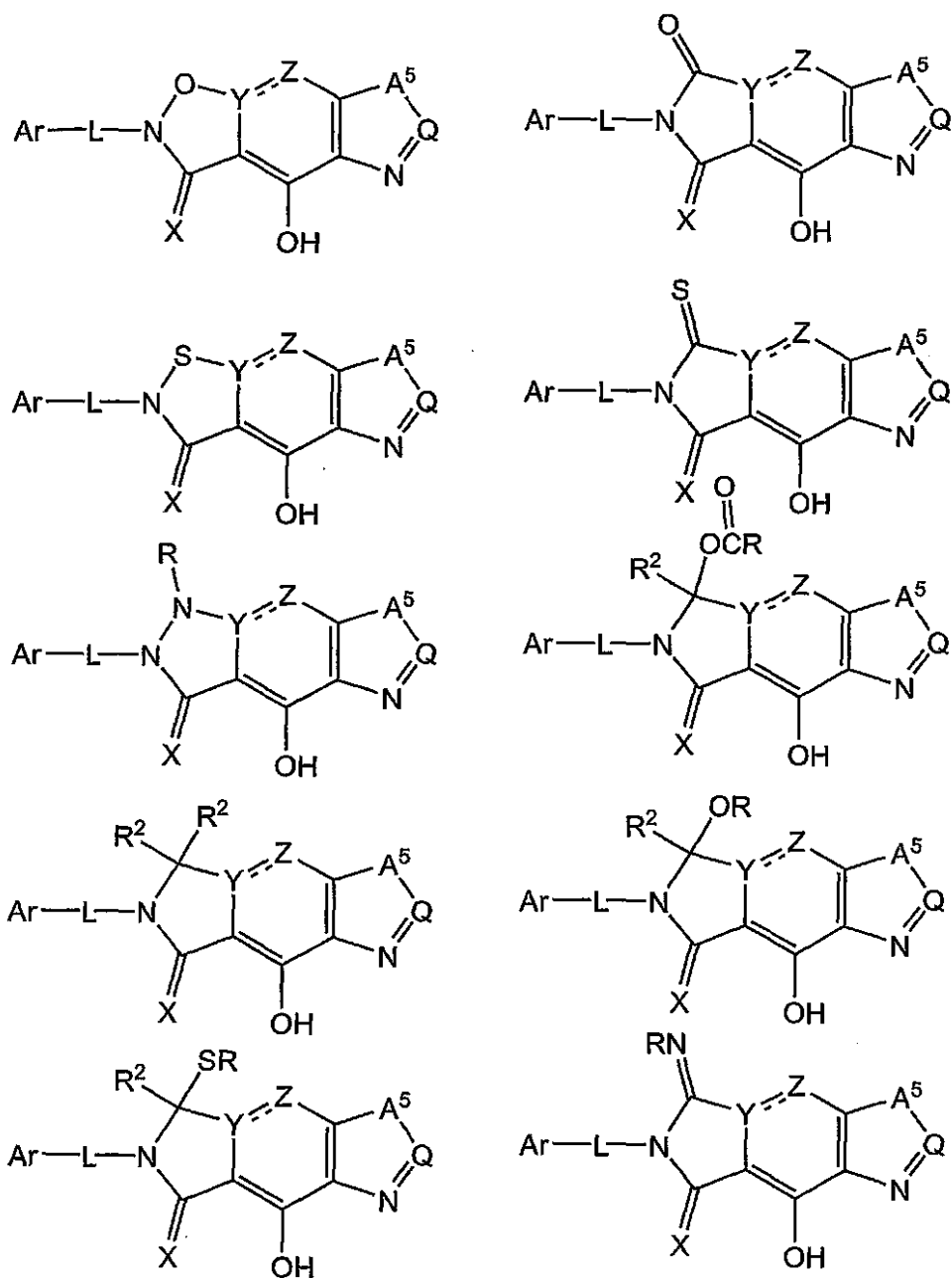


ここで、波線は、三環式構造上の共有結合点を示す；そしてこれは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

【請求項 2 6】

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：

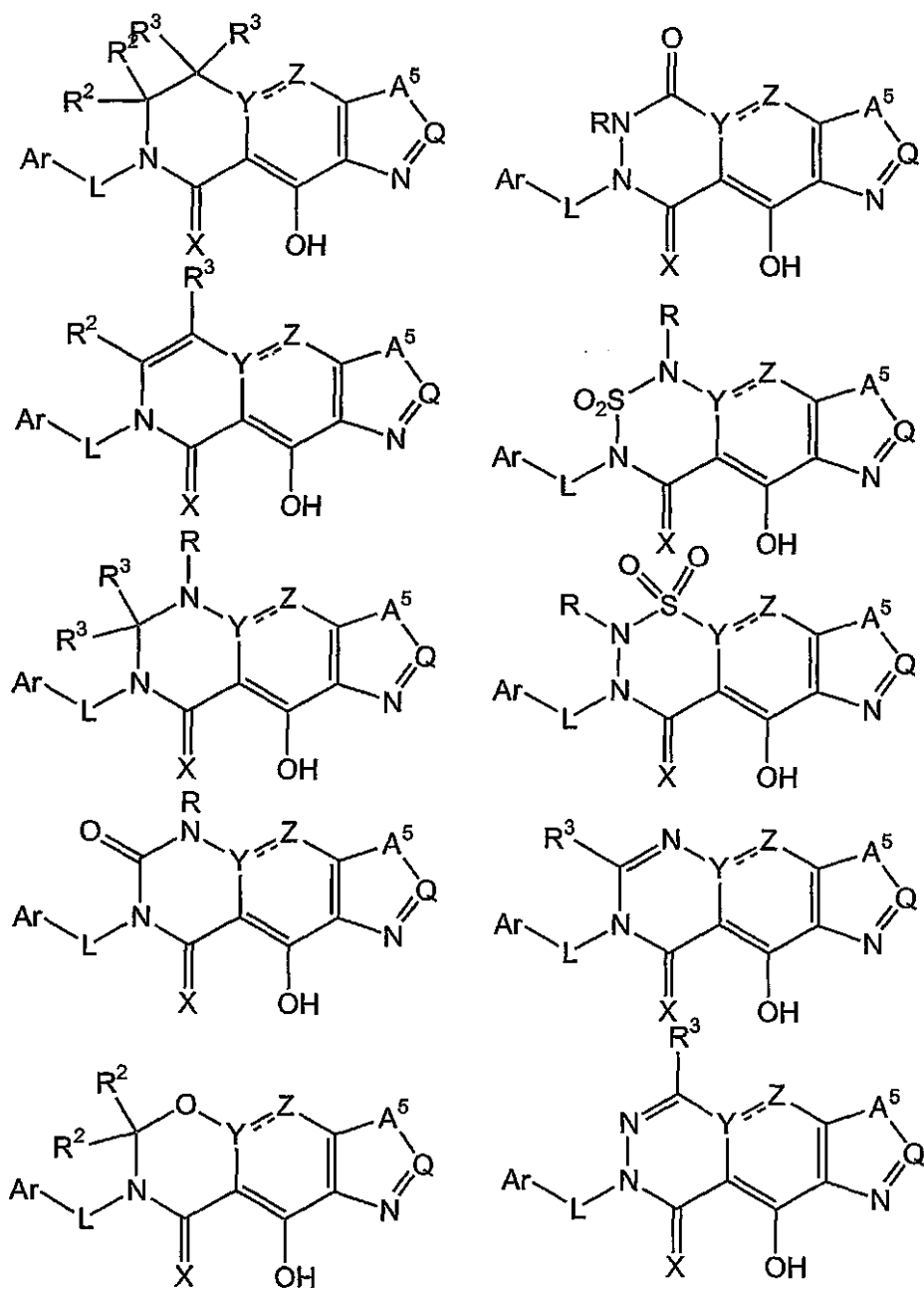
【化 3 1】



【請求項 27】

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：

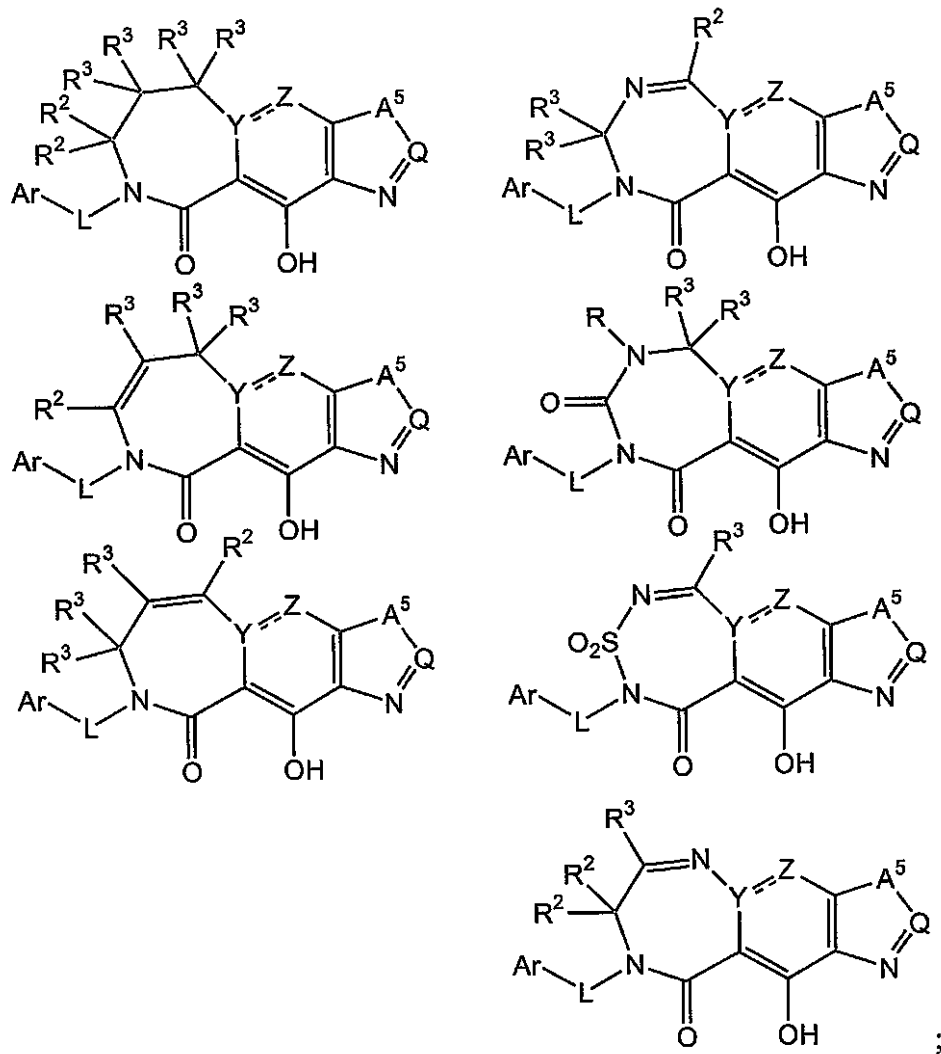
【化 3 2】



【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 H I
V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 3 3】

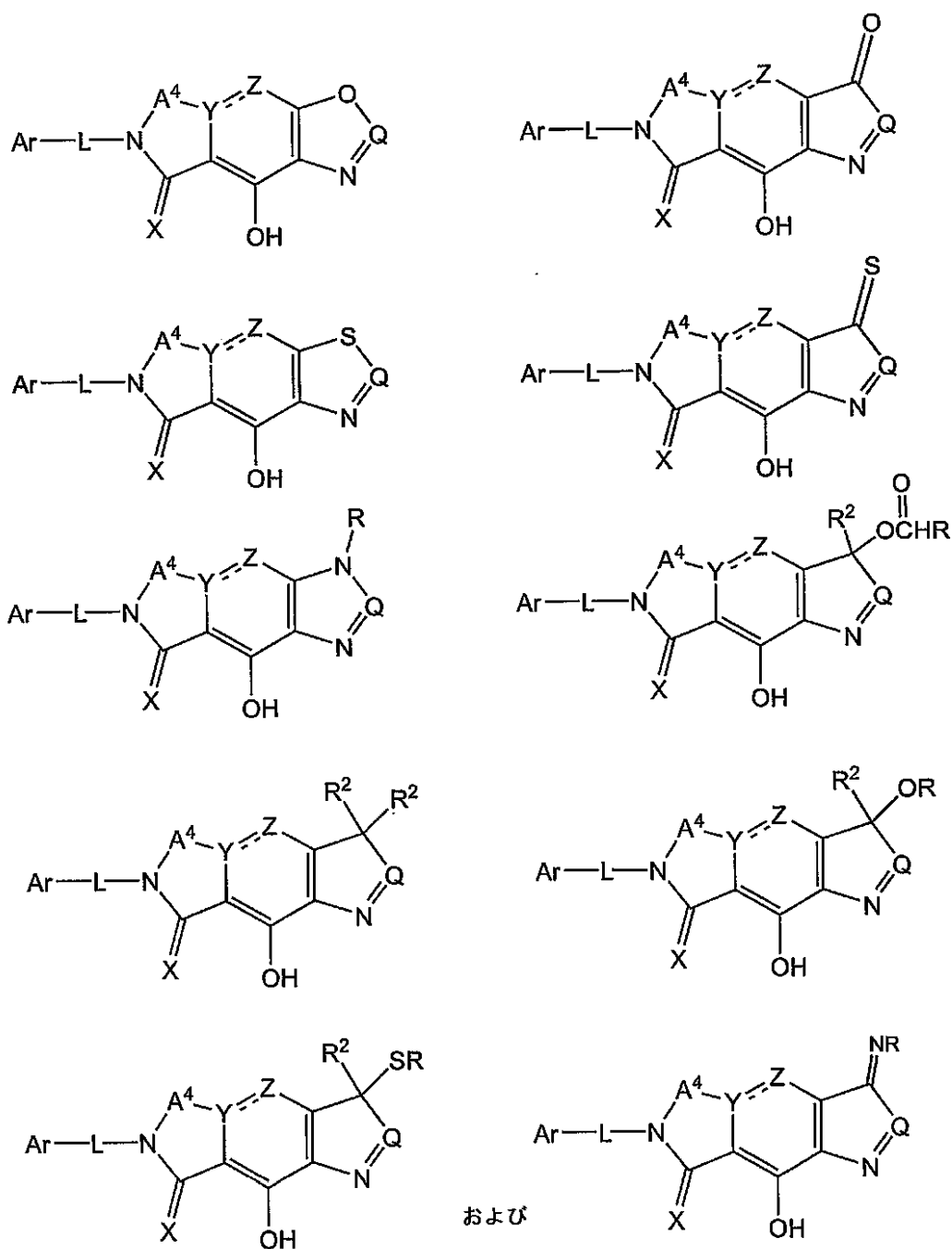


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項 29】

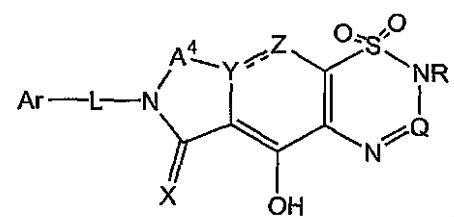
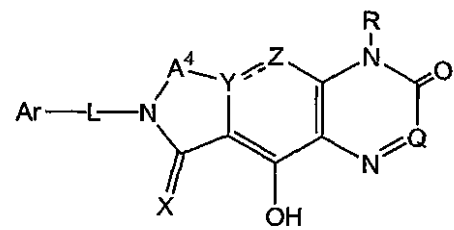
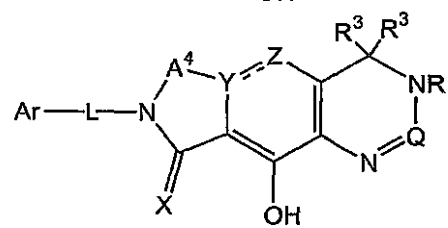
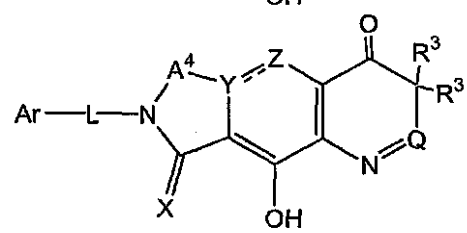
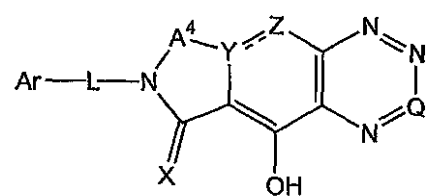
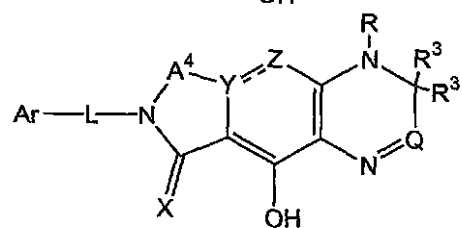
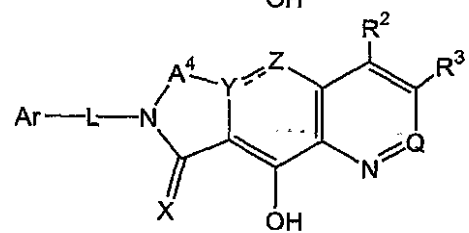
以下の構造から選択される、請求項 24 に記載の式 I の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 3 4】



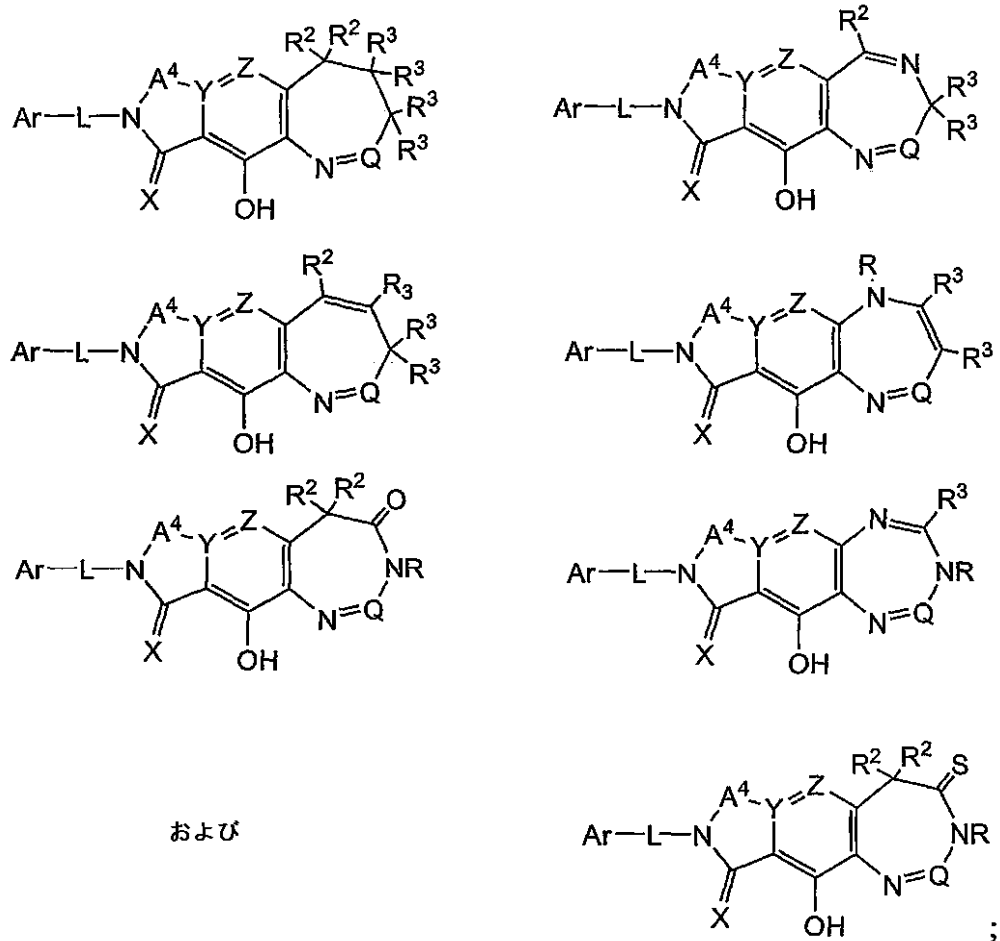
【請求項 30】

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：



前記化合物が、次式を有する、請求項 24 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 3 6】

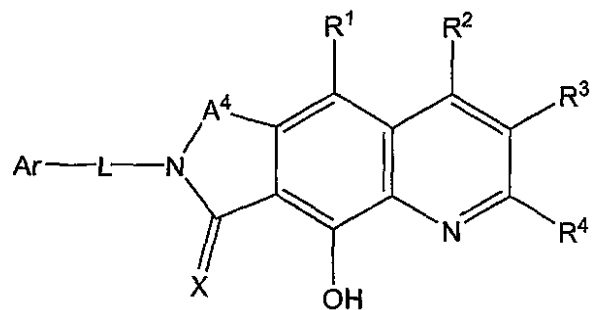


これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

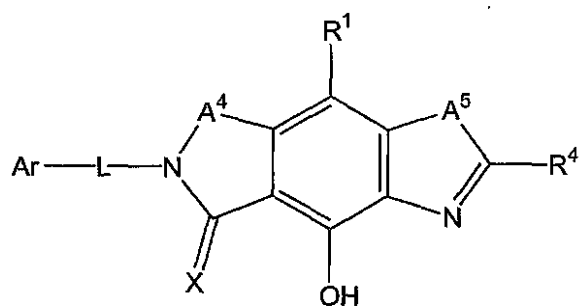
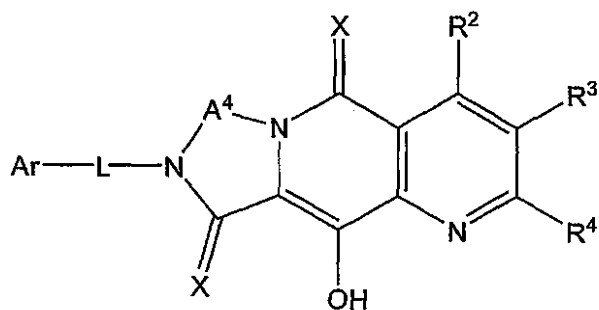
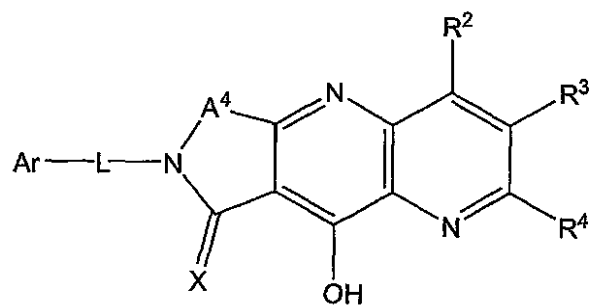
【請求項 3 2】

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 7】



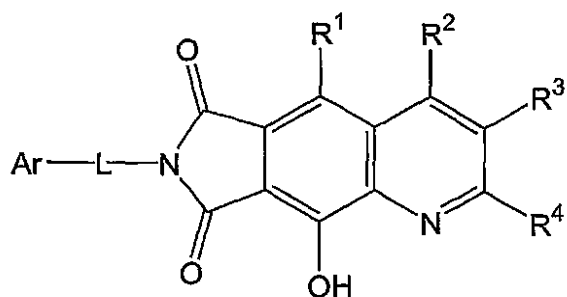
【化 3 8】



【請求項 3 3】

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：

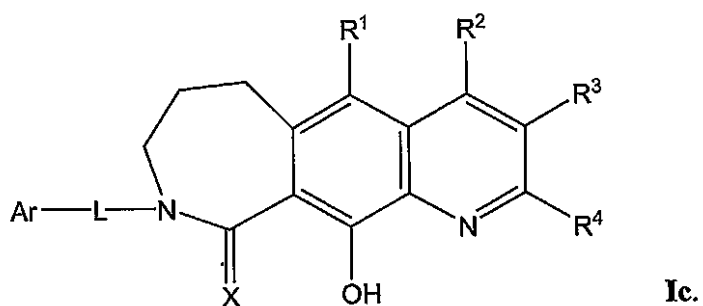
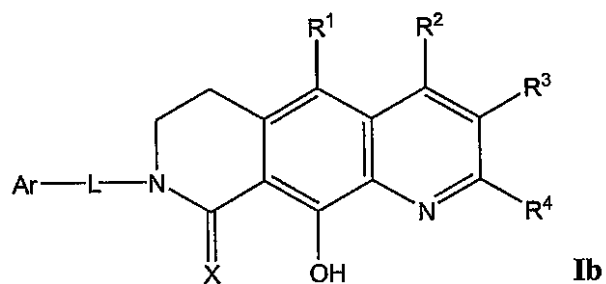
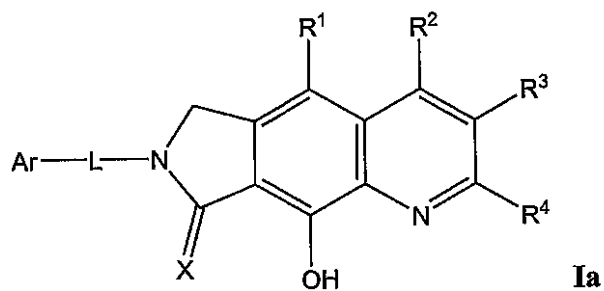
【化 3 9】



【請求項 3 4】

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：

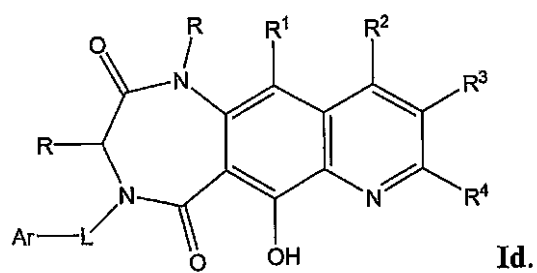
【化 4 0】



【請求項 3 5】

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：

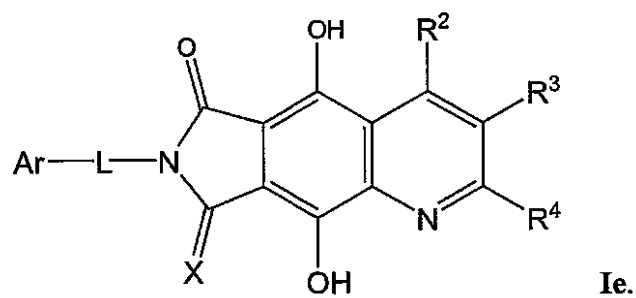
【化 4 1】



【請求項 3 6】

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：

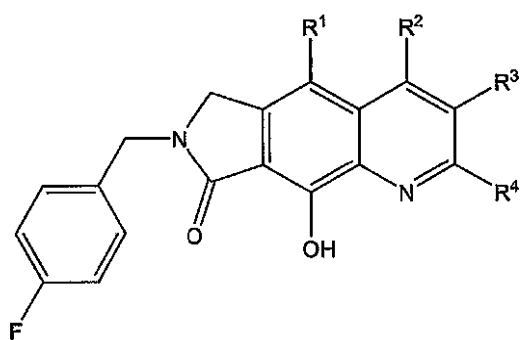
【化 4 2】



【請求項 3 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 HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

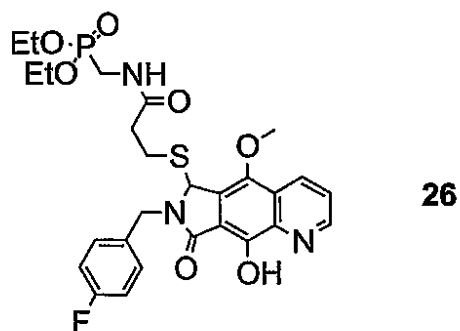
【化 4 3】



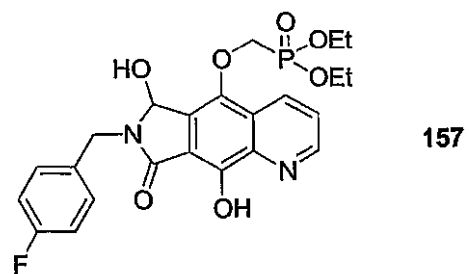
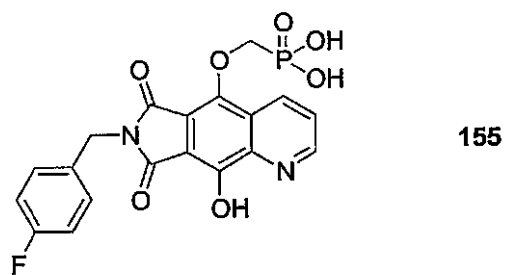
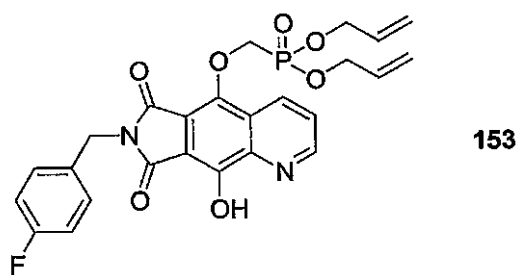
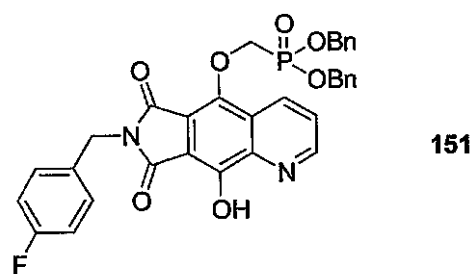
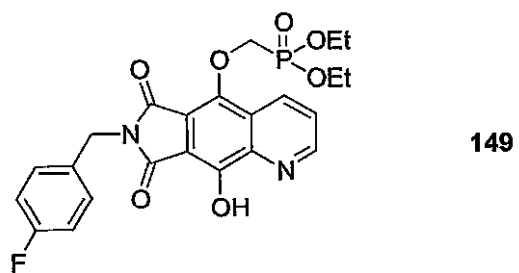
【請求項 3 8】

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：

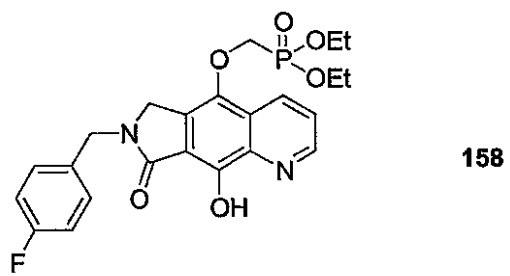
【化 4 4】



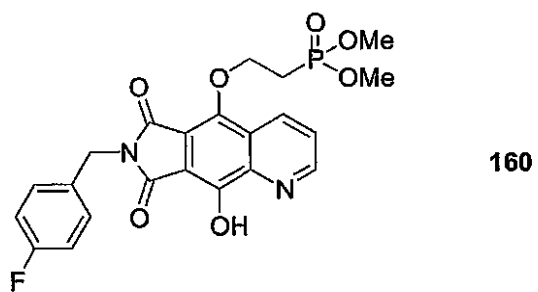
【化 4 5】



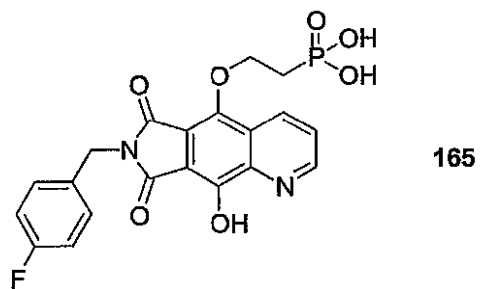
【化 4 6】



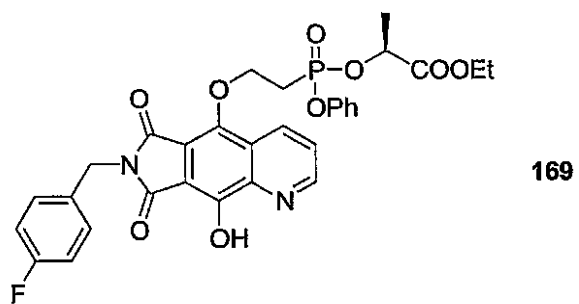
158



160

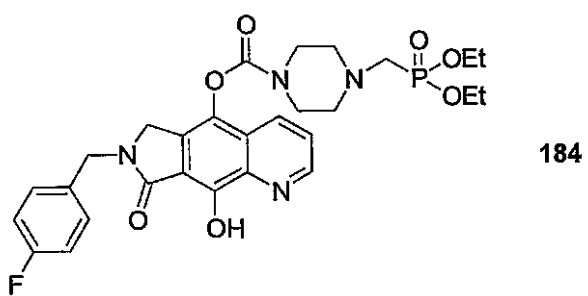
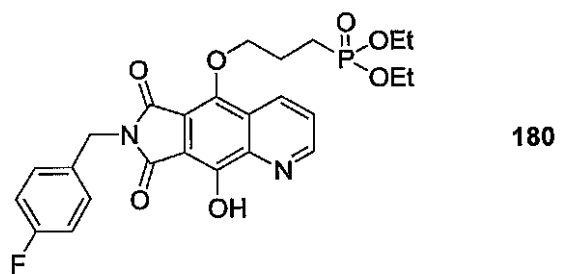
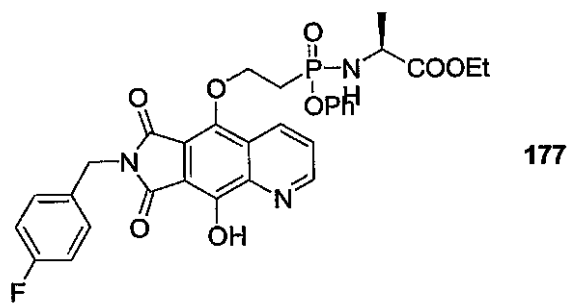
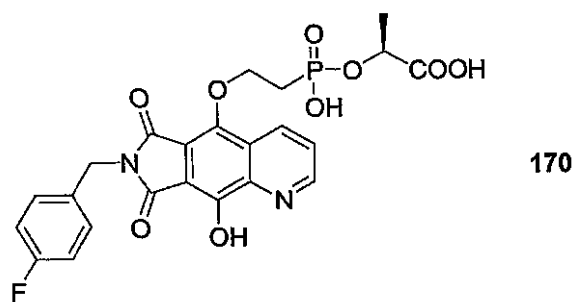


165

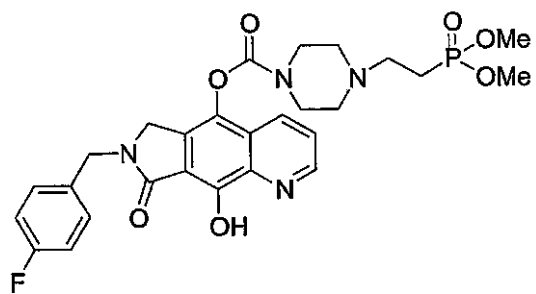


169

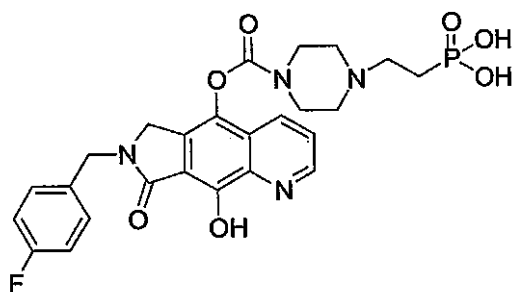
【化 4 7】



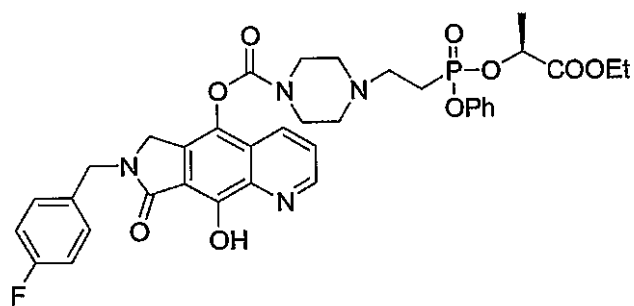
【化 4 8】



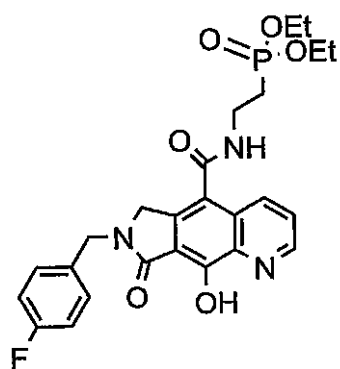
189



190

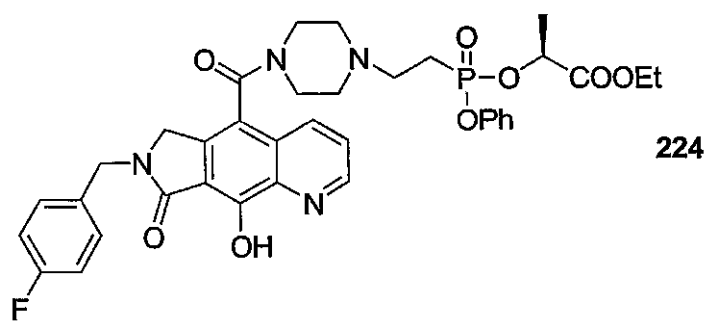
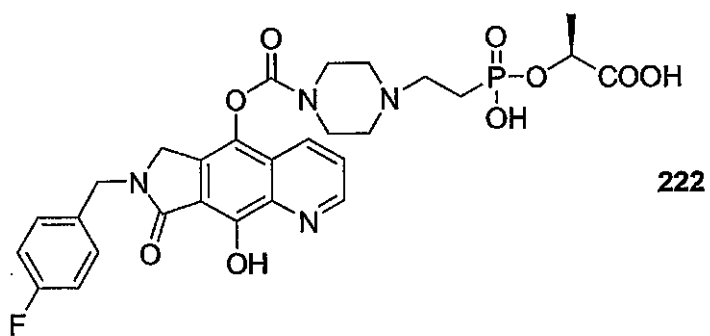
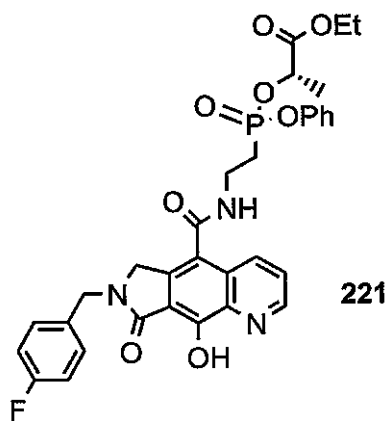
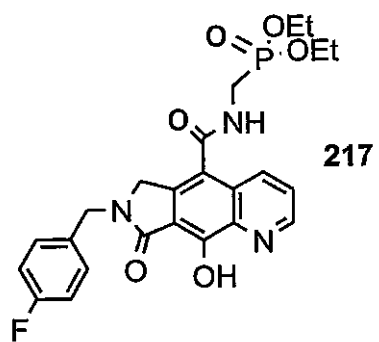


194

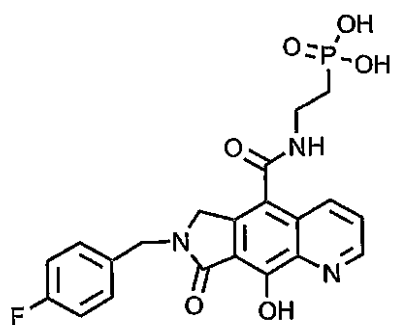
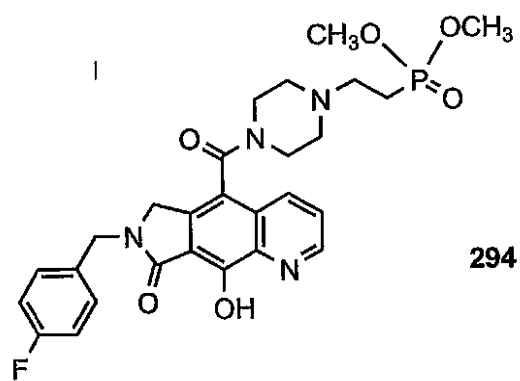
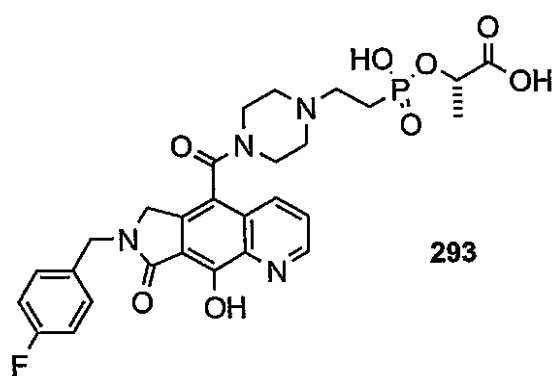
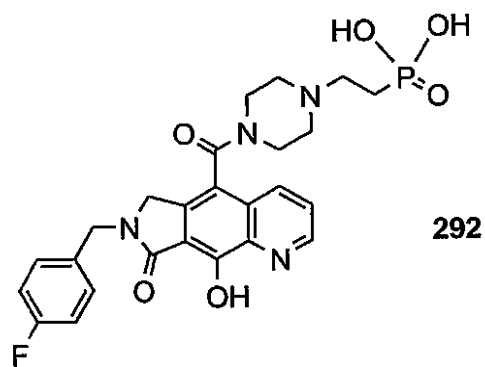


215

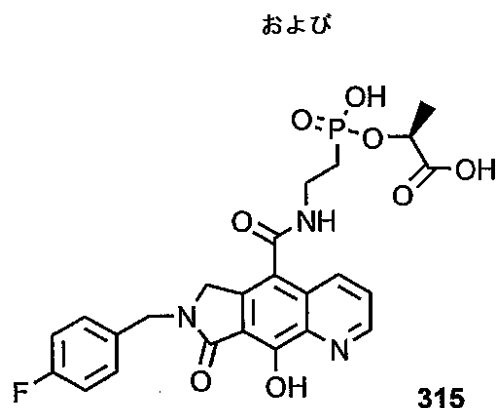
【化 4 9】



【化 5 0】



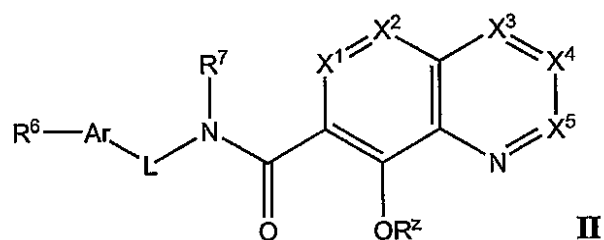
【化 5 1】



【請求項 3 9】

式 I I から選択される、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 2】



ここで：

X^1 は、 CR^1 、 NR または N である；

X^2 は、 CR^2 、 NR または N である；

X^3 は、 CR^3 、 NR または N である；

X^4 は、 CR^4 、 NR または N である；

X^5 は、 CR^5 、 NR または N である；

X^1 、 X^2 、 X^3 、 X^4 および X^5 の少なくとも 1 個は、 NR または N である；

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 および R^7 は、別個に、 H 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 OH 、 $-NH_2$ 、 $-NH_3^+$ 、 $-NHR$ 、 $-NR_2$ 、 $-NR_3^+$ 、 $C_1 \sim C_8$ 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、 $C_1 \sim C_8$ アルキルスルホネート、 $C_1 \sim C_8$ アルキルアミノ、4 - ジアルキルアミノピリジニウム、 $C_1 \sim C_8$ アルキルヒドロキシル、 $C_1 \sim C_8$ アルキルチオール、 $-SO_2R$ 、 $-SO_2Ar$ 、 $-SOAr$ 、 $-SR$ 、 $-SAr$ 、 $-SO_2NR_2$ (スルホンアミド)、 $-SOR$ 、 $-CO_2R$ 、 $-C(=O)NR_2$ 、5 員～7 員環ラクタム、5 員～7 員環ラクトン、 $-CN$ 、 $-N_3$ 、 $-NO_2$ 、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_8$ トリフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ 置換アルキル、 $C_3 \sim C_{12}$ 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、 $C_2 \sim C_{20}$ 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、 $-OC(=O)OR$ 、 $-OC(=O)NR_2$ 、 $-OC(=S)NR_2$ 、 $-OC(=O)NRNR_2$ 、 $-OC(=O)R$ 、 $-C(=O)NRNR_2$ 、 $-C(=O)R$ 、 $-OSO_2NR_2$ (スルファメート)、 $-NRSO_2R$ 、 $-NRC(=S)NR_2$ 、 $-OSO_2R$ (スルホネート)、 $-P(=O)(OR)_2$ 、 $-P(=O)(OR)(NR_2)$ 、 $-P(=O)(NR_2)_2$ 、 $-P(=S)(OR)_2$ 、 $-P(=S)(OR)(NR_2)$ 、 $-P(=S)(NR_2)_2$ 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；

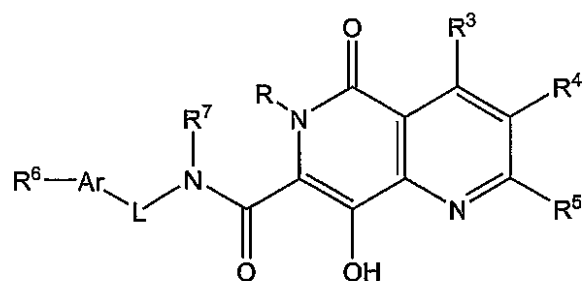
R 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 および R^7 の少なくとも 1 個は、ホスホネー

R² は、H、保護基またはプロドラッグ部分である；

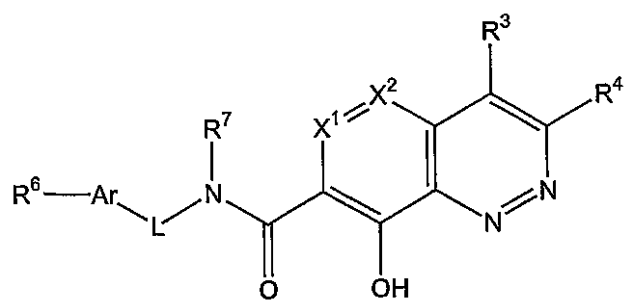
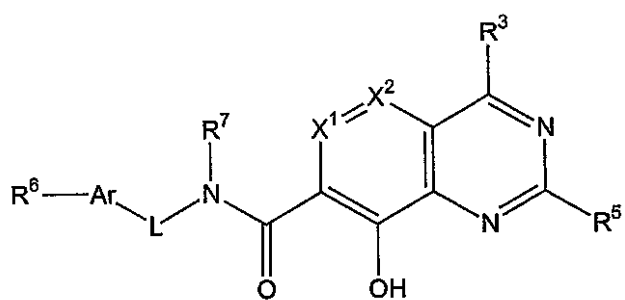
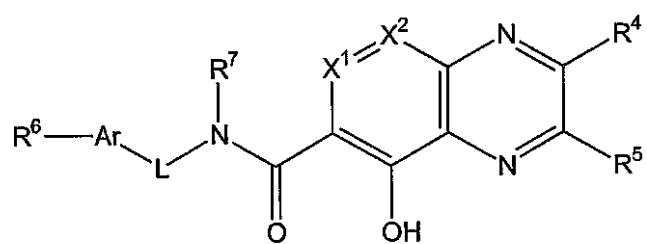
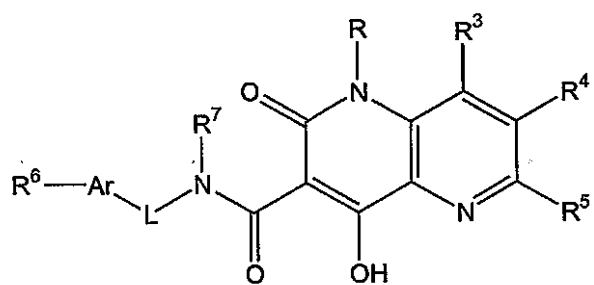
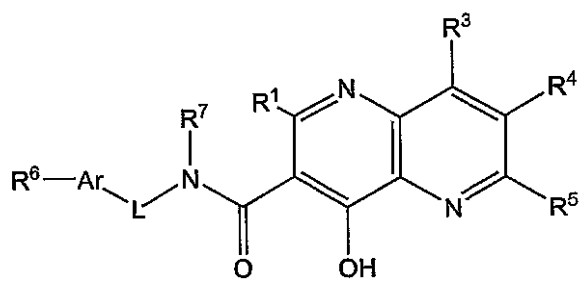
A r は、L と 1 個またはそれ以上の R ⁶ とに共有結合されている；そして

化合物。

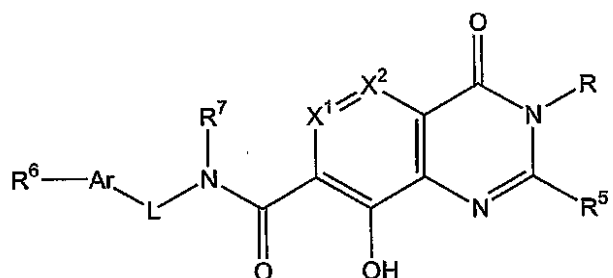
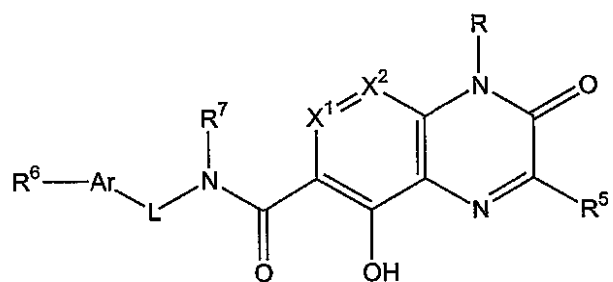
以下の構造から選択される、請求項 39 に記載の式 I I の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

R6-Ar-L-N(R7)-C(=O)-c1c(O)c2nc(R2)c(R3)c(R4)c(R5)n2c1

【化 5 4】



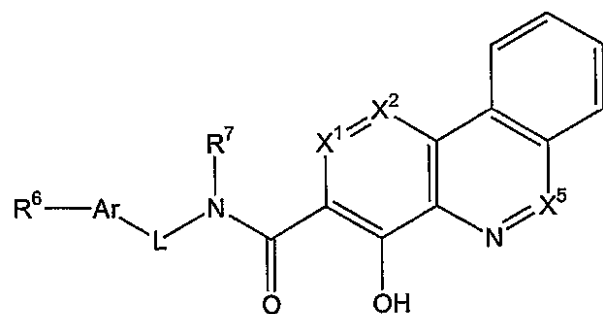
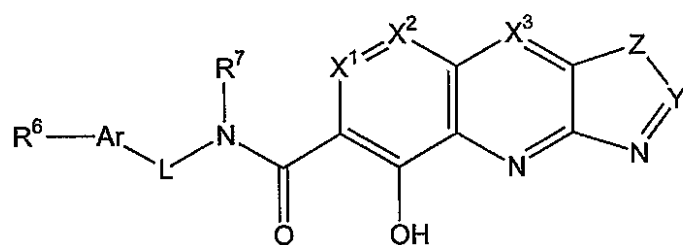
【化 5 5】



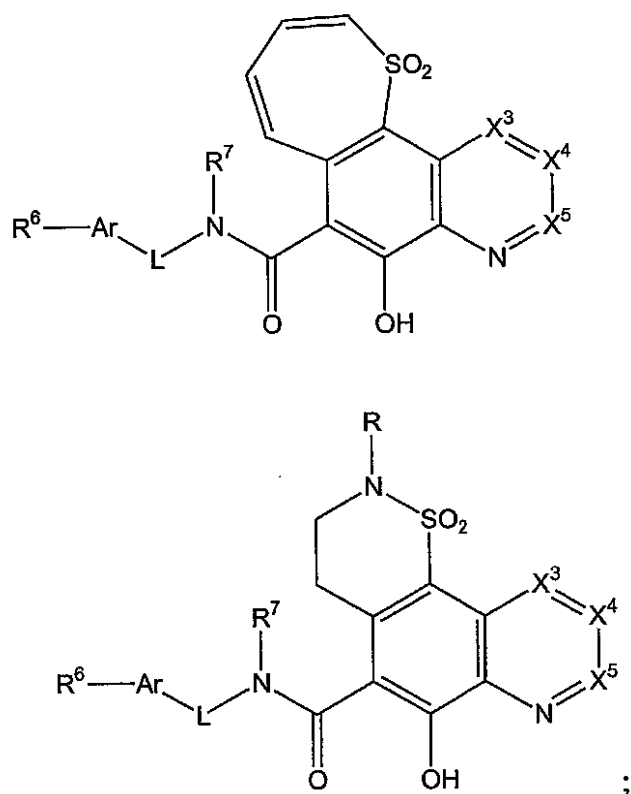
【請求項 4 1】

前記化合物が、次式を有する請求項 3 9 に記載の式 I 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 5 6】



【化 5 7】

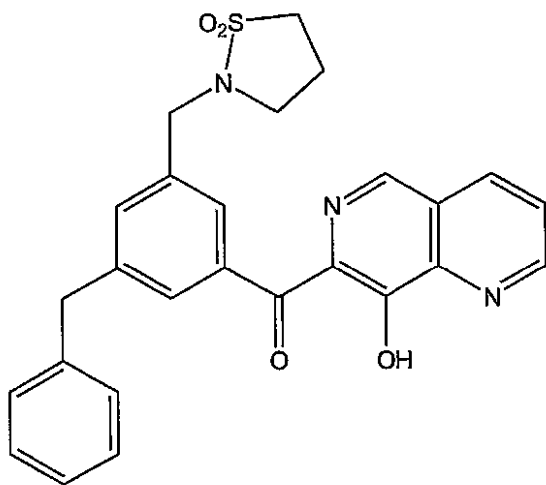


これは、1個またはそれ以上の共有結合されたA⁰基で置換されている、化合物。

【請求項 4 2】

前記化合物が、次式を有する請求項 3 9 に記載の式 I 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 5 8】



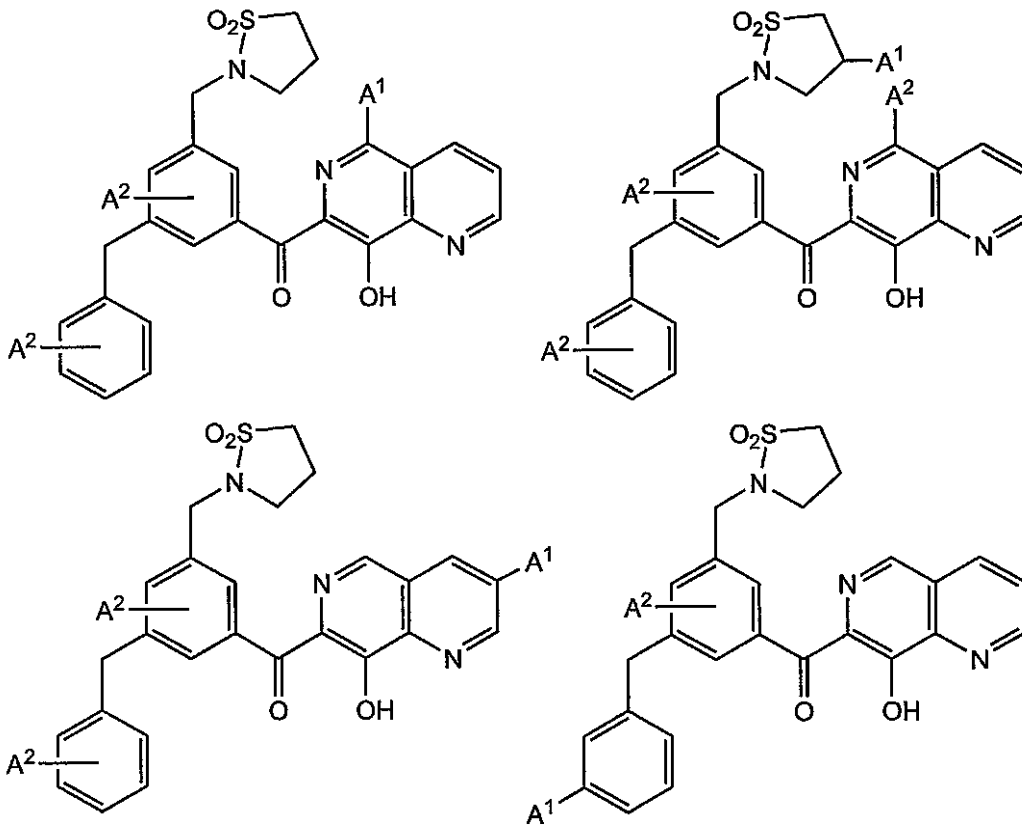
ここで、少なくとも1個のアリールまたはスルタム環炭素原子は、A¹基で置換されており、そして任意のアリールまたはスルタム環炭素原子は、A²基で置換され得る、化合物。

【請求項 4 3】

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

合物：

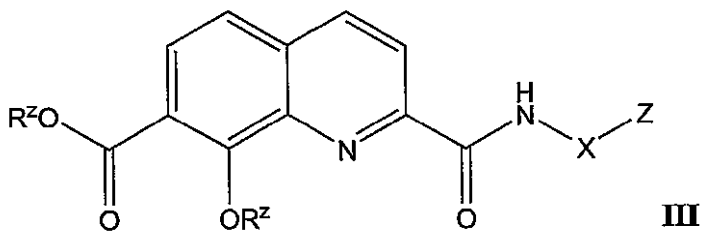
【化 5 9】



【請求項 4 4】

式 I 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 6 0】



ここで、

R^2 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

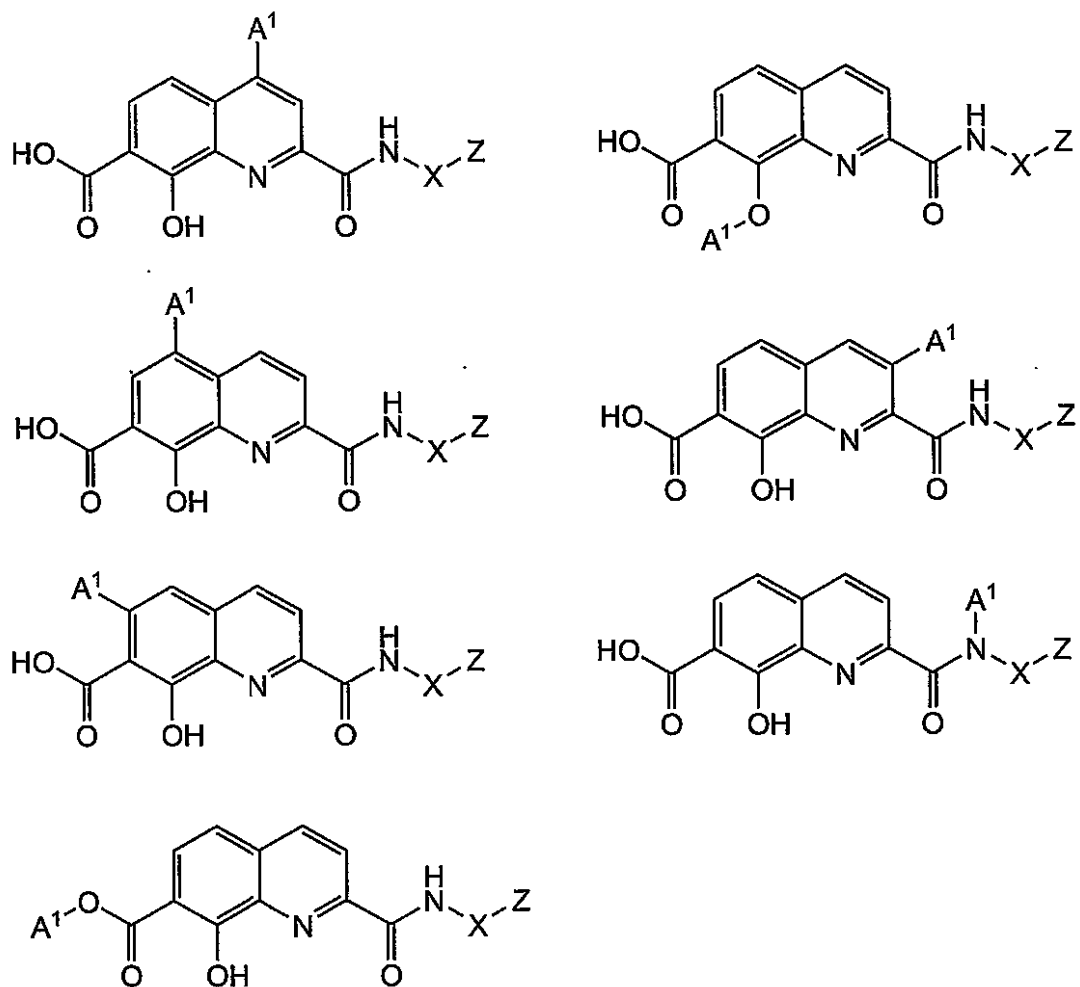
Z は、 $C_3 \sim C_{12}$ 炭素環、 $C_3 \sim C_{12}$ 置換炭素環、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリールまたは $C_2 \sim C_{20}$ 置換ヘテロアリールである；

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 4 5】

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

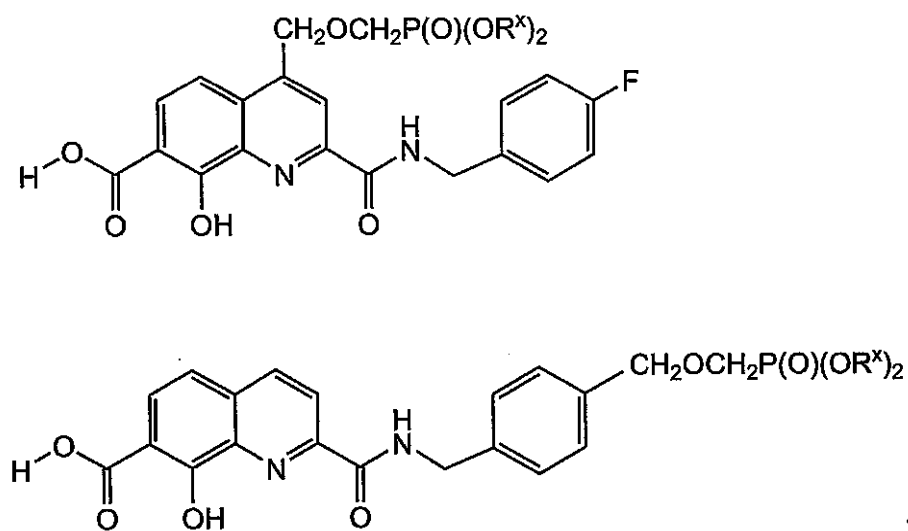
【化 6 1】



【請求項 4 6】

以下の構造から選択される、請求項 4 5 に記載の式 I I I の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

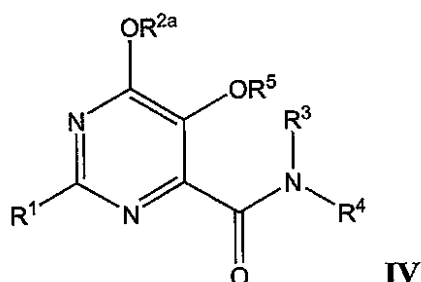
【化 6 2】



【請求項 4 7】

式 I V 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 6 3】



ここで：

R^1 は、H、F、Cl、Br、I、OH、OR、アミノ ($-NH_2$)、アンモニウム ($-NH_3^+$)、アルキルアミノ ($-NHR$)、ジアルキルアミノ ($-NR_2$)、トリアルキルアンモニウム ($-NR_3^+$)、カルボキシル ($-CO_2H$)、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 ($-SO_2R$)、アリールスルホン ($-SO_2Ar$)、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 ($-SO_2NR_2$)、アルキルスルホキシド ($-SOR$)、ホルミル ($-CHO$)、エステル ($-CO_2R$)、アミド ($-C(=O)NR_2$)、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 ($-N_3$)、ニトロ ($-NO_2$)、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ 置換アルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルキニル、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ 複素環、および $C_2 \sim C_{20}$ 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 ($-SO_2R$)、アリールスルホン ($-SO_2Ar$)、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 ($-SO_2NR_2$)、アルキルスルホキシド ($-SOR$)、ホルミル ($-CHO$)、エステル ($-CO_2R$)、アミド ($-C(=O)NR_2$)、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 ($-N_3$)、ニトロ ($-NO_2$)、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ 置換アルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルキニル、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ 複素環、 $C_2 \sim C_{20}$ 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 ($-NH_2$)、アンモニウム ($-NH_3^+$)、アルキルアミノ ($-NHR$)、ジアルキルアミノ ($-NR_2$)、トリアルキルアンモニウム ($-NR_3^+$)、カルボキシル ($-CO_2H$)、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 ($-SO_2R$)、アリールスルホン ($-SO_2Ar$)、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 ($-SO_2NR_2$)、アルキルスルホキシド ($-SOR$)、ホルミル ($-CHO$)、エステル ($-CO_2R$)、アミド ($-C(=O)NR_2$)、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 ($-N_3$)、ニトロ ($-NO_2$)、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ 置換アルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルキニル、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ 複素環、 $C_2 \sim C_{20}$ 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、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ 置換アルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アル

ケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルキニル、 $C_6 \sim C_{20}$ 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、および $C_2 \sim C_{20}$ 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^{2a} 、 R^3 、 R^4 または R^5 は、別個に、 A^1 、 A^3 または $L-A^3$ を含む；そして

R 、 R^1 、 R^{2a} 、 R^3 、 R^4 および R^5 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 A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項 48】

R^1 、 R^{2a} 、 R^3 、 R^4 および R^5 が、別個に、 $-C(=S)NR_2$ 、 $-C(=O)OR$ 、 $-C(=O)NR_2$ 、 $-C(=O)NRNR_2$ 、 $-C(=O)R$ 、 $-SO_2NR_2$ 、 $-NRSO_2R$ 、 $-NRC(=S)NR_2$ 、 $-SR$ 、 $-S(O)R$ 、 $-SO_2R$ 、 $-SO_2R$ 、 $-P(=O)(OR)_2$ 、 $-P(=O)(OR)(NR_2)$ 、 $-P(=O)(NR_2)_2$ 、 $-P(=S)(OR)_2$ 、 $-P(=S)(OR)(NR_2)_2$ および $-P(=S)(NR_2)_2$ 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 A^0 基で置換されている；

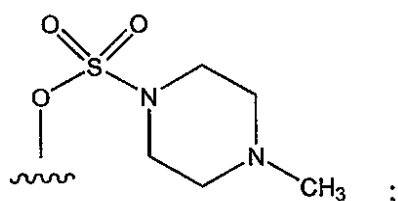
それらのプロドラッグ置換形状を含む、

請求項 47 に記載の式 I 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 49】

R^1 、 R^{2a} 、 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 47 に記載の式 I 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：

【化 64】



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 50】

R^1 、 R^{2a} 、 R^3 、 R^4 および R^5 が、別個に、 $-OC(=S)NR_2$ 、 $-OC(=O)OR$ 、 $-OC(=O)NR_2$ 、 $-OC(=O)NRNR_2$ 、 $-OC(=O)R$ 、 $-OP(=O)(OR)_2$ 、 $-OP(=O)(OR)(NR_2)$ 、 $-OP(=O)(NR_2)_2$ 、 $-OP(=S)(OR)_2$ 、 $-OP(=S)(OR)(NR_2)$ および $-OP(=S)(NR_2)_2$ からなる群から選択され、

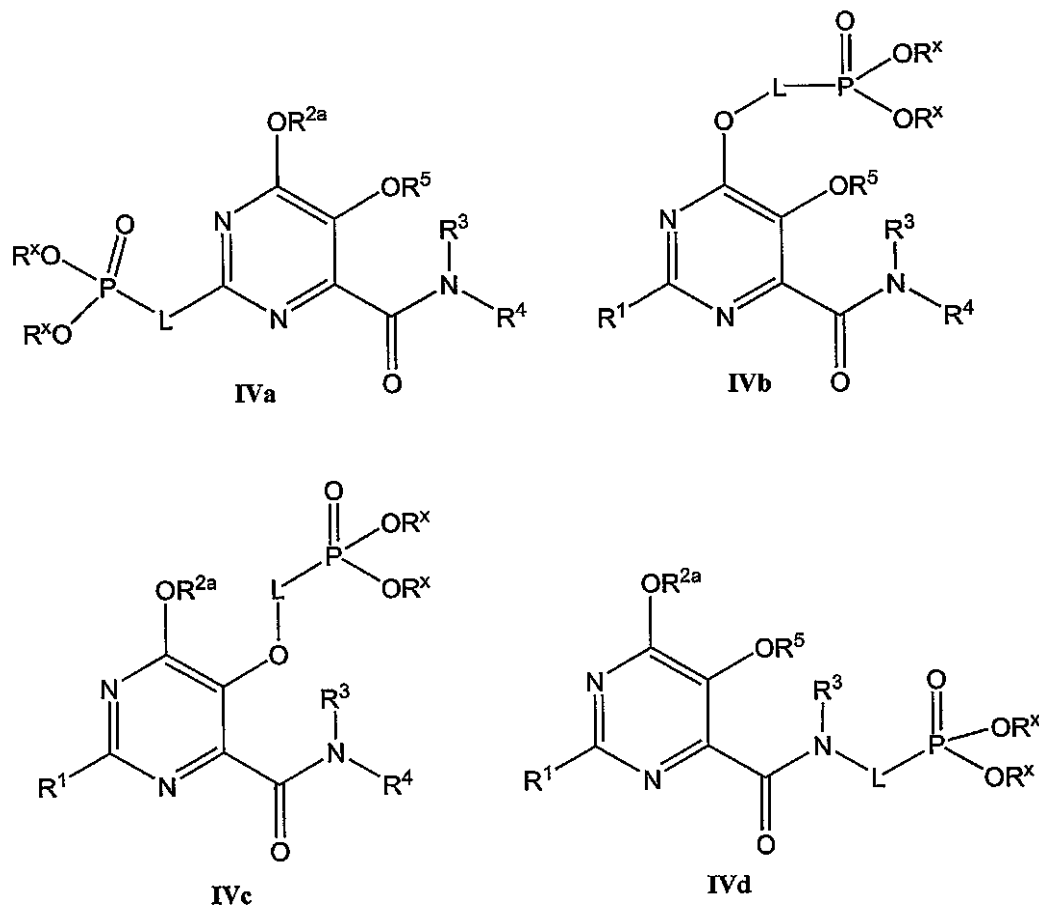
該化合物が、1 個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている；

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 I 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 51】

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

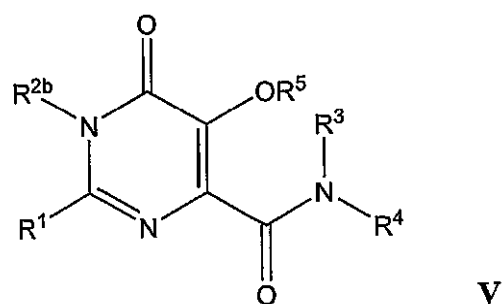
【化 6 5】



【請求項 5 2】

式 I V 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 6 6】



ここで：

R^1 は、H、F、Cl、Br、I、OH、OR、アミノ ($-NH_2$)、アンモニウム ($-NH_3^+$)、アルキルアミノ ($-NHR$)、ジアルキルアミノ ($-NR_2$)、トリアルキルアンモニウム ($-NR_3^+$)、カルボキシル ($-CO_2H$)、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 ($-SO_2R$)、アリールスルホン ($-SO_2Ar$)、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 ($-SO_2NR_2$)、アルキルスルホキシド ($-SOR$)、ホルミル ($-CHO$)、エステル ($-CO_2R$)、アミド ($-C(=O)NR_2$)、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 ($-N_3$)、ニトロ ($-NO_2$)、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ 置換アルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルケニル、 $C_2 \sim$

C_{1-8} アルキニル、 C_{2-8} 置換アルキニル、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 C_{2-20} 複素環、および C_{2-20} 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 ($-SO_2R$)、アリールスルホン ($-SO_2Ar$)、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 ($-SO_2NR_2$)、アルキルスルホキシド ($-SOR$)、ホルミル ($-CHO$)、エステル ($-CO_2R$)、アミド ($-C(=O)NR_2$)、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 ($-N_3$)、ニトロ ($-NO_2$)、 C_{1-8} アルキル、 C_{1-8} 置換アルキル、 C_{2-8} アルケニル、 C_{2-8} 置換アルケニル、 C_{2-8} アルキニル、 C_{2-8} 置換アルキニル、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 C_{2-20} 複素環、 C_{2-20} 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 ($-NH_2$)、アンモニウム ($-NH_3^+$)、アルキルアミノ ($-NHR$)、ジアルキルアミノ ($-NR_2$)、トリアルキルアンモニウム ($-NR_3^+$)、カルボキシル ($-CO_2H$)、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 ($-SO_2R$)、アリールスルホン ($-SO_2Ar$)、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 ($-SO_2NR_2$)、アルキルスルホキシド ($-SOR$)、ホルミル ($-CHO$)、エステル ($-CO_2R$)、アミド ($-C(=O)NR_2$)、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 ($-N_3$)、ニトロ ($-NO_2$)、 C_{1-8} アルキル、 C_{1-8} 置換アルキル、 C_{2-8} アルケニル、 C_{2-8} 置換アルケニル、 C_{2-8} アルキニル、 C_{2-8} 置換アルキニル、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 C_{2-20} 複素環、 C_{2-20} 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_{1-8} アルキル、 C_{1-8} 置換アルキル、 C_{2-8} アルケニル、 C_{2-8} 置換アルケニル、 C_{2-8} アルキニル、 C_{2-8} 置換アルキニル、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 C_{2-20} ヘテロアリール、および C_{2-20} 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、 A^1 、 A^3 または $L-A^3$ 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、 A^0 基を含む、化合物。

【請求項53】

R^1 、 R^{2b} 、 R^3 、 R^4 および R^5 が、別個に、 $-C(=S)NR_2$ 、 $-C(=O)OR$ 、 $-C(=O)NR_2$ 、 $-C(=O)NRNR_2$ 、 $-C(=O)R$ 、 $-SO_2NR_2$ 、 $-NRSO_2R$ 、 $-NRC(=S)NR_2$ 、 $-SR$ 、 $-S(O)R$ 、 $-SO_2R$ 、 $-SO_2R$ 、 $-P(=O)(OR)_2$ 、 $-P(=O)(OR)(NR_2)$ 、 $-P(=O)(NR_2)_2$ 、 $-P(=S)(OR)_2$ 、 $-P(=S)(OR)(NR_2)_2$ および $-P(=S)(NR_2)_2$ 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 A^0 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、

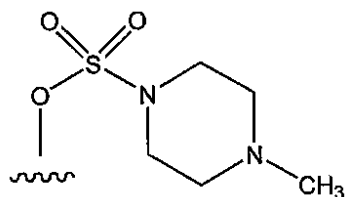
請求項52に記載の式Vを有する、請求項2または3に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項54】

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 52 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：

【化 67】



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 55】

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、

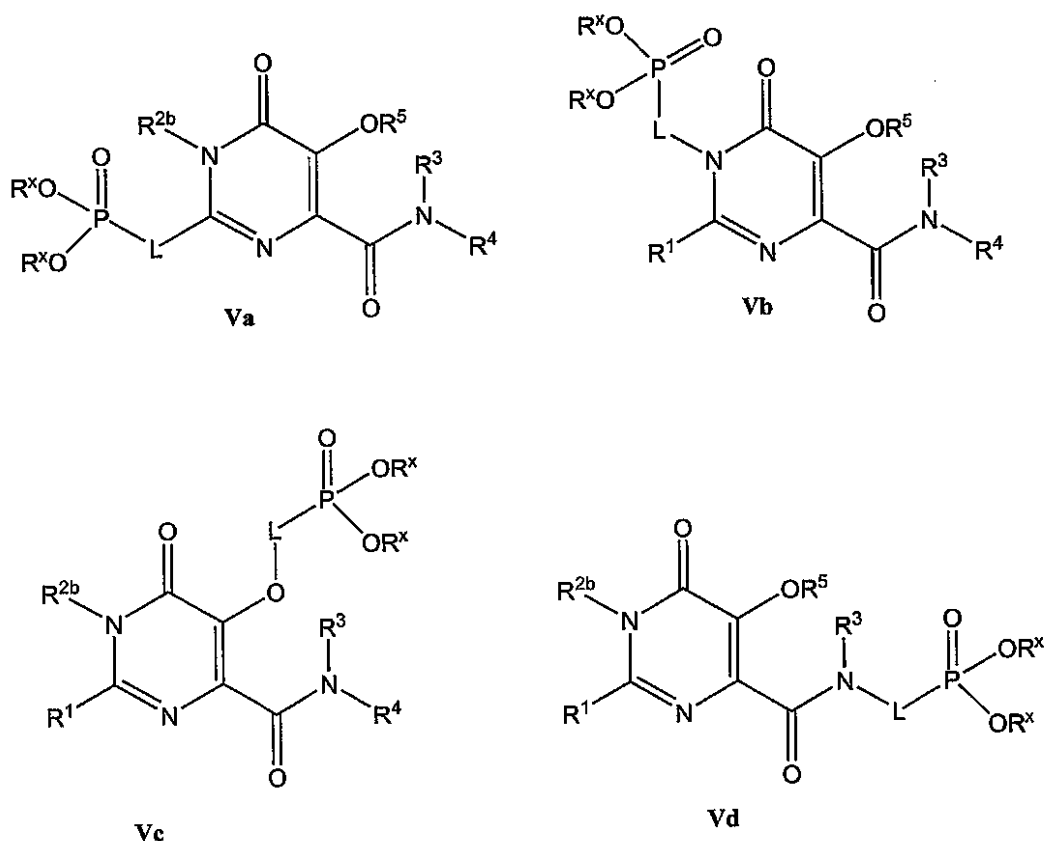
該化合物が、1 個またはそれ以上の共有結合された A⁰ 基で置換されている；

それらのプロドラッグ置換形状を含む、請求項 52 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 56】

以下の構造から選択される、請求項 52 に記載の式 V の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

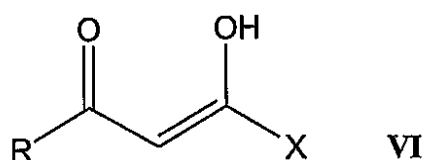
【化 68】



【請求項 57】

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

【化 6 9】



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、酸性プロトン具备了部分（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。

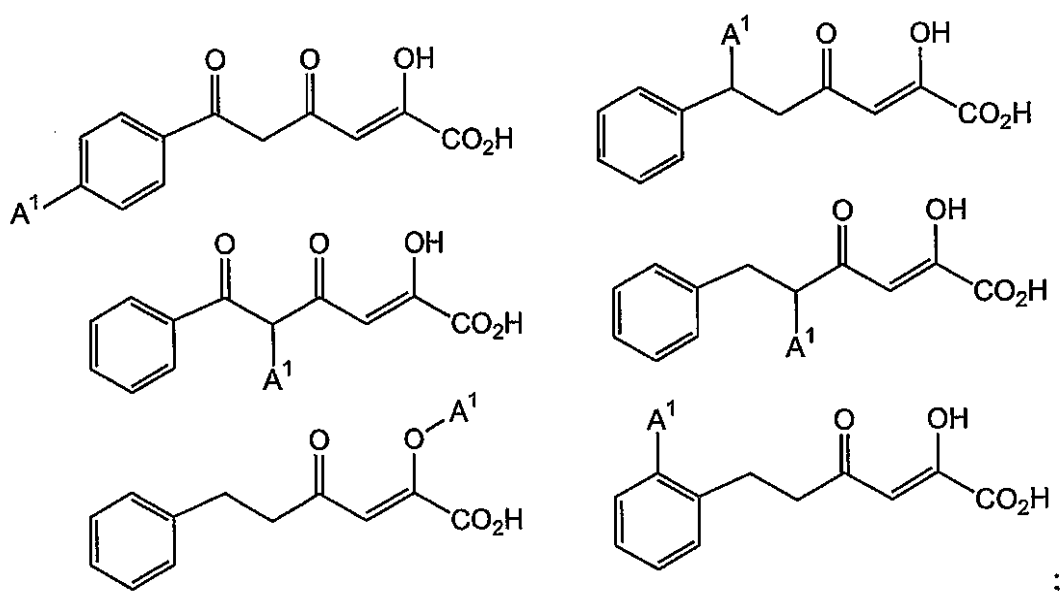
【請求項 5 8】

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 5 7 に記載の式 V I の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 5 9】

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 0】

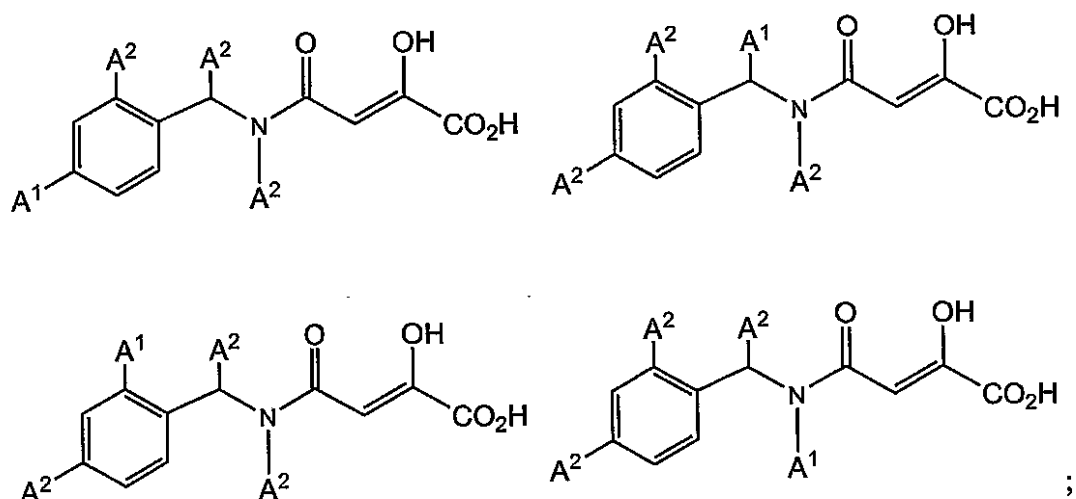


これは、1 個またはそれ以上の共有結合された A⁰ 基で置換されている、化合物。

【請求項 60】

以下の構造から選択される請求項 57 に記載の式 VI 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 71】

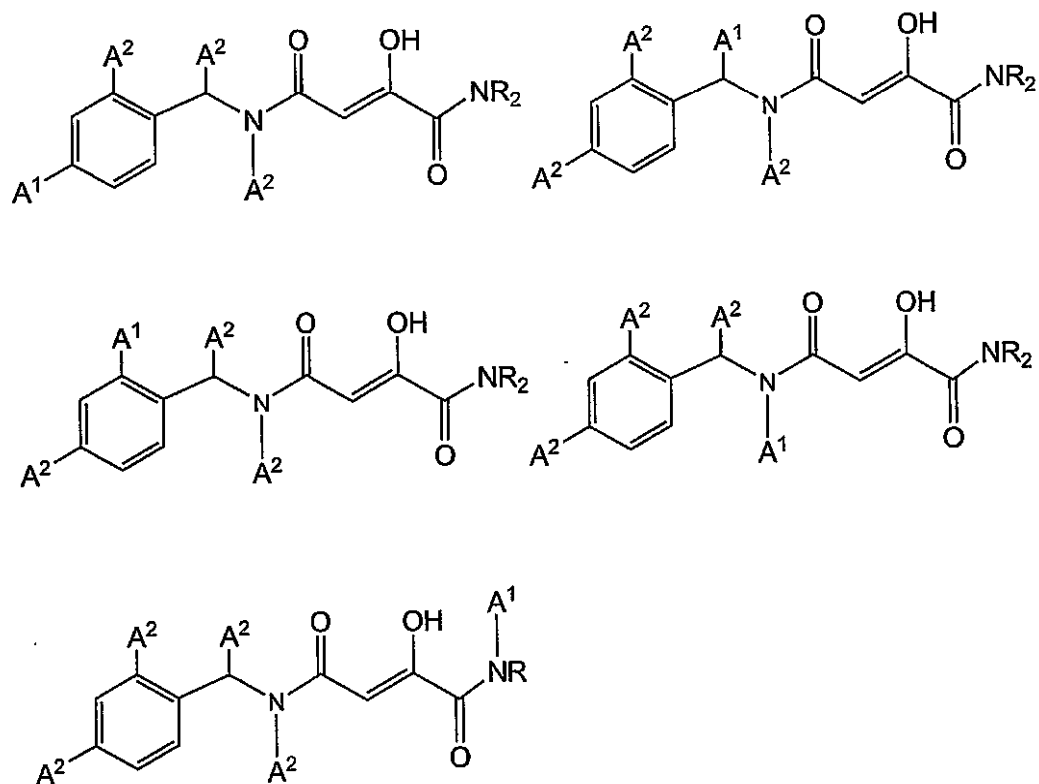


これは、1 個またはそれ以上の共有結合された A⁰ 基で置換されている、化合物。

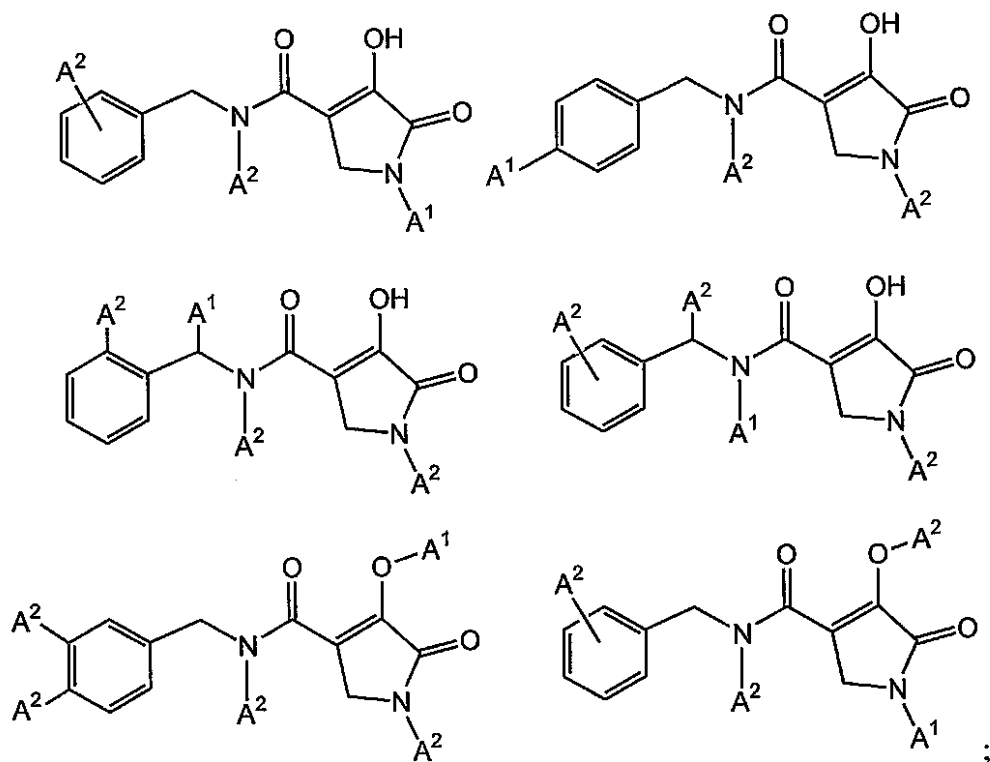
【請求項 61】

以下の構造から選択される請求項 57 に記載の式 VI 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 72】



【化 7 3】

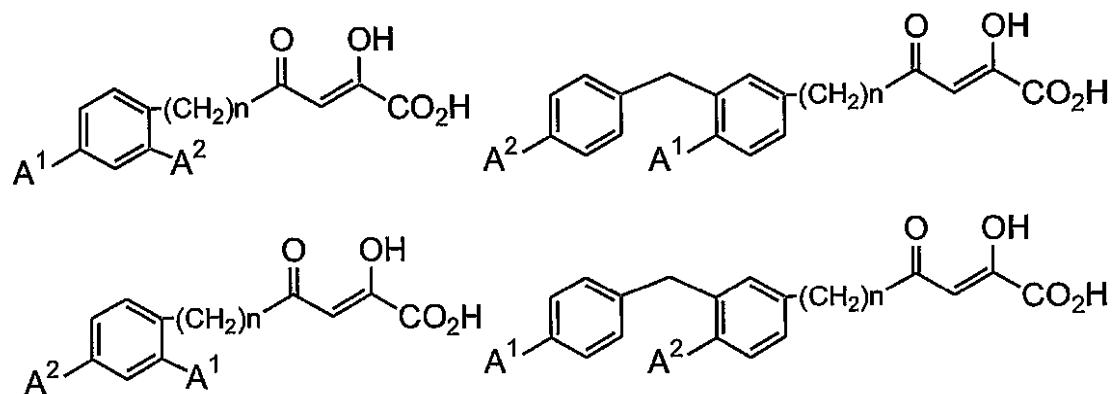


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A⁰ 基で置換されている、化合物。

【請求項 6 2】

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 4】



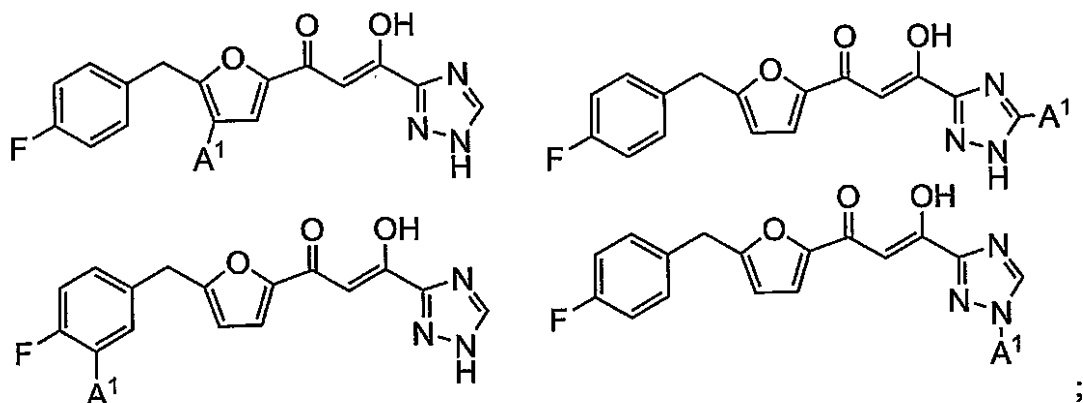
ここで、n は、1、2、3、4、5 または 6 であり得る；

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 6 3】

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 5】

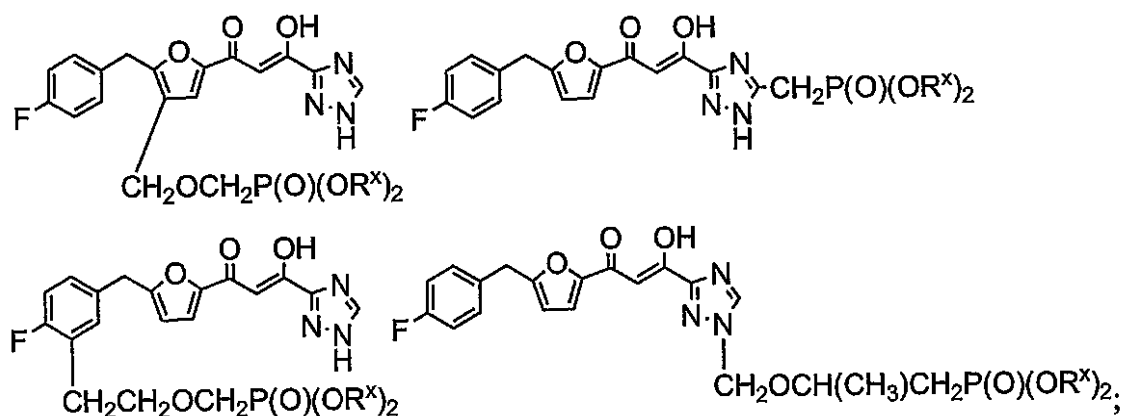


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項 6 4】

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 6】

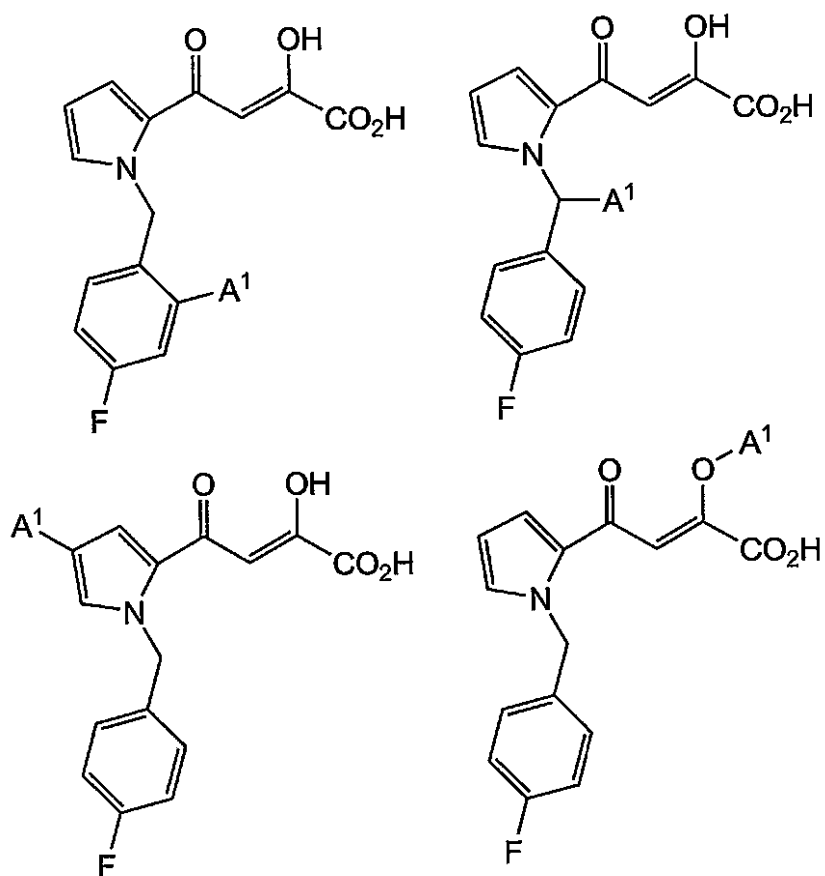


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項 6 5】

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 7】

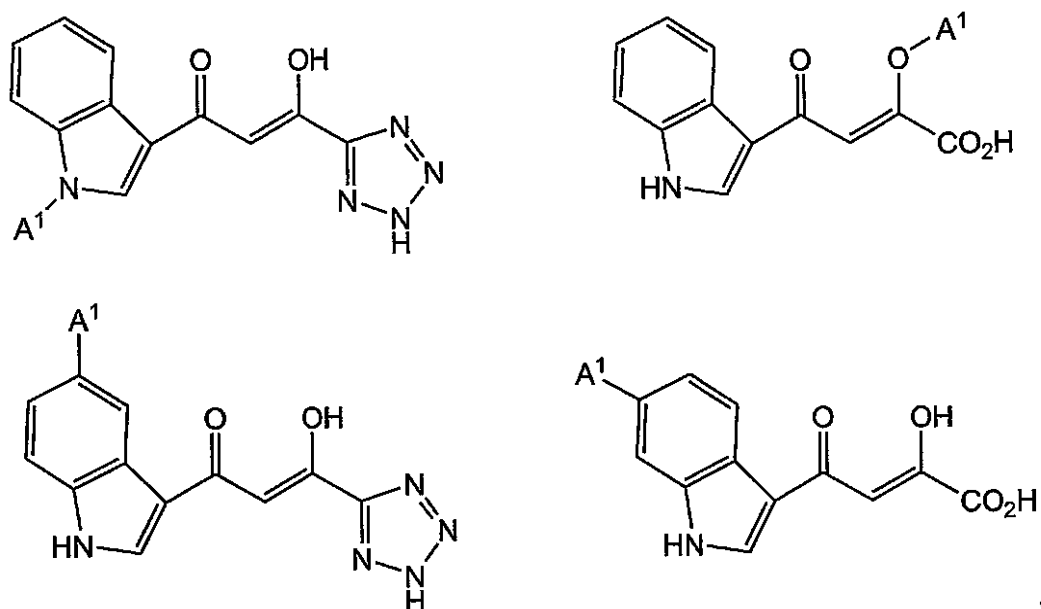


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項 6 6】

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、H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

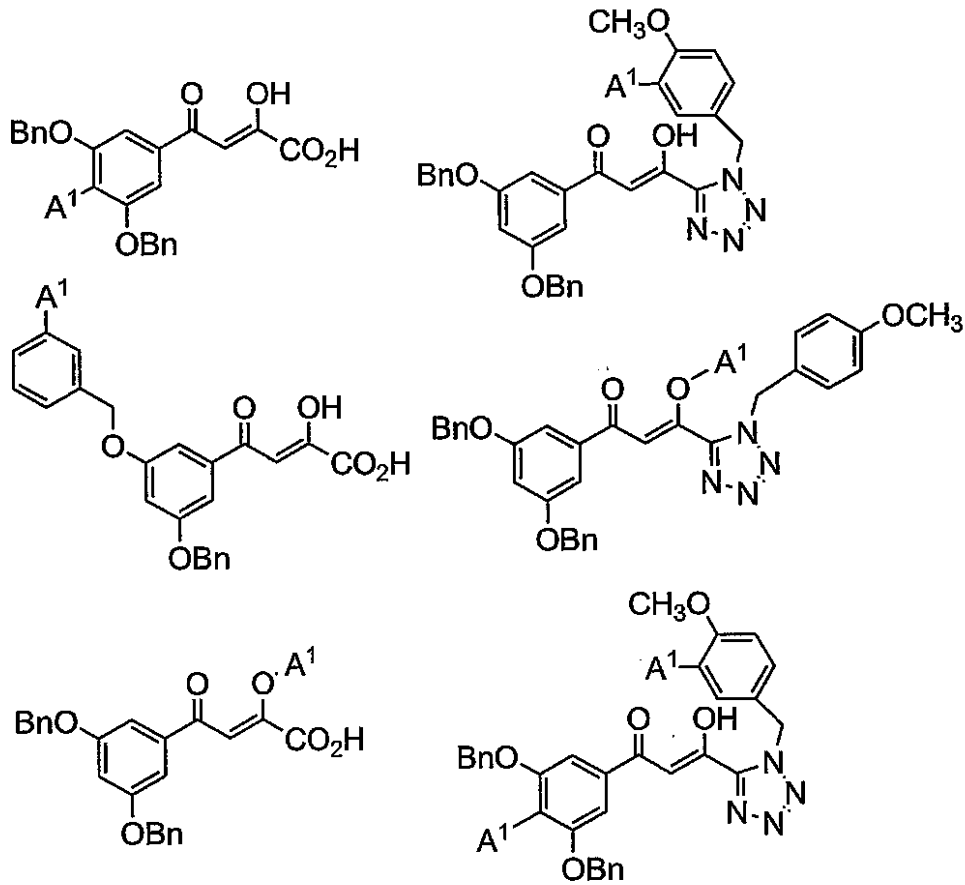
【化 7 8】



【請求項 6 7】

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】

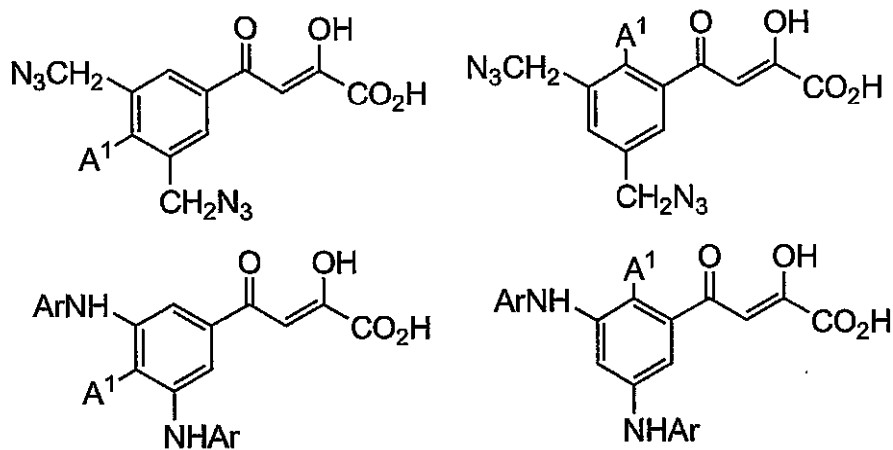


これは、1 個またはそれ以上の共有結合された A⁰ 基で置換されている、化合物。

【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】

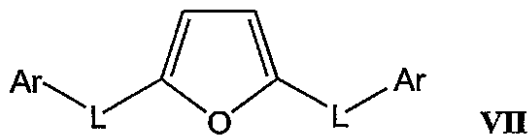


これは、1 個またはそれ以上の共有結合された A⁰ 基で置換されている、化合物。

【請求項 69】

式VII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81】



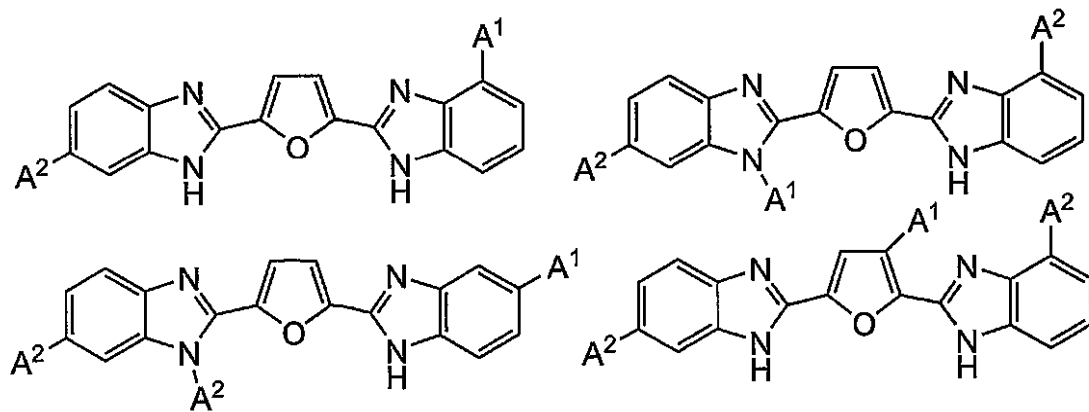
ここで、Arは、 $C_3 \sim C_{12}$ 炭素環、 $C_3 \sim C_{12}$ 置換炭素環、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリールまたは $C_2 \sim C_{20}$ 置換ヘテロアリールである；そして

該式VII化合物は、少なくとも1個の A^0 基を含む、化合物。

【請求項70】

以下の構造から選択される、請求項69に記載の式VIIのHIVインテグラーゼ阻害剤化合物：

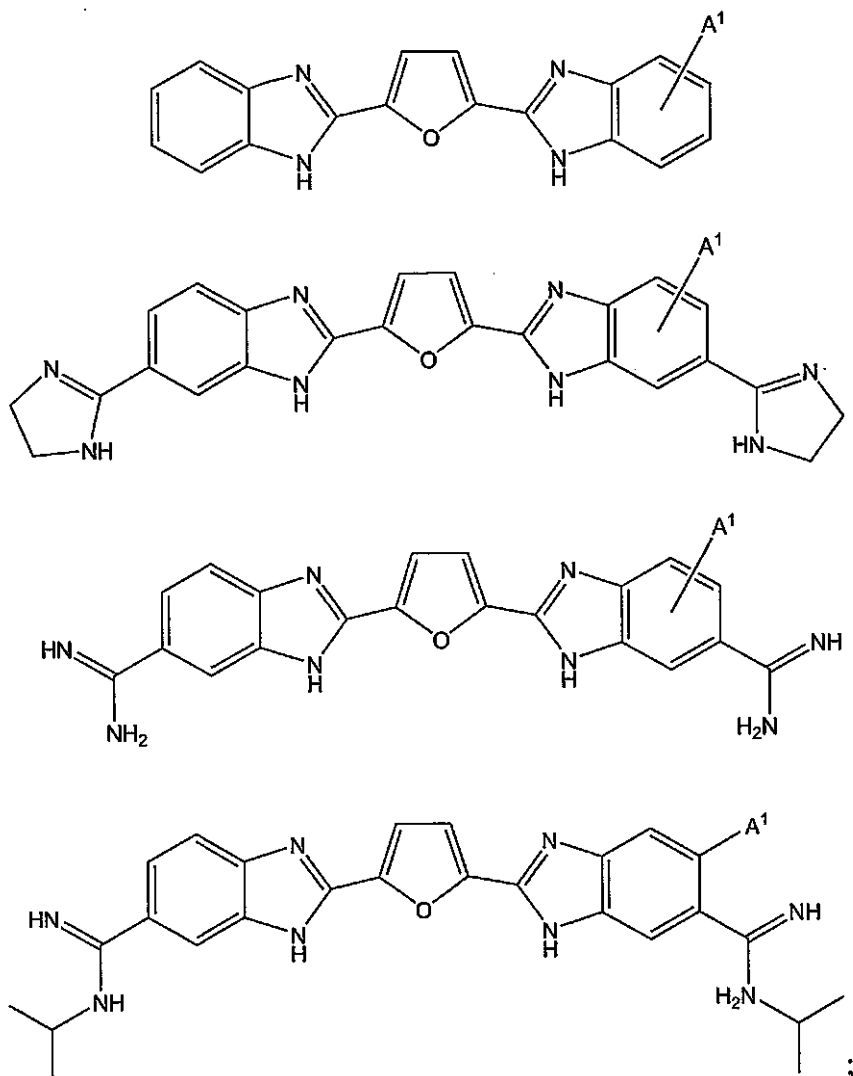
【化82】



【請求項71】

以下の構造から選択される請求項69に記載の式VII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 8 3】

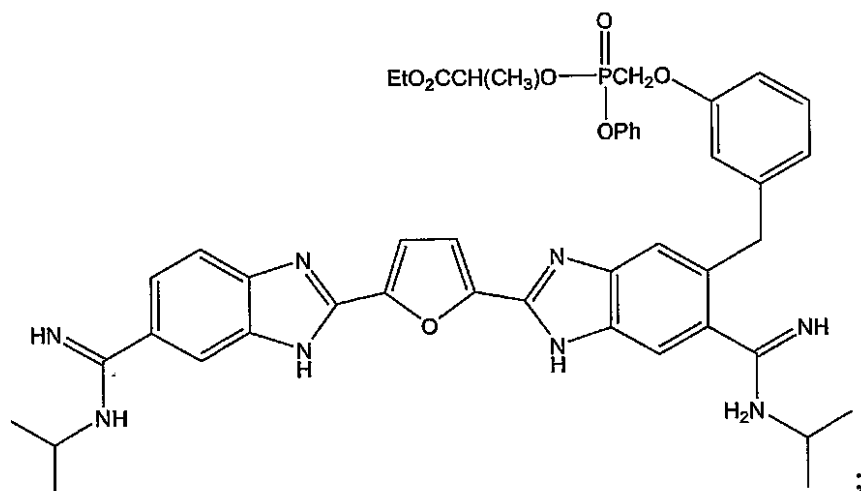


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、
化合物。

【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】

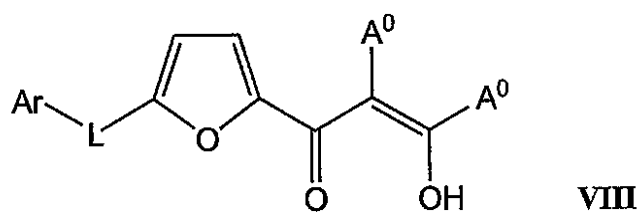


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項 7 3】

式 V I 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 5】

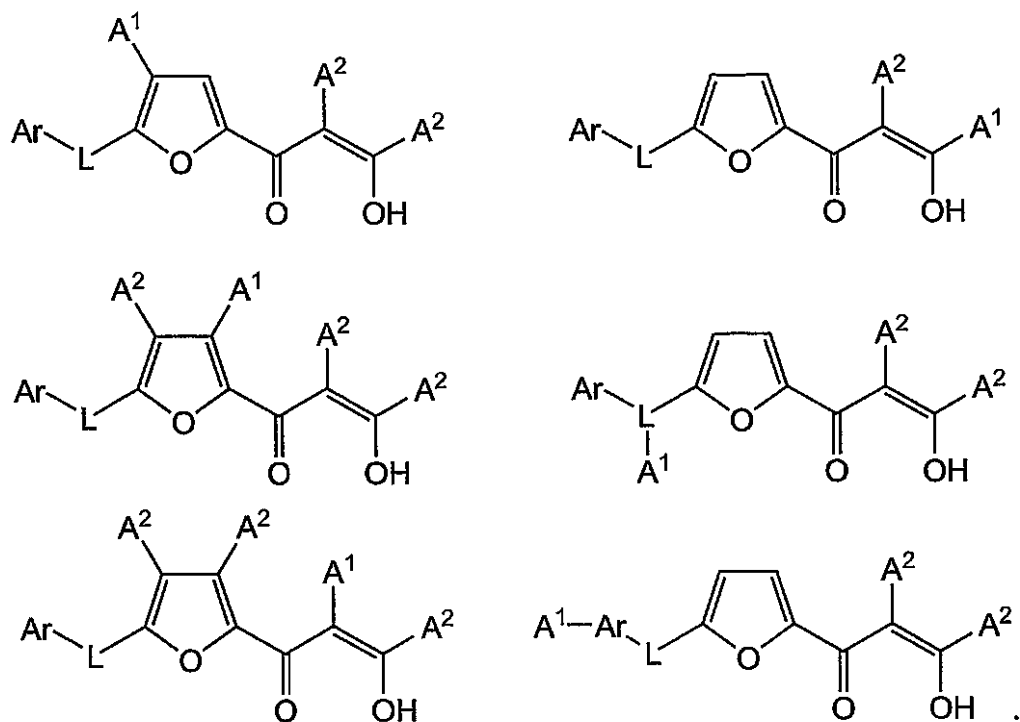


ここで、Ar は、 $C_3 \sim C_{12}$ 炭素環、 $C_3 \sim C_{12}$ 置換炭素環、 $C_6 \sim C_{20}$ アリール、 $C_6 \sim C_{20}$ 置換アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリールまたは $C_2 \sim C_{20}$ 置換ヘテロアリールである；そして該式 V I I I 化合物は、少なくとも 1 個の A^0 基を含む、化合物。

【請求項 7 4】

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

【化 8 6】

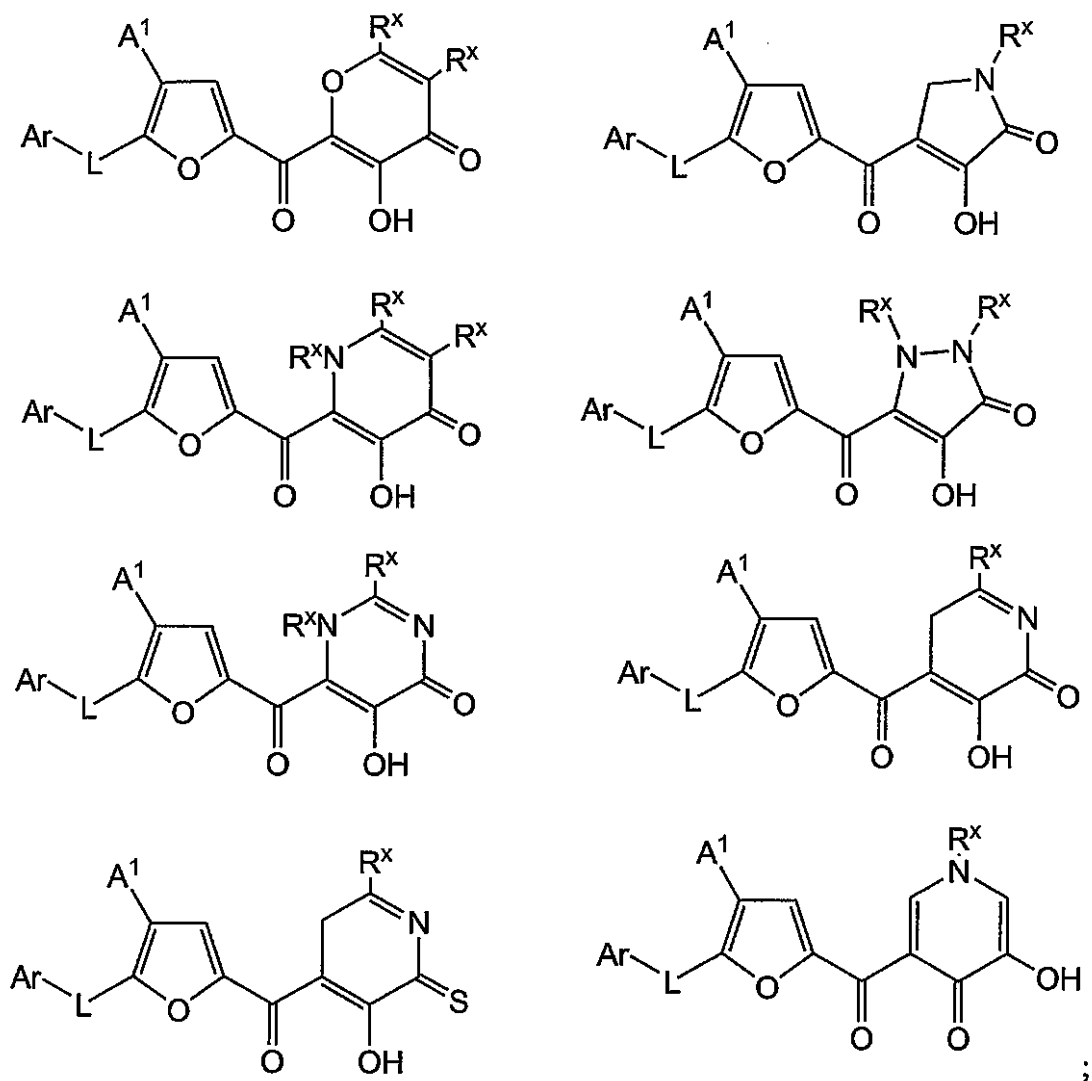


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【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】

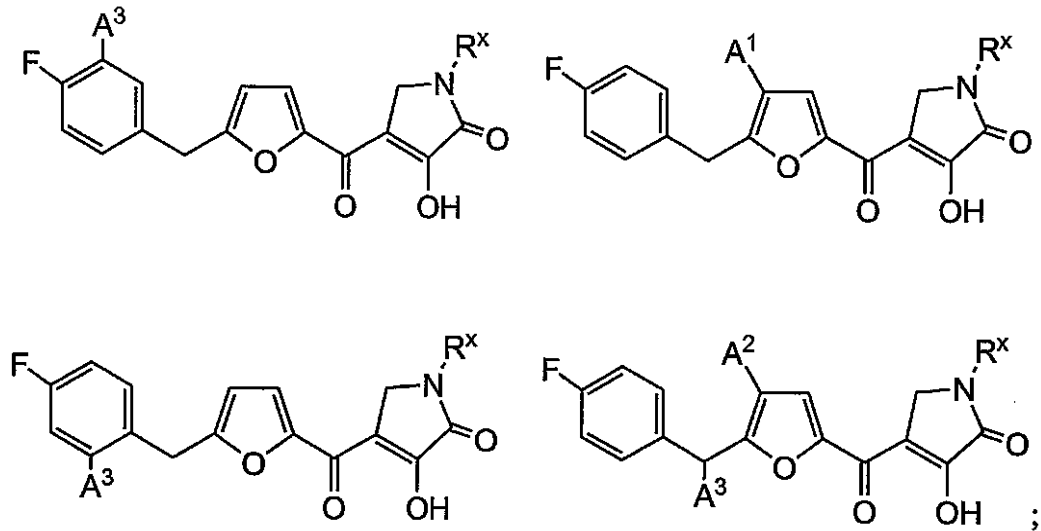


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項 76】

以下の構造を有する請求項 73 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 HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 8 8】

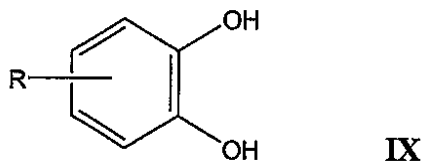


これは、1個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【請求項 77】

式 I X 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 9】



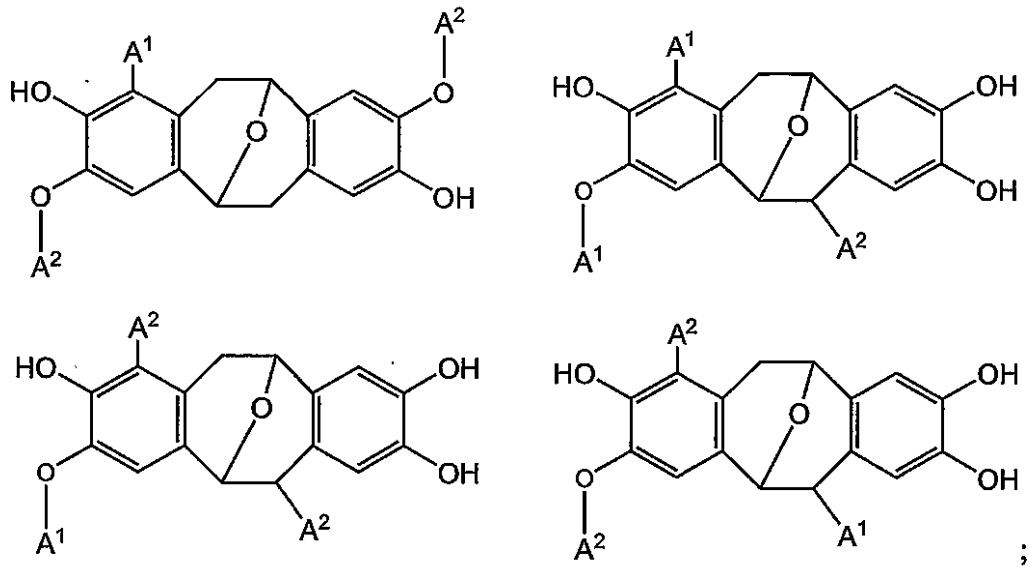
ここで、R は、単結合または縮合環系を介してカテコール部分に共有結合された H I V インテグラーゼ阻害剤足場であり、そして該式 I X 化合物は、少なくとも 1 個の A^0 基を含む、

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 I X 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 9 0】

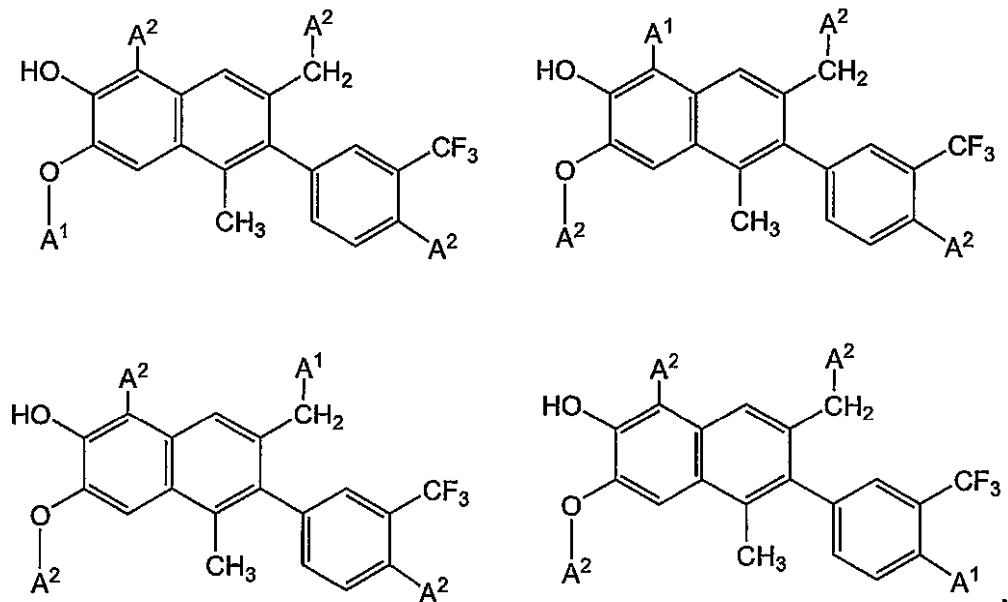


これは、1 個またはそれ以上の共有結合された A⁰ 基で置換されている、化合物。

【請求項 7 9】

以下の構造から選択される、請求項 7 7 に記載の式 I X の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

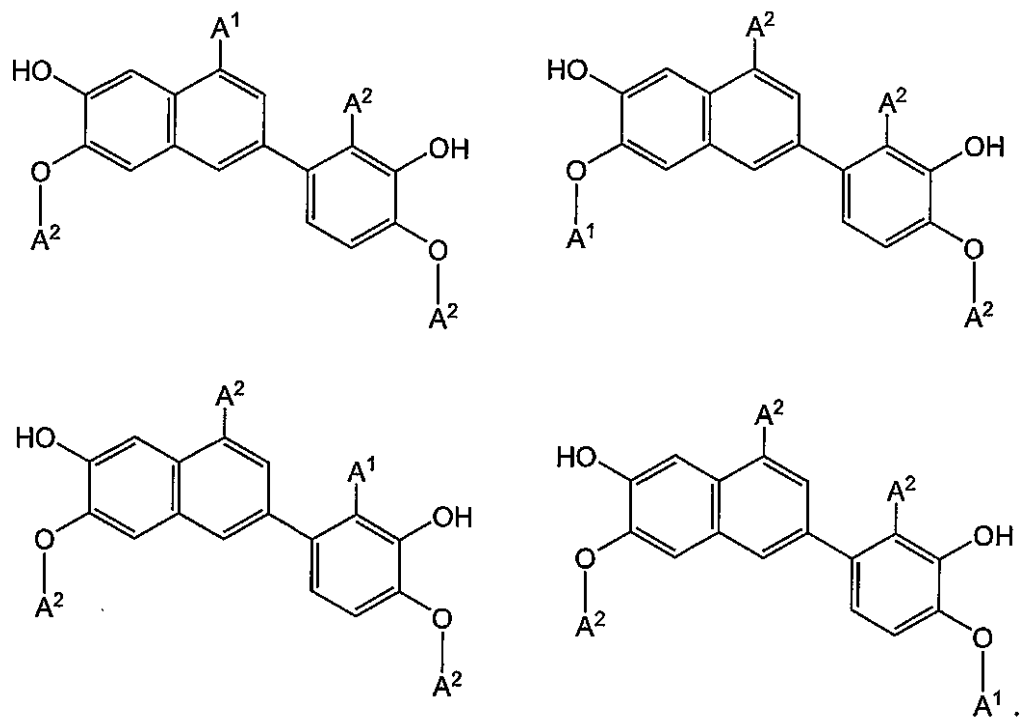
【化 9 1】



【請求項 8 0】

以下の構造から選択される、請求項 7 7 に記載の式 I X の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

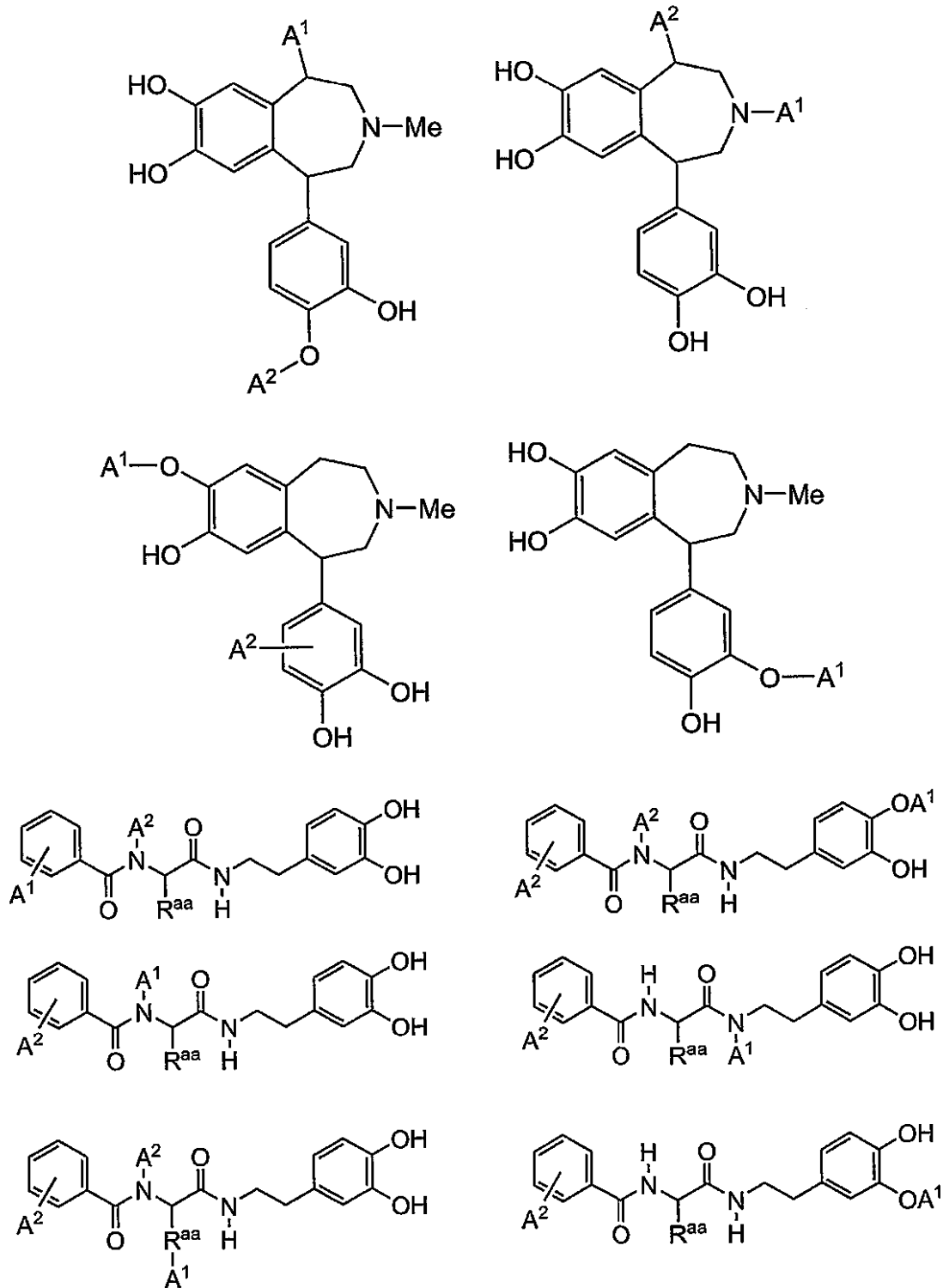
【化 9 2】



【請求項 8 1】

以下の構造から選択される、請求項 7 7 に記載の式 I X の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 9 3】

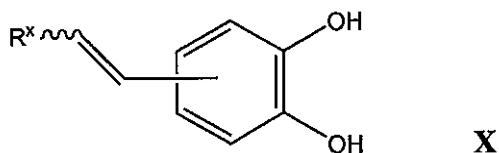


ここで、 R^{aa} は、アミノ酸側鎖であり、プロリンを含む、化合物。

【請求項 8 2】

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 9 4】

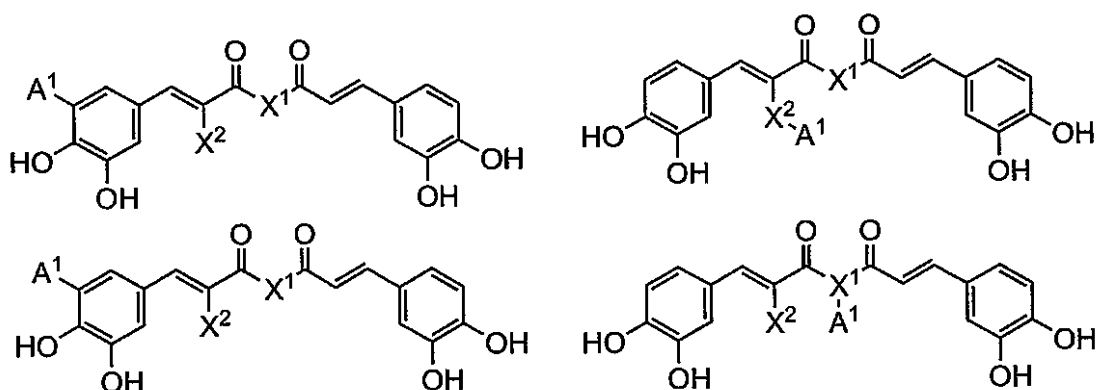


ここで、 R^x は、単結合または縮合環系を介してスチリルカテコール部分に共有結合された HIV インテグラーゼ阻害剤足場であり、そして該式 X 化合物は、少なくとも 1 個のホスホネート基を含む、化合物。

【請求項 8 3】

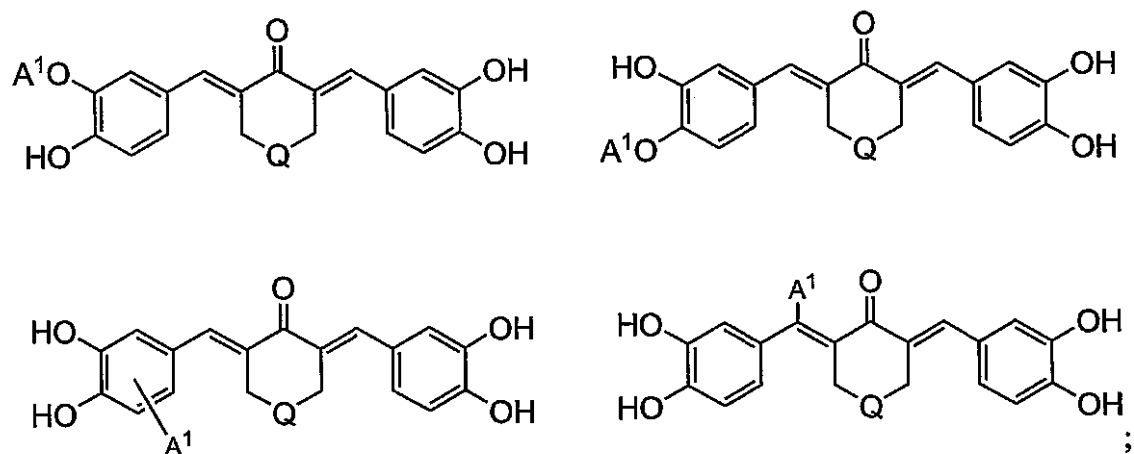
以下の構造から選択される、請求項 8 2 に記載の式 X の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 9 5】



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 9 6】



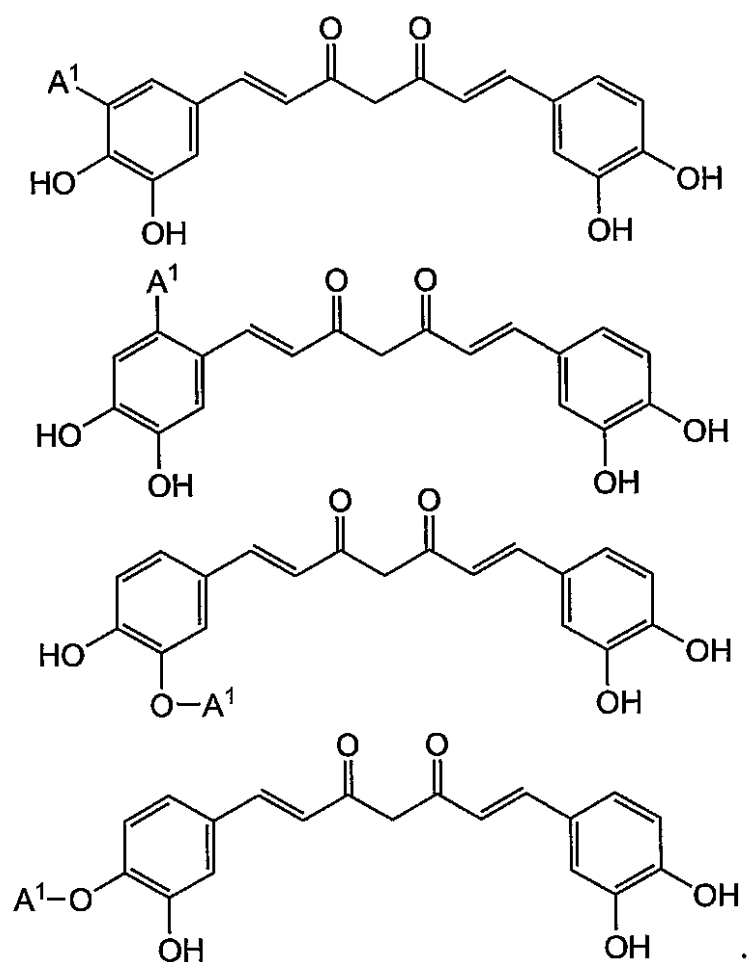
ここで、Q は、 CH_2 、O、S、NH または NR である、化合物。

【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 HIV インテグラーゼ阻害剤化合物

物：

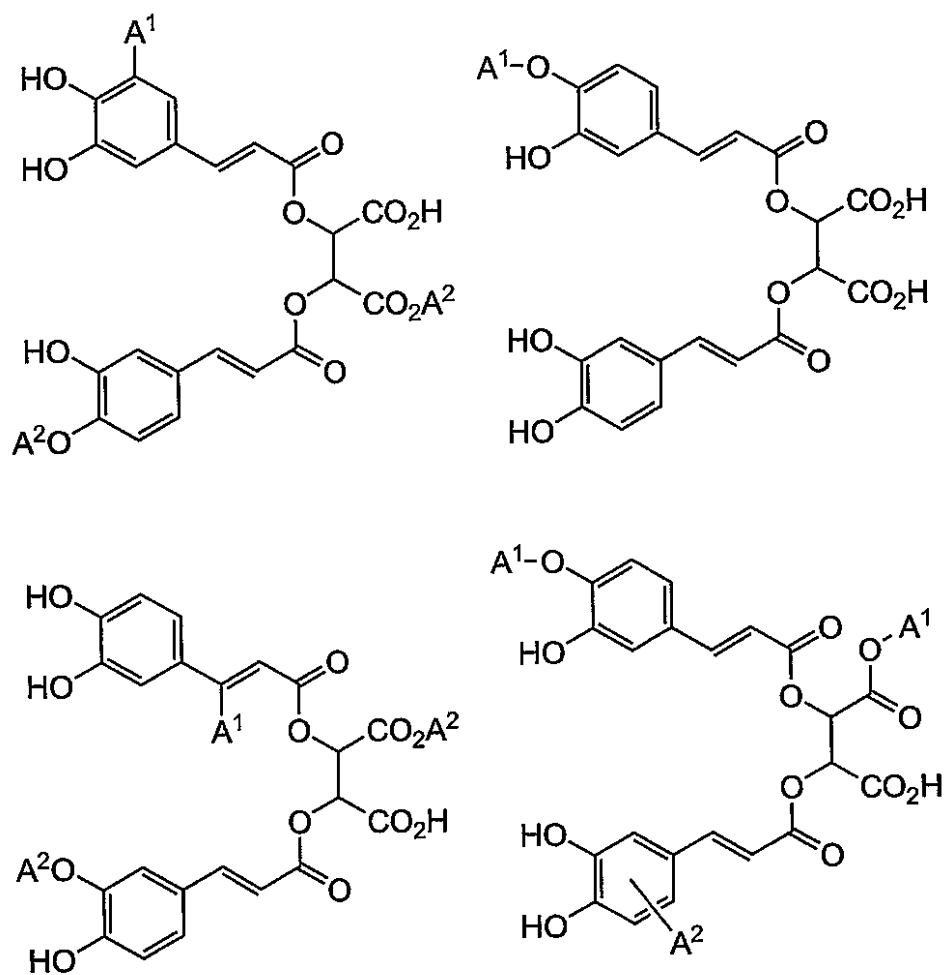
【化 9 7】



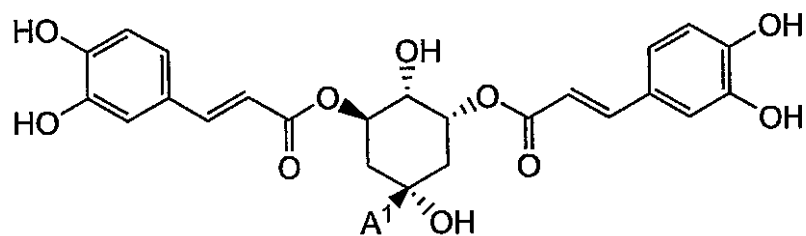
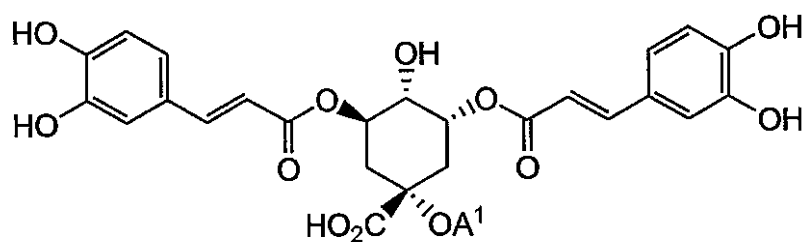
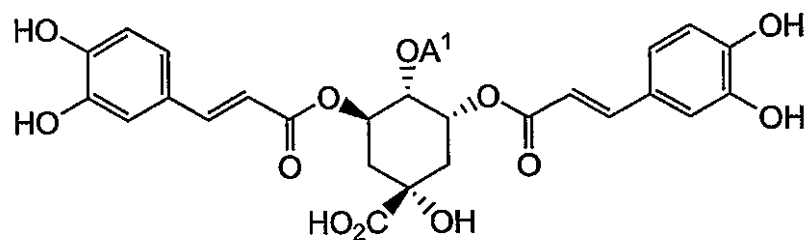
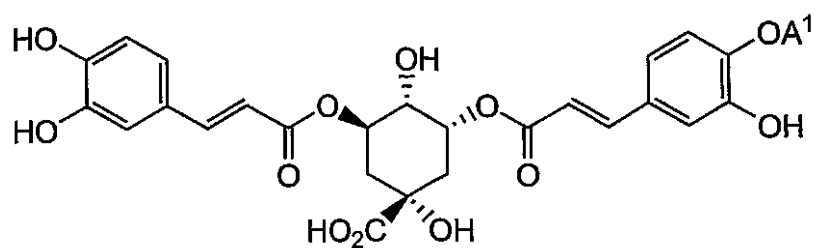
【請求項 8 5】

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

【化 9 8】



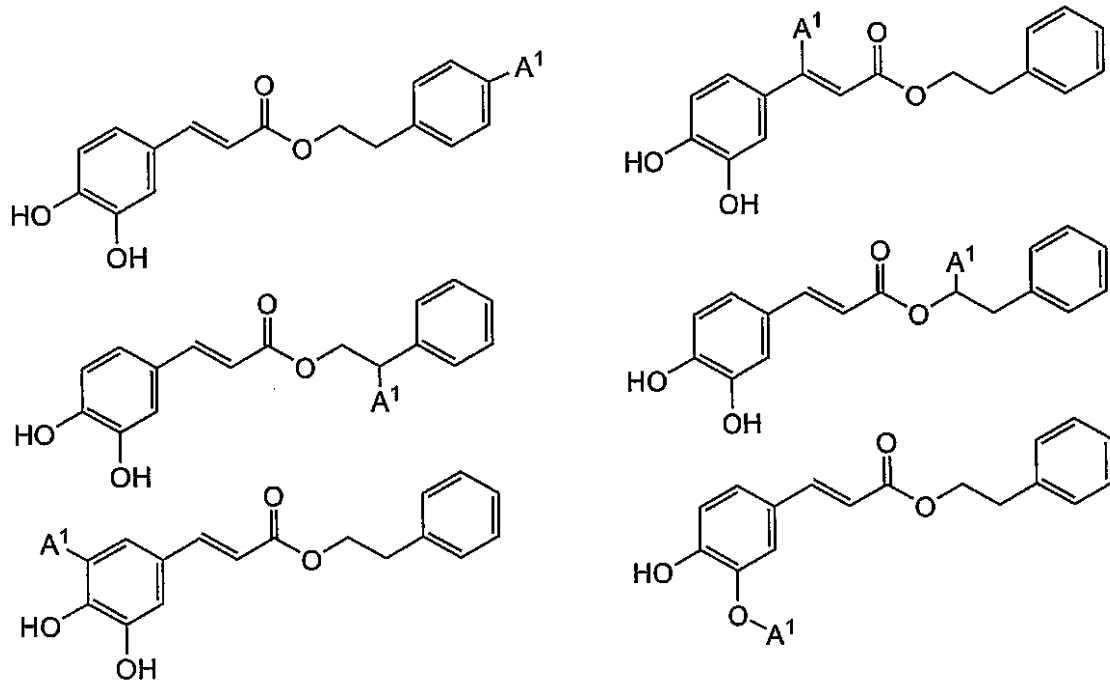
【化 9 9】



【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 HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

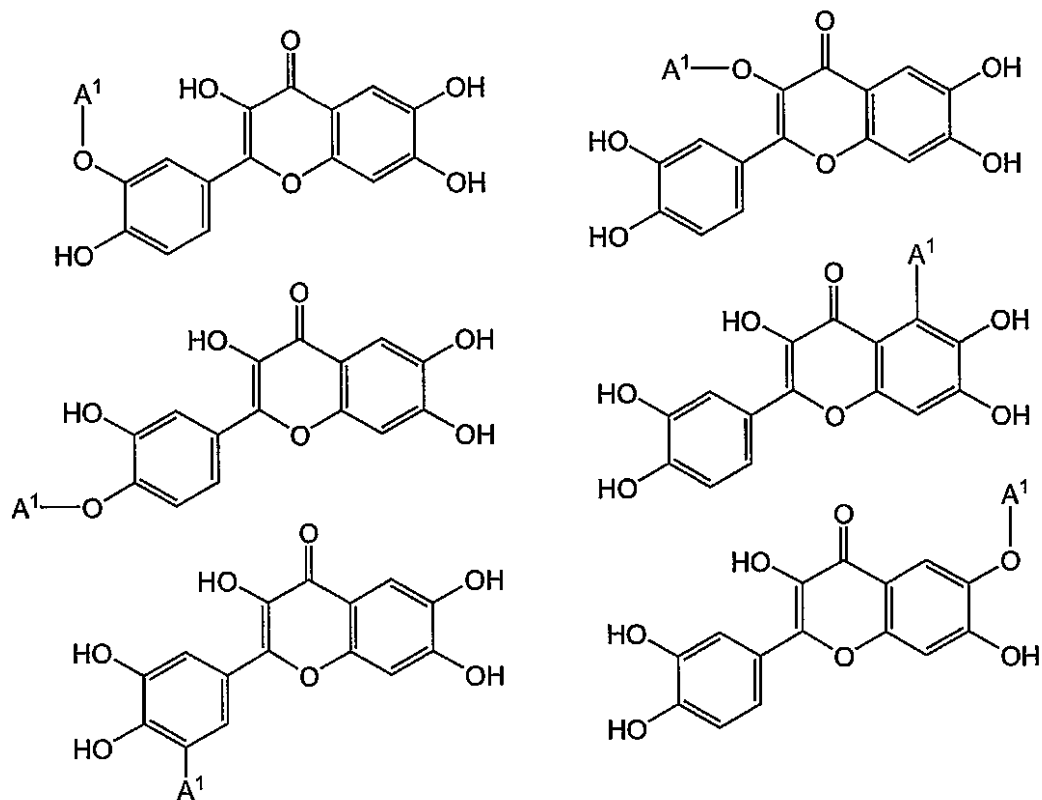
【化 1 0 0】



【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 HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

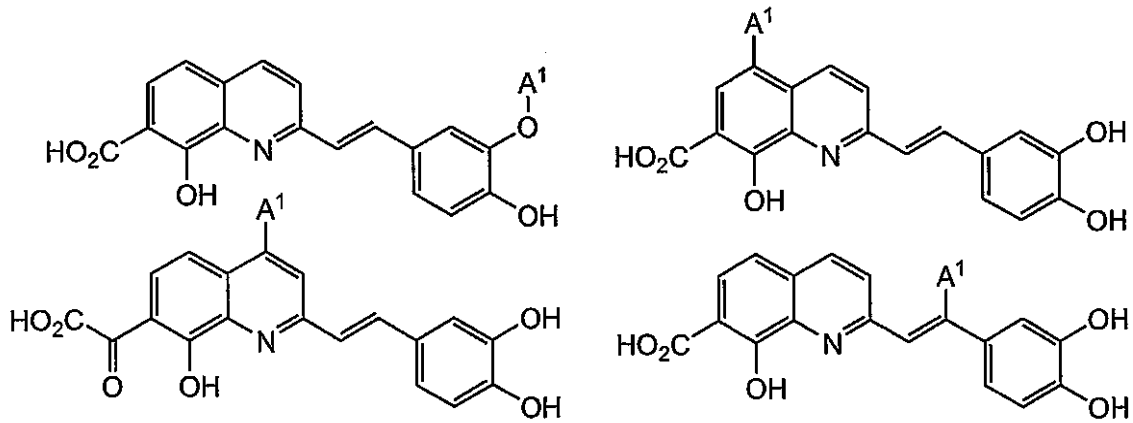
【化 1 0 1】



【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 HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

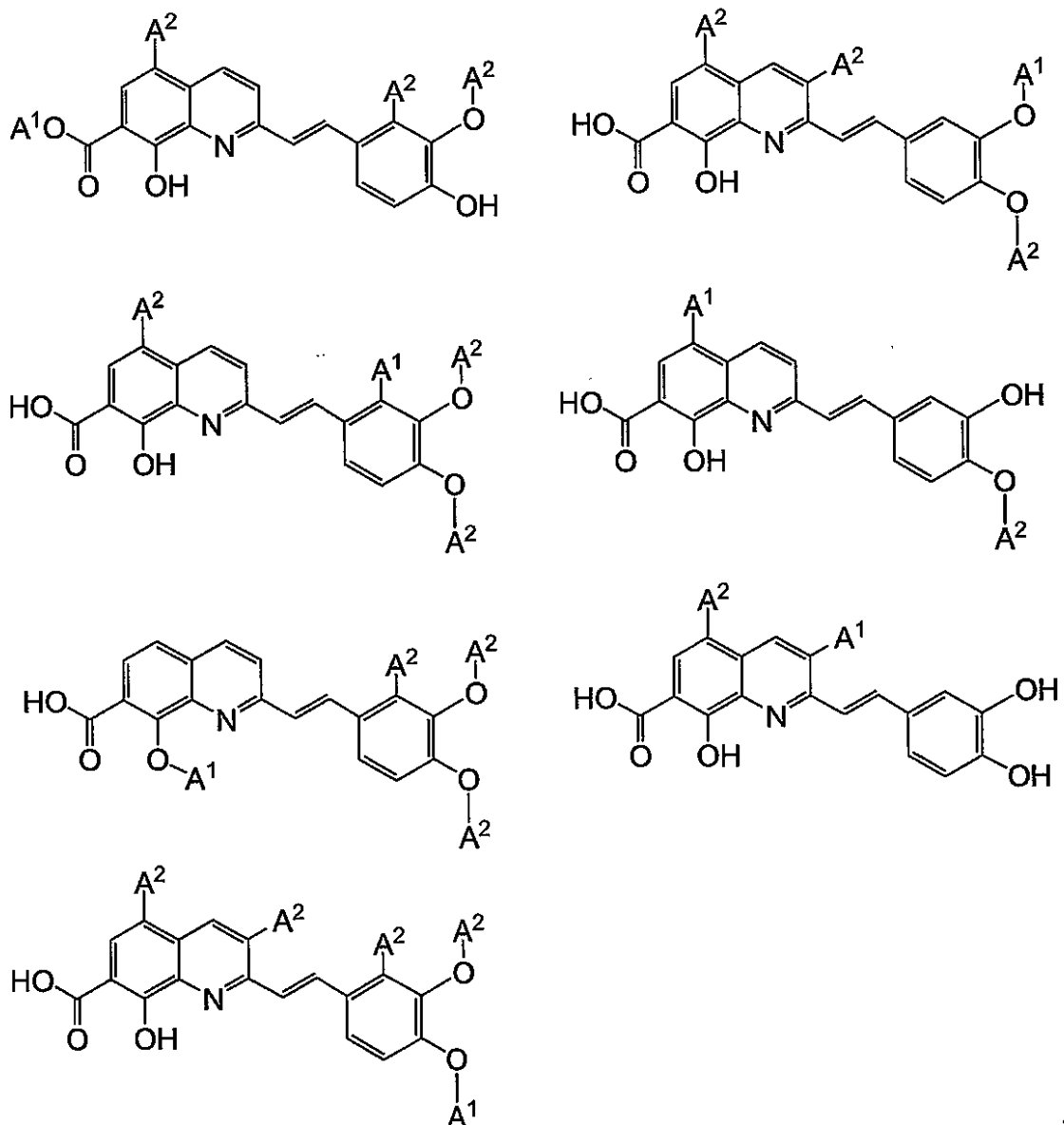
【化 1 0 2】



【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：

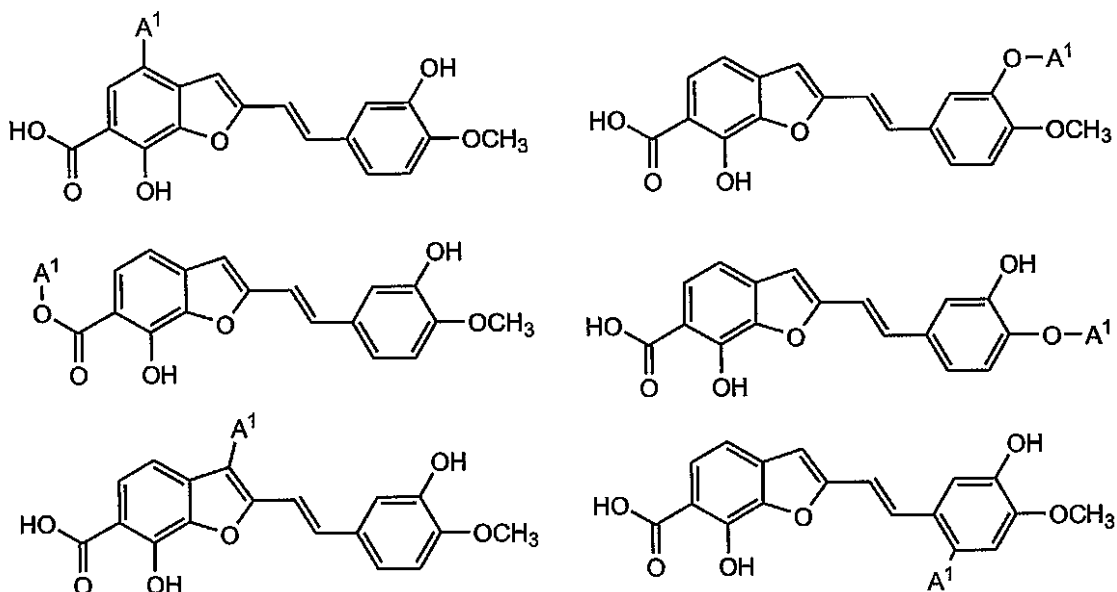
【化 1 0 3】



【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：

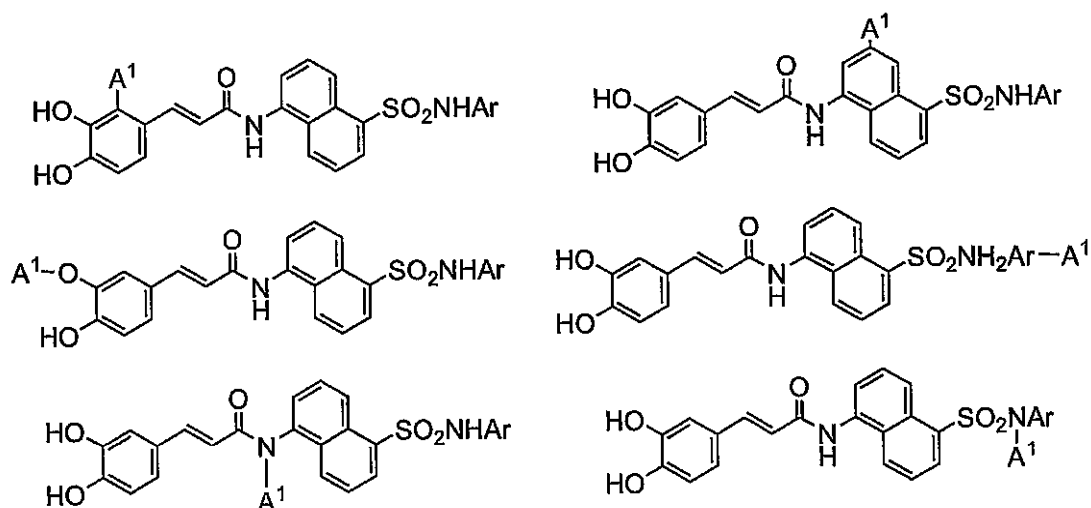
【化 1 0 4】



【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：

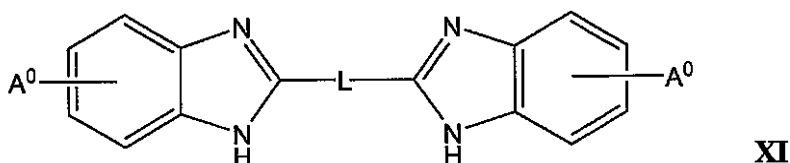
【化 1 0 5】



【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】



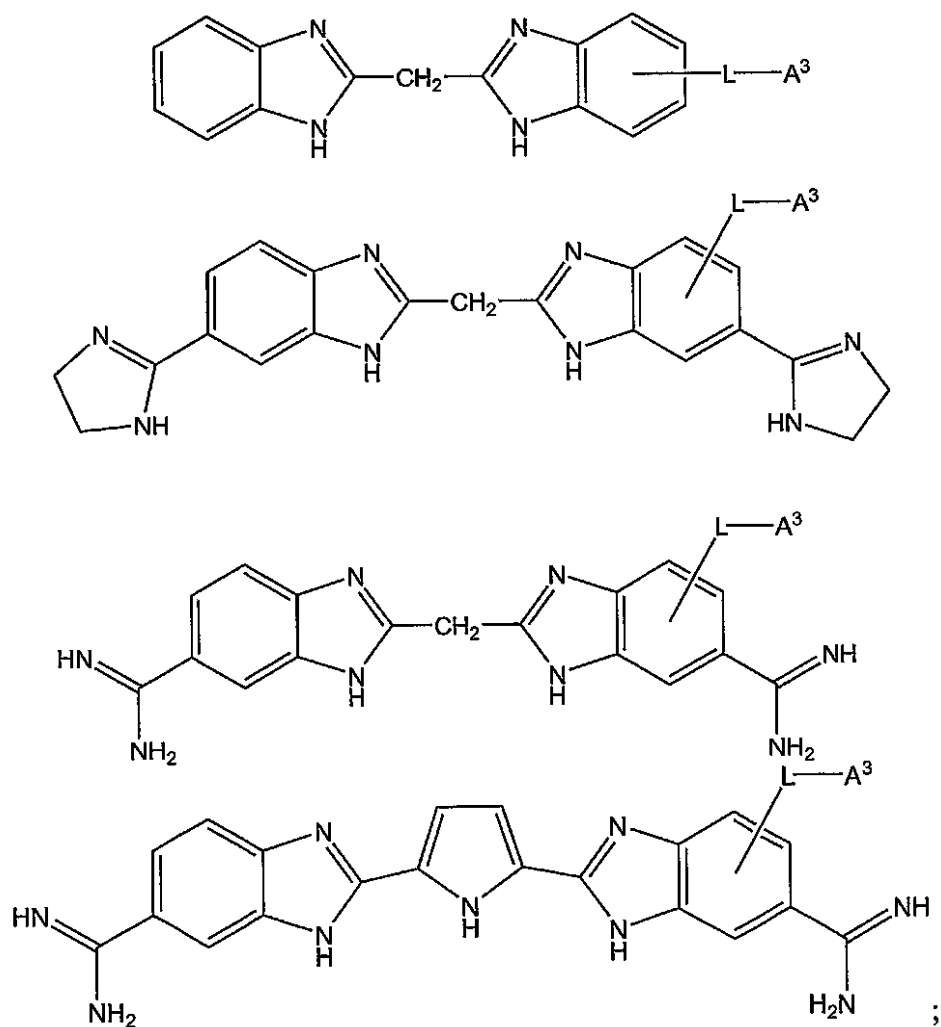
ここで、式 X I 化合物は、さらに、縮合環系で置換され得、L は、リンカーであり、そして該式 X I 化合物は、少なくとも 1 個の A⁰ 基を含む、

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】

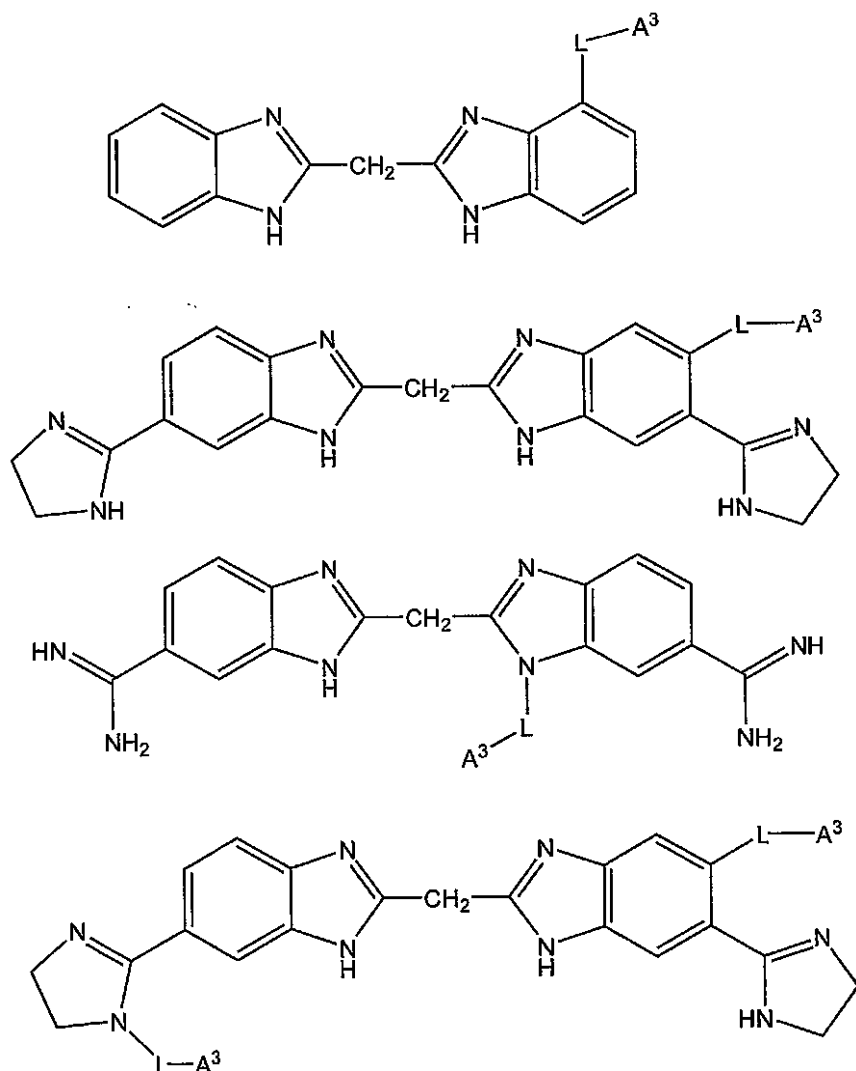


これは、1 個またはそれ以上の共有結合された A^0 基で置換されている、化合物。

【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：

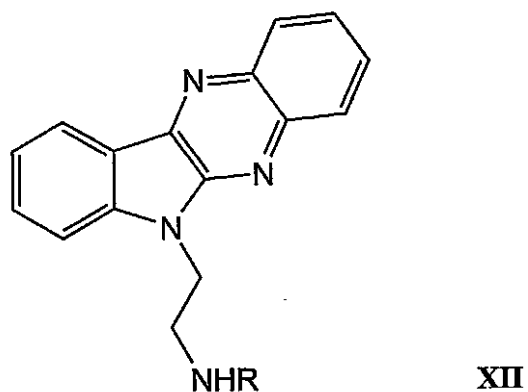
【化 1 0 8】



【請求項 9 5】

式 X 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 1 0 9】

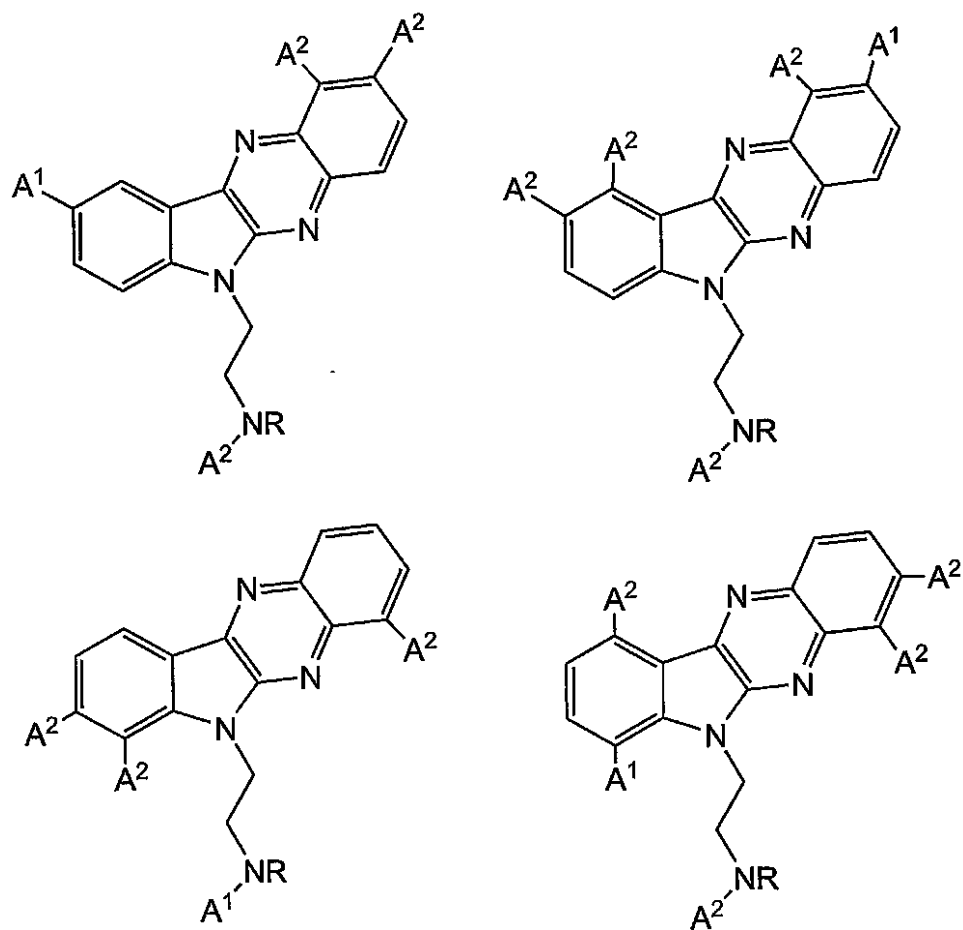


ここで、式 X I I 化合物は、少なくとも 1 個のホスホネート基を含む、化合物。

【請求項 9 6】

以下の構造から選択される、請求項 9 5 に記載の式 X I I の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

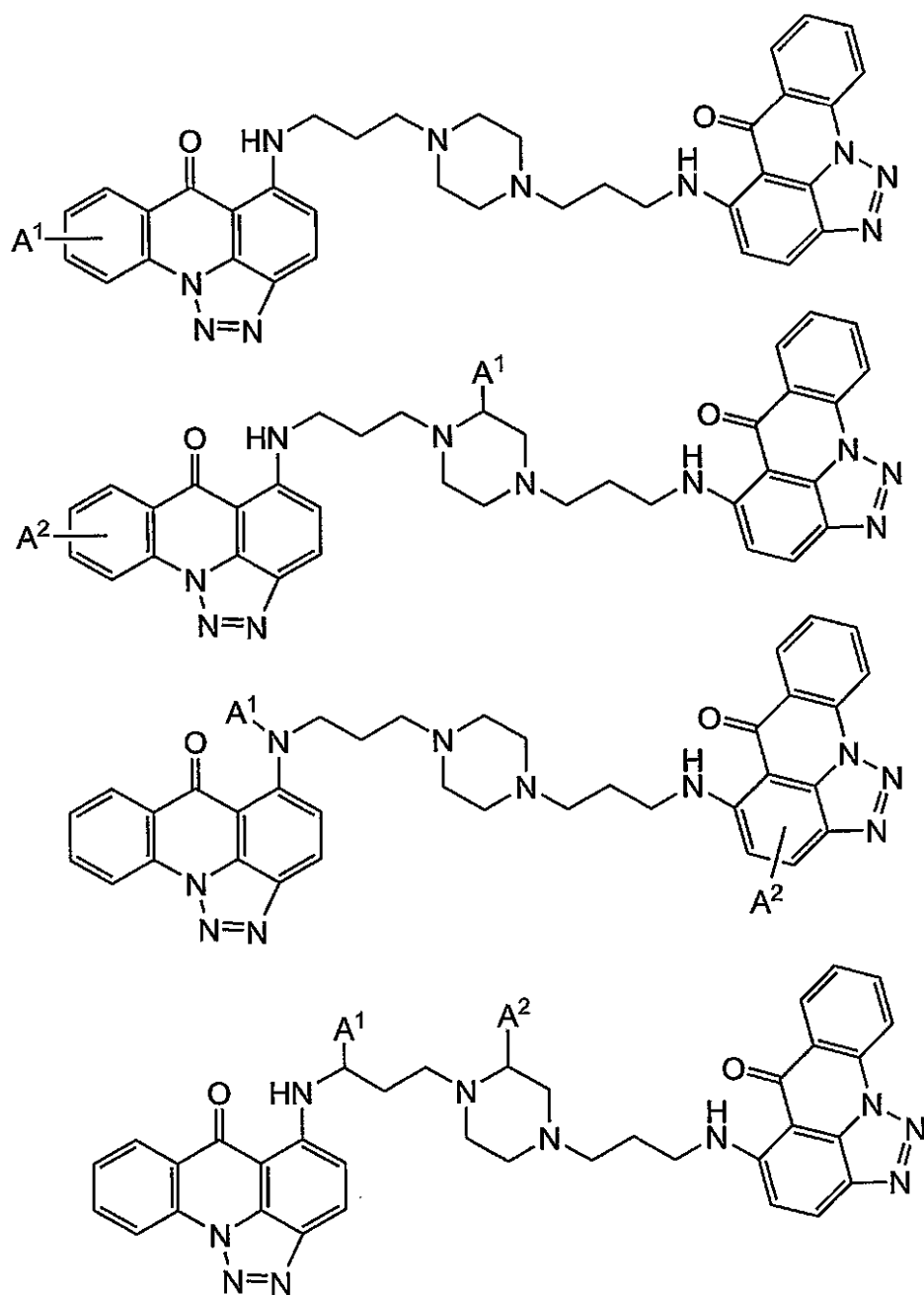
【化 1 1 0】



【請求項 97】

式 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
:

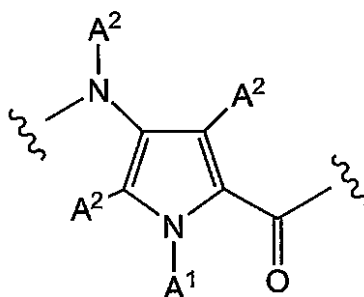
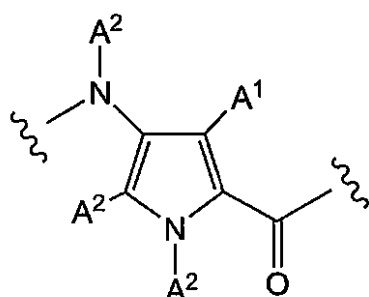
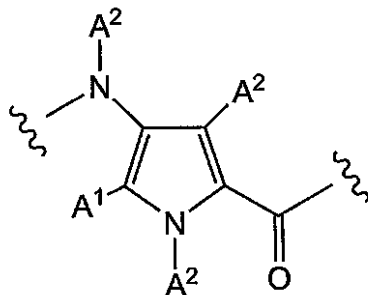
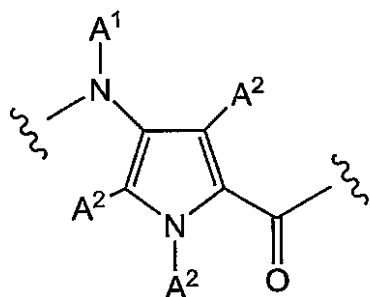
【化 1 1 1】



【請求項 98】

式 X I 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 1 2】



ここで、波線

【化 1 1 2 - a】

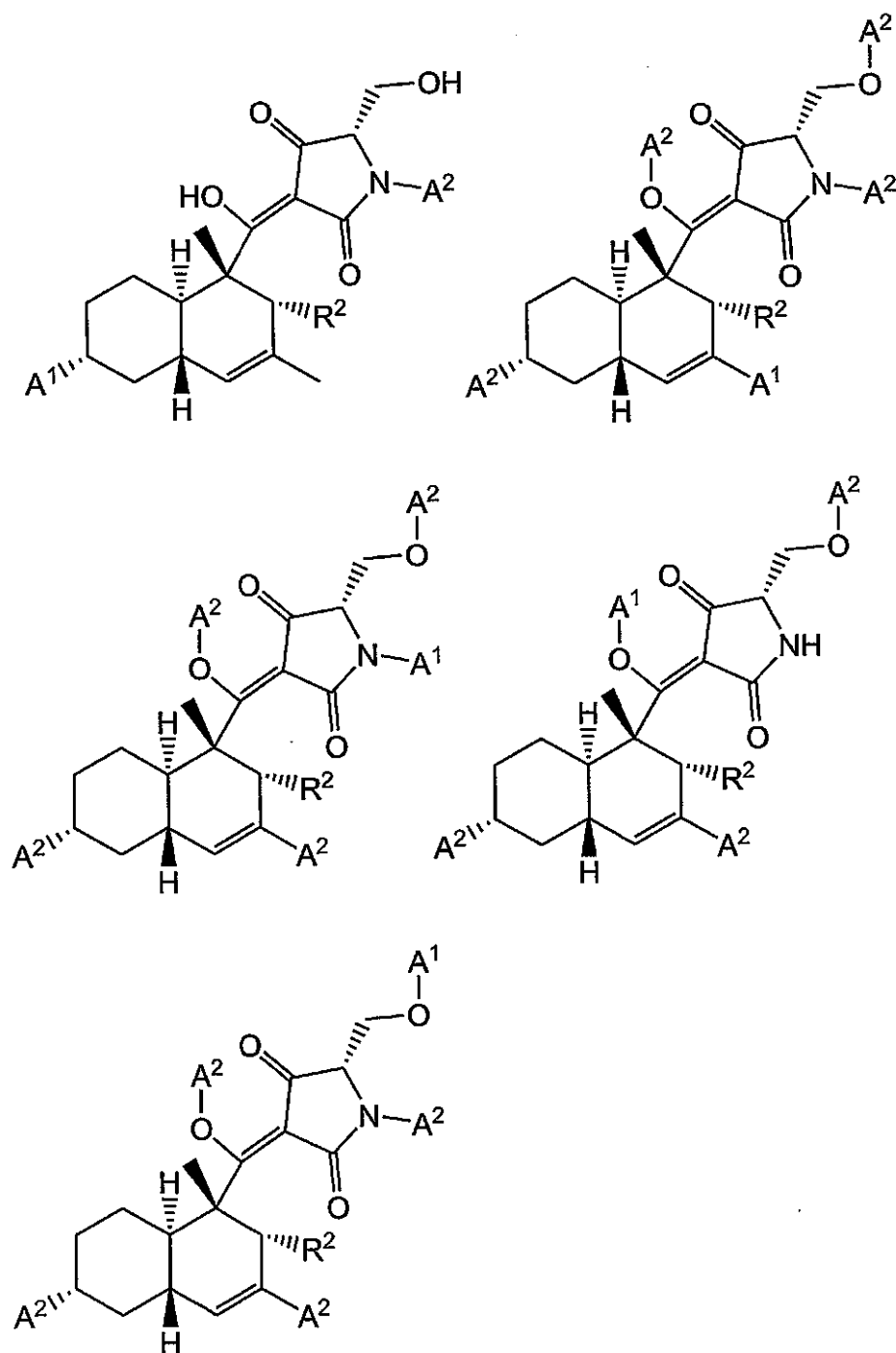


は、描写した構造が繰り返し重合体分子の下部構造であることを示す；そして、ここで、式 X I V の化合物は、少なくとも 1 個のホスホネート基を含む；そして、ここで、該ポリピロールアミド分子内の 1 個またはそれ以上のピロールアミドモノマー単位は、1 つまたはそれ以上の位置において、ホスホネート基で置換されている、化合物。

【請求項 9 9】

式 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：

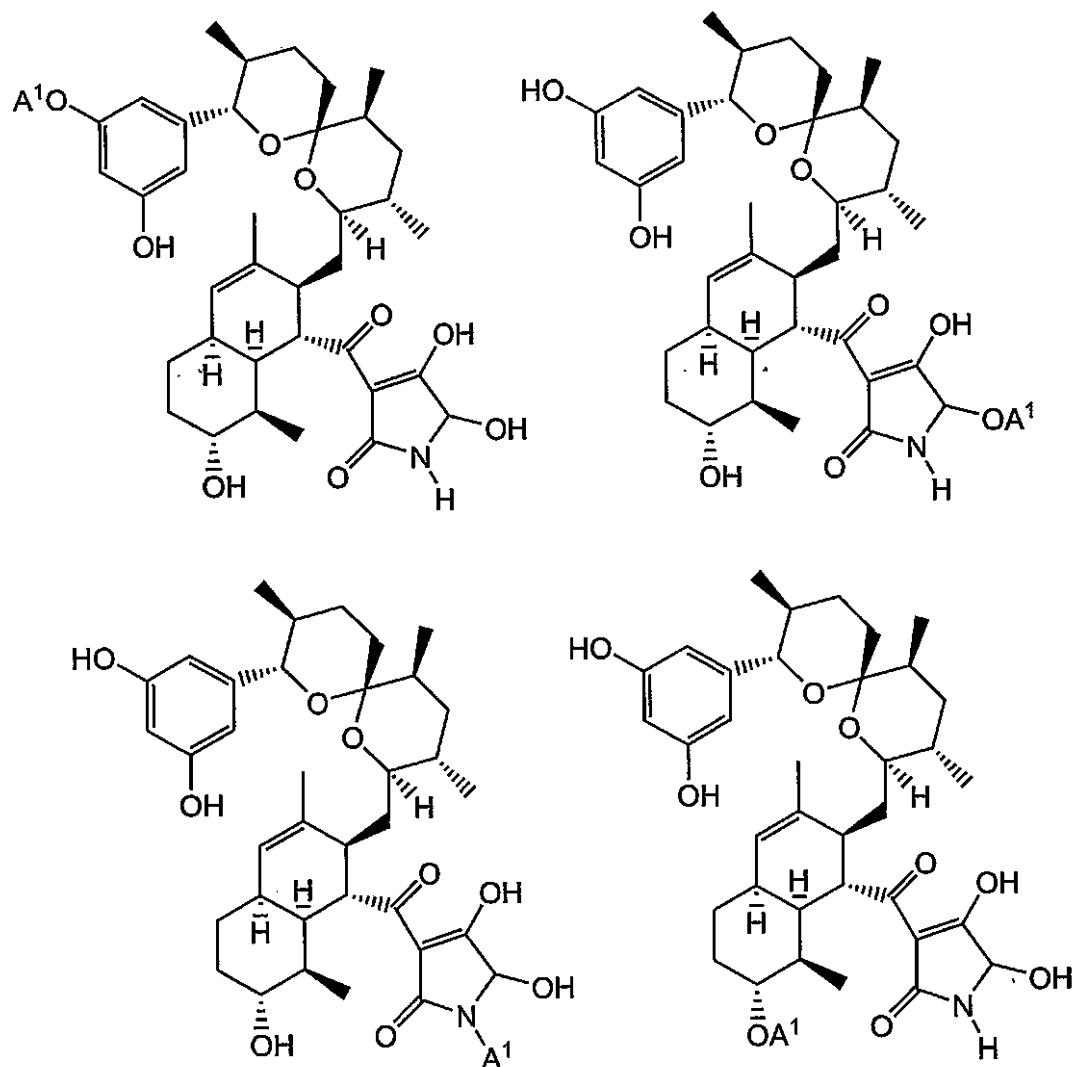
【化 1 1 3】



【請求項 100】

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

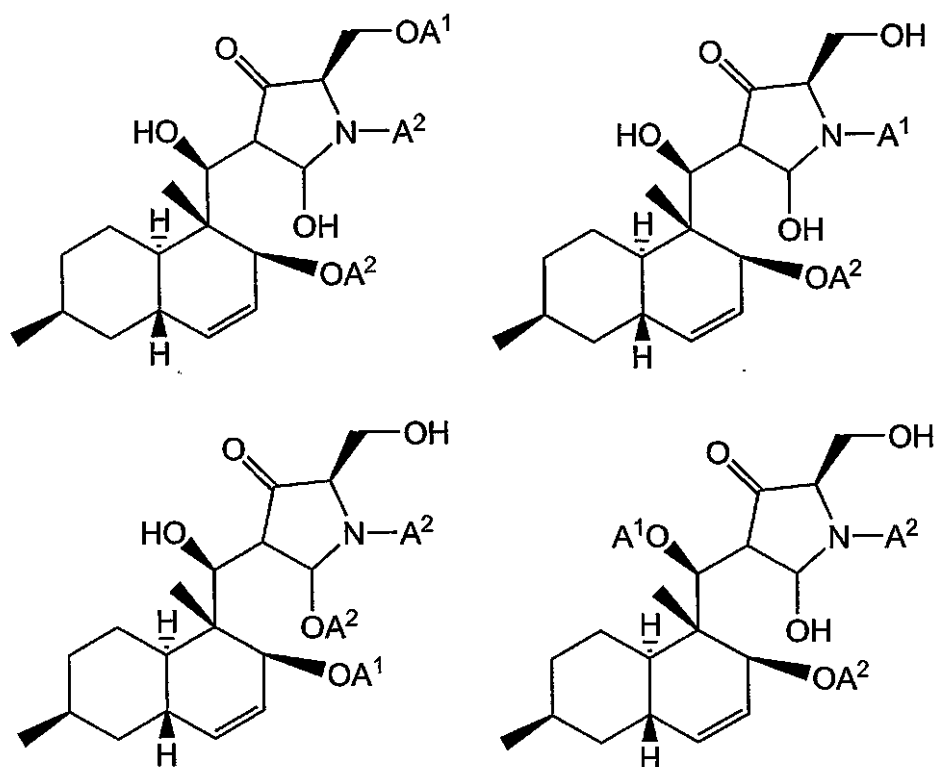
【化 1 1 4】



【請求項 1 0 1】

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

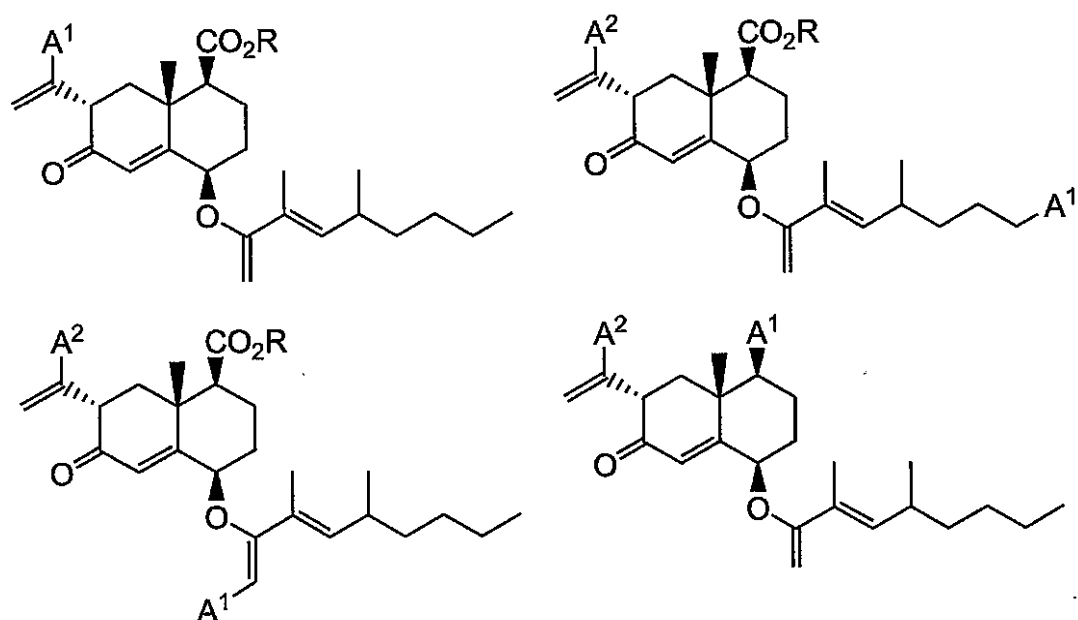
【化 1 1 5】



【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：

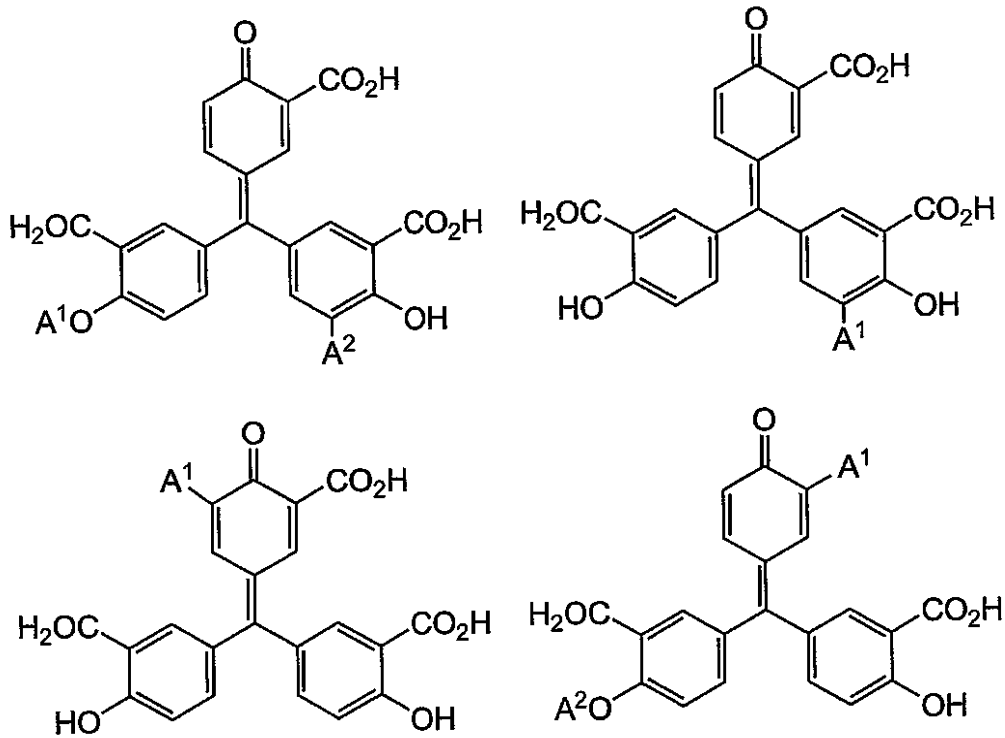
【化 1 1 6】



【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：

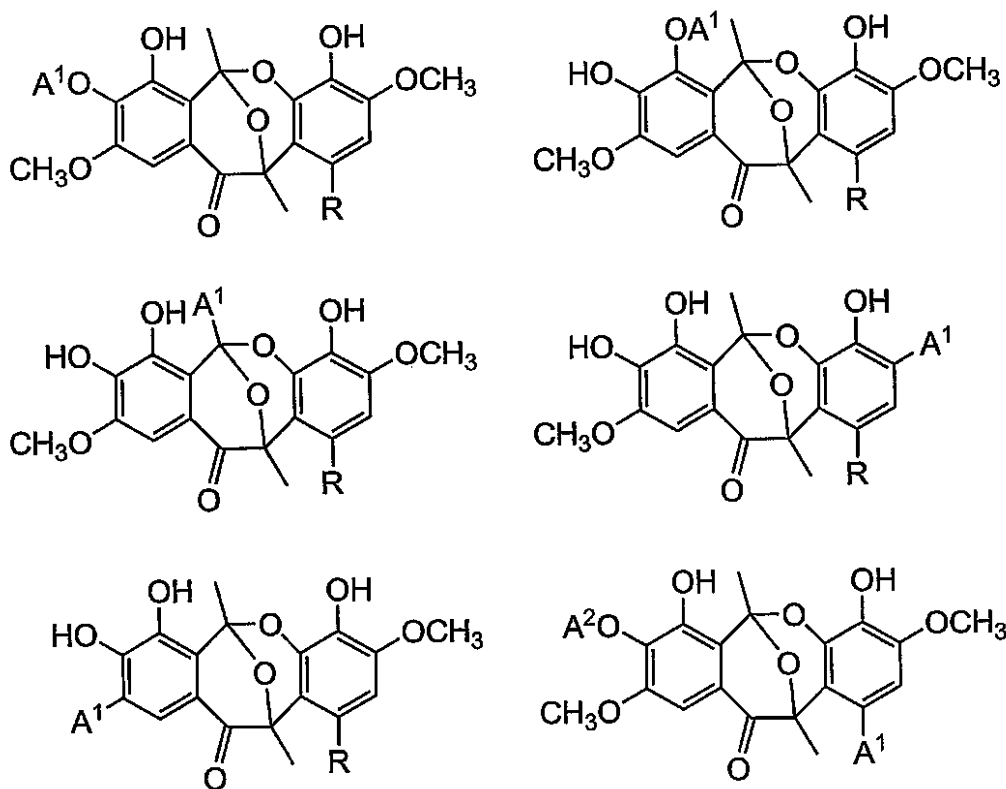
【化 1 1 7】



【請求項 1 0 4】

式 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：

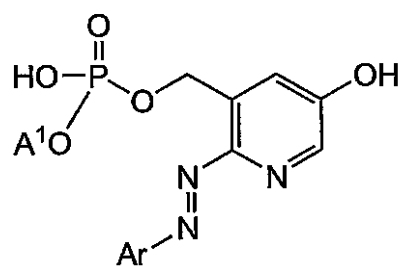
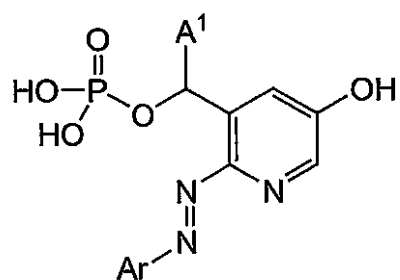
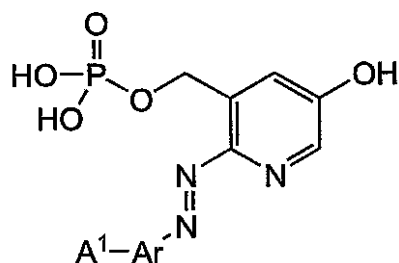
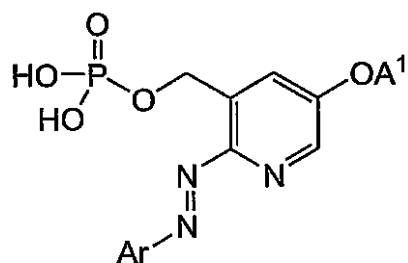
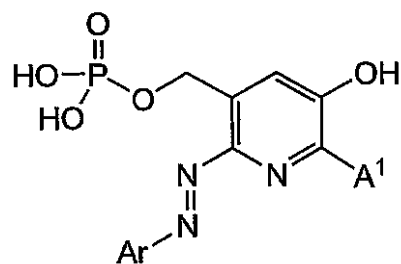
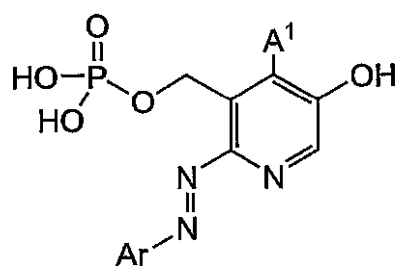
【化 1 1 8】



【請求項 1 0 5】

式 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：

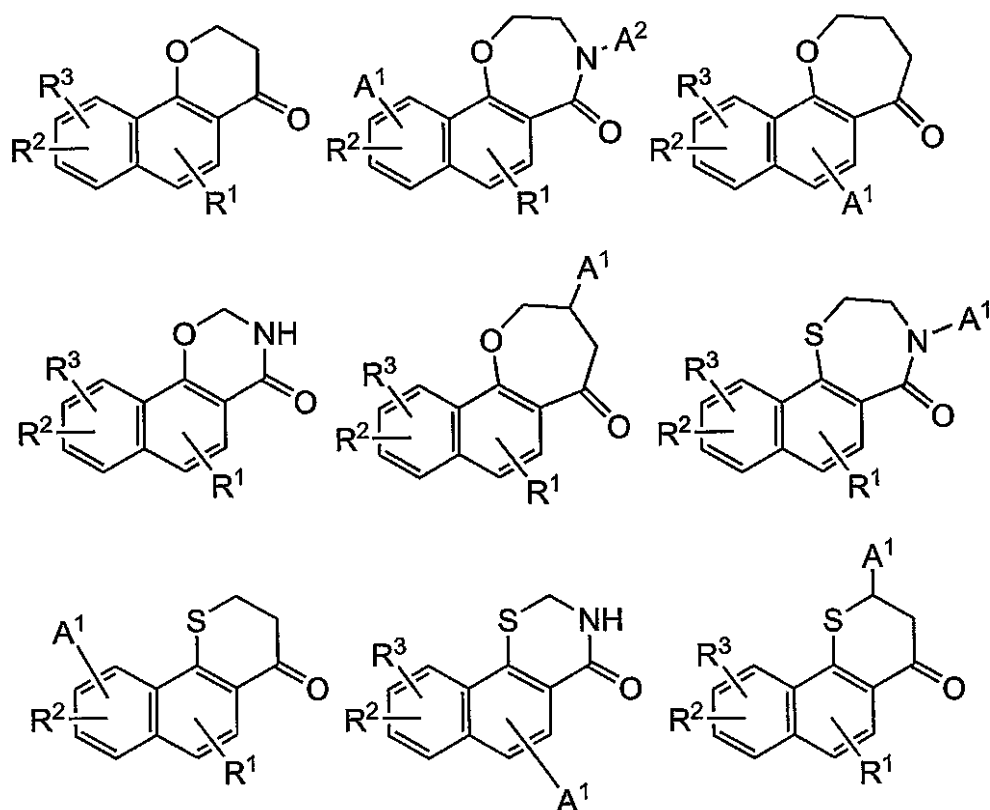
【化 1 1 9】



【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 HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 1 2 0】



ここで、 R^1 は、H、置換または非置換 C_{1-6} アルキル、ハロ、 NO_2 、 NH_2 、 CO_2H 、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

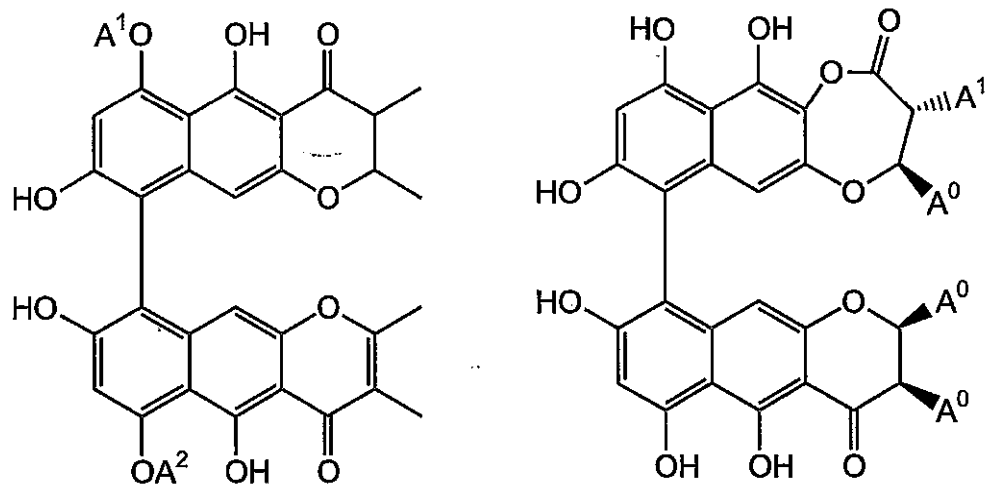
R^2 および R^3 は、別個に、H、 C_{1-6} アルキルまたはアルコキシ、ハロ、 NH_2 、 C_{1-6} アルキルアミノ、ジ(C_{1-6} アルキル)アミノ、 NO_2 、CN、 $CONH_2$ 、 CO_2H 、 C_{2-7} アルキルカルボニルアミノ、 C_{3-13} アルコキシカルボニルアミノアルコキシ、 C_{1-6} アミノアルコキシ、 C_{3-13} アルキルカルボニルアミノアルコキシである、

化合物。

【請求項 107】

式 X X 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：

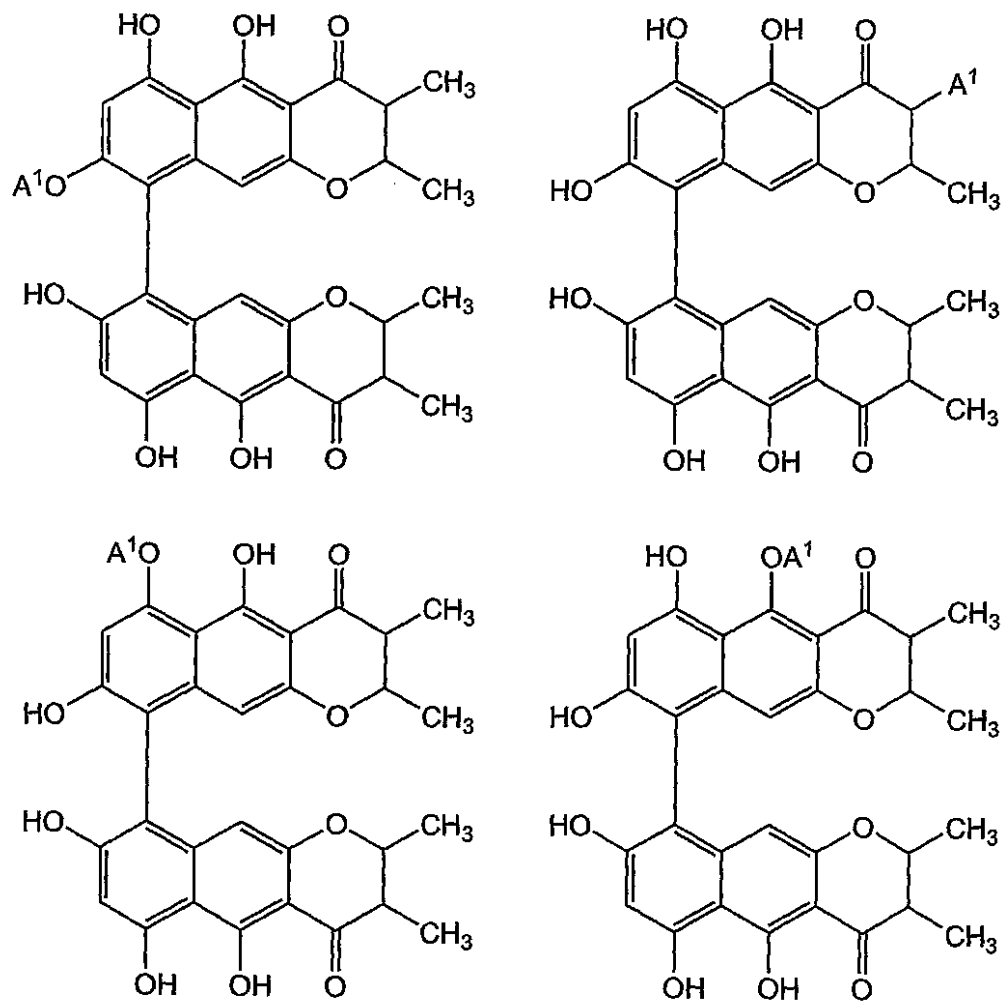
【化 1 2 1】



【請求項 1 0 8】

式 X X I 構造および全てのそれらのアトロプ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：

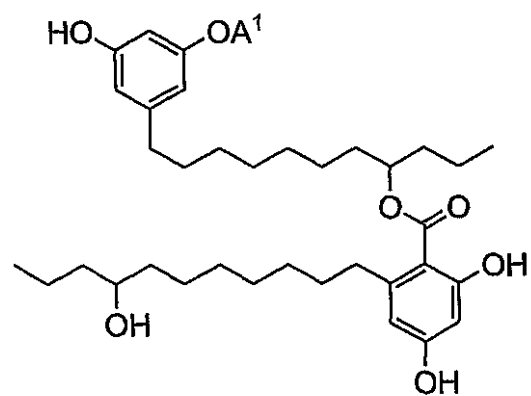
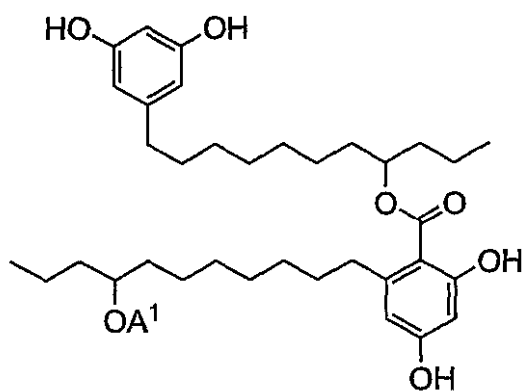
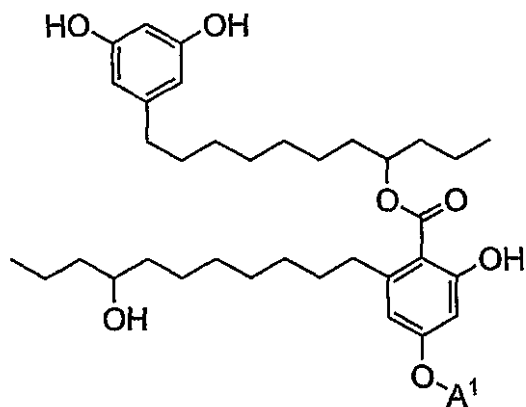
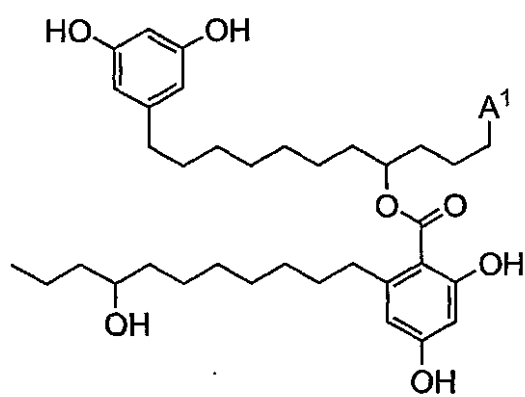
【化 1 2 2】



【請求項 1 0 9】

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：

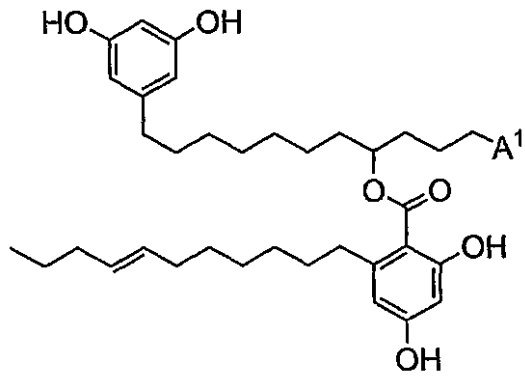
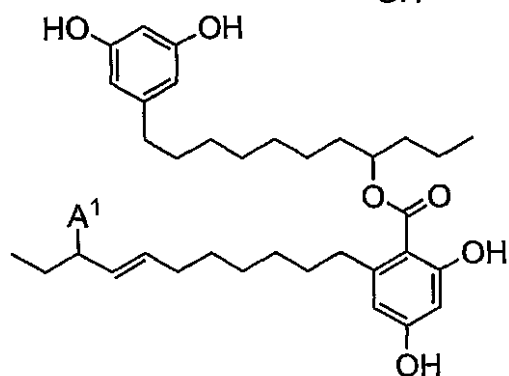
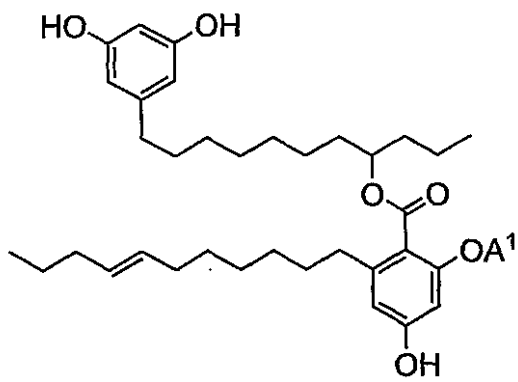
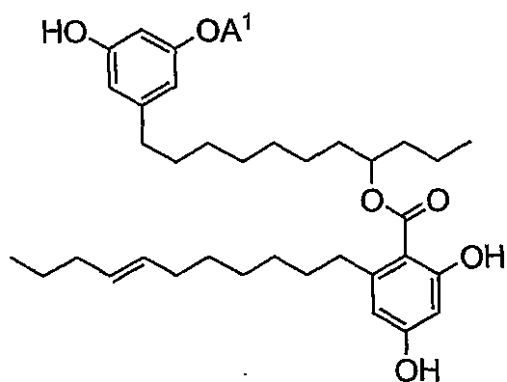
【化 1 2 3】



【請求項 1 1 0】

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 1 2 4】

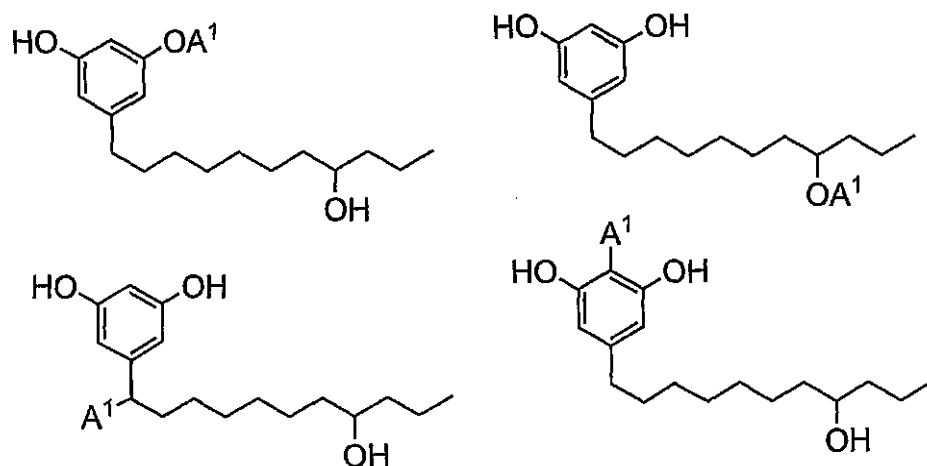


【請求項 1 1 1】

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

:

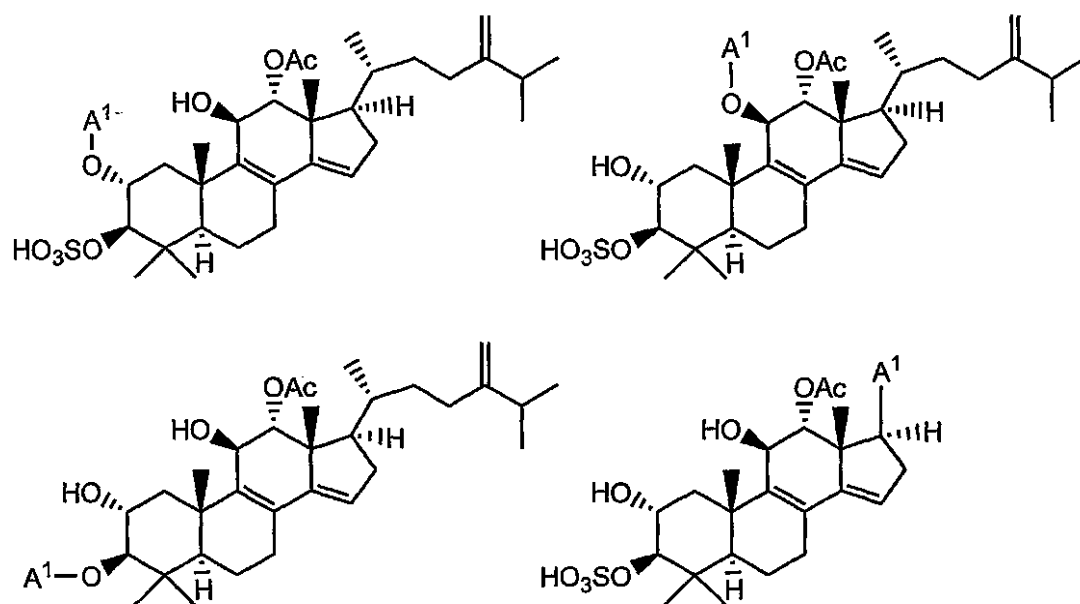
【化 1 2 5】



【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：

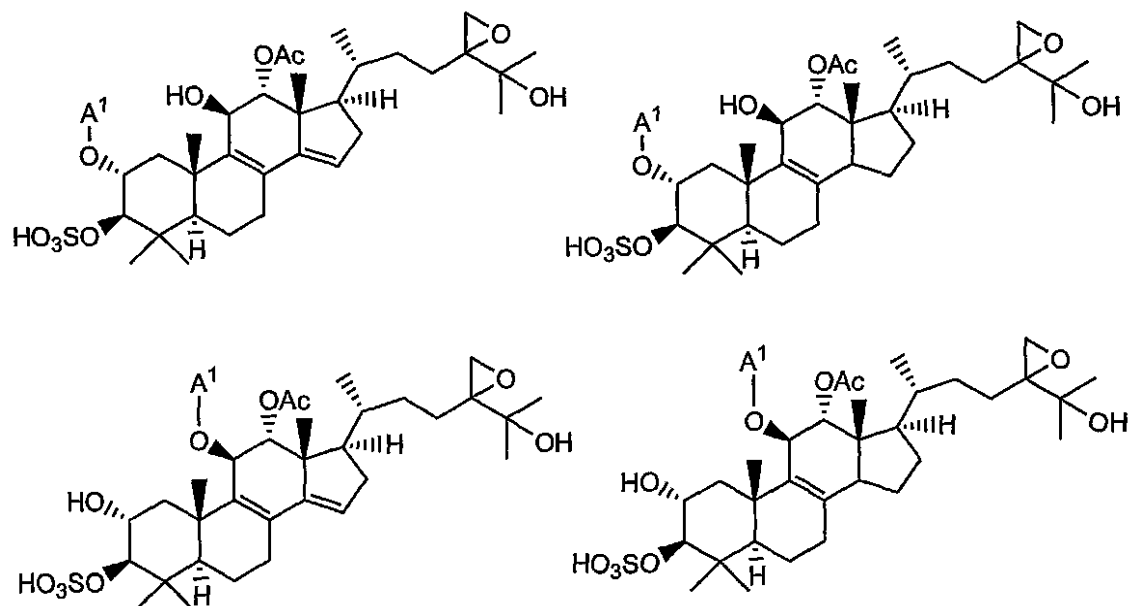
【化 1 2 6】



【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：

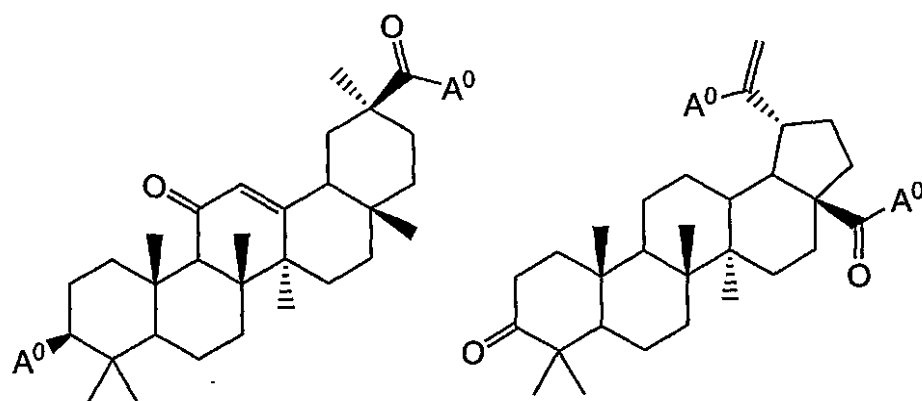
【化 1 2 7】



【請求項 1 1 4】

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
:

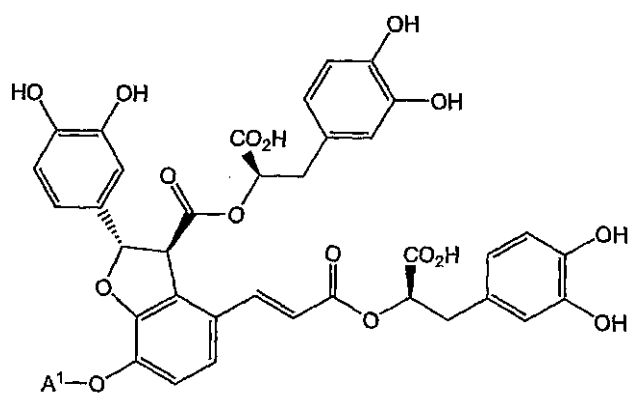
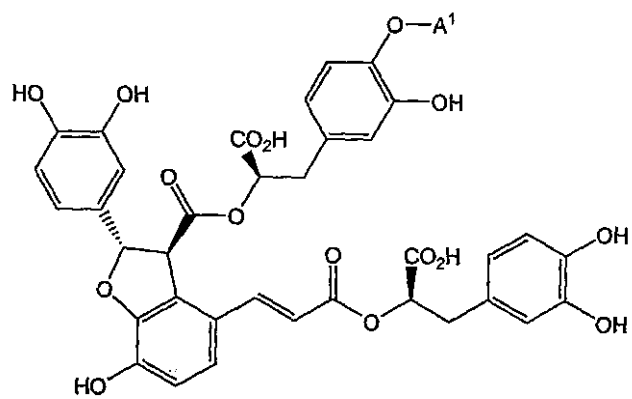
【化 1 2 8】



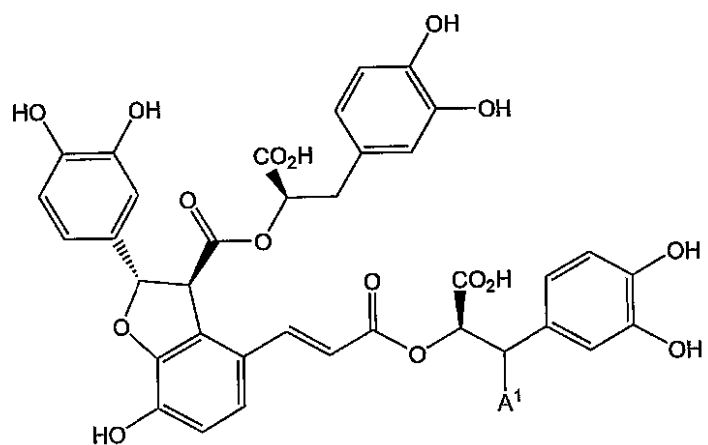
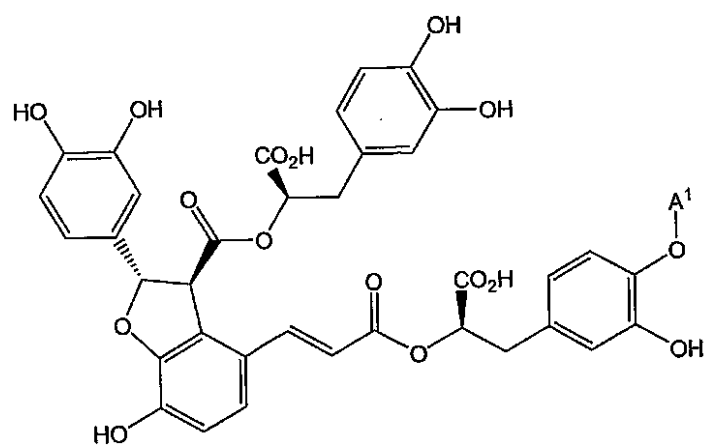
【請求項 1 1 5】

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
:

【化 1 2 9】



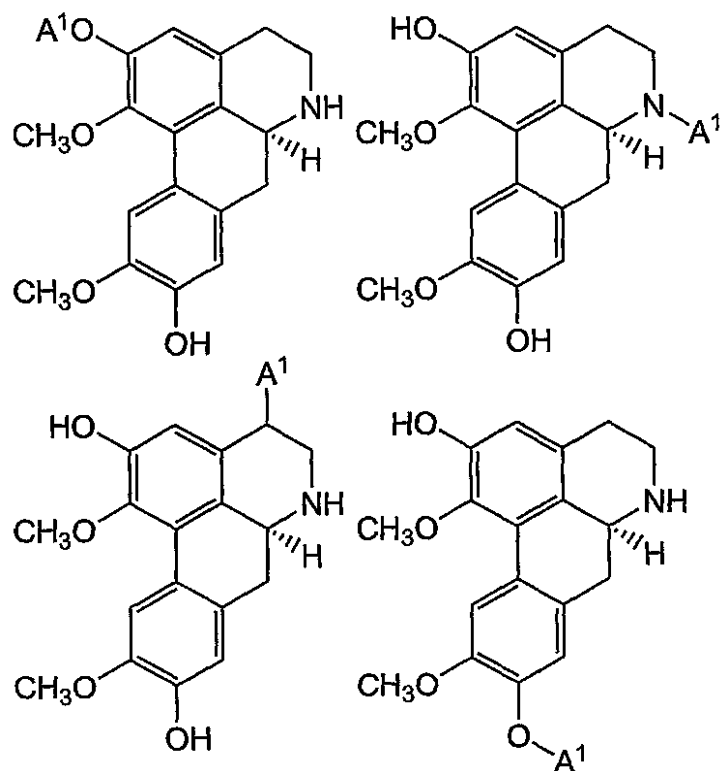
【化 1 3 0】



【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
:

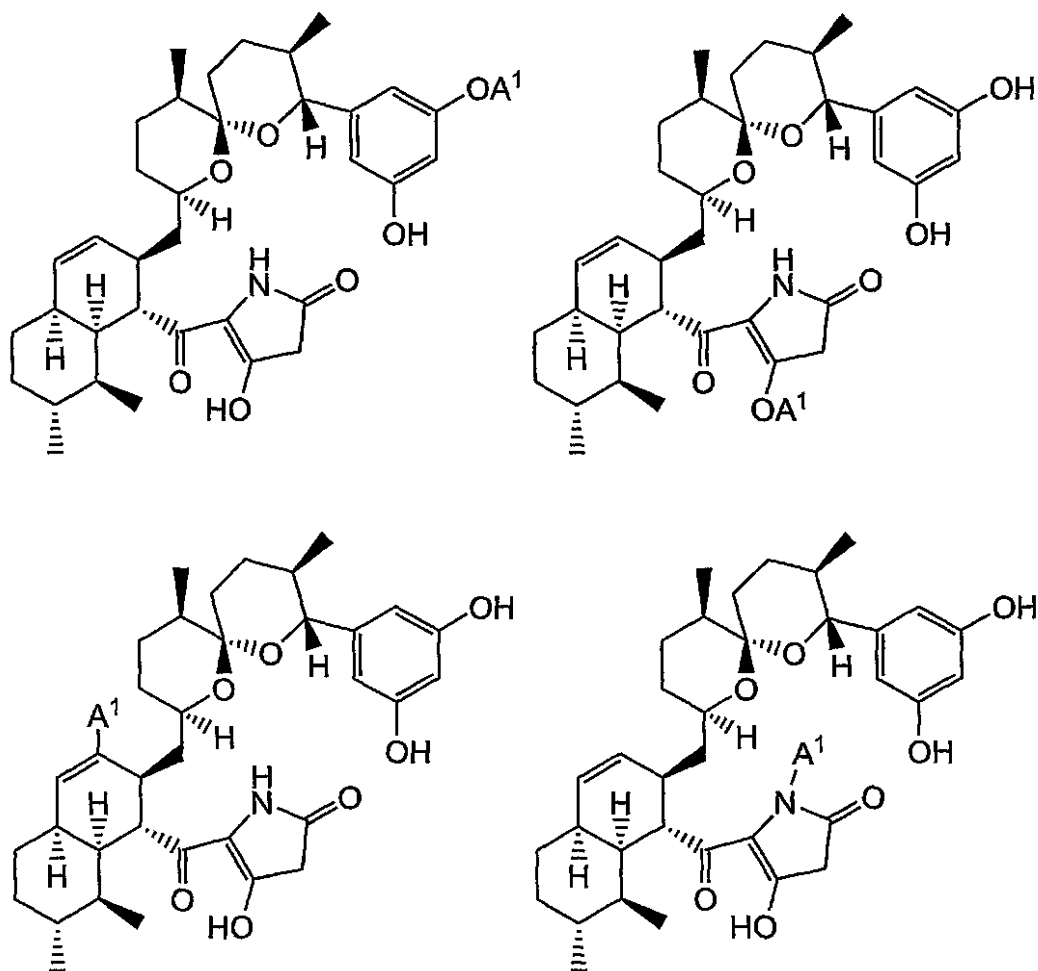
【化 1 3 1】



【請求項 1 1 7】

式 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 :

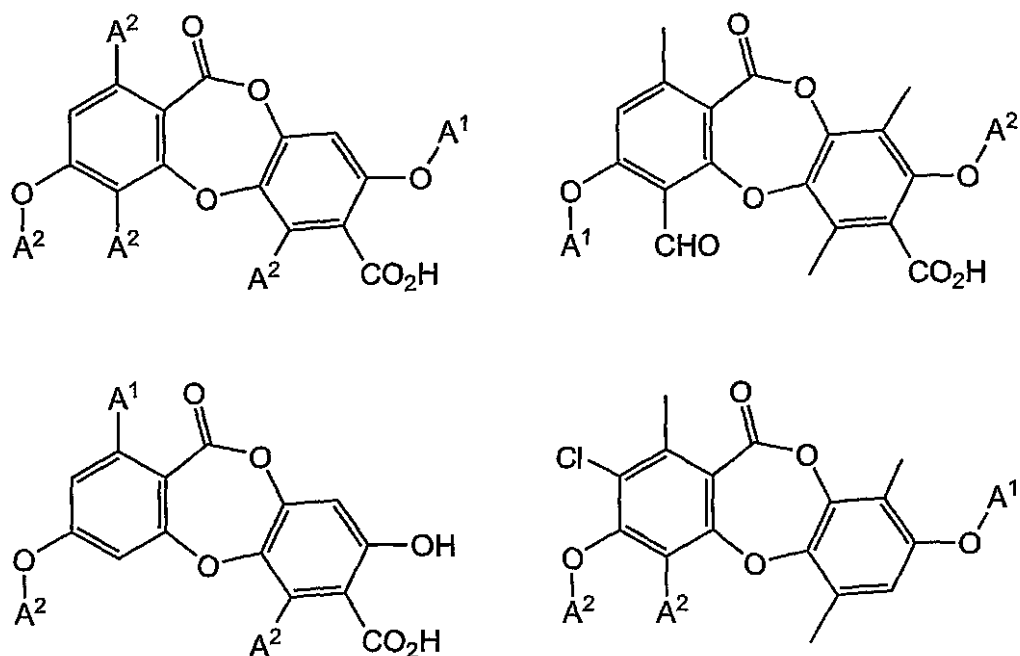
【化 1 3 2】



【請求項 1 1 8】

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

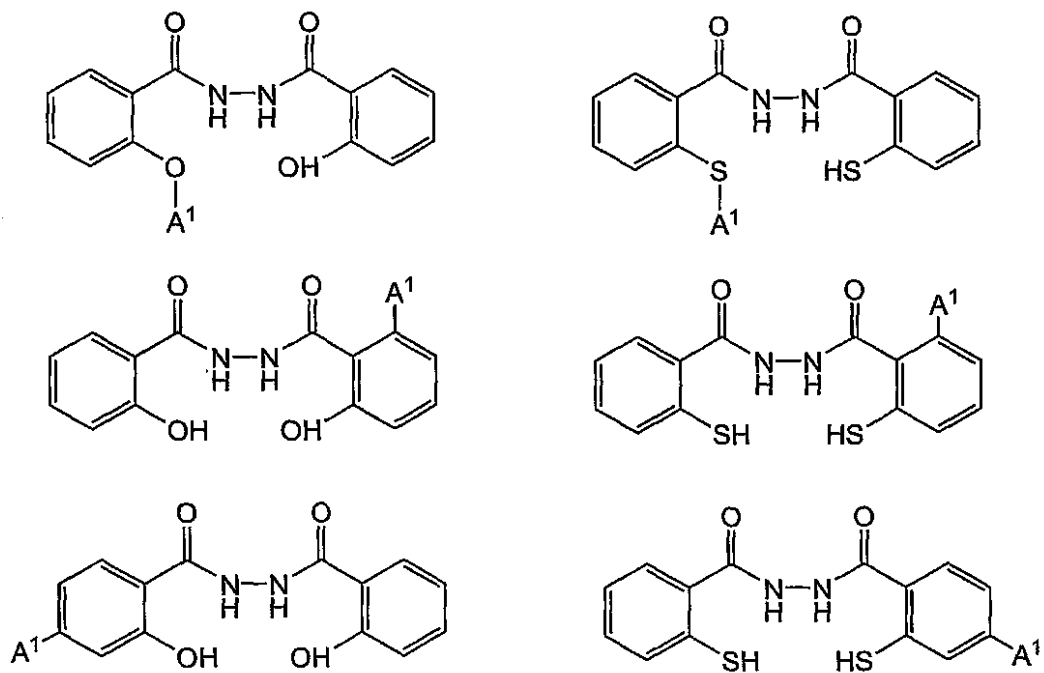
【化 1 3 3】



【請求項 119】

式 XXVI 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 134】

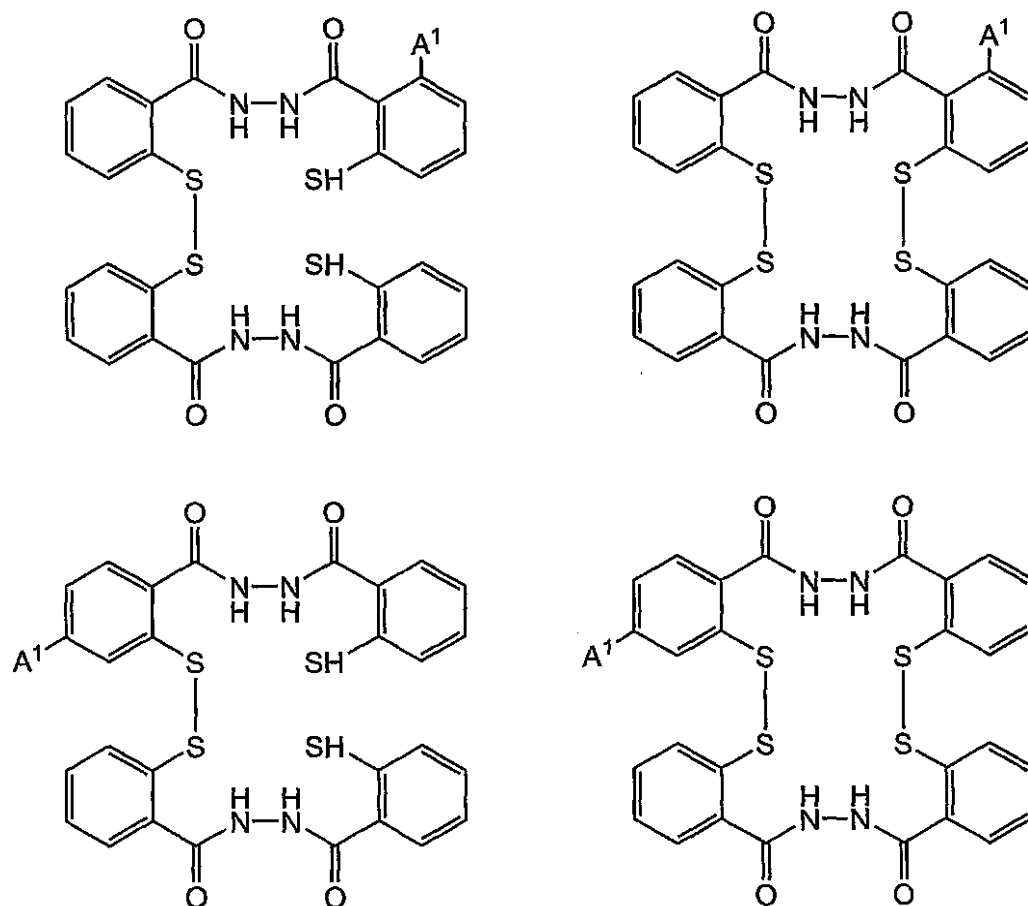


ここで、上記構造におけるフェニル環、N、Sまたはヒドロキシル酸素原子の各々は、別個に、A⁰基で置換され得る、化合物。

【請求項 120】

式 XXVI 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 3 5】

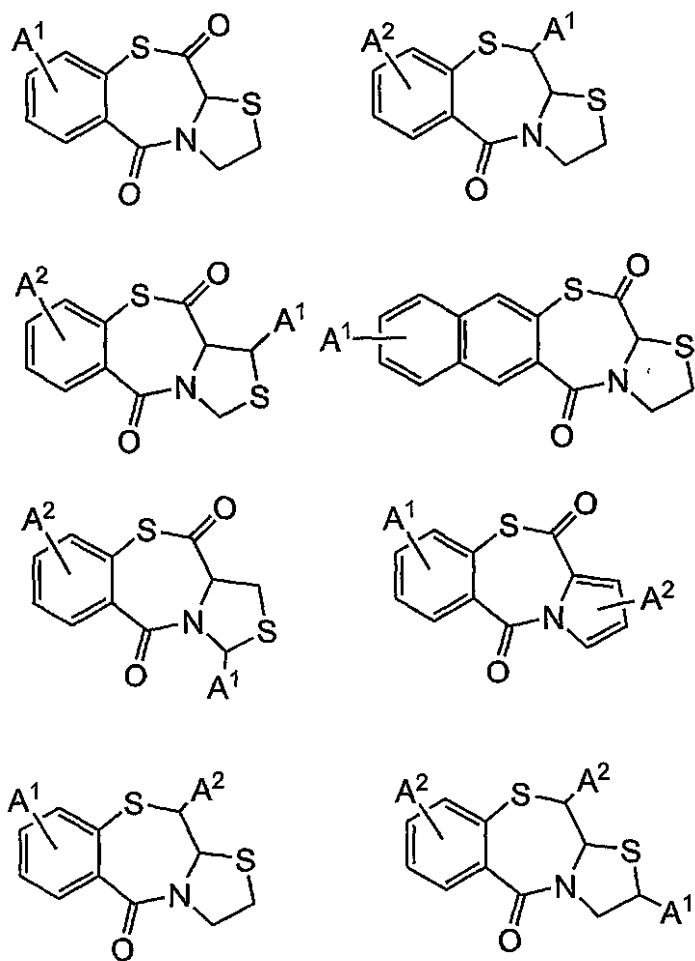


ここで、上記構造におけるフェニル環、N、Sまたはヒドロキシル酸素原子の各々は、別個に、A⁰基で置換され得る、化合物。

【請求項 1 2 1】

式 XXVIIII 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：

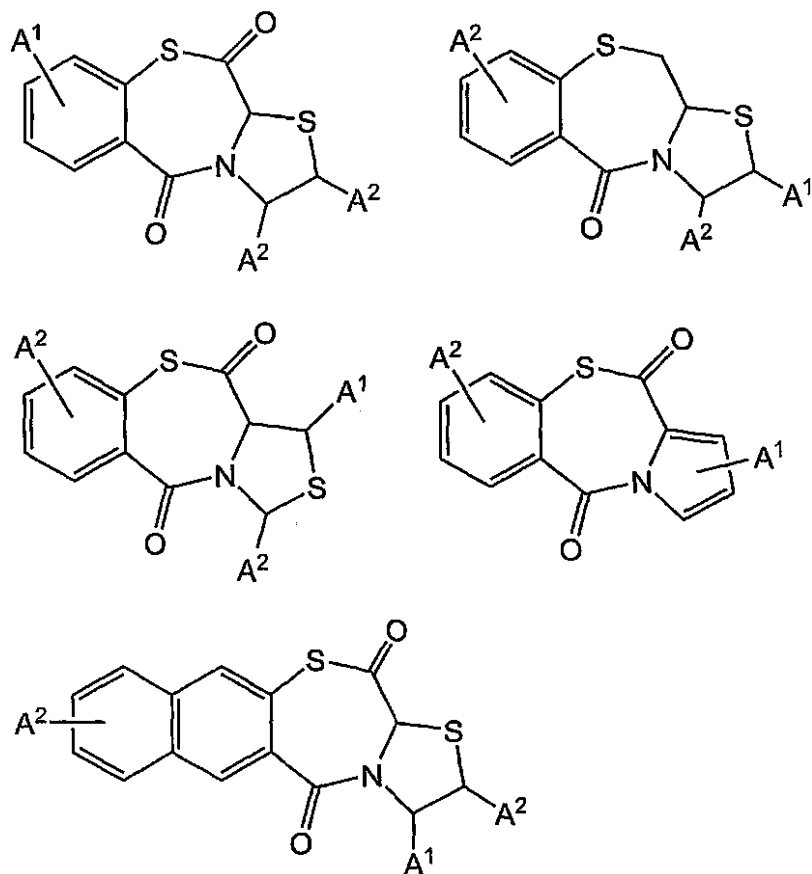
【化 1 3 6】



【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：

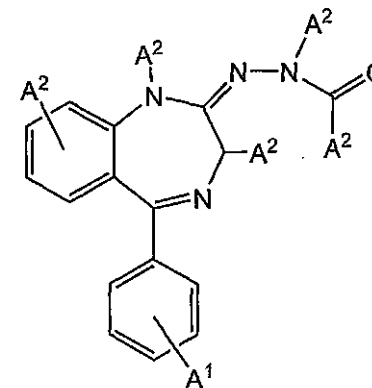
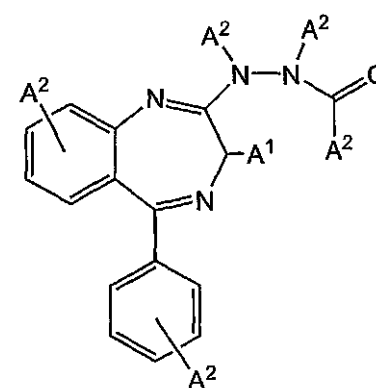
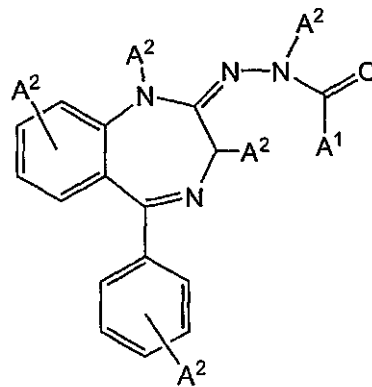
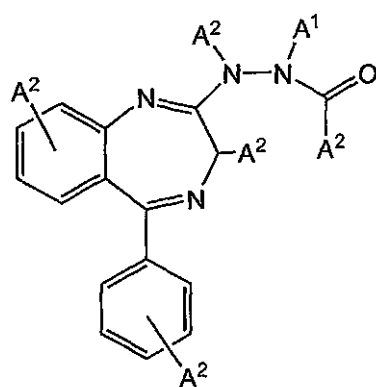
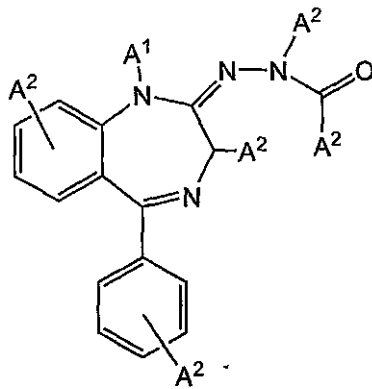
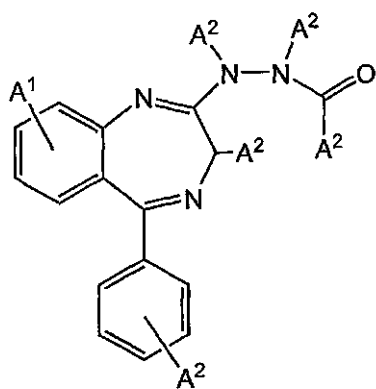
【化 1 3 7】



【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
:

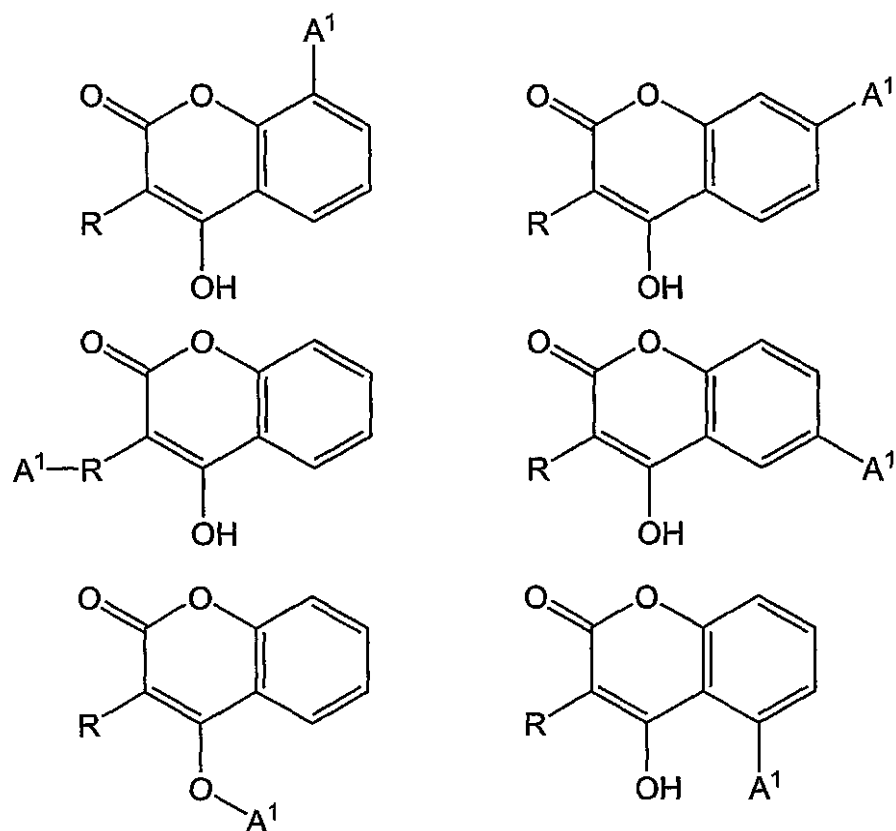
【化 1 3 8】



【請求項 1 2 4】

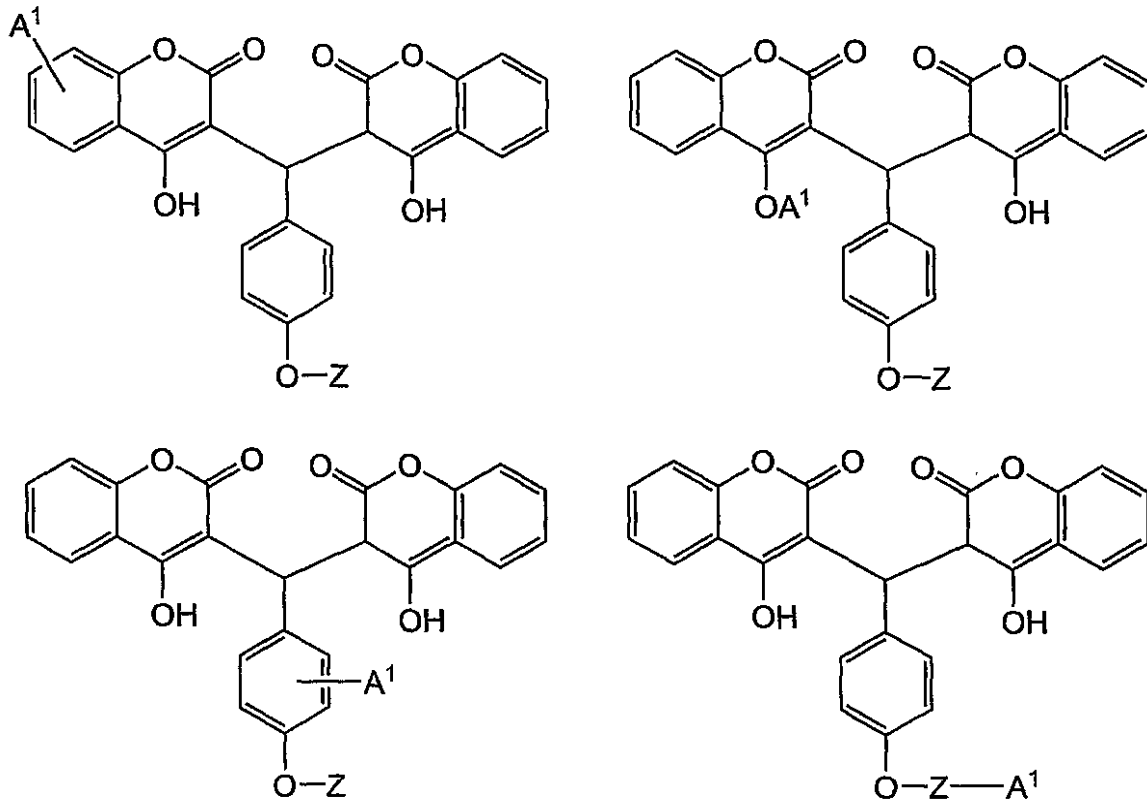
式 X X X の構造から選択される、請求項 2 に記載の HIV インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 1 3 9】



ここで、Rは、H、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ 置換アルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_2 \sim C_{18}$ 置換アルキニル、 $C_6 \sim C_{20}$ 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

【化 1 4 0】



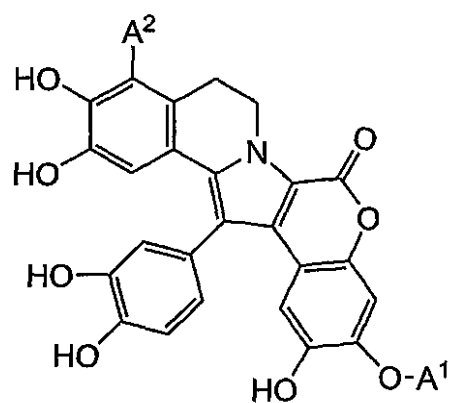
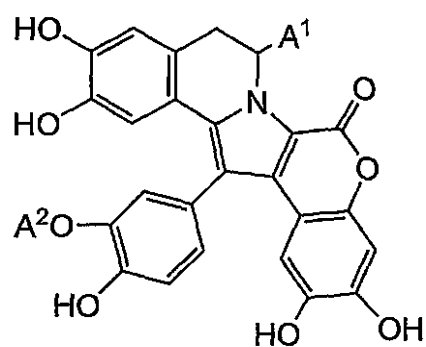
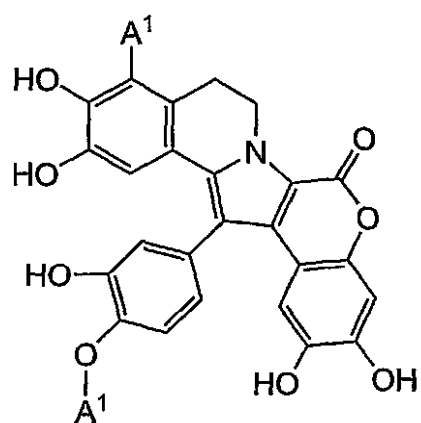
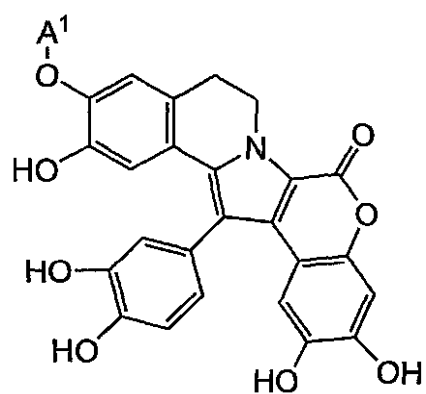
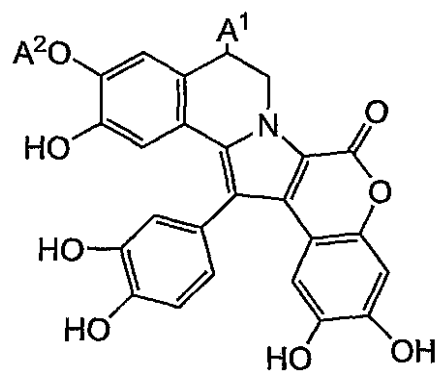
ここで、Zは、 $-C(O)Ar$ または $-SO_2R$ である；そして

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、

化合物。

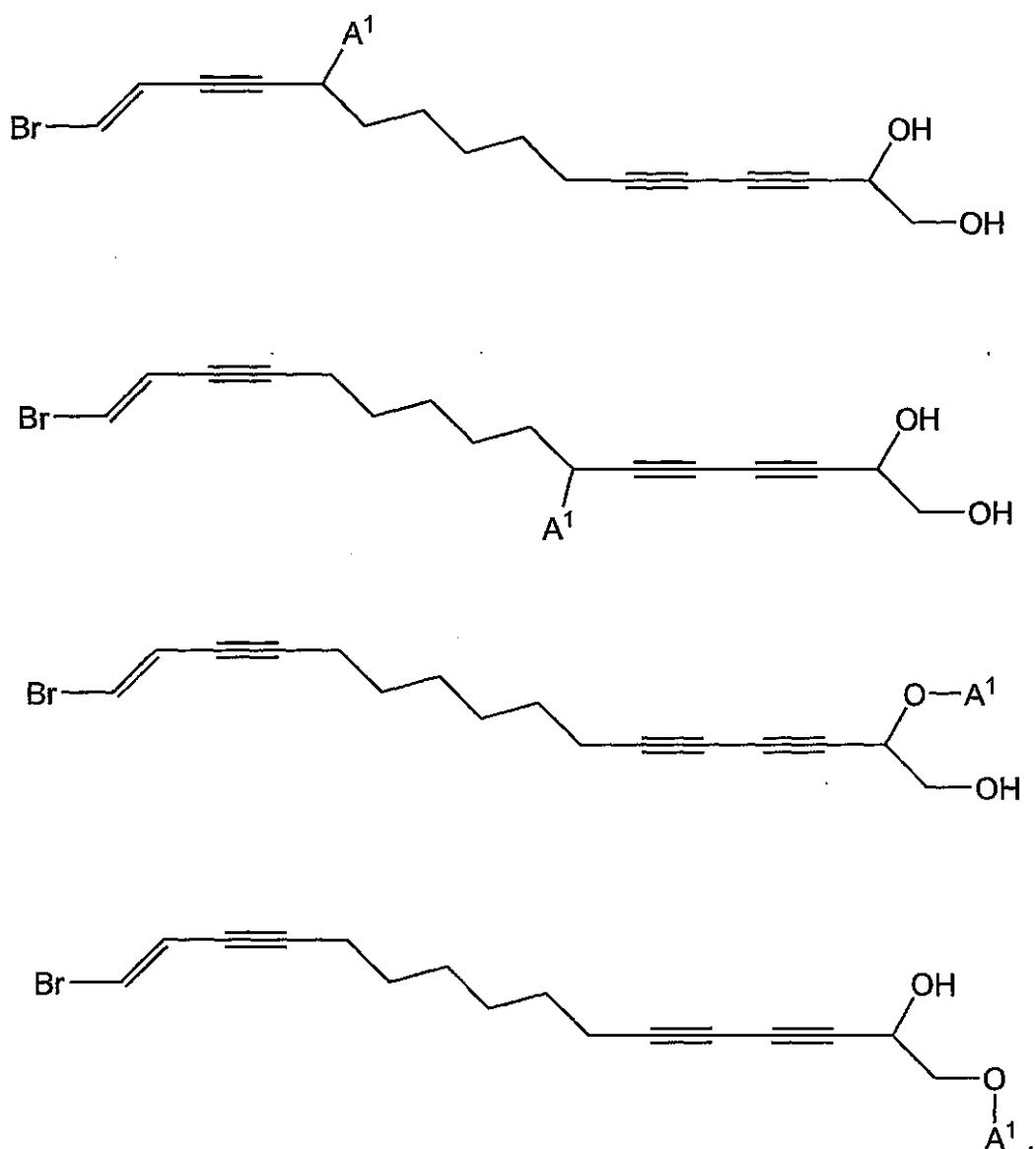
【請求項 1 2 5】

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：

Oc1cc(O)c(O)c(O)c1C2=C3C(=C2)OC(=O)C3=N2Cc1ccc(O)c(O)c1A1

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
：

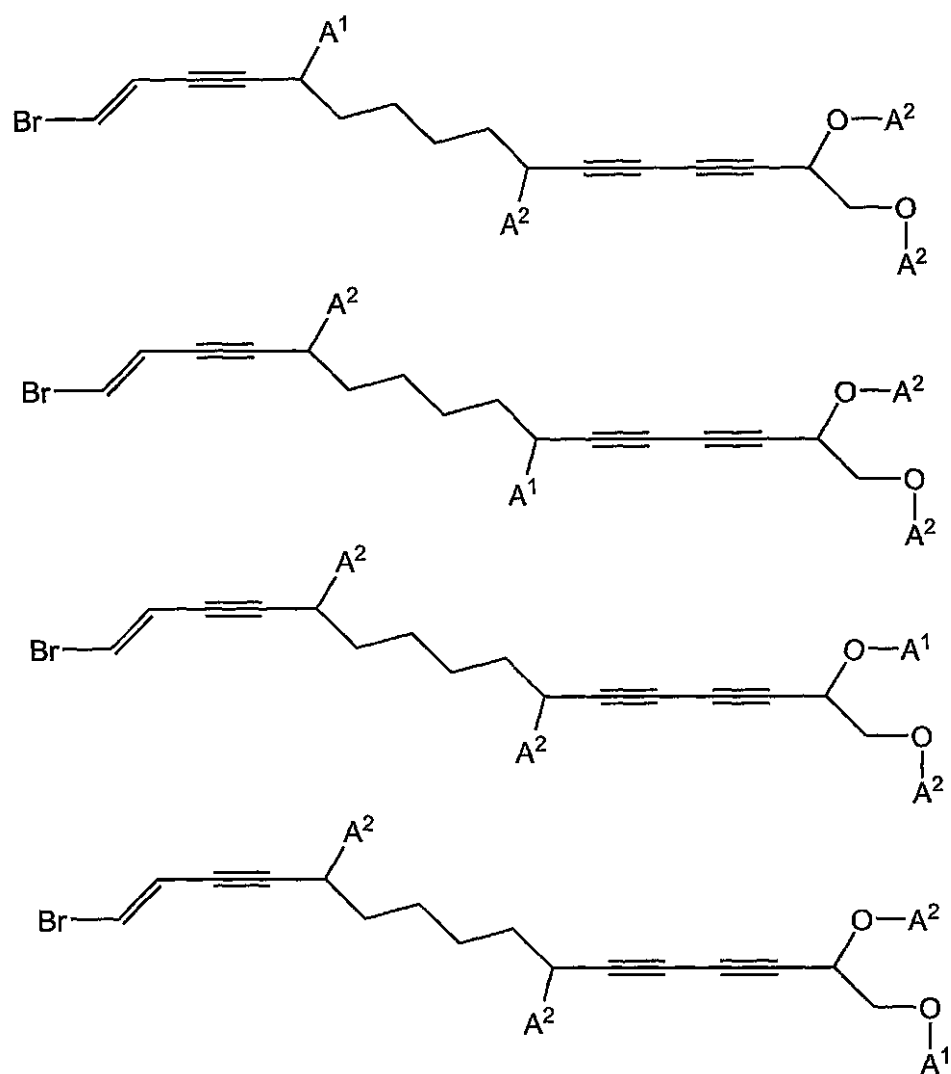
【化 1 4 2】



【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
:

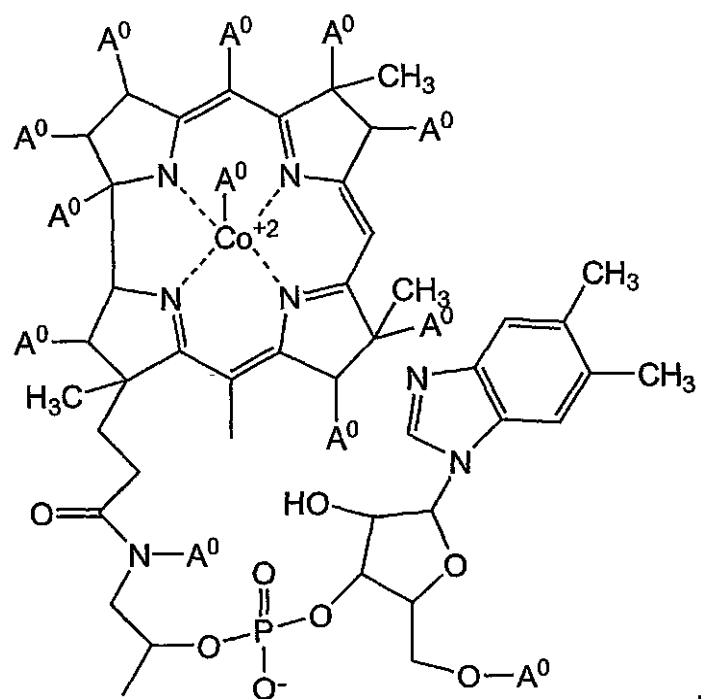
【化 1 4 3】



【請求項 1 2 8】

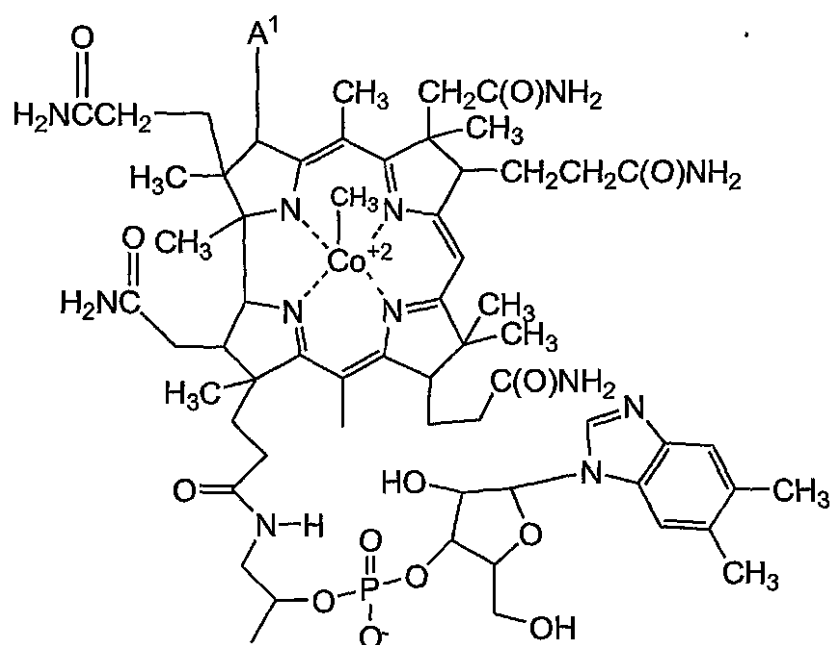
式 X X X I I の構造から選択される、請求項 2 に記載の H I V インテグラーゼ阻害剤化合物：

【化 1 4 4】



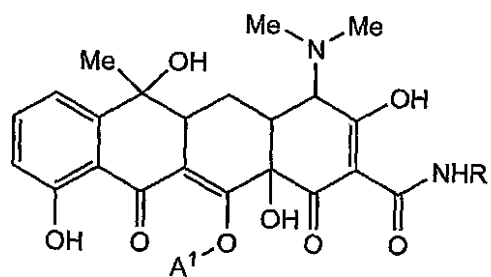
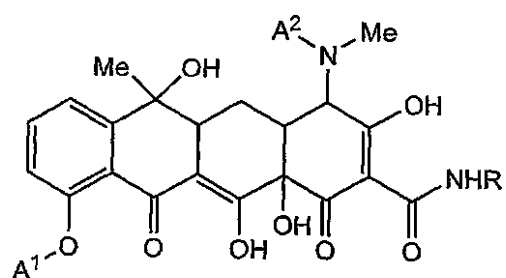
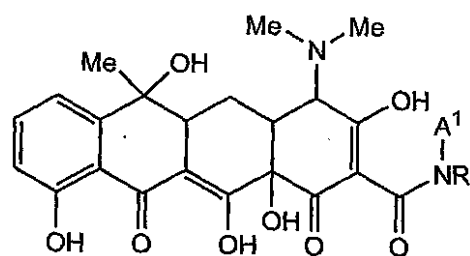
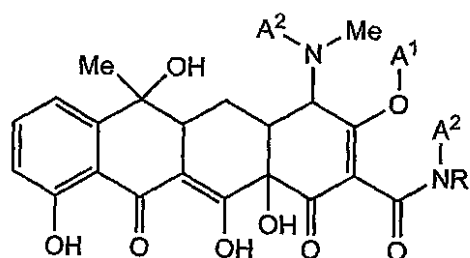
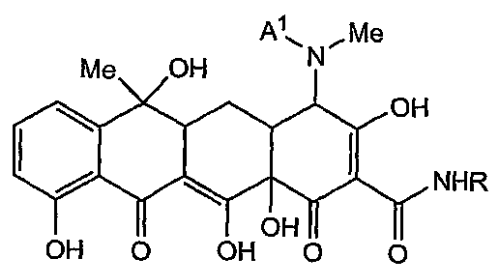
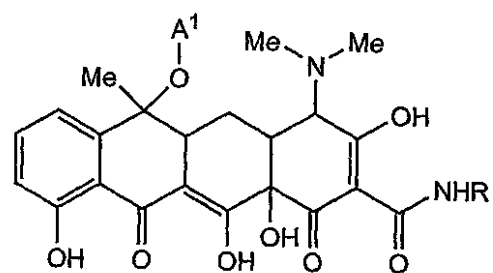
【請求項 1 2 9】

式 XXXII 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：

[illegible]

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：

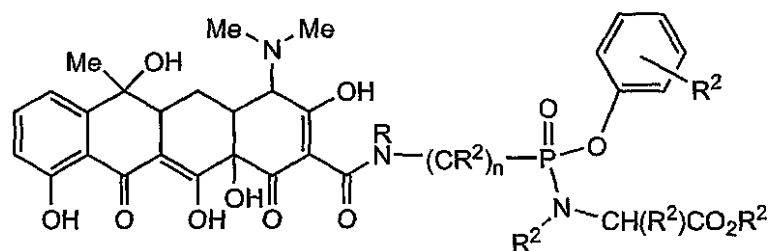
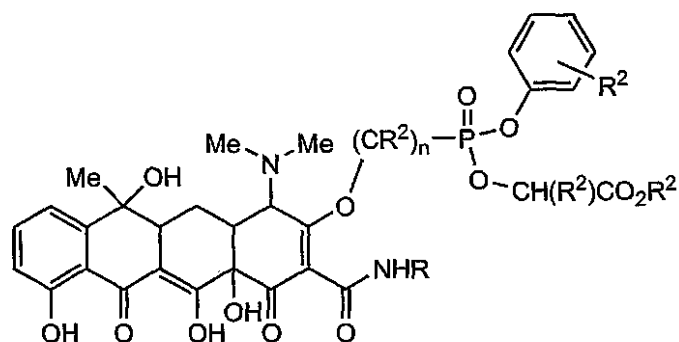
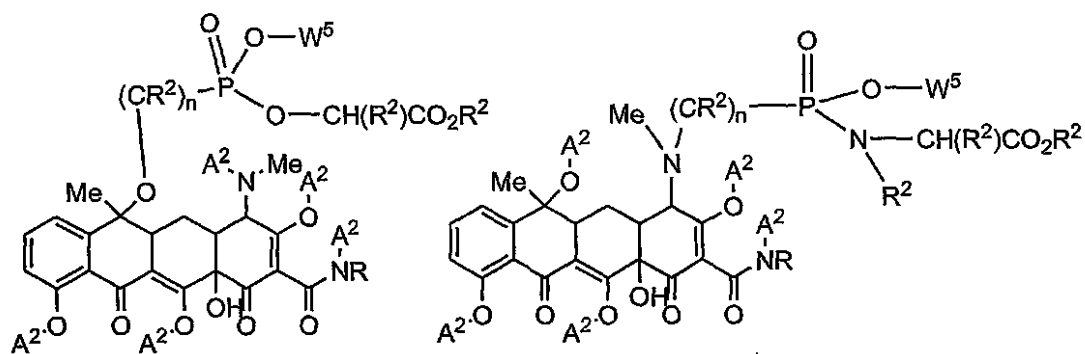
【化 1 4 6】



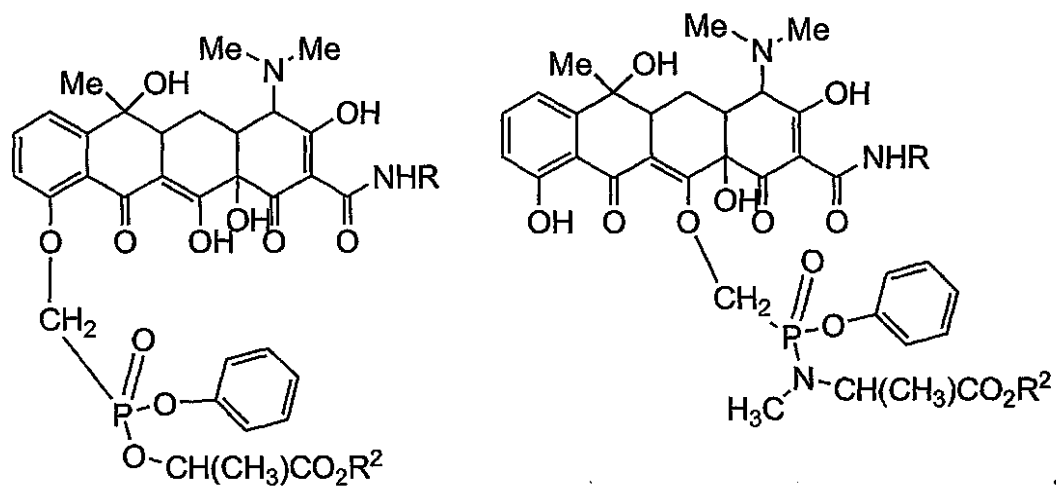
【請求項 1 3 1】

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

【化 1 4 7】



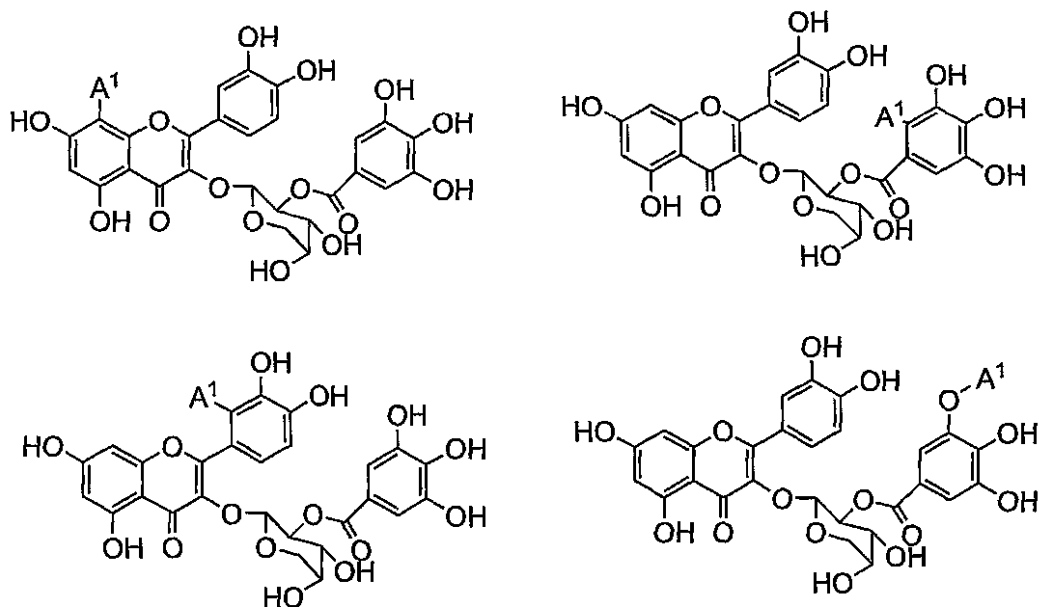
【化 1 4 7 - a】



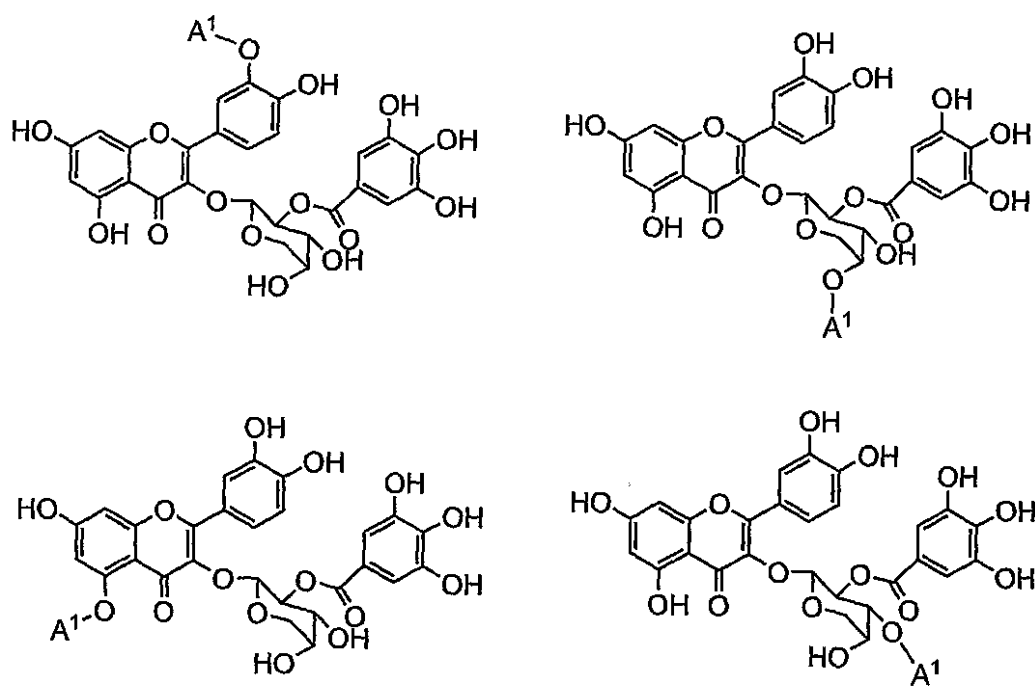
【請求項 1 3 2】

式 XXXIII 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】



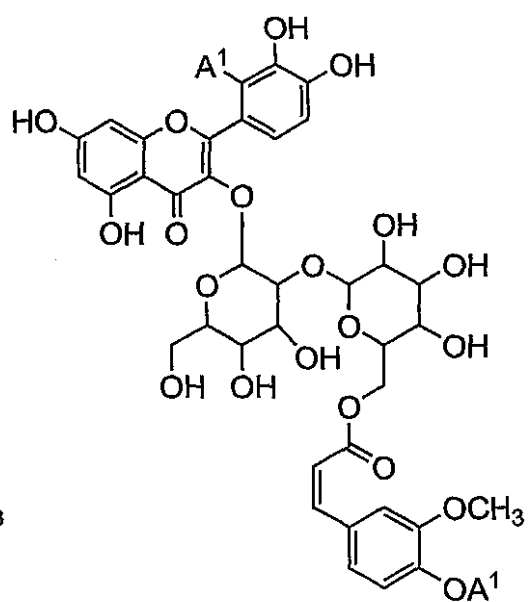
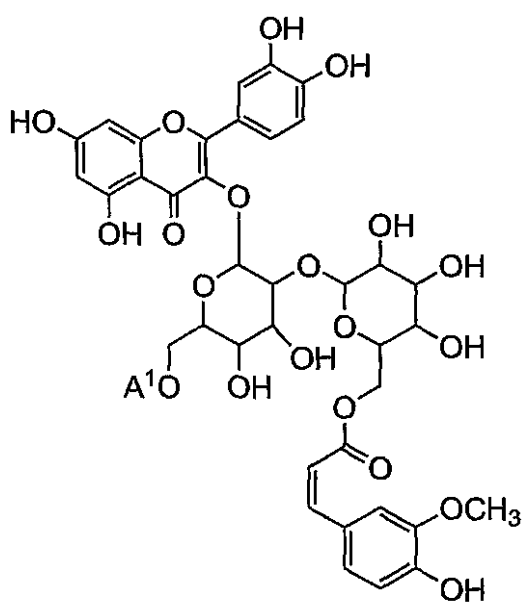
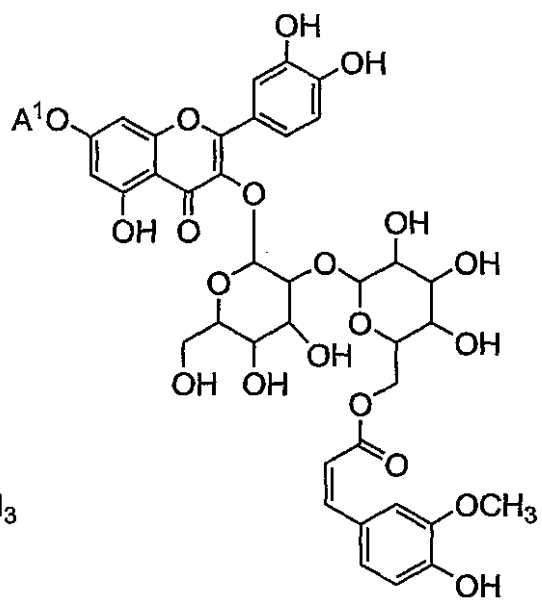
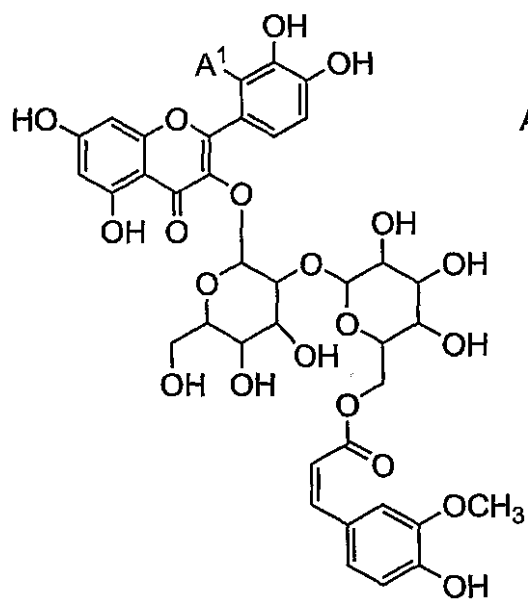
【化 1 4 9】



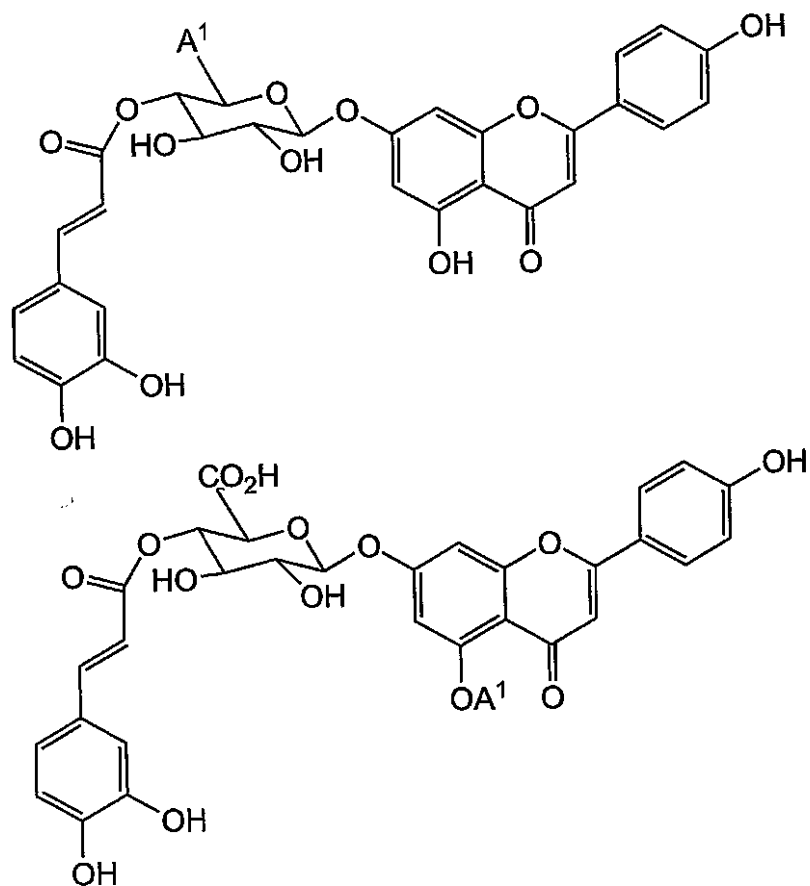
【請求項 1 3 3】

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 1 5 0】



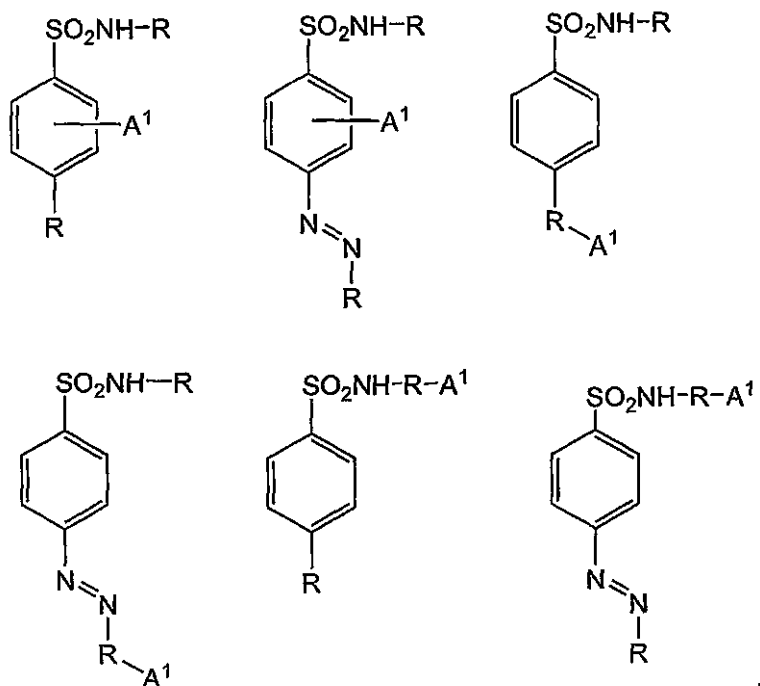
【化 1 5 2】



【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：

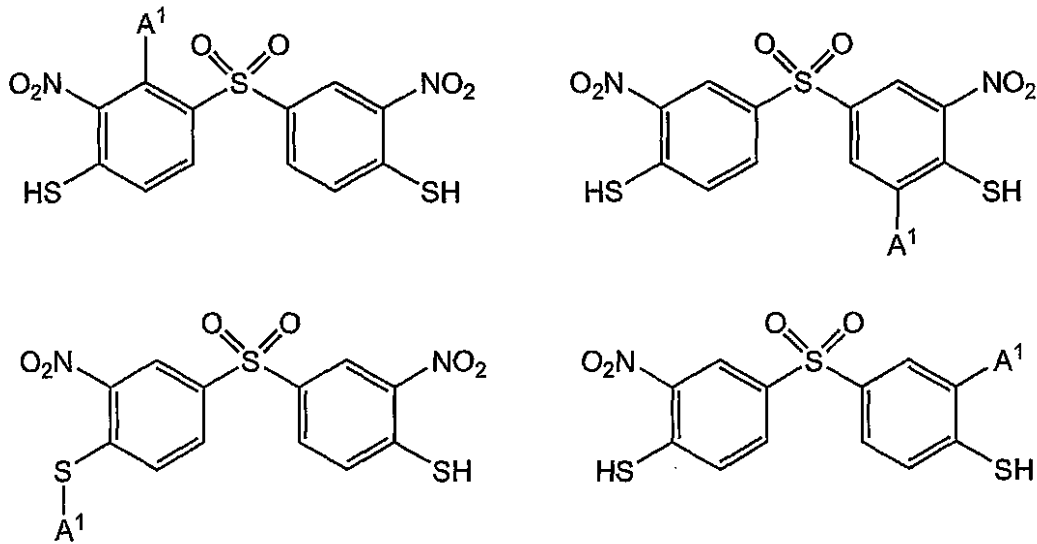
【化 1 5 3】



【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：

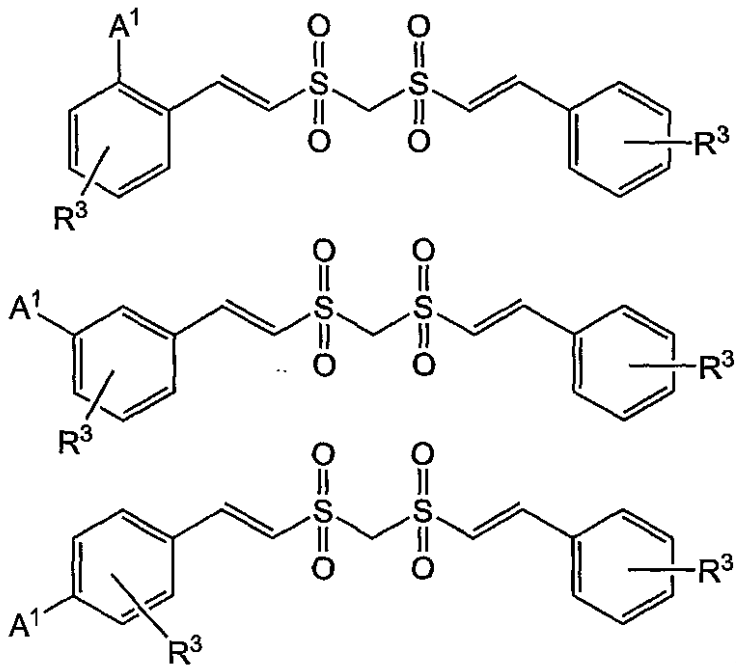
【化 154】



【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：

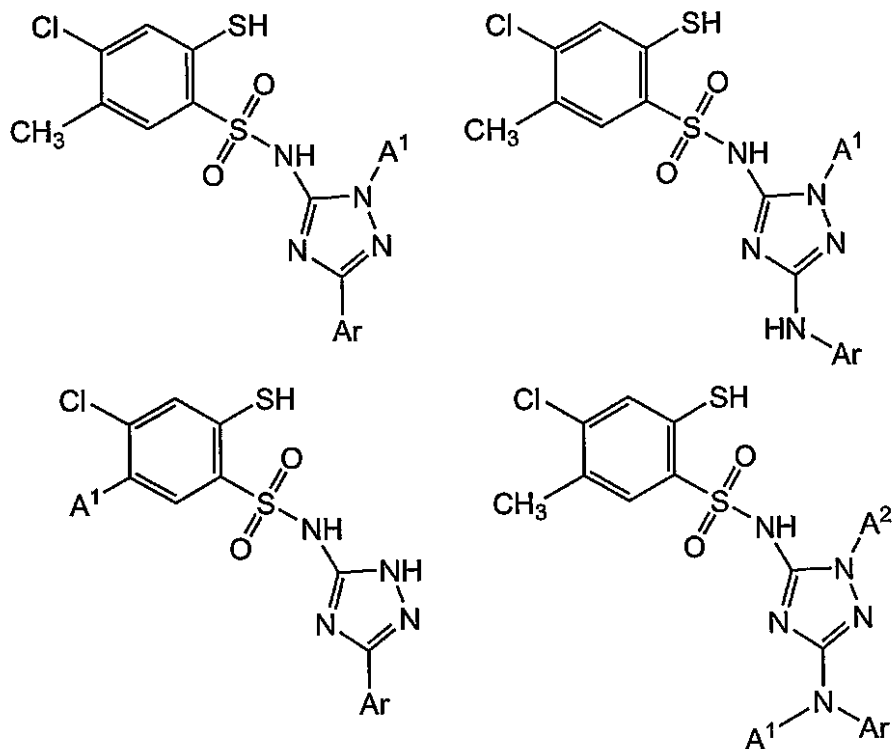
【化 155】



【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】

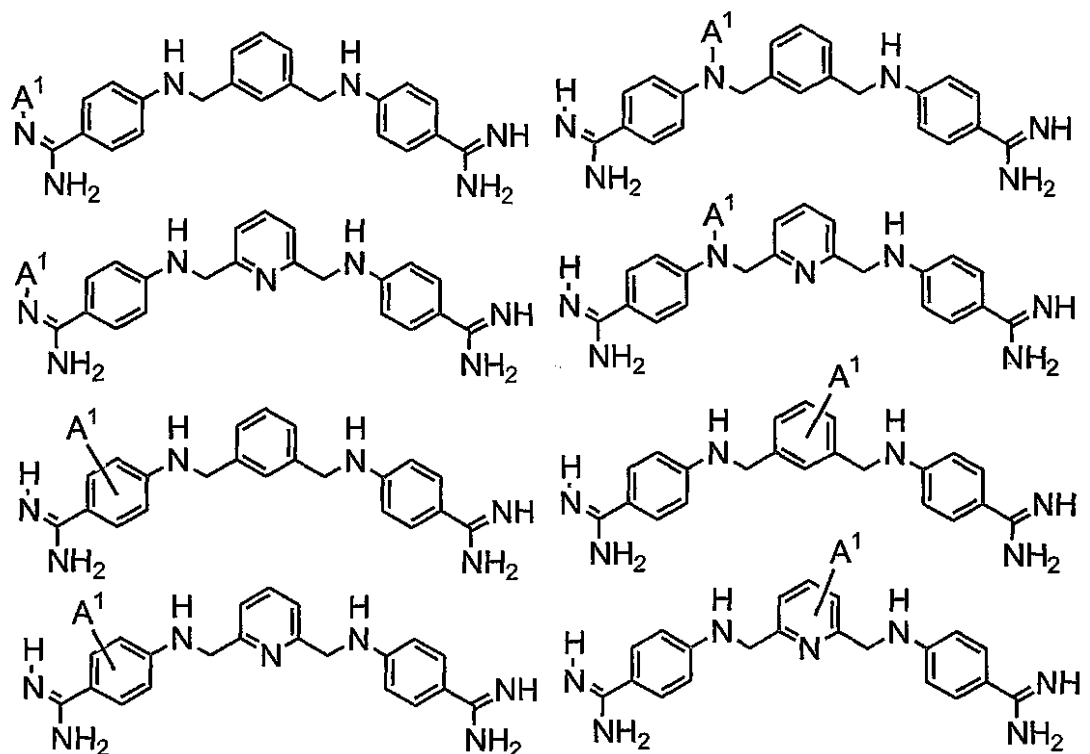


ここで、Ar は、炭素環または複素環である、化合物。

【請求項 1 3 8】

式 XXXV 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：

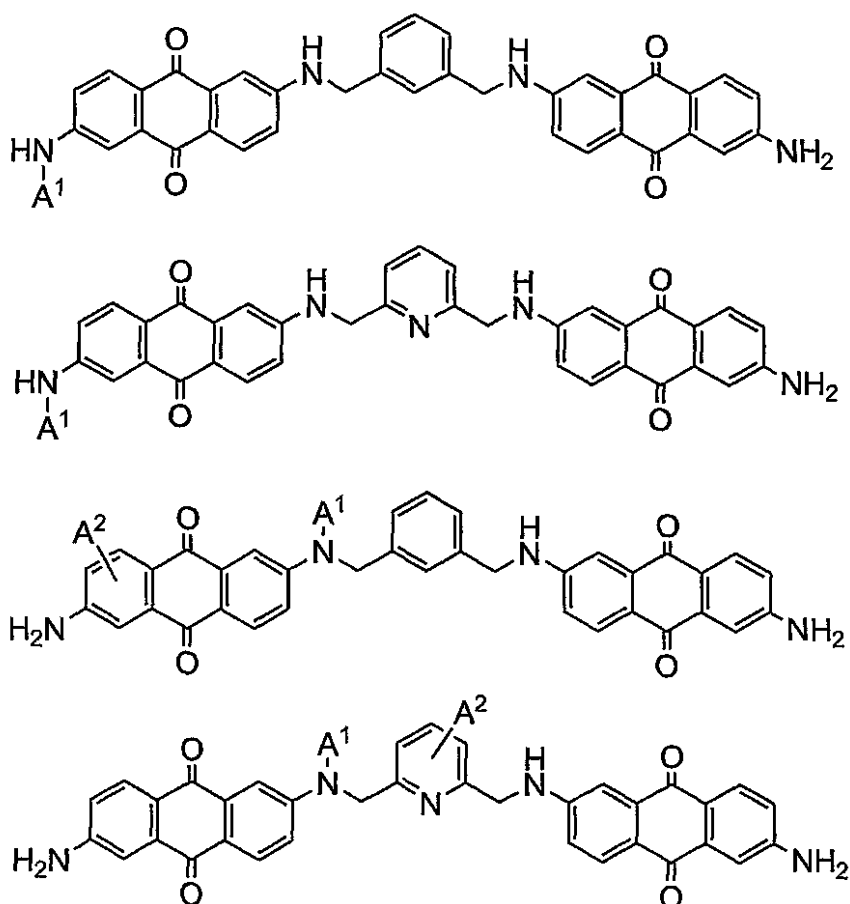
【化 1 5 7】



【請求項 1 3 9】

式 XXXV 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
:

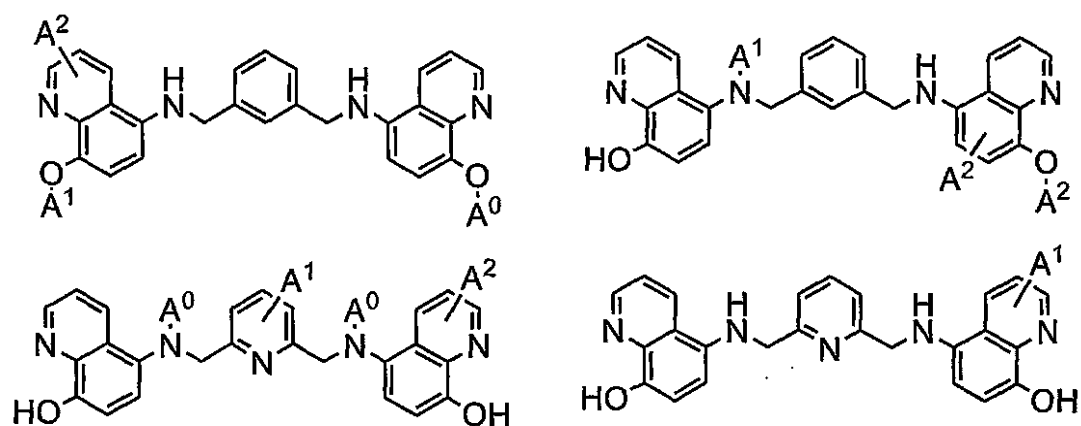
【化 158】



【請求項 140】

式 XXXV 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
:

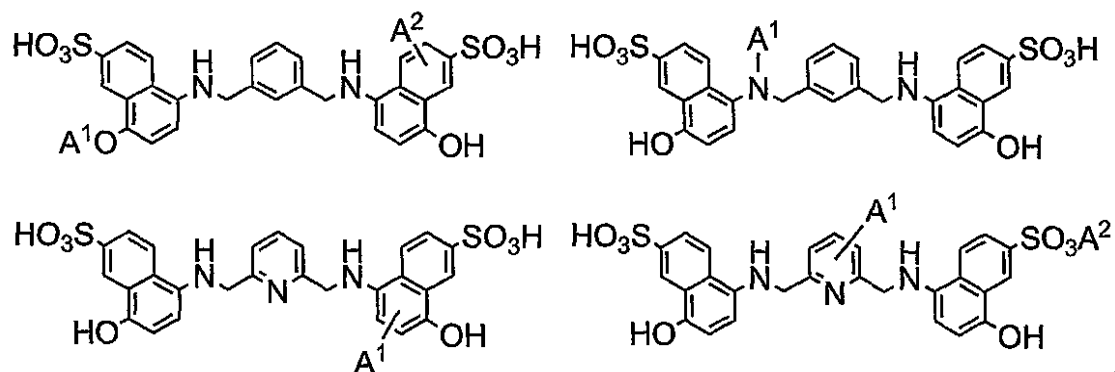
【化 159】



【請求項 141】

式 XXXV 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
:

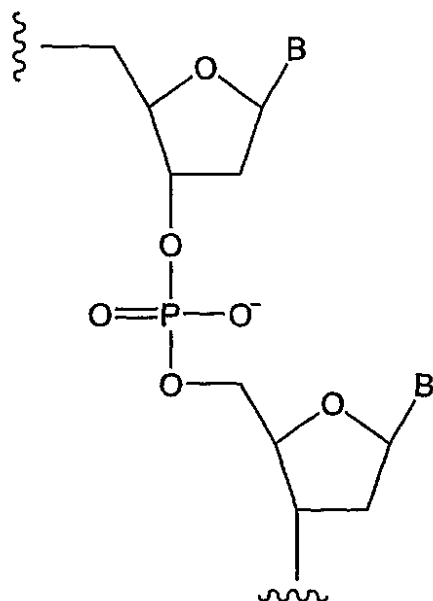
【化 1 6 0】



【請求項 1 4 2】

式 XXXVI 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 6 1】

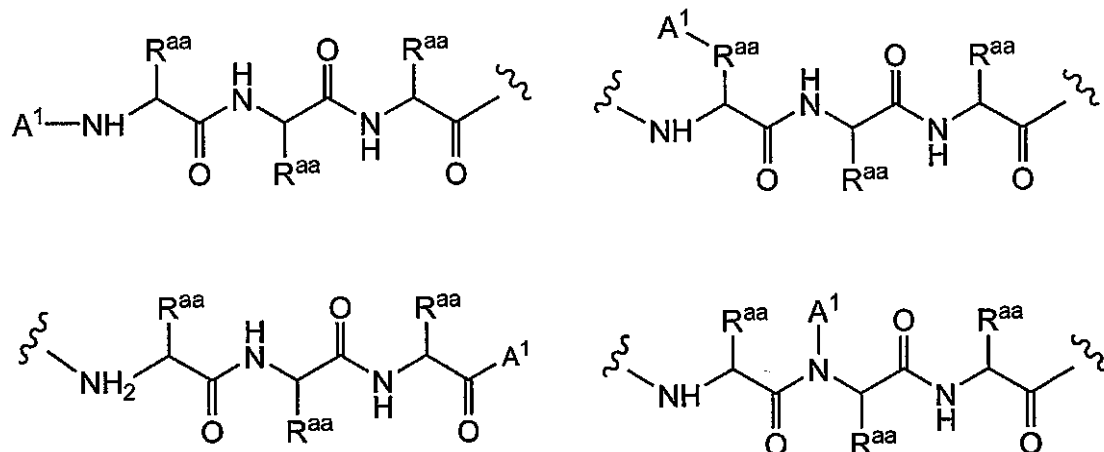


ここで、波線は、分子内の追加ヌクレオチド単位を示す；Bは、核酸塩基であり、そして式 XXXVI の化合物は、その 5' 末端、3' 末端、インターヌクレオチドホスフェート連鎖、糖、または核酸塩基部分において共有結合された少なくとも 1 個の A^1 基を含む化合物。

【請求項 1 4 3】

式 XXXVII 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 1 6 2】

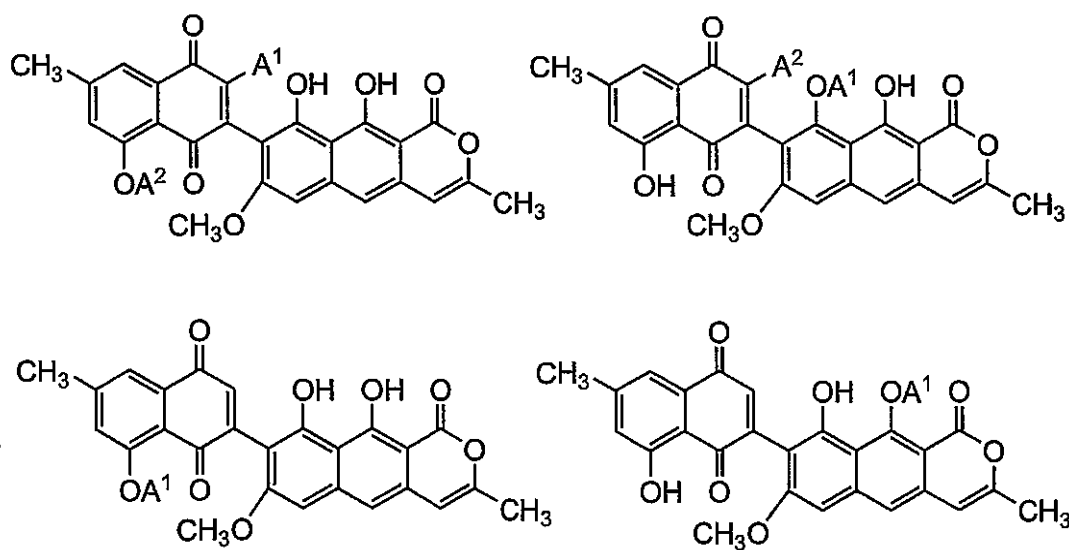


ここで、 R^{aa} は、アミノ酸側鎖である、化合物。

【請求項 1 4 4】

式 XXXVII 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：

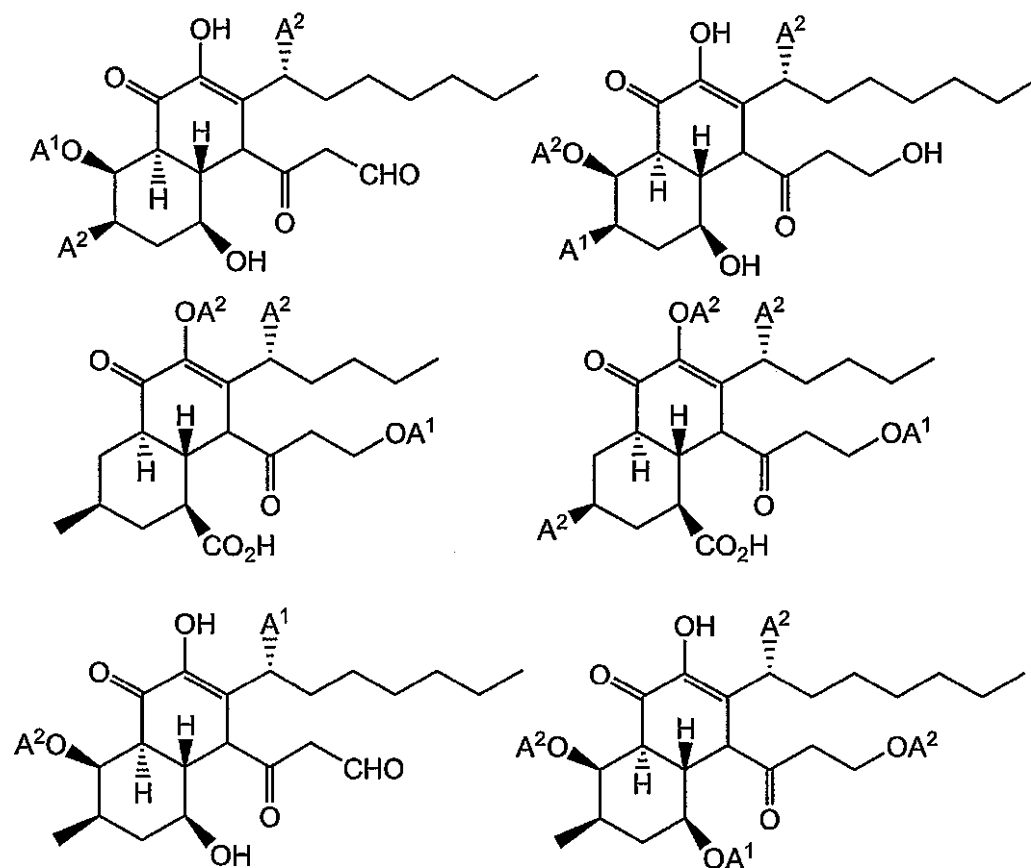
【化 1 6 3】



【請求項 1 4 5】

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 1 6 4】



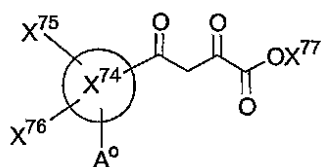
【請求項 1 4 6】

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 - 1, 1, 6 - [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 1 4 7】

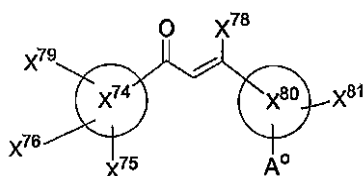
請求項2に記載のHIVインテグラーゼ阻害剤化合物であって、前記化合物は、以下ではない：

【化 1 6 5】



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 1 6 6】



ここで、 X^{78} がヒドロキシであり、そして X^{80} (- X^{81}) が 1 H - [1 , 2 , 4] トリアゾールであるとき、 X^{74} (- X^{75} 、 - X^{76} 、 - X^{79}) 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 1 4 8】

ヒト P B M 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 H I V インテグラーゼ阻害剤化合物。

【請求項 1 4 9】

ヒト P B M 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 1 4 8 に記載の化合物。

【請求項 1 5 0】

ヒト P B M 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 1 4 8 に記載の化合物。

【請求項 1 5 1】

前記半減期が、少なくとも約 5 0 % 改善される、請求項 1 5 0 に記載の化合物。

【請求項 1 5 2】

前記半減期が、少なくとも約 1 0 0 % 改善される、請求項 1 5 0 に記載の化合物。

【請求項 1 5 3】

ヒト P B M 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 1 5 0 に記載の化合物。

【請求項 1 5 4】

前記半減期が、少なくとも約 5 0 % 改善される、請求項 1 5 2 に記載の化合物。

【請求項 1 5 5】

前記半減期が、少なくとも約 1 0 0 % 改善される、請求項 1 5 2 に記載の化合物。

【請求項 1 5 6】

前記半減期が、約 1 0 0 % より大きく改善される、請求項 1 5 2 に記載の化合物。

【請求項 1 5 7】

請求項 1 に記載の H I V 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 1 5 8】

さらに、H I V 阻害薬、抗感染薬および免疫調節剤から選択される A I D S 治療薬の治療有効量を含有する、請求項 1 5 7 に記載の医薬組成物。

【請求項 1 5 9】

前記 H I V 阻害薬が、H I V - プロテアーゼ阻害剤である、請求項 1 5 8 に記載の医薬組成物。

【請求項 1 6 0】

前記 H I V 阻害薬が、ヌクレオシド逆転写酵素阻害剤である、請求項 1 5 9 に記載の組成物。

【請求項 1 6 1】

前記 H I V 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 1 5 9 に記載の組成物。

【請求項 1 6 2】

医薬組成物を製造する方法であって、請求項 1 に記載の H I V 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 1 6 3】

H I V 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 H I V インテ

グラゼ阻害剤化合物の治療有効量を含む、組成物。

【請求項 164】

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 165】

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 166】

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 167】

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 168】

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 169】

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 170】

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 171】

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 172】

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 173】

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 174】

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 175】

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 176】

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 177】

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-IMP DH 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。