

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6972002号
(P6972002)

(45) 発行日 令和3年11月24日 (2021. 11. 24)

(24) 登録日 令和3年11月5日 (2021. 11. 5)

(51) Int. Cl.

F I

C O 7 D 471/04 (2006. 01)

A 6 1 K 31/519 (2006. 01)

C O 7 D 487/04 (2006. 01)

A 6 1 K 31/437 (2006. 01)

A 6 1 K 31/4985 (2006. 01)

C O 7 D 471/04 1 O 6 H

A 6 1 K 31/519

C O 7 D 487/04 1 4 3

C O 7 D 487/04 C S P

A 6 1 K 31/437

請求項の数 36 (全 472 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2018-547964 (P2018-547964)
 (86) (22) 出願日 平成29年3月10日 (2017. 3. 10)
 (65) 公表番号 特表2019-507793 (P2019-507793A)
 (43) 公表日 平成31年3月22日 (2019. 3. 22)
 (86) 国際出願番号 PCT/US2017/021966
 (87) 国際公開番号 W02017/156495
 (87) 国際公開日 平成29年9月14日 (2017. 9. 14)
 審査請求日 令和2年3月10日 (2020. 3. 10)
 (31) 優先権主張番号 62/342, 004
 (32) 優先日 平成28年5月26日 (2016. 5. 26)
 (33) 優先権主張国・地域又は機関
 米国 (US)
 (31) 優先権主張番号 62/307, 399
 (32) 優先日 平成28年3月11日 (2016. 3. 11)
 (33) 優先権主張国・地域又は機関
 米国 (US)

(73) 特許権者 521242093
 エンジェル・ファーマシューティカル・カンパニー・リミテッド
 中華人民共和国、ジェージアン・プロビンス、ジャーション・シティ、ナンフー・ディストリクト、ヤタイ・ロード、ナンバー・778、ビルディング・8、ルーム・1106
 (74) 代理人 110001173
 特許業務法人川口国際特許事務所

最終頁に続く

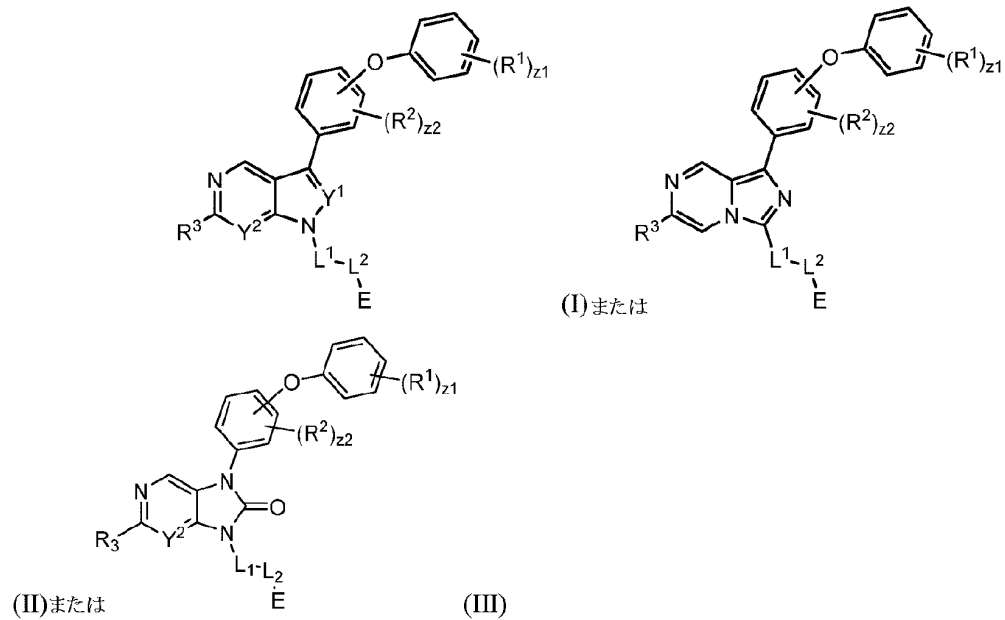
(54) 【発明の名称】 プルトン型チロシンキナーゼを調節する化合物及び方法

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式：

【化 1】



10

を有する化合物であって、

20

式中、

R^1 は独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CHX^1_2$ 、 $-CH_2X^1$ 、 $-OCX^1_3$ 、 $-OCH_2X^1$ 、 $-OCHX^1_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n1}R^{1D}$ 、 $-SO_{v1}NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-NHC(O)NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-N(O)_{m1}$ 、 $-NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-C(O)R^{1C}$ 、 $-C(O)-OR^{1C}$ 、 $-C(O)NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-OR^{1D}$ 、 $-NR^{1A}SO_2R^{1D}$ 、 $-NR^{1A}C(O)R^{1C}$ 、 $-NR^{1A}C(O)OR^{1C}$ 、 $-NR^{1A}OR^{1C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；2個の隣接する R^1 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；

30

z_1 は、0～5の整数であり；

R^2 は独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CHX^2_2$ 、 $-CH_2X^2$ 、 $-OCX^2_3$ 、 $-OCH_2X^2$ 、 $-OCHX^2_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n2}R^{2D}$ 、 $-SO_{v2}NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-NHC(O)NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-N(O)_{m2}$ 、 $-NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-C(O)R^{2C}$ 、 $-C(O)-OR^{2C}$ 、 $-C(O)NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-OR^{2D}$ 、 $-NR^{2A}SO_2R^{2D}$ 、 $-NR^{2A}C(O)R^{2C}$ 、 $-NR^{2A}C(O)OR^{2C}$ 、 $-NR^{2A}OR^{2C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；2個の隣接する R^2 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；

40

z_2 は、0～4の整数であり；

R^3 は、水素または $-NH_2$ であり；

Y^1 は、Nまたは $C(R^4)$ であり；

R^4 は、水素、ハロゲン、 $-CX^4_3$ 、 $-CHX^4_2$ 、 $-CH_2X^4$ 、 $-OCX^4_3$ 、 $-OCH_2X^4$ 、 $-OCHX^4_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n4}R^{4D}$ 、 $-SO_{v4}NR^{4A}R^{4B}$ 、 $-NHC(O)NR^{4A}R^{4B}$ 、 $-N(O)_{m4}$ 、 $-NR^{4A}R^{4B}$ 、 $-C(O)R$

50

${}^4\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^{{}^4\text{C}}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{{}^4\text{A}}\text{R}^{{}^4\text{B}}$ 、 $-\text{OR}^{{}^4\text{D}}$ 、 $-\text{NR}^{{}^4\text{A}}\text{SO}_2\text{R}^{{}^4\text{D}}$ 、 $-\text{NR}^{{}^4\text{A}}\text{C}(\text{O})\text{R}^{{}^4\text{C}}$ 、 $-\text{NR}^{{}^4\text{A}}\text{C}(\text{O})\text{OR}^{{}^4\text{C}}$ 、 $-\text{NR}^{{}^4\text{A}}\text{OR}^{{}^4\text{C}}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；

Y^2 は、Nであり；

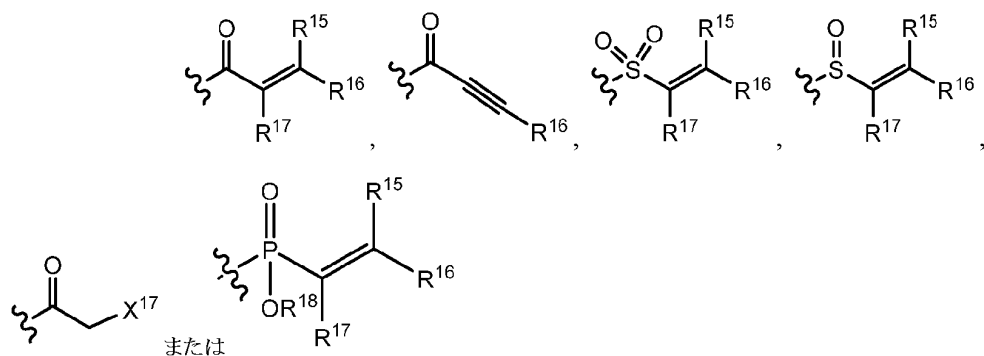
L^1 は、結合、 $-\text{S}(\text{O})_2-$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2-\text{Ph}-$ 、 $-\text{NR}^6-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{C}(\text{O})-$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^6-$ 、 $-\text{NR}^6\text{C}(\text{O})-$ 、 $-\text{NR}^6\text{C}(\text{O})\text{NH}-$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NR}^6-$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{OC}(\text{O})-$ 、置換もしくは非置換のアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、置換もしくは非置換のシクロアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のアリーレン、または置換もしくは非置換のヘテロアリーレンであり；

R^6 は、水素、ハロゲン、 $-\text{CX}^6_3$ 、 $-\text{CHX}^6_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^6$ 、 $-\text{OCX}^6_3$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^6$ 、 $-\text{OCHX}^6_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n6}\text{R}^6\text{D}$ 、 $-\text{SO}_{v6}\text{NR}^6\text{AR}^6\text{B}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NR}^6\text{AR}^6\text{B}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m6}$ 、 $-\text{NR}^6\text{AR}^6\text{B}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^6\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^6\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^6\text{AR}^6\text{B}$ 、 $-\text{OR}^6\text{D}$ 、 $-\text{NR}^6\text{ASO}_2\text{R}^6\text{D}$ 、 $-\text{NR}^6\text{AC}(\text{O})\text{R}^6\text{C}$ 、 $-\text{NR}^6\text{AC}(\text{O})\text{OR}^6\text{C}$ 、 $-\text{NR}^6\text{AOR}^6\text{C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；

L^2 は、結合、 $-\text{S}(\text{O})_2-$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2-\text{Ph}-$ 、 $-\text{NR}^7-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{C}(\text{O})-$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^7-$ 、 $-\text{NR}^7\text{C}(\text{O})-$ 、 $-\text{NR}^7\text{C}(\text{O})\text{NH}-$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NR}^7-$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{OC}(\text{O})-$ 、置換もしくは非置換のアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、置換もしくは非置換のシクロアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のアリーレン、または置換もしくは非置換のヘテロアリーレンであり；

R^7 は、水素、ハロゲン、 $-\text{CX}^7_3$ 、 $-\text{CHX}^7_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^7$ 、 $-\text{OCX}^7_3$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^7$ 、 $-\text{OCHX}^7_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n7}\text{R}^7\text{D}$ 、 $-\text{SO}_{v7}\text{NR}^7\text{AR}^7\text{B}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NR}^7\text{AR}^7\text{B}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m7}$ 、 $-\text{NR}^7\text{AR}^7\text{B}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^7\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^7\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^7\text{AR}^7\text{B}$ 、 $-\text{OR}^7\text{D}$ 、 $-\text{NR}^7\text{ASO}_2\text{R}^7\text{D}$ 、 $-\text{NR}^7\text{AC}(\text{O})\text{R}^7\text{C}$ 、 $-\text{NR}^7\text{AC}(\text{O})\text{OR}^7\text{C}$ 、 $-\text{NR}^7\text{AOR}^7\text{C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；

Eは、
【化2】



R^{15} が、水素、ハロゲン、 CX^{15}_3 、 $-\text{CHX}^{15}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{15}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n15}\text{R}^{15}\text{D}$ 、 $-\text{SO}_{v15}\text{NR}^{15}\text{AR}^{15}\text{B}$ 、 $-\text{NHN}^{15}\text{AR}^{15}\text{B}$ 、

10

20

30

40

50

$-\text{ONR}^{15A}\text{R}^{15B}$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NHN}^{15A}\text{R}^{15B}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{N}^{15A}\text{R}^{15B}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m15}$ 、 $-\text{NR}^{15A}\text{R}^{15B}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^{15C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^{15C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{15A}\text{R}^{15B}$ 、 $-\text{OR}^{15D}$ 、 $-\text{NR}^{15A}\text{S}^{15D}$ 、 $-\text{NR}^{15A}\text{C}(\text{O})\text{R}^{15C}$ 、 $-\text{NR}^{15A}\text{C}(\text{O})\text{OR}^{15C}$ 、 $-\text{NR}^{15A}\text{OR}^{15C}$ 、 $-\text{OCX}^{15}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{15}_2$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；

R^{16} が、水素、ハロゲン、 CX^{16}_3 、 $-\text{CHX}^{16}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{16}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n16}\text{R}^{16D}$ 、 $-\text{SO}_{v16}\text{NR}^{16A}\text{R}^{16B}$ 、 $-\text{NHN}^{16A}\text{R}^{16B}$ 、 $-\text{ONR}^{16A}\text{R}^{16B}$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NHN}^{16A}\text{R}^{16B}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{N}^{16A}\text{R}^{16B}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m16}$ 、 $-\text{NR}^{16A}\text{R}^{16B}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^{16C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^{16C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{16A}\text{R}^{16B}$ 、 $-\text{OR}^{16D}$ 、 $-\text{NR}^{16A}\text{S}^{16D}$ 、 $-\text{NR}^{16A}\text{C}(\text{O})\text{R}^{16C}$ 、 $-\text{NR}^{16A}\text{C}(\text{O})\text{OR}^{16C}$ 、 $-\text{NR}^{16A}\text{OR}^{16C}$ 、 $-\text{OCX}^{16}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{16}_2$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；

R^{17} が、水素、ハロゲン、 CX^{17}_3 、 $-\text{CHX}^{17}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{17}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n17}\text{R}^{17D}$ 、 $-\text{SO}_{v17}\text{NR}^{17A}\text{R}^{17B}$ 、 $-\text{NHN}^{17A}\text{R}^{17B}$ 、 $-\text{ONR}^{17A}\text{R}^{17B}$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NHN}^{17A}\text{R}^{17B}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{N}^{17A}\text{R}^{17B}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m17}$ 、 $-\text{NR}^{17A}\text{R}^{17B}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^{17C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^{17C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{17A}\text{R}^{17B}$ 、 $-\text{OR}^{17D}$ 、 $-\text{NR}^{17A}\text{S}^{17D}$ 、 $-\text{NR}^{17A}\text{C}(\text{O})\text{R}^{17C}$ 、 $-\text{NR}^{17A}\text{C}(\text{O})\text{OR}^{17C}$ 、 $-\text{NR}^{17A}\text{OR}^{17C}$ 、 $-\text{OCX}^{17}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{17}_2$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；

R^{18} が、水素、 $-\text{CX}^{18}_3$ 、 $-\text{CHX}^{18}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{18}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^{18C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^{18C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{18A}\text{R}^{18B}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；

各 R^{1A} 、 R^{1B} 、 R^{1C} 、 R^{1D} 、 R^{2A} 、 R^{2B} 、 R^{2C} 、 R^{2D} 、 R^{4A} 、 R^{4B} 、 R^{4C} 、 R^{4D} 、 R^{6A} 、 R^{6B} 、 R^{6C} 、 R^{6D} 、 R^{7A} 、 R^{7B} 、 R^{7C} 、 R^{7D} 、 R^{15A} 、 R^{15B} 、 R^{15C} 、 R^{15D} 、 R^{16A} 、 R^{16B} 、 R^{16C} 、 R^{16D} 、 R^{17A} 、 R^{17B} 、 R^{17C} 、 R^{17D} 、 R^{18A} 、 R^{18B} 、及び R^{18C} は独立して、水素、 $-\text{CX}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CHX}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；

同一の窒素原子と結合した R^{1A} 及び R^{1B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；

同一の窒素原子と結合した R^{2A} 及び R^{2B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；

同一の窒素原子と結合した R^{4A} 及び R^{4B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；

10

20

30

40

50

同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；

同一の窒素原子と結合した R^{7A} 及び R^{7B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；

同一の窒素原子と結合した R^{15A} 及び R^{15B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；

同一の窒素原子と結合した R^{16A} 及び R^{16B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；

同一の窒素原子と結合した R^{17A} 及び R^{17B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；

同一の窒素原子と結合した R^{18A} 及び R^{18B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；

各 X 、 X^1 、 X^2 、 X^4 、 X^6 、 X^7 、 X^{15} 、 X^{16} 、 X^{17} 、及び X^{18} は独立して、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ であり；

$n1$ 、 $n2$ 、 $n4$ 、 $n6$ 、 $n7$ 、 $n15$ 、 $n16$ 、及び $n17$ は独立して、 $0 \sim 4$ の整数であり；及び

$m1$ 、 $m2$ 、 $m4$ 、 $m6$ 、 $m7$ 、 $m15$ 、 $m16$ 、 $m17$ 、 $v1$ 、 $v2$ 、 $v4$ 、 $v6$ 、 $v7$ 、 $v15$ 、 $v16$ 、及び $v17$ は独立して、 $1 \sim 2$ の整数である、

前記化合物。

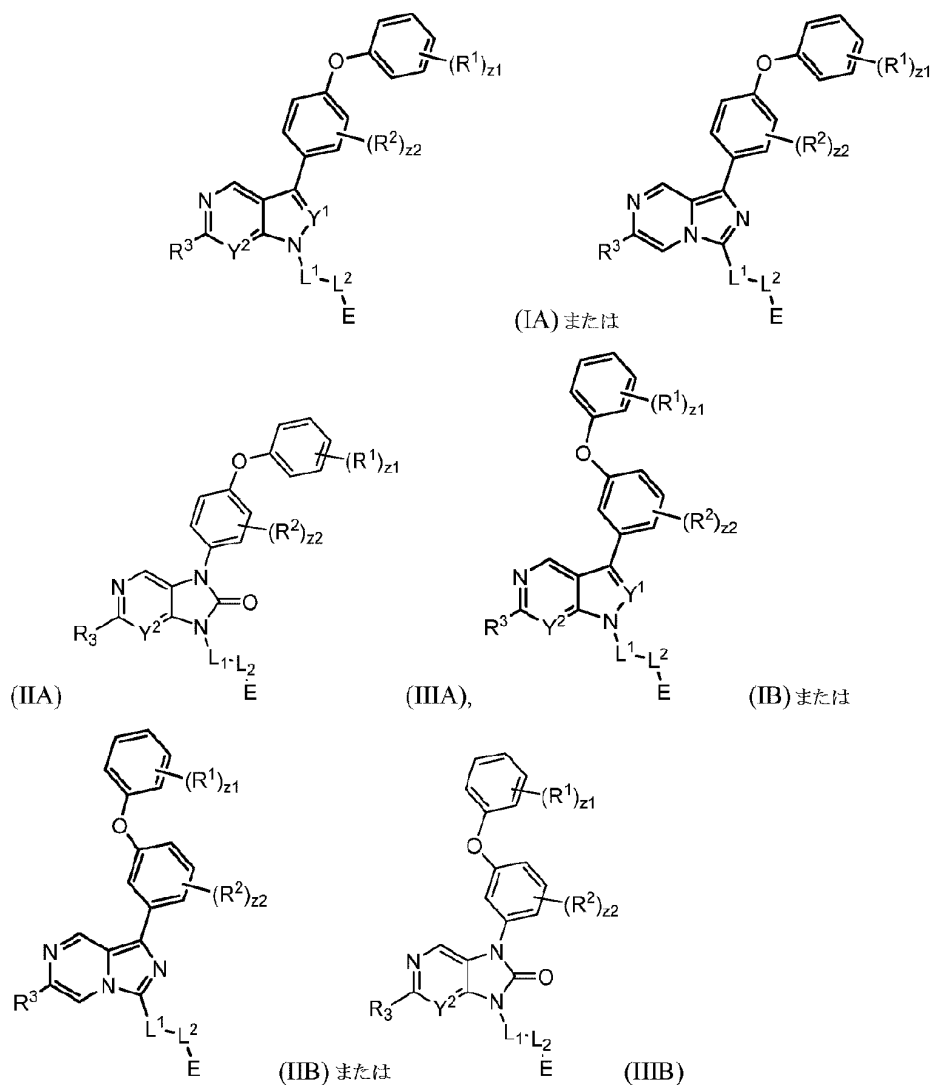
【請求項 2】

式：

10

20

【化 3】



10

20

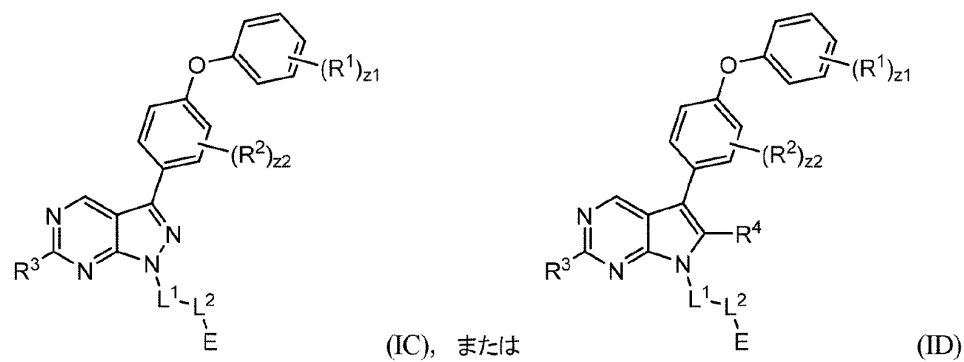
30

を有する、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

式：

【化 4】



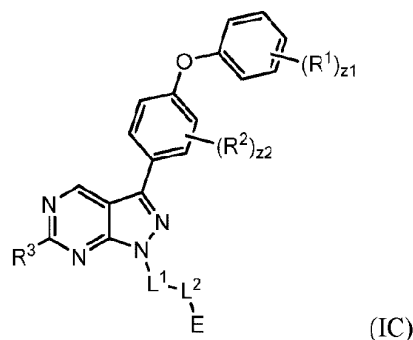
40

を有する、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 4】

式：

【化 5】



10

を有する、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 5】

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

【請求項 6】

R^3 が、 $-NH_2$ である、請求項 1 ～ 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 7】

R^1 が独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-OCX^1_3$ 、 $-OCHX^1_2$ 、 $-CHX^1_2$ 、 $-CH_2X^1$ 、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、または置換もしくは非置換の 2 ～ 8 員ヘテロアルキルであり；2 個の隣接する R^1 置換基が、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、置換もしくは非置換の 3 ～ 8 員ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のフェニル、または置換もしくは非置換の 5 ～ 6 員ヘテロアリールを形成し得る、請求項 1 ～ 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

【請求項 8】

R^1 が独立して、ハロゲンである、請求項 1 ～ 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 9】

z_1 が、0、1 または 2 である、請求項 1 ～ 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 10】

R^2 が独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-OCX^2_3$ 、 $-OCHX^2_2$ 、 $-CHX^2_2$ 、 $-CH_2X^2$ 、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、または置換もしくは非置換の 2 ～ 8 員ヘテロアルキルであり；2 個の隣接する R^2 置換基が、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、置換もしくは非置換の 3 ～ 8 員ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のフェニル、または置換もしくは非置換の 5 ～ 6 員ヘテロアリールを形成し得る、請求項 1 ～ 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

30

【請求項 11】

R^2 が独立して、ハロゲンである、請求項 1 ～ 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 12】

z_2 が、0、1 または 2 である、請求項 1 ～ 11 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

【請求項 13】

L^1 が、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキレン、置換もしくは非置換の 2 ～ 8 員ヘテロアルキレン、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキレン、置換もしくは非置換の 3 ～ 8 員ヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のフェニレン、または置換もしくは非置換の 5 ～ 6 員ヘテロアリーレンである、請求項 1 ～ 12 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 14】

L^1 が、結合である、請求項 1 ～ 12 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 15】

50

L^1 が、非置換のメチレンである、請求項 1 ～ 12 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 16】

L^2 が、 $-NR^7-$ 、または E に直接結合した環窒素を含む置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレンである、請求項 1 ～ 15 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 17】

L^2 が、 $-NR^7-$ である、請求項 1 ～ 15 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 18】

R^7 が、水素、置換もしくは非置換の $C_1 - C_6$ アルキル、または置換もしくは非置換の 2 ～ 6 員ヘテロアルキルである、請求項 17 に記載の化合物。

【請求項 19】

L^2 が、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレンである、請求項 1 ～ 15 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 20】

L^2 が、置換もしくは非置換のアゼパニレン、置換もしくは非置換のピペリジニレン、または置換もしくは非置換のピロリジニレンである、請求項 1 ～ 15 のいずれか 1 項に記載の化合物。

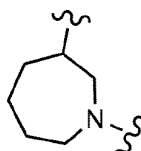
【請求項 21】

L^2 が、非置換のアゼパニレン、非置換のピペリジニレン、または非置換のピロリジニレンである、請求項 1 ～ 15 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 22】

L^2 が、

【化 6】



である、請求項 1 ～ 15 のいずれか 1 項に記載の化合物。

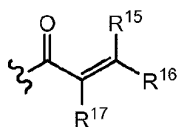
【請求項 23】

R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、及び R^{18} が、水素である、請求項 1 ～ 22 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 24】

E が、

【化 7】

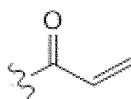


である、請求項 1 ～ 22 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 25】

E が、

【化 8】



である、請求項 1 ～ 22 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 26】

10

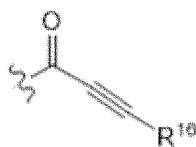
20

30

40

50

E が、
【化 9】

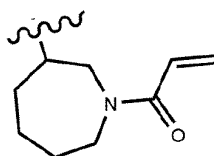


である、請求項 1 ～ 2 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 2 7】

L¹ - L² - E が、

【化 1 0】



である、請求項 1 ～ 1 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 2 8】

R⁴ が、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換の C₁ - C₈ アルキル、または置換もしくは非置換の 2 ～ 8 員ヘテロアルキルである、請求項 1 ～ 2 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

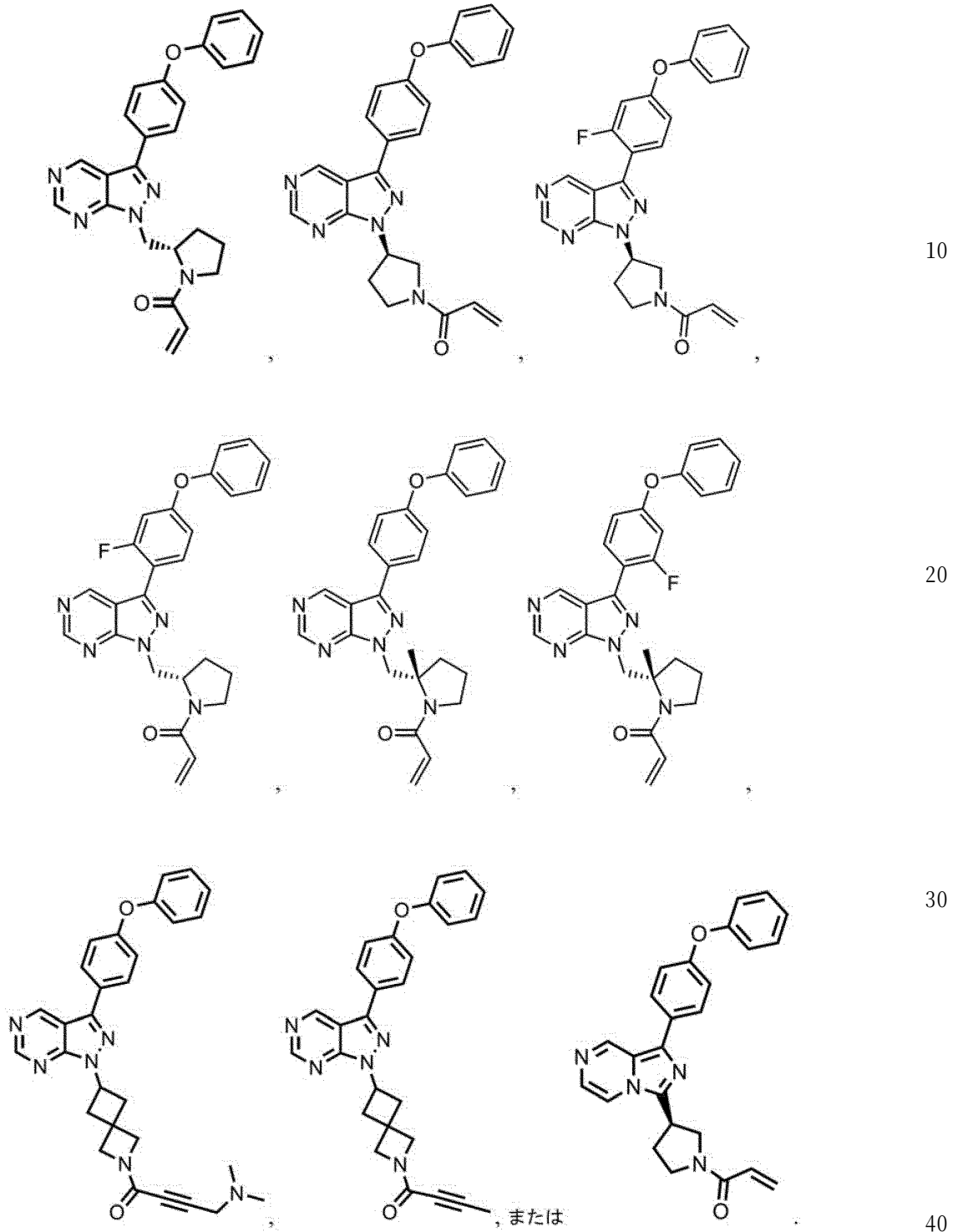
【請求項 2 9】

前記化合物が、式：

10

20

【化 1 1】



を有する、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3 0】

前記化合物が、中枢神経系の外側に投与した後に、患者の中枢神経系に入ることができる、請求項 1 ～ 2 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 3 1】

請求項 1 ～ 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物、及び医薬的に許容可能な賦形剤を含む、医薬組成物。

【請求項 3 2】

有効量の請求項 1 ～ 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物を含む、ブルトン型チロシンキナーゼ活性を阻害するための、医薬組成物。

【請求項 3 3】

有効量の請求項 1 ～ 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物を含む、がん、炎症性疾患、脳卒中または自己免疫疾患を治療するための、医薬組成物。

【請求項 3 4】

有効量の請求項 1 ～ 3 0 のいずれか 1 項に記載の化合物を含む、異常なブルトン型チロシンキナーゼ活性と関連する疾患を治療するための、医薬組成物。

【請求項 3 5】

前記疾患が、精神障害または神経障害である、請求項 3 4 に記載の医薬組成物。

10

【請求項 3 6】

前記疾患が、自閉症、レット症候群、脆弱 X 症候群、心筋梗塞、緑内障、結節性硬化症、神経因性疼痛、不安、慢性神経変性、うつ病、癲癇、H I V 関連痴呆、または神経炎症である、請求項 3 4 に記載の医薬組成物。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0 0 0 1】

関連出願の相互参照

本出願は、2 0 1 6 年 3 月 1 1 日に提出された米国仮出願第 6 2 / 3 0 7 , 3 9 9 号、及び 2 0 1 6 年 5 月 2 6 日に提出された米国仮出願第 6 2 / 3 4 2 , 0 0 4 号の利益を主張するものであり、それらの全体が全ての目的で参照により本明細書に組み入れられる。

20

【背景技術】

【0 0 0 2】

ブルトン型チロシンキナーゼ (B T K) は、B 細胞の発生、分化、シグナル伝達、及び成熟に重要な役割を果たす。B T K は、ヒト X 連鎖無ガンマグロブリン血症の疾患遺伝子として元々同定されたが、炎症 (例えば、皮膚の炎症状態)、自己免疫、アレルギー性疾患状態、及びがん (例えば、B 細胞リンパ腫などの B 細胞がん、及びリンパ芽球様 B 細胞白血病) にさらに関与している。従って、B T K 調節物質に対する当該技術分野における必要性が存在する。本明細書で開示されるのは、特に、当該技術分野におけるこれらの問題並びに他の問題に対する解決策である。

30

【発明の概要】

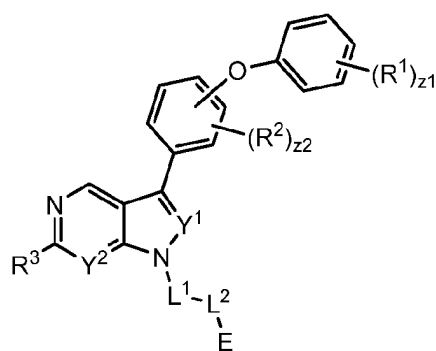
【0 0 0 3】

本明細書で提供されるのは、特に、ブルトン型チロシンキナーゼの活性レベルを調節することができる化合物、及びその使用方法である。

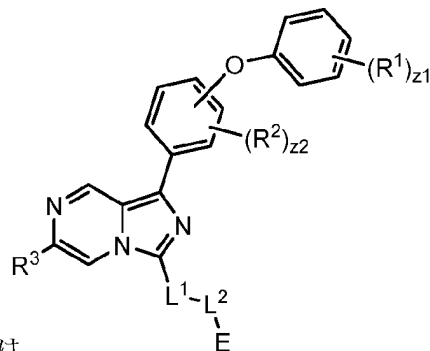
【0 0 0 4】

態様では、式：

【化 1】

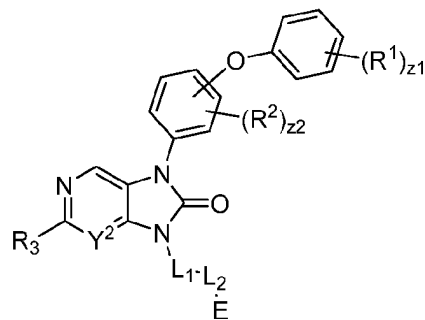


(I)または



(II)または

10



(III)

20

を有する化合物を提供する。

【0005】

R^1 は独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CHX^1_2$ 、 $-CH_2X^1$ 、 $-OCX^1_3$ 、 $-OCH_2X^1$ 、 $-OCHX^1_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n1}R^1D$ 、 $-SO_{v1}NR^1AR^1B$ 、 $-NHC(O)NR^1AR^1B$ 、 $-N(O)_{m1}$ 、 $-NR^1AR^1B$ 、 $-C(O)R^1C$ 、 $-C(O)-OR^1C$ 、 $-C(O)NR^1AR^1B$ 、 $-OR^1D$ 、 $-NR^1ASO_2R^1D$ 、 $-NR^1AC(O)R^1C$ 、 $-NR^1AC(O)OR^1C$ 、 $-NR^1AOR^1C$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。2個の隣接する R^1 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。記号 $z1$ は、0～5の整数である。 R^2 は独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CHX^2_2$ 、 $-CH_2X^2$ 、 $-OCX^2_3$ 、 $-OCH_2X^2$ 、 $-OCHX^2_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n2}R^2D$ 、 $-SO_{v2}NR^2AR^2B$ 、 $-NHC(O)NR^2AR^2B$ 、 $-N(O)_{m2}$ 、 $-NR^2AR^2B$ 、 $-C(O)R^2C$ 、 $-C(O)-OR^2C$ 、 $-C(O)NR^2AR^2B$ 、 $-OR^2D$ 、 $-NR^2ASO_2R^2D$ 、 $-NR^2AC(O)R^2C$ 、 $-NR^2AC(O)OR^2C$ 、 $-NR^2AOR^2C$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。2個の隣接する R^2 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。記号 $z2$ は、0～4の整数である。 R^3 は、水素または $-NH_2$ である。記号 Y^1 は、NまたはC(R^4)である。 R^4 は、水素、ハロゲン、 $-CX^4_3$ 、 $-CHX^4_2$ 、 $-CH_2X^4$ 、 $-OCX^4_3$ 、 $-OCH_2X^4$ 、 $-OCHX^4_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n4}R^4D$ 、 $-SO_{v4}NR^4AR^4B$ 、 $-NHC(O)NR^4AR^4B$ 、 $-N(O)_{m4}$ 、 $-NR^4AR^4B$ 、 $-C(O)R^4C$ 、 $-C(O)-OR^4C$ 、 $-C(O)NR^4AR^4B$ 、 $-OR^4D$ 、 $-NR^4ASO_2R^4D$ 、 $-NR^4AC(O)R^4C$ 、 $-NR^4AC(O)OR^4C$ 、 $-NR^4AOR^4C$ 、置換もしくは非置換のアル

30

40

50

キル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。記号 Y^2 は、NまたはC(R^5)である。 R^5 は、水素、ハロゲン、 $-CX^5_3$ 、 $-CHX^5_2$ 、 $-CH_2X^5$ 、 $-OCX^5_3$ 、 $-OCH_2X^5$ 、 $-OCHX^5_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n5}R^5D$ 、 $-SO_{v5}NR^5AR^5B$ 、 $-NHC(O)NR^5AR^5B$ 、 $-N(O)_m5$ 、 $-NR^5AR^5B$ 、 $-C(O)R^5C$ 、 $-C(O)-OR^5C$ 、 $-C(O)NR^5AR^5B$ 、 $-OR^5D$ 、 $-NR^5ASO_2R^5D$ 、 $-NR^5AC(O)R^5C$ 、 $-NR^5AC(O)OR^5C$ 、 $-NR^5AOR^5C$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 L^1 は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NR^6-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NR^6-$ 、 $-NR^6C(O)-$ 、 $-NR^6C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)NR^6-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、置換もしくは非置換のアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、置換もしくは非置換のシクロアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のアリーレン、または置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。 R^6 は、水素、ハロゲン、 $-CX^6_3$ 、 $-CHX^6_2$ 、 $-CH_2X^6$ 、 $-OCX^6_3$ 、 $-OCH_2X^6$ 、 $-OCHX^6_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n6}R^6D$ 、 $-SO_{v6}NR^6AR^6B$ 、 $-NHC(O)NR^6AR^6B$ 、 $-N(O)_m6$ 、 $-NR^6AR^6B$ 、 $-C(O)R^6C$ 、 $-C(O)-OR^6C$ 、 $-C(O)NR^6AR^6B$ 、 $-OR^6D$ 、 $-NR^6ASO_2R^6D$ 、 $-NR^6AC(O)R^6C$ 、 $-NR^6AC(O)OR^6C$ 、 $-NR^6AOR^6C$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 L^2 は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NR^7-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NR^7-$ 、 $-NR^7C(O)-$ 、 $-NR^7C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)NR^7-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、置換もしくは非置換のアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、置換もしくは非置換のシクロアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のアリーレン、または置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。 R^7 は、水素、ハロゲン、 $-CX^7_3$ 、 $-CHX^7_2$ 、 $-CH_2X^7$ 、 $-OCX^7_3$ 、 $-OCH_2X^7$ 、 $-OCHX^7_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n7}R^7D$ 、 $-SO_{v7}NR^7AR^7B$ 、 $-NHC(O)NR^7AR^7B$ 、 $-N(O)_m7$ 、 $-NR^7AR^7B$ 、 $-C(O)R^7C$ 、 $-C(O)-OR^7C$ 、 $-C(O)NR^7AR^7B$ 、 $-OR^7D$ 、 $-NR^7ASO_2R^7D$ 、 $-NR^7AC(O)R^7C$ 、 $-NR^7AC(O)OR^7C$ 、 $-NR^7AOR^7C$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 E は、求電子部分である。各 R^{1A} 、 R^{1B} 、 R^{1C} 、 R^{1D} 、 R^{2A} 、 R^{2B} 、 R^{2C} 、 R^{2D} 、 R^{4A} 、 R^{4B} 、 R^{4C} 、 R^{4D} 、 R^{5A} 、 R^{5B} 、 R^{5C} 、 R^{5D} 、 R^{6A} 、 R^{6B} 、 R^{6C} 、 R^{6D} 、 R^{7A} 、 R^{7B} 、 R^{7C} 、及び R^{7D} は独立して、水素、 $-CX_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX_2$ 、 $-CH_2X$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；同一の窒素原子と結合した R^{1A} 及び R^{1B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{2A} 及び R^{2B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{4A} 及び R^{4B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換

10

20

30

40

50

もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{5A} 及び R^{5B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{7A} 及び R^{7B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。各 X 、 X^1 、 X^2 、 X^4 、 X^5 、 X^6 、及び X^7 は独立して、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。 n_1 、 n_2 、 n_4 、 n_5 、 n_6 、及び n_7 は独立して、 $0 \sim 4$ の整数である。 m_1 、 m_2 、 m_4 、 m_5 、 m_6 、 m_7 、 v_1 、 v_2 、 v_4 、 v_5 、 v_6 、及び v_7 は独立して、 $1 \sim 2$ の整数である。

10

【0006】

態様では、本明細書に記載の化合物またはその医薬的に許容可能な塩、及び医薬的に許容可能な賦形剤を含む、医薬組成物を提供する。

【0007】

態様では、がんの治療方法であって、それを必要とする対象に有効量の本明細書に記載の化合物を投与することを含む、方法を提供する。

【0008】

態様では、炎症性疾患の治療方法であって、それを必要とする対象に有効量の本明細書に記載の化合物を投与することを含む、方法を提供する。

20

【0009】

態様では、有効量の本明細書に記載の化合物を、それを必要とする対象に投与することを含む、ブルトン型チロシンキナーゼ活性と関連する疾患の治療方法を提供する。実施形態では、疾患は、異常なブルトン型チロシンキナーゼ活性と関連する。

【0010】

態様では、ブルトン型チロシンキナーゼを本明細書に記載の化合物と接触させることを含む、ブルトン型チロシンキナーゼ活性の阻害方法を提供する。

【0011】

態様では、本明細書に記載の化合物（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、本明細書に記載の化合物、または本明細書に記載の化合物の一部）と共有結合した、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質を提供する。

30

【0012】

態様では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、本明細書に記載の化合物、または本明細書に記載の化合物の一部）と共有結合した、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトBTK）を提供する。

【発明を実施するための形態】

【0013】

I. 定義

40

本明細書で使用される略称は、化学分野及び生物分野の範囲内でのそれらの従来の意味を有する。本明細書に記載の化学構造及び式は、化学業界で公知の化学価数の標準規則に従って構築される。

【0014】

置換基が従来の化学式（左から右に記述）によって特定される場合、それらは、左から右に記述した構造式を記述したものから生じるであろう化学的に同一の置換基を同様に包含し、例えば、 $-CH_2O-$ は、 $-OCH_2-$ と等価である。

【0015】

「アルキル」という用語は、それ自体または別の置換基の一部として、別段の記載がない限り、直鎖（すなわち、非分岐鎖）または分岐炭素鎖（または炭素）またはそれらの組

50

み合わせであり、完全飽和、モノ不飽和または多価不飽和であってもよく、指定された数の炭素原子を有する1価、2価、または多価のラジカルを含むことができるものを意味する（すなわち、 $C_1 - C_{10}$ は、1から10個の炭素を意味する）。アルキルは、非環式鎖である。飽和炭化水素ラジカルの例としては、限定されないが、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、*t*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、例えば、*n*-ペンチル、*n*-ヘキシル、*n*-ヘプチル、*n*-オクチルなどの相同体及び異性体などの基が挙げられる。不飽和アルキル基は、1つ以上の二重結合または三重結合を有する基である。不飽和アルキル基の例としては、限定されないが、ビニル、2-プロペニル、クロチル、2-イソペンテニル、2-（ブタジエニル）、2, 4-ペンタジエニル、3-（1, 4-ペンタジエニル）、エチニル、1-及び3-プロピニル、3-ブチニル、及び高級相同体及び異性体が挙げられる。アルコキシは、酸素リンカー（-O-）を介して分子の残基と結合されるアルキルである。

10

【0016】

「アルキレン」という用語は、それ自体または別の置換基の一部として、別段の記載がない限り、アルキルから誘導される二価のラジカル（例えば、限定するものではないが、 $-CH_2CH_2CH_2CH_2-$ ）を意味する。典型的には、アルキル（またはアルキレン）基は、1個から24個の炭素原子を有し、10個以下の炭素原子を有するアルキル（またはアルキレン）基が、本明細書で好ましい。「低級アルキル」または「低級アルキレン」は、より短い鎖のアルキル基またはアルキレン基であり、概ね8個以下の炭素原子を有する。「アルケニレン」という用語は、それ自体または別の置換基の一部として、別段の記載がない限り、アルケンから誘導される二価のラジカルを意味する。

20

【0017】

「ヘテロアルキル」という用語は、それ自体または別の用語と組み合わせて、別段の記載がない限り、少なくとも1つの炭素原子、及び少なくとも1つのヘテロ原子（例えば、O、N、P、Si、またはS）を含む、安定直鎖または分岐鎖またはこれらの組み合わせを意味し、窒素及び硫黄原子は、任意選択で酸化されてもよく、窒素ヘテロ原子は、任意選択で四級化されてもよい。ヘテロ原子（複数可）（例えば、O、N、P、S、B、As、またはSi）は、ヘテロアルキル基の任意の内側位置、またはアルキル基が分子の残基と結合する位置に配置されてもよい。ヘテロアルキルは、非環式鎖である。その例としては、限定されないが、 $-CH_2-CH_2-O-CH_3$ 、 $-CH_2-CH_2-NH-CH_3$ 、 $-CH_2-CH_2-N(CH_3)-CH_3$ 、 $-CH_2-S-CH_2-CH_3$ 、 $-CH_2-CH_2-S(O)-CH_3$ 、 $-CH_2-CH_2-S(O)_2-CH_3$ 、 $-CH=CH-O-CH_3$ 、 $-Si(CH_3)_3$ 、 $-CH_2-CH=N-OCH_3$ 、 $-CH=CH-N(CH_3)-CH_3$ 、 $-O-CH_3$ 、 $-O-CH_2-CH_3$ 、及び-CNが挙げられる。2個または3個までのヘテロ原子は、例えば、 $-CH_2-NH-OCH_3$ 、及び $-CH_2-O-Si(CH_3)_3$ などのように連続していてもよい。ヘテロアルキル部分は、1個のヘテロ原子（例えば、O、N、S、Si、またはP）を含んでもよい。ヘテロアルキル部分は、2個の任意選択で異なるヘテロ原子（例えば、O、N、S、Si、またはP）を含んでもよい。ヘテロアルキル部分は、3個の任意選択で異なるヘテロ原子（例えば、O、N、S、Si、またはP）を含んでもよい。ヘテロアルキル部分は、4個の任意選択で異なるヘテロ原子（例えば、O、N、S、Si、またはP）を含んでもよい。ヘテロアルキル部分は、5個の任意選択で異なるヘテロ原子（例えば、O、N、S、Si、またはP）を含んでもよい。ヘテロアルキル部分は、最大で8個の任意選択で異なるヘテロ原子（例えば、O、N、S、Si、またはP）を含んでもよい。

30

40

【0018】

同様に、「ヘテロアルキレン」という用語は、それ自体または別の置換基の一部として、別段の記載がない限り、例えば、限定されないが、 $-CH_2-CH_2-S-CH_2-CH_2-$ 及び $-CH_2-S-CH_2-CH_2-NH-CH_2-$ などのようにヘテロアルキルから誘導された二価のラジカルを意味する。ヘテロアルキレン基の場合、ヘテロ原子は、鎖末端の一方または両方（例えば、アルキレンオキシ、アルキレンジオキシ、アルキレン

50

アミノ、アルキレンジアミノなど)を占有することもできる。さらに、アルキレン及びヘテロアルキレン連結基の場合、連結基の配向は、連結基の式が記述される方向によって示されるものではない。例えば、式 $-C(O)_2R'$ は、 $-C(O)_2R'$ 及び $-R'C(O)_2-$ のいずれをも示す。上記のように、ヘテロアルキル基は、本明細書で使用される場合、 $-C(O)R'$ 、 $-C(O)NR'$ 、 $-NR'R''$ 、 $-OR'$ 、 $-SR'$ 及び/または $-SO_2R'$ などのヘテロ原子を介して分子の残基と結合する基が挙げられる。「ヘテロアルキル基」及びそれに続いて特定のヘテロアルキル基が列挙される場合($-NR'R''$ など)、ヘテロアルキル及び $-NR'R''$ という用語は、重複していない、または互いに排他的ではないことが理解されよう。むしろ、明確にするために特定のヘテロアルキル基が列挙される。従って、本明細書において、「ヘテロアルキル」という用語は、特定のヘテロアルキル基(例えば、 $-NR'R''$ など)を除外するものと解釈されるべきではない。

10

【0019】

「シクロアルキル」及び「ヘテロシクロアルキル」という用語は、それらによってまたは他の用語と組み合わせて、別段の記載がない限り、それぞれ、環式形態の「アルキル」及び環式形態の「ヘテロアルキル」を意味する。シクロアルキル及びヘテロシクロアルキルは、芳香族ではない。加えて、ヘテロシクロアルキル基の場合、ヘテロ原子は、ヘテロシクロが分子の残基と結合する位置を占有し得る。実施形態では、シクロアルキルは、スピロ環状シクロアルキルであり、スピロ環式環は、シクロアルキル環である。実施形態では、シクロアルキルは、縮合環シクロアルキルであり、縮合環は、シクロアルキル環である。実施形態では、シクロアルキルは、架橋環シクロアルキルであり、架橋環は、シクロアルキル環である。実施形態では、シクロアルキルは、単環である。実施形態では、シクロアルキルは、2つの環である。実施形態では、シクロアルキルは、3つの環である。実施形態では、シクロアルキルは、4つの環である。実施形態では、シクロアルキルは、5つの環である。実施形態では、シクロアルキルは、多環である。実施形態では、ヘテロシクロアルキルは、スピロ環式ヘテロシクロアルキルであり、スピロ環式環は、1つ以上のヘテロシクロアルキル環であり、任意選択で1つ以上のシクロアルキル環である。実施形態では、ヘテロシクロアルキルは、縮合環ヘテロシクロアルキルであり、縮合環は、1つ以上のヘテロシクロアルキル環であり、任意選択で1つ以上のシクロアルキル環である。実施形態では、ヘテロシクロアルキルは、架橋環ヘテロシクロアルキルであり、架橋環は、1つ以上のヘテロシクロアルキル環であり、任意選択で1つ以上のシクロアルキル環である。実施形態では、スピロ環、縮合環、または架橋環ヘテロシクロアルキルの環は、複素環である。実施形態では、ヘテロシクロアルキルは、単環である。実施形態では、ヘテロシクロアルキルは、2つの環である。実施形態では、ヘテロシクロアルキルは、3つの環である。実施形態では、ヘテロシクロアルキルは、4つの環である。実施形態では、ヘテロシクロアルキルは、5つの環である。実施形態では、ヘテロシクロアルキルは、多環である。シクロアルキル基の例としては、限定されないが、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、1-シクロヘキセニル、3-シクロヘキセニル、シクロヘプチルなどが挙げられる。ヘテロシクロアルキルの例としては、限定されないが、1-(1, 2, 5, 6-テトラヒドロピリジル)、1-ピペリジニル、2-ピペリジニル、3-ピペリジニル、4-モルホリニル、3-モルホリニル、テトラヒドロフラン-2-イル、テトラヒドロフラン-3-イル、テトラヒドロチエン-2-イル、テトラヒドロチエン-3-イル、1-ピペラジニル、2-ピペラジニルなどが挙げられる。「シクロアルキレン」及び「ヘテロシクロアルキレン」は、単独でまたは別の置換基の一部として、それぞれ、シクロアルキル及びヘテロシクロアルキルから誘導される二価のラジカルを意味する。実施形態では、シクロアルキレンまたはヘテロシクロアルキレンは、多環である。実施形態では、ヘテロシクロアルキレンは、スピロ環式ヘテロシクロアルキレンであり、スピロ環式環は、1つ以上のヘテロシクロアルキル環であり、任意選択で1つ以上のシクロアルキル環である。

20

30

40

【0020】

50

「ハロ」または「ハロゲン」という用語は、それ自体または別の置換基の一部として、別段の記載がない限り、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、またはヨウ素原子を意味する。さらには、「ハロアルキル」などの用語は、モノハロアルキル及びポリハロアルキルを包含することが意図される。例えば、「ハロ ($C_1 - C_4$) アルキル」という用語は、限定されないが、フルオロメチル、ジフルオロメチル、トリフルオロメチル、2, 2, 2-トリフルオロエチル、4-クロロブチル、3-ブロモプロピルなどが挙げられる。

【0021】

「アシル」という用語は、別段の記載がない限り、 $-C(O)R$ を意味し、Rは、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。

10

【0022】

「アリール」という用語は、別段の記載がない限り、多価不飽和、芳香族、炭化水素置換基を意味し、単一の環または共に縮合する複数の環（好ましくは、1～3個の環）（すなわち、縮合環アリール）であってもよい。また、共有結合により連結され得る。縮合環アリール基は、縮合環のうちの少なくとも1つがアリール環である共に縮合された複数の環を指す。「ヘテロアリール」という用語は、少なくとも1つのヘテロ原子（例えば、N、O、またはS）を含むアリール基（または環）を指し、窒素及び硫黄原子は、任意選択で酸化され、窒素ヘテロ原子（複数可）は、任意選択で四級化される。従って、「ヘテロアリール」という用語は、縮合環ヘテロアリール基（すなわち、縮合環のうちの少なくとも1つは、芳香族ヘテロシクロである共に縮合された複数の環）を含む。5, 6-縮合環ヘテロアリーレンは、共に縮合された2つの環を指し、一方の環は、5つの員を有し、他方の環は、6つの員を有し、少なくとも1つの環は、ヘテロアリール環である。同様に、6, 6-縮合環ヘテロアリーレンは、共に縮合した2つの環を指し、一方の環は、6つの員を有し、他方の環は、6つの員を有し、少なくとも1つの環は、ヘテロアリール環である。また、6, 5-縮合環ヘテロアリーレンは、共に縮合される2つの環を指し、一方の環は、6つの員を有し、他方の環は、5つの員を有し、少なくとも1つの環は、ヘテロアリール環である。ヘテロアリール基は、炭素またはヘテロ原子を介して分子の残基と結合され得る。アリール及びヘテロアリール基の非限定例としては、フェニル、ナフチル、ピロリル、ピラゾリル、ピリダジニル、トリアジニル、ピリミジニル、イミダゾリル、ピラジニル、プリニル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、フリル、チエニル、ピリジル、ピリミジル、ベンゾチアゾリル、ベンゾキサゾイル、ベンズイミダゾリル、ベンゾフラン、イソベンゾフラン y 1、インドリル、イソインドリル、ベンゾチオフエニル、イソキノリル、キノキサリニル、キノリル、1-ナフチル、2-ナフチル、4-ピフェニル、1-ピロリル、2-ピロリル、3-ピロリル、3-ピラゾリル、2-イミダゾリル、4-イミダゾリル、ピラジニル、2-オキサゾリル、4-オキサゾリル、2-フェニルー4-オキサゾリル、5-オキサゾリル、3-イソオキサゾリル、4-イソオキサゾリル、5-イソオキサゾリル、2-チアゾリル、4-チアゾリル、5-チアゾリル、2-フリル、3-フリル、2-チエニル、3-チエニル、2-ピリジル、3-ピリジル、4-ピリジル、2-ピリミジル、4-ピリミジル、5-ベンゾチアゾリル、プリニル、2-ベンズイミダゾリル、5-インドリル、1-イソキノリル、5-イソキノリル、2-キノキサリニル、5-キノキサリニル、3-キノリル、及び6-キノリルが挙げられる。上述のアリール及びヘテロアリール環系の各々の置換基は、後述の許容可能な置換基からなる群から選択される。「アリーレン」及び「ヘテロアリーレン」は、単独または別の置換基の一部として、それぞれ、アリール及びヘテロアリールから誘導される二価のラジカルを意味する。ヘテロアリール基置換基は、環ヘテロ原子窒素と結合した $-O-$ であってもよい。

20

30

40

【0023】

スピロ環式環は、隣接環が単一原子を介して結合している2つ以上の環である。スピロ環式環内の個々の環は、同一であっても異なってもよい。スピロ環式環における個々の環は、置換であっても非置換のもであってもよく、一連のスピロ環式環内に他の個々の環とは

50

異なる置換基を有してもよい。スピロ環式環内の個々の環において可能な置換基は、スピロ環式環の一部ではない場合、同一環において可能な置換基である（例えば、シクロアルキルまたはヘテロシクロアルキル環の置換基）。スピロ環式環は、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレンであってもよく、スピロ環式環基内の個々の環は、全ての環が1種類であるものを含む（例えば、全ての環が置換ヘテロシクロアルキレンであり、各環は同一または異なる置換ヘテロシクロアルキレンであってもよい）、直前のリストのいずれかであり得る。スピロ環式環系のことを指す場合、ヘテロシクロスピロ環式環は、少なくとも1つの環がヘテロシクロ環であり、各環が異なる環であってもよいスピロ環式環のことを意味する。スピロ環式環系のことを指す場合、置換スピロ環式環は、少なくとも1つの環が置換され、各置換基は任意選択で異なってもよいことを意味する。

10

【0024】

記号

【化2】

「」

は、分子または化学式の残基に対する、化学部分の結合点を示す。

【0025】

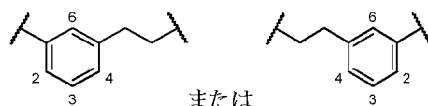
本明細書で使用される場合、「オキソ」という用語は、炭素原子に二重結合している酸素を意味する。

20

【0026】

「アルキルアリーレン」という用語は、アルキレン部分（アルキレンリンカーとも本明細書で呼ばれる）と共有結合したアリーレン部分である。実施形態では、アルキルアリーレン基は、式：

【化3】



30

を有する。

【0027】

アルキルアリーレン部分は、アルキレン部分またはアリーレンリンカー上で（例えば、置換基で）（例えば、2位、3位、4位、または6位の炭素において）置換され得、ハロゲン、オキソ、 $-N_3$ 、 $-CF_3$ 、 $-CCl_3$ 、 $-CBr_3$ 、 $-CI_3$ 、 $-CN$ 、 $-CHO$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_2CH_3$ 、 $-SO_3H$ 、 $-OSO_3H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、置換もしくは非置換の C_1-C_5 アルキル、または置換もしくは非置換の2～5員ヘテロアルキルで置換され得る）。実施形態では、アルキルアリーレンは、非置換のである。

40

【0028】

上記用語（例えば、「アルキル」、「ヘテロアルキル」、「シクロアルキル」、「ヘテロシクロアルキル」、「アリール」、及び「ヘテロアリール」）はそれぞれ、記載のラジカルの置換形態及び非置換の形態の両方を含む。ラジカルのそれぞれの型に好ましい置換基は、以下に記載されるものである。

【0029】

アルキルラジカル及びヘテロアルキルラジカル（アルキレン、アルケニル、ヘテロアルキレン、ヘテロアルケニル、アルキニル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、シクロアルケニル、及びヘテロシクロアルケニルと称されることが多い基を含む）を対象とする置換基は、限定はされないが、 $-OR'$ 、 $=O$ 、 $=NR'$ 、 $=N-OR'$ 、 $-NR'R$

50

、 $-SR'$ 、 $-ハロゲン$ 、 $-SiR'R''R'''$ 、 $-OC(O)R'$ 、 $-C(O)R'$ 、 $-CO_2R'$ 、 $-CONR'R''$ 、 $-OC(O)NR'R''$ 、 $-NR''C(O)R'$ 、 $-NR'-C(O)NR''R'''$ 、 $-NR''C(O)_2R'$ 、 $-NR-C(NR'R'')=NR'''$ 、 $-NR-C(NR'R'')=NR'''$ 、 $-S(O)R'$ 、 $-S(O)_2R'$ 、 $-S(O)_2NR'R''$ 、 $-NRSO_2R'$ 、 $-NR'NR''R'''$ 、 $-ONR'R''$ 、 $-NR'C(O)NR''NR'''$ 、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-NR'SO_2R'$ 、 $-NR'C(O)R''$ 、 $-NR'C(O)-OR''$ 、 $-NR'OR''$ から選択される、様々な基の1つ以上であり得、当該置換基の数の範囲は、 $0 \sim (2m' + 1)$ であり、 m' は、そのようなラジカルにおける炭素原子の総数である。 R 、 R' 、 R'' 、 R''' 、及び R'''' は、それぞれ好ましくは独立して、水素、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール（例えば、1～3つのハロゲンで置換されたアリール）、置換もしくは非置換のヘテロアリール、置換もしくは非置換のアルキル、アルコキシ基、もしくはチオアルコキシ基、またはアリールアルキル基を指す。本明細書に記載の化合物が、複数のR基を含む場合、例えば、R基は、それぞれ独立して選択され、同様に、 R' 基、 R'' 基、 R''' 基、及び R'''' 基のうちの複数が存在する場合、こうした基は、それぞれ独立して選択される。 R' 及び R'' が、同一の窒素原子と結合する場合、それらが窒素原子と組み合わされて、4員環、5員環、6員環、または7員環を形成し得る。例えば、 $-NR'R''$ には、限定はされないが、1-ピロリジニル及び4-モルホリニルが含まれる。置換基に関する上記の考察から、「アルキル」という用語は、ハロアルキル（例えば、 $-CF_3$ 及び $-CH_2CF_3$ ）並びにアシル（例えば、 $-C(O)CH_3$ 、 $-C(O)CF_3$ 、 $-C(O)CH_2OCH_3$ など）などの、水素基以外の基と結合した炭素原子を含む基を含むことが意図されることを、当業者であれば理解するであろう。

【0030】

アルキルラジカルを対象として記載される置換基と同様に、アリール基及びヘテロアリール基を対象とする置換基は多様であり、例えば、 $-OR'$ 、 $-NR'R''$ 、 $-SR'$ 、 $-ハロゲン$ 、 $-SiR'R''R'''$ 、 $-OC(O)R'$ 、 $-C(O)R'$ 、 $-CO_2R'$ 、 $-CONR'R''$ 、 $-OC(O)NR'R''$ 、 $-NR''C(O)R'$ 、 $-NR'-C(O)NR''R'''$ 、 $-NR''C(O)_2R'$ 、 $-NR-C(NR'R'')=NR'''$ 、 $-NR-C(NR'R'')=NR'''$ 、 $-S(O)R'$ 、 $-S(O)_2R'$ 、 $-S(O)_2NR'R''$ 、 $-NRSO_2R'$ 、 $-NR'NR''R'''$ 、 $-ONR'R''$ 、 $-NR'C(O)NR''NR'''$ 、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-R'$ 、 $-N_3$ 、 $-CH(Ph)_2$ 、フルオロ(C_1-C_4)アルコキシ、及びフルオロ(C_1-C_4)アルキル、 $-NR'SO_2R'$ 、 $-NR'C(O)R''$ 、 $-NR'C(O)-OR''$ 、 $-NR'OR''$ から選択され、当該置換基の数の範囲は、0から、芳香族環系に存在する利用可能な結合価の総数までの範囲であり、 R' 、 R'' 、 R''' 、及び R'''' は、好ましくは、水素、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、及び置換もしくは非置換のヘテロアリールから独立して選択される。本明細書に記載の化合物が、複数のR基を含む場合、例えば、R基は、それぞれ独立して選択され、同様に、 R' 基、 R'' 基、 R''' 基、及び R'''' 基の複数が存在する場合、こうした基は、それぞれ独立して選択される。

【0031】

環（例えば、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シクロアルキレン、ヘテロシクロアルキレン、アリーレン、またはヘテロアリーレン）を対象とする置換基は、環の特定の原子に対する置換基としてではなく、環に対する置換基として示され得る（一般に、浮遊置換基と称される）。そのような場合、置換基は、（化学結合価の規則に従って）任意の環原子と結合し得、縮合環またはスピロ環式環の場合、縮

10

20

30

40

50

合環またはスピロ環式環の1員と関連して示される置換基（単一環に対する浮遊置換基）は、任意の縮合環またはスピロ環式環に対する置換基であり得る（複数の環に対する浮遊置換基）。置換基が環と結合するが、特定の原子を対象とせず（浮遊置換基）、その置換基の添字が2以上の整数である場合、複数の置換基が、同一の原子、同一の環、異なる原子、異なる縮合環、異なるスピロ環式環に存在し得、置換基はそれぞれ、任意選択で異なり得る。環の分子残基への結合点が、単一原子に限定されない場合（浮遊置換基）、結合点は、任意の環原子であり得、縮合環またはスピロ環式環の場合、任意の縮合環またはスピロ環式環の任意の原子であり得、その際、化学結合価の規則に従う。環、縮合環、またはスピロ環式環が、1つ以上の環ヘテロ原子を含み、その環、縮合環、またはスピロ環式環が、1つ以上の浮遊置換基（限定はされないが、分子の残基への結合点を含む）と共に示される場合、浮遊置換基は、ヘテロ原子と結合し得る。環ヘテロ原子が、浮遊置換基を有する構造または式において1つ以上の水素と結合していることが示されている場合であり（例えば、2つの結合が環原子への結合であり、第3の結合が水素への結合である環窒素）、ヘテロ原子が、浮遊置換基と結合する場合、置換基は、化学結合価の規則に従いつつ水素と交換されると理解されることになる。

10

【0032】

2つ以上の置換基は、任意選択で連結されて、アリール基、ヘテロアリール基、シクロアルキル基、またはヘテロシクロアルキル基を形成し得る。そのような、いわゆる環形成置換基は、典型的には、必須ではないが、環式基礎構造と結合することがわかる。1つの実施形態では、環形成置換基は、基礎構造の隣接員と結合する。例えば、環式基礎構造の隣接員と結合した2つの環形成置換基は、縮合環構造を創出する。別の実施形態では、環形成置換基は、基礎構造の単一員と結合する。例えば、環式基礎構造の単一員と結合した2つの環形成置換基は、スピロ環式構造を創出する。さらに別の実施形態では、環形成置換基は、基礎構造の非隣接員と結合する。

20

【0033】

アリール環またはヘテロアリール環の隣接原子に存在する置換基の2つは、 $-T-C(O)-(CRR')_q-U-$ という式の環を任意選択で形成し得、式中、T及びUは独立して、 $-NR-$ 、 $-O-$ 、 $-CRR'-$ 、または単結合であり、qは、0～3の整数である。あるいは、アリール環またはヘテロアリール環の隣接原子に存在する置換基の2つは、 $-A-(CH_2)_r-B-$ という式の置換基と、任意選択で交換され得、式中、A及びBは独立して、 $-CRR'-$ 、 $-O-$ 、 $-NR-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2NR'-$ 、または単結合であり、rは、1～4の整数である。そのように形成された新たな環の単結合の1つは、任意選択で二重結合と交換され得る。あるいは、アリール環またはヘテロアリール環の隣接原子に存在する置換基の2つは、 $-(CRR')_s-X'-(C'R''R''')_d-$ という式の置換基と、任意選択で交換され得、式中、s及びdは独立して、0～3の整数であり、X'は、 $-O-$ 、 $-NR'-$ 、 $-S-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ 、または $-S(O)_2NR'-$ である。R、R'、R''、及びR'''という置換基は、好ましくは、水素、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、及び置換もしくは非置換のヘテロアリールから独立して選択される。

30

40

【0034】

本明細書で使用される場合、「ヘテロ原子」または「環ヘテロ原子」という用語は、酸素(O)、窒素(N)、硫黄(S)、リン(P)、及びケイ素(Si)を含むことが意図される。

【0035】

本明細書で使用される場合、「置換基」は、下記の部分から選択される基を意味する：
(A) オキソ、ハロゲン、 $-CF_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)-NH_2$ 、 $-NH-SO_2H$ 、

50

—NHC = (O)H、—NHC(O)—OH、—NHOH、—OCF₃、—OCHF₂、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、非置換のヘテロアリール、並びに

(B) 下記から選択される少なくとも1つの置換基で置換されたアルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール：

(i) オキソ、ハロゲン、—CF₃、—CN、—OH、—NH₂、—COOH、—CONH₂、—NO₂、—SH、—SO₃H、—SO₄H、—SO₂NH₂、—NHNH₂、—ONH₂、—NHC = (O)NHNH₂、—NHC = (O)—NH₂、—NH₂SO₂H、—NHC = (O)H、—NHC(O)—OH、—NHOH、—OCF₃、—OCHF₂、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、非置換のヘテロアリールと、

10

(ii) 下記から選択される少なくとも1つの置換基で置換されたアルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール：

(a) オキソ、ハロゲン、—CF₃、—CN、—OH、—NH₂、—COOH、—CONH₂、—NO₂、—SH、—SO₃H、—SO₄H、—SO₂NH₂、—NHNH₂、—ONH₂、—NHC = (O)NHNH₂、—NHC = (O)—NH₂、—NH₂SO₂H、—NHC = (O)H、—NHC(O)—OH、—NHOH、—OCF₃、—OCHF₂、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、非置換のヘテロアリール、及び

(b) 下記から選択される少なくとも1つの置換基で置換されたアルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール：オキソ、ハロゲン、—CF₃、—CN、—OH、—NH₂、—COOH、—CONH₂、—NO₂、—SH、—SO₃H、—SO₄H、—SO₂NH₂、—NHNH₂、—ONH₂、—NHC = (O)NHNH₂、—NHC = (O)—NH₂、—NH₂SO₂H、—NHC = (O)H、—NHC(O)—OH、—NHOH、—OCF₃、—OCHF₂、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、非置換のヘテロアリール。

20

【0036】

本明細書で使用される場合、「size-limited substituent (サイズ限定置換基)」または「size-limited substituent group (サイズ限定置換基)」は、「置換基」を対象として上に記載される置換基の全てから選択される基を意味し、置換もしくは非置換のアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換のC₁—C₂₀アルキルであり、置換もしくは非置換のヘテロアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換の2～20員ヘテロアルキルであり、置換もしくは非置換のシクロアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換のC₃—C₈シクロアルキルであり、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキルであり、置換もしくは非置換のアリールはそれぞれ、置換もしくは非置換のC₆—C₁₀アリールであり、及び置換もしくは非置換のヘテロアリールはそれぞれ、置換もしくは非置換の5～10員ヘテロアリールである。

30

【0037】

本明細書で使用される場合、「lower substituent (低級置換基)」または「lower substituent group (低級置換基)」は、「置換基」を対象として上に記載される置換基の全てから選択される基を意味し、置換もしくは非置換のアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換のC₁—C₈アルキルであり、置換もしくは非置換のヘテロアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキルであり、置換もしくは非置換のシクロアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換のC₃—C₇シクロアルキルであり、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換の3～7員ヘテロシクロアルキルであり、置換もしくは非置換のアリールはそれぞれ、置換もしくは非置換のC₆—C₁₀アリールであり、及び置換もしくは非置換のヘテロアリールはそれぞれ、置換もしくは非置換の5～9員ヘテロアリールであ

40

50

る。

【0038】

いくつかの実施形態では、本明細書に記載の化合物において記載される置換基はそれぞれ、少なくとも1つの置換基で置換される。より具体的には、いくつかの実施形態では、本明細書に記載の化合物において記載される置換アルキル、置換ヘテロアルキル、置換シクロアルキル、置換ヘテロシクロアルキル、置換アリール、置換ヘテロアリール、置換アルキレン、置換ヘテロアルキレン、置換シクロアルキレン、置換ヘテロシクロアルキレン、置換アリーレン、及び／または置換ヘテロアリーレンはそれぞれ、少なくとも1つの置換基で置換される。他の実施形態では、こうした基の少なくとも1つまたは全てが、少なくとも1つのサイズ限定置換基で置換される。他の実施形態では、こうした基の少なくとも1つまたは全てが、少なくとも1つの低級置換基で置換される。

10

【0039】

本明細書に記載の化合物の他の実施形態では、置換もしくは非置換のアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{20}$ アルキルであり得、置換もしくは非置換のヘテロアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換の2～20員ヘテロアルキルであり、置換もしくは非置換のシクロアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換の $C_3 - C_8$ シクロアルキルであり、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキルであり、置換もしくは非置換のアリールはそれぞれ、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{10}$ アリールであり、及び／または置換もしくは非置換のヘテロアリールはそれぞれ、置換もしくは非置換の5～10員ヘテロアリールである。本明細書に記載の化合物のいくつかの実施形態では、置換もしくは非置換のアルキレンはそれぞれ、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{20}$ アルキレンであり、置換もしくは非置換のヘテロアルキレンはそれぞれ、置換もしくは非置換の2～20員ヘテロアルキレンであり、置換もしくは非置換のシクロアルキレンはそれぞれ、置換もしくは非置換の $C_3 - C_8$ シクロアルキレンであり、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレンはそれぞれ、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキレンであり、置換もしくは非置換のアリーレンはそれぞれ、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{10}$ アリーレンであり、及び／または置換もしくは非置換のヘテロアリーレンはそれぞれ、置換もしくは非置換の5～10員ヘテロアリーレンである。

20

【0040】

いくつかの実施形態では、置換もしくは非置換のアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換の $C_1 - C_8$ アルキルであり、置換もしくは非置換のヘテロアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキルであり、置換もしくは非置換のシクロアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換の $C_3 - C_7$ シクロアルキルであり、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルはそれぞれ、置換もしくは非置換の3～7員ヘテロシクロアルキルであり、置換もしくは非置換のアリールはそれぞれ、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{10}$ アリールであり、及び／または置換もしくは非置換のヘテロアリールはそれぞれ、置換もしくは非置換の5～9員ヘテロアリールである。いくつかの実施形態では、置換もしくは非置換のアルキレンはそれぞれ、置換もしくは非置換の $C_1 - C_8$ アルキレンであり、置換もしくは非置換のヘテロアルキレンはそれぞれ、置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキレンであり、置換もしくは非置換のシクロアルキレンはそれぞれ、置換もしくは非置換の $C_3 - C_7$ シクロアルキレンであり、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレンはそれぞれ、置換もしくは非置換の3～7員ヘテロシクロアルキレンであり、置換もしくは非置換のアリーレンはそれぞれ、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{10}$ アリーレンであり、及び／または置換もしくは非置換のヘテロアリーレンはそれぞれ、置換もしくは非置換の5～9員ヘテロアリーレンである。いくつかの実施形態では、化合物は、後述の実施例セクション、図、または表に示される化学種である。

30

40

【0041】

本発明のある特定の化合物は、不斉炭素原子（光学中心もしくはキラル中心）または二重結合を有し、絶対立体化学の点において、(R)－もしくは(S)－として、またはア

50

ミノ酸については（D）－もしくは（L）－として定義され得るエナンチオマー、ラセミ化合物、ジアステレオマー、互変異性体、幾何異性体、立体異性形態であり、個々の異性体は、本発明の範囲内に包含される。本発明の化合物には、不安定が故に合成及び／または単離が不可能であることが当該技術分野において知られるものは含まれない。本発明は、ラセミ形態及び光学的に純粋な形態の化合物を含むことを意図する。光学的に活性な（R）－異性体及び（S）－異性体、または（D）－異性体及び（L）－異性体は、キラルシントロンもしくはキラル試薬を使用して調製してよく、または通常の技術を使用して分割してよい。本明細書に記載の化合物が、オレフィン結合または他の幾何不斉中心を含む場合、別段の記載がない限り、化合物は、E及びZの両方の幾何異性体を含むことが意図される。

10

【0042】

本明細書で使用される場合、「異性体」という用語は、同一数かつ同一種の原子を有し、従って、分子量は同一であるが、原子の構造的な配置または立体配置という点で異なる化合物を指す。

【0043】

本明細書で使用される場合、「互変異性体」という用語は、平衡状態において存在し、1つの異性形態から別の形態へと容易に変換される、2つ以上の構造異性体の1つを指す。

【0044】

本発明のある特定の化合物は、互変異性形態で存在し得ることが当業者には明らかである。化合物のそのような互変異性形態は全て、本発明の範囲内である。

20

【0045】

別段の記載がない限り、本明細書で示される構造は、本構造体の全ての立体化学的形状（すなわち、各非対称中心の（R）配置及び（S）配置）を含むことを意味する。従って、単一の立体化学的な異性体、並びに本発明の化合物のエナンチオマー及びジアステレオマー混合物は、本発明の範囲内である。

【0046】

別段の記載がない限り、本明細書に記載の構造は、1つ以上の同位体的に濃縮された原子が存在することのみが異なる化合物を含むことも意図される。例えば、本明細書に記載の構造を有する化合物であって、重水素もしくは三重水素による水素置換を有するか、または ^{13}C もしくは ^{14}C が濃縮された炭素による炭素置換を有することのみが異なる化合物は、本発明の範囲内である。

30

【0047】

別段の記載がない限り、本明細書に記載の構造は、1つ以上の同位体的に濃縮された原子が存在することのみが異なる化合物を含むことも意図される。例えば、本明細書に記載の構造を有する化合物であって、重水素もしくは三重水素による水素置換を有するか、または ^{13}C もしくは ^{14}C が濃縮された炭素による炭素置換を有することのみが異なる化合物は、本発明の範囲内である。

【0048】

本発明の化合物は、そのような化合物を構成する1つ以上の原子の原子同位体の含有割合が天然と異なり得る。例えば、化合物は、例えば、三重水素（ ^3H ）、ヨウ素-125（ ^{125}I ）、または炭素-14（ ^{14}C ）などの、放射性同位体で放射標識され得る。本発明の化合物の同位体的に異なる形態は全て、放射性の有無を問わず、本発明の範囲内に包含される。

40

【0049】

本出願の全体を通して、代替形態は、例えば、複数の可能なアミノ酸を含むそれぞれのアミノ酸位置といったマーカッシュ群で記載されることに留意されるべきである。マーカッシュ群のそれぞれのメンバーは、別々に考慮されるべきであり、それによって別の実施形態を含むことが特に企図され、マーカッシュ群は、単一の単位であると見なされることにはならない。

50

【0050】

「Analog（類似体）」または「analogue（類似体）」は、化学及び生物学においてそのごく普通の意味に従って使用され、別の化合物（すなわち、いわゆる「参照」化合物）と構造的に類似しているが、組成、例えば、異なる元素の原子による1つの原子の置換、または特定の官能基の存在、または別の官能基による1つの官能基の置換、または参照化合物の1つ以上のキラル中心の絶対立体化学が異なる化学的な化合物を指す。従って、類似体は、参照化合物と比較して、機能及び外観は類似または同等であるが、構造または起源が異なる化合物である。

【0051】

本明細書で使用される場合、「a」または「an」という用語は、1つ以上を意味する。加えて、本明細書で使用される場合、「a[n]で置換された」という語句は、特定の基が、指定の置換基のいずれかまたは全ての1つ以上で置換され得ることを意味する。例えば、アルキル基またはヘテロアリール基などの基が、「非置換のC₁－C₂₀アルキルで置換されるか、または非置換の2～20員ヘテロアルキルで置換される」場合、基は、1つ以上の非置換のC₁－C₂₀アルキル、及び／または1つ以上の非置換の2～20員ヘテロアルキルを含み得る。

10

【0052】

さらに、部分が、R置換基で置換される場合、基は、「Rで置換された」と称され得る。部分がRで置換される場合、部分は、少なくとも1つのR置換基で置換され、R置換基はそれぞれ、任意選択で異なる。（式（I）などの）化学属の記載において特定のR基が存在する場合、ローマアルファベット記号が、特定のR基のそれぞれの出現を区別するために使用され得る。例えば、R¹³置換基が複数存在する場合、R¹³置換基はそれぞれ、R^{13A}、R^{13B}、R^{13C}、R^{13D}などとして区別され得、R^{13A}、R^{13B}、R^{13C}、R^{13D}などはそれぞれ、R¹³の定義の範囲内であると定義され、任意選択で異なって定義される。

20

【0053】

本明細書で使用される場合、「共有結合性のシステイン修飾部分」は、システインアミノ酸（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトBTK）のシステイン481）のスルフヒドリル官能基と反応して、共有結合を形成することができる置換基を指す。従って、共有結合性のシステイン修飾部分は、典型的には求電子性である。

30

【0054】

本明細書で使用される場合、「検出可能部分」は、化合物または生体分子と共有結合または非共有結合で結合することができ、例えば、当該技術分野において知られる技術を使用して検出することができる部分を指す。実施形態では、検出可能部分は、共有結合で結合する。検出可能部分は、結合した化合物または生体分子のイメージングを提供し得る。検出可能部分は、2つの化合物間の接触を示し得る。検出可能部分の例は、フルオロフォア、抗体、反応性色素、放射標識された部分、磁性造影剤、及び量子ドットである。フルオロフォアの例としては、フルオレセイン、ローダミン、GFP、クマリン、FITC、Alexa fluor、Cy3、Cy5、BODIPY、及びシアニン色素が挙げられる。放射性核種の例としては、フッ素-18、ガリウム-68、及び銅-64が挙げられる。磁性造影剤の例としては、ガドリニウム、酸化鉄及び鉄白金、並びにマンガンが挙げられる。

40

【0055】

本発明の化合物の説明は、当業者に知られる化学結合の原理によって限定される。従って、基が、数ある置換基の1つ以上によって置換され得る場合、そのような置換基は、化学結合の原理に従うように選択されると共に、本質的に不安定ではなく、及び／または当業者の知見において、水性条件、中性条件、及びいくつかの既知の生理学的条件などの環境条件下で不安定性を有する可能性が想定される化合物が得られるように選択される。例えば、ヘテロシクロアルキルまたはヘテロアリールは、当業者に知られる化学結合の原理に従って、環ヘテロ原子を介して分子の残基と結合し、それによって、本質的に不安定な

50

化合物が生じることが回避される。

【0056】

「医薬的に許容可能な塩」という用語は、本明細書に記載の化合物に見られる特定の置換基に応じて、相対的に無毒な酸または塩基を用いて調製される、活性化合物の塩を含むことが意図される。本発明の化合物が、相対的に酸性の官能性を含む場合、溶媒を用いずに、または適した不活性溶媒において、そのような化合物の中性形態と、十分量の所望の塩基とを接触させることによって、塩基付加塩を得ることができる。医薬的に許容可能な塩基付加塩の例としては、ナトリウム塩、カリウム塩、カルシウム塩、アンモニウム塩、有機アミノ塩、もしくはマグネシウム塩、または類似の塩が挙げられる。本発明の化合物が、相対的に塩基性の官能性を含む場合、溶媒を用いずに、または適した不活性溶媒において、そのような化合物の中性形態と、十分量の所望の酸とを接触させることによって、酸付加塩を得ることができる。医薬的に許容可能な酸付加塩の例としては、塩酸、臭化水素酸、硝酸、炭酸、一水素炭酸、リン酸、一水素リン酸、二水素リン酸、硫酸、一水素硫酸、ヨウ化水素酸、または亜リン酸などのような無機酸に由来するもの、並びに酢酸、プロピオン酸、イソ酪酸、マレイン酸、マロン酸、安息香酸、コハク酸、スベリン酸、フマル酸、乳酸、マンデル酸、フタル酸、ベンゼンスルホン酸、p-トリルスルホン酸、クエン酸、酒石酸、シュウ酸、メタンスルホン酸などのような、相対的に無毒な有機酸に由来する塩が挙げられる。アルギニン酸塩などのアミノ酸の塩、並びにグルクロン酸またはガラクトロン酸などのような有機酸の塩も含まれる（例えば、Berge et al., “Pharmaceutical Salts”, Journal of Pharmaceutical Science, 1977, 66, 1-19を参照されたい）。本発明のある特定の化合物は、塩基付加塩または酸付加塩のいずれかに化合物を変換することが可能な塩基性の官能性及び酸性の官能性の両方を含む。

【0057】

従って、本発明の化合物は、医薬的に許容可能な酸などとの塩として存在し得る。本発明は、そのような塩を含む。そのような塩の非限定例としては、塩酸塩、臭化水素酸塩、リン酸塩、硫酸塩、メタンスルホン酸塩、硝酸塩、マレイン酸塩、酢酸塩、クエン酸塩、フマル酸塩、プロピオン酸塩、酒石酸塩（例えば、（+）-酒石酸塩、（-）-酒石酸塩、またはラセミ混合物を含む、それらの混合物）、コハク酸塩、安息香酸塩、及びグルタミン酸などのアミノ酸との塩、並びに四級アンモニウム塩（例えば、ヨウ化メチル、ヨウ化エチルなど）が挙げられる。こうした塩は、当業者に知られる方法によって調製してよい。

【0058】

化合物の中性形態は、好ましくは、塩と、塩基または酸とを接触させ、通常の様式において親化合物を単離することによって再生される。化合物の親形態は、極性溶媒における溶解性などの、ある特定の物理的特性において、様々な塩の形態とは異なり得るものである。

【0059】

塩の形態に加えて、本発明は、プロドラッグの形態の化合物を提供する。本明細書に記載の化合物のプロドラッグは、生理学的条件下で化学変化が容易に生じて本発明の化合物を与える化合物である。本明細書に記載の化合物のプロドラッグは、投与後にインビボで変換され得る。さらに、プロドラッグは、例えば、適した酵素または化学試薬と接触したときなどの、エクスピボの環境において化学的または生化学的な方法によって本発明の化合物へと変換することができる。

【0060】

本発明のある特定の化合物は、非溶媒和形態、並びに水和形態を含む溶媒和形態で存在することができる。一般に、溶媒和形態は、非溶媒和形態と等価であり、本発明の範囲内に包含される。本発明のある特定の化合物は、複数の結晶形態または非結晶形態で存在し得る。一般に、物理的形態は全て、本発明によって企図される使用について等価であり、本発明の範囲内であると意図される。

【0061】

「医薬的に許容可能な賦形剤」及び「医薬的に許容可能な担体」は、対象への活性薬剤の投与及び対象による吸収を助け、患者に対して顕著かつ有害な毒性学的作用を引き起こすことなく、本発明の組成物に含めることができる物質を指す。医薬的に許容可能な賦形剤の非限定例としては、水、NaCl、正常生理食塩水、乳酸リンゲル液、正常スクロース、正常グルコース、結合剤、増量剤、崩壊剤、滑沢剤、被覆剤、甘味剤、風味剤、塩溶液（リンゲル液など）、アルコール、オイル、ゼラチン、ラクトース、アミロース、またはデンプンなどの糖質、脂肪酸エステル、ヒドロキシメチルセルロース、ポリビニルピロリジン、及び着色剤などが挙げられる。そのような調製物は、滅菌することができ、望まれるのであれば、本発明の化合物との有害反応が生じない、滑沢剤、保存剤、安定剤、湿潤剤、乳化剤、浸透圧調整用の塩、緩衝剤、着色剤、及び／または芳香物質などの補助剤と混合することができる。本発明において有用な医薬賦形剤が他にも存在することを、当業者であれば認識するであろう。

10

【0062】

「調製物」という用語は、担体としての封入材料と共に活性化合物の製剤を含むことが意図され、これによって、他の担体を含むか、または含まずに活性成分が担体に囲まれたカプセルが提供され、従って、活性成分と担体とが結びつく。同様に、カシェ剤及びトローチ剤が含まれる。錠剤、粉末、カプセル、丸剤、カシェ剤、及びトローチ剤は、経口投与に適した固体の投与形態として使用することができる。

20

【0063】

「ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤」または「BTK化合物」または「BTK阻害剤」は、対照（例えば、化合物が欠如している）または公知の不活性を有する化合物と比較した場合に、ブルトン型チロシンキナーゼの活性を低下させる化合物（例えば、本明細書に記載の化合物）を指す。

【0064】

「ポリペプチド」、「ペプチド」、及び「タンパク質」という用語は、本明細書で互換的に使用され、アミノ酸残基のポリマーであって、アミノ酸からならない部分に任意選択で複合化され得るポリマーを指す。用語は、1つ以上のアミノ酸残基が、対応する天然起源のアミノ酸の人工的な化学模倣体であるアミノ酸ポリマー、並びに天然起源のアミノ酸ポリマー、及び非天然起源のアミノ酸ポリマーに適用される。

30

【0065】

人工的であるか、もしくは操作されているか、または人工的もしくは操作されたタンパク質もしくは核酸（例えば、非天然型もしくは非野生型）から誘導されるか、もしくはそれを含む場合、ポリペプチドまたは細胞は、「組換え体」である。例えば、ベクター、または例えば、組換え生物のゲノムといった、任意の他の異種性位置に挿入されたポリヌクレオチドであって、その結果、そのポリヌクレオチドが天然において見出されるときに通常それに隣接するヌクレオチド配列と関連しないポリヌクレオチドは、組換えポリヌクレオチドである。組換えポリヌクレオチドに由来して、インビトロまたはインビボで発現するタンパク質は、組換えポリペプチドの例である。同様に、天然において見られないポリヌクレオチド配列、例えば、天然起源の遺伝子の変異体は、組換え体である。

40

【0066】

タンパク質のアミノ酸残基は、それが、所与の残基と同じ、タンパク質内の基本的な構造的位置を占める場合、所与の残基に「対応する」。例えば、選択されたタンパク質の選択された残基は、選択された残基がヒトブルトン型チロシンキナーゼのCys481と同じ基本的な空間的または他の構造的な関係を占める場合、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのCys481に対応する。いくつかの実施形態では、選択されたタンパク質が、ヒトブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と最大の相同性となるように整列される場合、Cys481と整列している整列され選択されたタンパク質の位置は、Cys481に対応すると言われる。例えば、選択されたタンパク質の構造が、ヒトブルトン型チロシンキナーゼタンパク質との最大一貫性のために整列され、全体的構造を比較する場合に、一次配

50

列整列の代わりに、三次元構造整列も使用することができる。この場合、構造モデルにおいてCys481と同じ基本的位置を占めるアミノ酸は、Cys481残基に対応すると言われる。

【0067】

「接触すること」は、そのごく普通の意味に従って使用され、少なくとも2つの異なる種（例えば、生体分子または細胞を含む化学的な化合物）の反応、相互作用、または物理的接触に十分な近接化が可能となるプロセスを指す。しかしながら、得られる反応生成物は、添加試薬の間で生じる反応から直接生成し得るか、または1つ以上の添加試薬から反応混合物において生成し得る中間体から生成し得ると理解されるべきである。

【0068】

「接触すること」という用語は、2つの種が反応、相互作用、または物理的接触をすることを可能にすることも含み得、2つの種は、本明細書に記載の化合物及びタンパク質または酵素であってもよい。いくつかの実施形態では、接触することは、本明細書に記載の化合物を、シグナル伝達経路に關与するタンパク質または酵素と相互作用することを可能にすることが含まれる。

【0069】

本明細書で定義される場合、タンパク質に関する「活性化」「活性化する」「活性化すること」などの用語は、初期の非活性または不活性化状態からの、タンパク質の生物学的に活性な誘導体への変換を指す。用語は、疾患で減少したシグナル伝達または酵素活性またはタンパク質の量を活性化または活性化する、増感させる、または上方調節することを指す。

【0070】

本明細書で定義される場合、タンパク質阻害剤相互作用に関する「阻害」「阻害する」「阻害すること」という用語は、阻害剤の非存在下におけるタンパク質の活性または機能と比較して、タンパク質の活性または機能に負の影響を及ぼすこと（例えば、低減させること）を意味する。実施形態では、阻害は、阻害剤の非存在下におけるタンパク質の濃度またはレベルと比較して、タンパク質の濃度またはレベルに負の影響を及ぼすこと（例えば、低減させること）を意味する。実施形態では、阻害は、疾患または疾患症状の低減を指す。実施形態では、阻害は、特定のタンパク質標的の活性の低減を指す。従って、阻害には、タンパク質のシグナル伝達もしくは酵素活性、またはタンパク質の量の、少なくとも部分的、部分的、または完全な、刺激の遮断、活性化の低減、防止、もしくは遅延、または不活性化、脱感作、もしくは下方制御が含まれる。実施形態では、阻害は、直接相互作用（例えば、阻害剤が標的タンパク質と結合すること）がもたらす標的タンパク質の活性の低減を指す。実施形態では、阻害は、間接相互作用（例えば、阻害剤が、標的タンパク質を活性化するタンパク質と結合することによって、標的タンパク質の活性化を防止すること）からの標的タンパク質の活性の低減を指す。「ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤」及び「BTK阻害剤」は、阻害剤の非存在下におけるブルトン型チロシンキナーゼの活性または機能と比較して、ブルトン型チロシンキナーゼの活性または機能に負の影響を及ぼす（例えば、低減させる）（例えば、BTK阻害剤がBTKと結合する）化合物である。

【0071】

「ブルトン型チロシンキナーゼ」及び「BTK」という用語は、ブルトン型チロシンキナーゼ活性を有するタンパク質（相同体、アイソフォーム、及びその機能的断片を含む）を指す。この用語は、ブルトン型チロシンキナーゼの任意の組換え体または天然起源の形態、または（例えば、野生型ブルトン型チロシンキナーゼと比較して、少なくとも30%、40%、50%、60%、70%、80%、90%、95%、または100%の活性内で）ブルトン型チロシンキナーゼ活性を維持するその変異体を含む。実施形態では、BTK遺伝子によってコードされるブルトン型チロシンキナーゼタンパク質は、Entrez 695、UniProt Q06187、またはRefSeq（タンパク質）NP_000052に記載されるかまたは対応するアミノ酸配列を有する。実施形態では、ブルト

10

20

30

40

50

ン型チロシンキナーゼ BTK 遺伝子は、RefSeq (mRNA) NM_000061 に記載される核酸配列を有する。実施形態では、アミノ酸配列または核酸配列は、本出願の提出時に知られている配列である。実施形態では、配列は、GI: 4557377 に対応する。実施形態では、配列は、NP_000052.1 に対応する。実施形態では、配列は、NM_000061.2 に対応する。実施形態では、配列は、GI: 213385292 に対応する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼは、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ、例えば、ヒトがんを引き起こすブルトン型チロシンキナーゼである。

【0072】

「発現」という用語は、限定されないが、転写、転写後修飾、翻訳、翻訳後修飾、及び分泌を含むポリペプチドの産生に関与する任意のステップを含む。発現は、タンパク質を検出する従来の技術（例えば、ELISA、ウェスタンブロットティング、フローサイトメトリー、免疫蛍光、免疫組織化学など）を用いて検出することができる。

10

【0073】

「疾患」または「病状」は、本明細書で提供される化合物または方法で治療可能な患者または対象の存在状態または健康状態を指す。疾患は、がんであってもよい。疾患は、脳卒中であってもよい。疾患は、炎症性疾患であってもよい。いくつかのさらなる例では、「がん」は、ヒトのがん及びがん腫、肉腫、腺がん、リンパ腫、白血病などを指し、こうしたものには、固形及びリンパ系のがん、腎がん、乳がん、肺がん、膀胱がん、結腸がん、卵巣がん、前立腺がん、膵がん、胃がん、脳がん、頭頸部がん、皮膚がん、子宮がん、精巣がん、神経膠腫、食道がん、及び肝細胞がんを含む肝がん、B細胞性急性リンパ芽球性リンパ腫を含むリンパ腫、非ホジキンリンパ腫（例えば、バーキットリンパ腫、小細胞型リンパ腫、及び大細胞型リンパ腫）、ホジキンリンパ腫、白血病（AML、ALL、及びCMLを含む）、または多発性骨髄腫が含まれる。

20

【0074】

本明細書で使用される場合、「炎症性疾患」という用語は、異常な炎症（例えば、対照、例えば、疾患に罹患していない健康な人と比較して、炎症レベルの増加）によって特徴付けられる疾患または病状を指す。炎症性疾患の例としては、自己免疫疾患、関節炎、関節リウマチ、乾癬性関節炎、若年性特発性関節炎、多発性硬化症、全身性エリテマトーデス（SLE）、重症筋無力症、若年発症型糖尿病、1型糖尿病、ギラン・バレー症候群、橋本脳炎、慢性甲状腺炎、強直性脊椎炎、乾癬、シェーグレン症候群、脈管炎、糸球体腎炎、自己免疫性甲状腺炎、ベーチェット病、クローン病、潰瘍性大腸炎、水疱性類天疱瘡、サルコイドーシス、魚鱗癬、グレーブス眼症、炎症性腸疾患、アジソン病、白斑、喘息、アレルギー性喘息、尋常性座瘡、セリアック病、慢性前立腺炎、炎症性腸疾患、骨盤内炎症性疾患、再灌流障害、虚血再灌流障害、脳卒中、サルコイドーシス、移植拒絶、間質性膀胱炎、アテローム性動脈硬化症、強皮症、及びアトピー性皮膚炎が挙げられる。

30

【0075】

本明細書で使用される場合、「がん」という用語は、白血病、がん腫、及び肉腫を含む、哺乳類（例えば、ヒト）において見られる全ての型のがん、新生物、または悪性腫瘍を指す。本明細書で提供される化合物または方法で治療し得るがんの例としては、脳がん、神経膠腫、膠芽腫、神経芽細胞腫、前立腺がん、大腸がん、膵がん、子宮頸がん、胃がん、卵巣がん、肺がん、及び頭部がんが挙げられる。本明細書で提供される化合物または方法で治療し得るがんの例としては、甲状腺がん、内分泌系のがん、脳がん、乳がん、子宮頸がん、結腸がん、頭頸部がん、肝がん、腎がん、肺がん、非小細胞肺がん、黒色腫、中皮腫、卵巣がん、肉腫、胃がん、子宮がん、髄芽腫、大腸がん、膵がんが挙げられる。追加の例としては、ホジキン病、非ホジキンリンパ腫、多発性骨髄腫、神経芽細胞腫、神経膠腫、多形神経膠芽腫、卵巣がん、横紋筋肉腫、原発性血小板血症、原発性マクログロブリン血症、原発性脳腫瘍、がん、悪性脾臓インスリノーマ、悪性カルチノイド、膀胱がん、前悪性皮膚病変、精巣がん、リンパ腫、甲状腺がん、神経芽細胞腫、食道がん、尿生殖器がん、悪性高カルシウム血症、子宮内膜がん、副腎皮質がん、膵内分泌部もしくは膵外分泌部の新生物、甲状腺髄様がん (medullary thyroid cancer

40

50

)、甲状腺髄様がん (medullary thyroid carcinoma)、黒色腫、大腸がん、乳頭様甲状腺がん、肝細胞がん、または前立腺がんが挙げられる。

【0076】

「白血病」という用語は、造血器官の進行性の悪性疾患を広く指し、一般に、血液及び骨髓における白血球及びその前駆体の増殖及び発生に異常が生じることによって特徴付けられる。白血病は、一般に、(1) 疾患の期間及び特徴 (急性または慢性) ; (2) 骨髓 (骨髓性)、リンパ系 (リンパ性)、または単球性という、関与する細胞型 ; 及び (3) 血液における異常細胞の数の増加または非増加 (白血病性または非白血病性 (亜白血病性) の) に基づいて臨床的に分類される。本明細書で提供される化合物または方法で治療し得る白血病の例としては、例えば、急性非リンパ性白血病、慢性リンパ性白血病、急性顆粒球白血病、慢性顆粒球白血病、急性前骨髓球性白血病、成人T細胞白血病、非白血性白血病、白血性白血病 (leukocytthemic leukemia)、好塩基球性白血病、芽球性白血病、ウシ白血病、慢性骨髓性白血病、皮膚白血病、胎生細胞性白血病、好酸球性白血病、グロス白血病、ヘアリー細胞白血病、血芽球性白血病、血芽球細胞性白血病、組織球性リンパ腫、幹細胞性白血病、急性単球性白血病、白血球減少性白血病、リンパ性白血病 (lymphatic leukemia)、リンパ芽球性白血病、リンパ性白血病 (lymphocytic leukemia)、リンパ性白血病 (lymphogenous leukemia)、リンパ性白血病 (lymphoid leukemia)、リンパ肉腫細胞性白血病、肥満細胞性白血病、巨核球性白血病、小骨髓芽球性白血病、単球性白血病、骨髓芽球性白血病、骨髓性白血病、骨髓顆粒球性白血病、骨髓単球性白血病、ネーグリ白血病、形質細胞性白血病、多発性骨髓腫、形質細胞性白血病、前骨髓球性白血病、リーダー細胞性白血病、シリング白血病、幹細胞性白血病、亜白血性白血病、または未分化細胞性白血病が挙げられる。

【0077】

「肉腫」という用語は、一般に、胚性結合組織のような物質から構成され、一般に、線維性または均一性の物質に密に詰め込まれた包埋細胞からなる腫瘍を指す。本明細書で提供される化合物または方法で治療し得る肉腫としては、軟骨肉腫、線維肉腫、リンパ肉腫、黒色肉腫、粘液肉腫、骨肉腫、アベメシー肉腫、脂肪肉腫 (adipose sarcoma)、脂肪肉腫 (liposarcoma)、胞状軟部肉腫、エナメル上皮肉腫、ブドウ状肉腫、緑色腫肉腫、絨毛がん、胎児性肉腫、ウィルムス腫瘍肉腫、子宮内膜肉腫、間質肉腫、ユーイング肉腫、筋膜肉腫、線維芽細胞肉腫、巨細胞肉腫、顆粒球性肉腫、ホジキン肉腫、特発性多発性色素性出血性肉腫、B細胞の免疫芽球肉腫、リンパ腫、T細胞の免疫芽球肉腫、イエセン肉腫、カポジ肉腫、クッパー星細胞肉腫、血管肉腫、白血肉腫、悪性間葉腫肉腫、傍骨性骨肉腫、網状赤血球肉腫、ラウス肉腫、漿液嚢胞性肉腫、滑膜肉腫、または末梢血管拡張性肉腫が含まれる。

【0078】

「黒色腫」という用語は、皮膚または他の器官のメラニン細胞系から生じる腫瘍を意味するために使用される。本明細書で提供される化合物または方法で治療し得る黒色腫には、例えば、末端黒子型黒色腫、無色素性黒色腫、良性若年性黒色腫、クラウドマン黒色腫、S91黒色腫、ハーディング・パッセー黒色腫、若年性黒色腫、悪性黒子型黒色腫、悪性黒色腫、結節性黒色腫、爪下黒色腫、または表在拡大型黒色腫が含まれる。

【0079】

「がん腫」という用語は、周囲組織に浸潤し、転移を生じさせる傾向を有する上皮細胞から構成される悪性新生物を指す。本明細書で提供される化合物または方法で治療し得るがん腫の例としては、例えば、甲状腺髄様がん、家族性甲状腺髄様がん、腺房がん、小葉がん、腺嚢がん腫、腺様嚢胞がん、腺腫性がん、副腎皮質のがん腫、肺胞がん、肺胞上皮がん、基底細胞がん (basal cell carcinoma)、基底細胞がん (carcinoma basocellulare)、類基底細胞がん、基底扁平細胞がん、気管支肺胞上皮がん、細気管支がん、気管支原性肺がん、大脳様がん、胆管細胞がん、絨毛がん、粘液がん、面皰がん、子宮体がん、篩状がん、鑑状がん、皮膚がん、円柱がん

、円柱細胞がん、腺管がん、硬性がん、胎児性がん、髄様がん、類表皮がん、腺様上皮がん、外方増殖性がん、潰瘍がん、線維性がん、ゼラチン状がん、膠様がん、巨細胞がん（giant cell carcinoma）、巨細胞がん（carcinoma gigantocellulare）、腺がん、顆粒膜細胞がん、毛母がん、血性がん、肝細胞がん、ハースル細胞がん、硝子状がん、副腎がん、乳児胎児性がん、上皮内がん（carcinoma in situ）、表皮内がん、上皮内がん（intraepithelial carcinoma）、クロンベシェールがん、クルチスキー細胞がん、大細胞がん、レンズ状がん（lenticular carcinoma）、レンズ状がん（carcinoma lenticulare）、脂肪性がん、リンパ上皮がん、髄様がん（carcinoma medullare）、髄様がん（medullary carcinoma）、黒色がん、軟性がん、粘液性がん、粘液分泌がん、粘液細胞がん、粘表皮がん、粘液がん（carcinoma mucosum）、粘液がん（mucous carcinoma）、粘液腫状がん、上咽頭がん、燕麦細胞がん、骨化性がん、類骨がん、乳頭がん、門脈周囲のがん、前浸潤がん、有棘細胞がん、髄質様がん、腎臓の腎細胞がん、予備細胞がん、肉腫様がん、シュナイダーがん、硬性がん、陰囊がん、印環細胞がん、単純がん、小細胞がん、ソラノイドがん、回転楕円面細胞がん、紡錘細胞がん、海綿様がん、扁平上皮がん（squamous carcinoma）、扁平上皮がん（squamous cell carcinoma）、紐様がん、毛細血管拡張性がん（carcinoma telangiectaticum）、毛細血管拡張性がん（carcinoma telangiectodes）、移行上皮がん、結節がん（carcinoma tuberosum）、結節がん（tuberous carcinoma）、疣状がん、または絨毛がんが含まれる。

【0080】

「治療すること」または「治療」という用語は、損傷、疾患、病態、または病状の治療または改善における成功の兆候のことを指し、いずれの客観的または主観的パラメーター、例えば、軽減；緩和；症状の減衰、あるいは、損傷、病態または病状を患者にとってより許容できるようにすること；変性または衰退速度の遅延；変性の最終時点での衰弱をより低減すること；患者の身体的または精神的健康の向上などが含まれる。症状の治療または改善は、健康診断、神経学的検査、及び／または精神医学的評価の結果などを含む客観的または主観的パラメーターに基づき得る。「治療する」という用語及びその派生語は、損傷、病態、病状、または疾患の予防を含み得る。実施形態では、治療することは、予防することである。実施形態では、治療することは、予防することを含まない。

【0081】

「患者」または「それを必要とする対象」は、本明細書で提供される医薬組成物の投与によって治療することができる疾患または病状に苦しんでいるか、またはそれが生じる傾向を有する生きた生物を指す。非限定例としては、ヒト、他の哺乳類、ウシ、ラット、マウス、イヌ、サル、ヤギ、ヒツジ、雌ウシ、シカ、及び他の非哺乳類動物が挙げられる。いくつかの実施形態では、患者は、ヒトである。

【0082】

「有効量」は、その化合物が存在しない場合と比較して、化合物が記載の目的を達成（例えば、その投与効果の達成、疾患の治療、酵素活性の低減、酵素活性の増加、シグナル伝達経路の低減、疾患または病状の1つ以上の症状の低減するために十分な量である。「有効量」の例は、疾患の1つ以上の症状の治療、予防、または低減への寄与に十分な量であり、これは、「治療上有効な量」と称することもできる。1つ以上の症状の「低減」（及びこの語句の文法的同等形態）は、症状（複数可）の重症度もしくは頻度の減少、または症状（複数可）の排除を意味する。薬物の「予防的有効量」は、対象に投与されると、意図される予防効果を有することになる薬物の量であり、意図される予防効果は、例えば、損傷、疾患、病態、または病状の発症（または再発）の予防または遅延、あるいは損傷、疾患、病態、もしくは病状、またはそれらの症状の発症（または再発）の可能性の低減である。完全な予防効果は、1回の用量の投与によって必ずしも生じるとは限らず、一連

の用量の投与後にのみ生じ得る。従って、予防的有効量は、1回または複数回の投与において投与され得る。本明細書で使用される場合、「活性低減量」は、アンタゴニストが存在しない場合と比較して、酵素の活性を低減するために必要なそのアンタゴニストの量を指す。本明細書で使用される場合、「機能攪乱量」は、アンタゴニストが存在しない場合と比較して、酵素またはタンパク質の機能を攪乱するために必要なそのアンタゴニストの量を指す。正確な量は、治療目的に依存することになり、既知の技術を使用することで当業者によって確認可能であろう（例えば、Lieberman, Pharmaceutical Dosage Forms (vols. 1-3, 1992); Lloyd, The Art, Science and Technology of Pharmaceutical Compounding (1999); Pickar, Dosage Calculations (1999); 及び Remington: The Science and Practice of Pharmacy, 20th Edition, 2003, Gennaro, Ed., Lippincott, Williams & Wilkins を参照されたい）。

10

【0083】

本明細書に記載された任意の化合物に関して、治療上有効な量は、細胞培養アッセイから当初は決定することができる。標的濃度は、本明細書に記載されたまたは当業界で公知の方法を使用して測定した、本明細書に記載された方法を達成し得る（単数または複数種類の）活性化化合物の濃度である。

【0084】

20

当業者には公知であるように、ヒトにおける使用で治療上有効な量は、動物モデルからも決定することができる。例えば、ヒト用の用量は、動物で有効であることが知見された濃度を達成するために配合することができる。ヒトでの用量は、上述のように化合物の有効性を監視し、用量を上方または下方に調節することによって調整することができる。上記方法及び他の方法に基づいてヒトでの最大効能を達成するために用量を調節することは、当業者の能力の範囲内である。

【0085】

用量は、患者の要求条件及び使用する化合物に応じて変動し得る。本発明の状況における患者への投与用量は、経時で患者における有効な治療反応を得るのに十分でなければならない。用量サイズも、あらゆる悪い副作用の存在、性質、及び程度により決定することができる。特定の状況に対して正しい用量の決定は、開業医の技能の範囲内である。通常、最適用量の化合物よりも少ない量の用量で治療を始める。その後、その状況下で最適な効果が達成されるまで、用量を僅かに増加させることによって増やしていく。投与量及び間隔は、治療される特定の臨床適応症に有効な投与化合物のレベルを提供するために個々に調整することができる。これにより、個人の疾患状態の重篤度に応じた治療計画を提供する。

30

【0086】

本明細書で使用される場合、「投与すること」という用語は、対象に対する、経口投与、坐薬としての投与、局所接触投与、静脈内投与、腹腔内投与、筋肉内投与、病巣内投与、くも膜下腔内投与、鼻腔内投与、もしくは皮下投与、または例えば、小型浸透圧ポンプといった、徐放装置の埋め込みを意味する。投与は、調製物と適合可能な、非経口及び経粘膜（例えば、頬側、舌下、経口蓋、経歯肉、経鼻、経膈、経直腸、または経皮）を含む、任意の経路によるものである。非経口投与には、例えば、静脈内、筋肉内、細動脈内、皮内、皮下、腹腔内、脳室内、及び頭蓋内へのものが含まれる。他の様式の送達には、限定はされないが、リポソーム製剤、静脈内注入、経皮パッチなどの使用が含まれる。

40

【0087】

「同時投与」は、本明細書に記載の組成物が、1つ以上の追加治療の実施と同時、その直前、またはその直後に投与されることを意味する。本発明の化合物は、患者に対して単独投与または同時投与することができる。同時投与は、個々または組み合わせでの（複数の化合物）、化合物の同時投与または連続投与を含むことが意図される。従って、調製物

50

は、所望の場合（例えば、代謝分解の低減のために）、他の活性物質と組み合わせること
もできる。本発明の組成物は、局所経路によって経皮的に送達することができ、外用ステ
ィック、溶液、懸濁液、乳濁液、ゲル、クリーム、軟膏、ペースト、ゼリー、塗布薬、粉
末、及びエアロゾルとして製剤化することができる。

【0088】

本明細書で使用される場合、「細胞」は、そのゲノムDNAの保存または複製に十分な
代謝または他の機能を行う細胞を指す。細胞は、当該技術分野においてよく知られる方法
によって同定することができ、当該方法には、例えば、未変化膜の存在、特定の色素によ
る染色性、子孫の産生能力、または配偶子の場合は第2の配偶子と組み合わせることで生
存可能な子孫を産生する能力が含まれる。細胞には、原核細胞及び真核細胞が含まれ得る。
原核細胞には、限定はされないが、細菌が含まれる。真核細胞には、限定はされないが、酵
母細胞、並びに植物及び動物由来の細胞が含まれ、例えば、哺乳類、昆虫（例えば、スポ
ドプテラ属）、及びヒトの細胞である。細胞は、それが天然に非接着性であるか、または
例えば、トリプシン処理によって、表面に接着しないように処理すると有用であり得る。

10

【0089】

「対照」または「対照実験」は、そのごく普通の意味に従って使用され、実験の手順、
試薬、または変数が排除されていることのみが異なる平行実験となるように実験の対象ま
たは試薬が処理される実験を指す。いくつかの例では、対照は、実験効果の評価における
比較標準として使用される。いくつかの実施形態では、対照は、本明細書（実施形態及び
実施例を含む）に記載の化合物の非存在下におけるタンパク質の活性の測定である。

20

【0090】

「調節物質」という用語は、標的分子のレベル、または標的分子の機能、またはその分
子の標的の物理的状態を増加または低減する組成物を指す。いくつかの実施形態では、ブ
ルトン型チロシンキナーゼ関連の疾患調節物質は、ブルトン型チロシンキナーゼと関連す
る疾患（例えば、がん、炎症性疾患）の1つ以上の症状の重症度を低減する化合物である
。ブルトン型チロシンキナーゼ調節物質は、ブルトン型チロシンキナーゼの活性もしくは
機能または活性レベルもしくは機能レベルを増加または低減する化合物である。

【0091】

「調節する」という用語は、そのごく普通の意味に従って使用され、1つ以上の特性を
変更または変動させる作用を指す。「調節」は、1つ以上の特性を変更または変動させる
プロセスを指す。例えば、標的タンパク質に対する調節物質の作用に適用される場合、調
節することは、標的分子の特性もしくは機能、または特定分子の量の増加もしくは低減に
よる変更を意味する。

30

【0092】

疾患（例えば、タンパク質関連疾患、ブルトン型チロシンキナーゼ活性と関連するがん
、ブルトン型チロシンキナーゼ関連がん、ブルトン型チロシンキナーゼ関連疾患）と関連
する物質または物質の活性もしくは機能との関連における「関連」または「と関連する」
という用語は、疾患が、その物質またはその物質の活性もしくは機能によって（完全また
は部分的に）引き起こされるか、あるいは疾患の症状が、その物質またはその物質の活性
もしくは機能によって（完全または部分的に）引き起こされることを意味する。例えば、
ブルトン型チロシンキナーゼの活性または機能と関連するがんは、異常なブルトン型チロ
シンキナーゼ機能（例えば、酵素活性、タンパク質-タンパク質相互作用、シグナル伝達
経路）から（完全もしくは部分的に）生じるがんであり得るか、または疾患の特定の症状
が、異常なブルトン型チロシンキナーゼの活性または機能によって（完全もしくは部分的
に）引き起こされるがんであり得る。本明細書で使用される場合、疾患と関連すると記載
されるものが、原因物質であるならば、疾患治療の標的となる可能性がある。例えば、ブ
ルトン型チロシンキナーゼの活性または機能と関連するがん、またはブルトン型チロシン
キナーゼ関連がんは、ブルトン型チロシンキナーゼの活性または機能（例えば、シグナル
伝達経路の活性）の増加ががんを引き起こす場合、ブルトン型チロシンキナーゼ調節物質
またはブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤で治療し得る。例えば、ブルトン型チロシンキ

40

50

ナーゼの活性または機能と関連する炎症性疾患、またはブルトン型チロシンキナーゼ関連炎症性疾患は、ブルトン型チロシンキナーゼの活性または機能（例えば、シグナル伝達経路の活性）の増加が疾患を引き起こす場合、ブルトン型チロシンキナーゼ調節物質またはブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤で治療し得る。

【0093】

本明細書で使用される場合、「異常な」という用語は、正常とは異なることを指す。酵素活性またはタンパク質機能を説明するために使用される場合、異常なは、正常な対照、または疾患を有さない正常な対照試料の平均よりも高いまたは低い活性または機能を指す。異常な活性は、疾患を引き起こす活性量であって、（例えば、化合物の投与、または本明細書に記載の方法の使用によって）その異常な活性が正常、または疾患と関連しない量

10

【0094】

本明細書で使用される場合、「シグナル伝達経路」という用語は、細胞構成成分、及び任意選択で細胞外構成成分（例えば、タンパク質、核酸、小分子、イオン、脂質）の間の一連の相互作用であって、この一連の相互作用によって、1つの構成成分の変化が1つ以上の他の構成成分に伝わり、これによってさらなる構成成分に変化が次々に伝わり得、こうしたものが、任意選択で他のシグナル伝達経路構成成分に伝播する一連の相互作用を指す。例えば、ブルトン型チロシンキナーゼと、本明細書に記載の化合物との結合は、ブルトン型チロシンキナーゼ触媒反応の生成物のレベル、または生成物の下流誘導体のレベルを低下させ得、またはその結合は、ブルトン型チロシンキナーゼ酵素またはブルトン型チロシンキナーゼ反応生成物と下流エフェクターまたはシグナル伝達経路構成成分との間の相互作用を低下させ得、その結果、細胞の成長、増殖、または生存に変化が生じる。

20

【0095】

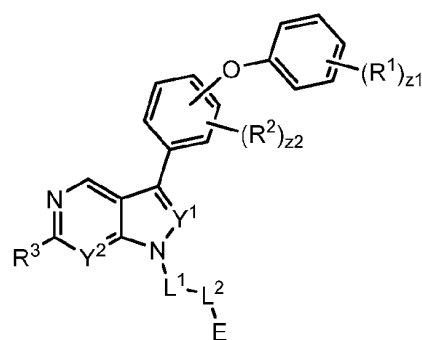
「求電子性化学部分」という用語は、そのごく普通の化学的意味に従って使用され、求電子性である一価の化学基を指す。

【0096】

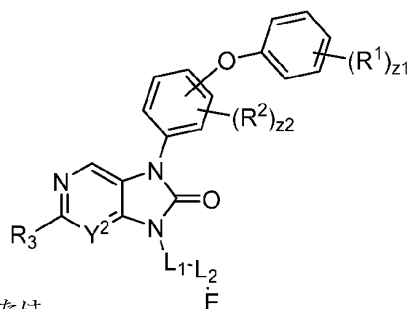
II. 化合物

態様では、式：

【化4】



(I) または



(II) または

(III)

を有する化合物を提供する。

【0097】

R^1 は独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CHX^1_2$ 、 $-CH_2X^1$ 、 $-OCX^1_3$

30

40

50

、 $-\text{OCH}_2\text{X}^1$ 、 $-\text{OCHX}^1_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n1}\text{R}^1\text{D}$ 、 $-\text{SO}_{v1}\text{NR}^1\text{A}\text{R}^1\text{B}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NR}^1\text{A}\text{R}^1\text{B}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m1}$ 、 $-\text{NR}^1\text{A}\text{R}^1\text{B}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^1\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^1\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^1\text{A}\text{R}^1\text{B}$ 、 $-\text{OR}^1\text{D}$ 、 $-\text{NR}^1\text{A}\text{SO}_2\text{R}^1\text{D}$ 、 $-\text{NR}^1\text{A}\text{C}(\text{O})\text{R}^1\text{C}$ 、 $-\text{NR}^1\text{A}\text{C}(\text{O})\text{OR}^1\text{C}$ 、 $-\text{NR}^1\text{A}\text{OR}^1\text{C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。2個の隣接する R^1 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。記号 $z1$ は、0～5の整数である。 R^2 は独立して、ハロゲン、 $-\text{CX}^2_3$ 、 $-\text{CHX}^2_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^2$ 、 $-\text{OCX}^2_3$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^2$ 、 $-\text{OCHX}^2_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n2}\text{R}^2\text{D}$ 、 $-\text{SO}_{v2}\text{NR}^2\text{A}\text{R}^2\text{B}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NR}^2\text{A}\text{R}^2\text{B}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m2}$ 、 $-\text{NR}^2\text{A}\text{R}^2\text{B}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^2\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^2\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^2\text{A}\text{R}^2\text{B}$ 、 $-\text{OR}^2\text{D}$ 、 $-\text{NR}^2\text{A}\text{SO}_2\text{R}^2\text{D}$ 、 $-\text{NR}^2\text{A}\text{C}(\text{O})\text{R}^2\text{C}$ 、 $-\text{NR}^2\text{A}\text{C}(\text{O})\text{OR}^2\text{C}$ 、 $-\text{NR}^2\text{A}\text{OR}^2\text{C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。2個の隣接する R^2 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。記号 $z2$ は、0～4の整数である。 R^3 は、水素または $-\text{NH}_2$ である。記号 Y^1 は、Nまたは $\text{C}(\text{R}^4)$ である。 R^4 は、水素、ハロゲン、 $-\text{CX}^4_3$ 、 $-\text{CHX}^4_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^4$ 、 $-\text{OCX}^4_3$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^4$ 、 $-\text{OCHX}^4_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n4}\text{R}^4\text{D}$ 、 $-\text{SO}_{v4}\text{NR}^4\text{A}\text{R}^4\text{B}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NR}^4\text{A}\text{R}^4\text{B}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m4}$ 、 $-\text{NR}^4\text{A}\text{R}^4\text{B}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^4\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^4\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^4\text{A}\text{R}^4\text{B}$ 、 $-\text{OR}^4\text{D}$ 、 $-\text{NR}^4\text{A}\text{SO}_2\text{R}^4\text{D}$ 、 $-\text{NR}^4\text{A}\text{C}(\text{O})\text{R}^4\text{C}$ 、 $-\text{NR}^4\text{A}\text{C}(\text{O})\text{OR}^4\text{C}$ 、 $-\text{NR}^4\text{A}\text{OR}^4\text{C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。記号 Y^2 は、Nまたは $\text{C}(\text{R}^5)$ である。 R^5 は、水素、ハロゲン、 $-\text{CX}^5_3$ 、 $-\text{CHX}^5_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^5$ 、 $-\text{OCX}^5_3$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^5$ 、 $-\text{OCHX}^5_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n5}\text{R}^5\text{D}$ 、 $-\text{SO}_{v5}\text{NR}^5\text{A}\text{R}^5\text{B}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NR}^5\text{A}\text{R}^5\text{B}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m5}$ 、 $-\text{NR}^5\text{A}\text{R}^5\text{B}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^5\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^5\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^5\text{A}\text{R}^5\text{B}$ 、 $-\text{OR}^5\text{D}$ 、 $-\text{NR}^5\text{A}\text{SO}_2\text{R}^5\text{D}$ 、 $-\text{NR}^5\text{A}\text{C}(\text{O})\text{R}^5\text{C}$ 、 $-\text{NR}^5\text{A}\text{C}(\text{O})\text{OR}^5\text{C}$ 、 $-\text{NR}^5\text{A}\text{OR}^5\text{C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 L^1 は、結合、 $-\text{S}(\text{O})_2-$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2-\text{Ph}-$ 、 $-\text{NR}^6-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{C}(\text{O})-$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^6-$ 、 $-\text{NR}^6\text{C}(\text{O})-$ 、 $-\text{NR}^6\text{C}(\text{O})\text{NH}-$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NR}^6-$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{OC}(\text{O})-$ 、置換もしくは非置換のアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、置換もしくは非置換のシクロアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のアリーレン、または置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。 R^6 は、水素、ハロゲン、 $-\text{CX}^6_3$ 、 $-\text{CHX}^6_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^6$ 、 $-\text{OCX}^6_3$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^6$ 、 $-\text{OCHX}^6_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n6}\text{R}^6\text{D}$ 、 $-\text{SO}_{v6}\text{NR}^6\text{A}\text{R}^6\text{B}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NR}^6\text{A}\text{R}^6\text{B}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m6}$ 、 $-\text{NR}^6\text{A}\text{R}^6\text{B}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^6\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^6\text{C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^6\text{A}\text{R}^6\text{B}$ 、 $-\text{OR}^6\text{D}$ 、 $-\text{NR}^6\text{A}\text{SO}_2\text{R}^6\text{D}$ 、 $-\text{NR}^6\text{A}\text{C}(\text{O})\text{R}^6\text{C}$ 、 $-\text{NR}^6\text{A}\text{C}(\text{O})\text{OR}^6\text{C}$ 、 $-\text{NR}^6\text{A}\text{OR}^6\text{C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシ

10

20

30

40

50

クロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。L²は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NR^7-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NR^7-$ 、 $-NR^7C(O)-$ 、 $-NR^7C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)NR^7-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、置換もしくは非置換のアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、置換もしくは非置換のシクロアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のアリーレン、または置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。R⁷は、水素、ハロゲン、 $-CX^7_3$ 、 $-CHX^7_2$ 、 $-CH_2X^7$ 、 $-OCX^7_3$ 、 $-OCH_2X^7$ 、 $-OCHX^7_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n^7}R^{7D}$ 、 $-SO_{v^7}NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-NHC(O)NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-N(O)_{m^7}$ 、 $-NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-C(O)R^{7C}$ 、 $-C(O)-OR^{7C}$ 、 $-C(O)NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-OR^{7D}$ 、 $-NR^{7A}SO_2R^{7D}$ 、 $-NR^{7A}C(O)R^{7C}$ 、 $-NR^{7A}C(O)OR^{7C}$ 、 $-NR^{7A}OR^{7C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。Eは、求電子部分である。各R^{1A}、R^{1B}、R^{1C}、R^{1D}、R^{2A}、R^{2B}、R^{2C}、R^{2D}、R^{4A}、R^{4B}、R^{4C}、R^{4D}、R^{5A}、R^{5B}、R^{5C}、R^{5D}、R^{6A}、R^{6B}、R^{6C}、R^{6D}、R^{7A}、R^{7B}、R^{7C}、及びR^{7D}は独立して、水素、 $-CX_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX_2$ 、 $-CH_2X$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。同一の窒素原子と結合したR^{1A}及びR^{1B}置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。同一の窒素原子と結合したR^{2A}及びR^{2B}置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。同一の窒素原子と結合したR^{4A}及びR^{4B}置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。同一の窒素原子と結合したR^{5A}及びR^{5B}置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。同一の窒素原子と結合したR^{6A}及びR^{6B}置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。同一の窒素原子と結合したR^{7A}及びR^{7B}置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。各X、X¹、X²、X⁴、X⁵、X⁶、及びX⁷は独立して、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。記号n¹、n²、n⁴、n⁵、n⁶、及びn⁷は独立して、0～4の整数である。記号m¹、m²、m⁴、m⁵、m⁶、m⁷、v¹、v²、v⁴、v⁵、v⁶、及びv⁷は独立して、1～2の整数である。

【0098】

実施形態では、化合物は、式

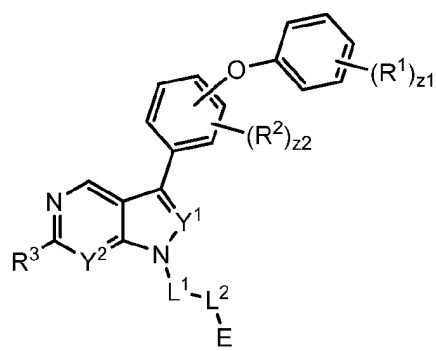
10

20

30

40

【化 5】



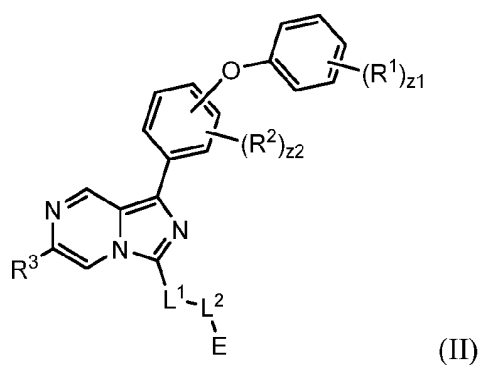
10

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y¹、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0099】

実施形態では、化合物は、式

【化 6】



20

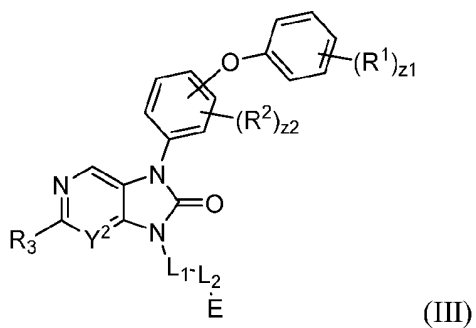
を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0100】

実施形態では、化合物は、式

30

【化 7】



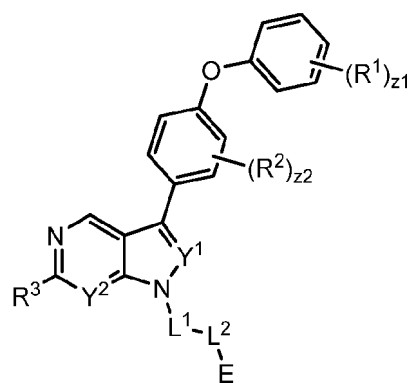
40

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0101】

実施形態では、化合物は、式

【化 8】



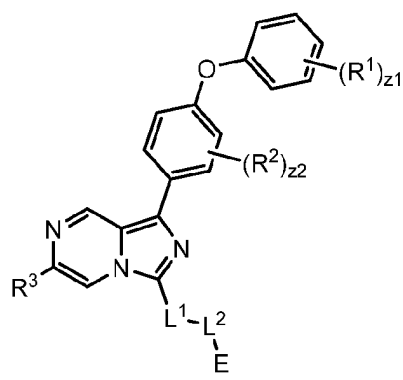
10

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y¹、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0102】

実施形態では、化合物は、式

【化 9】



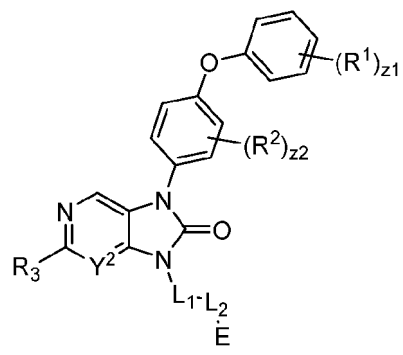
20

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0103】

実施形態では、化合物は、式

【化 10】



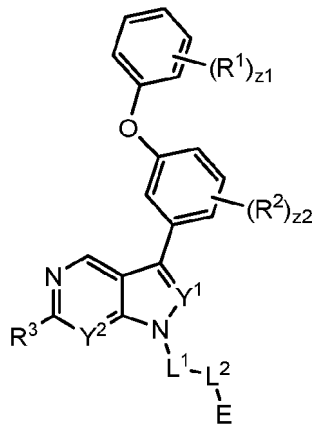
40

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0104】

実施形態では、化合物は、式

【化 1 1】



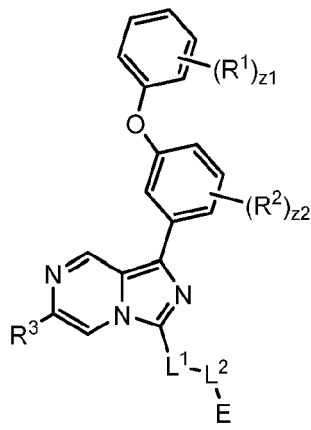
(IB)

を有する。 R^1 、 R^2 、 R^3 、 L^1 、 L^2 、 Y^1 、 Y^2 、 $z1$ 、 $z2$ 、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0105】

実施形態では、化合物は、式

【化 1 2】



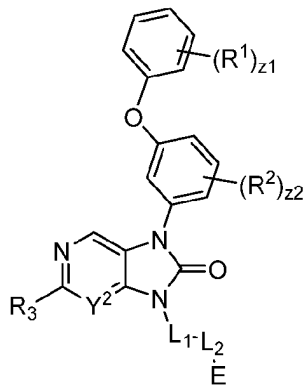
(IIB)

を有する。 R^1 、 R^2 、 R^3 、 L^1 、 L^2 、 $z1$ 、 $z2$ 、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0106】

実施形態では、化合物は、式

【化 1 3】



(IIIB)

を有する。 R^1 、 R^2 、 R^3 、 L^1 、 L^2 、 Y^2 、 $z1$ 、 $z2$ 、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0107】

実施形態では、化合物は、式

10

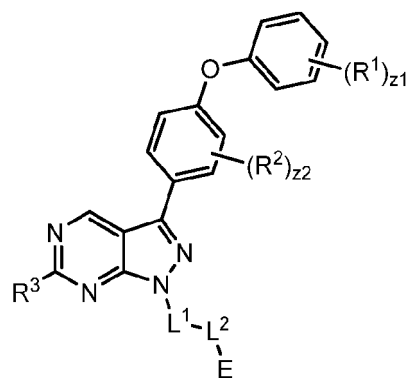
20

30

40

50

【化 1 4】



(IC)

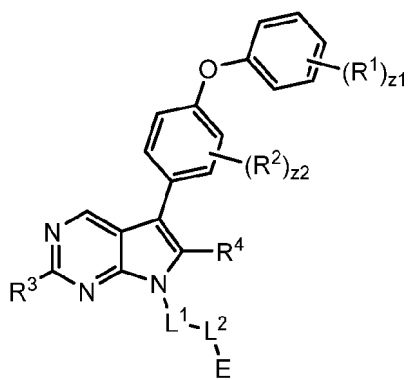
10

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0108】

実施形態では、化合物は、式

【化 1 5】



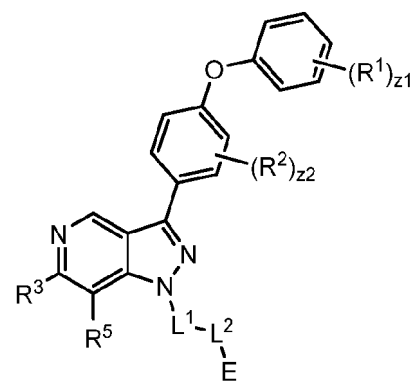
(ID)

を有する。R¹、R²、R³、R⁴、L¹、L²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0109】

実施形態では、化合物は、式

【化 1 6】



(IE)

を有する。R¹、R²、R³、R⁵、L¹、L²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0110】

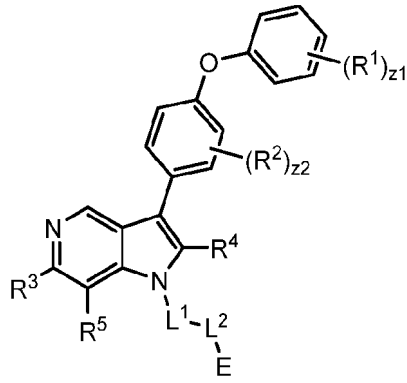
実施形態では、化合物は、式

20

30

40

【化 1 7】



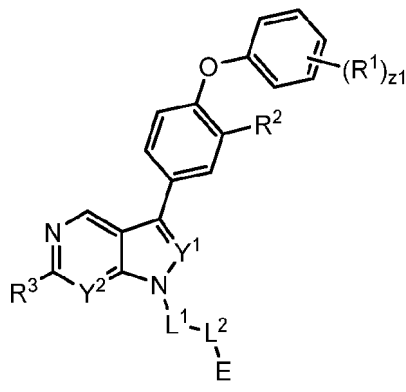
10

を有する。R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、L¹、L²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 1 1 1】

実施形態では、化合物は、式

【化 1 8】



20

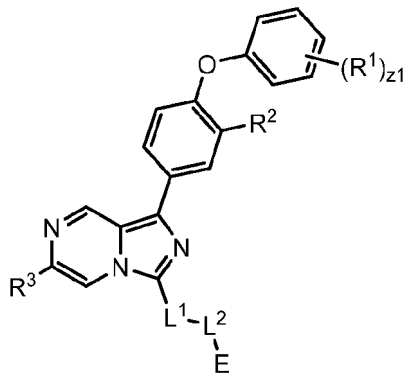
を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y¹、Y²、z₁、及びEは、本明細書に記載される通りである。

30

【0 1 1 2】

実施形態では、化合物は、式

【化 1 9】



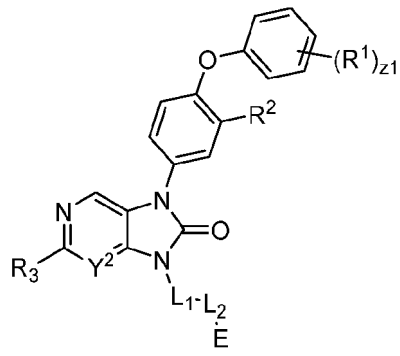
40

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、z₁、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 1 1 3】

実施形態では、化合物は、式

【化 2 0】



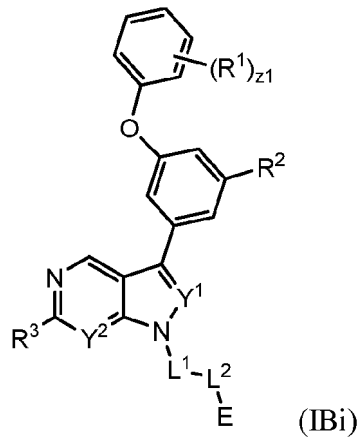
10

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y²、z 1、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 1 1 4】

実施形態では、化合物は、式

【化 2 1】



20

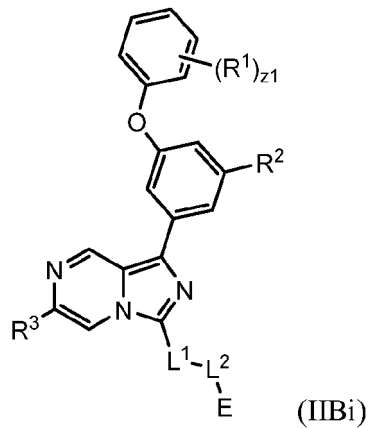
を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y¹、Y²、z 1、及び E は、本明細書に記載される通りである。

30

【0 1 1 5】

実施形態では、化合物は、式

【化 2 2】



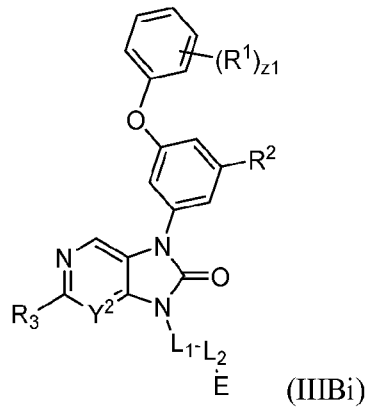
40

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、z 1、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 1 1 6】

実施形態では、化合物は、式

【化 2 3】



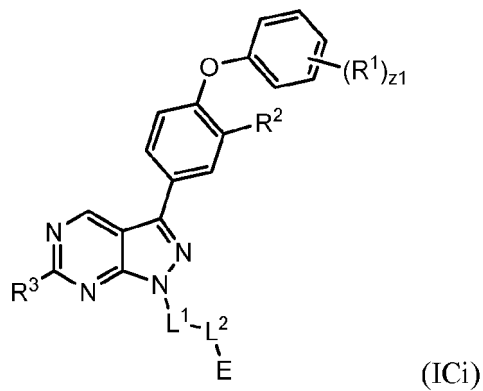
10

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y²、z 1、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 1 1 7】

実施形態では、化合物は、式

【化 2 4】



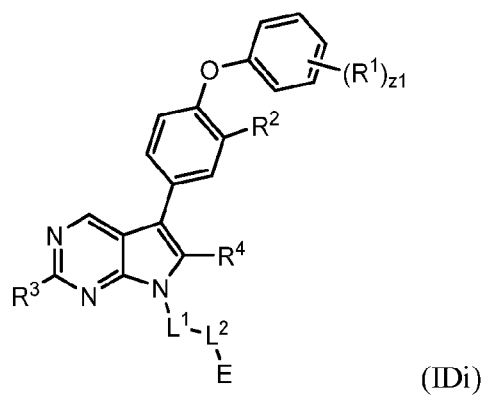
20

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、z 1、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 1 1 8】

実施形態では、化合物は、式

【化 2 5】



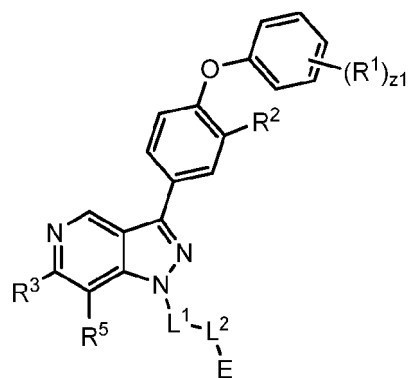
40

を有する。R¹、R²、R³、R⁴、L¹、L²、z 1、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 1 1 9】

実施形態では、化合物は、式

【化 2 6】



(IEi)

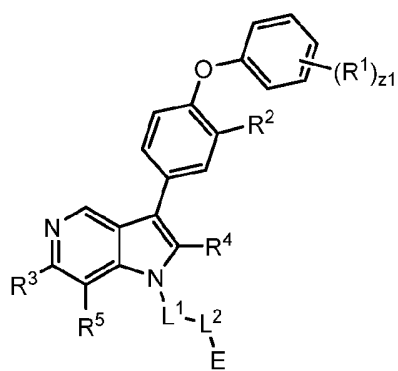
10

を有する。R¹、R²、R³、R⁵、L¹、L²、z 1、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 1 2 0】

実施形態では、化合物は、式

【化 2 7】



(IFi)

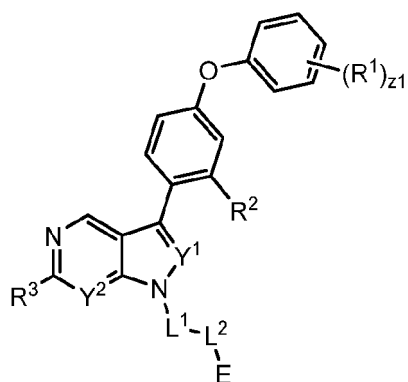
20

を有する。R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、L¹、L²、z 1、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 1 2 1】

実施形態では、化合物は、式

【化 2 8】



(IAii)

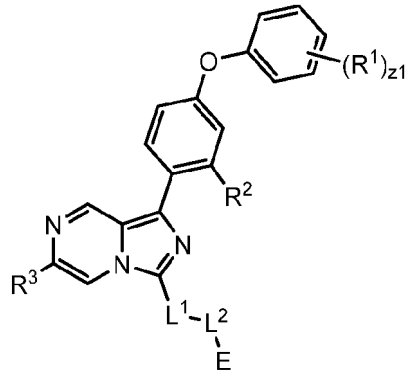
40

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y¹、Y²、z 1、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 1 2 2】

実施形態では、化合物は、式

【化 2 9】



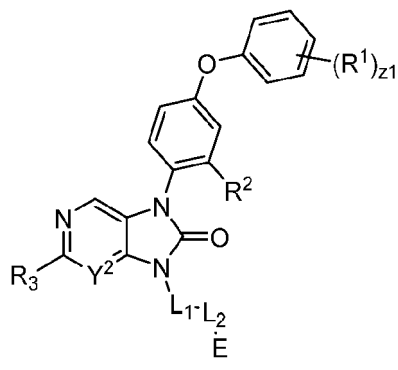
10

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、z¹、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0123】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 0】



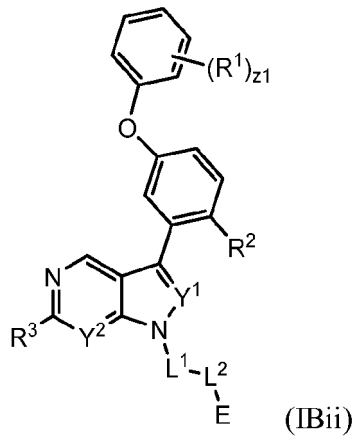
20

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y¹、z¹、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0124】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 1】



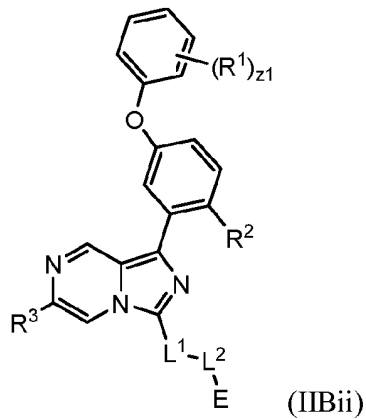
40

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y¹、Y²、z¹、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0125】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 2】



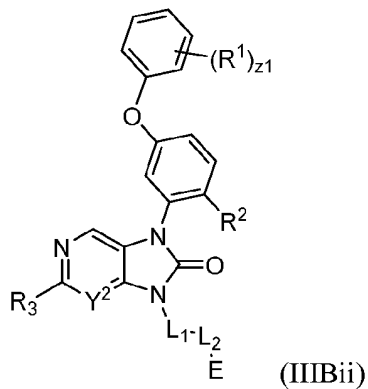
10

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、z¹、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0126】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 3】



20

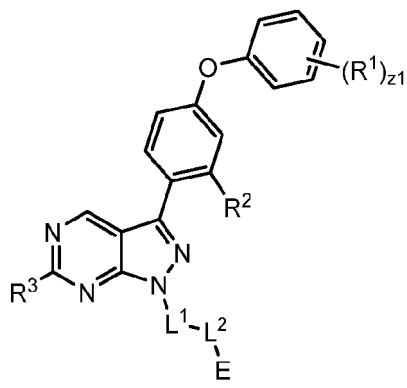
を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y²、z¹、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0127】

30

実施形態では、化合物は、式

【化 3 4】



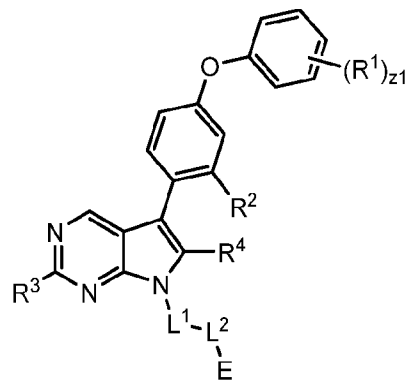
40

を有する。R¹、R²、R³、L¹、L²、z¹、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0128】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 5】



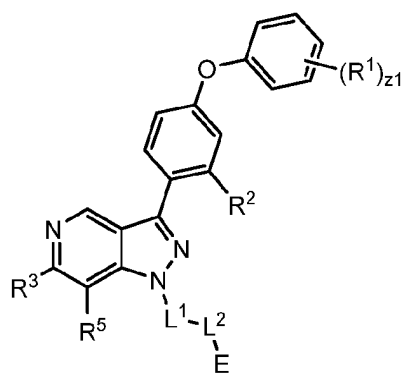
10

を有する。R¹、R²、R³、R⁴、L¹、L²、z 1、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0129】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 6】



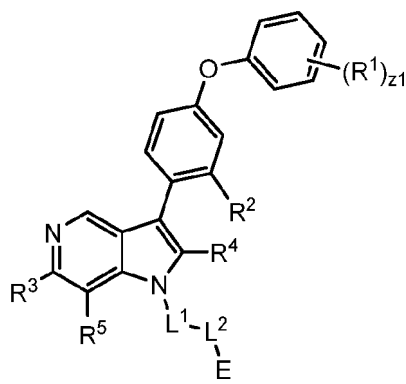
20

を有する。R¹、R²、R³、R⁵、L¹、L²、z 1、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0130】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 7】



40

を有する。R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、L¹、L²、z 1、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0131】

実施形態では、R¹ は独立して、ハロゲン、-CX¹₃、-CN、-OH、-NH₂、-COOH、-CONH₂、-NO₂、-SH、-OCX¹₃、-OCHX¹₂、-CHX¹₂、-CH₂X¹、置換もしくは非置換の C₁-C₈ アルキル、または置換もしくは非置換の 2～8 員ヘテロアルキルであり；2 個の隣接する R¹ 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換の C₃-C₈ シクロアルキル、置換もしくは非置換の 3～8

50

員ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のフェニル、または置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリアルを形成し得る。実施形態では、 R^1 は独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CN$ 、非置換の C_1-C_4 アルキル、または非置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^1 は独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CN$ 、非置換のメチル、非置換のエチル、非置換のメトキシ、または非置換のエトキシである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換のエチルである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換の n -プロピルである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換のブチルである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換の n -ブチルである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換のイソブチルである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換のtert-ブチルである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換のペンチルである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換のヘキシルである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換のヘプチルである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換のオクチルである。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-F$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-Cl$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-Br$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-I$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換のメトキシである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換のエトキシである。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-CF_3$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、ハロゲンである。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-CCl_3$ である。

【0132】

実施形態では、 R^1 は独立して、 $-CX^1_3$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-CHX^1_2$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-CH_2X^1$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-OCX^1_3$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-OCH_2X^1$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-OCHX^1_2$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-CN$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-SO_{n-1}R^{1D}$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-SO_{v-1}NR^{1A}R^{1B}$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-NHC(O)NR^{1A}R^{1B}$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-N(O)_{m-1}$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-NR^{1A}R^{1B}$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-C(O)R^{1C}$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-C(O)-OR^{1C}$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-C(O)NR^{1A}R^{1B}$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-OR^{1D}$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-NR^{1A}SO_2R^{1D}$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-NR^{1A}C(O)R^{1C}$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-NR^{1A}C(O)OR^{1C}$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-NR^{1A}OR^{1C}$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-OH$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-NH_2$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-NO_2$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、 $-SH$ である。

【0133】

実施形態では、 R^1 は独立して、置換もしくは非置換のアルキルである。実施形態では、 R^1 は独立して、置換もしくは非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^1 は独立して、置換もしくは非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^1 は独立して、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^1 は独立して、置換もしくは非置換のアリアルである。実施形態では、 R^1 は独立して、置換もしくは非置換のヘテロアリアルである。実施形態では、 R^1 は独立して、置換アルキルである。実施形態では、 R^1 は独立して、置換ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^1 は独立して、置換シクロアルキルである。実施形態では、 R^1 は独立して、置換ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^1 は独立して、置換アリアルである。実施形態では、 R^1 は独立して、置換ヘテロアリアルである。実施形態では、 R^1 は独立して、非置換のアル

10

20

30

40

50

30

50

30

50

40

50

50

[illegible]

実施形態では、 R^{1C} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{1C} は独立して、 CX^{1C}_3 である。実施形態では、 R^{1C} は独立して、 $-CHX^{1C}_2$ である。実施形態では、 R^{1C} は独立して、 $-CH_2X^{1C}$ である。実施形態では、 R^{1C} は独立して、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{1C} は独立して、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{1C} は独立して、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{1C} は独立して、置換もしくは非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、置換もしくは非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、置換もしくは非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、置換もしくは非置換のアリールである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、置換アルキルである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、置換ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、置換シクロアルキルである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、置換ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、置換アリールである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、置換ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、非置換のアリールである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキルである。実施形態では、 R^{1C} は独立して、置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{1C}

30

40

50

リールである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換のアリールである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換もしくは非置換の C_6-C_{10} アリールである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換もしくは非置換の5～10員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換の C_1-C_8 アルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換の2～8員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換の C_3-C_8 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換の3～8員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換の C_6-C_{10} アリールである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換の5～10員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換の C_1-C_8 アルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換の2～8員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換の C_3-C_8 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換の3～8員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換の C_6-C_{10} アリールである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換の5～10員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換もしくは非置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換もしくは非置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換もしくは非置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換もしくは非置換のフェニルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換フェニルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換のフェニルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{1D} は独立して、非置換のtert-ブチルである。

【0140】

実施形態では、 R^1 は独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CHX^1_2$ 、 $-CH_2X^1$ 、 $-OCX^1_3$ 、 $-OCH_2X^1$ 、 $-OCHX^1_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n1}R^{1D}$ 、 $-SO_{v1}NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-NHC(O)NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-N(O)_{m1}$ 、 $-NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-C(O)R^{1C}$ 、 $-C(O)OR^{1C}$ 、 $-C(O)NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-OR^{1D}$ 、 $-NR^{1A}SO_2R^{1D}$ 、 $-NR^{1A}C(O)R^{1C}$ 、 $-NR^{1A}C(O)OR^{1C}$ 、 $-NR^{1A}OR^{1C}$ 、 R^{20} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{20} —置換もし

くは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{20} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^1 は独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^1_3$ 、 $-OCHX^1_2$ 、 R^{20} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{20} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^1 は独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^1_3$ 、 $-OCHX^1_2$ 、 R^{20} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{20} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^1 は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^1 は独立して、水素である。実施形態では、 R^1 は独立して、メチルである。実施形態では、 R^1 は独立して、エチルである。実施形態では、 R^1 は、 CX_3 である。実施形態では、 R^1 は、 CHX_2 である。実施形態では、 R^1 は、 CHF_2 である。実施形態では、 R^1 は、 CH_2F である。

【0141】

実施形態では、2個の隣接する R^1 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{20} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{20} —置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、2個の隣接する R^1 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{20} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{20} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{20} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

【0142】

R^{20} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{20}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{20}_3$ 、 $-OCHX^{20}_2$ 、 R^{21} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{21} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{21} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{21} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{21} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{21} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{20} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{20}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{20}_3$ 、 $-OCHX^{20}_2$ 、 R^{21} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{21} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{21} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{21} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{21} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{21} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{20} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0143】

10

20

30

40

50

R^{21} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{21}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{21}_3$ 、 $-OCHX^{21}_2$ 、 R^{22} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{22} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{22} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{22} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{22} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{22} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{21} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{21}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{21}_3$ 、 $-OCHX^{21}_2$ 、 R^{22} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{22} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{22} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{22} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{22} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{22} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{21} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

10

【0144】

実施形態では、 R^{1A} は独立して、水素、 $-CX^{1A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{1A}_2$ 、 $-CH_2X^{1A}$ 、 R^{20A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{20A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{20A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{20A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{20A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{20A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{1A} は独立して、水素、 $-CX^{1A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{1A}_2$ 、 $-CH_2X^{1A}$ 、 R^{20A} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{20A} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{20A} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{20A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{20A} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{20A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{1A} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{1A} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{1A} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{1A} は独立して、エチルである。

20

30

【0145】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{1A} 及び R^{1B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{20A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または R^{20A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{1A} 及び R^{1B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{20A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、または R^{20A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

【0146】

R^{20A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{20A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{20A}_3$ 、 $-OCHX^{20A}_2$ 、 R^{21A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{21A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{21A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{21A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{21A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{21A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{20A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{20A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{20A}_3$ 、 $-OCHX^{20A}_2$ 、 R^{21A} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{21A} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{21A} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{21A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{21A} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{21A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{20A} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{20A} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{20A} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{20A} は独立して、エチルである。

40

50

$\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{20\text{A}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{20\text{A}}_2$ 、 $\text{R}^{21\text{A}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{21\text{A}}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{21\text{A}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{21\text{A}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{21\text{A}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{21\text{A}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{20\text{A}}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0147】

$\text{R}^{21\text{A}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{21\text{A}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{21\text{A}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{21\text{A}}_2$ 、 $\text{R}^{22\text{A}}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{22\text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{22\text{A}}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $\text{R}^{22\text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{22\text{A}}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{22\text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{21\text{A}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{21\text{A}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{21\text{A}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{21\text{A}}_2$ 、 $\text{R}^{22\text{A}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{22\text{A}}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{22\text{A}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{22\text{A}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{22\text{A}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{22\text{A}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{21\text{A}}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0148】

実施形態では、 $\text{R}^{1\text{B}}$ は独立して、水素、 $-\text{CX}^{1\text{B}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CHX}^{1\text{B}}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{1\text{B}}$ 、 $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{1\text{B}}$ は独立して、水素、 $-\text{CX}^{1\text{B}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CHX}^{1\text{B}}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{1\text{B}}$ 、 $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{1\text{B}}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。実施形態では、 $\text{R}^{1\text{B}}$ は独立して、水素である。実施形態では、 $\text{R}^{1\text{B}}$ は独立して、メチルである。実施形態では、 $\text{R}^{1\text{B}}$ は独立して、エチルである。

【0149】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した $\text{R}^{1\text{A}}$ 及び $\text{R}^{1\text{B}}$ 置換基は、任意選択で連結されて、 $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した $\text{R}^{1\text{A}}$ 及び $\text{R}^{1\text{B}}$ 置換基は、任意選択で連結されて、 $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、または $\text{R}^{20\text{B}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

【0150】

$\text{R}^{20\text{B}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{20\text{B}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{20\text{B}}_3$

10

20

30

50

10

20

30

50

$R^{2\ 0\ D}$ 、 $-OCHX^{2\ 0\ D}_2$ 、 $R^{2\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{2\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{2\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{2\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{2\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{2\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{2\ 0\ D}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{2\ 0\ D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{2\ 0\ D}_3$ 、 $-OCHX^{2\ 0\ D}_2$ 、 $R^{2\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{2\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{2\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{2\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{2\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{2\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{2\ 0\ D}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0157】

$R^{2\ 1\ D}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{2\ 1\ D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{2\ 1\ D}_3$ 、 $-OCHX^{2\ 1\ D}_2$ 、 $R^{2\ 2\ D}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{2\ 2\ D}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{2\ 2\ D}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{2\ 2\ D}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{2\ 2\ D}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{2\ 2\ D}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{2\ 1\ D}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{2\ 1\ D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{2\ 1\ D}_3$ 、 $-OCHX^{2\ 1\ D}_2$ 、 $R^{2\ 2\ D}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{2\ 2\ D}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{2\ 2\ D}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{2\ 2\ D}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{2\ 2\ D}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{2\ 2\ D}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{2\ 1\ D}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0158】

$R^{2\ 2}$ 、 $R^{2\ 2\ A}$ 、 $R^{2\ 2\ B}$ 、 $R^{2\ 2\ C}$ 、及び $R^{2\ 2\ D}$ は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CCl_3$ 、 $-CBr_3$ 、 $-CF_3$ 、 $-CI_3$ 、 CN 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCCl_3$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCBr_3$ 、 $-OCI_3$ 、 $OCHCl_2$ 、 $-OCHBr_2$ 、 $-OCHI_2$ 、 $-OCHF_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{2\ 2}$ 、 $R^{2\ 2\ A}$ 、 $R^{2\ 2\ B}$ 、 $R^{2\ 2\ C}$ 、及び $R^{2\ 2\ D}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CF_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{2\ 2}$ 、 $R^{2\ 2\ A}$ 、 $R^{2\ 2\ B}$ 、 $R^{2\ 2\ C}$ 、及び $R^{2\ 2\ D}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CF_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH$

HC(O)NH₂、-NH₂SO₂H、-NHC(O)H、-NHC(O)OH、-NHOH、-OCF₃、-OCHF₂、非置換のC₁-C₈アルキル、非置換の2～8員ヘテロアルキル、非置換のC₃-C₈シクロアルキル、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、非置換のフェニル、または非置換の5～6員ヘテロアリールである。

【0159】

実施形態では、R¹は独立して、ハロゲンである。実施形態では、R¹は独立して、水素である。実施形態では、z₁は、2、及びR¹は独立して、水素またはハロゲンである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、水素であり、1個のR¹は、ハロゲンである。

【0160】

実施形態では、R¹は独立して、メチルである。実施形態では、R¹は独立して、C₁-C₄アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、ハロゲンであり、1個のR¹は、非置換のC₁-C₄アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、ハロゲンであり、1個のR¹は、非置換のC₁-C₃アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、ハロゲンであり、1個のR¹は、非置換のC₁-C₂アルキルである。実施形態では、R¹は独立して、ハロゲンまたは非置換のC₁-C₃アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、ハロゲンであり、1個のR¹は、メチルである。

【0161】

実施形態では、R¹は独立して、置換もしくは非置換のメチルである。実施形態では、R¹は独立して、置換もしくは非置換のC₁-C₄アルキルである。実施形態では、R¹は独立して、ハロゲン、または置換もしくは非置換のC₁-C₄アルキルである。実施形態では、R¹は独立して、ハロゲン、または置換もしくは非置換のC₁-C₃アルキルである。実施形態では、R¹は独立して、ハロゲン、または置換もしくは非置換のC₁-C₂アルキルである。実施形態では、R¹は独立して、ハロゲン、または置換もしくは非置換のメチルである。実施形態では、R¹は独立して、置換メチルである。実施形態では、R¹は独立して、置換のC₁-C₄アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、ハロゲンであり、1個のR¹は、置換のC₁-C₄アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、ハロゲンであり、1個のR¹は、置換のC₁-C₃アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、ハロゲンであり、1個のR¹は、置換のC₁-C₂アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、ハロゲンであり、1個のR¹は、置換メチルである。実施形態では、R¹は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、ハロゲンであり、1個のR¹は、非置換のC₁-C₄アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、ハロゲンであり、1個のR¹は、非置換のC₁-C₃アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、ハロゲンであり、1個のR¹は、非置換のC₁-C₂アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、ハロゲンであり、1個のR¹は、非置換のメチルである。

【0162】

実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、置換もしくは非置換のC₁-C₄アルキルであり、1個のR¹は、置換もしくは非置換のC₃アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、置換もしくは非置換のC₁-C₃アルキルであり、1個のR¹は、置換もしくは非置換のC₃アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、置換もしくは非置換のC₁-C₂アルキルであり、1個のR¹は、置換もしくは非置換のC₃アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、置換もしくは非置換のメチルであり、1個のR¹は、置換もしくは非置換のC₃アルキルである。実施形態では、z₁は、2であり、1個のR¹は独立して、置換もしくは非置換のメチルであり、1個のR¹は、置換もしくは非置換のイソプロピルである。

10

20

30

40

50

【0163】

実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、非置換の C_1-C_4 アルキルであり、1個の R^1 は、非置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、非置換の C_1-C_3 アルキルであり、1個の R^1 は、非置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、非置換の C_1-C_2 アルキルであり、1個の R^1 は、非置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、非置換のメチルであり、1個の R^1 は、非置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、非置換のメチルであり、1個の R^1 は、非置換のイソプロピルである。

【0164】

10

実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、置換の C_1-C_4 アルキルであり、1個の R^1 は、置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、置換の C_1-C_3 アルキルであり、1個の R^1 は、置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、置換の C_1-C_2 アルキルであり、1個の R^1 は、置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、置換メチルであり、1個の R^1 は、置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、置換メチルであり、1個の R^1 は、置換イソプロピルである。

【0165】

20

実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、置換の C_1-C_4 アルキルであり、1個の R^1 は、非置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、置換の C_1-C_3 アルキルであり、1個の R^1 は、非置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、置換の C_1-C_2 アルキルであり、1個の R^1 は、非置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、置換メチルであり、1個の R^1 は、非置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、置換メチルであり、1個の R^1 は、非置換のイソプロピルである。

【0166】

30

実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、非置換の C_1-C_4 アルキルであり、1個の R^1 は、置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、非置換の C_1-C_3 アルキルであり、1個の R^1 は、置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、非置換の C_1-C_2 アルキルであり、1個の R^1 は、置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、非置換のメチルであり、1個の R^1 は、置換の C_3 アルキルである。実施形態では、 z_1 は、2であり、1個の R^1 は独立して、非置換のメチルであり、1個の R^1 は、置換イソプロピルである。

【0167】

40

実施形態では、 z_1 は、0である。実施形態では、 z_1 は、1である。実施形態では、 z_1 は、2である。実施形態では、 z_1 は、3である。実施形態では、 z_1 は、4である。実施形態では、 z_1 は、5である。

【0168】

実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-OCX^2_3$ 、 $-OCHX^2_2$ 、 $-CHX^2_2$ 、 $-CH_2X^2$ 、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、または置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキルであり；2個の隣接する R^2 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のフェニル、または置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリアルを形成し得る。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CN$ 、非置換の C_1-C_4 アルキル、または非置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CN$ 、非置換のメチ

50

ル、非置換のエチル、非置換のメトキシ、または非置換のエトキシである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のエチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換の*n*-プロピルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のブチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換の*n*-ブチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のイソブチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換の*tert*-ブチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のペンチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のヘキシルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のヘプチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のオクチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-F$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-Cl$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-Br$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-I$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のメトキシである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のエトキシである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲンである。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-CF_3$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-CCl_3$ である。

10

【0169】

実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-CHX^2_2$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-CH_2X^2$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-OCX^2_3$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-OCH_2X^2$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-OCHX^2_2$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-CN$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-SO_{n_2}R^{2D}$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-SO_{v_2}NR^{2A}R^{2B}$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-NHC(O)NR^{2A}R^{2B}$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-N(O)_{m_2}$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-NR^{2A}R^{2B}$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-C(O)R^{2C}$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-C(O)-OR^{2C}$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-C(O)NR^{2A}R^{2B}$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-OR^{2D}$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-NR^{2A}SO_2R^{2D}$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-NR^{2A}C(O)R^{2C}$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-NR^{2A}C(O)OR^{2C}$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-NR^{2A}OR^{2C}$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-OH$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-NH_2$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-NO_2$ である。実施形態では、 R^2 は独立して、 $-SH$ である。

20

30

【0170】

実施形態では、 R^2 は独立して、置換もしくは非置換のアルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換もしくは非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換もしくは非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換もしくは非置換のアリールである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換シクロアルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換アリールである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換ヘテロアリールである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のアルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のアリールである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のヘテロアリールである。実施形態

40

50

30

40

50

30

40

50

30

40

50

40

50

20

30

40

50

30

50

施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換もしくは非置換の C_6-C_{10} アリールである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換もしくは非置換の5～10員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換の C_1-C_8 アルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換の2～8員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換の C_3-C_8 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換の3～8員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換の C_6-C_{10} アリールである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換の5～10員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換の C_1-C_8 アルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換の2～8員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換の C_3-C_8 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換の3～8員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換の C_6-C_{10} アリールである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換の5～10員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換もしくは非置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換もしくは非置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換もしくは非置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換もしくは非置換のフェニルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換フェニルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換のフェニルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{2D} は独立して、非置換のtert-ブチルである。

【0177】

実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CHX^2_2$ 、 $-CH_2X^2$ 、 $-OCX^2_3$ 、 $-OCH_2X^2$ 、 $-OCHX^2_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_nR^{2D}$ 、 $-SO_vNR^{2A}R^{2B}$ 、 $-NHC(O)NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-N(O)_m$ 、 $-NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-C(O)R^{2C}$ 、 $-C(O)OR^{2C}$ 、 $-C(O)NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-OR^{2D}$ 、 $-NR^{2A}SO_2R^{2D}$ 、 $-NR^{2A}C(O)R^{2C}$ 、 $-NR^{2A}C(O)OR^{2C}$ 、 $-NR^{2A}OR^{2C}$ 、 R^{23} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{23} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{23} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{23} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{23} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{23} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-N$

HC(O)NHNH₂、-NHC(O)NH₂、-NH₂SO₂H、-NHC(O)H、-NHC(O)OH、-NHOH、-OCX²₃、-OCHX²₂、R²₃-置換もしくは非置換のアルキル、R²₃-置換もしくは非置換のヘテロアルキル、R²₃-置換もしくは非置換のシクロアルキル、R²₃-置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、R²₃-置換もしくは非置換のアリール、またはR²₃-置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、R²は独立して、ハロゲン、-CX²₃、-CN、-OH、-NH₂、-COOH、-CONH₂、-NO₂、-SH、-SO₃H、-SO₄H、-SO₂NH₂、-NHNH₂、-ONH₂、-NHC(O)NHNH₂、-NHC(O)NH₂、-NH₂SO₂H、-NHC(O)H、-NHC(O)OH、-NHOH、-OCX²₃、-OCHX²₂、R²₃-置換もしくは非置換のC₁-C₈アルキル、R²₃-置換もしくは非置換の2~8員ヘテロアルキル、R²₃-置換もしくは非置換のC₃-C₈シクロアルキル、R²₃-置換もしくは非置換の3~6員ヘテロシクロアルキル、R²₃-置換もしくは非置換のフェニル、またはR²₃-置換もしくは非置換の5~6員ヘテロアリールである。X²は、-F、-Cl、-Br、または-Iである。実施形態では、R²は独立して、水素である。実施形態では、R²は独立して、メチルである。実施形態では、R²は独立して、エチルである。

10

【0178】

実施形態では、2個の隣接するR²置換基は、任意選択で連結されて、R²₃-置換もしくは非置換のシクロアルキル、R²₃-置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、R²₃-置換もしくは非置換のアリール、またはR²₃-置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、2個の隣接するR²置換基は、任意選択で連結されて、R²₃-置換もしくは非置換のC₃-C₈シクロアルキル、R²₃-置換もしくは非置換の3~6員ヘテロシクロアルキル、R²₃-置換もしくは非置換のフェニル、またはR²₃-置換もしくは非置換の5~6員ヘテロアリールを形成し得る。

20

【0179】

R²₃は独立して、オキソ、ハロゲン、-CX²₃、-CN、-OH、-NH₂、-COOH、-CONH₂、-NO₂、-SH、-SO₃H、-SO₄H、-SO₂NH₂、-NHNH₂、-ONH₂、-NHC(O)NHNH₂、-NHC(O)NH₂、-NH₂SO₂H、-NHC(O)H、-NHC(O)OH、-NHOH、-OCX²₃、-OCHX²₂、R²₄-置換もしくは非置換のアルキル、R²₄-置換もしくは非置換のヘテロアルキル、R²₄-置換もしくは非置換のシクロアルキル、R²₄-置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、R²₄-置換もしくは非置換のアリール、またはR²₄-置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、R²₃は独立して、オキソ、ハロゲン、-CX²₃、-CN、-OH、-NH₂、-COOH、-CONH₂、-NO₂、-SH、-SO₃H、-SO₄H、-SO₂NH₂、-NHNH₂、-ONH₂、-NHC(O)NHNH₂、-NHC(O)NH₂、-NH₂SO₂H、-NHC(O)H、-NHC(O)OH、-NHOH、-OCX²₃、-OCHX²₂、R²₄-置換もしくは非置換のC₁-C₈アルキル、R²₄-置換もしくは非置換の2~8員ヘテロアルキル、R²₄-置換もしくは非置換のC₃-C₈シクロアルキル、R²₄-置換もしくは非置換の3~6員ヘテロシクロアルキル、R²₄-置換もしくは非置換のフェニル、またはR²₄-置換もしくは非置換の5~6員ヘテロアリールである。X²₃は、-F、-Cl、-Br、または-Iである。

30

40

【0180】

R²₄は独立して、オキソ、ハロゲン、-CX²₄、-CN、-OH、-NH₂、-COOH、-CONH₂、-NO₂、-SH、-SO₃H、-SO₄H、-SO₂NH₂、-NHNH₂、-ONH₂、-NHC(O)NHNH₂、-NHC(O)NH₂、-NH₂SO₂H、-NHC(O)H、-NHC(O)OH、-NHOH、-OCX²₄、-OCHX²₂、R²₅-置換もしくは非置換のアルキル、R²₅-置換もしくは非置換のヘテロアルキル、R²₅-置換もしくは非置換のシクロアルキル、R²₅-置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、R²₅-置換もしくは非置換のアリール、またはR²

50

⁵ -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{2\ 4}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{2\ 4}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{2\ 4}_3$ 、 $-OCHX^{2\ 4}_2$ 、 $R^{2\ 5}$ -置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{2\ 5}$ -置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{2\ 5}$ -置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{2\ 5}$ -置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{2\ 5}$ -置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{2\ 5}$ -置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{2\ 4}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

10

【0181】

実施形態では、 $R^{2\ A}$ は独立して、水素、 $-CX^{2\ A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{2\ A}_2$ 、 $-CH_2X^{2\ A}$ 、 $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換のアリール、または $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{2\ A}$ は独立して、水素、 $-CX^{2\ A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{2\ A}_2$ 、 $-CH_2X^{2\ A}$ 、 $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{2\ A}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 $R^{2\ A}$ は独立して、水素である。実施形態では、 $R^{2\ A}$ は独立して、メチルである。実施形態では、 $R^{2\ A}$ は独立して、エチルである。

20

【0182】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した $R^{2\ A}$ 及び $R^{2\ B}$ 置換基は、任意選択で連結されて、 $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した $R^{2\ A}$ 及び $R^{2\ B}$ 置換基は、任意選択で連結されて、 $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、または $R^{2\ 3\ A}$ -置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

30

【0183】

$R^{2\ 3\ A}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{2\ 3\ A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{2\ 3\ A}_3$ 、 $-OCHX^{2\ 3\ A}_2$ 、 $R^{2\ 4\ A}$ -置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{2\ 4\ A}$ -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{2\ 4\ A}$ -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{2\ 4\ A}$ -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{2\ 4\ A}$ -置換もしくは非置換のアリール、または $R^{2\ 4\ A}$ -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{2\ 3\ A}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{2\ 3\ A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{2\ 3\ A}_3$ 、 $-OCHX^{2\ 3\ A}_2$ 、 $R^{2\ 4\ A}$ -置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{2\ 4\ A}$ -置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{2\ 4\ A}$ -置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{2\ 4\ A}$ -置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{2\ 4\ A}$ -置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{2\ 4\ A}$ -置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{2\ 3\ A}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

40

【0184】

50

R^{24A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{24A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{24A}_3$ 、 $-OCHX^{24A}_2$ 、 R^{25A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{25A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{25A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{25A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{25A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{25A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{24A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{24A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{24A}_3$ 、 $-OCHX^{24A}_2$ 、 R^{25A} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{25A} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{25A} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{25A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{25A} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{25A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{24A} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

10

【0185】

実施形態では、 R^{2B} は独立して、水素、 $-CX^{2B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{2B}_2$ 、 $-CH_2X^{2B}$ 、 R^{23B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{23B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{23B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{23B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{23B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{23B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{2B} は独立して、水素、 $-CX^{2B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{2B}_2$ 、 $-CH_2X^{2B}$ 、 R^{23B} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{23B} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{23B} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{23B} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{23B} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{23B} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{2B} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{2B} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{2B} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{2B} は独立して、エチルである。

20

30

【0186】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{2A} 及び R^{2B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{23B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または R^{23B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{2A} 及び R^{2B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{23B} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、または R^{23B} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

【0187】

R^{23B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{23B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{23B}_3$ 、 $-OCHX^{23B}_2$ 、 R^{24B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{24B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{24B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{24B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{24B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{24B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{23B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{23B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、

40

50

【 0 1 8 8 】

10

【 0 1 8 9 】

20

30

【 0 1 9 0 】

40

50

【 0 1 9 1 】

10

【 0 1 9 2 】

30

【 0 1 9 3 】

40

50

$\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{2\ 3\ \text{D}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{2\ 3\ \text{D}}_2$ 、 $\text{R}^{2\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{2\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{2\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{2\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{2\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{2\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{2\ 3\ \text{D}}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0194】

$\text{R}^{2\ 4\ \text{D}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{2\ 4\ \text{D}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{2\ 4\ \text{D}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{2\ 4\ \text{D}}_2$ 、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{2\ 4\ \text{D}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{2\ 4\ \text{D}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{2\ 4\ \text{D}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{2\ 4\ \text{D}}_2$ 、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{2\ 4\ \text{D}}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0195】

$\text{R}^{2\ 5}$ 、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{A}}$ 、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{B}}$ 、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{C}}$ 、及び $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CCl}_3$ 、 $-\text{CBr}_3$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CI}_3$ 、 CN 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCCl}_3$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCBr}_3$ 、 $-\text{OCI}_3$ 、 OCHCl_2 、 $-\text{OCHBr}_2$ 、 $-\text{OCHI}_2$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{2\ 5}$ 、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{A}}$ 、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{B}}$ 、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{C}}$ 、及び $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{2\ 5}$ 、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{A}}$ 、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{B}}$ 、 $\text{R}^{2\ 5\ \text{C}}$ 、及び $\text{R}^{2\ 5\ \text{D}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換の C_1-C_8 アルキル、非置換の2～8員ヘテロアルキル、非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、非置換のフェニル、または非置換の5～6員ヘテロアリールである。

【0196】

実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲンである。実施形態では、 R^2 は独立して、水素である。実施形態では、 R^2 は独立して、水素またはハロゲンである。実施形態では、

R^2 は独立して、メチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、 $C_1 - C_4$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲンまたは $C_1 - C_4$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲンまたは $C_1 - C_3$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲンまたは $C_1 - C_2$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲンまたはメチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換もしくは非置換のメチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換もしくは非置換の $C_1 - C_4$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲン、または置換もしくは非置換の $C_1 - C_4$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲン、または置換もしくは非置換の $C_1 - C_3$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲン、または置換もしくは非置換の $C_1 - C_2$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲン、または置換もしくは非置換のメチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換メチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換の $C_1 - C_4$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲンまたは置換の $C_1 - C_4$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲンまたは置換の $C_1 - C_3$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲンまたは置換の $C_1 - C_2$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲンまたは置換メチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、非置換の $C_1 - C_4$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲンまたは非置換の $C_1 - C_4$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲンまたは非置換の $C_1 - C_3$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲンまたは非置換の $C_1 - C_2$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、ハロゲンまたは非置換のメチルである。

10

20

【0197】

実施形態では、 R^2 は独立して、 $C_1 - C_4$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、 $C_1 - C_3$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、 $C_1 - C_2$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、メチルである。実施形態では、 R^2 は独立して、イソプロピルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換もしくは非置換のメチル、または置換もしくは非置換のイソプロピルである。

【0198】

実施形態では、 R^2 は独立して、置換もしくは非置換の $C_1 - C_4$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換もしくは非置換の $C_1 - C_3$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換もしくは非置換の $C_1 - C_2$ アルキルである。実施形態では、 R^2 は独立して、置換もしくは非置換のメチルである。

30

【0199】

実施形態では、 z_2 は、0 である。実施形態では、 z_2 は、1 である。実施形態では、 z_2 は、2 である。実施形態では、 z_2 は、3 である。実施形態では、 z_2 は、4 である。

【0200】

実施形態では、 R^3 は、水素である。実施形態では、 R^3 は、 $-NH_2$ である。

【0201】

実施形態では、記号 Y^1 は、N である。実施形態では、記号 Y^1 は、 $-C(R^4)$ である。

40

【0202】

実施形態では、 R^4 は、水素、置換もしくは非置換の $C_1 - C_8$ アルキル、または置換もしくは非置換の 2～8 員ヘテロアルキルである。

【0203】

実施形態では、 R^4 は独立して、水素である。実施形態では、 R^4 は独立して、ハロゲンである。実施形態では、 R^4 は独立して、 $-CX^4_3$ である。実施形態では、 R^4 は独立して、 $-CHX^4_2$ である。実施形態では、 R^4 は独立して、 $-CH_2X^4$ である。実施形態では、 R^4 は独立して、 $-OCX^4_3$ である。実施形態では、 R^4 は独立して、 $-OCH_2X^4$ である。実施形態では、 R^4 は独立して、 $-OCHX^4_2$ である。実施形態

50

10

20

30

40

50

10

20

30

40

50

10

20

30

40

50

20

50

【 0 2 0 8 】

50

10

20

30

40

50

非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、置換もしくは非置換のフェニルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、置換フェニルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、非置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、非置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、非置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、非置換のフェニルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、非置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{4D} は独立して、非置換のtert-ブチルである。

10

【0210】

実施形態では、 R^4 は独立して、水素、ハロゲン、 $-CX^4_3$ 、 $-CHX^4_2$ 、 $-CH_2X^4$ 、 $-OCX^4_3$ 、 $-OCH_2X^4$ 、 $-OCHX^4_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n4}R^{4D}$ 、 $-SO_{v4}NR^{4A}R^{4B}$ 、 $-NHC(O)NR^{4A}R^{4B}$ 、 $-N(O)_mR^{4A}R^{4B}$ 、 $-C(O)R^{4C}$ 、 $-C(O)OR^{4C}$ 、 $-C(O)NR^{4A}R^{4B}$ 、 $-OR^{4D}$ 、 $-NR^{4A}SO_2R^{4D}$ 、 $-NR^{4A}C(O)R^{4C}$ 、 $-NR^{4A}C(O)OR^{4C}$ 、 $-NR^{4A}OR^{4C}$ 、 R^{29} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{29} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^4 は独立して、ハロゲン、 $-CX^4_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH_2SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^4_3$ 、 $-OCHX^4_2$ 、 R^{29} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{29} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^4 は独立して、ハロゲン、 $-CX^4_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH_2SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^4_3$ 、 $-OCHX^4_2$ 、 R^{29} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{29} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^4 は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^4 は独立して、水素である。実施形態では、 R^4 は独立して、メチルである。実施形態では、 R^4 は独立して、エチルである。

20

30

40

【0211】

R^{29} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{29}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH_2SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{29}_3$ 、 $-OCHX^{29}_2$ 、 R^{29} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{29} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{29} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{29} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{29} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{29} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{29} は独立して、エチルである。

50

OCHX^{29}_2 、 R^{30} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{30} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{30} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{30} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{30} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{30} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{29} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{29}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{29}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{29}_2$ 、 R^{30} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{30} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{30} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{30} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{30} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{30} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{29} は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

10

【0212】

R^{30} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{30}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{30}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{30}_2$ 、 R^{31} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{31} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{31} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{31} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{31} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{31} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{30} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{30}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{30}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{30}_2$ 、 R^{31} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{31} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{31} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{31} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{31} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{31} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{30} は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

20

30

【0213】

実施形態では、 R^{4A} は独立して、水素、 $-\text{CX}^{4A}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CHX}^{4A}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{4A}$ 、 R^{29A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{29A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{29A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{29A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{29A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{29A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{4A} は独立して、水素、 $-\text{CX}^{4A}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CHX}^{4A}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{4A}$ 、 R^{29A} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{29A} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{29A} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{29A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{29A} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{29A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{4A} は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。実施形態では、 R^{4A} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{4A} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{4A} は独立して、エチルである。

40

【0214】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{4A} 及び R^{4B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{29A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または R^{29A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{4A} 及び R^{4B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{29A} —置換もしくは非置換の

50

3～6員ヘテロシクロアルキル、または R^{29A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

【0215】

R^{29A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{29A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{29A}_3$ 、 $-OCHX^{29A}_2$ 、 R^{30A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{30A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{30A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{30A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{30A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{30A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{29A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{29A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{29A}_3$ 、 $-OCHX^{29A}_2$ 、 R^{30A} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{30A} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{30A} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{30A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{30A} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{30A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{29A} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

10

20

【0216】

R^{30A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{30A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{30A}_3$ 、 $-OCHX^{30A}_2$ 、 R^{31A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{31A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{31A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{31A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{31A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{31A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{30A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{30A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{30A}_3$ 、 $-OCHX^{30A}_2$ 、 R^{31A} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{31A} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{31A} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{31A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{31A} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{31A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{30A} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

30

【0217】

実施形態では、 R^{4B} は独立して、水素、 $-CX^{4B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{4B}_2$ 、 $-CH_2X^{4B}$ 、 R^{29B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{29B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{29B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{29B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{29B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{29B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{4B} は独立して、水素、 $-CX^{4B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{4B}_2$ 、 $-CH_2X^{4B}$ 、 R^{29B} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{29B} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{29B} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{29B} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{29B} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{29B} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{4B} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、ま

40

50

たは-Iである。実施形態では、 R^{4B} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{4B} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{4B} は独立して、エチルである。

【0218】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{4A} 及び R^{4B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{29B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または R^{29B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{4A} 及び R^{4B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{29B} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、または R^{29B} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

【0219】

R^{29B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{29B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{29B}_3$ 、 $-OCHX^{29B}_2$ 、 R^{30B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{30B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{30B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{30B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{30B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{30B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{29B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{29B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{29B}_3$ 、 $-OCHX^{29B}_2$ 、 R^{30B} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{30B} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{30B} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{30B} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{30B} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{30B} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{29B} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または-Iである。

【0220】

R^{30B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{30B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{30B}_3$ 、 $-OCHX^{30B}_2$ 、 R^{31B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{31B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{31B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{31B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{31B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{31B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{30B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{30B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{30B}_3$ 、 $-OCHX^{30B}_2$ 、 R^{31B} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{31B} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{31B} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{31B} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{31B} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{31B} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{30B} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または-Iである。

【0221】

実施形態では、 R^{4C} は独立して、水素、 $-CX^{4C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{4C}_2$ 、 $-CH_2X^{4C}$ 、 R^{29C} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{29C} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{29C} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{29C} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{29C} —置換も

10

20

30

40

50

しくは非置換のアリール、または $R^{2,9C}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{4C} は独立して、水素、 $-CX^{4C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{4C}_2$ 、 $-CH_2X^{4C}$ 、 $R^{2,9C}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{2,9C}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{2,9C}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{2,9C}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{2,9C}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{2,9C}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{4C} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{4C} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{4C} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{4C} は独立して、エチルである。

【0222】

$R^{2,9C}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{2,9C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{2,9C}_3$ 、 $-OCHX^{2,9C}_2$ 、 $R^{3,0C}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{3,0C}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{3,0C}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{3,0C}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{3,0C}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{3,0C}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{2,9C}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{2,9C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{2,9C}_3$ 、 $-OCHX^{2,9C}_2$ 、 $R^{3,0C}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{3,0C}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{3,0C}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{3,0C}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{3,0C}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{3,0C}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{2,9C}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0223】

$R^{3,0C}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{3,0C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{3,0C}_3$ 、 $-OCHX^{3,0C}_2$ 、 $R^{3,1C}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{3,1C}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{3,1C}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{3,1C}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{3,1C}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{3,1C}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{3,0C}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{3,0C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{3,0C}_3$ 、 $-OCHX^{3,0C}_2$ 、 $R^{3,1C}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{3,1C}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{3,1C}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{3,1C}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{3,1C}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{3,1C}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{3,0C}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0224】

実施形態では、 R^{4D} は独立して、水素、 $-CX^{4D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{4D}_2$ 、 $-CH_2X^{4D}$ 、 $R^{2,9D}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{2,9D}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{2,9D}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{2,9D}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{2,9D}$ —置換も

10

20

30

40

50

しくは非置換のアリール、または $R^{2\ 9\ D}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{4\ D}$ は独立して、水素、 $-CX^{4\ D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{4\ D}_2$ 、 $-CH_2X^{4\ D}$ 、 $R^{2\ 9\ D}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{2\ 9\ D}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{2\ 9\ D}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{2\ 9\ D}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{2\ 9\ D}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{2\ 9\ D}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{4\ D}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 $R^{4\ D}$ は独立して、水素である。実施形態では、 $R^{4\ D}$ は独立して、メチルである。実施形態では、 $R^{4\ D}$ は独立して、エチルである。

【0225】

$R^{2\ 9\ D}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{2\ 9\ D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{2\ 9\ D}_3$ 、 $-OCHX^{2\ 9\ D}_2$ 、 $R^{3\ 0\ D}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{3\ 0\ D}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{3\ 0\ D}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{3\ 0\ D}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 0\ D}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{3\ 0\ D}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{2\ 9\ D}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{2\ 9\ D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{2\ 9\ D}_3$ 、 $-OCHX^{2\ 9\ D}_2$ 、 $R^{3\ 0\ D}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{3\ 0\ D}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{3\ 0\ D}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{3\ 0\ D}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 0\ D}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{3\ 0\ D}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{2\ 9\ D}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0226】

$R^{3\ 0\ D}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{3\ 0\ D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{3\ 0\ D}_3$ 、 $-OCHX^{3\ 0\ D}_2$ 、 $R^{3\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{3\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{3\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{3\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{3\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{3\ 0\ D}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{3\ 0\ D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{3\ 0\ D}_3$ 、 $-OCHX^{3\ 0\ D}_2$ 、 $R^{3\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{3\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{3\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{3\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{3\ 1\ D}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{3\ 0\ D}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0227】

$R^{3\ 1}$ 、 $R^{3\ 1\ A}$ 、 $R^{3\ 1\ B}$ 、 $R^{3\ 1\ C}$ 、及び $R^{3\ 1\ D}$ は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CCl_3$ 、 $-CBr_3$ 、 $-CF_3$ 、 $-CI_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-N$

10

20

30

40

50

HSO₂H、-NHC(O)H、-NHC(O)OH、-NHOH、-OCCl₃、-OCF₃、-OCBr₃、-OCI₃、OCHCl₂、-OCHBr₂、-OCHI₂、-OCHF₂、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、R³¹、R^{31A}、R^{31B}、R^{31C}、及びR^{31D}は独立して、オキソ、ハロゲン、-CF₃、-CN、-OH、-NH₂、-COOH、-CONH₂、-NO₂、-SH、-SO₃H、-SO₄H、-SO₂NH₂、-NHNH₂、-ONH₂、-NHC(O)NHNH₂、-NHC(O)NH₂、-NH₂SO₂H、-NHC(O)H、-NHC(O)OH、-NHOH、-OCF₃、-OCHF₂、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、R³¹、R^{31A}、R^{31B}、R^{31C}、及びR^{31D}は独立して、オキソ、ハロゲン、-CF₃、-CN、-OH、-NH₂、-COOH、-CONH₂、-NO₂、-SH、-SO₃H、-SO₄H、-SO₂NH₂、-NHNH₂、-ONH₂、-NHC(O)NHNH₂、-NHC(O)NH₂、-NH₂SO₂H、-NHC(O)H、-NHC(O)OH、-NHOH、-OCF₃、-OCHF₂、非置換のC₁-C₈アルキル、非置換の2~8員ヘテロアルキル、非置換のC₃-C₈シクロアルキル、非置換の3~6員ヘテロシクロアルキル、非置換のフェニル、または非置換の5~6員ヘテロアリールである。

10

【0228】

実施形態では、記号Y²は、Nである。実施形態では、記号Y²は、C(R⁵)である。

20

【0229】

実施形態では、R⁵は、水素、置換もしくは非置換のC₁-C₈アルキル、または置換もしくは非置換の2~8員ヘテロアルキルである。

【0230】

実施形態では、R⁵は独立して、水素である。実施形態では、R⁵は独立して、ハロゲンである。実施形態では、R⁵は独立して、-CX⁵₃である。実施形態では、R⁵は独立して、-CHX⁵₂である。実施形態では、R⁵は独立して、-CH₂X⁵である。実施形態では、R⁵は独立して、-OCX⁵₃である。実施形態では、R⁵は独立して、-OCH₂X⁵である。実施形態では、R⁵は独立して、-OCHX⁵₂である。実施形態では、R⁵は独立して、-CNである。実施形態では、R⁵は独立して、-SO_nR^{5D}である。実施形態では、R⁵は独立して、-SO_vNR^{5A}R^{5B}である。実施形態では、R⁵は独立して、-NHC(O)NR^{5A}R^{5B}である。実施形態では、R⁵は独立して、-N(O)_mである。実施形態では、R⁵は独立して、-NR^{5A}R^{5B}である。実施形態では、R⁵は独立して、-C(O)^{R^{5C}}である。実施形態では、R⁵は独立して、-C(O)-O^{R^{5C}}である。実施形態では、R⁵は独立して、-C(O)NR^{5A}R^{5B}である。実施形態では、R⁵は独立して、-OR^{5D}である。実施形態では、R⁵は独立して、-NR^{5A}SO₂R^{5D}である。実施形態では、R⁵は独立して、-NR^{5A}C(O)^{R^{5C}}である。実施形態では、R⁵は独立して、-NR^{5A}C(O)OR^{5C}である。実施形態では、R⁵は独立して、-NR^{5A}OR^{5C}である。実施形態では、R⁵は独立して、-OHである。実施形態では、R⁵は独立して、-NH₂である。実施形態では、R⁵は独立して、-COOHである。実施形態では、R⁵は独立して、-CONH₂である。実施形態では、R⁵は独立して、-NO₂である。実施形態では、R⁵は独立して、-SHである。実施形態では、R⁵は独立して、-Fである。

30

40

【0231】

実施形態では、R⁵は独立して、置換もしくは非置換のアルキルである。実施形態では、R⁵は独立して、置換もしくは非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、R⁵は独立して、置換もしくは非置換のシクロアルキルである。実施形態では、R⁵は独立して、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、R⁵は独立して、置換もしくは非置換のアリールである。実施形態では、R⁵は独立して、置換もしくは非

50

40

50

40

50

50

【 0 2 3 4 】

30

【 0 2 3 5 】

50

40

50

40

50

20

30

40

50

R^{3 3} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{3 3}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{3 3}_3$ 、 $-OCHX^{3 3}_2$ 、R^{3 4} -置換もしくは非置換のアルキル、R^{3 4} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、R^{3 4} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、R^{3 4} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、R^{3 4} -置換もしくは非置換のアリール、またはR³

⁴置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、R^{3 3}は独立して、オキソ、ハロゲン、-CX^{3 3}₃、-CN、-OH、-NH₂、-COOH、-CONH₂、-NO₂、-SH、-SO₃H、-SO₄H、-SO₂NH₂、-NHNH₂、-ONH₂、-NHC(O)NHNH₂、-NHC(O)NH₂、-NH₂SO₂H、-NHC(O)H、-NHC(O)OH、-NHOH、-OCX^{3 3}₃、-OCHX^{3 3}₂、R^{3 4}置換もしくは非置換のC₁-C₈アルキル、R^{3 4}置換もしくは非置換の2~8員ヘテロアルキル、R^{3 4}置換もしくは非置換のC₃-C₈シクロアルキル、R^{3 4}置換もしくは非置換の3~6員ヘテロシクロアルキル、R^{3 4}置換もしくは非置換のフェニル、またはR^{3 4}置換もしくは非置換の5~6員ヘテロアリールである。X^{3 3}は、-F、-Cl、-Br、または-Iである。

10

【0240】

実施形態では、R^{5 A}は独立して、水素、-CX^{5 A}₃、-CN、-COOH、-CONH₂、-CHX^{5 A}₂、-CH₂X^{5 A}、R^{3 2 A}置換もしくは非置換のアルキル、R^{3 2 A}置換もしくは非置換のヘテロアルキル、R^{3 2 A}置換もしくは非置換のシクロアルキル、R^{3 2 A}置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、R^{3 2 A}置換もしくは非置換のアリール、またはR^{3 2 A}置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、R^{5 A}は独立して、水素、-CX^{5 A}₃、-CN、-COOH、-CONH₂、-CHX^{5 A}₂、-CH₂X^{5 A}、R^{3 2 A}置換もしくは非置換のC₁-C₈アルキル、R^{3 2 A}置換もしくは非置換の2~8員ヘテロアルキル、R^{3 2 A}置換もしくは非置換のC₃-C₈シクロアルキル、R^{3 2 A}置換もしくは非置換の3~6員ヘテロシクロアルキル、R^{3 2 A}置換もしくは非置換のフェニル、またはR^{3 2 A}置換もしくは非置換の5~6員ヘテロアリールである。X^{5 A}は、-F、-Cl、-Br、または-Iである。実施形態では、R^{5 A}は独立して、水素である。実施形態では、R^{5 A}は独立して、メチルである。実施形態では、R^{5 A}は独立して、エチルである。

20

【0241】

実施形態では、同一の窒素原子と結合したR^{5 A}及びR^{5 B}置換基は、任意選択で連結されて、R^{3 2 A}置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、またはR^{3 2 A}置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合したR^{5 A}及びR^{5 B}置換基は、任意選択で連結されて、R^{3 2 A}置換もしくは非置換の3~6員ヘテロシクロアルキル、またはR^{3 2 A}置換もしくは非置換の5~6員ヘテロアリールを形成し得る。

30

【0242】

R^{3 2 A}は独立して、オキソ、ハロゲン、-CX^{3 2 A}₃、-CN、-OH、-NH₂、-COOH、-CONH₂、-NO₂、-SH、-SO₃H、-SO₄H、-SO₂NH₂、-NHNH₂、-ONH₂、-NHC(O)NHNH₂、-NHC(O)NH₂、-NH₂SO₂H、-NHC(O)H、-NHC(O)OH、-NHOH、-OCX^{3 2 A}₃、-OCHX^{3 2 A}₂、R^{3 3 A}置換もしくは非置換のアルキル、R^{3 3 A}置換もしくは非置換のヘテロアルキル、R^{3 3 A}置換もしくは非置換のシクロアルキル、R^{3 3 A}置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、R^{3 3 A}置換もしくは非置換のアリール、またはR^{3 3 A}置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、R^{3 2 A}は独立して、オキソ、ハロゲン、-CX^{3 2 A}₃、-CN、-OH、-NH₂、-COOH、-CONH₂、-NO₂、-SH、-SO₃H、-SO₄H、-SO₂NH₂、-NHNH₂、-ONH₂、-NHC(O)NHNH₂、-NHC(O)NH₂、-NH₂SO₂H、-NHC(O)H、-NHC(O)OH、-NHOH、-OCX^{3 2 A}₃、-OCHX^{3 2 A}₂、R^{3 3 A}置換もしくは非置換のC₁-C₈アルキル、R^{3 3 A}置換もしくは非置換の2~8員ヘテロアルキル、R^{3 3 A}置換もしくは非置換のC₃-C₈シクロアルキル、R^{3 3 A}置換もしくは非置換の3~6員ヘテロシクロアルキル、R^{3 3 A}置換もしくは非置換のフェニル、またはR^{3 3 A}置換もしくは非置換の5~6員ヘテロアリールである。X^{3 2 A}は、-F、-Cl、-Br、または-Iである。

40

【0243】

50

$R^{3\ 3\ A}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{3\ 3\ A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{3\ 3\ A}_3$ 、 $-OCHX^{3\ 3\ A}_2$ 、 $R^{3\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{3\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{3\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{3\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{3\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{3\ 3\ A}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{3\ 3\ A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{3\ 3\ A}_3$ 、 $-OCHX^{3\ 3\ A}_2$ 、 $R^{3\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{3\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{3\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{3\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{3\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{3\ 3\ A}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0244】

実施形態では、 $R^{5\ B}$ は独立して、水素、 $-CX^{5\ B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{5\ B}_2$ 、 $-CH_2X^{5\ B}$ 、 $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{5\ B}$ は独立して、水素、 $-CX^{5\ B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{5\ B}_2$ 、 $-CH_2X^{5\ B}$ 、 $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{5\ B}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 $R^{5\ B}$ は独立して、水素である。実施形態では、 $R^{5\ B}$ は独立して、メチルである。実施形態では、 $R^{5\ B}$ は独立して、エチルである。

【0245】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した $R^{5\ A}$ 及び $R^{5\ B}$ 置換基は、任意選択で連結されて、 $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した $R^{5\ A}$ 及び $R^{5\ B}$ 置換基は、任意選択で連結されて、 $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、または $R^{3\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

【0246】

$R^{3\ 2\ B}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{3\ 2\ B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{3\ 2\ B}_3$ 、 $-OCHX^{3\ 2\ B}_2$ 、 $R^{3\ 3\ B}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{3\ 3\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{3\ 3\ B}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{3\ 3\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 3\ B}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{3\ 3\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{3\ 2\ B}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{3\ 2\ B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、

10

20

30

40

50

【 0 2 4 7 】

10

【 0 2 4 8 】

30

【 0 2 4 9 】

40

50

【 0 2 5 0 】

10

【 0 2 5 1 】

30

【 0 2 5 2 】

40

50

$\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{3\ 2\ \text{D}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{3\ 2\ \text{D}}_2$ 、 $\text{R}^{3\ 3\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{3\ 3\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{3\ 3\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 3\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 3\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{3\ 3\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{3\ 2\ \text{D}}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0253】

$\text{R}^{3\ 3\ \text{D}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{3\ 3\ \text{D}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{3\ 3\ \text{D}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{3\ 3\ \text{D}}_2$ 、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{3\ 3\ \text{D}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{3\ 3\ \text{D}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{3\ 3\ \text{D}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{3\ 3\ \text{D}}_2$ 、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{3\ 3\ \text{D}}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0254】

$\text{R}^{3\ 4}$ 、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{A}}$ 、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{B}}$ 、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{C}}$ 、及び $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CCl}_3$ 、 $-\text{CBr}_3$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CI}_3$ 、 CN 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCCl}_3$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCBr}_3$ 、 $-\text{OCI}_3$ 、 OCHCl_2 、 $-\text{OCHBr}_2$ 、 $-\text{OCHI}_2$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{3\ 4}$ 、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{A}}$ 、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{B}}$ 、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{C}}$ 、及び $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{3\ 4}$ 、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{A}}$ 、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{B}}$ 、 $\text{R}^{3\ 4\ \text{C}}$ 、及び $\text{R}^{3\ 4\ \text{D}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換の C_1-C_8 アルキル、非置換の2～8員ヘテロアルキル、非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、非置換のフェニル、または非置換の5～6員ヘテロアリールである。

【0255】

実施形態では、 L^1 は、結合、 $-\text{S}(\text{O})_2-$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2-\text{Ph}-$ 、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキレン、置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキレン、置換

10

20

30

40

50

もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキレン、置換もしくは非置換の 3～8 員ヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のフェニレン、または置換もしくは非置換の 5～6 員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^1 は、結合である。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換の C_1-C_6 アルキレン、置換もしくは非置換の 2～6 員ヘテロアルキレン、置換もしくは非置換の C_3-C_6 シクロアルキレン、置換もしくは非置換の 3～6 員ヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のフェニレン、または置換もしくは非置換の 5～6 員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換の C_1-C_6 アルキレン、非置換の 2～6 員ヘテロアルキレン、または非置換の C_3-C_6 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のメチレンである。

【0256】

実施形態では、 L^1 は、結合である。実施形態では、 L^1 は、 $-S(O)_2-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-S(O)_2-Ph-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-NR^6-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-O-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-S-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-C(O)-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-C(O)NR^6-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-NR^6C(O)-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-NR^6C(O)NH-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-NHC(O)NR^6-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-C(O)O-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-OC(O)-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-NH-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-C(O)NH-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-NHC(O)-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-NHC(O)NH-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-CH_2-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-OCH_2-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-CH_2O-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-CH_2CH_2-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-SCH_2-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-CH_2S-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-CHCH-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-CC-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-NHCH_2-$ である。実施形態では、 L^1 は、 $-CH_2NH-$ である。

【0257】

実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換のアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換のヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換のシクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換のアリーレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^1 は、置換アルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換シクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換アリーレンである。実施形態では、 L^1 は、置換ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のシクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のアリーレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換の 2～8 員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換の 3～8 員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換の C_6-C_{10} アリーレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換の 5～10 員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^1 は、置換の C_1-C_8 アルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換の 2～8 員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換の C_3-C_8 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換の 3～8 員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換の C_6-C_{10} アリーレンである。実施形態では、 L^1 は、置換の 5～10 員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換の C_1-C_8 アルキレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換の 2～8 員ヘテロア

10

20

30

40

50

ルキレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換の C_3-C_8 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換の3～8員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換の C_6-C_{10} アリーレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換の5～10員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換の C_1-C_4 アルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換の2～4員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換の C_3-C_6 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換のフェニレンである。実施形態では、 L^1 は、置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^1 は、置換の C_1-C_4 アルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換の2～4員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換の C_3-C_6 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換の3～6員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、置換フェニレンである。実施形態では、 L^1 は、置換の5～6員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換の C_1-C_4 アルキレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換の2～4員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換の C_3-C_6 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のフェニレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換の5～6員ヘテロアリーレンである。

【0258】

実施形態では、 L^1 は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NR^6-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NR^6-$ 、 $-NR^6C(O)-$ 、 $-NR^6C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)NR^6-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、 R^{41} —置換もしくは非置換のアルキレン、 R^{41} —置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、 R^{41} —置換もしくは非置換のシクロアルキレン、 R^{41} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、 R^{41} —置換もしくは非置換のアリーレン、または R^{41} —置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^1 は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NH-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)-$ 、 $-NHC(O)NH-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、 R^{41} —置換もしくは非置換のアルキレン、 R^{41} —置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、 R^{41} —置換もしくは非置換のシクロアルキレン、 R^{41} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、 R^{41} —置換もしくは非置換のアリーレン、または R^{41} —置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^1 は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NH-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)-$ 、 $-NHC(O)NH-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、 R^{41} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキレン、 R^{41} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキレン、 R^{41} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキレン、 R^{41} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキレン、 R^{41} —置換もしくは非置換のフェニレン、または R^{41} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリーレンである。

【0259】

R^{41} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{41}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{41}_3$ 、 $-OCHX^{41}_2$ 、 R^{42} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{42} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{42} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{42} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{42} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{42} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{41} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{41}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{41}_3$ 、 $-OCHX^{41}_2$ 、 R^{42} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{42} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{42} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{42} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{42} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。

O) H、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{4\ 1}_{\ 3}$ 、 $-\text{OCHX}^{4\ 1}_{\ 2}$ 、 $\text{R}^{4\ 2}$ ー置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{4\ 2}$ ー置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{4\ 2}$ ー置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{4\ 2}$ ー置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{4\ 2}$ ー置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{4\ 2}$ ー置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{4\ 1}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0260】

$\text{R}^{4\ 2}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{4\ 2}_{\ 3}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHSO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{4\ 2}_{\ 3}$ 、 $-\text{OCHX}^{4\ 2}_{\ 2}$ 、 $\text{R}^{4\ 3}$ ー置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{4\ 3}$ ー置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{4\ 3}$ ー置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $\text{R}^{4\ 3}$ ー置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{4\ 3}$ ー置換もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{4\ 3}$ ー置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{4\ 2}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{4\ 2}_{\ 3}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHSO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{4\ 2}_{\ 3}$ 、 $-\text{OCHX}^{4\ 2}_{\ 2}$ 、 $\text{R}^{4\ 3}$ ー置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{4\ 3}$ ー置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{4\ 3}$ ー置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{4\ 3}$ ー置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{4\ 3}$ ー置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{4\ 3}$ ー置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{4\ 2}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0261】

$\text{R}^{4\ 3}$ は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CCl}_3$ 、 $-\text{CBr}_3$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CI}_3$ 、 CN 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHSO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCCl}_3$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCBr}_3$ 、 $-\text{OCI}_3$ 、 $-\text{OCHCl}_2$ 、 $-\text{OCHBr}_2$ 、 $-\text{OCHI}_2$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{4\ 3}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHSO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{4\ 3}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHSO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換の C_1-C_8 アルキル、非置換の2～8員ヘテロアルキル、非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、非置換のフェニル、または非置換の5～6員ヘテロアリールである。

【0262】

実施形態では、 L^1 は、結合である。実施形態では、 L^1 は、 $\text{R}^{4\ 1}$ ー置換もしくは非置換の C_1-C_2 アルキレンである。実施形態では、 L^1 は、 $\text{R}^{4\ 1}$ ー置換もしくは非置換の C_1-C_4 アルキレンである。実施形態では、 L^1 は、 $\text{R}^{4\ 1}$ ー置換もしくは非置換

10

20

30

40

50

【 0 2 6 6 】

10

【 0 2 6 7 】

20

【 0 2 6 8 】

30

40

50

$R^{4,1}$ －置換もしくは非置換のアザインドリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換もしくは非置換のプリニレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換もしくは非置換のインドリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換もしくは非置換のピラジニレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換もしくは非置換のピロリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換もしくは非置換のイミダゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換もしくは非置換のピラゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換もしくは非置換のトリアゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換もしくは非置換のテトラゾリレンである。

【0269】

実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換インドリニレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換インダゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換ベンズイミダゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換ベンズオキサゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換アザインドリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換プリニレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換インドリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換ピラジニレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換ピロリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換イミダゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換ピラゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換トリアゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、 $R^{4,1}$ －置換テトラゾリレンである。

【0270】

実施形態では、 L^1 は、非置換のインドリニレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のインダゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のベンズイミダゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のベンズオキサゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のアザインドリレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のプリニレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のインドリレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のピラジニレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のピロリレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のイミダゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のピラゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のトリアゾリレンである。実施形態では、 L^1 は、非置換のテトラゾリレンである。

【0271】

実施形態では、 R^6 は独立して、水素である。実施形態では、 R^6 は独立して、ハロゲンである。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-CX^6_3$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-CHX^6_2$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-CH_2X^6$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-OCX^6_3$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-OCH_2X^6$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-OCHX^6_2$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-CN$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-SO_nR^6$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-SO_vR^6$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-NR^6AR^6B$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-NHC(O)NR^6AR^6B$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-N(O)_mR^6$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-NR^6AR^6B$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-C(O)R^6C$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-C(O)OR^6C$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-C(O)NR^6AR^6B$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-OR^6D$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-NR^6ASO_2R^6D$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-NR^6AC(O)R^6C$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-NR^6AC(O)OR^6C$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-NH_2$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-NO_2$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、 $-SH$ である。

【0272】

40

50

50

【 0 2 7 4 】

50

5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{6B} は独立して、非置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{6B} は独立して、非置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{6B} は独立して、非置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{6B} は独立して、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{6B} は独立して、非置換のフェニルである。実施形態では、 R^{6B} は独立して、非置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{6B} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{6B} は独立して、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{6B} は独立して、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{6B} は独立して、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{6B} は独立して、非置換のtert-ブチルである。

10

【0275】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、置換ヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、置換ヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、非置換のヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、置換もしくは非置換の5～10員ヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、置換の3～8員ヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、置換の5～10員ヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、非置換の3～8員ヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、非置換の5～10員ヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は結合して、非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

20

30

【0276】

実施形態では、 R^{6C} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{6C} は独立して、 CX^{6C}_3 である。実施形態では、 R^{6C} は独立して、 $-CHX^{6C}_2$ である。実施形態では、 R^{6C} は独立して、 $-CH_2X^{6C}$ である。実施形態では、 R^{6C} は独立して、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{6C} は独立して、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{6C} は独立して、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{6C} は独立して、置換もしくは非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{6C} は独立して、置換もしくは非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{6C} は独立して、置換もしくは非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^{6C} は独立して、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{6C} は独立して、置換もしくは非置換のアリールである。実施形態では、 R^{6C} は独立して、置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{6C} は独立して、置換アルキルである。実施形態では、 R^{6C} は独立して、置換

40

50

40

50

50

換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{6D} は独立して、非置換のtert-ブチルである。

【0278】

実施形態では、 R^6 は独立して、水素、ハロゲン、 $-CX^6_3$ 、 $-CHX^6_2$ 、 $-CH_2X^6$ 、 $-OCX^6_3$ 、 $-OCH_2X^6$ 、 $-OCHX^6_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_nR^{6D}$ 、 $-SO_vNR^A R^B$ 、 $-NHC(O)NR^A R^B$ 、 $-N(O)_m$ 、 $-NR^A R^B$ 、 $-C(O)R^C$ 、 $-C(O)OR^C$ 、 $-C(O)NR^A R^B$ 、 $-OR^{6D}$ 、 $-NR^A SO_2 R^{6D}$ 、 $-NR^A C(O)R^C$ 、 $-NR^A C(O)OR^C$ 、 $-NR^A OR^C$ 、 R^{35} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{35} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{35} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{35} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{35} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{35} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^6 は独立して、ハロゲン、 $-CX^6_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^6_3$ 、 $-OCHX^6_2$ 、 R^{35} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{35} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{35} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{35} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{35} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{35} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^6 は独立して、ハロゲン、 $-CX^6_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^6_3$ 、 $-OCHX^6_2$ 、 R^{35} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{35} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{35} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{35} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{35} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{35} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^6 は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^6 は独立して、水素である。実施形態では、 R^6 は独立して、メチルである。実施形態では、 R^6 は独立して、エチルである。

【0279】

R^{35} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{35}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{35}_3$ 、 $-OCHX^{35}_2$ 、 R^{36} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{36} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{36} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{36} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{36} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{36} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{35} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{35}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{35}_3$ 、 $-OCHX^{35}_2$ 、 R^{36} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{36} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{36} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{36} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{36} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{36} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{35} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0280】

R^{36} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{36}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-$

COOH、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{3\ 6\ 3}$ 、 $-\text{OCHX}^{3\ 6\ 2}$ 、 $\text{R}^{3\ 7}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{3\ 7}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{3\ 7}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 7}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 7}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{3\ 7}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{3\ 6}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{3\ 6\ 3}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{3\ 6\ 3}$ 、 $-\text{OCHX}^{3\ 6\ 2}$ 、 $\text{R}^{3\ 7}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{3\ 7}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{3\ 7}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 7}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 7}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{3\ 7}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{3\ 6}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0281】

実施形態では、 $\text{R}^{6\ \text{A}}$ は独立して、水素、 $-\text{CX}^{6\ \text{A}\ 3}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CHX}^{6\ \text{A}\ 2}$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{6\ \text{A}}$ 、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{6\ \text{A}}$ は独立して、水素、 $-\text{CX}^{6\ \text{A}\ 3}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CHX}^{6\ \text{A}\ 2}$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{6\ \text{A}}$ 、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{6\ \text{A}}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。実施形態では、 $\text{R}^{6\ \text{A}}$ は独立して、水素である。実施形態では、 $\text{R}^{6\ \text{A}}$ は独立して、メチルである。実施形態では、 $\text{R}^{6\ \text{A}}$ は独立して、エチルである。

【0282】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した $\text{R}^{6\ \text{A}}$ 及び $\text{R}^{6\ \text{B}}$ 置換基は、任意選択で連結されて、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した $\text{R}^{6\ \text{A}}$ 及び $\text{R}^{6\ \text{B}}$ 置換基は、任意選択で連結されて、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、または $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

【0283】

$\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{3\ 5\ \text{A}\ 3}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{3\ 5\ \text{A}\ 3}$ 、 $-\text{OCHX}^{3\ 5\ \text{A}\ 2}$ 、 $\text{R}^{3\ 6\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{3\ 6\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{3\ 6\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 6\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 6\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{3\ 6\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{A}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{3\ 5\ \text{A}\ 3}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{3\ 5\ \text{A}\ 3}$

、 $-\text{OCHX}^{3\ 5\ \text{A}}_2$ 、 $\text{R}^{3\ 6\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{3\ 6\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{3\ 6\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 6\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 6\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{3\ 6\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{3\ 5\ \text{A}}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0284】

$\text{R}^{3\ 6\ \text{A}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{3\ 6\ \text{A}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{3\ 6\ \text{A}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{3\ 6\ \text{A}}_2$ 、 $\text{R}^{3\ 7\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{3\ 7\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{3\ 7\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 7\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 7\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{3\ 7\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{3\ 6\ \text{A}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{3\ 6\ \text{A}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{3\ 6\ \text{A}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{3\ 6\ \text{A}}_2$ 、 $\text{R}^{3\ 7\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{3\ 7\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{3\ 7\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 7\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 7\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{3\ 7\ \text{A}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{3\ 6\ \text{A}}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0285】

実施形態では、 $\text{R}^{6\ \text{B}}$ は独立して、水素、 $-\text{CX}^{6\ \text{B}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CHX}^{6\ \text{B}}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{6\ \text{B}}$ 、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{6\ \text{B}}$ は独立して、水素、 $-\text{CX}^{6\ \text{B}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CHX}^{6\ \text{B}}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{6\ \text{B}}$ 、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{6\ \text{B}}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。実施形態では、 $\text{R}^{6\ \text{B}}$ は独立して、水素である。実施形態では、 $\text{R}^{6\ \text{B}}$ は独立して、メチルである。実施形態では、 $\text{R}^{6\ \text{B}}$ は独立して、エチルである。

【0286】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した $\text{R}^{6\ \text{A}}$ 及び $\text{R}^{6\ \text{B}}$ 置換基は、任意選択で連結されて、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した $\text{R}^{6\ \text{A}}$ 及び $\text{R}^{6\ \text{B}}$ 置換基は、任意選択で連結されて、 $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、または $\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

【0287】

$\text{R}^{3\ 5\ \text{B}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{3\ 5\ \text{B}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{3\ 5\ \text{B}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{3\ 5\ \text{B}}_2$ 、 $\text{R}^{3\ 6\ \text{B}}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{3\ 6\ \text{B}}$ —置換も

しくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{3\ 6\ B}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{3\ 6\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 6\ B}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{3\ 6\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{3\ 5\ B}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{3\ 5\ B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{3\ 5\ B}_3$ 、 $-OCHX^{3\ 5\ B}_2$ 、 $R^{3\ 6\ B}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{3\ 6\ B}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{3\ 6\ B}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{3\ 6\ B}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 6\ B}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{3\ 6\ B}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{3\ 5\ B}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

10

【0288】

$R^{3\ 6\ B}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{3\ 6\ B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{3\ 6\ B}_3$ 、 $-OCHX^{3\ 6\ B}_2$ 、 $R^{3\ 7\ B}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{3\ 7\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{3\ 7\ B}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{3\ 7\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 7\ B}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{3\ 7\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{3\ 6\ B}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{3\ 6\ B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{3\ 6\ B}_3$ 、 $-OCHX^{3\ 6\ B}_2$ 、 $R^{3\ 7\ B}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{3\ 7\ B}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{3\ 7\ B}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{3\ 7\ B}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 7\ B}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{3\ 7\ B}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{3\ 6\ B}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

20

30

【0289】

実施形態では、 $R^{6\ C}$ は独立して、水素、 $-CX^{6\ C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{6\ C}_2$ 、 $-CH_2X^{6\ C}$ 、 $R^{3\ 5\ C}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{3\ 5\ C}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{3\ 5\ C}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{3\ 5\ C}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 5\ C}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{3\ 5\ C}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $R^{6\ C}$ は独立して、水素、 $-CX^{6\ C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{6\ C}_2$ 、 $-CH_2X^{6\ C}$ 、 $R^{3\ 5\ C}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $R^{3\ 5\ C}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $R^{3\ 5\ C}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $R^{3\ 5\ C}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $R^{3\ 5\ C}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $R^{3\ 5\ C}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $X^{6\ C}$ は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 $R^{6\ C}$ は独立して、水素である。実施形態では、 $R^{6\ C}$ は独立して、メチルである。実施形態では、 $R^{6\ C}$ は独立して、エチルである。

40

【0290】

$R^{3\ 5\ C}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{3\ 5\ C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{3\ 5\ C}_3$ 、 $-OCHX^{3\ 5\ C}_2$ 、 $R^{3\ 6\ C}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{3\ 6\ C}$ —置換も

50

しくは非置換のヘテロアルキル、 R^{36C} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{36C} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{36C} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{36C} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{35C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{35C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH_2SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{35C}_3$ 、 $-OCHX^{35C}_2$ 、 R^{36C} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{36C} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{36C} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{36C} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{36C} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{36C} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{35C} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

10

【0291】

R^{36C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{36C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH_2SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{36C}_3$ 、 $-OCHX^{36C}_2$ 、 R^{37C} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{37C} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{37C} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{37C} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{37C} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{37C} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{36C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{36C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH_2SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{36C}_3$ 、 $-OCHX^{36C}_2$ 、 R^{37C} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{37C} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{37C} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{37C} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{37C} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{37C} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{36C} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

20

30

【0292】

実施形態では、 R^{6D} は独立して、水素、 $-CX^{6D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{6D}_2$ 、 $-CH_2X^{6D}$ 、 R^{35D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{35D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{35D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{35D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{35D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{35D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{6D} は独立して、水素、 $-CX^{6D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{6D}_2$ 、 $-CH_2X^{6D}$ 、 R^{35D} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{35D} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{35D} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{35D} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{35D} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{35D} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{6D} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{6D} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{6D} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{6D} は独立して、エチルである。

40

【0293】

R^{35D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{35D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH_2SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{35D}_3$ 、 $-OCHX^{35D}_2$ 、 R^{36D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{36D} —置換も

50

10

20

30

40

50

OH、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換の C_1-C_8 アルキル、非置換の2～8員ヘテロアルキル、非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、非置換のフェニル、または非置換の5～6員ヘテロアリールである。

【0296】

実施形態では、 L^{100} は、式 $\text{L}^{100} \sim \text{L}^{108}$ で与えられる。

【0297】

L^{100} は、結合、 $-\text{S}(\text{O})_2-$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2-\text{Ph}-$ 、 $-\text{NR}^{101}-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{C}(\text{O})-$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{101}-$ 、 $-\text{NR}^{101}\text{C}(\text{O})-$ 、 $-\text{NR}^{101}\text{C}(\text{O})\text{NH}-$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NR}^{101}-$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{OC}(\text{O})-$ 、置換もしくは非置換のアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、置換もしくは非置換のシクロアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のアリーレン、または置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。 R^{101} は、水素、ハロゲン、 $-\text{CX}^{101}_3$ 、 $-\text{CHX}^{101}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{101}$ 、 $-\text{OCX}^{101}_3$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^{101}$ 、 $-\text{OCHX}^{101}_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n101}\text{R}^{101\text{D}}$ 、 $-\text{SO}_{v101}\text{NR}^{101\text{A}}\text{R}^{101\text{B}}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NR}^{101\text{A}}\text{R}^{101\text{B}}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m101}$ 、 $-\text{NR}^{101\text{A}}\text{R}^{101\text{B}}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^{101\text{C}}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^{101\text{C}}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{101\text{A}}\text{R}^{101\text{B}}$ 、 $-\text{OR}^{101\text{D}}$ 、 $-\text{NR}^{101\text{A}}\text{SO}_2\text{R}^{101\text{D}}$ 、 $-\text{NR}^{101\text{A}}\text{C}(\text{O})\text{R}^{101\text{C}}$ 、 $-\text{NR}^{101\text{A}}\text{C}(\text{O})\text{OR}^{101\text{C}}$ 、 $-\text{NR}^{101\text{A}}\text{OR}^{101\text{C}}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。記号 $v101$ 及び $m101$ は独立して、1～2の整数である。記号 $n101$ は、0～4の整数である。

【0298】

L^{108} は、結合、 $-\text{S}(\text{O})_2-$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2-\text{Ph}-$ 、 $-\text{NR}^{109}-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{C}(\text{O})-$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{109}-$ 、 $-\text{NR}^{109}\text{C}(\text{O})-$ 、 $-\text{NR}^{109}\text{C}(\text{O})\text{NH}-$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NR}^{109}-$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{OC}(\text{O})-$ 、置換もしくは非置換のアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、置換もしくは非置換のシクロアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のアリーレン、または置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。 R^{109} は、水素、ハロゲン、 $-\text{CX}^{109}_3$ 、 $-\text{CHX}^{109}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{109}$ 、 $-\text{OCX}^{109}_3$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^{109}$ 、 $-\text{OCHX}^{109}_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n109}\text{R}^{109\text{D}}$ 、 $-\text{SO}_{v109}\text{NR}^{109\text{A}}\text{R}^{109\text{B}}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NR}^{109\text{A}}\text{R}^{109\text{B}}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m109}$ 、 $-\text{NR}^{109\text{A}}\text{R}^{109\text{B}}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^{109\text{C}}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^{109\text{C}}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^{109\text{A}}\text{R}^{109\text{B}}$ 、 $-\text{OR}^{109\text{D}}$ 、 $-\text{NR}^{109\text{A}}\text{SO}_2\text{R}^{109\text{D}}$ 、 $-\text{NR}^{109\text{A}}\text{C}(\text{O})\text{R}^{109\text{C}}$ 、 $-\text{NR}^{109\text{A}}\text{C}(\text{O})\text{OR}^{109\text{C}}$ 、 $-\text{NR}^{109\text{A}}\text{OR}^{109\text{C}}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールである。記号 $v109$ 、及び $m109$ は独立して、1～2の整数である。記号 $n109$ は、0～4の整数である。

【0299】

実施形態では、 L^{100} は、結合、 $-\text{S}(\text{O})_2-$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2-\text{Ph}-$ 、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキレン、置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキレン、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキレン、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のフェニレン、または置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、結合である。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換の C_1-C_6 アルキレン、置換もしくは非置換の2～6員ヘテロアルキレン、置換もしくは非置換の C_3-C_6 シクロアルキレン、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のフェニレン、または

10

20

30

40

50

置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換の C_1-C_6 アルキレン、非置換の2～6員ヘテロアルキレン、または非置換の C_3-C_6 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のメチレンである。

【0300】

実施形態では、 L^{100} は、結合である。実施形態では、 L^{100} は、 $-S(O)_2-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-S(O)_2-Ph-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-NR^{101}-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-O-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-S-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-C(O)-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-C(O)NR^{101}-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-NR^{101}C(O)NH-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-NHC(O)NR^{101}-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-C(O)O-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-OC(O)-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-NH-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-C(O)NH-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-NHC(O)-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-NHC(O)NH-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-CH_2-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-OCH_2-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-CH_2O-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-CH_2CH_2-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-SCH_2-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-CH_2S-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-CHCH-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-CC-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-NHCH_2-$ である。実施形態では、 L^{100} は、 $-CH_2NH-$ である。

【0301】

実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換のアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換のヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換のシクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換のアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換アルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換シクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換アリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のシクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換の C_6-C_{10} アリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換の5～10員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換の C_1-C_8 アルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換の2～8員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換の C_3-C_8 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換の3～8員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換の C_6-C_{10} アリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換の5～10員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換の C_1-C_8 アルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換の2～8員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換の C_3-C_8 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換の3～8員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のC

$6-C_{10}$ アリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換の 5～10 員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換の C_1-C_4 アルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換の 2～4 員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換の C_3-C_6 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換の 3～6 員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換のフェニレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換もしくは非置換の 5～6 員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換の C_1-C_4 アルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換の 2～4 員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換の C_3-C_6 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換の 3～6 員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換フェニレンである。実施形態では、 L^{100} は、置換の 5～6 員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換の C_1-C_4 アルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換の 2～4 員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換の C_3-C_6 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換の 3～6 員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のフェニレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換の 5～6 員ヘテロアリーレンである。

【0302】

実施形態では、 L^{100} は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NR^{101}-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NR^{101}-$ 、 $-NR^{101}C(O)-$ 、 $-NR^{101}C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)NR^{101}-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、 R^{105} —置換もしくは非置換のアルキレン、 R^{105} —置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、 R^{105} —置換もしくは非置換のシクロアルキレン、 R^{105} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、 R^{105} —置換もしくは非置換のアリーレン、または R^{105} —置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NH-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)-$ 、 $-NHC(O)NH-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、 R^{105} —置換もしくは非置換のアルキレン、 R^{105} —置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、 R^{105} —置換もしくは非置換のシクロアルキレン、 R^{105} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、 R^{105} —置換もしくは非置換のアリーレン、または R^{105} —置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NH-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)-$ 、 $-NHC(O)NH-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、 R^{105} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキレン、 R^{105} —置換もしくは非置換の 2～8 員ヘテロアルキレン、 R^{105} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキレン、 R^{105} —置換もしくは非置換の 3～6 員ヘテロシクロアルキレン、 R^{105} —置換もしくは非置換のフェニレン、または R^{105} —置換もしくは非置換の 5～6 員ヘテロアリーレンである。

【0303】

R^{105} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{105}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{105}_3$ 、 $-OCHX^{105}_2$ 、 R^{106} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{106} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{106} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{106} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{106} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{106} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{105} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{105}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-$

10

20

30

40

50

$\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{105}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{105}_2$ 、 R^{106} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{106} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{106} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{106} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{106} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{106} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{105} は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0304】

R^{106} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{106}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{106}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{106}_2$ 、 R^{107} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{107} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{107} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{107} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{107} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{107} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{106} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{106}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{106}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{106}_2$ 、 R^{107} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{107} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{107} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{107} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{107} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{107} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{106} は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0305】

R^{107} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CCl}_3$ 、 $-\text{CBr}_3$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CI}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCCl}_3$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCBr}_3$ 、 $-\text{OCI}_3$ 、 OCHCl_2 、 $-\text{OCHBr}_2$ 、 $-\text{OCHI}_2$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{107} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{107} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換の C_1-C_8 アルキル、非置換の2～8員ヘテロアルキル、非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、非置換のフェニル、または非置換の5～6員ヘテロアリールである。

【0306】

実施形態では、 L^{100} は、結合である。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換の C_1-C_2 アルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換の C_1-C_4 アルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{10}

10

20

30

40

50

10

20

30

40

50

50

実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} －置換もしくは非置換の C_3 － C_8 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} －置換もしくは非置換の C_4 － C_6 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} －置換もしくは非置換の C_5 － C_6 シクロアルキレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} －置換もしくは非置換のシクロアルキレン（例えば、 C_3 － C_8 シクロアルキレン、 C_4 － C_6 シクロアルキレン、または C_5 － C_6 シクロアルキレン）である。実施形態では、 L^{100} は、 R

ロアリーレン)である。実施形態では、 L^{100} は、非置換の5～10員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換の5～9員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換の5～6員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換のインドリニレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換のインダゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換のベンズイミダゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換のベンズオキサゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換のアザインドリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換のプリニレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換のインドリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換のピラジニレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換のピロリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換のイミダゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換のピラゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換のトリアゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換もしくは非置換のテトラゾリレンである。

10

【0313】

実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換インドリニレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換インダゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換ベンズイミダゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換ベンズオキサゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換アザインドリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換プリニレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換インドリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換ピラジニレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換ピロリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換イミダゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換ピラゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換トリアゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、 R^{105} —置換テトラゾリレンである。

20

【0314】

実施形態では、 L^{100} は、非置換のインドリニレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のインダゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のベンズイミダゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のベンズオキサゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のアザインドリレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のプリニレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のインドリレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のピラジニレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のピロリレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のイミダゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のピラゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のトリアゾリレンである。実施形態では、 L^{100} は、非置換のテトラゾリレンである。

30

【0315】

実施形態では、 R^{101} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{101} は独立して、ハロゲンである。実施形態では、 R^{101} は独立して、 $-CX^{101}_3$ である。実施形態では、 R^{101} は独立して、 $-CHX^{101}_2$ である。実施形態では、 R^{101} は独立して、 $-CH_2X^{101}$ である。実施形態では、 R^{101} は独立して、 $-OCX^{101}_3$ である。実施形態では、 R^{101} は独立して、 $-OCH_2X^{101}$ である。実施形態では、 R^{101} は独立して、 $-OCHX^{101}_2$ である。実施形態では、 R^{101} は独立して、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{101} は独立して、 $-SO_{n101}R^{101D}$ である。実施形態では、 R^{101} は独立して、 $-SO_{v101}NR^{101A}R^{101B}$ である。実施形態では、 R^{101} は独立して、 $-NHC(O)NR^{101A}R^{101B}$ である。実施形態では、 R^{101} は独立して、 $-N(O)_{m101}$ である。実施形態では、 R^{101}

40

50

10

20

30

40

50

10

20

30

40

50

20

50

30

40

50

10

20

30

40

50

20

50

立して、置換の C_1-C_8 アルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換の2～8員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換の C_3-C_8 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換の3～8員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換の C_6-C_{10} アリーールである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換の5～10員ヘテロアリーールである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換の C_1-C_8 アルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換の2～8員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換の C_3-C_8 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換の3～8員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換の C_6-C_{10} アリーールである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換の5～10員ヘテロアリーールである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換もしくは非置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換もしくは非置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換もしくは非置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換もしくは非置換のフェニルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリーールである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換フェニルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、置換の5～6員ヘテロアリーールである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換のフェニルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換の5～6員ヘテロアリーールである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{101D} は独立して、非置換のtert-ブチルである。

【0322】

実施形態では、 R^{101} は独立して、水素、ハロゲン、 $-CX^{101}_3$ 、 $-CHX^{101}_2$ 、 $-CH_2X^{101}$ 、 $-OCX^{101}_3$ 、 $-OCH_2X^{101}$ 、 $-OCHX^{101}_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n101}R^{101D}$ 、 $-SO_{v101}NR^{101A}R^{101B}$ 、 $-NHC(O)NR^{101A}R^{101B}$ 、 $-N(O)_{m101}$ 、 $-NR^{101A}R^{101B}$ 、 $-C(O)R^{101C}$ 、 $-C(O)OR^{101C}$ 、 $-C(O)NR^{101A}R^{101B}$ 、 $-OR^{101D}$ 、 $-NR^{101A}SO_2R^{101D}$ 、 $-NR^{101A}C(O)R^{101C}$ 、 $-NR^{101A}C(O)OR^{101C}$ 、 $-NR^{101A}OR^{101C}$ 、 R^{102} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換のアリーール、または R^{102} —置換もしくは非置換のヘテロアリーールである。実施形態では、 R^{101} は独立して、ハロゲン、 $-CX^{101}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{101}_3$ 、 $-OCHX^{101}_2$ 、 R^{102} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R

R^{102} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{102} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{101} は独立して、ハロゲン、 $-CX^{101}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{101}_3$ 、 $-OCHX^{101}_2$ 、 R^{102} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{102} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{101} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{101} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{101} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{101} は独立して、エチルである。

10

【0323】

実施形態では、 R^{101} は独立して、ハロゲン、 $-CX^{101}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-OCX^{101}_3$ 、 $-OCHX^{101}_2$ 、 R^{102} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{102} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{102} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{101} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{101} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{101} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{101} は独立して、エチルである。

20

【0324】

R^{102} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{102}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{102}_3$ 、 $-OCHX^{102}_2$ 、 R^{103} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{103} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{103} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{103} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{103} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{103} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{102} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{102}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{102}_3$ 、 $-OCHX^{102}_2$ 、 R^{103} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{103} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{103} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{103} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{103} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{103} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{102} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

30

40

【0325】

R^{103} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{103}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{103}_3$ 、 $-OCHX^{103}_2$ 、 R^{104} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{104} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{104} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{104} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{104} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{104} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、

50

R^{103} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{103}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{103}_3$ 、 $-OCHX^{103}_2$ 、 R^{104} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{104} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{104} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{104} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{104} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{104} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{103} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0326】

実施形態では、 R^{101A} は独立して、水素、 $-CX^{101A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{101A}_2$ 、 $-CH_2X^{101A}$ 、 R^{102A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{102A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{102A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{102A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{102A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{102A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{101A} は独立して、水素、 $-CX^{101A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{101A}_2$ 、 $-CH_2X^{101A}$ 、 R^{102A} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{102A} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{102A} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{102A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{102A} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{102A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{101A} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{101A} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{101A} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{101A} は独立して、エチルである。

【0327】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{101A} 及び R^{101B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{102A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または R^{102A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{101A} 及び R^{101B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{102A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、または R^{102A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

【0328】

R^{102A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{102A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{102A}_3$ 、 $-OCHX^{102A}_2$ 、 R^{103A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{103A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{103A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{103A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{103A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{103A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{102A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{102A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{102A}_3$ 、 $-OCHX^{102A}_2$ 、 R^{103A} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{103A} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{103A} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{103A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{103A} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{103A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{102A} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

10

20

30

40

50

【0329】

R^{103A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{103A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{103A}_3$ 、 $-OCHX^{103A}_2$ 、 R^{104A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{104A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{104A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{104A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{104A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{104A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{103A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{103A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{103A}_3$ 、 $-OCHX^{103A}_2$ 、 R^{104A} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{104A} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{104A} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{104A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{104A} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{104A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{103A} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

10

【0330】

実施形態では、 R^{101B} は独立して、水素、 $-CX^{101B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{101B}_2$ 、 $-CH_2X^{101B}$ 、 R^{102B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{102B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{102B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{102B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{102B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{102B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{101B} は独立して、水素、 $-CX^{101B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{101B}_2$ 、 $-CH_2X^{101B}$ 、 R^{102B} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{102B} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{102B} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{102B} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{102B} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{102B} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{101B} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{101B} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{101B} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{101B} は独立して、エチルである。

20

30

【0331】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{101A} 及び R^{101B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{102B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または R^{102B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{101A} 及び R^{101B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{102B} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、または R^{102B} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

40

【0332】

R^{102B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{102B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{102B}_3$ 、 $-OCHX^{102B}_2$ 、 R^{103B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{103B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{103B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{103B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{103B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{103B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールで

50

10

20

30

40

50

10

20

30

50

10

20

30

40

50

—OCHI₂、—OCHF₂、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、R¹⁰⁴、R^{104A}、R^{104B}、R^{104C}、及びR^{104D}は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、—CCl₃、—CBr₃、—CF₃、—CI₃、—CN、—OH、—NH₂、—COOH、—CONH₂、—NO₂、—SH、—SO₃H、—SO₄H、—SO₂NH₂、—NHNH₂、—ONH₂、—NHC(O)NHNH₂、—NHC(O)NH₂、—NH₂SO₂H、—NHC(O)H、—NHC(O)OH、—NHOH、—OCCl₃、—OCF₃、—OCBr₃、—OCI₃、OCHCl₂、—OCHBr₂、—OCHI₂、—OCHF₂、非置換のC₁—C₈アルキル、非置換の2～8員ヘテロアルキル、非置換のC₃—C₈シクロアルキル、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、非置換のフェニル、または非置換の5～6員ヘテロアリールである。

10

【0341】

実施形態では、L¹⁰⁸は、結合、—S(O)₂—、—S(O)₂—Ph—、置換もしくは非置換のC₁—C₈アルキレン、置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキレン、置換もしくは非置換のC₃—C₈シクロアルキレン、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のフェニレン、または置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリーレンである。実施形態では、L¹⁰⁸は、結合である。実施形態では、L¹⁰⁸は、置換もしくは非置換のC₁—C₆アルキレン、置換もしくは非置換の2～6員ヘテロアルキレン、置換もしくは非置換のC₃—C₆シクロアルキレン、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のフェニレン、または置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリーレンである。実施形態では、L¹⁰⁸は、非置換のC₁—C₆アルキレン、非置換の2～6員ヘテロアルキレン、または非置換のC₃—C₆シクロアルキレンである。実施形態では、L¹⁰⁸は、非置換のメチレンである。

20

【0342】

実施形態では、L¹⁰⁸は、結合である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—S(O)₂—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—S(O)₂—Ph—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—NR¹⁰⁹—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—O—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—S—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—C(O)—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—C(O)NR¹⁰⁹—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—NR¹⁰⁹C(O)—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—NHC(O)NR¹⁰⁹—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—C(O)O—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—OC(O)—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—NH—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—C(O)NH—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—NHC(O)—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—NHC(O)NH—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—CH₂—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—OCH₂—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—CH₂O—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—CH₂CH₂—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—SCH₂—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—CH₂S—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—CHCH—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—CC—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—NHCH₂—である。実施形態では、L¹⁰⁸は、—CH₂NH—である。

30

40

【0343】

実施形態では、L¹⁰⁸は、置換もしくは非置換のアルキレンである。実施形態では、L¹⁰⁸は、置換もしくは非置換のヘテロアルキレンである。実施形態では、L¹⁰⁸は、置換もしくは非置換のシクロアルキレンである。実施形態では、L¹⁰⁸は、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、L¹⁰⁸は、置換もしくは非置換のアリーレンである。実施形態では、L¹⁰⁸は、置換アルキレンである。実施形態では、L¹⁰⁸は、置換ヘテロアルキレンである。実施形態では、L¹⁰⁸は、置換シクロアルキ

50

30

40

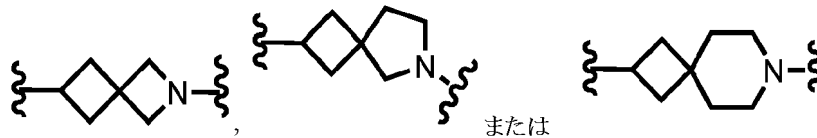
50

レン、 R^{113} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、 R^{113} -置換もしくは非置換のアリーレン、または R^{113} -置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^{108} は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NH-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)-$ 、 $-NHC(O)NH-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、 R^{113} -置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキレン、 R^{113} -置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキレン、 R^{113} -置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキレン、 R^{113} -置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキレン、 R^{113} -置換もしくは非置換のフェニレン、または R^{113} -置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリーレンである。

【0345】

実施形態では、 L^{108} は、式

【化38】



を有する。

【0346】

R^{113} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{113}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{113}_3$ 、 $-OCHX^{113}_2$ 、 R^{114} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{114} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{114} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{114} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{114} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{114} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{113} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{113}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{113}_3$ 、 $-OCHX^{113}_2$ 、 R^{114} -置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{114} -置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{114} -置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{114} -置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{114} -置換もしくは非置換のフェニル、または R^{114} -置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{113} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0347】

R^{114} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{114}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{114}_3$ 、 $-OCHX^{114}_2$ 、 R^{115} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{115} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{115} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{115} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{115} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{115} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{114} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{114}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{114}_3$ 、 $-OCHX^{114}_2$ 、 R^{115} -置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{115} -置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{115} -置換もしくは非置換の C_3

10

20

30

40

50

—C₈シクロアルキル、R^{1 1 5}—置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、R^{1 1 5}—置換もしくは非置換のフェニル、またはR^{1 1 5}—置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。X^{1 1 4}は、—F、—Cl、—Br、または—Iである。

【0348】

R^{1 1 5}は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、—CCl₃、—CBr₃、—CF₃、—CI₃、CN、—OH、—NH₂、—COOH、—CONH₂、—NO₂、—SH、—SO₃H、—SO₄H、—SO₂NH₂、—NHNH₂、—ONH₂、—NHC(O)NHNH₂、—NHC(O)NH₂、—NH₂SO₂H、—NHC(O)H、—NHC(O)OH、—NHOH、—OCCl₃、—OCF₃、—OCBr₃、—OCI₃、OCHCl₂、—OCHBr₂、—OCHI₂、—OCHF₂、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、R^{1 1 5}は独立して、オキソ、ハロゲン、—CF₃、—CN、—OH、—NH₂、—COOH、—CONH₂、—NO₂、—SH、—SO₃H、—SO₄H、—SO₂NH₂、—NHNH₂、—ONH₂、—NHC(O)NHNH₂、—NHC(O)NH₂、—NH₂SO₂H、—NHC(O)H、—NHC(O)OH、—NHOH、—OCF₃、—OCHF₂、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、R^{1 1 5}は独立して、オキソ、ハロゲン、—CF₃、—CN、—OH、—NH₂、—COOH、—CONH₂、—NO₂、—SH、—SO₃H、—SO₄H、—SO₂NH₂、—NHNH₂、—ONH₂、—NHC(O)NHNH₂、—NHC(O)NH₂、—NH₂SO₂H、—NHC(O)H、—NHC(O)OH、—NHOH、—OCF₃、—OCHF₂、非置換のC₁—C₈アルキル、非置換の2～8員ヘテロアルキル、非置換のC₃—C₈シクロアルキル、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、非置換のフェニル、または非置換の5～6員ヘテロアリールである。

【0349】

実施形態では、L^{1 0 8}は、結合である。実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換もしくは非置換のC₁—C₂アルキレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換もしくは非置換のC₁—C₄アルキレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換もしくは非置換のC₁—C₆アルキレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換もしくは非置換のC₁—C₈アルキレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換もしくは非置換のアルキレン（例えば、C₁—C₈アルキレン、C₁—C₆アルキレン、C₁—C₄アルキレン、C₁—C₂アルキレン）である。実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換のC₁—C₂アルキレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換のC₁—C₄アルキレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換のC₁—C₆アルキレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換のC₁—C₈アルキレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換アルキレン（例えば、C₁—C₈アルキレン、C₁—C₆アルキレン、C₁—C₄アルキレン、C₁—C₂アルキレン）である。実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換メチレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、非置換のC₁—C₂アルキレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、非置換のC₁—C₄アルキレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、非置換のC₁—C₆アルキレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、非置換のC₁—C₈アルキレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、非置換のアルキレン（例えば、C₁—C₈アルキレン、C₁—C₆アルキレン、C₁—C₄アルキレン、C₁—C₂アルキレン）である。実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換もしくは非置換のメチレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換メチレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、非置換のメチレンである。

【0350】

実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換もしくは非置換の2～4員ヘテロアルキレンである。実施形態では、L^{1 0 8}は、R^{1 1 3}—置換もしくは非置換の2～6員ヘテロ

10

20

30

40

50

10

20

30

40

50

【 0 3 5 4 】

10

【0 3 5 5】

20

30

40

【 0 3 5 6 】

50

ある。実施形態では、 L^{108} は、 R^{113} —置換プリニレンである。実施形態では、 L^{108} は、 R^{113} —置換インドリレンである。実施形態では、 L^{108} は、 R^{113} —置換ピラジニレンである。実施形態では、 L^{108} は、 R^{113} —置換ピロリレンである。実施形態では、 L^{108} は、 R^{113} —置換イミダゾリレンである。実施形態では、 L^{108} は、 R^{113} —置換ピラゾリレンである。実施形態では、 L^{108} は、 R^{113} —置換トリアゾリレンである。実施形態では、 L^{108} は、 R^{113} —置換テトラゾリレンである。

【0357】

実施形態では、 L^{108} は、非置換のインドリニレンである。実施形態では、 L^{108} は、非置換のインダゾリレンである。実施形態では、 L^{108} は、非置換のベンズイミダゾリレンである。実施形態では、 L^{108} は、非置換のベンズオキサゾリレンである。実施形態では、 L^{108} は、非置換のアザインドリレンである。実施形態では、 L^{108} は、非置換のプリニレンである。実施形態では、 L^{108} は、非置換のインドリレンである。実施形態では、 L^{108} は、非置換のピラジニレンである。実施形態では、 L^{108} は、非置換のピロリレンである。実施形態では、 L^{108} は、非置換のイミダゾリレンである。実施形態では、 L^{108} は、非置換のピラゾリレンである。実施形態では、 L^{108} は、非置換のトリアゾリレンである。実施形態では、 L^{108} は、非置換のテトラゾリレンである。

【0358】

実施形態では、 R^{109} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{109} は独立して、ハロゲンである。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-CX^{109}_3$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-CHX^{109}_2$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-CH_2X^{109}$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-OCX^{109}_3$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-OCH_2X^{109}$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-OCHX^{109}_2$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-SO_{n109}R^{109}D$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-SO_{v109}NR^{109}AR^{109}B$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-NHC(O)NR^{109}AR^{109}B$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-N(O)_{m109}$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-NR^{109}AR^{109}B$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-C(O)R^{109}C$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-C(O)-OR^{109}C$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-C(O)NR^{109}AR^{109}B$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-OR^{109}D$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-NR^{109}ASO_2R^{109}D$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-NR^{109}AC(O)R^{109}C$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-NR^{109}AC(O)OR^{109}C$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-NR^{109}AOR^{109}C$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-OH$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-NH_2$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-NO_2$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、 $-SH$ である。

【0359】

実施形態では、 R^{109} は独立して、置換もしくは非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{109} は独立して、置換もしくは非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{109} は独立して、置換もしくは非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^{109} は独立して、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{109} は独立して、置換もしくは非置換のアリールである。実施形態では、 R^{109} は独立して、置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{109} は独立して、置換アルキルである。実施形態では、 R^{109} は独立して、置換ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{109} は独立して、置換シクロアルキルである。実施形態では、

40

50

50

【 0 3 6 1 】

50

独立して、置換フェニルである。実施形態では、 R^{109B} は独立して、置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{109B} は独立して、非置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{109B} は独立して、非置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{109B} は独立して、非置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{109B} は独立して、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{109B} は独立して、非置換のフェニルである。実施形態では、 R^{109B} は独立して、非置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{109B} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{109B} は独立して、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{109B} は独立して、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{109B} は独立して、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{109B} は独立して、非置換のtert-ブチルである。

10

【0362】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、置換ヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、置換ヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、非置換のヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、置換もしくは非置換の5～10員ヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、置換の3～8員ヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、置換の5～10員ヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、非置換の3～8員ヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、非置換の5～10員ヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、置換の3～6員ヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は結合して、非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

20

30

40

【0363】

実施形態では、 R^{109C} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{109C} は独立して、 $-CX^{109C}_3$ である。実施形態では、 R^{109C} は独立して、 $-CHX^{109C}_2$ である。実施形態では、 R^{109C} は独立して、 $-CH_2X^{109C}$ である。実施形態では、 R^{109C} は独立して、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{109C} は独立して、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{109C} は独立して、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{109C} は独立して、置換もしくは非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{109C} は独立して、置換もしくは非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{109C} は独立して、置換もしくは非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^{109C}

50

50

【 0 3 6 4 】

50

独立して、置換フェニルである。実施形態では、 R^{109D} は独立して、置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{109D} は独立して、非置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{109D} は独立して、非置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{109D} は独立して、非置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{109D} は独立して、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{109D} は独立して、非置換のフェニルである。実施形態では、 R^{109D} は独立して、非置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{109D} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{109D} は独立して、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{109D} は独立して、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{109D} は独立して、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{109D} は独立して、非置換のtert-ブチルである。

10

【0365】

実施形態では、 R^{109} は独立して、水素、ハロゲン、 $-CX^{109}_3$ 、 $-CHX^{109}_2$ 、 $-CH_2X^{109}$ 、 $-OCX^{109}_3$ 、 $-OCH_2X^{109}$ 、 $-OCHX^{109}_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n109}R^{109D}$ 、 $-SO_{v109}NR^{109A}R^{109B}$ 、 $-NHC(O)NR^{109A}R^{109B}$ 、 $-N(O)_{m109}$ 、 $-NR^{109A}R^{109B}$ 、 $-C(O)R^{109C}$ 、 $-C(O)OR^{109C}$ 、 $-C(O)NR^{109A}R^{109B}$ 、 $-OR^{109D}$ 、 $-NR^{109A}SO_2R^{109D}$ 、 $-NR^{109A}C(O)R^{109C}$ 、 $-NR^{109A}C(O)OR^{109C}$ 、 $-NR^{109A}OR^{109C}$ 、 R^{110} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{110} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{109} は独立して、ハロゲン、 $-CX^{109}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{109}_3$ 、 $-OCHX^{109}_2$ 、 R^{110} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{110} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{109} は独立して、ハロゲン、 $-CX^{109}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{109}_3$ 、 $-OCHX^{109}_2$ 、 R^{110} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{110} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{109} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{109} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{109} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{109} は独立して、エチルである。

20

30

40

【0366】

実施形態では、 R^{109} は独立して、ハロゲン、 $-CX^{109}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-OCX^{109}_3$ 、 $-OCHX^{109}_2$ 、 R^{110} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{110} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{110} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。

【0367】

50

R^{110} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{110}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{110}_3$ 、 $-OCHX^{110}_2$ 、 R^{111} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{111} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{111} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{111} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{111} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{111} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{110} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{110}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{110}_3$ 、 $-OCHX^{110}_2$ 、 R^{111} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{111} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{111} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{111} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{111} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{111} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{110} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

10

【0368】

R^{111} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{111}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{111}_3$ 、 $-OCHX^{111}_2$ 、 R^{112} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{112} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{112} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{112} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{112} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{112} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{111} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{111}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{111}_3$ 、 $-OCHX^{111}_2$ 、 R^{112} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{112} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{112} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{112} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{112} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{112} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{111} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

20

30

【0369】

実施形態では、 R^{109A} は独立して、水素、 $-CX^{109A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{109A}_2$ 、 $-CH_2X^{109A}$ 、 R^{110A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{110A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{110A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{110A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{110A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{110A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{109A} は独立して、水素、 $-CX^{109A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{109A}_2$ 、 $-CH_2X^{109A}$ 、 R^{110A} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{110A} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{110A} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{110A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{110A} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{110A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{109A} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{109A} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{109A} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{109A} は独立して、エチルである。

40

50

【0370】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{110A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または R^{110A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{110A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、または R^{110A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

【0371】

R^{110A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{110A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{110A}_3$ 、 $-OCHX^{110A}_2$ 、 R^{111A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{111A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{111A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{111A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{111A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{111A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{110A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{110A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{110A}_3$ 、 $-OCHX^{110A}_2$ 、 R^{111A} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{111A} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{111A} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{111A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{111A} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{111A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{110A} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0372】

R^{111A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{111A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{111A}_3$ 、 $-OCHX^{111A}_2$ 、 R^{112A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{112A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{112A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{112A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{112A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{112A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{111A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{111A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{111A}_3$ 、 $-OCHX^{111A}_2$ 、 R^{112A} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{112A} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{112A} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{112A} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{112A} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{112A} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{111A} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0373】

実施形態では、 R^{109B} は独立して、水素、 $-CX^{109B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{109B}_2$ 、 $-CH_2X^{109B}$ 、 R^{110B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{110B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{110B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{110B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロア

10

20

30

40

50

ルキル、 R^{110B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{110B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{109B} は独立して、水素、 $-CX^{109B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{109B}_2$ 、 $-CH_2X^{109B}$ 、 R^{110B} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{110B} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{110B} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{110B} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{110B} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{110B} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{109B} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{109B} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{109B} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{109B} は独立して、エチルである。

10

【0374】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{110B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または R^{110B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{109A} 及び R^{109B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{110B} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、または R^{110B} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

【0375】

R^{110B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{110B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH_2SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{110B}_3$ 、 $-OCHX^{110B}_2$ 、 R^{111B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{111B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{111B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{111B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{111B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{111B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{110B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{110B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH_2SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{110B}_3$ 、 $-OCHX^{110B}_2$ 、 R^{111B} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{111B} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{111B} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{111B} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{111B} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{111B} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{110B} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

20

30

【0376】

R^{111B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{111B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH_2SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{111B}_3$ 、 $-OCHX^{111B}_2$ 、 R^{112B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{112B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{112B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{112B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{112B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{112B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{111B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{111B}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH_2SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{111B}_3$ 、 $-OCHX^{111B}_2$ 、 R^{112B} —置換もしくは非置換

40

50

の $C_1 - C_8$ アルキル、 R^{112B} - 置換もしくは非置換の 2 ～ 8 員ヘテロアルキル、 R^{112B} - 置換もしくは非置換の $C_3 - C_8$ シクロアルキル、 R^{112B} - 置換もしくは非置換の 3 ～ 6 員ヘテロシクロアルキル、 R^{112B} - 置換もしくは非置換のフェニル、または R^{112B} - 置換もしくは非置換の 5 ～ 6 員ヘテロアリールである。 X^{111B} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0377】

実施形態では、 R^{109C} は独立して、水素、 $-CX^{109C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{109C}_2$ 、 $-CH_2X^{109C}$ 、 R^{110C} - 置換もしくは非置換のアルキル、 R^{110C} - 置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{110C} - 置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{110C} - 置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{110C} - 置換もしくは非置換のアリール、または R^{110C} - 置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{109C} は独立して、水素、 $-CX^{109C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{109C}_2$ 、 $-CH_2X^{109C}$ 、 R^{110C} - 置換もしくは非置換の $C_1 - C_8$ アルキル、 R^{110C} - 置換もしくは非置換の 2 ～ 8 員ヘテロアルキル、 R^{110C} - 置換もしくは非置換の $C_3 - C_8$ シクロアルキル、 R^{110C} - 置換もしくは非置換の 3 ～ 6 員ヘテロシクロアルキル、 R^{110C} - 置換もしくは非置換のフェニル、または R^{110C} - 置換もしくは非置換の 5 ～ 6 員ヘテロアリールである。 X^{109C} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{109C} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{109C} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{109C} は独立して、エチルである。

【0378】

R^{110C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{110C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{110C}_3$ 、 $-OCHX^{110C}_2$ 、 R^{111C} - 置換もしくは非置換のアルキル、 R^{111C} - 置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{111C} - 置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{111C} - 置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{111C} - 置換もしくは非置換のアリール、または R^{111C} - 置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{110C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{110C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{110C}_3$ 、 $-OCHX^{110C}_2$ 、 R^{111C} - 置換もしくは非置換の $C_1 - C_8$ アルキル、 R^{111C} - 置換もしくは非置換の 2 ～ 8 員ヘテロアルキル、 R^{111C} - 置換もしくは非置換の $C_3 - C_8$ シクロアルキル、 R^{111C} - 置換もしくは非置換の 3 ～ 6 員ヘテロシクロアルキル、 R^{111C} - 置換もしくは非置換のフェニル、または R^{111C} - 置換もしくは非置換の 5 ～ 6 員ヘテロアリールである。 X^{110C} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0379】

R^{111C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{111C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{111C}_3$ 、 $-OCHX^{111C}_2$ 、 R^{112C} - 置換もしくは非置換のアルキル、 R^{112C} - 置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{112C} - 置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{112C} - 置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{112C} - 置換もしくは非置換のアリール、または R^{112C} - 置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{111C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{111C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、

$-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、
 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、
 $-\text{OCX}^{111\text{C}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{111\text{C}}_2$ 、 $\text{R}^{112\text{C}}$ —置換もしくは非置換の
 C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{112\text{C}}$ —置換もしくは非置換の 2～8 員ヘテロアルキル、
 $\text{R}^{112\text{C}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{112\text{C}}$ —置換もしくは
 非置換の 3～6 員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{112\text{C}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、
 または $\text{R}^{112\text{C}}$ —置換もしくは非置換の 5～6 員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{111\text{C}}$ は
 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0380】

実施形態では、 $\text{R}^{109\text{D}}$ は独立して、水素、 $-\text{CX}^{109\text{D}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{COOH}$
 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CHX}^{109\text{D}}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{109\text{D}}$ 、 $\text{R}^{110\text{D}}$ —置換もしくは
 非置換のアルキル、 $\text{R}^{110\text{D}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{110\text{D}}$ —置
 換もしくは非置換のシクロアルキル、 $\text{R}^{110\text{D}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロア
 ルキル、 $\text{R}^{110\text{D}}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{110\text{D}}$ —置換もしくは
 非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{109\text{D}}$ は独立して、水素、 $-\text{CX}^{109\text{D}}_3$ 、
 $-\text{CN}$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CHX}^{109\text{D}}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{109\text{D}}$ 、 $\text{R}^{110\text{D}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、
 $\text{R}^{110\text{D}}$ —置換もしくは非置換の 2～8 員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{110\text{D}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロ
 アルキル、 $\text{R}^{110\text{D}}$ —置換もしくは非置換の 3～6 員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{110\text{D}}$
 $-\text{D}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{110\text{D}}$ —置換もしくは非置換の 5～6 員
 ヘテロアリールである。 $\text{X}^{109\text{D}}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。実施
 形態では、 $\text{R}^{109\text{D}}$ は独立して、水素である。実施形態では、 $\text{R}^{109\text{D}}$ は独立して、
 メチルである。実施形態では、 $\text{R}^{109\text{D}}$ は独立して、エチルである。

【0381】

$\text{R}^{110\text{D}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{110\text{D}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、
 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、
 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、
 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{110\text{D}}_3$ 、
 $-\text{OCHX}^{110\text{D}}_2$ 、 $\text{R}^{111\text{D}}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{111\text{D}}$
 $-\text{D}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{111\text{D}}$ —置換もしくは非置換のシクロ
 アルキル、 $\text{R}^{111\text{D}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{111\text{D}}$ —置換
 もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{111\text{D}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールで
 ある。実施形態では、 $\text{R}^{110\text{D}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{110\text{D}}_3$ 、
 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、
 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、
 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、
 $-\text{OCX}^{110\text{D}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{110\text{D}}_2$ 、 $\text{R}^{111\text{D}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、
 $\text{R}^{111\text{D}}$ —置換もしくは非置換の 2～8 員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{111\text{D}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロ
 アルキル、 $\text{R}^{111\text{D}}$ —置換もしくは非置換の 3～6 員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{111\text{D}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、
 または $\text{R}^{111\text{D}}$ —置換もしくは非置換の 5～6 員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{110\text{D}}$ は
 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0382】

$\text{R}^{111\text{D}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{111\text{D}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、
 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、
 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、
 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{111\text{D}}_3$ 、
 $-\text{OCHX}^{111\text{D}}_2$ 、 $\text{R}^{112\text{D}}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{112\text{D}}$
 $-\text{D}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{112\text{D}}$ —置換もしくは非置換のシクロ
 アルキル、 $\text{R}^{112\text{D}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{112\text{D}}$ —置換

もしくは非置換のアリール、または R^{112D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{111D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{111D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{111D}_3$ 、 $-OCHX^{111D}_2$ 、 R^{112D} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{112D} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{112D} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{112D} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{112D} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{112D} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{111D} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

10

【0383】

R^{112} 、 R^{112A} 、 R^{112B} 、 R^{112C} 、及び R^{112D} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CCl_3$ 、 $-CBr_3$ 、 $-CF_3$ 、 $-CI_3$ 、 CN 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCCl_3$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCBr_3$ 、 $-OCI_3$ 、 $OCHCl_2$ 、 $-OCHBr_2$ 、 $-OCHI_2$ 、 $-OCHF_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{112} 、 R^{112A} 、 R^{112B} 、 R^{112C} 、及び R^{112D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CF_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{112} 、 R^{112A} 、 R^{112B} 、 R^{112C} 、及び R^{112D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CF_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、非置換の C_1-C_8 アルキル、非置換の2～8員ヘテロアルキル、非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、非置換のフェニル、または非置換の5～6員ヘテロアリールである。

20

30

【0384】

実施形態では、 L^2 は、 $-NR^7-$ 、またはEに直接結合した環窒素を含む置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $-NR^7-$ である。実施形態では、 L^2 は、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、置換もしくは非置換のピペリジニレン、または置換もしくは非置換のピロリンジニレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換のピペリジニレンまたは非置換のピロリンジニレンである。

40

【0385】

実施形態では、 L^2 は、結合である。実施形態では、 L^2 は、 $-S(O)_2-$ である。実施形態では、 L^2 は、 $-S(O)_2-Ph-$ である。実施形態では、 L^2 は、 $-NR^7-$ である。実施形態では、 L^2 は、 $-O-$ である。実施形態では、 L^2 は、 $-S-$ である。実施形態では、 L^2 は、 $-C(O)-$ である。実施形態では、 L^2 は、 $-C(O)NR^7-$ である。実施形態では、 L^2 は、 $-NR^7C(O)-$ である。実施形態では、 L^2 は、 $-NR^7C(O)NH-$ である。実施形態では、 L^2 は、 $-NHC(O)NR^7-$ である。実施形態では、 L^2 は、 $-C(O)O-$ である。実施形態では、 L^2 は、 $-OC(O)$

50

【 0 3 8 6 】

50

態では、 L^2 は、非置換の5～6員ヘテロアリーレンである。

【0387】

実施形態では、 L^2 は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NR^7-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NR^7-$ 、 $-NR^7C(O)-$ 、 $-NR^7C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)NR^7-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、 R^{44} -置換もしくは非置換のアルキレン、 R^{44} -置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、 R^{44} -置換もしくは非置換のシクロアルキレン、 R^{44} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、 R^{44} -置換もしくは非置換のアリーレン、または R^{44} -置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^2 は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NH-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)-$ 、 $-NHC(O)NH-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、 R^{44} -置換もしくは非置換のアルキレン、 R^{44} -置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、 R^{44} -置換もしくは非置換のシクロアルキレン、 R^{44} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、 R^{44} -置換もしくは非置換のアリーレン、または R^{44} -置換もしくは非置換のヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^2 は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NH-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)-$ 、 $-NHC(O)NH-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、 R^{44} -置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキレン、 R^{44} -置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキレン、 R^{44} -置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキレン、 R^{44} -置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキレン、 R^{44} -置換もしくは非置換のフェニレン、または R^{44} -置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリーレンである。

【0388】

R^{44} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{44}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{44}_3$ 、 $-OCHX^{44}_2$ 、 R^{45} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{45} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{45} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{45} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{45} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{45} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{44} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{44}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{44}_3$ 、 $-OCHX^{44}_2$ 、 R^{45} -置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{45} -置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{45} -置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{45} -置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{45} -置換もしくは非置換のフェニル、または R^{45} -置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{44} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{44} は、 $-CH_3$ である。実施形態では、 R^{44} は、 $-F$ である。

【0389】

R^{45} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{45}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{45}_3$ 、 $-OCHX^{45}_2$ 、 R^{46} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{46} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{46} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{46} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{46} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{46} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{45} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{45}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$

、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{4\ 5}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{4\ 5}_2$ 、 $\text{R}^{4\ 6}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{4\ 6}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{4\ 6}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{4\ 6}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{4\ 6}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{4\ 6}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{4\ 5}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0390】

$\text{R}^{4\ 6}$ は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CCl}_3$ 、 $-\text{CBr}_3$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CI}_3$ 、 CN 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCCl}_3$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCBr}_3$ 、 $-\text{OCI}_3$ 、 OCHCl_2 、 $-\text{OCHBr}_2$ 、 $-\text{OCHI}_2$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{4\ 6}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{4\ 6}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換の C_1-C_8 アルキル、非置換の2～8員ヘテロアルキル、非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、非置換のフェニル、または非置換の5～6員ヘテロアリールである。

【0391】

実施形態では、 L^2 は、 $\text{R}^{4\ 4}$ —置換もしくは非置換の4員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $\text{R}^{4\ 4}$ —置換もしくは非置換の5員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $\text{R}^{4\ 4}$ —置換もしくは非置換の6員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $\text{R}^{4\ 4}$ —置換もしくは非置換の7員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $\text{R}^{4\ 4}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン（例えば、3～6員ヘテロシクロアルキレン、4～6員ヘテロシクロアルキレン、または5～6員ヘテロシクロアルキレン）である。実施形態では、 L^2 は、 $\text{R}^{4\ 4}$ —置換の4員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $\text{R}^{4\ 4}$ —置換の5員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $\text{R}^{4\ 4}$ —置換の6員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $\text{R}^{4\ 4}$ —置換の7員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $\text{R}^{4\ 4}$ —置換ヘテロシクロアルキレン（例えば、3～6員ヘテロシクロアルキレン、4～6員ヘテロシクロアルキレン、または5～6員ヘテロシクロアルキレン）である。実施形態では、 L^2 は、非置換の4員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換の5員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換の6員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換の7員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換のヘテロシクロアルキレン（例えば、3～6員ヘテロシクロアルキレン、4～6員ヘテロシクロアルキレン、または5～6員ヘテロシクロアルキレン）である。

【0392】

実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のピペリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のピロリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のイミダゾリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のピラゾリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のピペラジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のピペラジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のアゼチジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のアジリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のモルホリニレンである。

【0393】

10

実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換ピペリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換 $R^{4,4}$ -置換ピロリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換イミダゾリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換ピラゾリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換ピペラジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換アゼチジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換アジリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換モルホリニレンである。

【0394】

実施形態では、 L^2 は、メチル置換ピペリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、メチル置換メチル置換ピロリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、メチル置換イミダゾリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、メチル置換ピラゾリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、メチル置換ピペラジニレンである。実施形態では、 L^2 は、メチル置換アゼチジニレンである。実施形態では、 L^2 は、メチル置換アジリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、メチル置換モルホリニレンである。

20

【0395】

実施形態では、 L^2 は、非置換の5員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換の6員ヘテロシクロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換のヘテロシクロアルキレン（例えば、3～6員ヘテロシクロアルキレン、4～6員ヘテロシクロアルキレン、または5～6員ヘテロシクロアルキレン）である。実施形態では、 L^2 は、非置換のピペリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換のピロリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換のイミダゾリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換のピラゾリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換のピペラジニレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換のアゼチジニレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換のアジリジニレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換のモルホリニレンである。

30

【0396】

実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換の5～10員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のピリジニレン、ピリダジニレン、ピリミジニレン、ピラジニレン、またはトリアジニレンである。

【0397】

40

実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換の5～10員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換の5～6員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換ピリジニレン、ピリダジニレン、ピリミジニレン、ピラジニレン、またはトリアジニレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換の5～10員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換の5～6員ヘテロアリーレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換のピリジニレン、ピリダジニレン、ピリミジニレン、ピラジニレン、またはトリアジニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のインドリニレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のインダゾリレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のベンズイミダゾリレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のベンズオキサゾリレンで

50

10

20

30

40

50

実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のアルキレン（例えば、 C_1-C_8 アルキレン、 C_1-C_6 アルキレン、 C_1-C_4 アルキレン、 C_1-C_2 アルキレン）である。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換の C_1-C_6 アルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換の C_1-C_4 アルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換の C_1-C_2 アルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換アルキレン（例えば、 C_1-C_8 アルキレン、 C_1-C_6 アルキレン、 C_1-C_4 アルキレン、 C_1-C_2 アルキレン）である。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換の C_1-C_8 アルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換の C_1-C_6 アルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換の C_1-C_4 アルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換の C_1-C_2 アルキレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換のアルキレン（例えば、 C_1-C_8 アルキレン、 C_1-C_6 アルキレン、 C_1-C_4 アルキレン、 C_1-C_2 アルキレン）である。実施形態では、 L^2 は、非置換の C_1-C_8 アルキレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換の C_1-C_6 アルキレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換の C_1-C_4 アルキレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換の C_1-C_2 アルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のメチレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換のメチレンである。

10

【0402】

実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換のヘテロアルキレン（例えば、2～8員ヘテロアルキレン、2～6員ヘテロアルキレン、2～4員ヘテロアルキレン）である。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換の 2～8員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換の 2～6員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換もしくは非置換の 2～4員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換ヘテロアルキレン（例えば、2～8員ヘテロアルキレン、2～6員ヘテロアルキレン、2～4員ヘテロアルキレン）である。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換の 2～8員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換の 2～6員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、 $R^{4,4}$ -置換の 2～4員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換のヘテロアルキレン（例えば、2～8員ヘテロアルキレン、2～6員ヘテロアルキレン、2～4員ヘテロアルキレン）である。実施形態では、 L^2 は、非置換の 2～8員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換の 2～6員ヘテロアルキレンである。実施形態では、 L^2 は、非置換の 2～4員ヘテロアルキレンである。

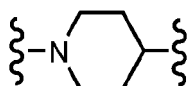
20

30

【0403】

実施形態では、 L^2 は、

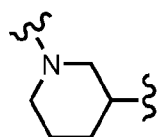
【化39】



である。実施形態では、 L^2 は、

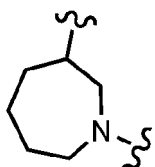
40

【化40】

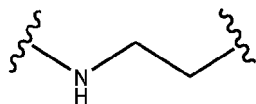


である。実施形態では、 L^2 は、

【化 4 1】

である。実施形態では、 L^1 は、

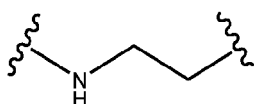
【化 4 2】



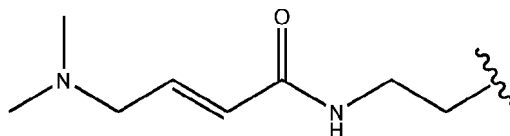
10

である。実施形態では、 L^2 は、

【化 4 3】

である。実施形態では、 $L^2 - E$ は、

【化 4 4】



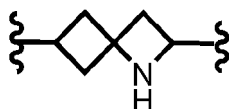
20

である。実施形態では、 L^2 は、

【化 4 5】

である。実施形態では、 L^2 は、

【化 4 6】



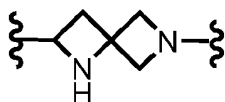
30

である。実施形態では、 L^2 は、

【化 4 7】

である。実施形態では、 L^2 は、

【化 4 8】



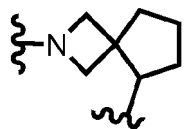
40

である。実施形態では、 L^2 は、

【化 4 9】

である。実施形態では、 L^2 は、

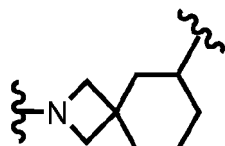
【化 5 0】



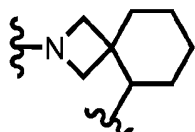
である。実施形態では、 L^2 は、
【化 5 1】



である。実施形態では、 L^2 は、
【化 5 2】



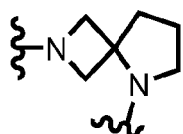
である。実施形態では、 L^2 は、
【化 5 3】



である。実施形態では、 L^2 は、
【化 5 4】



である。実施形態では、 L^2 は、
【化 5 5】



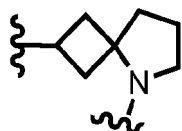
である。実施形態では、 L^2 は、
【化 5 6】



である。実施形態では、 L^2 は、
【化 5 7】



である。実施形態では、 L^2 は、
【化 5 8】



である。実施形態では、 L^2 は、

10

20

30

40

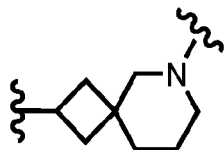
50

【化 5 9】



である。実施形態では、 L^2 は、

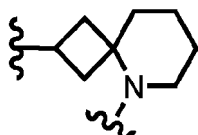
【化 6 0】



10

である。実施形態では、 L^2 は、

【化 6 1】



である。

【0 4 0 4】

実施形態では、 R^7 は、水素、置換もしくは非置換の $C_1 - C_6$ アルキル、または置換もしくは非置換の 2 ～ 6 員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^7 は、水素または非置換の $C_1 - C_3$ アルキルである。実施形態では、 R^7 は、水素である。

20

【0 4 0 5】

実施形態では、 R^7 は独立して、水素である。実施形態では、 R^7 は独立して、ハロゲンである。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-CX^7_3$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-CHX^7_2$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-CH_2X^7$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-OCX^7_3$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-OCH_2X^7$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-OCHX^7_2$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-CN$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-SO_nR^7$ D である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-SO_vR^7$ $A R^7 B$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-NHC(O)NR^7$ $A R^7 B$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-N(O)_mR^7$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-NR^7$ $A R^7 B$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-C(O)R^7$ C である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-C(O)-OR^7$ C である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-C(O)NR^7$ $A R^7 B$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-OR^7$ D である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-NR^7$ $A SO_2R^7$ D である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-NR^7$ $A C(O)R^7$ C である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-NR^7$ $A C(O)OR^7$ C である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-NR^7$ $A OR^7$ C である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-OH$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-NH_2$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-NO_2$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、 $-SH$ である。

30

40

【0 4 0 6】

実施形態では、 R^7 は独立して、置換もしくは非置換のアルキルである。実施形態では、 R^7 は独立して、置換もしくは非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^7 は独立して、置換もしくは非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^7 は独立して、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^7 は独立して、置換もしくは非置換のアリールである。実施形態では、 R^7 は独立して、置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^7 は独立して、置換アルキルである。実施形態では、 R^7 は独立して、置換ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^7 は独立し

50

30

40

50

40

50

50

【 0 4 0 9 】

30

【 0 4 1 0 】

50

30

40

50

ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換シクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換アリールである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換のアリールである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換もしくは非置換の C_6-C_{10} アリールである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換もしくは非置換の5～10員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換の C_1-C_8 アルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換の2～8員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換の C_3-C_8 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換の3～8員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換の C_6-C_{10} アリールである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換の5～10員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換の C_1-C_8 アルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換の2～8員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換の C_3-C_8 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換の3～8員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換の C_6-C_{10} アリールである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換の5～10員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換もしくは非置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換もしくは非置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換もしくは非置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換もしくは非置換のフェニルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換フェニルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換の C_1-C_4 アルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換の2～4員ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換の C_3-C_6 シクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換のフェニルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換の5～6員ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、非置換のtert-ブチルである。

【0412】

実施形態では、 R^7 は独立して、水素、ハロゲン、 $-CX^7_3$ 、 $-CHX^7_2$ 、 $-CH_2X^7$ 、 $-OCX^7_3$ 、 $-OCH_2X^7$ 、 $-OCHX^7_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n7}R^{7D}$ 、 $-SO_{v7}NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-NHC(O)NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-N(O)_mR^{7C}$ 、 $-NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-C(O)R^{7C}$ 、 $-C(O)OR^{7C}$ 、 $-C(O)NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-OR$

10

20

30

40

50

R^7D 、 $-NR^7ASO_2R^7D$ 、 $-NR^7AC(O)R^7C$ 、 $-NR^7AC(O)OR^7C$ 、 $-NR^7AOR^7C$ 、 R^{38} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{38} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{38} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{38} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{38} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{38} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^7 は独立して、ハロゲン、 $-CX^7_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^7_3$ 、 $-OCHX^7_2$ 、 R^{38} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{38} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{38} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{38} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{38} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{38} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^7 は独立して、ハロゲン、 $-CX^7_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^7_3$ 、 $-OCHX^7_2$ 、 R^{38} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{38} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{38} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{38} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{38} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{38} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^7 は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^7 は独立して、水素である。実施形態では、 R^7 は独立して、メチルである。実施形態では、 R^7 は独立して、エチルである。

【0413】

R^{38} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{38}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{38}_3$ 、 $-OCHX^{38}_2$ 、 R^{39} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{39} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{39} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{39} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{39} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{39} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{38} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{38}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{38}_3$ 、 $-OCHX^{38}_2$ 、 R^{39} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{39} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{39} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{39} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{39} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{39} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{38} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0414】

R^{39} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{39}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{39}_3$ 、 $-OCHX^{39}_2$ 、 R^{40} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{40} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{40} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{40} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{40} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{40} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{39} は独立して、オ

キソ、ハロゲン、 $-CX^{39}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{39}_3$ 、 $-OCHX^{39}_2$ 、 R^{40} 一置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{40} 一置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{40} 一置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{40} 一置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{40} 一置換もしくは非置換のフェニル、または R^{40} 一置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{39} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0415】

実施形態では、 R^{7A} は独立して、水素、 $-CX^{7A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{7A}_2$ 、 $-CH_2X^{7A}$ 、 R^{38A} 一置換もしくは非置換のアルキル、 R^{38A} 一置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{38A} 一置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{38A} 一置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{38A} 一置換もしくは非置換のアリール、または R^{38A} 一置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{7A} は独立して、水素、 $-CX^{7A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{7A}_2$ 、 $-CH_2X^{7A}$ 、 R^{38A} 一置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{38A} 一置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{38A} 一置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{38A} 一置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{38A} 一置換もしくは非置換のフェニル、または R^{38A} 一置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{7A} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{7A} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{7A} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{7A} は独立して、エチルである。

【0416】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{7A} 及び R^{7B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{38A} 一置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または R^{38A} 一置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した R^{7A} 及び R^{7B} 置換基は、任意選択で連結されて、 R^{38A} 一置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、または R^{38A} 一置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

【0417】

R^{38A} は独立して、オキシソ、ハロゲン、 $-CX^{38A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{38A}_3$ 、 $-OCHX^{38A}_2$ 、 R^{39A} 一置換もしくは非置換のアルキル、 R^{39A} 一置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{39A} 一置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{39A} 一置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{39A} 一置換もしくは非置換のアリール、または R^{39A} 一置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{38A} は独立して、オキシソ、ハロゲン、 $-CX^{38A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{38A}_3$ 、 $-OCHX^{38A}_2$ 、 R^{39A} 一置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{39A} 一置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{39A} 一置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{39A} 一置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{39A} 一置換もしくは非置換のフェニル、または R^{39A} 一置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{38A} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0418】

R^{39A} は独立して、オキシソ、ハロゲン、 $-CX^{39A}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$

10

20

30

40

50

、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{39\text{A}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{39\text{A}}_2$ 、 $\text{R}^{40\text{A}}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{40\text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{40\text{A}}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $\text{R}^{40\text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{40\text{A}}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{40\text{A}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{39\text{A}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{39\text{A}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{39\text{A}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{39\text{A}}_2$ 、 $\text{R}^{40\text{A}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{40\text{A}}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{40\text{A}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{40\text{A}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{40\text{A}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{40\text{A}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{39\text{A}}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。

【0419】

実施形態では、 $\text{R}^{7\text{B}}$ は独立して、水素、 $-\text{CX}^{7\text{B}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CHX}^{7\text{B}}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{7\text{B}}$ 、 $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{7\text{B}}$ は独立して、水素、 $-\text{CX}^{7\text{B}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CHX}^{7\text{B}}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{7\text{B}}$ 、 $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換のフェニル、または $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 $\text{X}^{7\text{B}}$ は、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ である。実施形態では、 $\text{R}^{7\text{B}}$ は独立して、水素である。実施形態では、 $\text{R}^{7\text{B}}$ は独立して、メチルである。実施形態では、 $\text{R}^{7\text{B}}$ は独立して、エチルである。

【0420】

実施形態では、同一の窒素原子と結合した $\text{R}^{7\text{A}}$ 及び $\text{R}^{7\text{B}}$ 置換基は、任意選択で連結されて、 $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。実施形態では、同一の窒素原子と結合した $\text{R}^{7\text{A}}$ 及び $\text{R}^{7\text{B}}$ 置換基は、任意選択で連結されて、 $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、または $\text{R}^{38\text{B}}$ —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る。

【0421】

$\text{R}^{38\text{B}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{38\text{B}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{38\text{B}}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{38\text{B}}_2$ 、 $\text{R}^{39\text{B}}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $\text{R}^{39\text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $\text{R}^{39\text{B}}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $\text{R}^{39\text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $\text{R}^{39\text{B}}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $\text{R}^{39\text{B}}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 $\text{R}^{38\text{B}}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{38\text{B}}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{38\text{B}}_3$

【 0 4 2 2 】

10

【 0 4 2 3 】

20

【 0 4 2 4 】

30

$$\text{NHSO}_2\text{H}, \text{—NHC(O)H}, \text{—NHC(O)OH}, \text{—NHOH}, \text{—OCX}^3 \text{ } ^8 \text{C}_3 \quad 50$$

、 $-OCHX^{38C}_2$ 、 R^{39C} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{39C} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{39C} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{39C} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{39C} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{39C} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{38C} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0425】

R^{39C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{39C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{39C}_3$ 、 $-OCHX^{39C}_2$ 、 R^{40C} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{40C} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{40C} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{40C} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{40C} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{40C} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{39C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{39C}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{39C}_3$ 、 $-OCHX^{39C}_2$ 、 R^{40C} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{40C} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{40C} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{40C} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{40C} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{40C} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{39C} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0426】

実施形態では、 R^{7D} は独立して、水素、 $-CX^{7D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{7D}_2$ 、 $-CH_2X^{7D}$ 、 R^{38D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{38D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{38D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{38D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{38D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{38D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、水素、 $-CX^{7D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX^{7D}_2$ 、 $-CH_2X^{7D}$ 、 R^{38D} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{38D} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{38D} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{38D} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{38D} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{38D} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{7D} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。実施形態では、 R^{7D} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{7D} は独立して、メチルである。実施形態では、 R^{7D} は独立して、エチルである。

【0427】

R^{38D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{38D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{38D}_3$ 、 $-OCHX^{38D}_2$ 、 R^{39D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{39D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{39D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{39D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{39D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{39D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{38D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{38D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{38D}_3$

、 $-OCHX^{38D}_2$ 、 R^{39D} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{39D} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{39D} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{39D} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{39D} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{39D} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{38D} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0428】

R^{39D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{39D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{39D}_3$ 、 $-OCHX^{39D}_2$ 、 R^{40D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{40D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{40D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{40D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{40D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{40D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{39D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{39D}_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{39D}_3$ 、 $-OCHX^{39D}_2$ 、 R^{40D} —置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、 R^{40D} —置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキル、 R^{40D} —置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、 R^{40D} —置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、 R^{40D} —置換もしくは非置換のフェニル、または R^{40D} —置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールである。 X^{39D} は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ である。

【0429】

R^{40} 、 R^{40A} 、 R^{40B} 、 R^{40C} 、及び R^{40D} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CCl_3$ 、 $-CBr_3$ 、 $-CF_3$ 、 $-CI_3$ 、 CN 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCCl_3$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCBr_3$ 、 $-OCI_3$ 、 $OCHCl_2$ 、 $-OCHBr_2$ 、 $-OCHI_2$ 、 $-OCHF_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{40} 、 R^{40A} 、 R^{40B} 、 R^{40C} 、及び R^{40D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CF_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{40} 、 R^{40A} 、 R^{40B} 、 R^{40C} 、及び R^{40D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CF_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、非置換の C_1-C_8 アルキル、非置換の2～8員ヘテロアルキル、非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、非置換のフェニル、または非置換の5～6員ヘテロアリールである。

【0430】

実施形態では、 X は、 $-F$ である。実施形態では、 X は、 $-Cl$ である。実施形態では、 X は、 $-Br$ である。実施形態では、 X は、 $-I$ である。実施形態では、 X^1 は、 $-F$ である。実施形態では、 X^1 は、 $-Cl$ である。実施形態では、 X^1 は、 $-Br$ である。

10

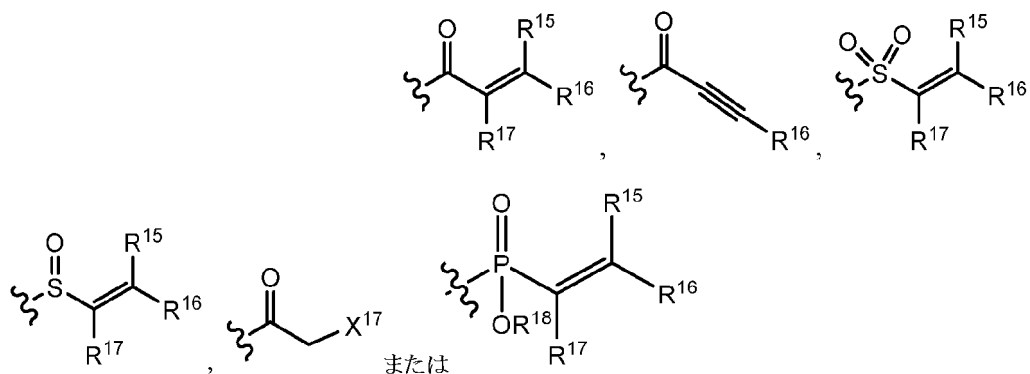
20

30

40

実施形態では、Eは、

【化 6 2】



10

である。

【0436】

R^{15} は独立して、水素、ハロゲン、 CX^{15}_3 、 $-CHX^{15}_2$ 、 $-CH_2X^{15}$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n15}R^{15D}$ 、 $-SO_{v15}NR^{15A}R^{15B}$ 、 $-NHN R^{15A}R^{15B}$ 、 $-ONR^{15A}R^{15B}$ 、 $-NHC=(O)NHN R^{15A}R^{15B}$ 、 $-NHC(O)NR^{15A}R^{15B}$ 、 $-N(O)_m15$ 、 $-NR^{15A}R^{15B}$ 、 $-C(O)R^{15C}$ 、 $-C(O)-OR^{15C}$ 、 $-C(O)NR^{15A}R^{15B}$ 、 $-OR^{15D}$ 、 $-NR^{15A}SO_2R^{15D}$ 、 $-NR^{15A}C(O)R^{15C}$ 、 $-NR^{15A}C(O)OR^{15C}$ 、 $-NR^{15A}OR^{15C}$ 、 $-OCX^{15}_3$ 、 $-OCHX^{15}_2$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 R^{16} は独立して、水素、ハロゲン、 CX^{16}_3 、 $-CHX^{16}_2$ 、 $-CH_2X^{16}$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n16}R^{16D}$ 、 $-SO_{v16}NR^{16A}R^{16B}$ 、 $-NHN R^{16A}R^{16B}$ 、 $-ONR^{16A}R^{16B}$ 、 $-NHC=(O)NHN R^{16A}R^{16B}$ 、 $-NHC(O)NR^{16A}R^{16B}$ 、 $-N(O)_m16$ 、 $-NR^{16A}R^{16B}$ 、 $-C(O)R^{16C}$ 、 $-C(O)-OR^{16C}$ 、 $-C(O)NR^{16A}R^{16B}$ 、 $-OR^{16D}$ 、 $-NR^{16A}SO_2R^{16D}$ 、 $-NR^{16A}C(O)R^{16C}$ 、 $-NR^{16A}C(O)OR^{16C}$ 、 $-NR^{16A}OR^{16C}$ 、 $-OCX^{16}_3$ 、 $-OCHX^{16}_2$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 R^{17} は独立して、水素、ハロゲン、 CX^{17}_3 、 $-CHX^{17}_2$ 、 $-CH_2X^{17}$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n17}R^{17D}$ 、 $-SO_{v17}NR^{17A}R^{17B}$ 、 $-NHN R^{17A}R^{17B}$ 、 $-ONR^{17A}R^{17B}$ 、 $-NHC=(O)NHN R^{17A}R^{17B}$ 、 $-NHC(O)NR^{17A}R^{17B}$ 、 $-N(O)_m17$ 、 $-NR^{17A}R^{17B}$ 、 $-C(O)R^{17C}$ 、 $-C(O)-OR^{17C}$ 、 $-C(O)NR^{17A}R^{17B}$ 、 $-OR^{17D}$ 、 $-NR^{17A}SO_2R^{17D}$ 、 $-NR^{17A}C(O)R^{17C}$ 、 $-NR^{17A}C(O)OR^{17C}$ 、 $-NR^{17A}OR^{17C}$ 、 $-OCX^{17}_3$ 、 $-OCHX^{17}_2$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 R^{18} は独立して、水素、 $-CX^{18}_3$ 、 $-CHX^{18}_2$ 、 $-CH_2X^{18}$ 、 $-C(O)R^{18C}$ 、 $-C(O)OR^{18C}$ 、 $-C(O)NR^{18A}R^{18B}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールである。

20

30

40

【0437】

各 R^{15A} 、 R^{15B} 、 R^{15C} 、 R^{15D} 、 R^{16A} 、 R^{16B} 、 R^{16C} 、 R^{16D} 、 R^{17A} 、 R^{17B} 、 R^{17C} 、 R^{17D} 、 R^{18A} 、 R^{18B} 、 R^{18C} 、 R^{18D} は独立して、水素、 $-CX_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX_2$ 、 $-C$

50

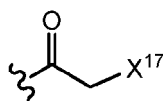
H₂X、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；同一の窒素原子と結合したR^{15A}及びR^{15B}置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合したR^{16A}及びR^{16B}置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合したR^{17A}及びR^{17B}置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合したR^{18A}及びR^{18B}置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成し得る。各X、X¹⁵、X¹⁶、X¹⁷、及びX¹⁸は独立して、-F、-Cl、-Br、または-Iである。記号n15、n16、n17、v15、v16、及びv17は独立して、0～4の整数である。記号m15、m16、及びm17は独立して、1～2の整数である。

10

【0438】

実施形態では、Eは、

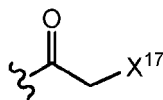
【化63】



20

であり、X¹⁷は、-Clである。実施形態では、Eは、

【化64】

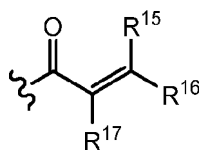


である。実施形態では、X¹⁷は、-Clである。

【0439】

実施形態では、Eは、

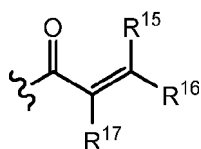
【化65】



30

であり、R¹⁵、R¹⁶、及びR¹⁷は独立して、水素である。実施形態では、Eは、

【化66】



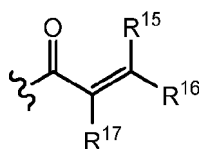
40

である。実施形態では、R¹⁵、R¹⁶、及びR¹⁷は独立して、水素である。

【0440】

実施形態では、Eは、

【化67】

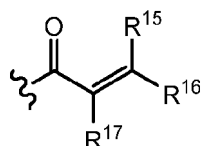


であり；R¹⁵は独立して、水素であり；R¹⁶は独立して、水素または-CH₂NR^{16A}R^{16B}であり；R¹⁷は独立して、水素であり；及びR^{16A}及びR^{16B}は独立

50

して、水素または非置換のアルキルである。実施形態では、Eは、

【化68】



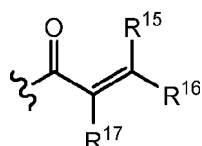
である。実施形態では、 R^{15} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{16} は独立して、水素または $-CH_2NR^{16A}R^{16B}$ である。実施形態では、 R^{17} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{16A} 及び R^{16B} は独立して、水素または非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{16A} 及び R^{16B} は独立して、非置換のメチルである。

10

【0441】

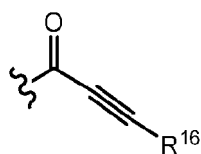
実施形態では、Eは、

【化69】



である。実施形態では、Eは、

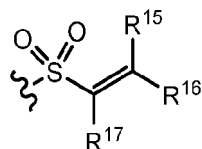
【化70】



20

である。実施形態では、Eは、

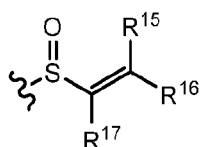
【化71】



30

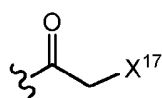
である。実施形態では、Eは、

【化72】



である。実施形態では、Eは、

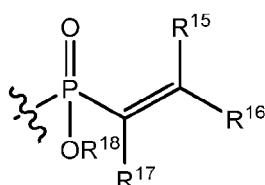
【化73】



40

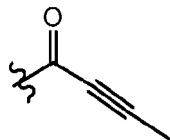
である。実施形態では、Eは、

【化74】



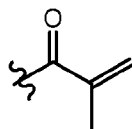
である。実施形態では、Eは、

【化 7 5】



である。実施形態では、Eは、

【化 7 6】



である。

【0 4 4 2】

Xは独立して、-Fであってもよい。Xは独立して、-Clであってもよい。Xは独立して、-Brであってもよい。Xは独立して、-Iであってもよい。X^{1 5}は独立して、-Fであってもよい。X^{1 5}は独立して、-Clであってもよい。X^{1 5}は独立して、-Brであってもよい。X^{1 5}は独立して、-Iであってもよい。X^{1 6}は独立して、-Fであってもよい。X^{1 6}は独立して、-Clであってもよい。X^{1 6}は独立して、-Brであってもよい。X^{1 6}は独立して、-Iであってもよい。X^{1 7}は独立して、-Fであってもよい。X^{1 7}は独立して、-Clであってもよい。X^{1 7}は独立して、-Brであってもよい。X^{1 7}は独立して、-Iであってもよい。X^{1 8}は独立して、-Fであってもよい。X^{1 8}は独立して、-Clであってもよい。X^{1 8}は独立して、-Brであってもよい。X^{1 8}は独立して、-Iであってもよい。n 1 5は独立して、0であってもよい。n 1 5は独立して、1であってもよい。n 1 5は独立して、2であってもよい。n 1 5は独立して、3であってもよい。n 1 5は独立して、4であってもよい。n 1 6は独立して、0であってもよい。n 1 6は独立して、1であってもよい。n 1 6は独立して、2であってもよい。n 1 6は独立して、3であってもよい。n 1 6は独立して、4であってもよい。n 1 7は独立して、0であってもよい。n 1 7は独立して、1であってもよい。n 1 7は独立して、2であってもよい。n 1 7は独立して、3であってもよい。n 1 7は独立して、4であってもよい。v 1 5は独立して、0であってもよい。v 1 5は独立して、1であってもよい。v 1 5は独立して、2であってもよい。v 1 5は独立して、3であってもよい。v 1 5は独立して、4であってもよい。v 1 6は独立して、0であってもよい。v 1 6は独立して、1であってもよい。v 1 6は独立して、2であってもよい。v 1 6は独立して、3であってもよい。v 1 6は独立して、4であってもよい。m 1 5は独立して、1であってもよい。m 1 5は独立して、2であってもよい。m 1 6は独立して、1であってもよい。m 1 6は独立して、2であってもよい。m 1 7は独立して、1であってもよい。m 1 7は独立して、2であってもよい。

【0 4 4 3】

実施形態では、R^{1 5}は、水素である。実施形態では、R^{1 5}は、ハロゲンである。実施形態では、R^{1 5}は、-CX^{1 5}₃である。実施形態では、R^{1 5}は、-CHX^{1 5}₂である。実施形態では、R^{1 5}は、-CH₂X^{1 5}である。実施形態では、R^{1 5}は、-CNである。実施形態では、R^{1 5}は、-SO_{n 1 5}R^{1 5 A}R^{1 5 B}である。実施形態では、R^{1 5}は、-SO_{v 1 5}NR^{1 5 A}R^{1 5 B}である。実施形態では、R^{1 5}は、-NHNRR^{1 5 A}R^{1 5 B}である。実施形態では、R^{1 5}は、-ONRR^{1 5 A}R^{1 5 B}である。実施形態では、R^{1 5}は、-NHC(=O)NHNRR^{1 5 A}R^{1 5 B}である。実施形態では、R^{1 5}は、-NHC(O)NRR^{1 5 A}R^{1 5 B}である。実施形態では、R^{1 5}は、-N(O)_{m 1 5}である。実施形態では、R^{1 5}は、-NR^{1 5 A}R^{1 5 B}である。実施形態では、R^{1 5}は、-C(O)R^{1 5 C}である。実施形態では、R^{1 5}は、-C(O)-OR^{1 5 C}である。実施形態では、R^{1 5}は、-C(O)NR^{1 5 A}R^{1 5 B}である。実施形態では、R^{1 5}は、-OR^{1 5 D}である。実施形態では、R^{1 5}は、-NR^{1 5 A}SO₂

10

20

30

40

50

ある。実施形態では、 R^{15D} は、 $-\text{CONH}_2$ である。実施形態では、 R^{15D} は、 $-\text{CHX}_2$ である。実施形態では、 R^{15D} は、 $-\text{CH}_2\text{X}$ である。実施形態では、 R^{15D} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{15D} は、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{15D} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{15D} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{15D} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{15D} は、非置換のtert-ブチルである。

【0448】

実施形態では、 R^{15} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{15}_3$ 、 $-\text{CHX}^{15}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^{15}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})-\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{15}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{15}_2$ 、 R^{72} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{72} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{72} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{72} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{72} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{72} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{15} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{15} は、Fである。

10

【0449】

R^{72} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{72}_3$ 、 $-\text{CHX}^{72}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^{72}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})-\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{72}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{72}_2$ 、 R^{73} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{73} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{73} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{73} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{73} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{73} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{72} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{72} は、Fである。

20

【0450】

R^{73} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{73}_3$ 、 $-\text{CHX}^{73}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^{73}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})-\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{73}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{73}_2$ 、 R^{74} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{74} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{74} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{74} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{74} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{74} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{73} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{73} は、Fである。

30

【0451】

実施形態では、 R^{15A} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{15A}_3$ 、 $-\text{CHX}^{15A}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^{15A}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})-\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{15A}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{15A}_2$ 、 R^{72A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{72A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{72A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{72A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{72A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{72A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{15A} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{15A} は、Fである。

40

【0452】

50

$R^{7\ 2\ A}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{7\ 2\ A}_3$ 、 $-CHX^{7\ 2\ A}_2$ 、 $-OCH_2X^{7\ 2\ A}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{7\ 2\ A}_3$ 、 $-OCHX^{7\ 2\ A}_2$ 、 $R^{7\ 3\ A}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{7\ 3\ A}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{7\ 3\ A}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{7\ 3\ A}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{7\ 3\ A}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{7\ 3\ A}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 $X^{7\ 2\ A}$ は、ハロゲンである。実施形態では、 $X^{7\ 2\ A}$ は、Fである。

10

【0453】

$R^{7\ 3\ A}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{7\ 3\ A}_3$ 、 $-CHX^{7\ 3\ A}_2$ 、 $-OCH_2X^{7\ 3\ A}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{7\ 3\ A}_3$ 、 $-OCHX^{7\ 3\ A}_2$ 、 $R^{7\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{7\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{7\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{7\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{7\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{7\ 4\ A}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 $X^{7\ 3\ A}$ は、ハロゲンである。実施形態では、 $X^{7\ 3\ A}$ は、Fである。

20

【0454】

実施形態では、 $R^{1\ 5\ B}$ は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{1\ 5\ B}_3$ 、 $-CHX^{1\ 5\ B}_2$ 、 $-OCH_2X^{1\ 5\ B}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{1\ 5\ B}_3$ 、 $-OCHX^{1\ 5\ B}_2$ 、 $R^{7\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{7\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{7\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{7\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{7\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{7\ 2\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 $X^{1\ 5\ B}$ は、ハロゲンである。実施形態では、 $X^{1\ 5\ B}$ は、Fである。

30

【0455】

$R^{7\ 2\ B}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{7\ 2\ B}_3$ 、 $-CHX^{7\ 2\ B}_2$ 、 $-OCH_2X^{7\ 2\ B}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{7\ 2\ B}_3$ 、 $-OCHX^{7\ 2\ B}_2$ 、 $R^{7\ 3\ B}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{7\ 3\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{7\ 3\ B}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{7\ 3\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{7\ 3\ B}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{7\ 3\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 $X^{7\ 2\ B}$ は、ハロゲンである。実施形態では、 $X^{7\ 2\ B}$ は、Fである。

40

【0456】

$R^{7\ 3\ B}$ は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{7\ 3\ B}_3$ 、 $-CHX^{7\ 3\ B}_2$ 、 $-OCH_2X^{7\ 3\ B}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{7\ 3\ B}_3$ 、 $-OCHX^{7\ 3\ B}_2$ 、 $R^{7\ 4\ B}$ —置換もしくは非置換のアルキル、 $R^{7\ 4\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 $R^{7\ 4\ B}$ —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 $R^{7\ 4\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 $R^{7\ 4\ B}$ —置換もしくは非置換のアリール、または $R^{7\ 4\ B}$ —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 $X^{7\ 3\ B}$ は、ハロゲンである。実施形態では、 $X^{7\ 3\ B}$ は、Fである。

50

4^B -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{74B} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{74B} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{74B} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{73B} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{73B} は、Fである。

【0457】

実施形態では、 R^{15C} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{15C}_3$ 、 $-CHX^{15C}_2$ 、 $-OCH_2X^{15C}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{15C}_3$ 、 $-OCHX^{15C}_2$ 、 R^{72C} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{72C} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{72C} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{72C} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{72C} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{72C} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{15C} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{15C} は、Fである。

10

【0458】

R^{72C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{72C}_3$ 、 $-CHX^{72C}_2$ 、 $-OCH_2X^{72C}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{72C}_3$ 、 $-OCHX^{72C}_2$ 、 R^{73C} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{73C} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{73C} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{73C} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{73C} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{73C} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{72C} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{72C} は、Fである。

20

【0459】

R^{73C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{73C}_3$ 、 $-CHX^{73C}_2$ 、 $-OCH_2X^{73C}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{73C}_3$ 、 $-OCHX^{73C}_2$ 、 R^{74C} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{74C} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{74C} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{74C} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{74C} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{74C} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{73C} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{73C} は、Fである。

30

【0460】

実施形態では、 R^{15D} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{15D}_3$ 、 $-CHX^{15D}_2$ 、 $-OCH_2X^{15D}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{15D}_3$ 、 $-OCHX^{15D}_2$ 、 R^{72D} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{72D} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{72D} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{72D} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{72D} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{72D} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{15D} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{15D} は、Fである。

40

【0461】

R^{72D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{72D}_3$ 、 $-CHX^{72D}_2$ 、 $-OC$

50

H_2X^{72D} 、 $-OCHX^{72D}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{72D}_3$ 、 $-OCHX^{72D}_2$ 、 R^{73D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{73D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{73D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{73D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{73D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{73D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{72D} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{72D} は、Fである。

【0462】

R^{73D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{73D}_3$ 、 $-CHX^{73D}_2$ 、 $-OCH_2X^{73D}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{73D}_3$ 、 $-OCHX^{73D}_2$ 、 R^{74D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{74D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{74D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{74D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{74D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{74D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{73D} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{73D} は、Fである。

【0463】

実施形態では、 R^{16} は、水素である。実施形態では、 R^{16} は、ハロゲンである。実施形態では、 R^{16} は、 CX^{16}_3 である。実施形態では、 R^{16} は、 $-CHX^{16}_2$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-CH_2X^{16}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-SO_{n16}R^{16D}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-SO_{v16}NR^{16A}R^{16B}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-NHN R^{16A}R^{16B}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-ONR^{16A}R^{16B}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-NHC=(O)NHN R^{16A}R^{16B}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-NHC(O)NR^{16A}R^{16B}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-N(O)_{m16}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-NR^{16A}R^{16B}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-C(O)R^{16C}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-C(O)-OR^{16C}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-C(O)NR^{16A}R^{16B}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-OR^{16D}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-NR^{16A}SO_2R^{16D}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-NR^{16A}C(O)R^{16C}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-NR^{16A}C(O)OR^{16C}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-NR^{16A}OR^{16C}$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-OCX^{16}_3$ である。実施形態では、 R^{16} は、 $-OCHX^{16}_2$ である。実施形態では、 R^{16} は、置換もしくは非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{16} は、置換もしくは非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{16} は、置換もしくは非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^{16} は、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{16} は、置換もしくは非置換のアリールである。実施形態では、 R^{16} は、置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{16} は、置換アルキルである。実施形態では、 R^{16} は、置換ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{16} は、置換シクロアルキルである。実施形態では、 R^{16} は、置換ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{16} は、置換アリールである。実施形態では、 R^{16} は、置換ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{16} は、非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{16} は、非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{16} は、非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^{16} は、非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{16} は、非置換のアリールである。実施形態では、 R^{16} は、非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{16} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{16} は、非置

10

20

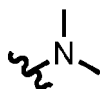
30

40

50

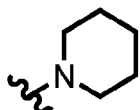
換のエチルである。実施形態では、 R^{16} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{16} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{16} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{16} は、非置換のtert-ブチルである。実施形態では、 R^{16} は、

【化77】



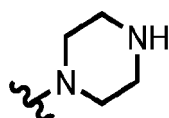
である。実施形態では、 R^{16} は、

【化78】



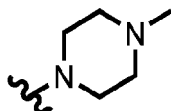
である。実施形態では、 R^{16} は、

【化79】



である。実施形態では、 R^{16} は、

【化80】



である。

【0464】

実施形態では、 R^{16A} は、水素である。実施形態では、 R^{16A} は、 $-CX_3$ である。実施形態では、 R^{16A} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{16A} は、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{16A} は、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{16A} は、 $-CHX_2$ である。実施形態では、 R^{16A} は、 $-CH_2X$ である。実施形態では、 R^{16A} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{16A} は、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{16A} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{16A} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{16A} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{16A} は、非置換のtert-ブチルである。

【0465】

実施形態では、 R^{16B} は、水素である。実施形態では、 R^{16B} は、 $-CX_3$ である。実施形態では、 R^{16B} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{16B} は、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{16B} は、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{16B} は、 $-CHX_2$ である。実施形態では、 R^{16B} は、 $-CH_2X$ である。実施形態では、 R^{16B} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{16B} は、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{16B} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{16B} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{16B} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{16B} は、非置換のtert-ブチルである。

【0466】

実施形態では、 R^{16C} は、水素である。実施形態では、 R^{16C} は、 $-CX_3$ である。実施形態では、 R^{16C} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{16C} は、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{16C} は、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{16C} は、 $-CHX_2$ である。実施形態では、 R^{16C} は、 $-CH_2X$ である。実施形態では、 R^{16C} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{16C} は、非置換のエチルである。実施

10

20

30

40

50

形態では、 R^{16C} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{16C} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{16C} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{16C} は、非置換のtert-ブチルである。

【0467】

実施形態では、 R^{16D} は、水素である。実施形態では、 R^{16D} は、 $-CX_3$ である。実施形態では、 R^{16D} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{16D} は、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{16D} は、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{16D} は、 $-CHX_2$ である。実施形態では、 R^{16D} は、 $-CH_2X$ である。実施形態では、 R^{16D} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{16D} は、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{16D} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{16D} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{16D} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{16D} は、非置換のtert-ブチルである。

10

【0468】

実施形態では、 R^{16} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{16}_3$ 、 $-CHX^{16}_2$ 、 $-OCH_2X^{16}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{16}_3$ 、 $-OCHX^{16}_2$ 、 R^{75} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{75} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{75} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{75} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{75} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{75} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{16} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{16} は、Fである。

20

【0469】

R^{75} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{75}_3$ 、 $-CHX^{75}_2$ 、 $-OCH_2X^{75}$ 、 $-OCHX^{75}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{75}_3$ 、 $-OCHX^{75}_2$ 、 R^{76} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{76} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{76} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{76} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{76} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{76} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{75} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{75} は、Fである。

30

【0470】

R^{76} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{76}_3$ 、 $-CHX^{76}_2$ 、 $-OCH_2X^{76}$ 、 $-OCHX^{76}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{76}_3$ 、 $-OCHX^{76}_2$ 、 R^{77} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{77} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{77} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{77} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{77} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{77} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{76} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{76} は、Fである。

40

【0471】

実施形態では、 R^{16A} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{16A}_3$ 、 $-CHX^{16A}_2$ 、 $-OCH_2X^{16A}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{16A}_3$ 、 $-OCHX$

50

R^{16A}_2 、 R^{75A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{75A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{75A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{75A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{75A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{75A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{16A} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{16A} は、Fである。

【0472】

R^{75A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{75A}_3$ 、 $-CHX^{75A}_2$ 、 $-OCH_2X^{75A}$ 、 $-OCHX^{75A}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{75A}_3$ 、 $-OCHX^{75A}_2$ 、 R^{76A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{76A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{76A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{76A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{76A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{76A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{75A} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{75A} は、Fである。

10

【0473】

R^{76A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{76A}_3$ 、 $-CHX^{76A}_2$ 、 $-OCH_2X^{76A}$ 、 $-OCHX^{76A}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{76A}_3$ 、 $-OCHX^{76A}_2$ 、 R^{77A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{77A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{77A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{77A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{77A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{77A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{76A} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{76A} は、Fである。

20

【0474】

実施形態では、 R^{16B} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{16B}_3$ 、 $-CHX^{16B}_2$ 、 $-OCH_2X^{16B}$ 、 $-OCHX^{16B}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{16B}_3$ 、 $-OCHX^{16B}_2$ 、 R^{75B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{75B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{75B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{75B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{75B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{75B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{16B} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{16B} は、Fである。

30

【0475】

R^{75B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{75B}_3$ 、 $-CHX^{75B}_2$ 、 $-OCH_2X^{75B}$ 、 $-OCHX^{75B}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{75B}_3$ 、 $-OCHX^{75B}_2$ 、 R^{76B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{76B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{76B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{76B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{76B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{76B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{75B} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{75B} は、Fである。

40

【0476】

50

R^{76B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{76B}_3$ 、 $-CHX^{76B}_2$ 、 $-OCH_2X^{76B}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{76B}_3$ 、 $-OCHX^{76B}_2$ 、 R^{77B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{77B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{77B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{77B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{77B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{77B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{76B} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{76B} は、Fである。

10

【0477】

実施形態では、 R^{16C} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{16C}_3$ 、 $-CHX^{16C}_2$ 、 $-OCH_2X^{16C}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{16C}_3$ 、 $-OCHX^{16C}_2$ 、 R^{75C} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{75C} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{75C} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{75C} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{75C} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{75C} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{16C} は、ハロゲンである。

20

【0478】

R^{75C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{75C}_3$ 、 $-CHX^{75C}_2$ 、 $-OCH_2X^{75C}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{75C}_3$ 、 $-OCHX^{75C}_2$ 、 R^{76C} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{76C} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{76C} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{76C} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{76C} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{76C} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{75C} は、ハロゲンである。

30

【0479】

R^{76C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{76C}_3$ 、 $-CHX^{76C}_2$ 、 $-OCH_2X^{76C}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{76C}_3$ 、 $-OCHX^{76C}_2$ 、 R^{77C} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{77C} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{77C} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{77C} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{77C} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{77C} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{76C} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{76C} は、Fである。

40

【0480】

実施形態では、 R^{16D} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{16D}_3$ 、 $-CHX^{16D}_2$ 、 $-OCH_2X^{16D}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{16D}_3$ 、 $-OCHX^{16D}_2$ 、 R^{75D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{75D} —置換もしくは非置換の

50

ヘテロアルキル、 R^{75D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{75D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{75D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{75D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{16D} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{16D} は、Fである。

【0481】

R^{75D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{75D}_3$ 、 $-CHX^{75D}_2$ 、 $-OCH_2X^{75D}$ 、 $-OCHX^{75D}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{75D}_3$ 、 $-OCHX^{75D}_2$ 、 R^{76D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{76D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{76D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{76D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{76D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{76D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{75D} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{75D} は、Fである。

10

【0482】

R^{76D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{76D}_3$ 、 $-CHX^{76D}_2$ 、 $-OCH_2X^{76D}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{76D}_3$ 、 $-OCHX^{76D}_2$ 、 R^{77D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{77D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{77D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{77D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{77D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{77D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{76D} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{76D} は、Fである。

20

【0483】

実施形態では、 R^{17} は、水素である。実施形態では、 R^{17} は、ハロゲンである。実施形態では、 R^{17} は、 $-CX^{17}_3$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-CHX^{17}_2$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-CH_2X^{17}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-SO_{n17}R^{17D}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-SO_{v17}NR^{17A}R^{17B}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-NHNR^{17A}R^{17B}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-ONR^{17A}R^{17B}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-NHC=(O)NHNR^{17A}R^{17B}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-NHC(O)NR^{17A}R^{17B}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-N(O)_{m17}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-NR^{17A}R^{17B}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-C(O)R^{17C}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-C(O)-OR^{17C}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-C(O)NR^{17A}R^{17B}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-OR^{17D}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-NR^{17A}SO_2R^{17D}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-NR^{17A}C(O)R^{17C}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-NR^{17A}C(O)OR^{17C}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-NR^{17A}OR^{17C}$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-OCX^{17}_3$ である。実施形態では、 R^{17} は、 $-OCHX^{17}_2$ である。実施形態では、 R^{17} は、置換もしくは非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{17} は、置換もしくは非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{17} は、置換もしくは非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^{17} は、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{17} は、置換もしくは非置換のアリールである。実施形態では、 R^{17} は、置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{17} は、置換アルキルである。実施形態では、 R^{17} は、置換ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{17} は、置換シクロアルキルである。実施形態では、 R^{17} は、置換ヘテロシクロアルキルである。実施

30

40

50

形態では、 R^{17} は、置換アリールである。実施形態では、 R^{17} は、置換ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{17} は、非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{17} は、非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{17} は、非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^{17} は、非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{17} は、非置換のアリールである。実施形態では、 R^{17} は、非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{17} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{17} は、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{17} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{17} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{17} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{17} は、非置換のtert-ブチルである。

【0484】

10

実施形態では、 R^{17A} は、水素である。実施形態では、 R^{17A} は、 $-CX_3$ である。実施形態では、 R^{17A} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{17A} は、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{17A} は、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{17A} は、 $-CHX_2$ である。実施形態では、 R^{17A} は、 $-CH_2X$ である。実施形態では、 R^{17A} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{17A} は、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{17A} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{17A} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{17A} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{17A} は、非置換のtert-ブチルである。

【0485】

20

実施形態では、 R^{17B} は、水素である。実施形態では、 R^{17B} は、 $-CX_3$ である。実施形態では、 R^{17B} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{17B} は、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{17B} は、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{17B} は、 $-CHX_2$ である。実施形態では、 R^{17B} は、 $-CH_2X$ である。実施形態では、 R^{17B} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{17B} は、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{17B} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{17B} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{17B} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{17B} は、非置換のtert-ブチルである。

【0486】

30

実施形態では、 R^{17C} は、水素である。実施形態では、 R^{17C} は、 $-CX_3$ である。実施形態では、 R^{17C} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{17C} は、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{17C} は、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{17C} は、 $-CHX_2$ である。実施形態では、 R^{17C} は、 $-CH_2X$ である。実施形態では、 R^{17C} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{17C} は、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{17C} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{17C} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{17C} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{17C} は、非置換のtert-ブチルである。

【0487】

40

実施形態では、 R^{17D} は、水素である。実施形態では、 R^{17D} は、 $-CX_3$ である。実施形態では、 R^{17D} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{17D} は、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{17D} は、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{17D} は、 $-CHX_2$ である。実施形態では、 R^{17D} は、 $-CH_2X$ である。実施形態では、 R^{17D} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{17D} は、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{17D} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{17D} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{17D} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{17D} は、非置換のtert-ブチルである。

【0488】

実施形態では、 R^{17} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{17}_3$ 、 $-CHX^{17}_2$ 、 $-OCH_2X^{17}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NH_2SO_2H$ 、 $-NHC=$

50

(O)H、 $-\text{NHC}(\text{O})-\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{17}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{17}_2$ 、 R^{78} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{78} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{78} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{78} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{78} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{78} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{17} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{17} は、Fである。

【0489】

R^{78} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{78}_3$ 、 $-\text{CHX}^{78}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^{78}$ 、 $-\text{OCHX}^{78}_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})-\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{78}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{78}_2$ 、 R^{79} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{79} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{79} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{79} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{79} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{79} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{78} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{78} は、Fである。

10

【0490】

R^{79} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{79}_3$ 、 $-\text{CHX}^{79}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^{79}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})-\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{79}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{79}_2$ 、 R^{80} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{80} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{80} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{80} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{80} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{80} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{79} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{79} は、Fである。

20

【0491】

実施形態では、 R^{17A} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{17A}_3$ 、 $-\text{CHX}^{17A}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^{17A}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})-\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{17A}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{17A}_2$ 、 R^{78A} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{78A} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{78A} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{78A} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{78A} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{78A} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{17A} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{17A} は、Fである。

30

【0492】

R^{78A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CX}^{78A}_3$ 、 $-\text{CHX}^{78A}_2$ 、 $-\text{OCH}_2\text{X}^{78A}$ 、 $-\text{OCHX}^{78A}_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})-\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCX}^{78A}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{78A}_2$ 、 R^{79A} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{79A} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{79A} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{79A} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{79A} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{79A} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{78A} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{78A} は、Fである。

40

【0493】

50

R^{79A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{79A}_3$ 、 $-CHX^{79A}_2$ 、 $-OCH_2X^{79A}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{79A}_3$ 、 $-OCHX^{79A}_2$ 、 R^{80A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{80A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{80A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{80A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{80A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{80A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{79A} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{79A} は、Fである。

10

【0494】

実施形態では、 R^{17B} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{17B}_3$ 、 $-CHX^{17B}_2$ 、 $-OCH_2X^{17B}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{17B}_3$ 、 $-OCHX^{17B}_2$ 、 R^{78B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{78B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{78B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{78B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{78B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{78B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{17B} は、ハロゲンである。

20

【0495】

R^{78B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{78B}_3$ 、 $-CHX^{78B}_2$ 、 $-OCH_2X^{78B}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{78B}_3$ 、 $-OCHX^{78B}_2$ 、 R^{79B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{79B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{79B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{79B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{79B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{79B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{78B} は、ハロゲンである。

30

【0496】

R^{79B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{79B}_3$ 、 $-CHX^{79B}_2$ 、 $-OCH_2X^{79B}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{79B}_3$ 、 $-OCHX^{79B}_2$ 、 R^{80B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{80B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{80B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{80B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{80B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{80B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{79B} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{79B} は、Fである。

40

【0497】

実施形態では、 R^{17C} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{17C}_3$ 、 $-CHX^{17C}_2$ 、 $-OCH_2X^{17C}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{17C}_3$ 、 $-OCHX^{17C}_2$ 、 R^{78C} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{78C} —置換もしくは非置換の

50

ヘテロアルキル、 R^{78C} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{78C} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{78C} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{78C} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{17C} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{17C} は、Fである。

【0498】

R^{78C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{78C}_3$ 、 $-CHX^{78C}_2$ 、 $-OCH_2X^{78C}$ 、 $-OCHX^{78C}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{78C}_3$ 、 $-OCHX^{78C}_2$ 、 R^{79C} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{79C} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{79C} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{79C} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{79C} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{79C} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{78C} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{78C} は、Fである。

10

【0499】

R^{79C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{79C}_3$ 、 $-CHX^{79C}_2$ 、 $-OCH_2X^{79C}$ 、 $-OCHX^{79C}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{79C}_3$ 、 $-OCHX^{79C}_2$ 、 R^{80C} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{80C} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{80C} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{80C} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{80C} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{80C} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{79C} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{79C} は、Fである。

20

【0500】

実施形態では、 R^{17D} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{17D}_3$ 、 $-CHX^{17D}_2$ 、 $-OCH_2X^{17D}$ 、 $-OCHX^{17D}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{17D}_3$ 、 $-OCHX^{17D}_2$ 、 R^{78D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{78D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{78D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{78D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{78D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{78D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{17D} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{17D} は、Fである。

30

【0501】

R^{78D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{78D}_3$ 、 $-CHX^{78D}_2$ 、 $-OCH_2X^{78D}$ 、 $-OCHX^{78D}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{78D}_3$ 、 $-OCHX^{78D}_2$ 、 R^{79D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{79D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{79D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{79D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{79D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{79D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{78D} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{78D} は、Fである。

40

【0502】

R^{79D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{79D}_3$ 、 $-CHX^{79D}_2$ 、 $-OCH_2X^{79D}$ 、 $-OCHX^{79D}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{79D}_3$ 、 $-OCHX^{79D}_2$ 、 R^{80D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{80D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{80D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{80D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{80D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{80D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{79D} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{79D} は、Fである。

50

H_2X^{79D} 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{79D}_3$ 、 $-OCHX^{79D}_2$ 、 R^{80D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{80D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{80D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{80D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{80D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{80D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{79D} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{79D} は、Fである。

【0503】

実施形態では、 R^{18} は、水素である。実施形態では、 R^{18} は、ハロゲンである。実施形態では、 R^{18} は、 CX^{18}_3 である。実施形態では、 R^{18} は、 $-CHX^{18}_2$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-SO_{n18}R^{18D}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-SO_{v18}NR^{18A}R^{18B}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-NHNR^{18A}R^{18B}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-ONR^{18A}R^{18B}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-NHC=(O)NHNR^{18A}R^{18B}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-NHC(O)NR^{18A}R^{18B}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-N(O)_{m18}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-NR^{18A}R^{18B}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-C(O)R^{18C}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-C(O)-OR^{18C}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-C(O)NR^{18A}R^{18B}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-OR^{18D}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-NR^{18A}SO_2R^{18D}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-NR^{18A}C(O)R^{18C}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-NR^{18A}C(O)OR^{18C}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-NR^{18A}OR^{18C}$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-OCX^{18}_3$ である。実施形態では、 R^{18} は、 $-OCHX^{18}_2$ である。実施形態では、 R^{18} は、置換もしくは非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{18} は、置換もしくは非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{18} は、置換もしくは非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^{18} は、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{18} は、置換もしくは非置換のアリールである。実施形態では、 R^{18} は、置換もしくは非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{18} は、置換アルキルである。実施形態では、 R^{18} は、置換ヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{18} は、置換シクロアルキルである。実施形態では、 R^{18} は、置換ヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{18} は、置換アリールである。実施形態では、 R^{18} は、置換ヘテロアリールである。実施形態では、 R^{18} は、非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{18} は、非置換のヘテロアルキルである。実施形態では、 R^{18} は、非置換のシクロアルキルである。実施形態では、 R^{18} は、非置換のヘテロシクロアルキルである。実施形態では、 R^{18} は、非置換のアリールである。実施形態では、 R^{18} は、非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{18} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{18} は、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{18} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{18} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{18} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{18} は、非置換のtert-ブチルである。

【0504】

実施形態では、 R^{18A} は、水素である。実施形態では、 R^{18A} は、 $-CX_3$ である。実施形態では、 R^{18A} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{18A} は、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{18A} は、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{18A} は、 $-CHX_2$ である。実施形態では、 R^{18A} は、 $-CH_2X$ である。実施形態では、 R^{18A} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{18A} は、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{18A} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{18A} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{18A} は、非置換のブチルである。実施形態では、

、 R^{18A} は、非置換のtert-ブチルである。

【0505】

実施形態では、 R^{18B} は、水素である。実施形態では、 R^{18B} は、 $-CX_3$ である。実施形態では、 R^{18B} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{18B} は、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{18B} は、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{18B} は、 $-CHX_2$ である。実施形態では、 R^{18B} は、 $-CH_2X$ である。実施形態では、 R^{18B} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{18B} は、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{18B} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{18B} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{18B} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{18B} は、非置換のtert-ブチルである。

10

【0506】

実施形態では、 R^{18C} は、水素である。実施形態では、 R^{18C} は、 $-CX_3$ である。実施形態では、 R^{18C} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{18C} は、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{18C} は、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{18C} は、 $-CHX_2$ である。実施形態では、 R^{18C} は、 $-CH_2X$ である。実施形態では、 R^{18C} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{18C} は、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{18C} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{18C} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{18C} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{18C} は、非置換のtert-ブチルである。

20

【0507】

実施形態では、 R^{18D} は、水素である。実施形態では、 R^{18D} は、 $-CX_3$ である。実施形態では、 R^{18D} は、 $-CN$ である。実施形態では、 R^{18D} は、 $-COOH$ である。実施形態では、 R^{18D} は、 $-CONH_2$ である。実施形態では、 R^{18D} は、 $-CHX_2$ である。実施形態では、 R^{18D} は、 $-CH_2X$ である。実施形態では、 R^{18D} は、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{18D} は、非置換のエチルである。実施形態では、 R^{18D} は、非置換のプロピルである。実施形態では、 R^{18D} は、非置換のイソプロピルである。実施形態では、 R^{18D} は、非置換のブチルである。実施形態では、 R^{18D} は、非置換のtert-ブチルである。

【0508】

実施形態では、 R^{18} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{18}_3$ 、 $-CHX^{18}_2$ 、 $-OCH_2X^{18}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{18}_3$ 、 $-OCHX^{18}_2$ 、 R^{81} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{81} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{81} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{81} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{81} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{81} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{18} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{18} は、Fである。

30

【0509】

R^{81} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{81}_3$ 、 $-CHX^{81}_2$ 、 $-OCH_2X^{81}$ 、 $-OCHX^{81}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NH SO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{81}_3$ 、 $-OCHX^{81}_2$ 、 R^{82} -置換もしくは非置換のアルキル、 R^{82} -置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{82} -置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{82} -置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{82} -置換もしくは非置換のアリール、または R^{82} -置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{81} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{81} は、Fである。

40

50

【0510】

R^{82} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{82}_3$ 、 $-CHX^{82}_2$ 、 $-OCH_2X^{82}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{82}_3$ 、 $-OCHX^{82}_2$ 、 R^{83} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{83} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{83} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{83} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{83} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{83} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{82} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{82} は、Fである。

10

【0511】

実施形態では、 R^{18A} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{18A}_3$ 、 $-CHX^{18A}_2$ 、 $-OCH_2X^{18A}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{18A}_3$ 、 $-OCHX^{18A}_2$ 、 R^{81A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{81A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{81A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{81A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{81A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{81A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{18A} は、ハロゲンである。

20

【0512】

R^{81A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{81A}_3$ 、 $-CHX^{81A}_2$ 、 $-OCH_2X^{81A}$ 、 $-OCHX^{81A}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{81A}_3$ 、 $-OCHX^{81A}_2$ 、 R^{82A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{82A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{82A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{82A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{82A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{82A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{81A} は、ハロゲンである。

30

【0513】

R^{82A} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{82A}_3$ 、 $-CHX^{82A}_2$ 、 $-OCH_2X^{82A}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{82A}_3$ 、 $-OCHX^{82A}_2$ 、 R^{83A} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{83A} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{83A} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{83A} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{83A} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{83A} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{82A} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{82A} は、Fである。

40

【0514】

実施形態では、 R^{18B} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{18B}_3$ 、 $-CHX^{18B}_2$ 、 $-OCH_2X^{18B}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{18B}_3$ 、 $-OCHX^{18B}_2$ 、 R^{81B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{81B} —置換もしくは非置換の

50

ヘテロアルキル、 R^{81B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{81B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{81B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{81B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{18B} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{18B} は、Fである。

【0515】

R^{81B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{81B}_3$ 、 $-CHX^{81B}_2$ 、 $-OCH_2X^{81B}$ 、 $-OCHX^{81B}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{81B}_3$ 、 $-OCHX^{81B}_2$ 、 R^{82B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{82B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{82B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{82B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{82B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{82B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{81B} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{81B} は、Fである。

10

【0516】

R^{82B} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{82B}_3$ 、 $-CHX^{82B}_2$ 、 $-OCH_2X^{82B}$ 、 $-OCHX^{82B}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{82B}_3$ 、 $-OCHX^{82B}_2$ 、 R^{83B} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{83B} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{83B} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{83B} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{83B} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{83B} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{82B} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{82B} は、Fである。

20

【0517】

実施形態では、 R^{18C} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{18C}_3$ 、 $-CHX^{18C}_2$ 、 $-OCH_2X^{18C}$ 、 $-OCHX^{18C}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{18C}_3$ 、 $-OCHX^{18C}_2$ 、 R^{81C} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{81C} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{81C} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{81C} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{81C} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{81C} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{18C} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{18C} は、Fである。

30

【0518】

R^{81C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{81C}_3$ 、 $-CHX^{81C}_2$ 、 $-OCH_2X^{81C}$ 、 $-OCHX^{81C}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{81C}_3$ 、 $-OCHX^{81C}_2$ 、 R^{82C} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{82C} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{82C} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{82C} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{82C} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{82C} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{81C} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{81C} は、Fである。

40

【0519】

R^{82C} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{82C}_3$ 、 $-CHX^{82C}_2$ 、 $-OCH_2X^{82C}$ 、 $-OCHX^{82C}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{82C}_3$ 、 $-OCHX^{82C}_2$ 、 R^{83C} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{83C} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{83C} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{83C} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{83C} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{83C} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{82C} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{82C} は、Fである。

50

H_2X^{82C} 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{82C}_3$ 、 $-OCHX^{82C}_2$ 、 R^{83C} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{83C} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{83C} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{83C} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{83C} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{83C} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{82C} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{82C} は、Fである。

【0520】

実施形態では、 R^{18D} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{18D}_3$ 、 $-CHX^{18D}_2$ 、 $-OCH_2X^{18D}$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{18D}_3$ 、 $-OCHX^{18D}_2$ 、 R^{81D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{81D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{81D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{81D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{81D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{81D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{18D} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{18D} は、Fである。

【0521】

R^{81D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{81D}_3$ 、 $-CHX^{81D}_2$ 、 $-OCH_2X^{81D}$ 、 $-OCHX^{81D}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{81D}_3$ 、 $-OCHX^{81D}_2$ 、 R^{82D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{82D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{82D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{82D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{82D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{82D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{81D} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{81D} は、Fである。

【0522】

R^{82D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-CX^{82D}_3$ 、 $-CHX^{82D}_2$ 、 $-OCH_2X^{82D}$ 、 $-OCHX^{82D}_2$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC=(O)NHNH_2$ 、 $-NHC=(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC=(O)H$ 、 $-NHC(O)-OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCX^{82D}_3$ 、 $-OCHX^{82D}_2$ 、 R^{83D} —置換もしくは非置換のアルキル、 R^{83D} —置換もしくは非置換のヘテロアルキル、 R^{83D} —置換もしくは非置換のシクロアルキル、 R^{83D} —置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、 R^{83D} —置換もしくは非置換のアリール、または R^{83D} —置換もしくは非置換のヘテロアリールである。 X^{82D} は、ハロゲンである。実施形態では、 X^{82D} は、Fである。

【0523】

R^{74} 、 R^{77} 、 R^{80} 、 R^{83} 、 R^{74A} 、 R^{77A} 、 R^{80A} 、 R^{83A} 、 R^{74B} 、 R^{77B} 、 R^{80B} 、 R^{83B} 、 R^{74C} 、 R^{77C} 、 R^{80C} 、 R^{83C} 、 R^{74D} 、 R^{77D} 、 R^{80D} 、及び R^{83D} は独立して、水素、オキソ、ハロゲン、 $-CCl_3$ 、 $-CBr_3$ 、 $-CF_3$ 、 $-CI_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-SO_4H$ 、 $-SO_2NH_2$ 、 $-NHNH_2$ 、 $-ONH_2$ 、 $-NHC(O)NHNH_2$ 、 $-NHC(O)NH_2$ 、 $-NHHSO_2H$ 、 $-NHC(O)H$ 、 $-NHC(O)OH$ 、 $-NHOH$ 、 $-OCCl_3$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCBr$

10

20

30

40

50

3 、 $-\text{OCI}_3$ 、 OCHCl_2 、 $-\text{OCHBr}_2$ 、 $-\text{OCHI}_2$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{74} 、 R^{77} 、 R^{80} 、 R^{83} 、 R^{74A} 、 R^{77A} 、 R^{80A} 、 R^{83A} 、 R^{74B} 、 R^{77B} 、 R^{80B} 、 R^{83B} 、 R^{74C} 、 R^{77C} 、 R^{80C} 、 R^{83C} 、 R^{74D} 、 R^{77D} 、 R^{80D} 、及び R^{83D} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換のアルキル、非置換のヘテロアルキル、非置換のシクロアルキル、非置換のヘテロシクロアルキル、非置換のアリール、または非置換のヘテロアリールである。実施形態では、 R^{74} 、 R^{77} 、 R^{80} 、 R^{83} 、 R^{74A} 、 R^{77A} 、 R^{80A} 、 R^{83A} 、 R^{74B} 、 R^{77B} 、 R^{80B} 、 R^{83B} 、 R^{74C} 、 R^{77C} 、 R^{80C} 、 R^{83C} 、 R^{74D} 、 R^{77D} 、 R^{80D} 、 R^{83D} 、及び R^{86} は独立して、オキソ、ハロゲン、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_4\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ 、 $-\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{ONH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NHNH}_2$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}\text{SO}_2\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})\text{OH}$ 、 $-\text{NHOH}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、非置換の C_1-C_8 アルキル、非置換の2～8員ヘテロアルキル、非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、非置換の3～6員ヘテロシクロアルキル、非置換のフェニル、または非置換の5～6員ヘテロアリールである。

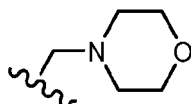
10

20

【0524】

実施形態では、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、及び R^{18} は、水素である。実施形態では、 R^{15} は、水素である。実施形態では、 R^{16} は、水素、 $-\text{CH}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{NR}^{16A}$ 、 R^{16B} 、または

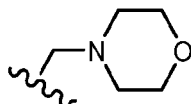
【化81】



である。実施形態では、 R^{17} は、水素である。実施形態では、 R^{16A} 及び R^{16B} は独立して、水素または非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{16A} 及び R^{16B} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{16A} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{16A} は独立して、非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{16B} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{16B} は独立して、非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{16A} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{16B} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{15} は、水素であり； R^{16} は、水素、 $-\text{CH}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{NR}^{16A}$ 、 R^{16B} 、または

30

【化82】



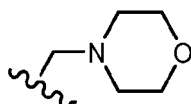
40

であり； R^{17} は、水素であり；及び R^{16A} 及び R^{16B} は独立して、水素または非置換のアルキルである。

【0525】

実施形態では、 R^{15} は、水素である。実施形態では、 R^{16} は、水素である。実施形態では、 R^{17} は、水素、 $-\text{CH}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{NR}^{17A}$ 、 R^{17B} 、または

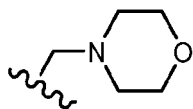
【化83】



50

である。実施形態では、 R^{17A} 、及び R^{17B} は独立して、水素または非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{17A} 、及び R^{17B} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{15} は、水素であり； R^{16} は、水素であり； R^{17} は、水素、 $-CH_3$ 、 $-CH_2NR^{17A}R^{17B}$ 、または

【化84】



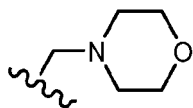
であり；及び R^{17A} 、及び R^{17B} は独立して、水素または非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{17A} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{17A} は独立して、非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{17B} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{17B} は独立して、非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{17A} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{17B} は独立して、非置換のメチルである。

10

【0526】

実施形態では、 R^{15} は、水素、 $-CH_3$ 、 $-CH_2NR^{15A}R^{15B}$ 、または

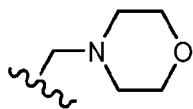
【化85】



である。実施形態では、 R^{16} は、水素である。実施形態では、 R^{17} は、水素である。実施形態では、 R^{15A} 、及び R^{15B} は独立して、水素または非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{15A} 、及び R^{15B} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{15A} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{15A} は独立して、非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{15B} は独立して、水素である。実施形態では、 R^{15B} は独立して、非置換のアルキルである。実施形態では、 R^{15A} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{15B} は独立して、非置換のメチルである。実施形態では、 R^{15} は、水素、 $-CH_3$ 、 $-CH_2NR^{15A}R^{15B}$ 、または

20

【化86】



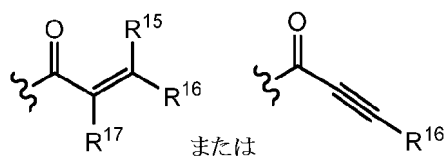
であり； R^{16} は、水素であり； R^{17} は、水素であり；及び R^{15A} 、及び R^{15B} は独立して、水素または非置換のアルキルである。

30

【0527】

実施形態では、Eは、

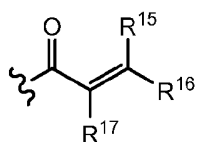
【化87】



40

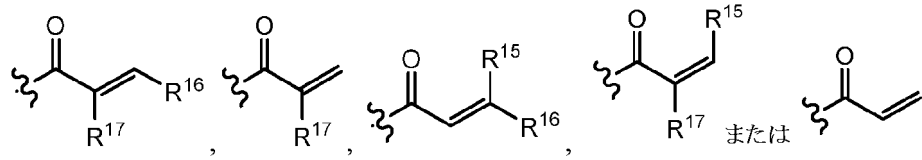
である。実施形態では、Eは、

【化88】



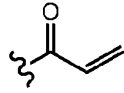
である。実施形態では、Eは、

【化 8 9】



である。実施形態では、Eは、

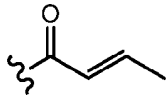
【化 9 0】



10

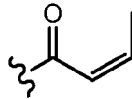
である。実施形態では、Eは、

【化 9 1】



である。実施形態では、Eは、

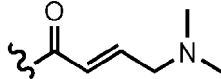
【化 9 2】



20

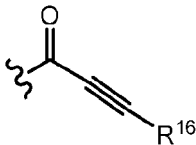
である。実施形態では、Eは、

【化 9 3】



である。実施形態では、Eは、

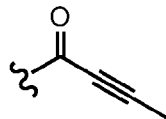
【化 9 4】



30

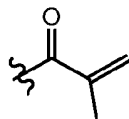
である。実施形態では、Eは、

【化 9 5】



である。実施形態では、Eは、

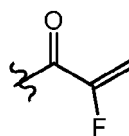
【化 9 6】



40

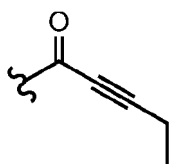
である。実施形態では、Eは、

【化 9 7】

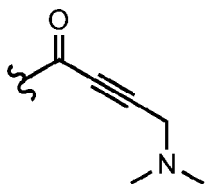


50

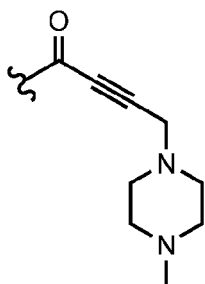
である。実施形態では、Eは、
【化98】



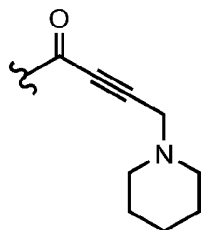
である。実施形態では、Eは、
【化99】



である。実施形態では、Eは、
【化100】



である。実施形態では、Eは、
【化101】

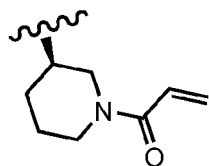


である。

【0528】

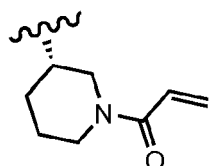
実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化102】



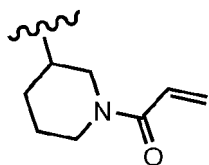
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化103】



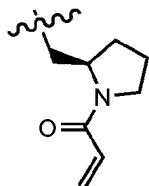
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 0 4】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、 $-CH_2CH_2NHCOCHCH_2$ である。
実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

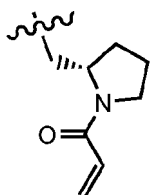
【化 1 0 5】



10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

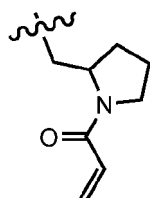
【化 1 0 6】



20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

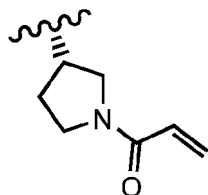
【化 1 0 7】



30

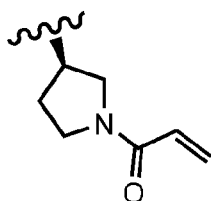
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 0 8】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

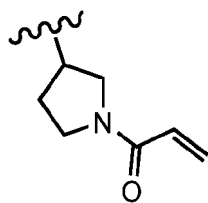
【化 1 0 9】



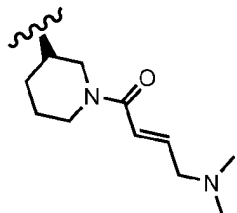
40

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 1 0】

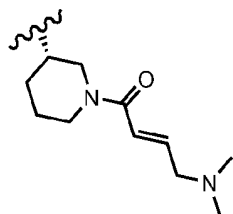


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 1 1 1】



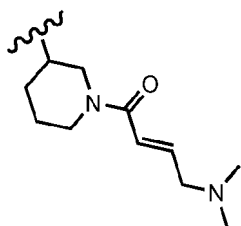
10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 1 1 2】



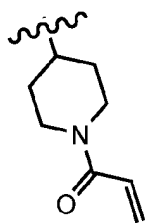
20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 1 1 3】



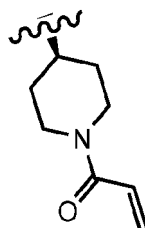
30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 1 1 4】



40

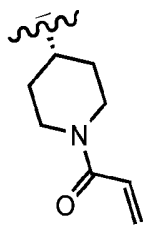
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 1 1 5】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

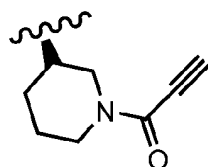
50

【化 1 1 6】



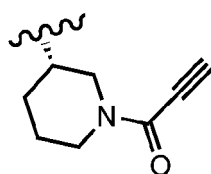
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、 $-CH_2CH_2NHCOCHCH_2N(CH_3)_2$ である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 1 7】



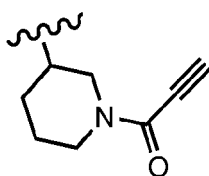
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 1 8】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 1 9】



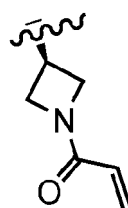
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 2 0】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 2 1】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

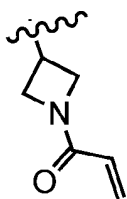
10

20

30

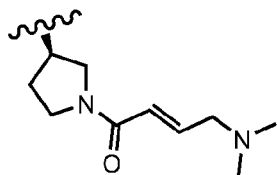
40

【化 1 2 2】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

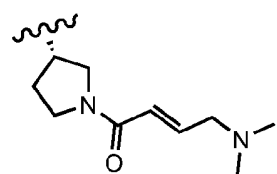
【化 1 2 3】



10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

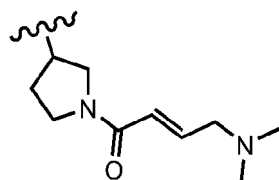
【化 1 2 4】



20

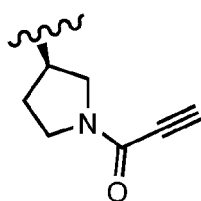
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 2 5】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

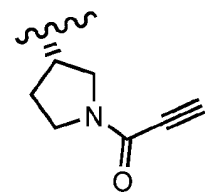
【化 1 2 6】



30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

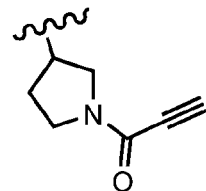
【化 1 2 7】



40

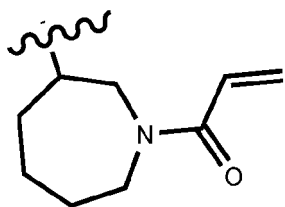
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 2 8】

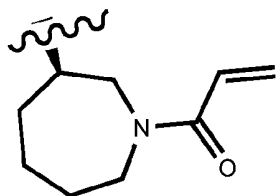


50

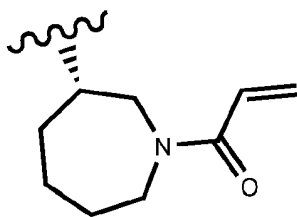
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化129】



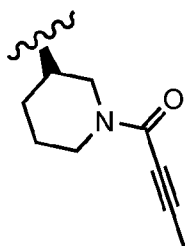
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化130】



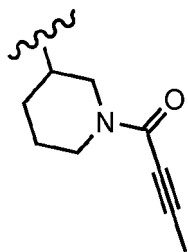
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化131】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化132】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化133】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

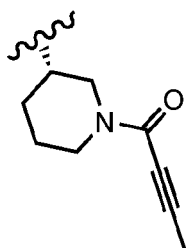
10

20

30

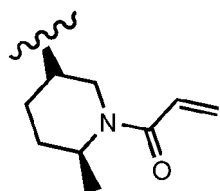
40

【化 1 3 4】



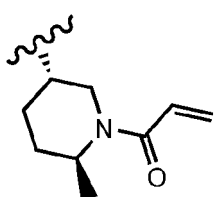
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 3 5】



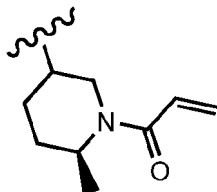
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 3 6】



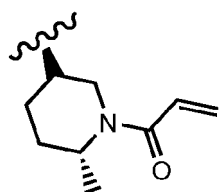
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 3 7】



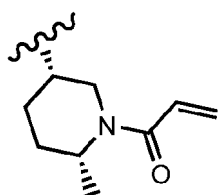
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 3 8】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 3 9】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

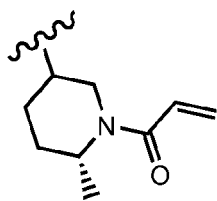
10

20

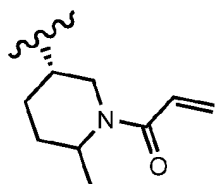
30

40

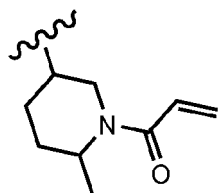
【化 1 4 0】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

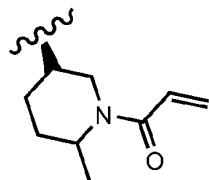
【化 1 4 1】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

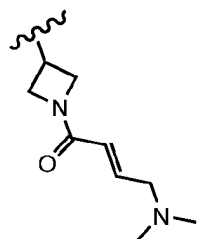
【化 1 4 2】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

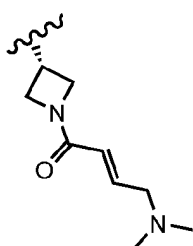
【化 1 4 3】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 4 4】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 4 5】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

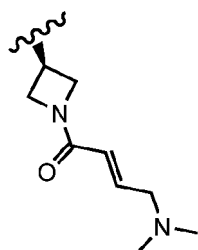
10

20

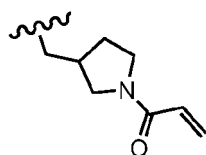
30

40

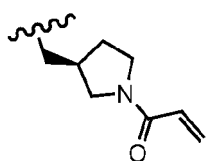
【化 1 4 6】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

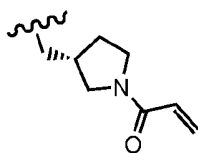
【化 1 4 7】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

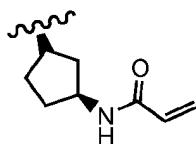
【化 1 4 8】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

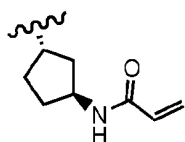
【化 1 4 9】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

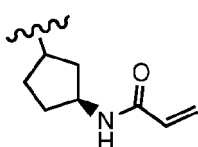
【化 1 5 0】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 5 1】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 5 2】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

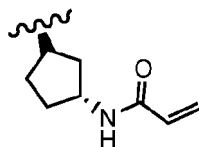
10

20

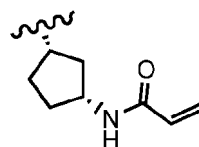
30

40

【化 1 5 3】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

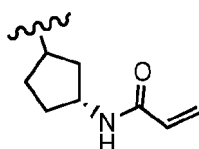
【化 1 5 4】



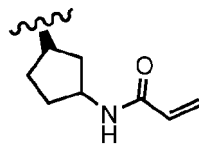
10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 5 5】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

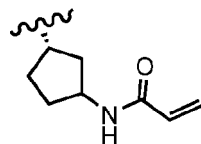
【化 1 5 6】



20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

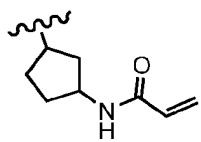
【化 1 5 7】



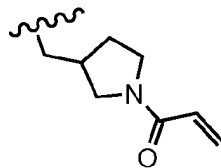
30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 5 8】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

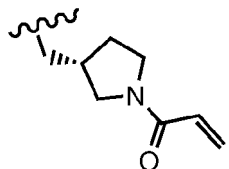
【化 1 5 9】



40

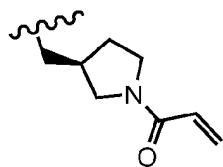
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 6 0】

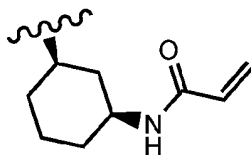


50

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化161】

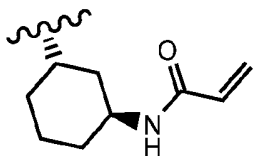


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化162】



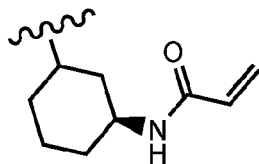
10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化163】

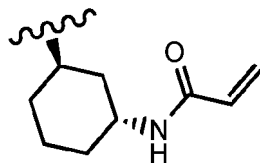


20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化164】

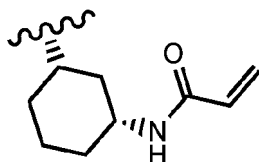


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化165】



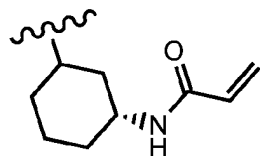
30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化166】



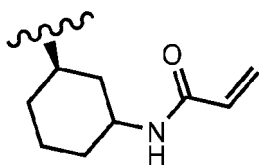
40

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化167】

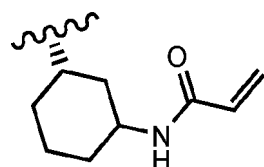


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 6 8】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

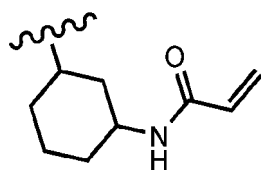
【化 1 6 9】



10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

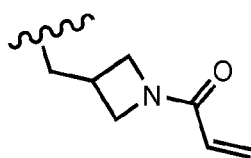
【化 1 7 0】



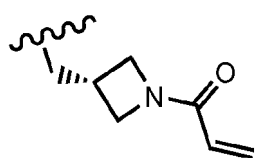
20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 7 1】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

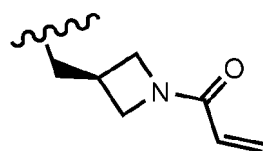
【化 1 7 2】



30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

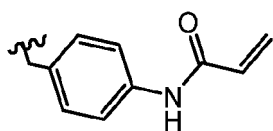
【化 1 7 3】



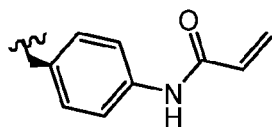
40

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

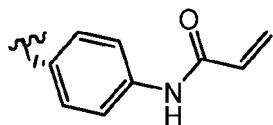
【化 1 7 4】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 7 5】

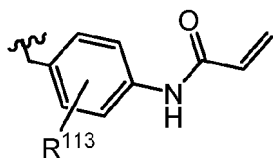


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 1 7 6】



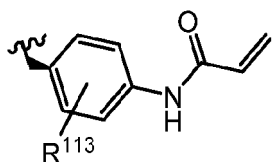
10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 1 7 7】

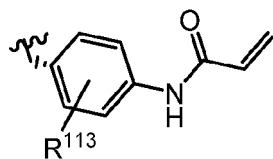


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 1 7 8】

20

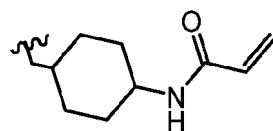


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 1 7 9】



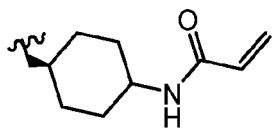
30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 1 8 0】

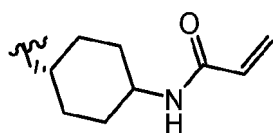


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 1 8 1】

40

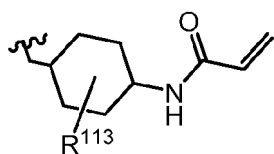


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 1 8 2】

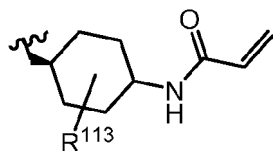


50

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化183】

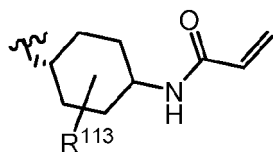


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化184】



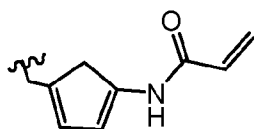
10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化185】

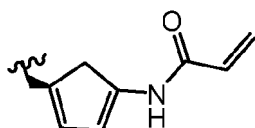


20

ある。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化186】

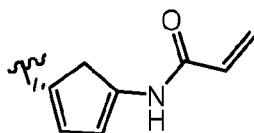


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化187】

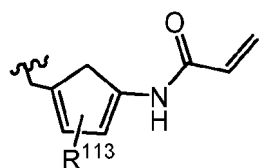


30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化188】



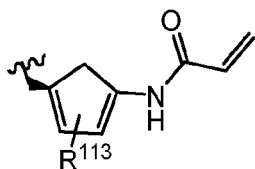
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化189】



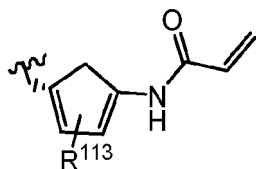
40

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 9 0】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

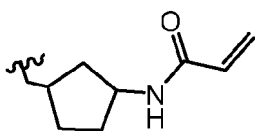
【化 1 9 1】



10

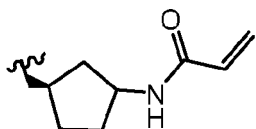
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 9 2】

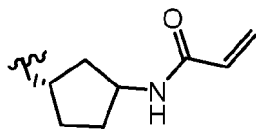
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

20

【化 1 9 3】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

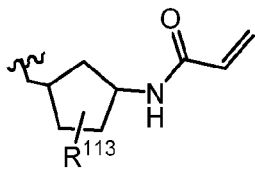
【化 1 9 4】



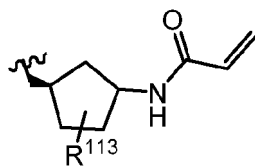
30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 9 5】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

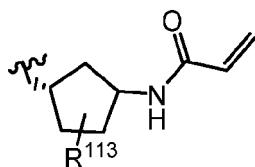
【化 1 9 6】



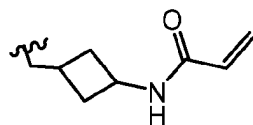
40

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 9 7】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

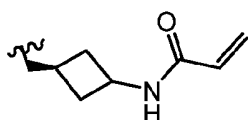
【化 1 9 8】



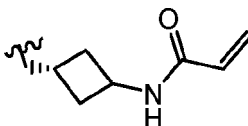
10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 1 9 9】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

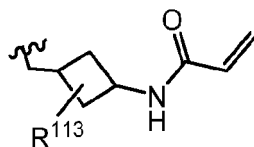
【化 2 0 0】



20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

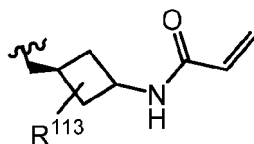
【化 2 0 1】



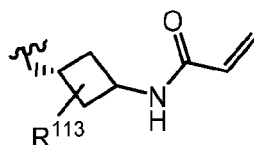
30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 0 2】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 0 3】



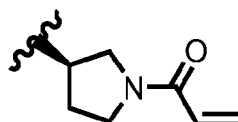
40

である。

【0 5 2 9】

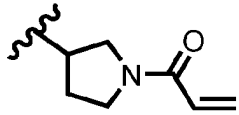
実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 0 4】

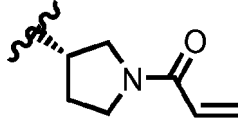


50

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化205】

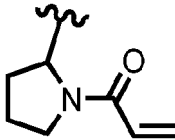


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化206】

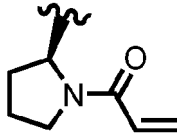


10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化207】

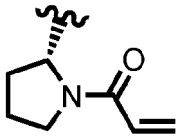


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化208】

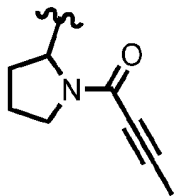


20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化209】

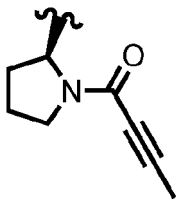


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化210】



30

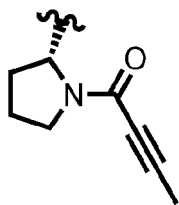
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化211】



40

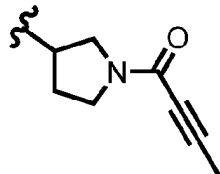
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 1 2】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

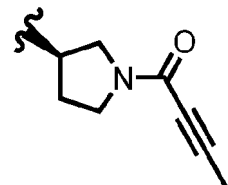
【化 2 1 3】



10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

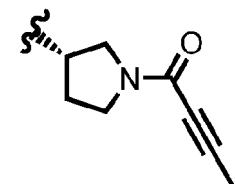
【化 2 1 4】



20

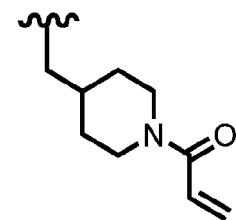
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 1 5】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

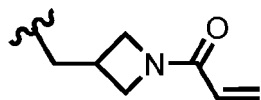
【化 2 1 6】



30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 1 7】



40

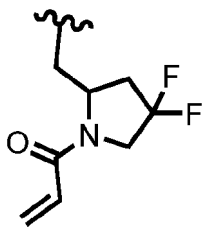
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 1 8】



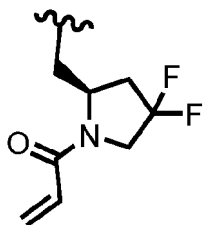
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 1 9】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

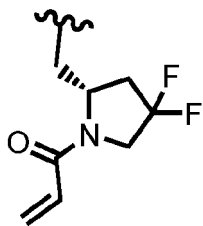
【化 2 2 0】



10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

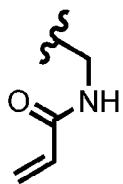
【化 2 2 1】



20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

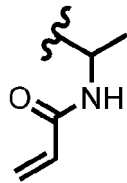
【化 2 2 2】



30

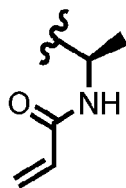
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 2 3】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

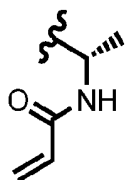
【化 2 2 4】



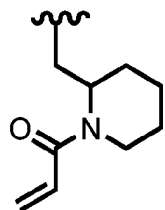
40

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 2 5】

である。実施形態では、L¹ - L² - Eは、

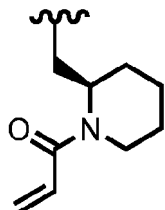
【化 2 2 6】



10

である。実施形態では、L¹ - L² - Eは、

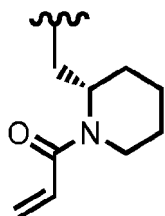
【化 2 2 7】



20

である。実施形態では、L¹ - L² - Eは、

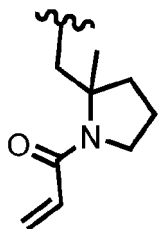
【化 2 2 8】



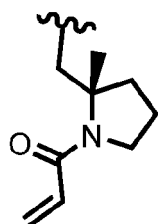
30

である。実施形態では、L¹ - L² - Eは、

【化 2 2 9】

である。実施形態では、L¹ - L² - Eは、

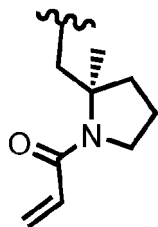
【化 2 3 0】



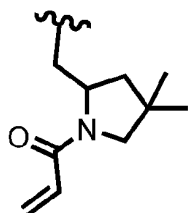
40

である。実施形態では、L¹ - L² - Eは、

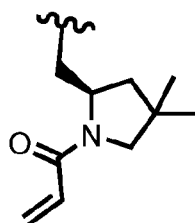
【化 2 3 1】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

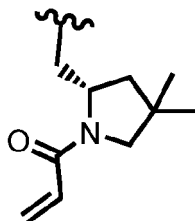
【化 2 3 2】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

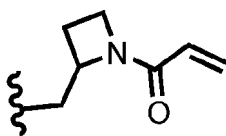
【化 2 3 3】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

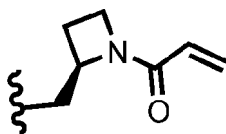
【化 2 3 4】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

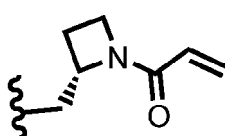
【化 2 3 5】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 3 6】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 3 7】



10

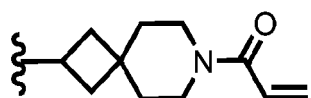
20

30

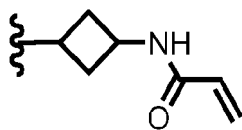
40

50

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 2 3 8】

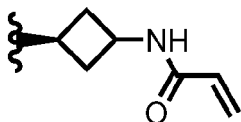


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 2 3 9】

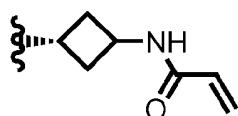


10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 2 4 0】

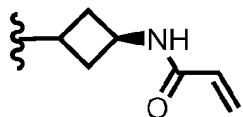


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 2 4 1】

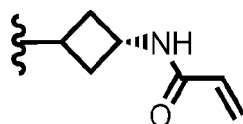


20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 2 4 2】

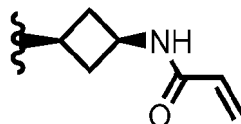


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 2 4 3】



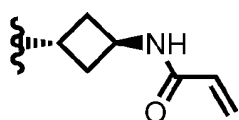
30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 2 4 4】



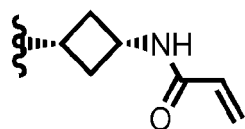
40

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 2 4 5】

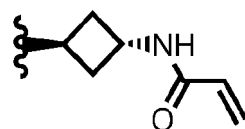


である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 4 6】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

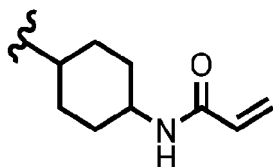
【化 2 4 7】



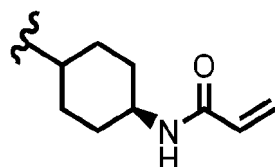
10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 4 8】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

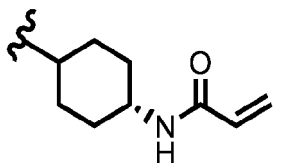
【化 2 4 9】



20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

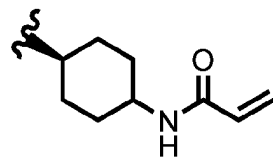
【化 2 5 0】



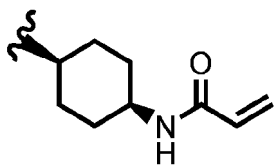
30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 5 1】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

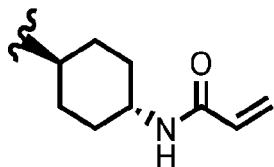
【化 2 5 2】



40

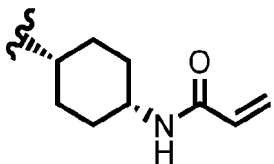
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 5 3】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

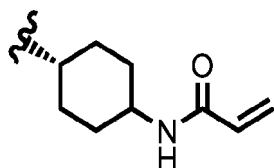
【化 2 5 4】



10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

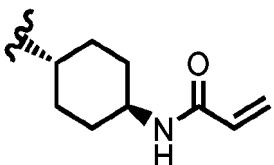
【化 2 5 5】



20

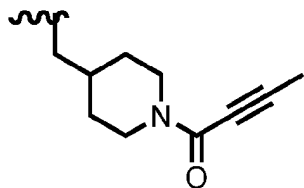
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 5 6】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

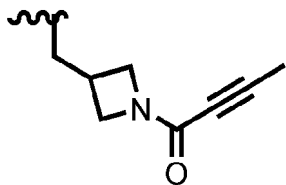
【化 2 5 7】



30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

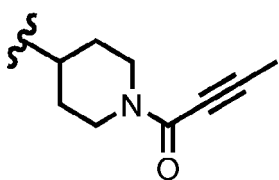
【化 2 5 8】



40

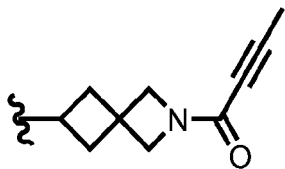
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 5 9】



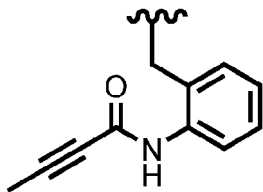
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 6 0】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

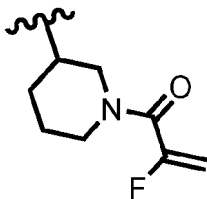
【化 2 6 1】



10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

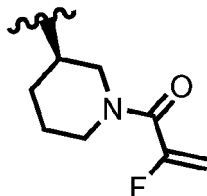
【化 2 6 2】



20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

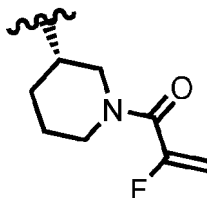
【化 2 6 3】



30

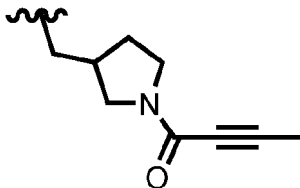
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 6 4】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

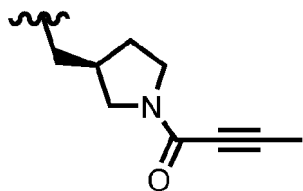
【化 2 6 5】



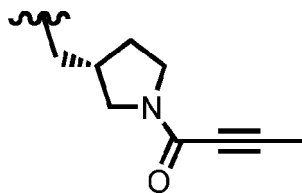
40

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 6 6】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

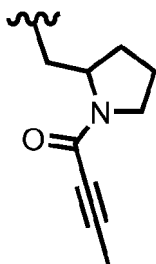
【化 2 6 7】



10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

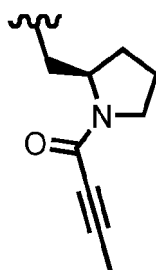
【化 2 6 8】



20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

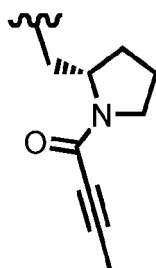
【化 2 6 9】



30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

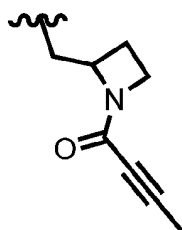
【化 2 7 0】



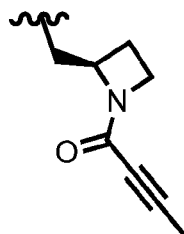
40

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 7 1】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

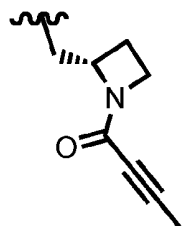
【化 2 7 2】



10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

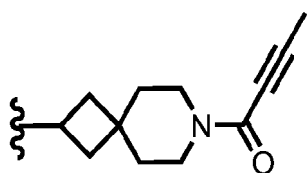
【化 2 7 3】



20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

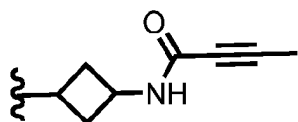
【化 2 7 4】



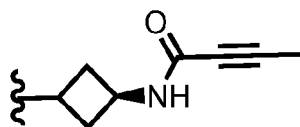
30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 7 5】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

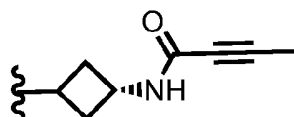
【化 2 7 6】



40

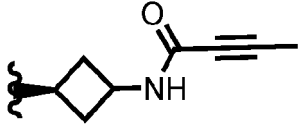
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 7 7】

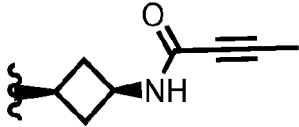
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

50

【化 2 7 8】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

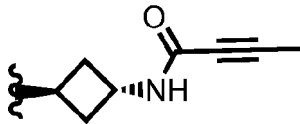
【化 2 7 9】



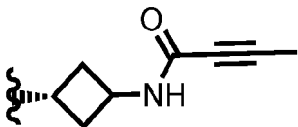
10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 8 0】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

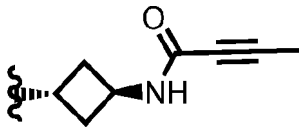
【化 2 8 1】



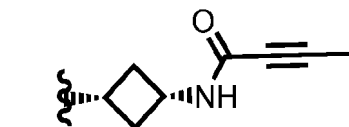
20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 8 2】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

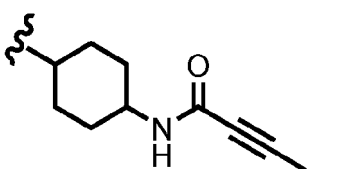
【化 2 8 3】



30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

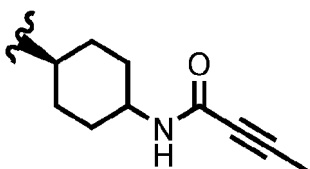
【化 2 8 4】



40

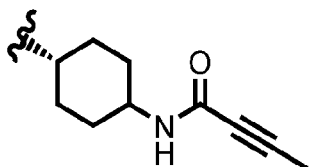
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 8 5】

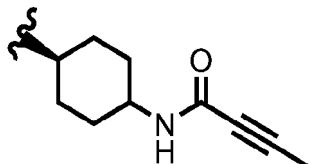
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

50

【化 2 8 6】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

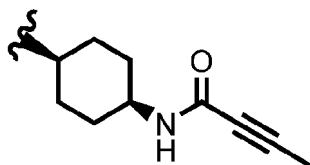
【化 2 8 7】



10

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

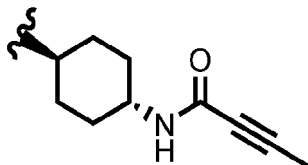
【化 2 8 8】



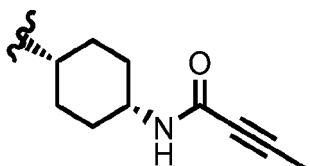
20

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

【化 2 8 9】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

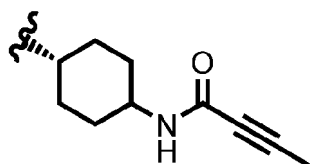
【化 2 9 0】



30

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

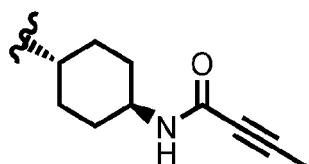
【化 2 9 1】



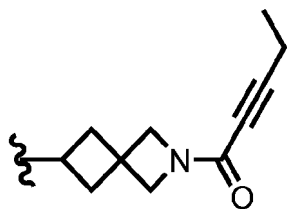
40

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

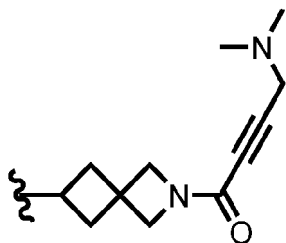
【化 2 9 2】

である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

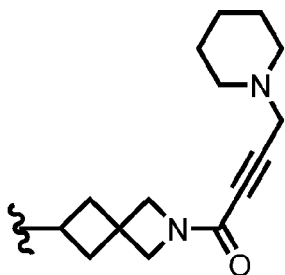
【化 2 9 3】



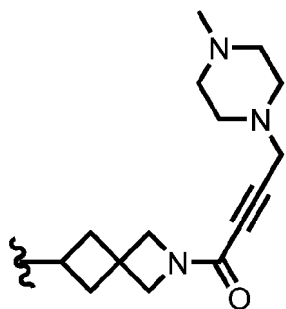
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 2 9 4】



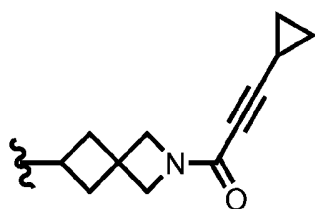
である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 2 9 5】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 2 9 6】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、
【化 2 9 7】



である。実施形態では、 $L^1 - L^2 - E$ は、

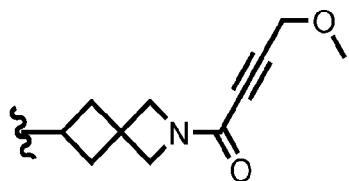
10

20

30

40

【化 2 9 8】



である。

【0 5 3 0】

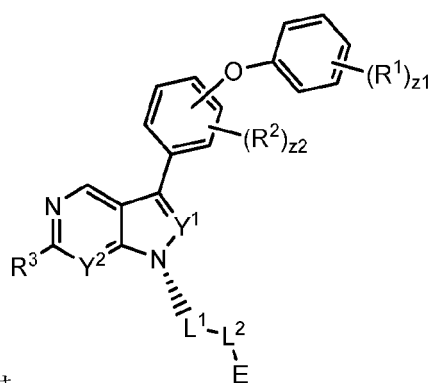
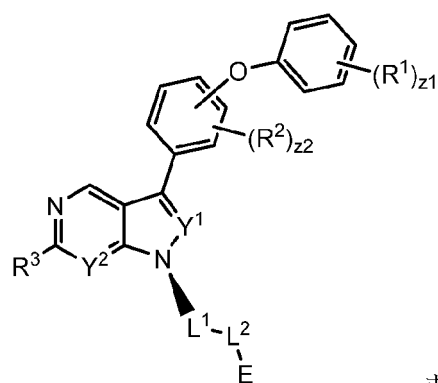
実施形態では、化合物（例えば、本明細書に記載の）は、中枢神経系の外側（例えば、全身投与、静脈内、または動脈内）に投与した後に、患者の中枢神経系に入ることができる。実施形態では、化合物（例えば、本明細書に記載の）は、血液脳関門を横断することができる。

10

【0 5 3 1】

実施形態では、化合物は、式

【化 2 9 9】



または

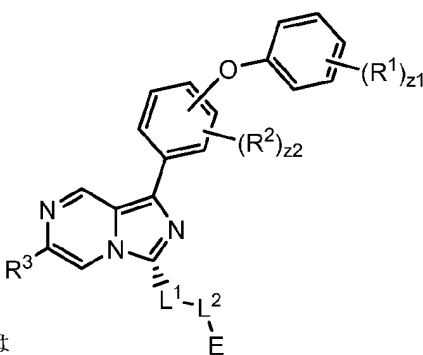
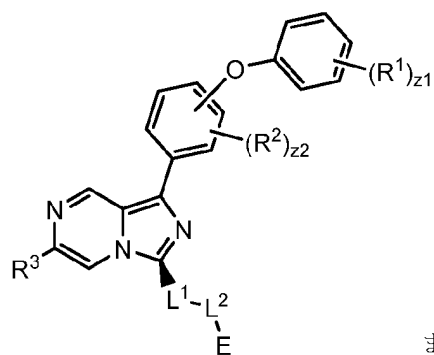
20

である。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y¹、Y²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 3 2】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 0 0】



または

30

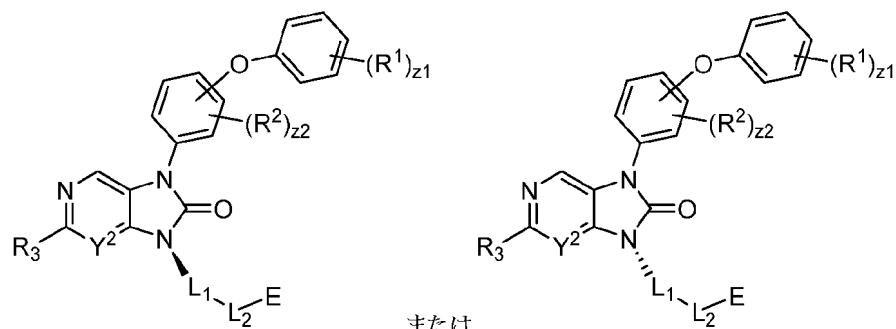
40

である。R¹、R²、R³、L¹、L²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 3 3】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 0 1】

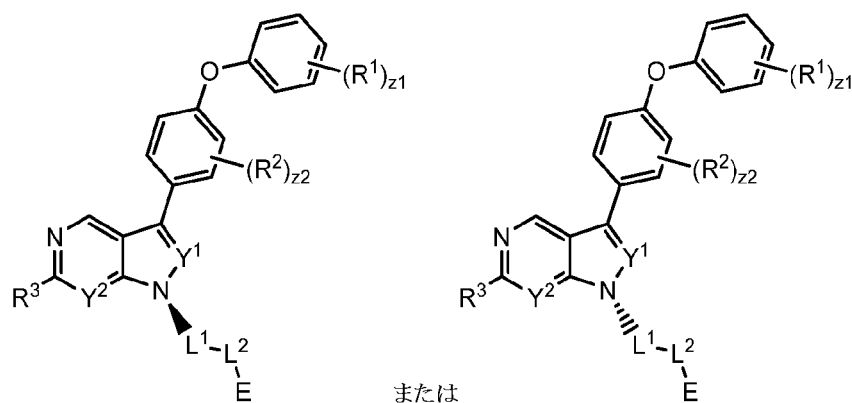


である。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 3 4】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 0 2】

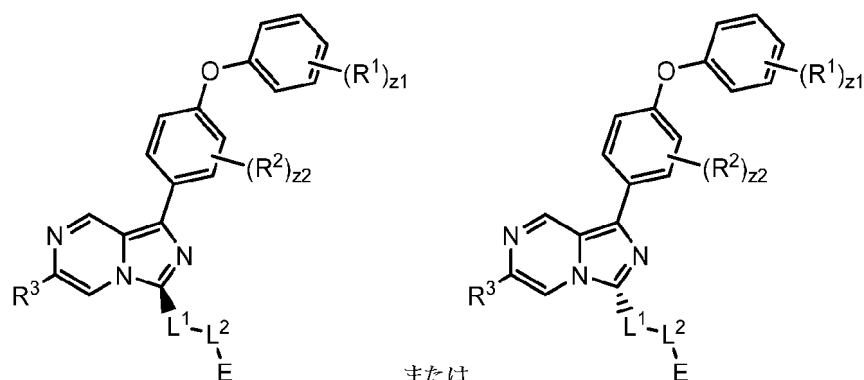


である。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y¹、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 3 5】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 0 3】

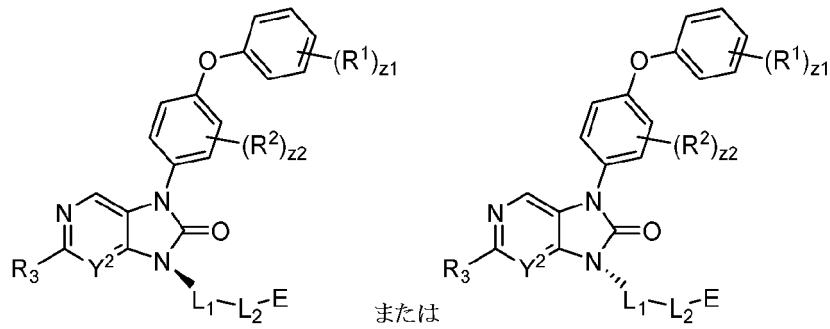


である。R¹、R²、R³、L¹、L²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 3 6】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 0 4】



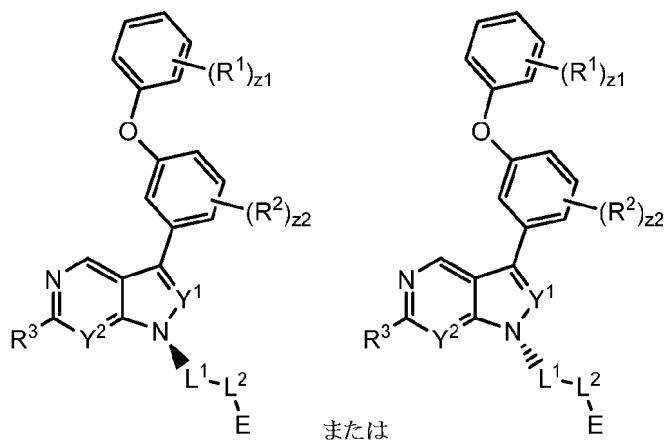
10

である。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 3 7】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 0 5】



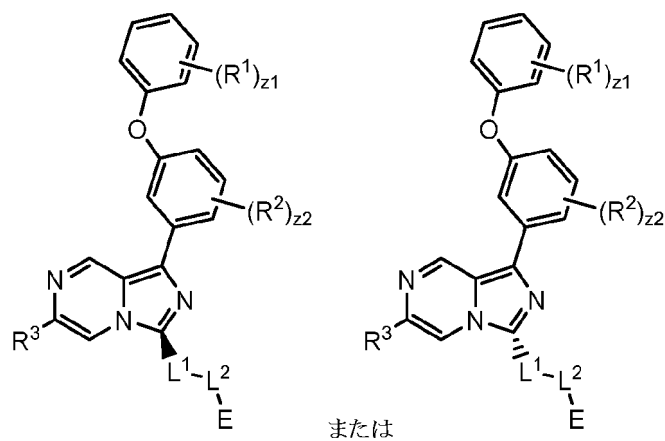
20

である。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y¹、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 3 8】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 0 6】



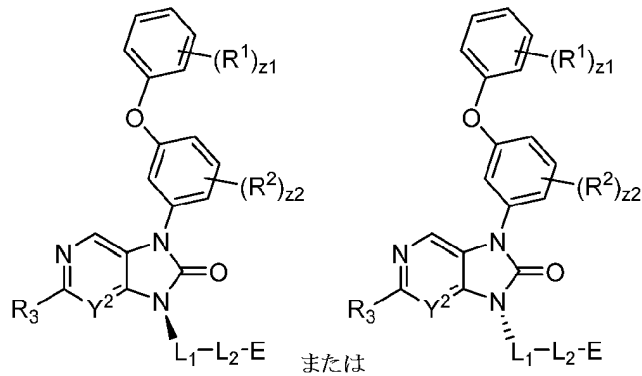
40

である。R¹、R²、R³、L¹、L²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 3 9】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 0 7】



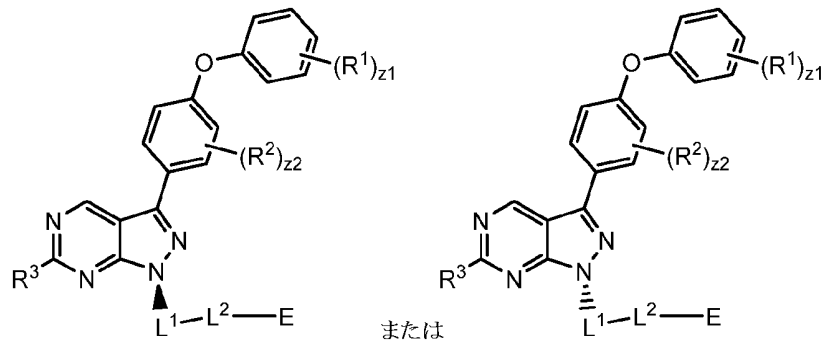
10

である。R¹、R²、R³、L¹、L²、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 4 0】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 0 8】



20

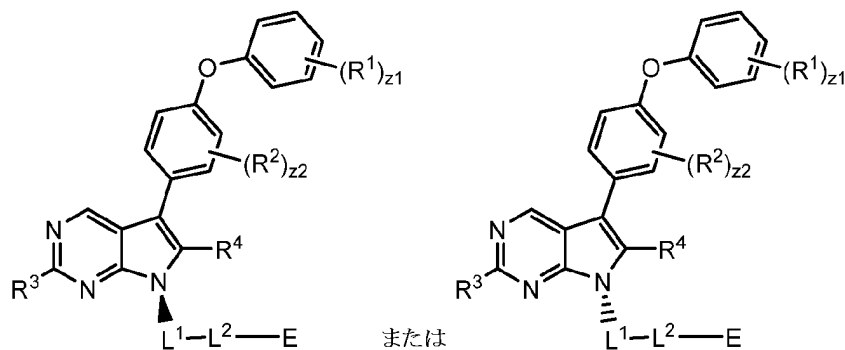
である。R¹、R²、R³、L¹、L²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 4 1】

実施形態では、化合物は、式

30

【化 3 0 9】



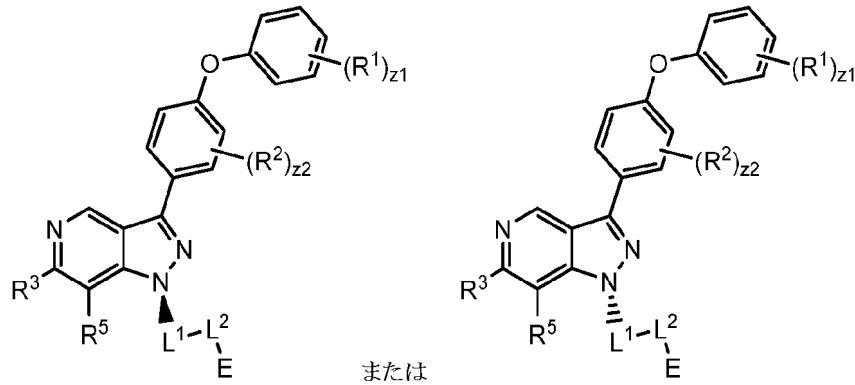
40

である。R¹、R²、R³、R⁴、L¹、L²、Y¹、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 4 2】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 1 0】



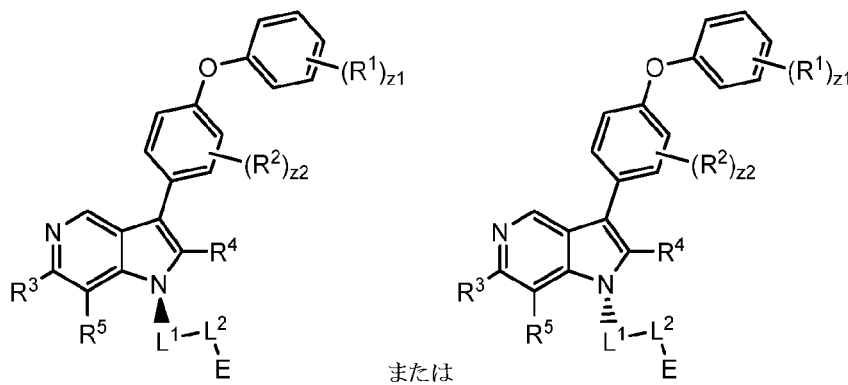
10

である。R¹、R²、R³、R⁵、L¹、L²、Y¹、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 4 3】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 1 1】



20

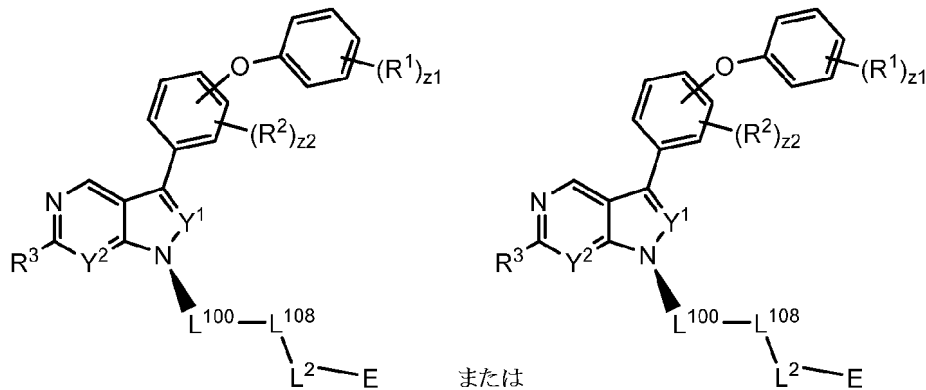
である。R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、L¹、L²、Y¹、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

30

【0 5 4 4】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 1 2】



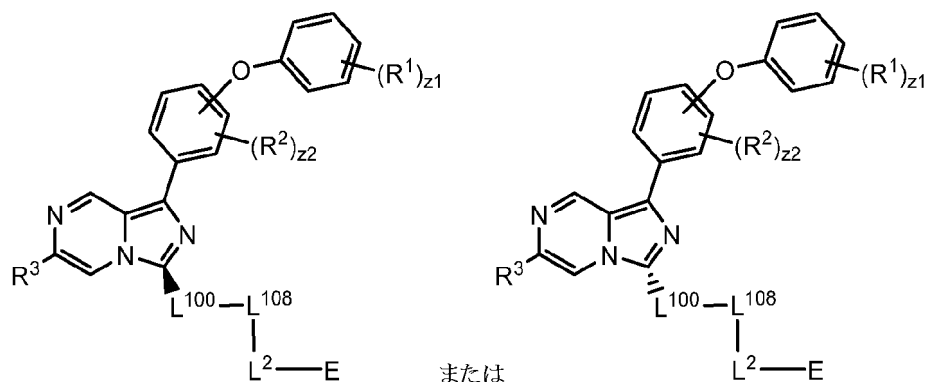
40

である。R¹、R²、R³、L¹⁰⁰、L¹⁰⁸、L²、Y¹、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 4 5】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 1 3】



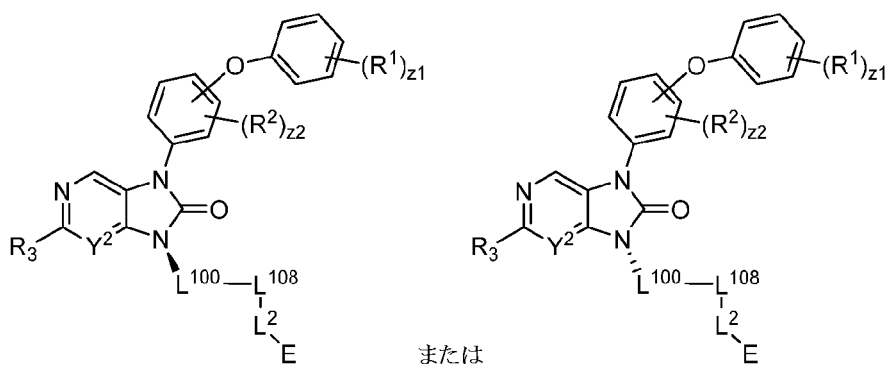
10

である。R¹、R²、R³、L¹⁰⁰、L¹⁰⁸、L²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 4 6】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 1 4】



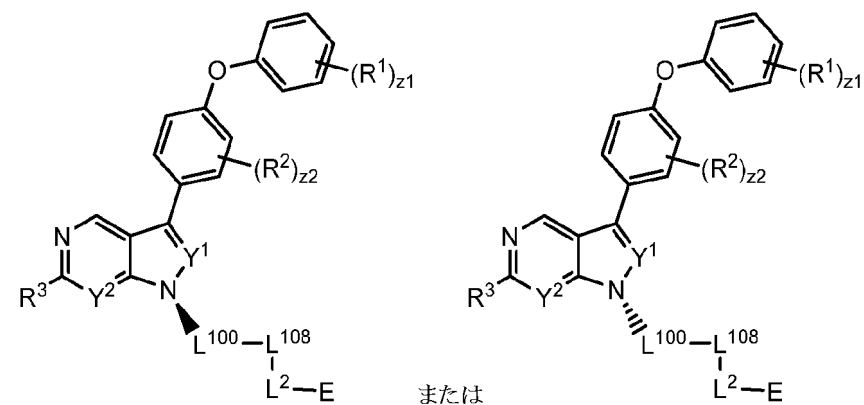
20

である。R¹、R²、R³、L¹⁰⁰、L¹⁰⁸、L²、Y²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 4 7】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 1 5】



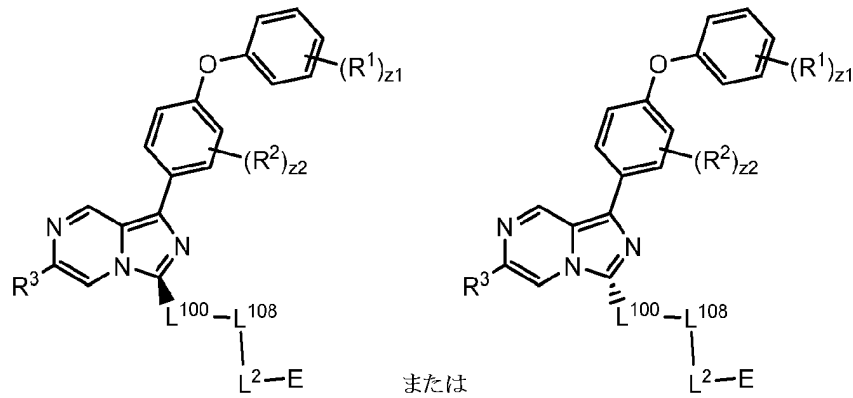
40

である。R¹、R²、R³、L¹⁰⁰、L¹⁰⁸、L²、Y¹、Y²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 4 8】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 1 6】



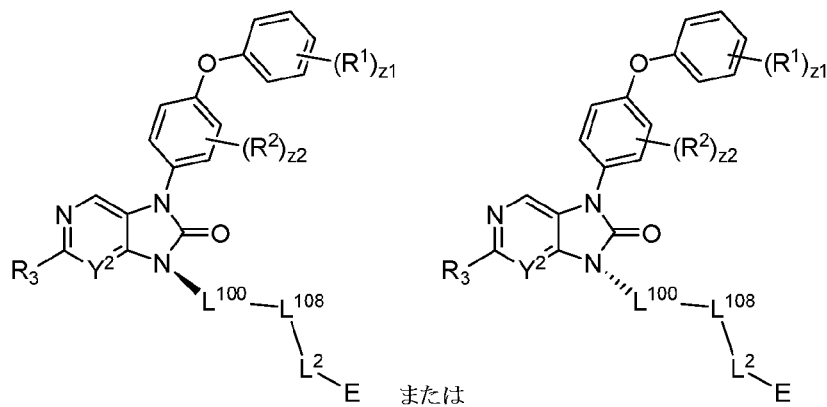
10

である。R¹、R²、R³、L¹⁰⁰、L¹⁰⁸、L²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 4 9】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 1 7】



20

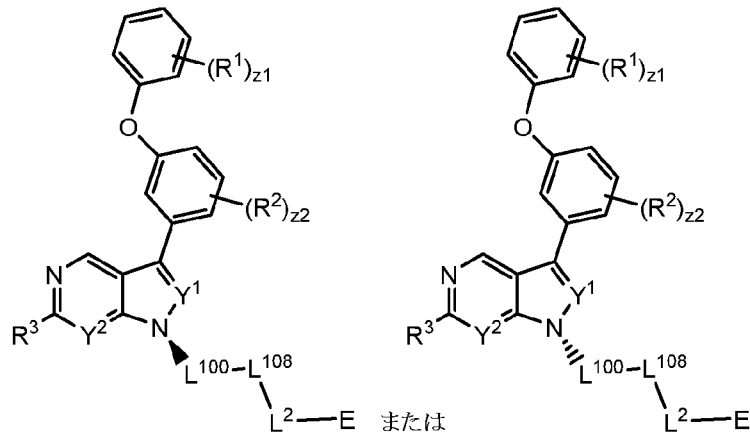
である。R¹、R²、R³、L¹⁰⁰、L¹⁰⁸、L²、Y²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

30

【0 5 5 0】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 1 8】



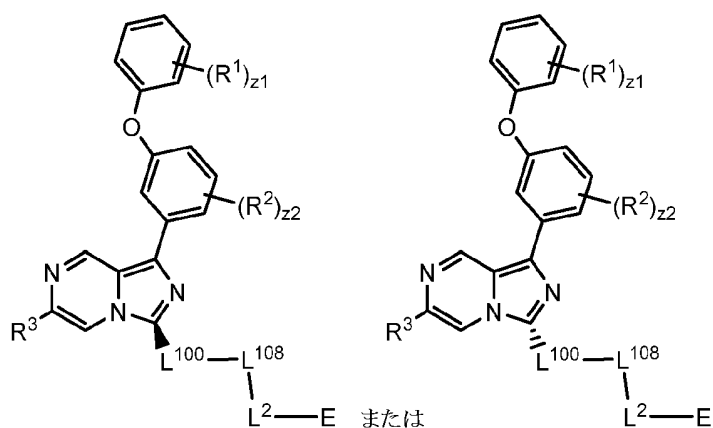
40

である。R¹、R²、R³、L¹⁰⁰、L¹⁰⁸、L²、Y¹、Y²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 5 1】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 1 9】

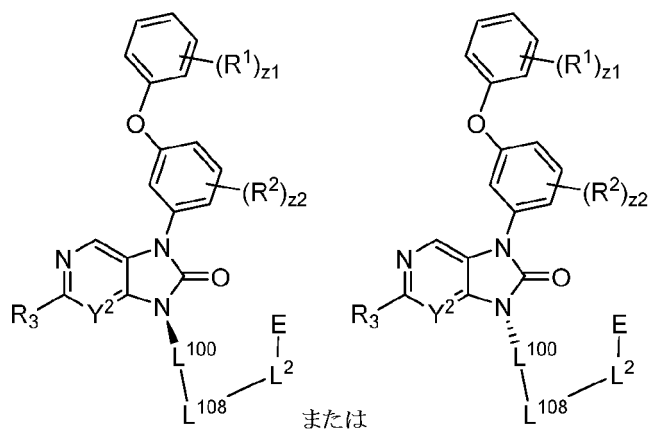


である。R¹、R²、R³、L¹⁰⁰、L¹⁰⁸、L²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0552】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 2 0】

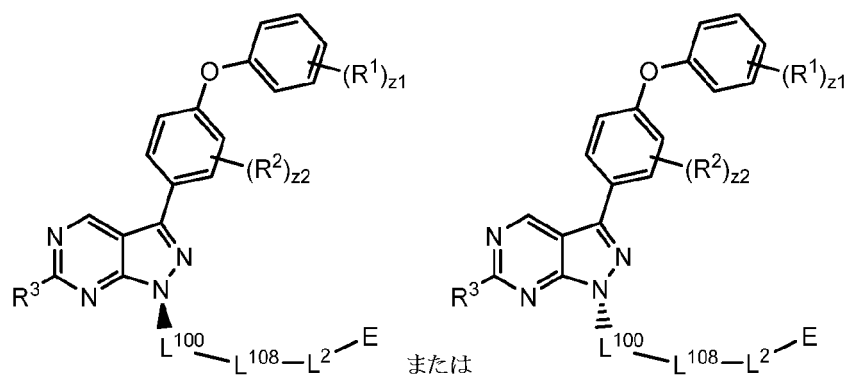


である。R¹、R²、R³、L¹⁰⁰、L¹⁰⁸、L²、Y²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0553】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 2 1】

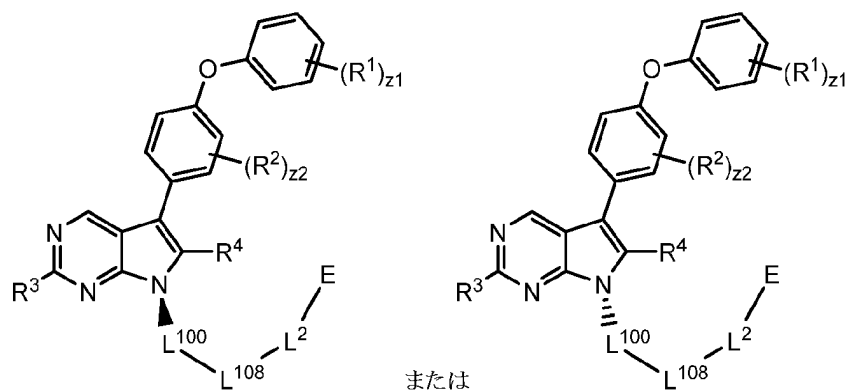


である。R¹、R²、R³、L¹⁰⁰、L¹⁰⁸、L²、z₁、z₂、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0554】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 2 2】



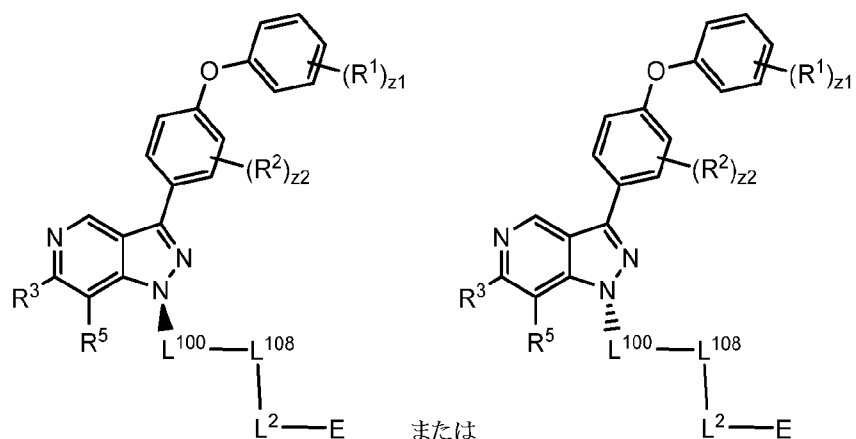
10

である。R¹、R²、R³、R⁴、L¹⁰⁰、L¹⁰⁸、L²、Y¹、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0555】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 2 3】



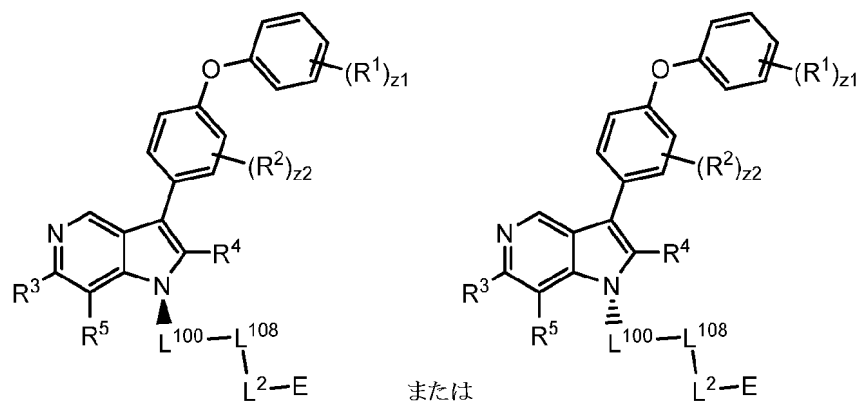
20

である。R¹、R²、R³、R⁵、L¹⁰⁰、L¹⁰⁸、L²、Y¹、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0556】

実施形態では、化合物は、式

【化 3 2 4】



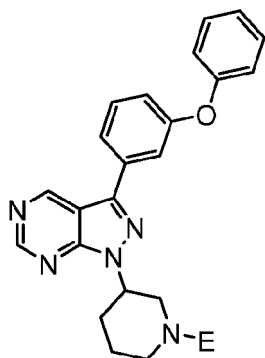
40

である。R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、L¹⁰⁰、L¹⁰⁸、L²、Y¹、Y²、z¹、z²、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0557】

実施形態では、化合物は、式：

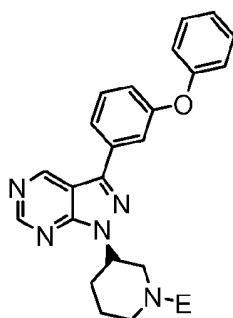
【化 3 2 5】



10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

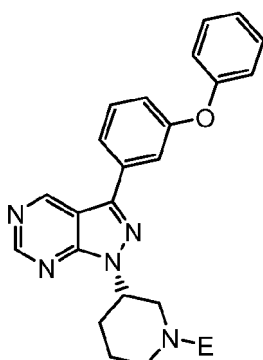
【化 3 2 6】



20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 2 7】



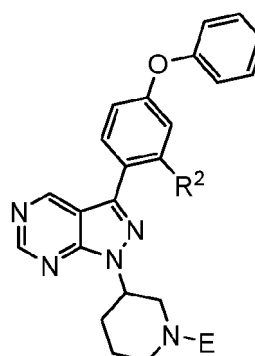
30

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 5 8】

実施形態では、化合物は、式：

【化 3 2 8】



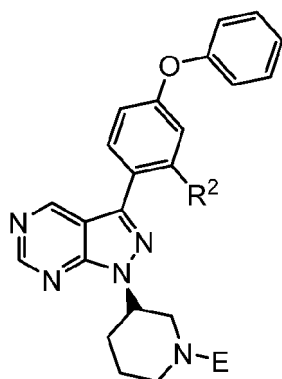
40

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物

50

は、式：

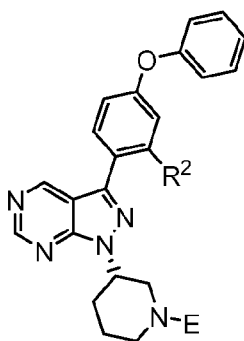
【化 3 2 9】



10

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 3 0】



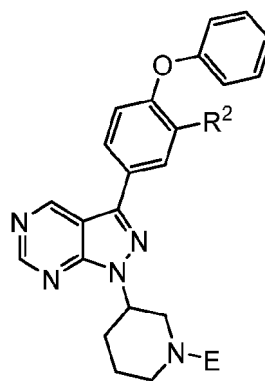
20

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 5 9】

実施形態では、化合物は、式：

【化 3 3 1】

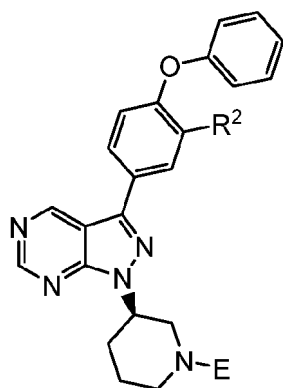


30

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

40

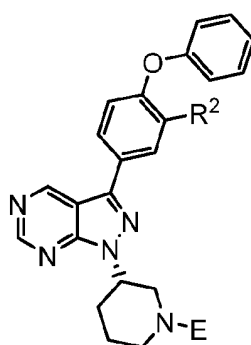
【化 3 3 2】



10

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 3 3】



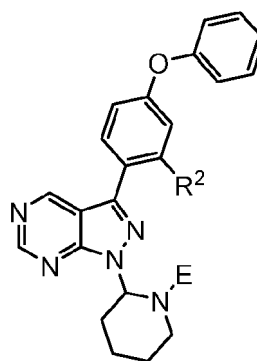
20

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 6 0】

実施形態では、化合物は、式：

【化 3 3 4】

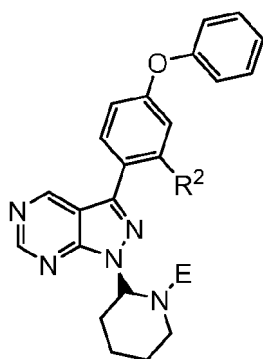


30

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

40

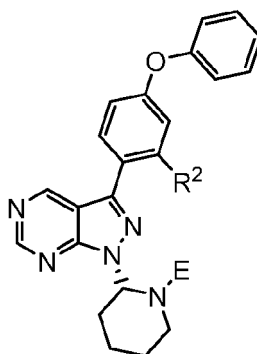
【化 3 3 5】



10

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 3 6】



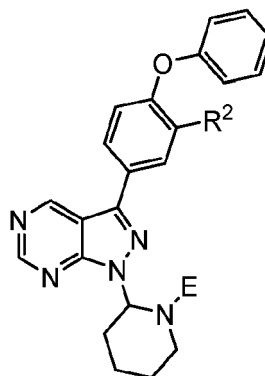
20

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 6 1】

実施形態では、化合物は、式：

【化 3 3 7】

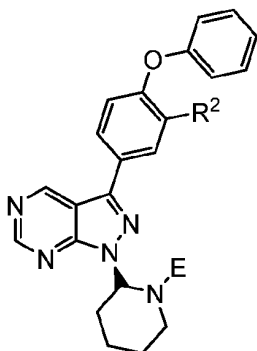


30

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

40

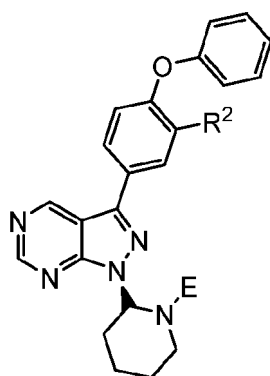
【化 3 3 8】



10

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 3 9】



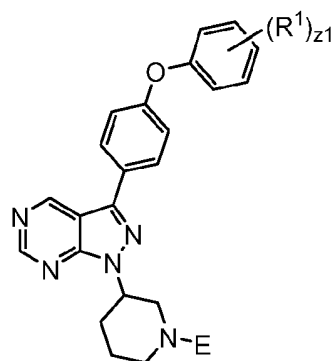
20

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 6 2】

実施形態では、化合物は、式：

【化 3 4 0】

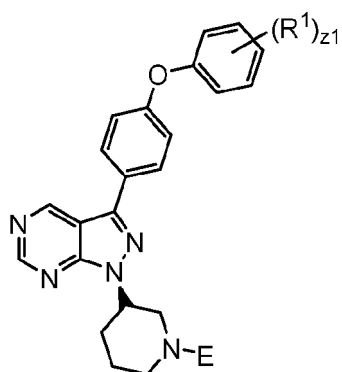


30

を有し、式中、 R^1 、 z_1 、及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

40

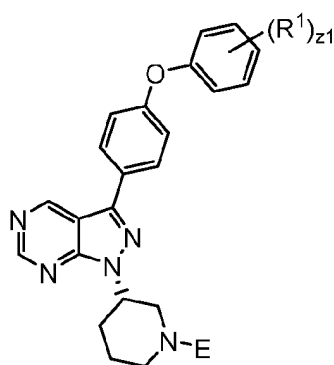
【化 3 4 1】



10

を有し、式中、 R^1 、 $z1$ 、及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 4 2】



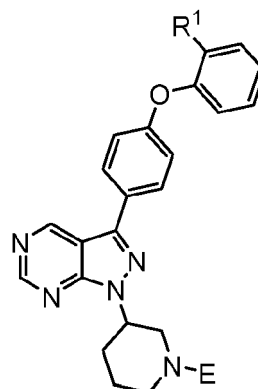
20

を有し、式中、 R^1 、 $z1$ 、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 6 3】

実施形態では、化合物は、式：

【化 3 4 3】

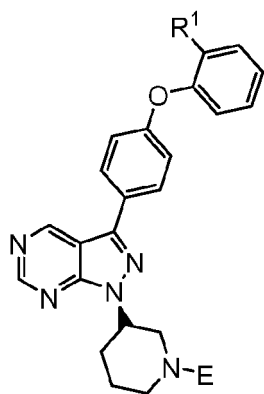


30

を有し、式中、 R^1 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

40

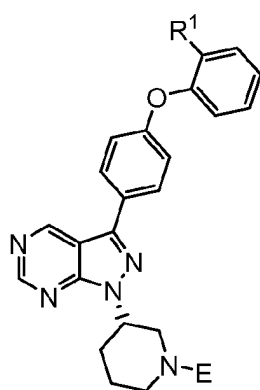
【化 3 4 4】



10

を有し、式中、 R^1 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 4 5】



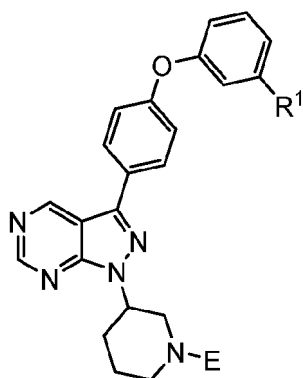
20

を有し、式中、 R^1 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 6 4】

実施形態では、化合物は、式：

【化 3 4 6】

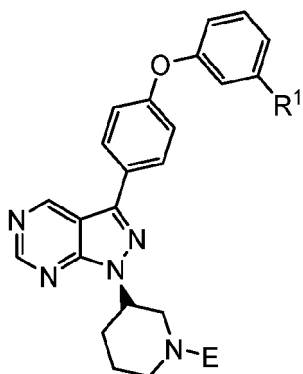


30

を有し、式中、 R^1 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

40

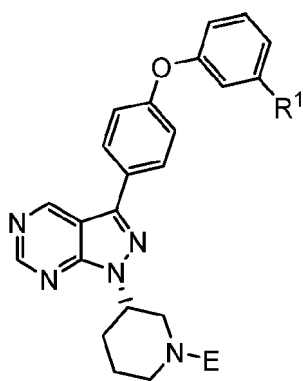
【化 3 4 7】



10

を有し、式中、R¹ 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 4 8】



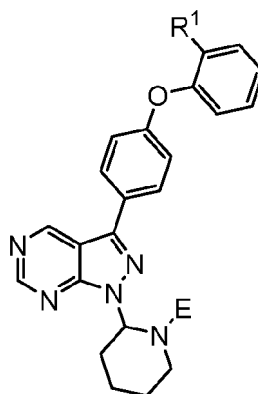
20

を有し、式中、R¹ 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 6 5】

実施形態では、化合物は、式：

【化 3 4 9】

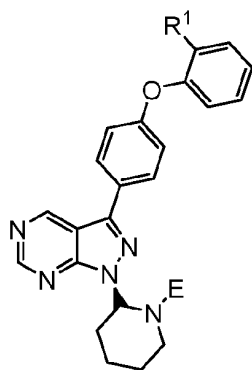


30

40

を有し、式中、R¹ 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

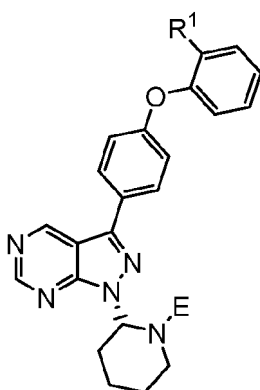
【化 3 5 0】



10

を有し、式中、 R^1 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 5 1】



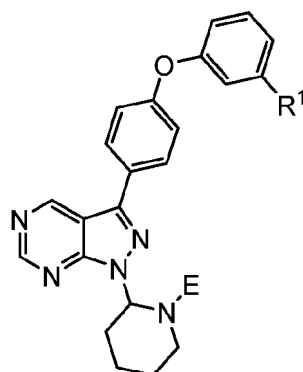
20

を有し、式中、 R^1 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【 0 5 6 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 3 5 2】

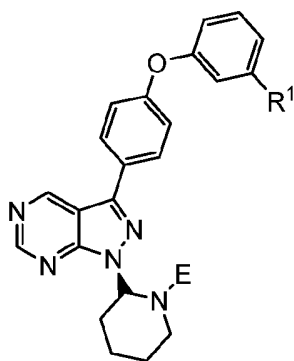


30

を有し、式中、 R^1 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

40

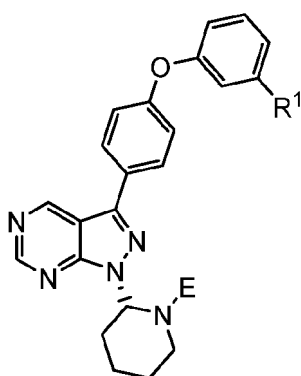
【化 3 5 3】



10

を有し、式中、 R^1 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 5 4】



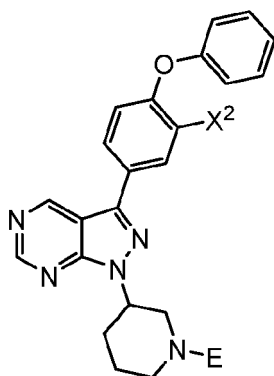
20

を有し、式中、 R^1 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 6 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 3 5 5】

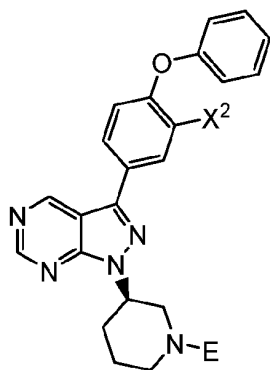


30

を有し、式中、 X^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

40

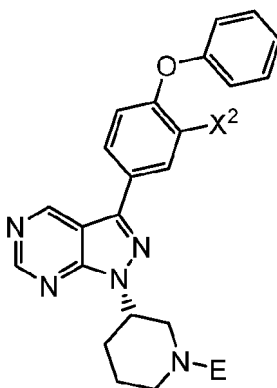
【化 3 5 6】



10

を有し、式中、 X^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 5 7】



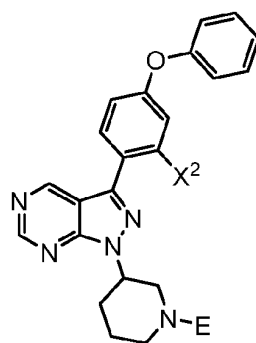
20

を有し、式中、 X^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 6 8】

実施形態では、化合物は、式：

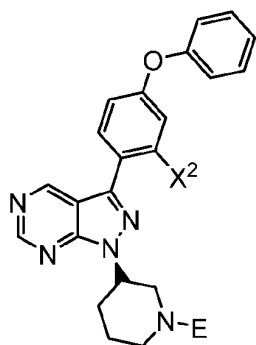
【化 3 5 8】



30

を有し、式中、 X^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 5 9】

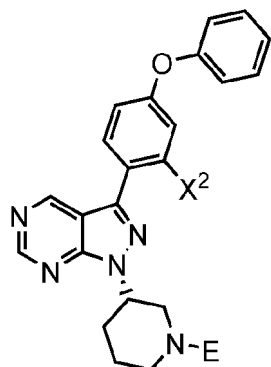


40

50

を有し、式中、 X^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 6 0】



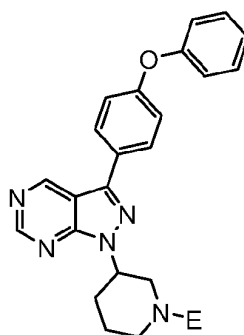
10

を有し、式中、 X^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 6 9】

実施形態では、化合物は、式：

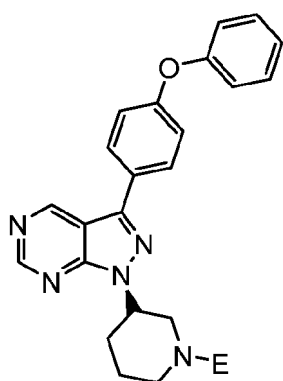
【化 3 6 1】



20

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 6 2】

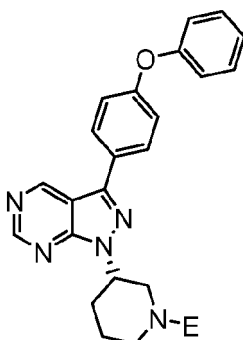


30

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

40

【化 3 6 3】



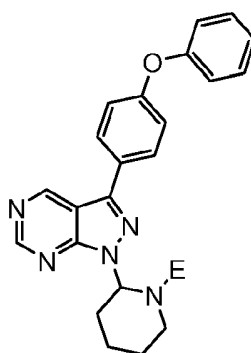
10

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 7 0】

実施形態では、化合物は、式：

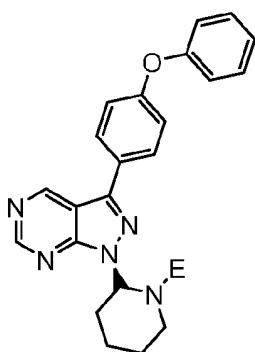
【化 3 6 4】



20

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

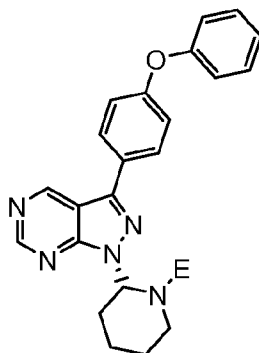
【化 3 6 5】



30

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 6 6】



40

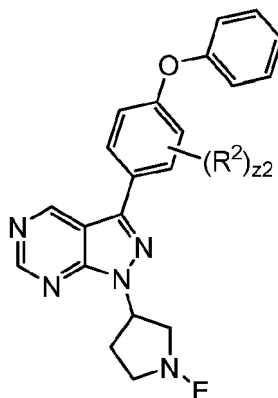
50

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0571】

実施形態では、化合物は、式：

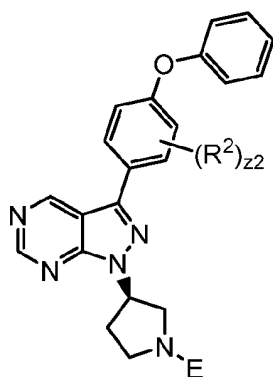
【化367】



10

を有し、式中、 R^2 、 z_2 、及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

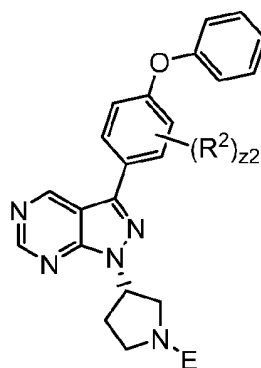
【化368】



20

を有し、式中、 R^2 、 z_2 、及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化369】



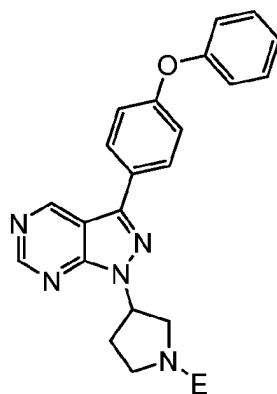
40

を有し、式中、 R^2 、 z_2 、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0572】

実施形態では、化合物は、式：

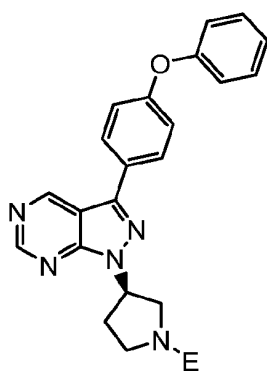
【化 3 7 0】



10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

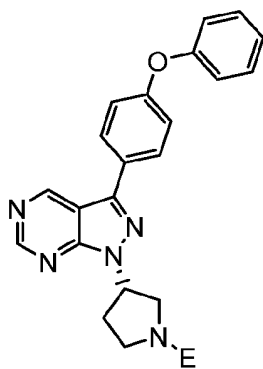
【化 3 7 1】



20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。化合物は、式：

【化 3 7 2】



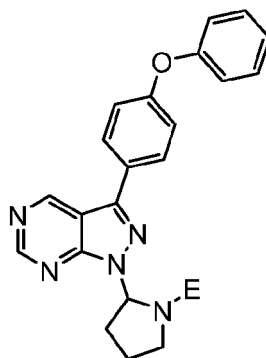
30

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 7 3】

実施形態では、化合物は、式：

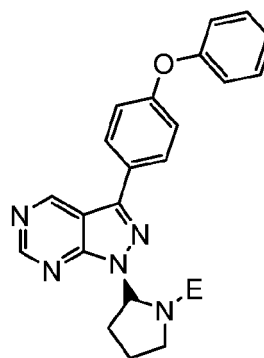
【化 3 7 3】



40

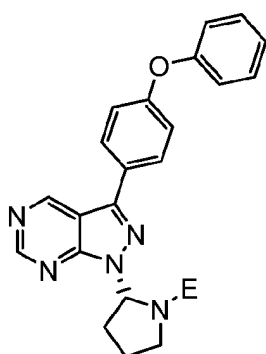
50

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：
【化374】



10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：
【化375】

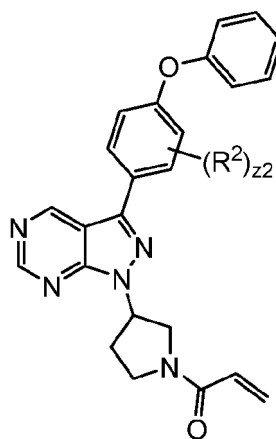


20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。
【0574】

実施形態では、化合物は、式：

【化376】

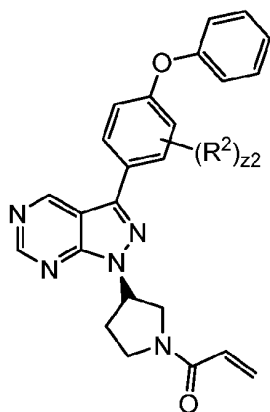


30

を有し、式中、 R^2 及び $z2$ は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

40

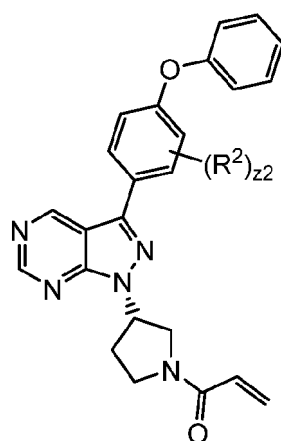
【化 3 7 7】



10

を有し、式中、 R^2 及び $z2$ は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 7 8】



20

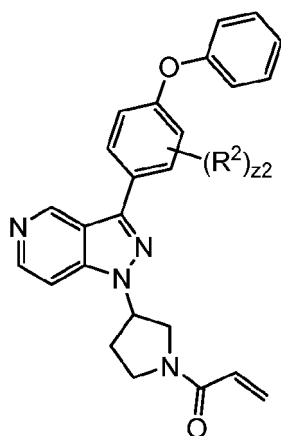
を有し、式中、 R^2 及び $z2$ は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 7 5】

実施形態では、化合物は、式：

30

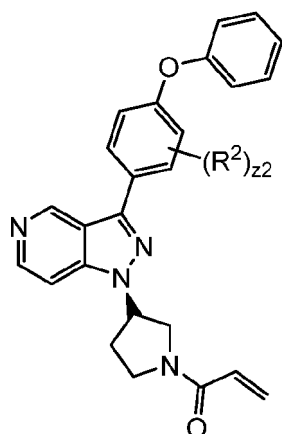
【化 3 7 9】



40

を有し、式中、 R^2 及び $z2$ は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

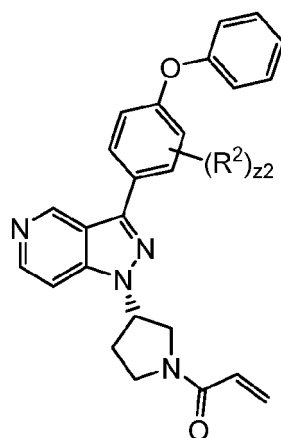
【化 3 8 0】



10

を有し、式中、 R^2 及び $z2$ は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 8 1】



20

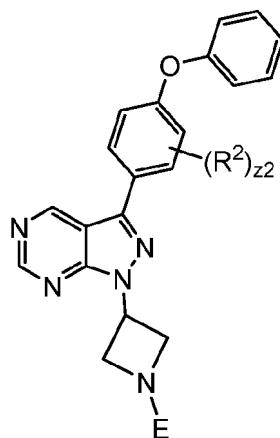
を有し、式中、 R^2 及び $z2$ は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 7 6】

30

実施形態では、化合物は、式：

【化 3 8 2】



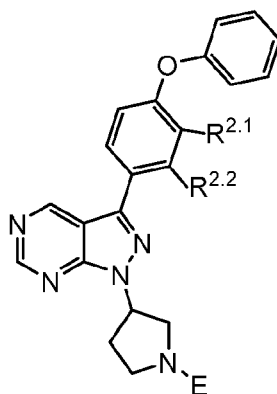
40

を有し、式中、 R^2 、 $z2$ 、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 7 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 3 8 3】

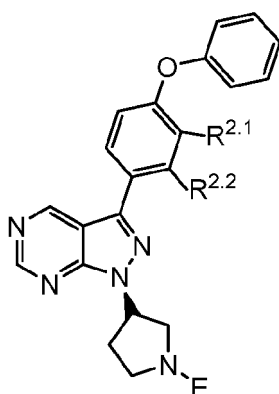


10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。R^{2.1}及びR^{2.2}は各々、結合した環上の固定位置でR¹である。R^{2.1}及びR^{2.2}は、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載のR²の任意の置換基であってもよい。

実施形態では、化合物は、式：

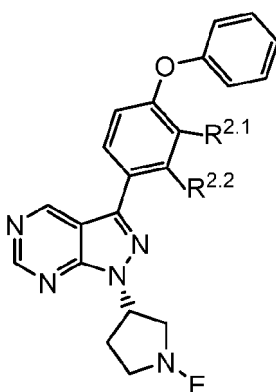
【化 3 8 4】



20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。R^{2.1}及びR^{2.2}は各々、結合した環上の固定位置でR¹である。R^{2.1}及びR^{2.2}は、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載のR²の任意の置換基であってもよい。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 8 5】



30

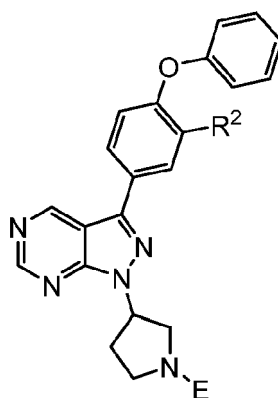
40

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。R^{2.1}及びR^{2.2}は各々、結合した環上の固定位置でR¹である。R^{2.1}及びR^{2.2}は、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載のR²の任意の置換基であってもよい。

【0 5 7 8】

50

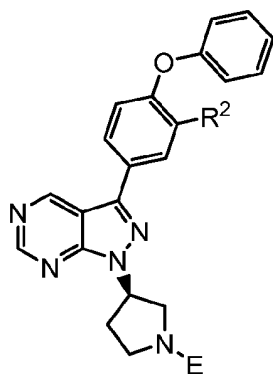
実施形態では、化合物は、式：
【化 3 8 6】



10

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

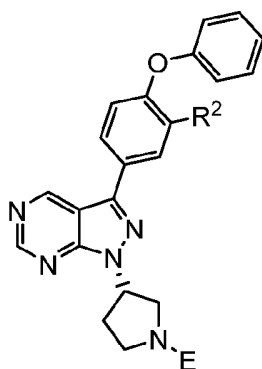
【化 3 8 7】



20

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 8 8】



30

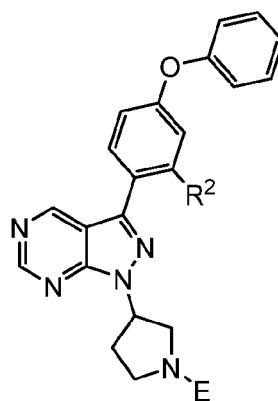
を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

40

【0 5 7 9】

実施形態では、化合物は、式：

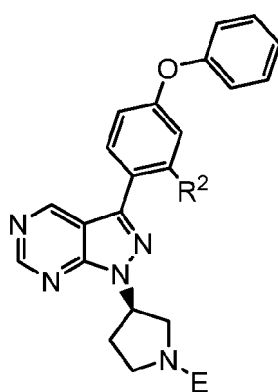
【化 3 8 9】



10

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

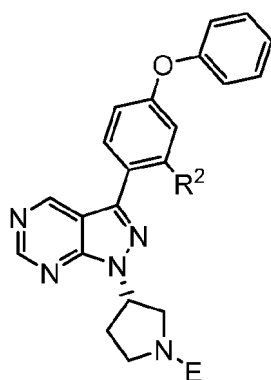
【化 3 9 0】



20

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 9 1】



30

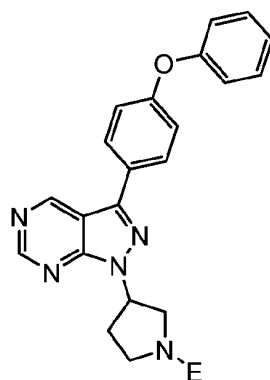
を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

40

【0 5 8 0】

実施形態では、化合物は、式：

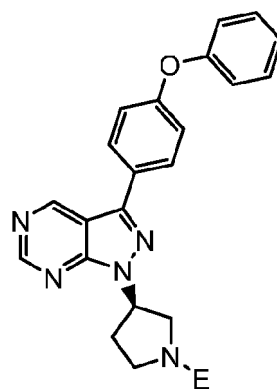
【化 3 9 2】



10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

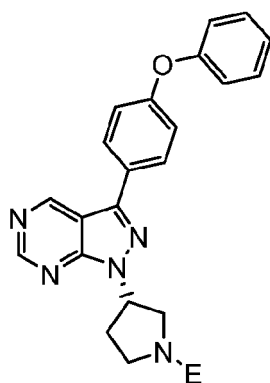
【化 3 9 3】



20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 9 4】



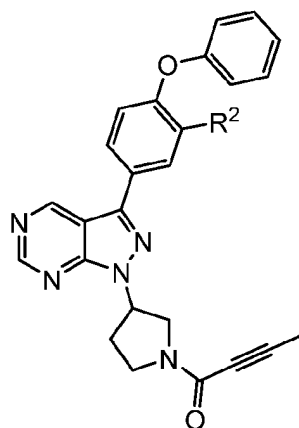
30

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 8 1】

実施形態では、化合物は、式：

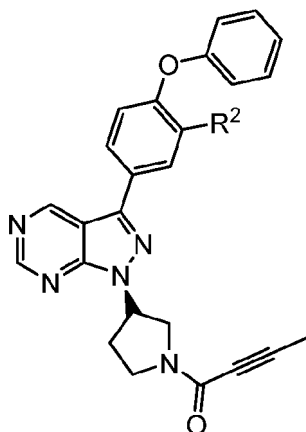
【化 3 9 5】



10

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

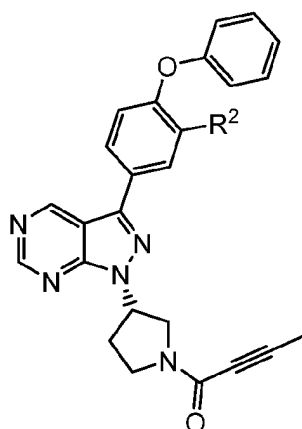
【化 3 9 6】



20

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 3 9 7】



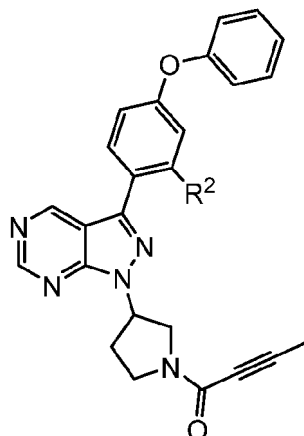
40

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 8 2】

実施形態では、化合物は、式：

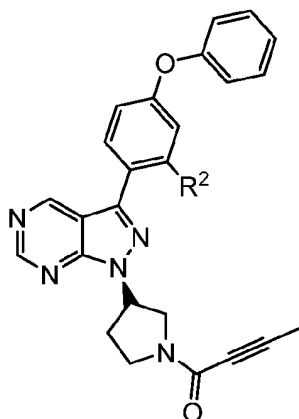
【化 3 9 8】



10

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

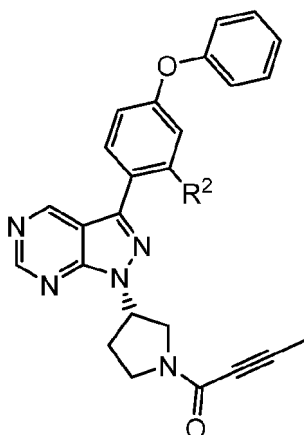
【化 3 9 9】



20

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 0 0】



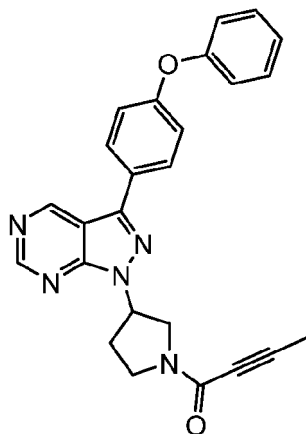
40

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 8 3】

実施形態では、化合物は、式：

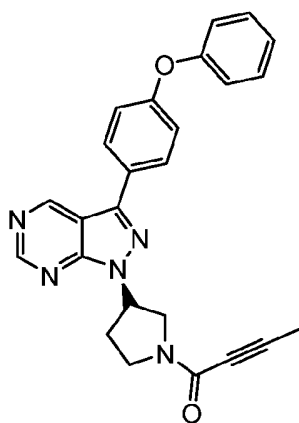
【化 4 0 1】



10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

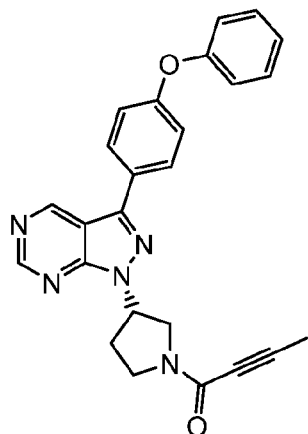
【化 4 0 2】



20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 0 3】



30

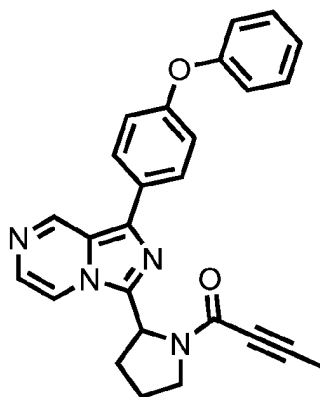
を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【 0 5 8 4】

実施形態では、化合物は、式：

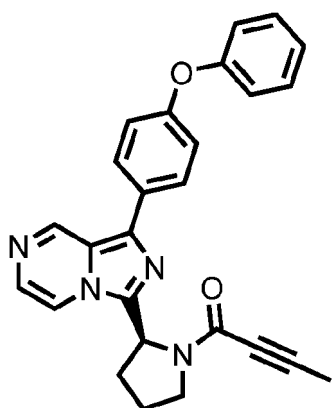
40

【化 4 0 4】



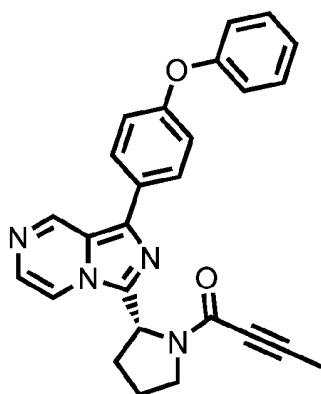
10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：
【化 4 0 5】



20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：
【化 4 0 6】



30

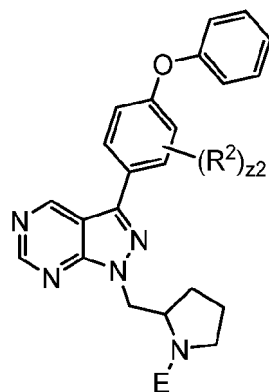
を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 8 5】

実施形態では、化合物は、式：

40

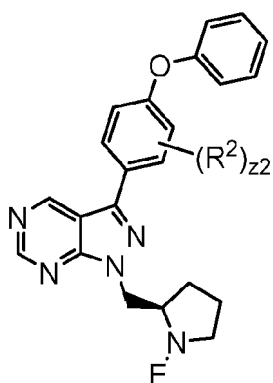
【化 4 0 7】



10

を有し、式中、 R^2 、 $z2$ 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

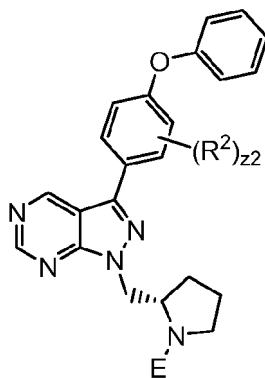
【化 4 0 8】



20

を有し、式中、 R^2 、 $z2$ 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 0 9】



30

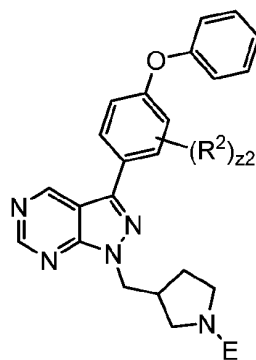
を有し、式中、 R^2 、 $z2$ 、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 8 6】

40

実施形態では、化合物は、式：

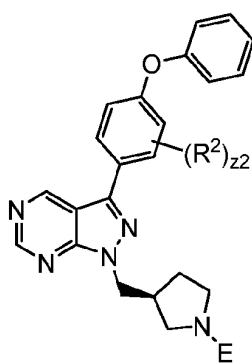
【化 4 1 0】



10

を有し、式中、 R^2 、 $z2$ 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

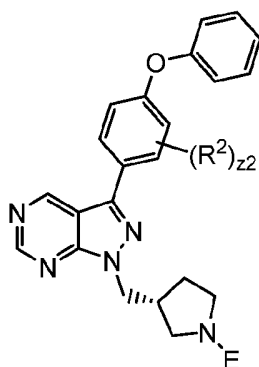
【化 4 1 1】



20

を有し、式中、 R^2 、 $z2$ 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 1 2】



30

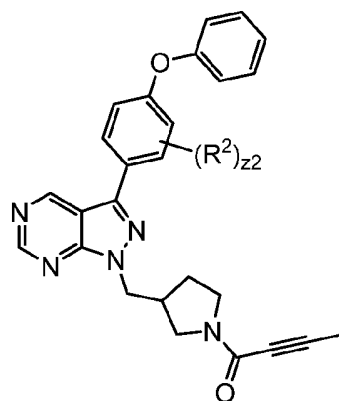
を有し、式中、 R^2 、 $z2$ 、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 8 7】

実施形態では、化合物は、式：

40

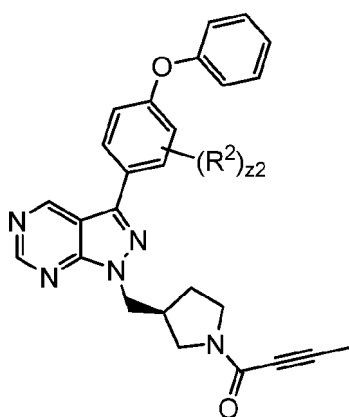
【化 4 1 3】



10

を有し、式中、 R^2 及び $z2$ は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

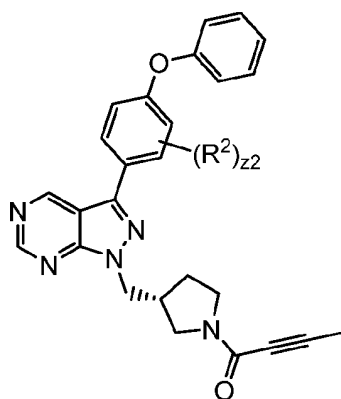
【化 4 1 4】



20

を有し、式中、 R^2 及び $z2$ は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 1 5】



30

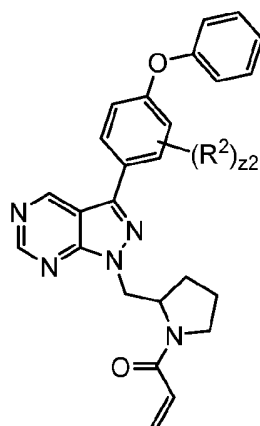
を有し、式中、 R^2 及び $z2$ は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 8 8】

実施形態では、化合物は、式：

40

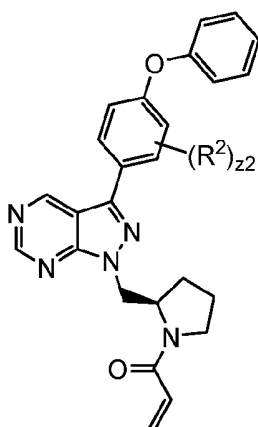
【化 4 1 6】



10

を有し、式中、 R^2 及び z_2 は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

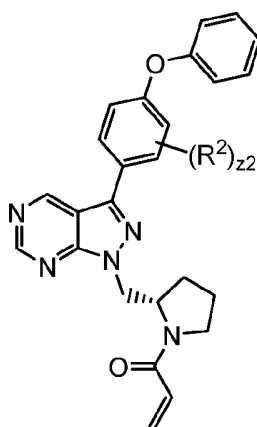
【化 4 1 7】



20

を有し、式中、 R^2 及び z_2 は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 1 8】



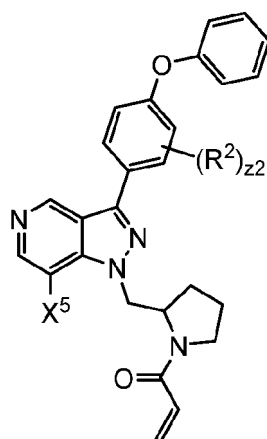
40

を有し、式中、 R^2 及び z_2 は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 8 9】

実施形態では、化合物は、式：

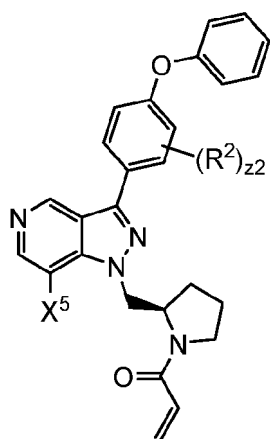
【化 4 1 9】



10

を有し、式中、 X^5 、 R^2 、及び $z2$ は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

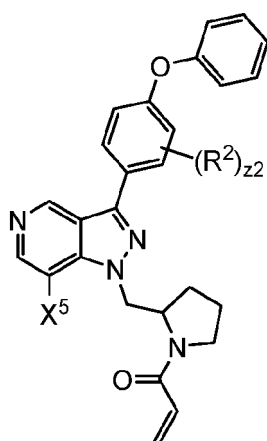
【化 4 2 0】



20

を有し、式中、 X^5 、 R^2 、及び $z2$ は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 2 1】



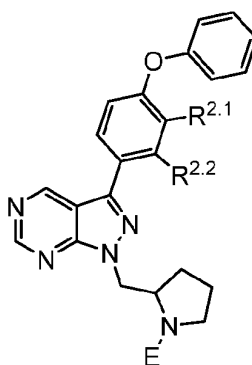
40

を有し、式中、 X^5 、 R^2 、及び $z2$ は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 9 0】

実施形態では、化合物は、式：

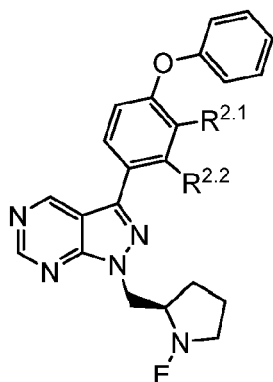
【化 4 2 2】



10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。R^{2.1}及びR^{2.2}は各々、結合した環上の固定位置でR¹である。R^{2.1}及びR^{2.2}は、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載のR²の任意の置換基であってもよい。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 2 3】

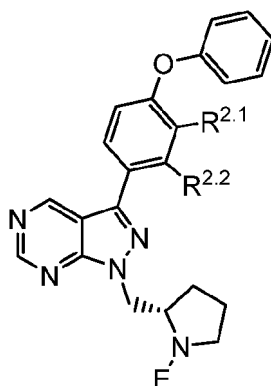


20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。R^{2.1}及びR^{2.2}は各々、結合した環上の固定位置でR¹である。R^{2.1}及びR^{2.2}は、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載のR²の任意の置換基であってもよい。実施形態では、化合物は、式：

30

【化 4 2 4】



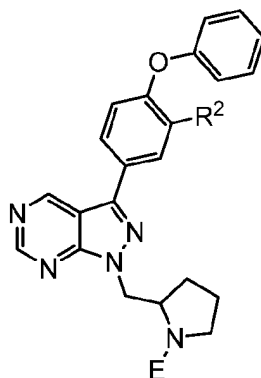
40

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。R^{2.1}及びR^{2.2}は各々、結合した環上の固定位置でR¹である。R^{2.1}及びR^{2.2}は、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載のR²の任意の置換基であってもよい。

【0 5 9 1】

実施形態では、化合物は、式：

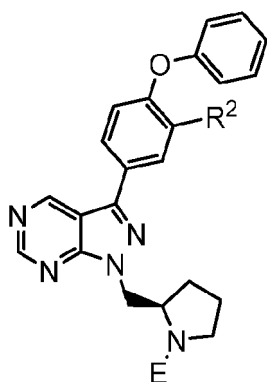
【化 4 2 5】



10

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

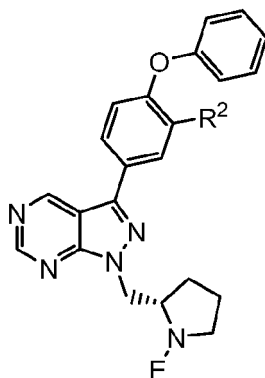
【化 4 2 6】



20

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 2 7】



30

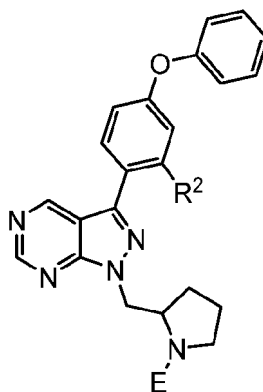
を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 9 2】

実施形態では、化合物は、式：

40

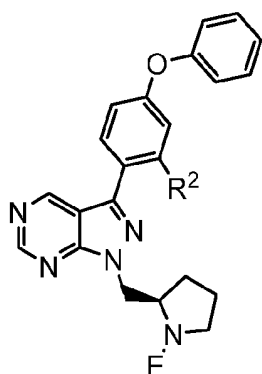
【化 4 2 8】



10

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

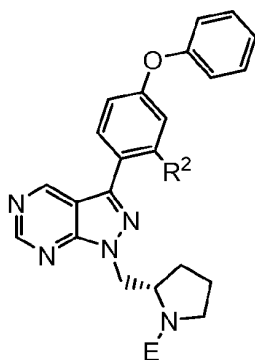
【化 4 2 9】



20

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 3 0】



30

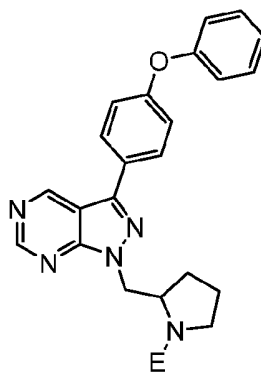
を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 5 9 3】

40

実施形態では、化合物は、式：

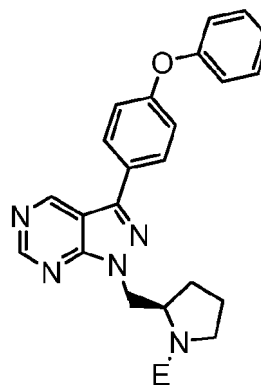
【化 4 3 1】



10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

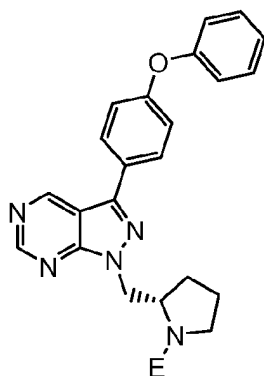
【化 4 3 2】



20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 3 3】



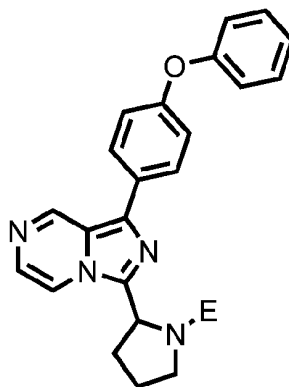
30

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 9 4】

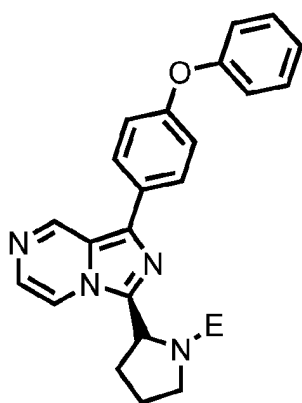
実施形態では、化合物は、式：

【化 4 3 4】



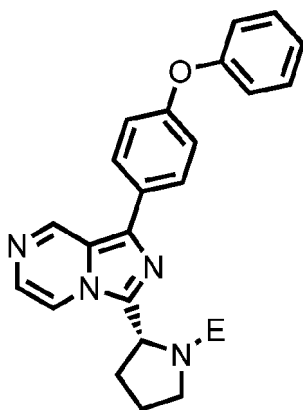
10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：
【化 4 3 5】



20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：
【化 4 3 6】



30

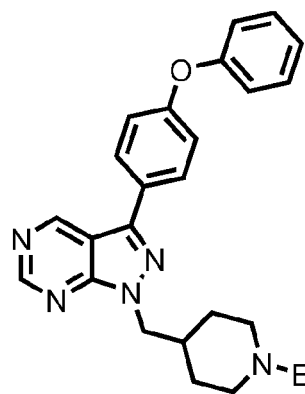
を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 9 5】

40

実施形態では、化合物は、式：

【化 4 3 7】



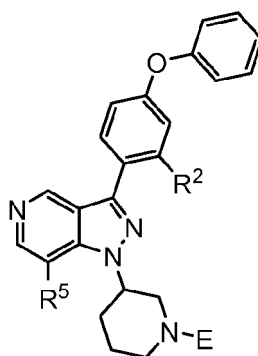
10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 9 6】

実施形態では、化合物は、式：

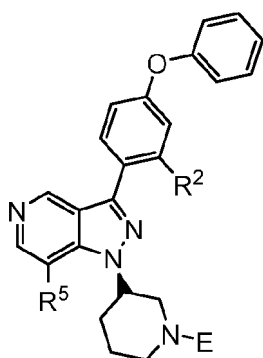
【化 4 3 8】



20

を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 3 9】

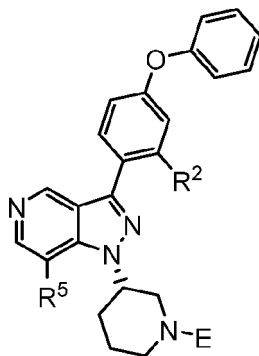


30

を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

40

【化 4 4 0】



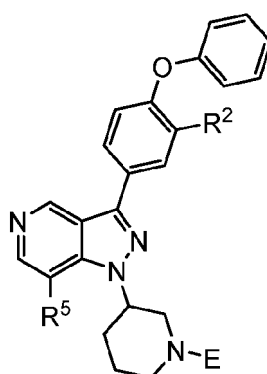
10

を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 9 7】

実施形態では、化合物は、式：

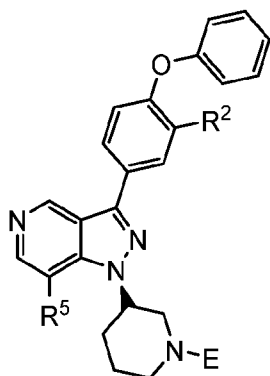
【化 4 4 1】



20

を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 4 2】

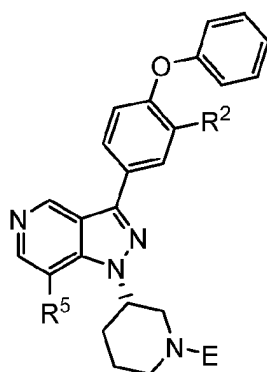


30

を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

40

【化 4 4 3】



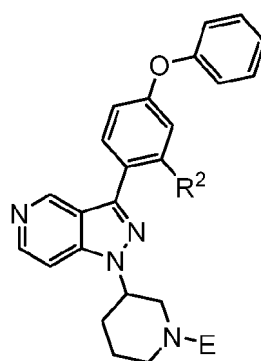
10

を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 5 9 8】

実施形態では、化合物は、式：

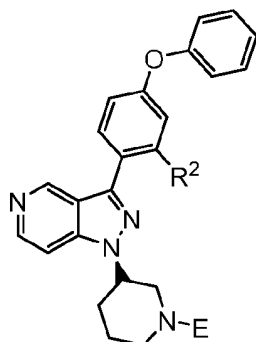
【化 4 4 4】



20

を有し、式中、 R^2 及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

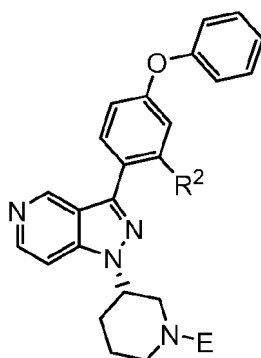
【化 4 4 5】



30

を有し、式中、 R^2 及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 4 6】



40

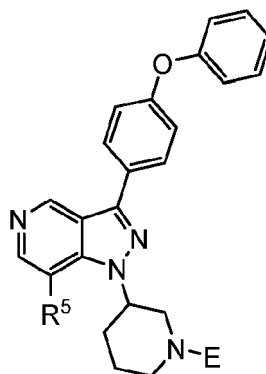
50

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0599】

実施形態では、化合物は、式：

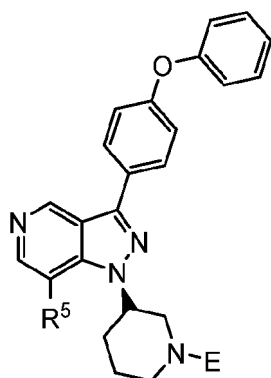
【化447】



10

を有し、式中、 R^5 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

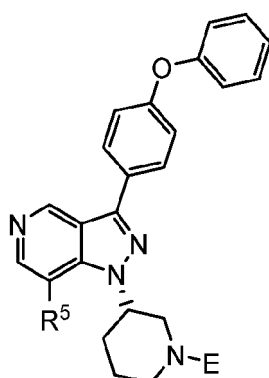
【化448】



20

を有し、式中、 R^5 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化449】



30

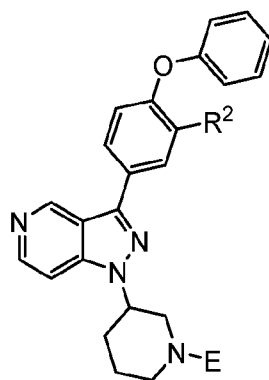
40

を有し、式中、 R^5 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0600】

実施形態では、化合物は、式：

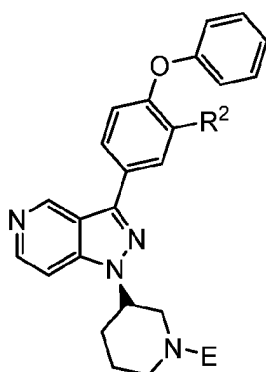
【化 4 5 0】



10

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

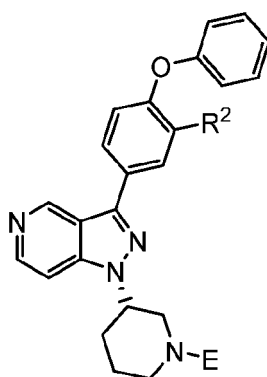
【化 4 5 1】



20

を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 5 2】



30

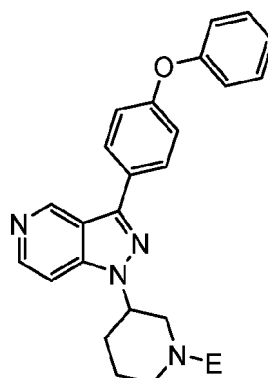
を有し、式中、 R^2 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 6 0 1】

40

実施形態では、化合物は、式：

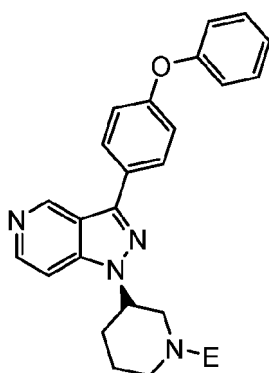
【化 4 5 3】



10

を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

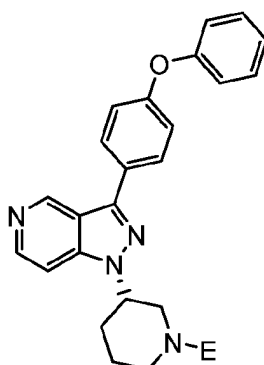
【化 4 5 4】



20

を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 5 5】



30

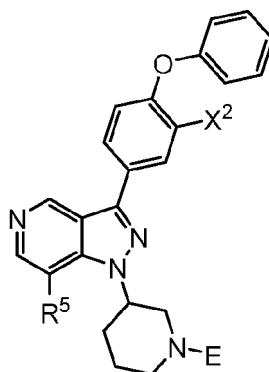
を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0 6 0 2】

実施形態では、化合物は、式：

40

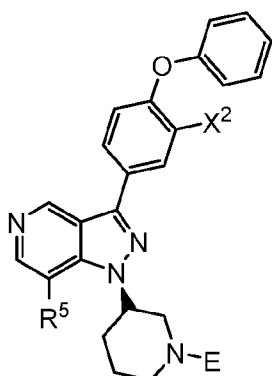
【化 4 5 6】



10

を有し、式中、 X^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

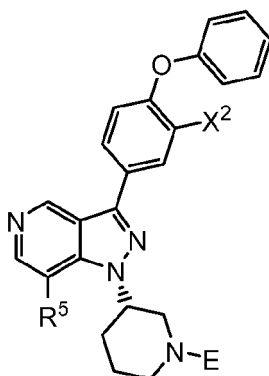
【化 4 5 7】



20

を有し、式中、 X^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 5 8】



30

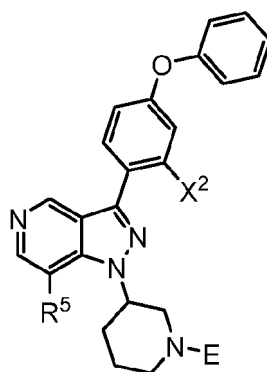
を有し、式中、 X^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 6 0 3】

実施形態では、化合物は、式：

40

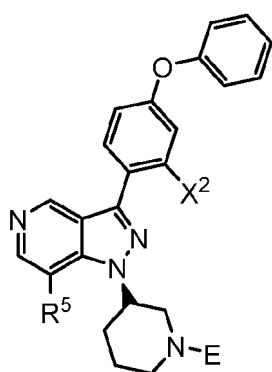
【化 4 5 9】



10

を有し、式中、 X^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

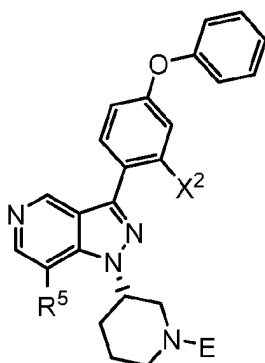
【化 4 6 0】



20

を有し、式中、 X^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 6 1】



30

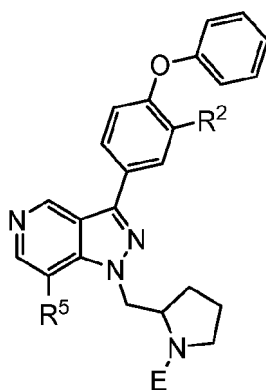
を有し、式中、 X^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 6 0 4】

実施形態では、化合物は、式：

40

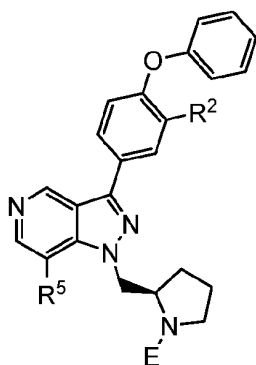
【化 4 6 2】



10

を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

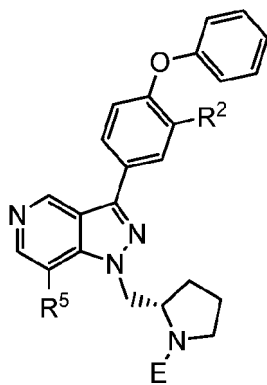
【化 4 6 3】



20

を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 6 4】



30

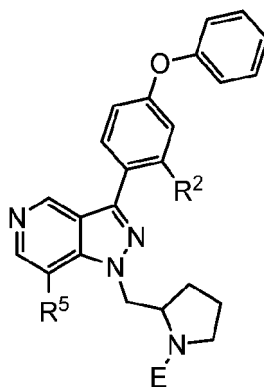
を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。

【0 6 0 5】

40

実施形態では、化合物は、式：

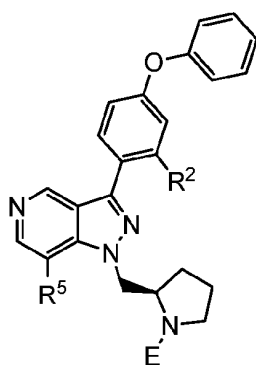
【化 4 6 5】



10

を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

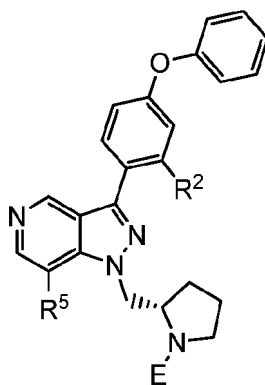
【化 4 6 6】



20

を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 6 7】



30

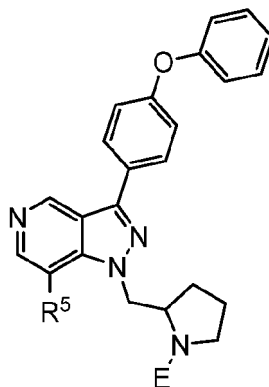
を有し、式中、 R^2 、 R^5 、及びEは、本明細書に記載される通りである。

40

【0 6 0 6】

実施形態では、化合物は、式：

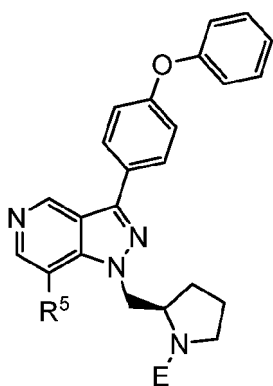
【化 4 6 8】



10

を有し、式中、 R^5 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

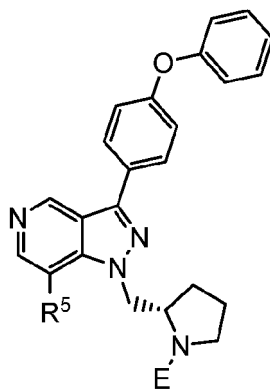
【化 4 6 9】



20

を有し、式中、 R^5 及び E は、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 7 0】



30

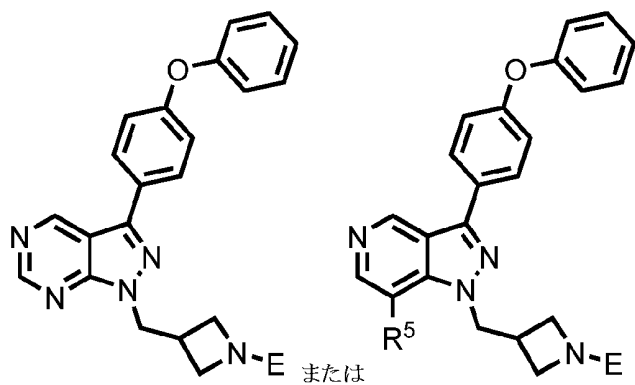
を有し、式中、 R^5 及び E は、本明細書に記載される通りである。

40

【0 6 0 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 4 7 1】



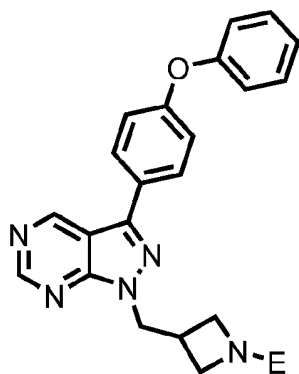
10

を有し、式中、 R^5 及び E は、本明細書に記載される通りである。

【0608】

実施形態では、化合物は、式：

【化 4 7 2】



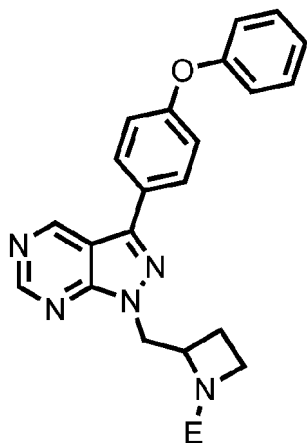
20

を有し、式中、E は、本明細書に記載される通りである。

【0609】

実施形態では、化合物は、式：

【化 4 7 3】



30

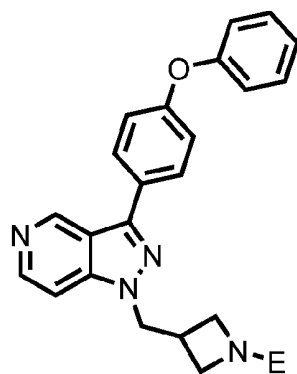
を有し、式中、E は、本明細書に記載される通りである。

【0610】

実施形態では、化合物は、式：

40

【化 4 7 4】



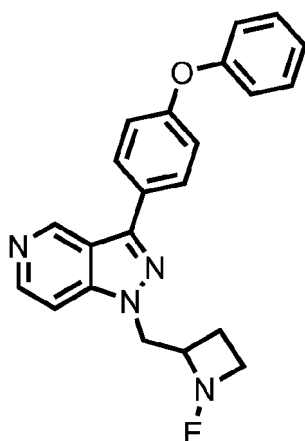
10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 6 1 1】

実施形態では、化合物は、式：

【化 4 7 5】



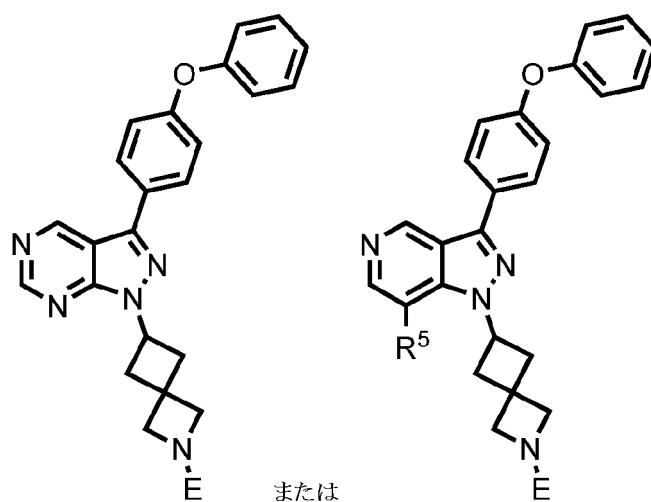
20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 6 1 2】

実施形態では、化合物は、式：

【化 4 7 6】



または

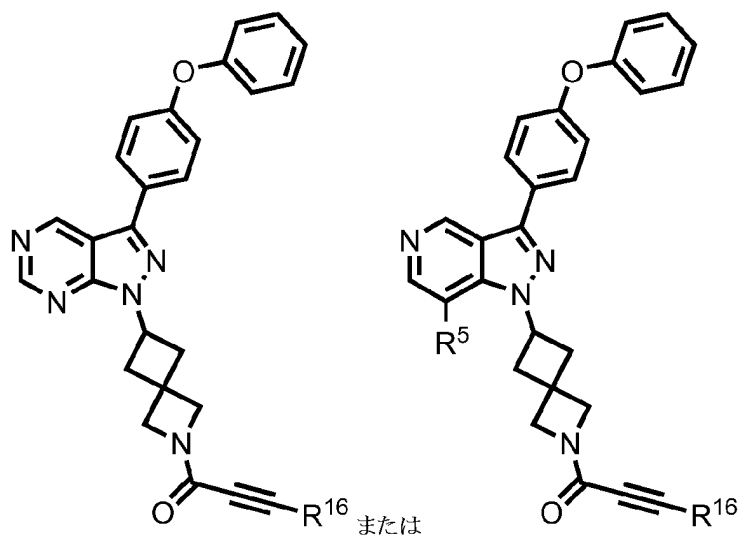
40

を有し、式中、R⁵ 及び Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 6 1 3】

実施形態では、化合物は、式：

【化 4 7 7】



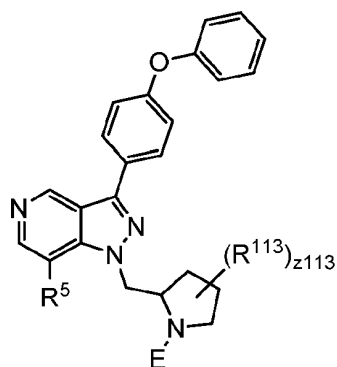
10

を有し、式中、 R^5 及び R^{16} は、本明細書に記載される通りである。

【0 6 1 4】

実施形態では、化合物は、式：

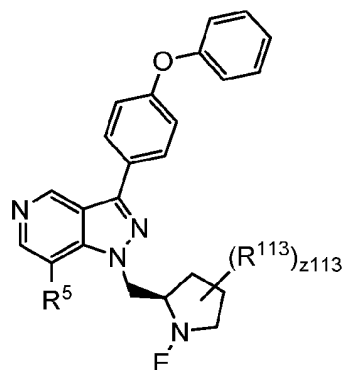
【化 4 7 8】



20

を有し、式中、 R^5 、 R^{113} 、及び E は、本明細書に記載される通りである。記号 $z113$ は、0～7の整数である。実施形態では、化合物は、式：

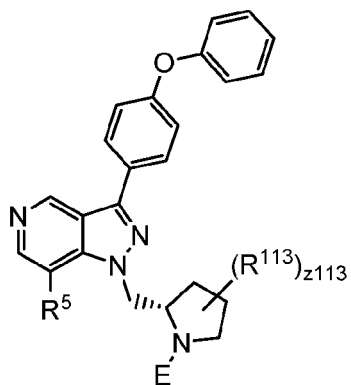
【化 4 7 9】



40

を有し、式中、 R^5 、 R^{113} 、及び E は、本明細書に記載される通りである。記号 $z113$ は、0～7の整数である。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 8 0】



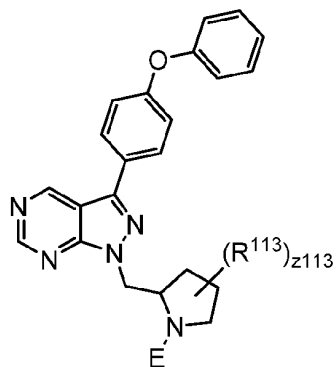
10

を有し、式中、 R^5 、 R^{113} 、及びEは、本明細書に記載される通りである。記号 z_{113} は、0～7の整数である。

【0 6 1 5】

実施形態では、化合物は、式：

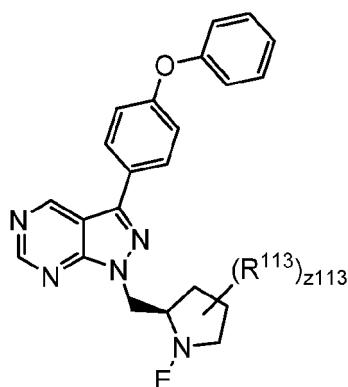
【化 4 8 1】



20

を有し、式中、 R^{113} 及びEは、本明細書に記載される通りである。記号 z_{113} は、0～7の整数である。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 8 2】



30

を有し、式中、 R^{113} 及びEは、本明細書に記載される通りである。記号 z_{113} は、0～7の整数である。実施形態では、化合物は、式：

40

c1ccc(cc1)Oc2ccc(cc2)c3nc4ncnc4n3C(F)(C5CC(R13)CC5)N5C6CCN(C6)CC5

を有し、式中、 $R^{1\ 1\ 3}$ 及び E は、本明細書に記載される通りである。記号 $z^{1\ 1\ 3}$ は、 $0 \sim 7$ の整数である。

実施形態では、化合物は、式：

c1ccc(cc1)Oc2ccc(cc2)c3nc4c(ncn4C(F)N)nc5ccncc35

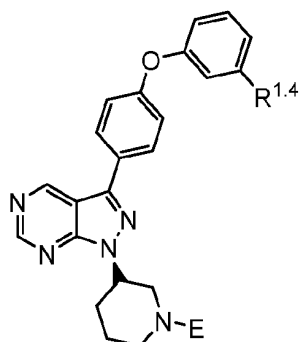
を有し、式中、 R^{4-1} 及び E は、本明細書に記載される通りである。

実施形態では、化合物は、式：

*c1ccc(Oc2ccc(cc2)c3nc4ncnc4n3C5CCN(E)CC5)cc1

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。 $R^{1 \cdot 4}$ は、結合した環上の固定位置で R^1 である。 $R^{1 \cdot 4}$ は、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載の R^1 の任意の置換基であってもよい。実施形態では、化合物は、式：

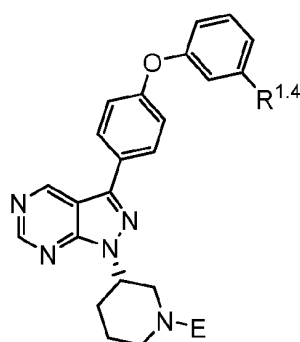
【化 4 8 6】



10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。R¹・⁴は、結合した環上の固定位置でR¹である。R¹・⁴は、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載のR¹の任意の置換基であってもよい。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 8 7】



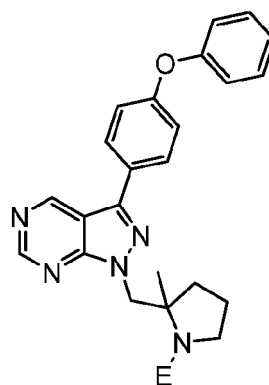
20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。R¹・⁴は、結合した環上の固定位置でR¹である。R¹・⁴は、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載のR¹の任意の置換基であってもよい。

【0 6 1 8】

実施形態では、化合物は、式：

【化 4 8 8】



30

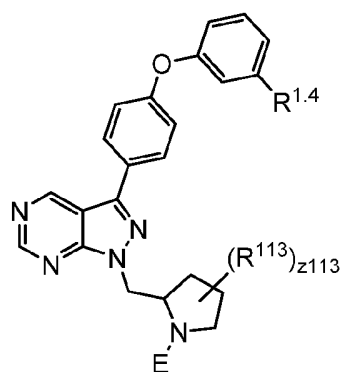
を有し、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 6 1 9】

実施形態では、化合物は、式：

40

【化 4 8 9】

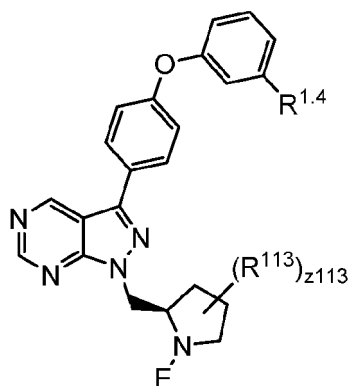


10

を有し、式中、 R^{113} 及び E は、本明細書に記載される通りである。記号 z_{113} は、0～7 の整数である。実施形態では、 z_{113} は、0 である。実施形態では、 z_{113} は、1 である。実施形態では、 z_{113} は、2 である。実施形態では、 z_{113} は、3 である。実施形態では、 z_{113} は、4 である。実施形態では、 z_{113} は、5 である。実施形態では、 z_{113} は、6 である。実施形態では、 z_{113} は、7 である。 R^{14} は、結合した環上の固定位置で R^1 である。 R^{14} は、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載の R^1 の任意の置換基であってもよい。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 9 0】

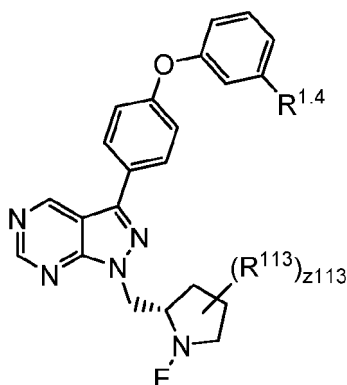
20



30

を有し、式中、 R^{113} 及び E は、本明細書に記載される通りである。記号 z_{113} は、0～7 の整数である。 R^{14} は、結合した環上の固定位置で R^1 である。 R^{14} は、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載の R^1 の任意の置換基であってもよい。実施形態では、化合物は、式：

【化 4 9 1】



40

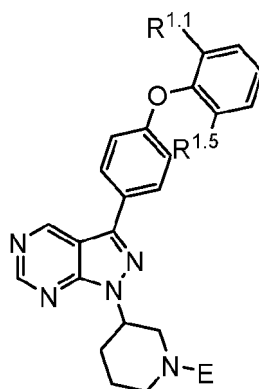
を有し、式中、 R^{113} 及び E は、本明細書に記載される通りである。記号 z_{113} は、0～7 の整数である。 R^{14} は、結合した環上の固定位置で R^1 である。 R^{14} は、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載の R^1 の任意の置換基であってもよい。

50

【0620】

実施形態では、化合物は、式：

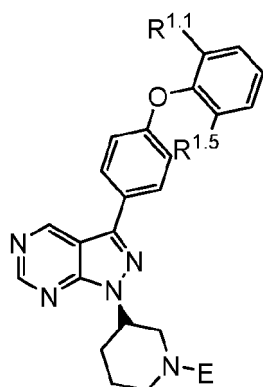
【化492】



10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。R^{1.1}及びR^{1.5}は各々、結合した環上の固定位置でR¹である。R^{1.1}及びR^{1.5}は独立して、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載のR¹の任意の置換基であってもよい。実施形態では、化合物は、式：

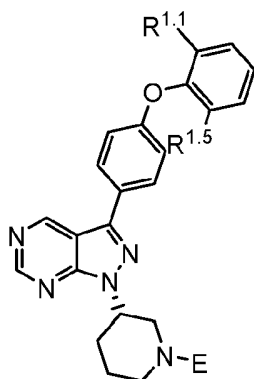
【化493】



20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。R^{1.1}及びR^{1.5}は各々、結合した環上の固定位置でR¹である。R^{1.1}及びR^{1.5}は独立して、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載のR¹の任意の置換基であってもよい。実施形態では、化合物は、式：

【化494】



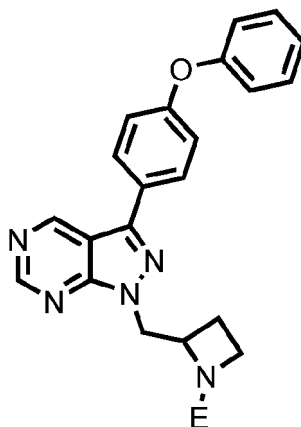
40

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。R^{1.1}及びR^{1.5}は各々、結合した環上の固定位置でR¹である。R^{1.1}及びR^{1.5}は独立して、任意の態様、実施形態、実施例、図、または請求項を含む、本明細書に記載のR¹の任意の置換基であってもよい。

【0621】

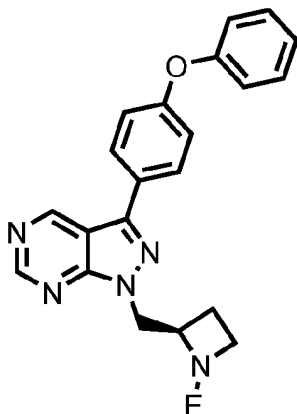
50

実施形態では、化合物は、式：
【化 4 9 5】



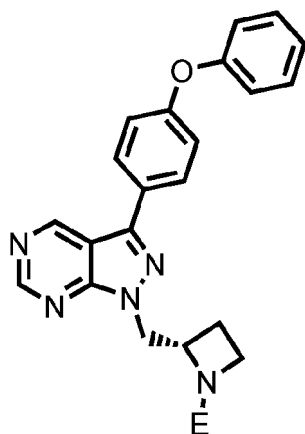
10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：
【化 4 9 6】



20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。実施形態では、化合物は、式：
【化 4 9 7】



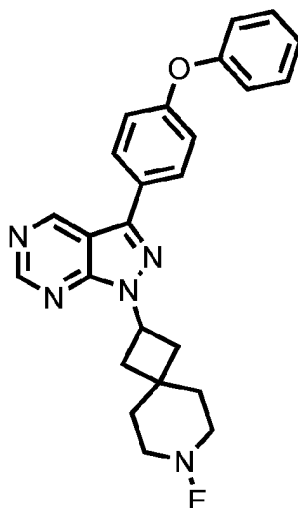
30

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。
【0 6 2 2】

実施形態では、化合物は、式：

40

【化 4 9 8】



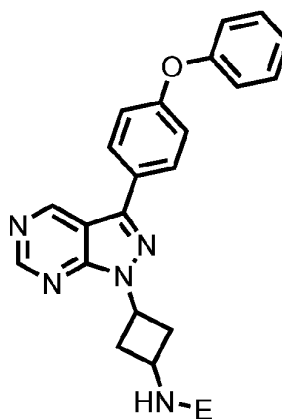
10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 6 2 3】

実施形態では、化合物は、式：

【化 4 9 9】



20

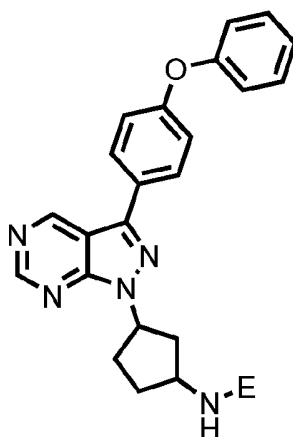
30

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 6 2 4】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 0 0】



40

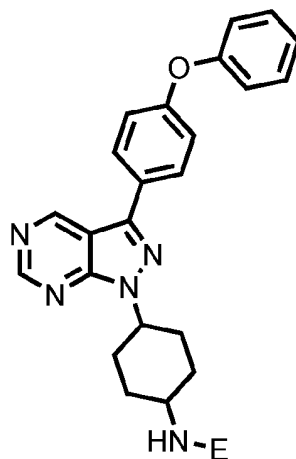
を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 6 2 5】

実施形態では、化合物は、式：

50

【化 5 0 1】



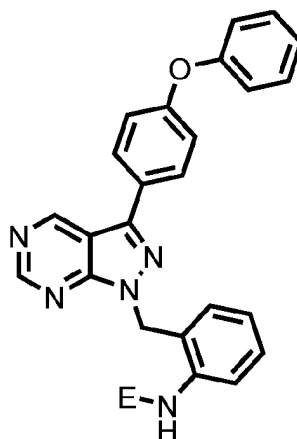
10

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 6 2 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 0 2】



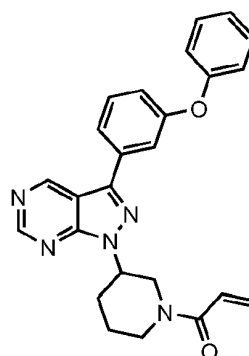
20

を有し、式中、Eは、本明細書に記載される通りである。

【0 6 2 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 0 3】



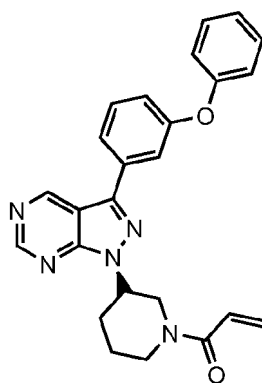
40

を有する。

【0 6 2 8】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 0 4】



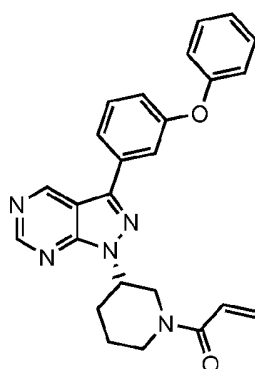
10

を有する。

【 0 6 2 9】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 0 5】



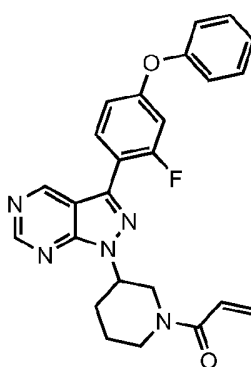
20

を有する。

【 0 6 3 0】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 0 6】



30

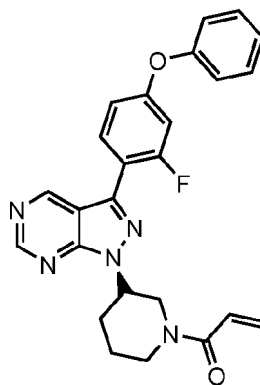
を有する。

【 0 6 3 1】

実施形態では、化合物は、式：

40

【化 5 0 7】



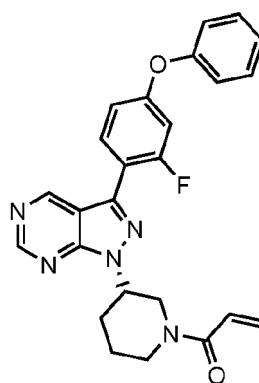
10

を有する。

【 0 6 3 2】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 0 8】



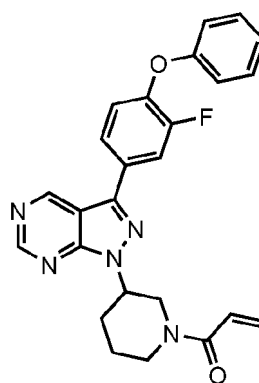
20

を有する。

【 0 6 3 3】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 0 9】



30

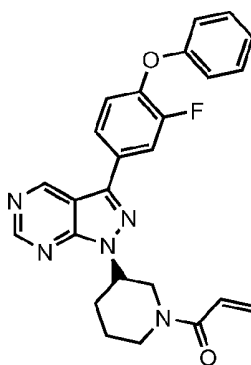
を有する。

【 0 6 3 4】

実施形態では、化合物は、式：

40

【化 5 1 0】



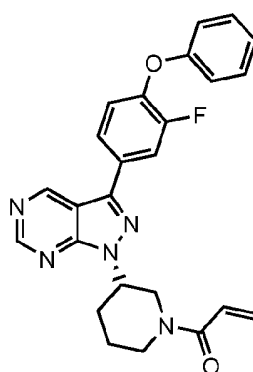
10

を有する。

【 0 6 3 5】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 1 1】



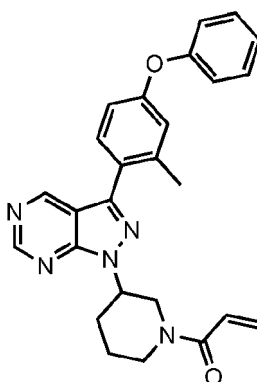
20

を有する。

【 0 6 3 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 1 2】



30

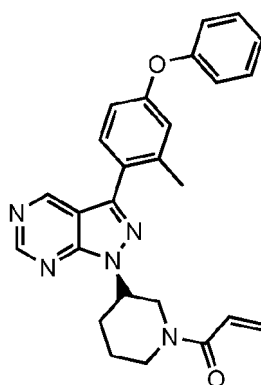
を有する。

【 0 6 3 7】

実施形態では、化合物は、式：

40

【化 5 1 3】



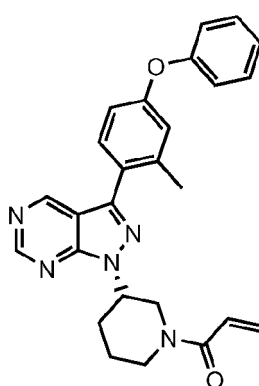
10

を有する。

【0 6 3 8】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 1 4】



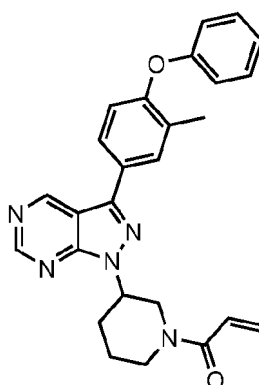
20

を有する。

【0 6 3 9】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 1 5】



30

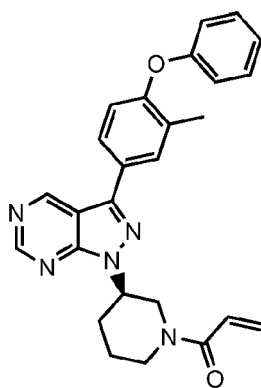
を有する。

【0 6 4 0】

実施形態では、化合物は、式：

40

【化 5 1 6】



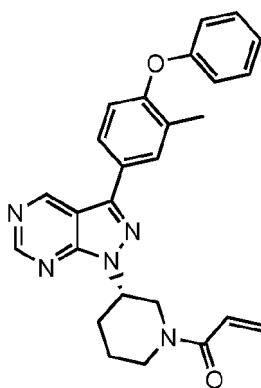
10

を有する。

【0 6 4 1】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 1 7】



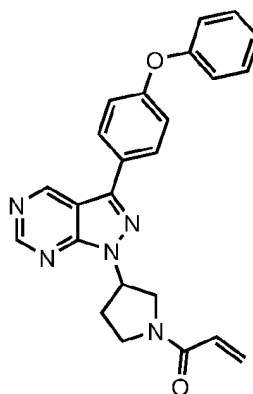
20

を有する。

【0 6 4 2】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 1 8】



30

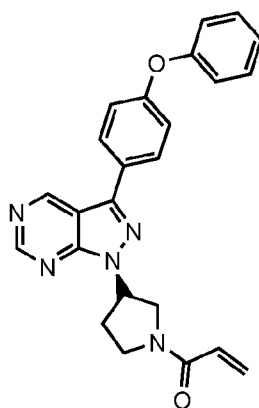
を有する。

【0 6 4 3】

実施形態では、化合物は、式：

40

【化 5 1 9】



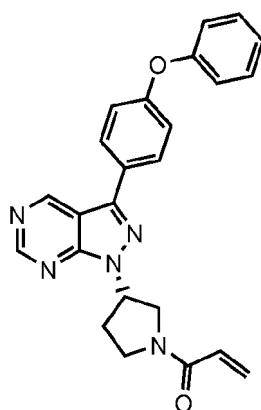
10

を有する。

【0 6 4 4】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 2 0】



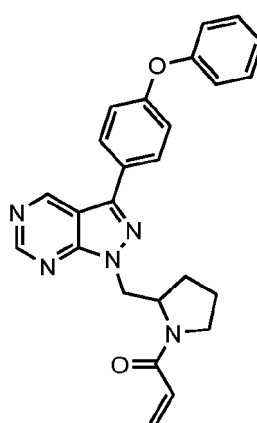
20

を有する。

【0 6 4 5】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 2 1】



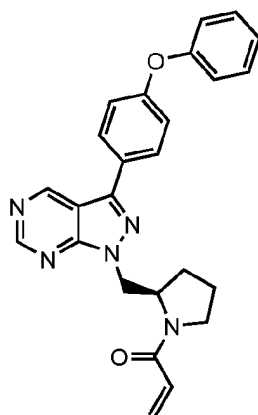
40

を有する。

【0 6 4 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 2 2】



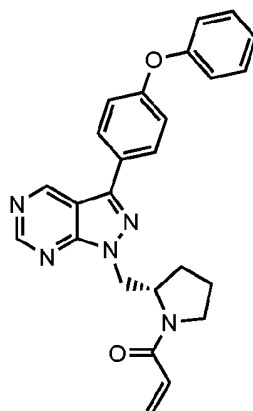
10

を有する。

【0 6 4 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 2 3】



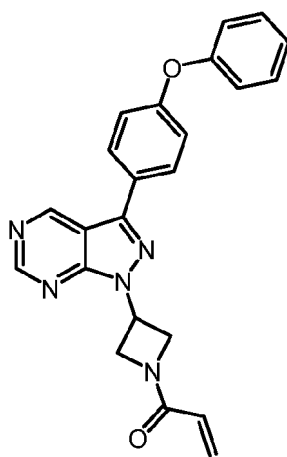
20

を有する。

【0 6 4 8】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 2 4】



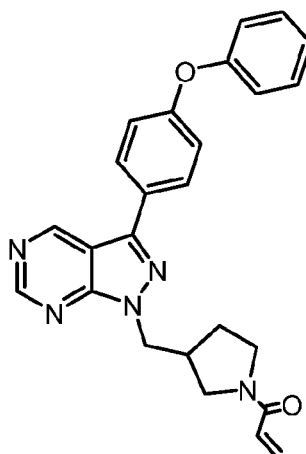
40

を有する。

【0 6 4 9】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 2 5】



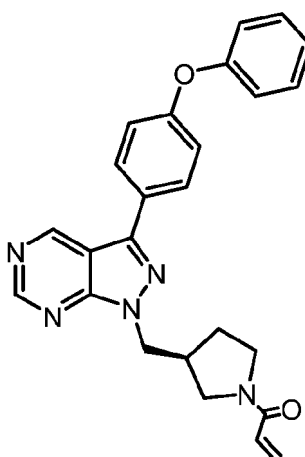
10

を有する。

【0 6 5 0】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 2 6】



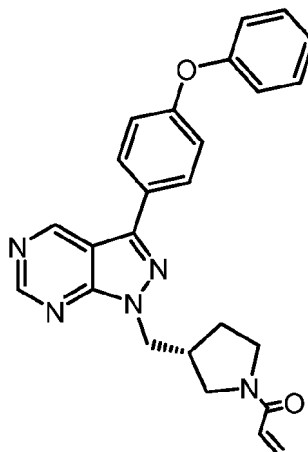
20

を有する。

【0 6 5 1】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 2 7】



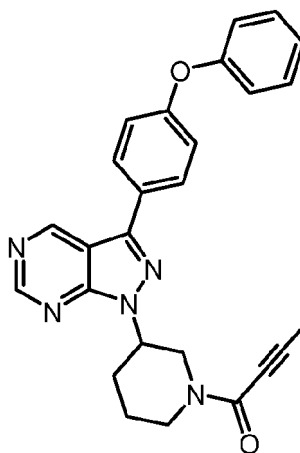
40

を有する。

【0 6 5 2】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 2 8】



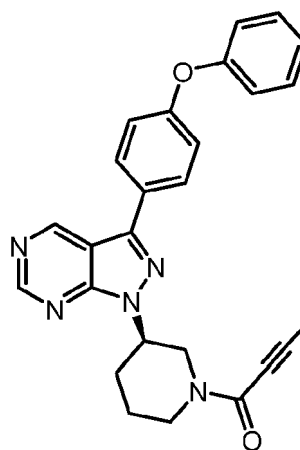
10

を有する。

【0 6 5 3】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 2 9】



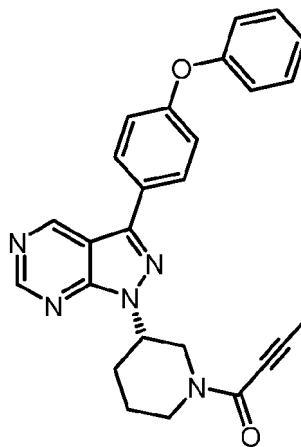
20

を有する。

【0 6 5 4】

実施形態では、化合物は、式：

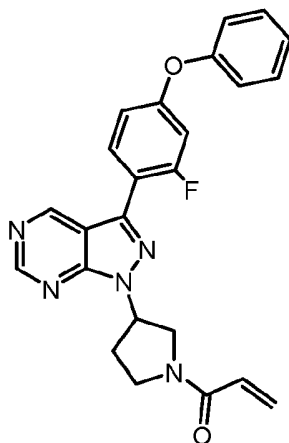
【化 5 3 0】



40

を有する。実施形態では、化合物は、式：

【化 5 3 1】



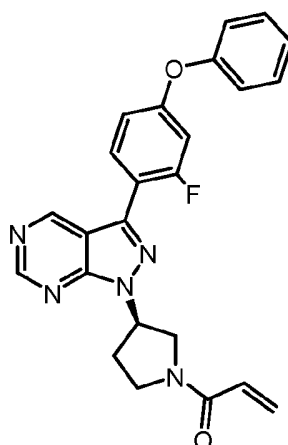
10

を有する。

【0 6 5 5】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 3 2】



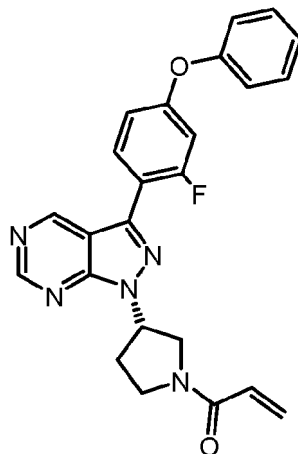
20

を有する。

【0 6 5 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 3 3】



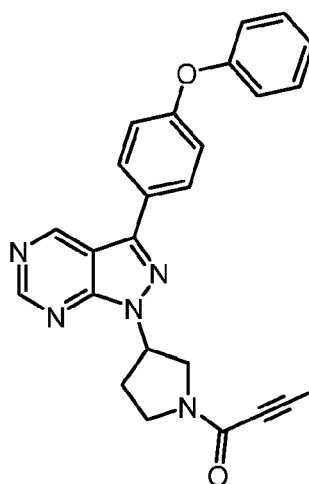
40

を有する。

【0 6 5 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 3 4】



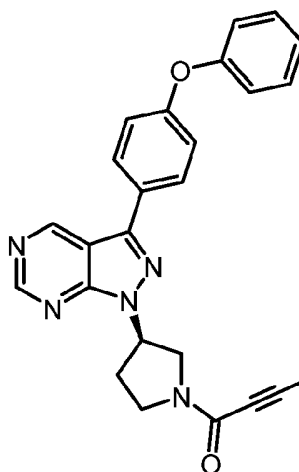
10

を有する。

【0 6 5 8】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 3 5】



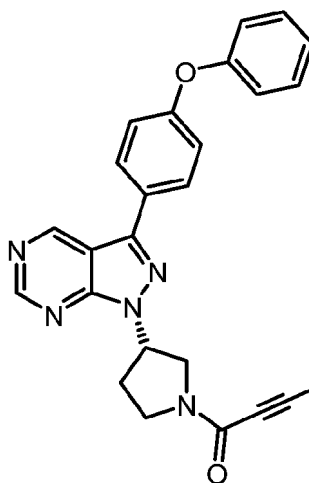
20

を有する。

【0 6 5 9】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 3 6】



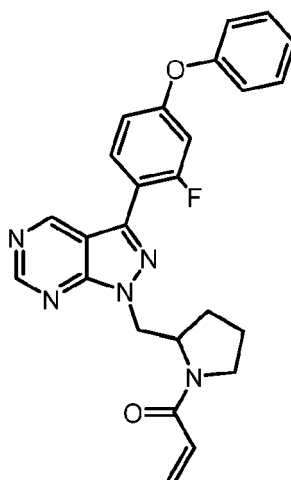
40

を有する。

【0 6 6 0】

50

実施形態では、化合物は、式：
【化 5 3 7】

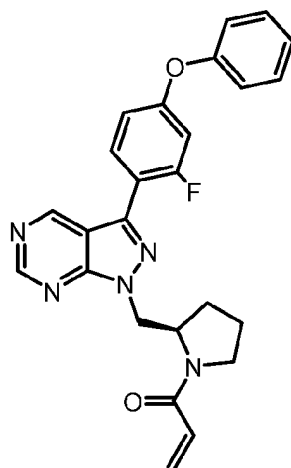


10

を有する。

【0 6 6 1】

実施形態では、化合物は、式：
【化 5 3 8】

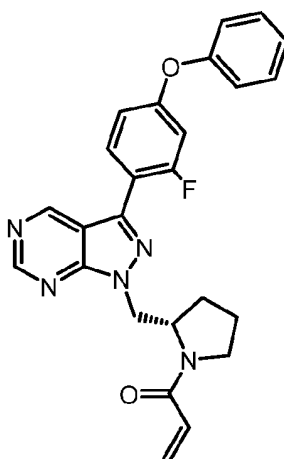


20

を有する。

【0 6 6 2】

実施形態では、化合物は、式：
【化 5 3 9】



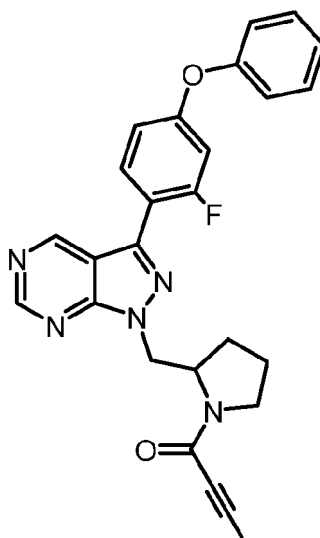
40

を有する。

【0 6 6 3】

50

実施形態では、化合物は、式：
【化 5 4 0】

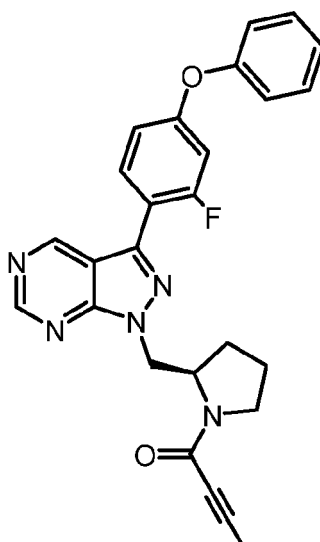


10

を有する。

【0 6 6 4】

実施形態では、化合物は、式：
【化 5 4 1】



20

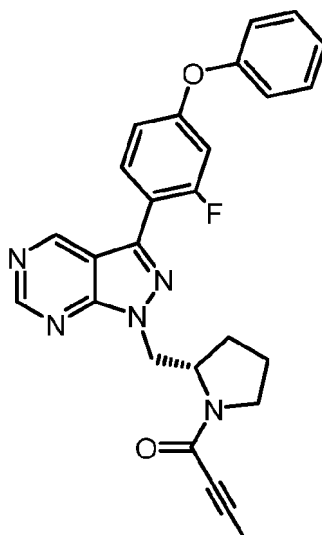
を有する。

【0 6 6 5】

実施形態では、化合物は、式：

30

【化 5 4 2】



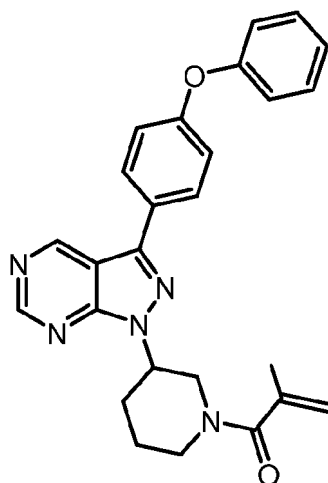
10

を有する。

【0 6 6 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 4 3】



20

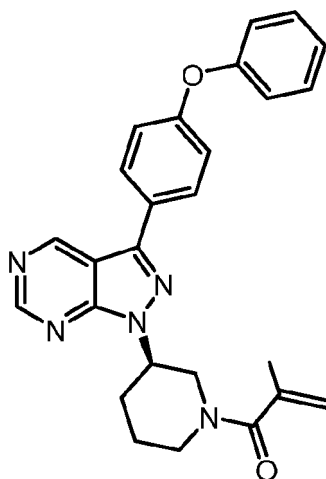
30

を有する。

【0 6 6 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 4 4】



40

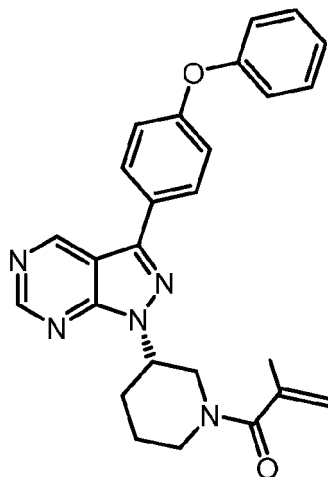
50

を有する。

【0668】

実施形態では、化合物は、式：

【化545】



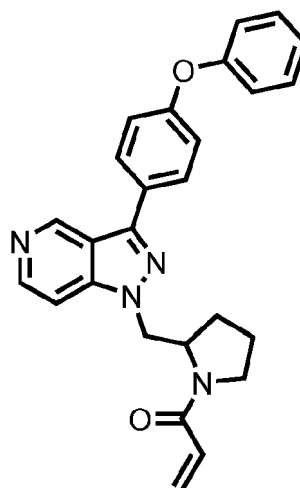
10

を有する。

【0669】

実施形態では、化合物は、式：

【化546】



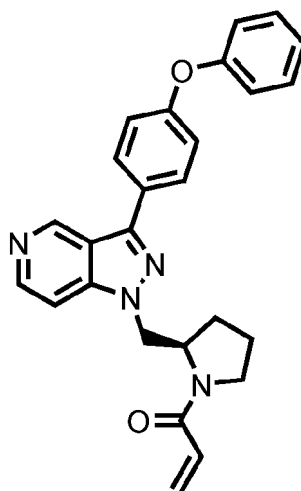
30

を有する。

【0670】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 4 7】



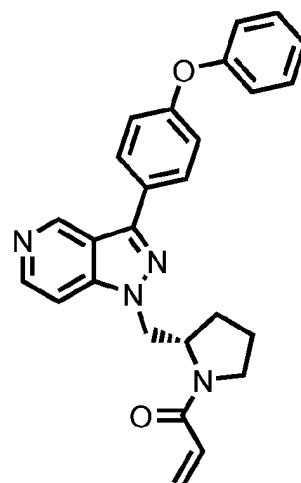
10

を有する。

【0 6 7 1】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 4 8】



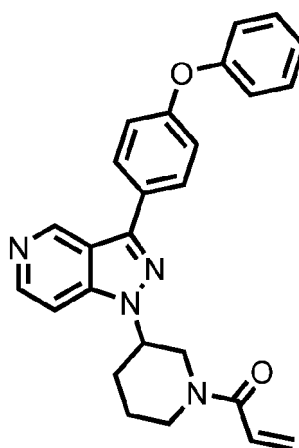
20

を有する。

【0 6 7 2】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 4 9】



40

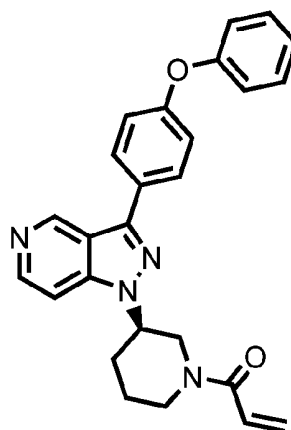
を有する。

【0 6 7 3】

実施形態では、化合物は、式：

50

【化 5 5 0】



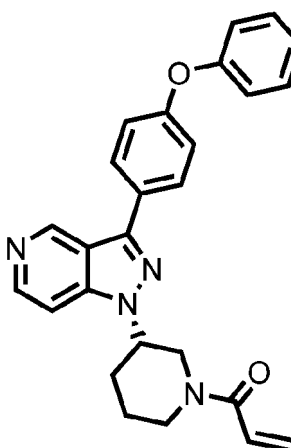
10

を有する。

【 0 6 7 4 】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 5 1】



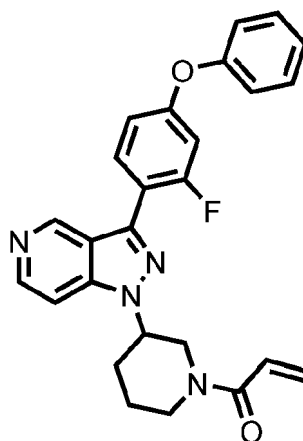
20

を有する。

【 0 6 7 5 】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 5 2】



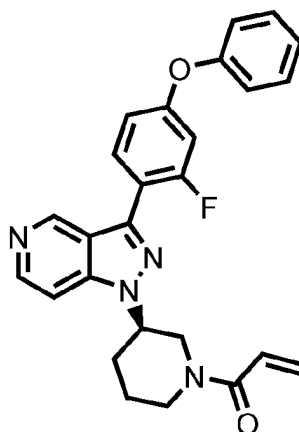
40

を有する。

【 0 6 7 6 】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 5 3】



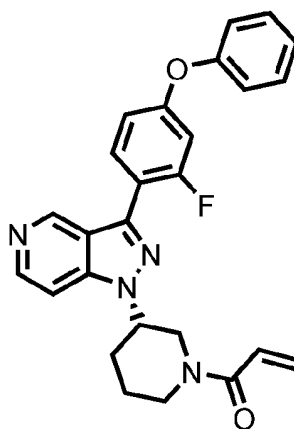
10

を有する。

【0 6 7 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 5 4】



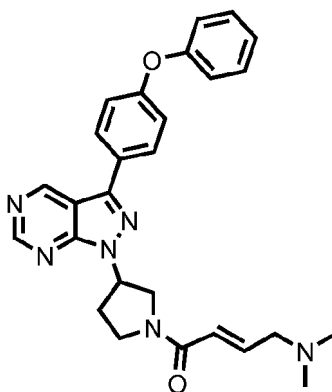
20

を有する。

【0 6 7 8】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 5 5】



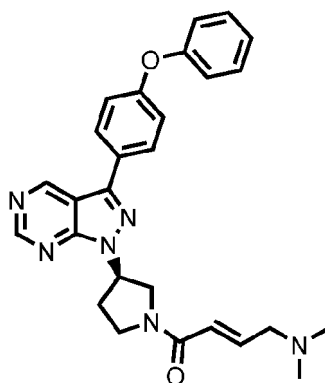
40

を有する。

【0 6 7 9】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 5 6】



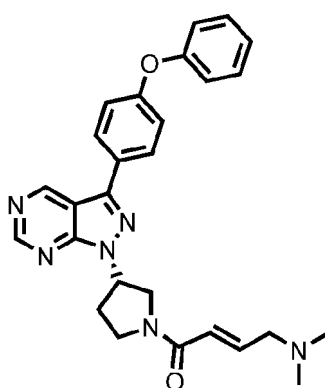
10

を有する。

【0 6 8 0】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 5 7】



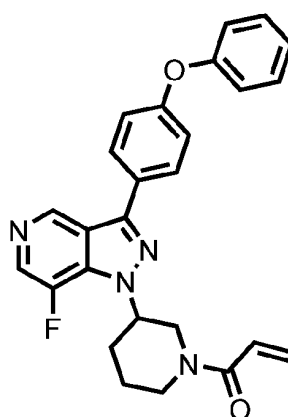
20

を有する。

【0 6 8 1】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 5 8】



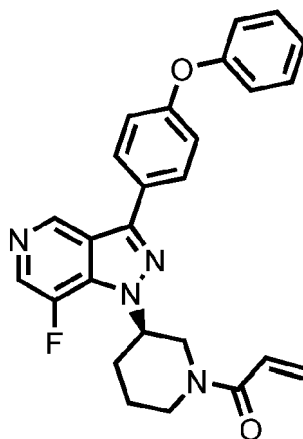
40

を有する。

【0 6 8 2】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 5 9】



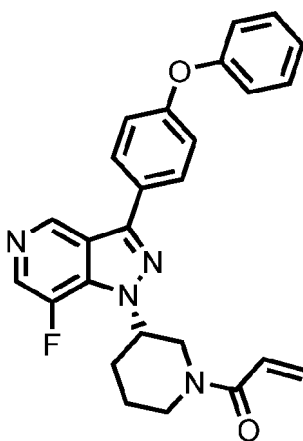
10

を有する。

【0 6 8 3】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 6 0】



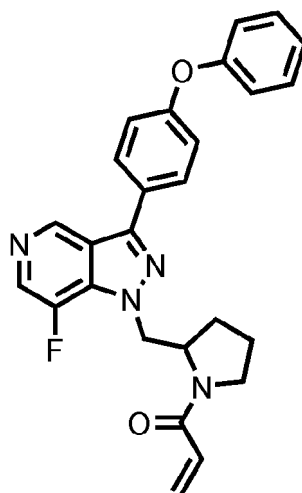
20

を有する。

【0 6 8 4】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 6 1】



40

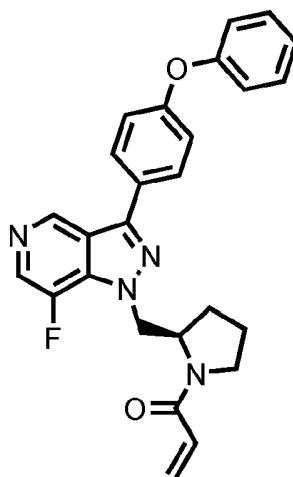
を有する。

【0 6 8 5】

実施形態では、化合物は、式：

50

【化 5 6 2】



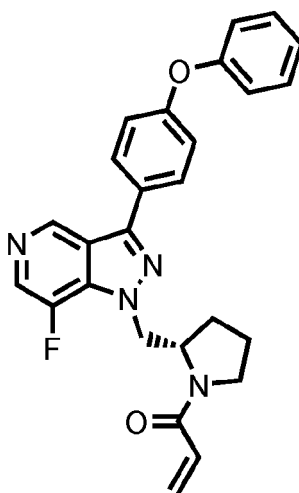
10

を有する。

【0 6 8 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 6 3】



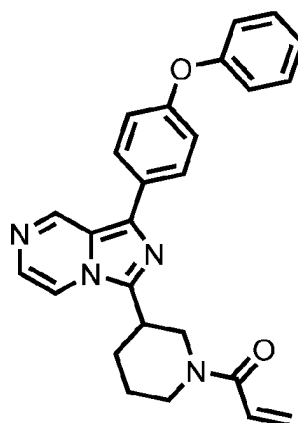
20

を有する。

【0 6 8 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 6 4】



40

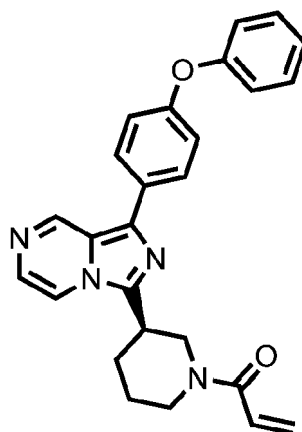
を有する。

【0 6 8 8】

実施形態では、化合物は、式：

50

【化 5 6 5】



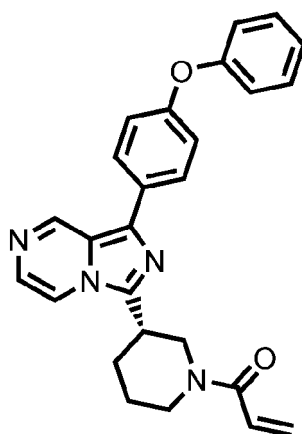
10

を有する。

【0 6 8 9】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 6 6】



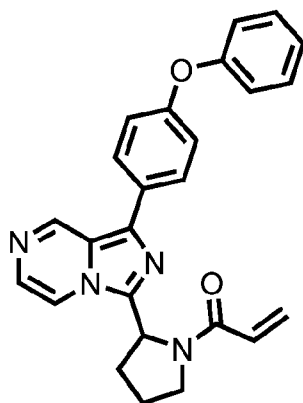
20

を有する。

【0 6 9 0】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 6 7】



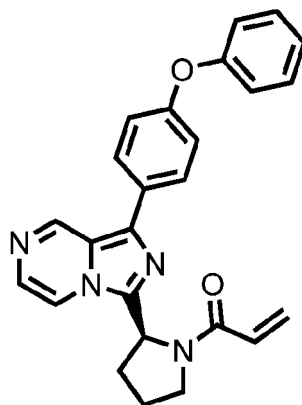
40

を有する。

【0 6 9 1】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 6 8】



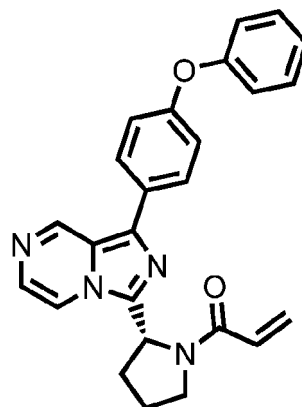
10

を有する。

【0 6 9 2】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 6 9】



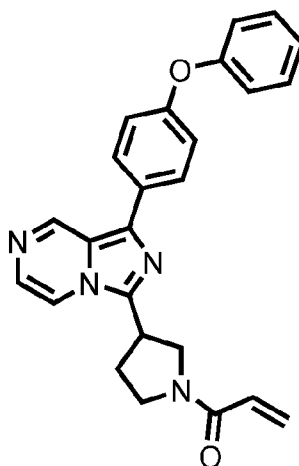
20

を有する。

【0 6 9 3】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 7 0】



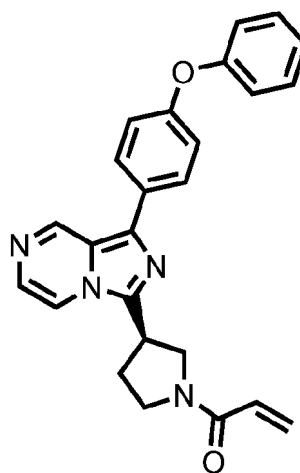
40

を有する。

【0 6 9 4】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 7 1】



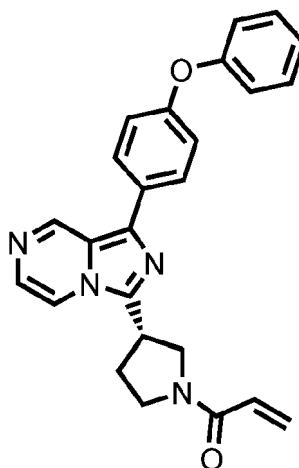
10

を有する。

【0 6 9 5】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 7 2】



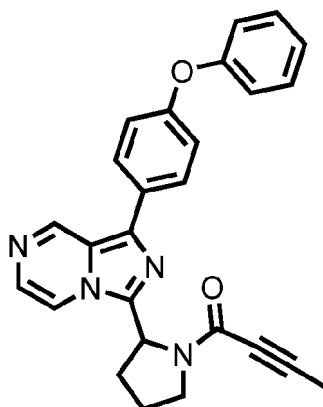
20

を有する。

【0 6 9 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 7 3】



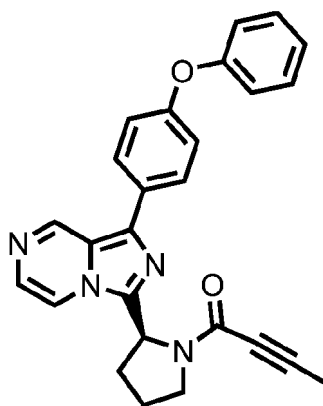
40

を有する。

【0 6 9 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 7 4】



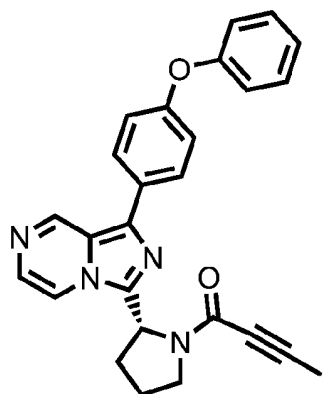
10

を有する。

【0 6 9 8】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 7 5】



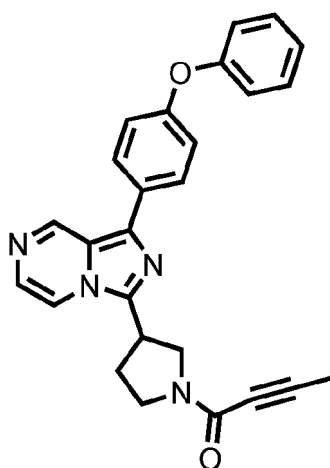
20

を有する。

【0 6 9 9】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 7 6】



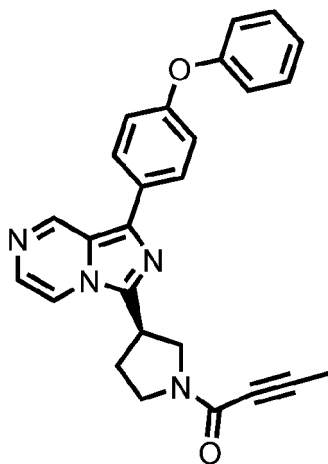
40

を有する。

【0 7 0 0】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 7 7】



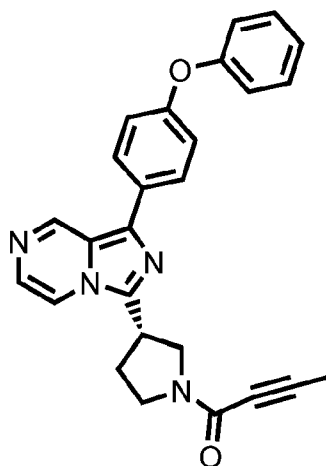
10

を有する。

【0 7 0 1】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 7 8】



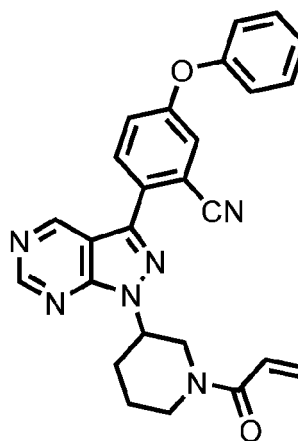
20

を有する。

【0 7 0 2】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 7 9】



30

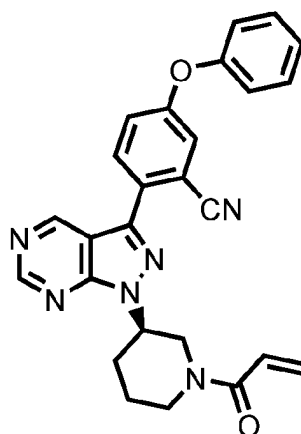
を有する。

【0 7 0 3】

実施形態では、化合物は、式：

40

【化 5 8 0】



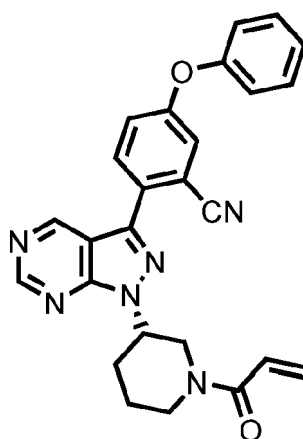
10

を有する。

【0 7 0 4】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 8 1】



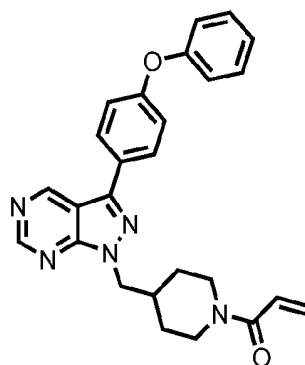
20

を有する。

【0 7 0 5】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 8 2】



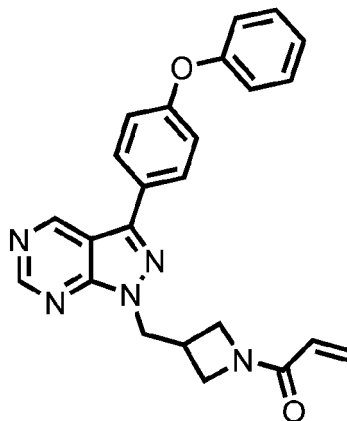
40

を有する。

【0 7 0 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 8 3】



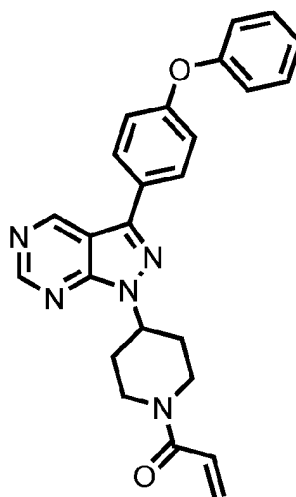
10

を有する。

【0 7 0 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 8 4】



20

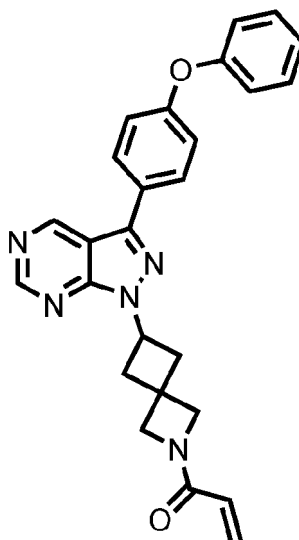
30

を有する。

【0 7 0 8】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 8 5】



40

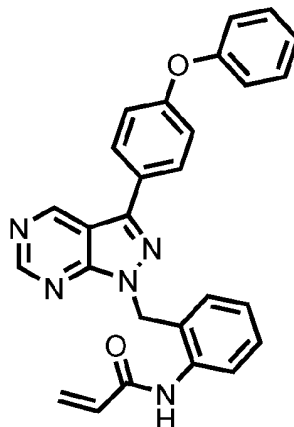
50

を有する。

【0709】

実施形態では、化合物は、式：

【化586】



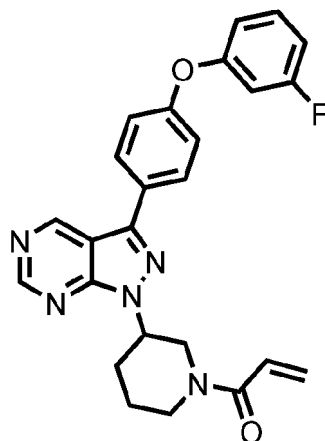
10

を有する。

【0710】

実施形態では、化合物は、式：

【化587】



20

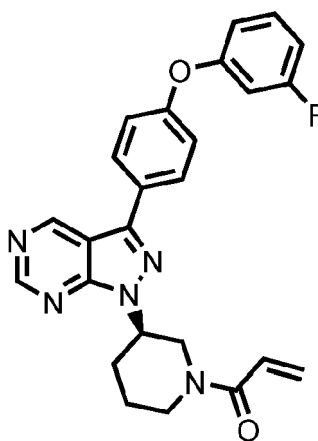
30

を有する。

【0711】

実施形態では、化合物は、式：

【化588】



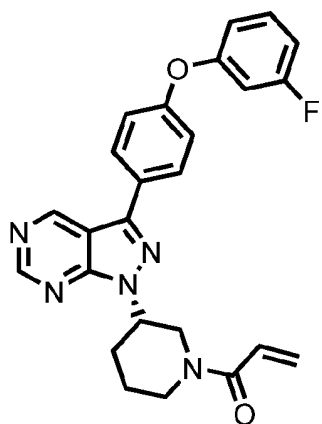
40

を有する。

【0712】

50

実施形態では、化合物は、式：
【化 5 8 9】

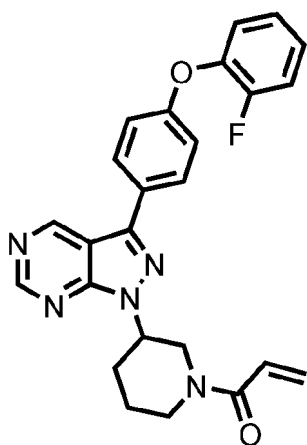


10

を有する。

【0 7 1 3】

実施形態では、化合物は、式：
【化 5 9 0】

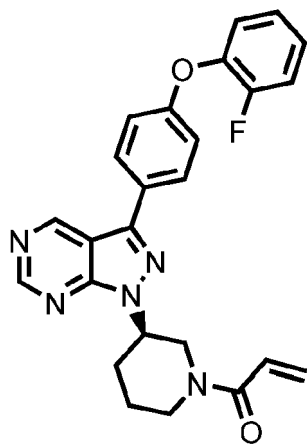


20

を有する。

【0 7 1 4】

実施形態では、化合物は、式：
【化 5 9 1】



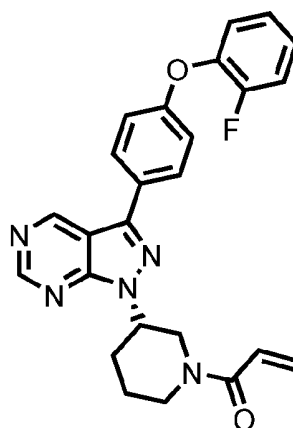
40

を有する。

【0 7 1 5】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 9 2】



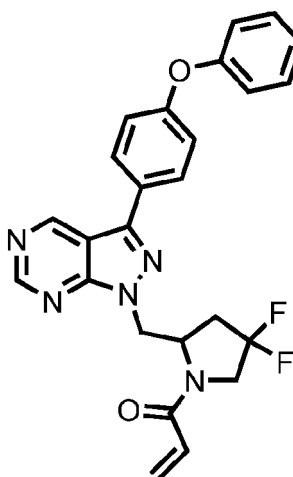
10

を有する。

【0 7 1 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 9 3】



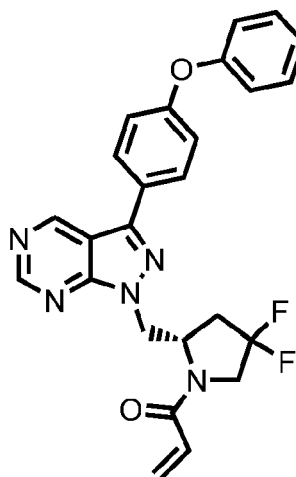
20

を有する。

【0 7 1 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 9 4】



40

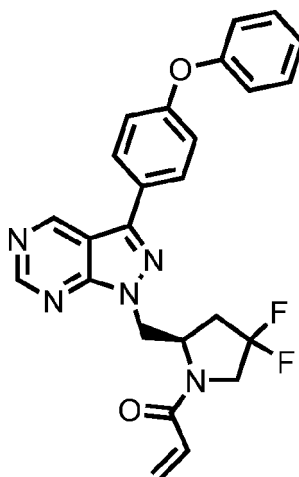
を有する。

【0 7 1 8】

実施形態では、化合物は、式：

50

【化 5 9 5】



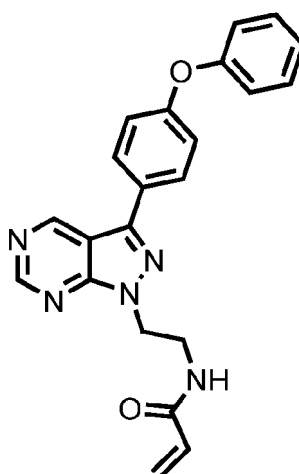
10

を有する。

【0 7 1 9】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 9 6】



20

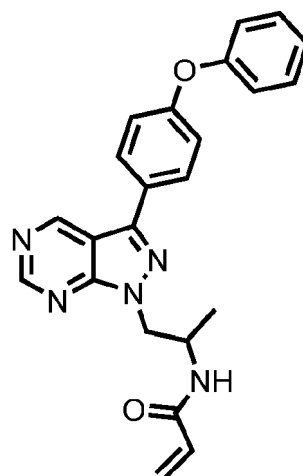
30

を有する。

【0 7 2 0】

実施形態では、化合物は、式：

【化 5 9 7】



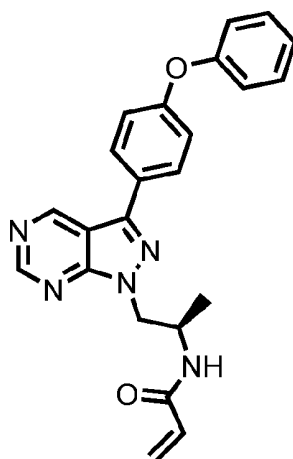
40

を有する。

【0 7 2 1】

50

実施形態では、化合物は、式：
【化 5 9 8】

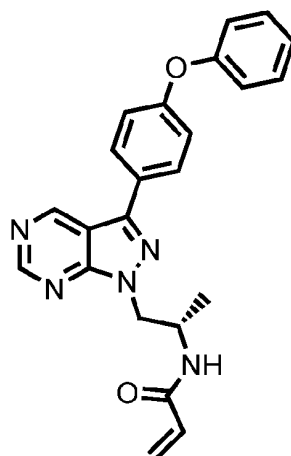


10

を有する。

【0 7 2 2】

実施形態では、化合物は、式：
【化 5 9 9】

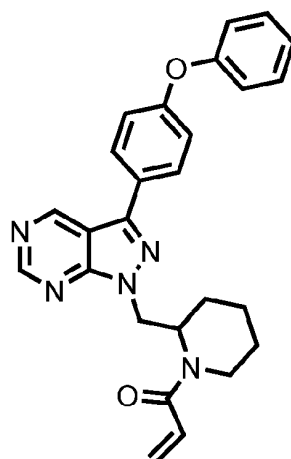


20

を有する。

【0 7 2 3】

実施形態では、化合物は、式：
【化 6 0 0】



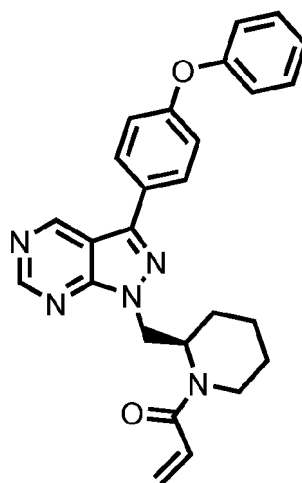
40

を有する。

【0 7 2 4】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 0 1】



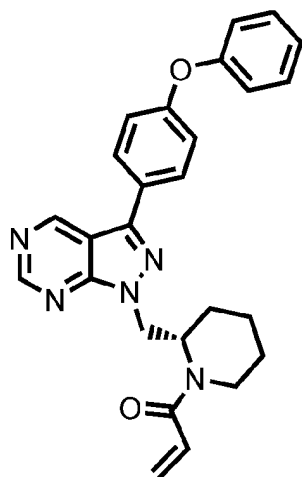
10

を有する。

【 0 7 2 5】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 0 2】



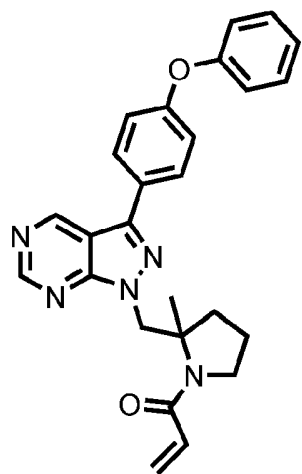
20

を有する。

【 0 7 2 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 0 3】



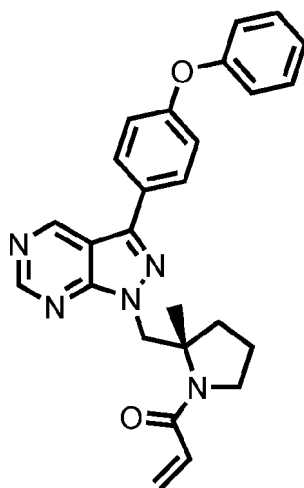
40

を有する。

【 0 7 2 7】

50

実施形態では、化合物は、式：
【化 6 0 4】

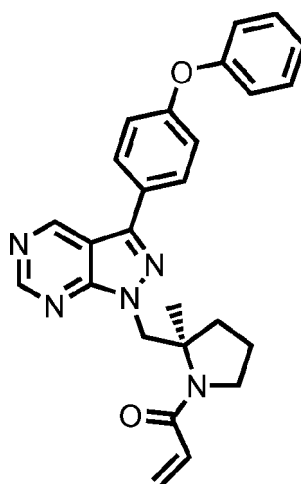


10

を有する。

【0 7 2 8】

実施形態では、化合物は、式：
【化 6 0 5】

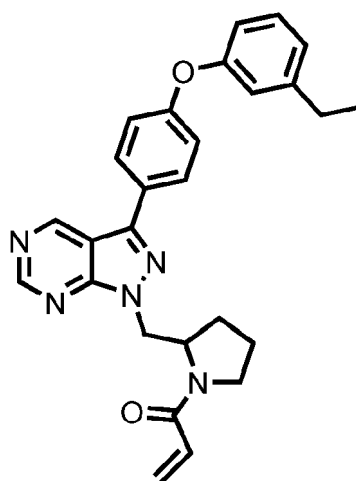


20

を有する。

【0 7 2 9】

実施形態では、化合物は、式：
【化 6 0 6】



40

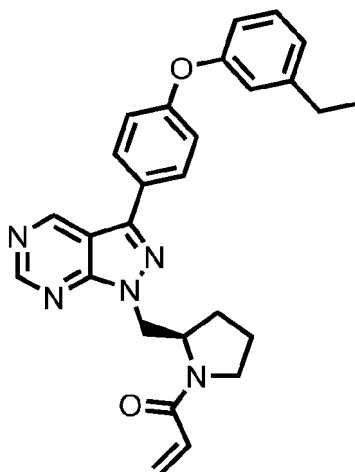
を有する。

50

【0730】

実施形態では、化合物は、式：

【化607】



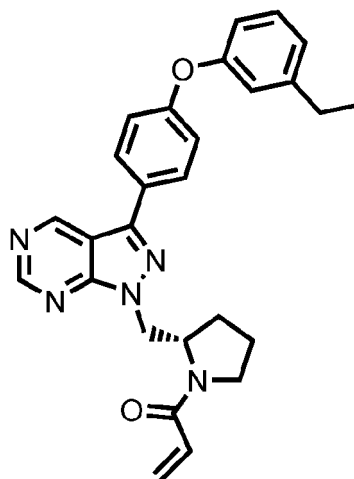
10

を有する。

【0731】

実施形態では、化合物は、式：

【化608】



20

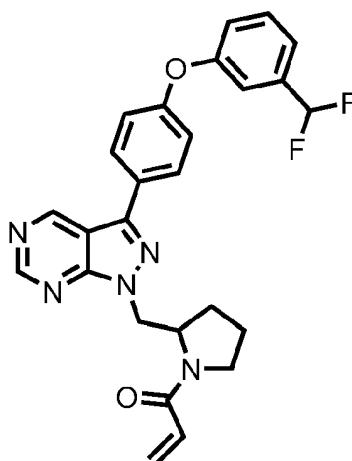
30

を有する。

【0732】

実施形態では、化合物は、式：

【化609】



40

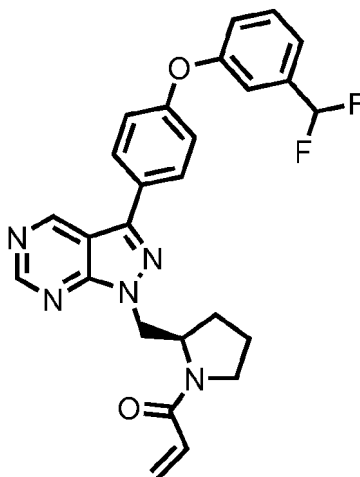
50

を有する。

【0733】

実施形態では、化合物は、式：

【化610】



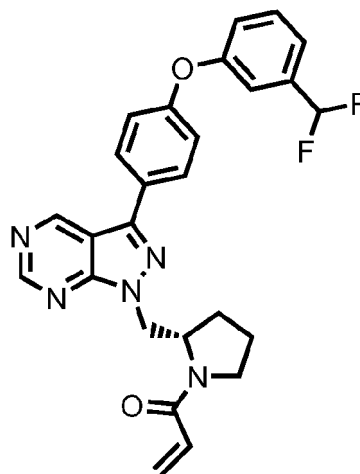
10

を有する。

【0734】

実施形態では、化合物は、式：

【化611】



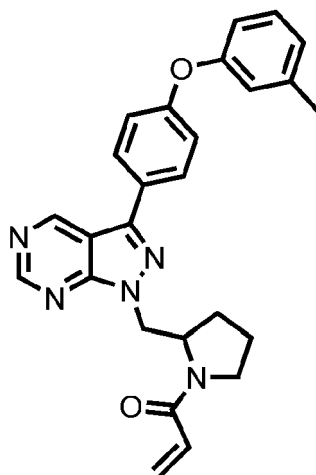
30

を有する。

【0735】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 1 2】



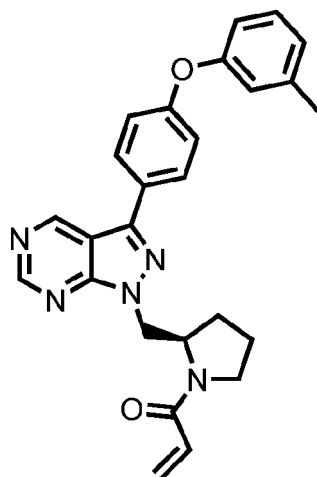
10

を有する。

【0 7 3 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 1 3】



20

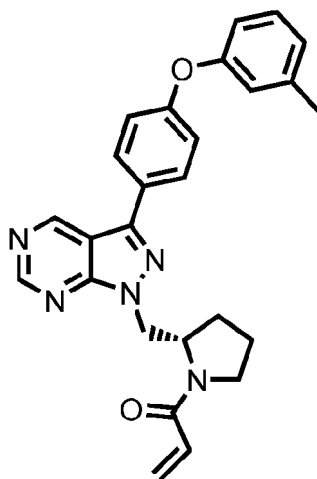
30

を有する。

【0 7 3 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 1 4】



40

を有する。

【0 7 3 8】

50

実施形態では、化合物は、式：
【化 6 1 5】



を有する。

【 0 7 3 9 】

実施形態では、化合物は、式：
【化 6 1 6】



を有する。

【 0 7 4 0 】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 1 7】

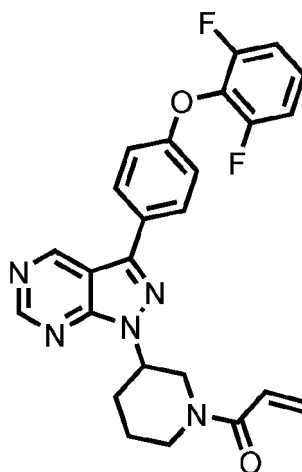


を有する。

【0741】

実施形態では、化合物は、式：

【化618】



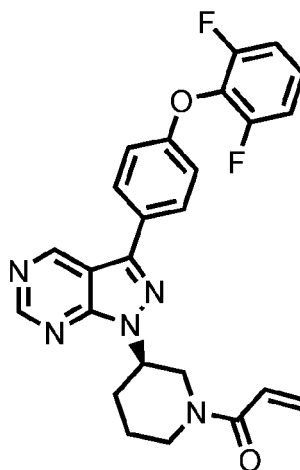
10

を有する。

【0742】

実施形態では、化合物は、式：

【化619】



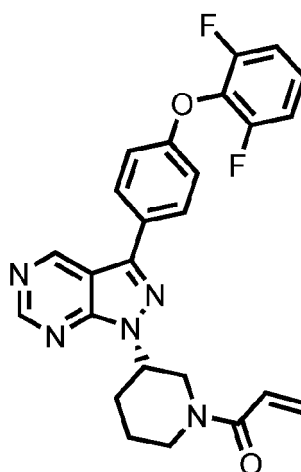
30

を有する。

【0743】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 2 0】



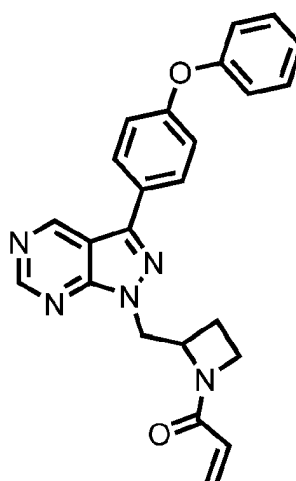
10

を有する。

【 0 7 4 4】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 2 1】



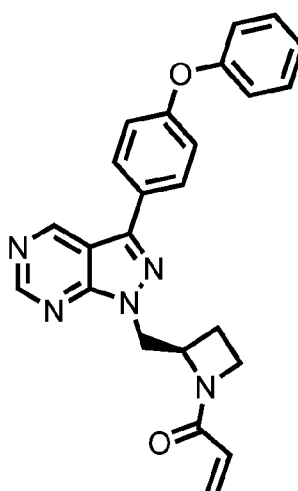
20

を有する。

【 0 7 4 5】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 2 2】



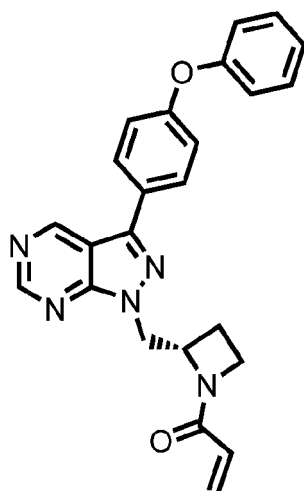
40

を有する。

【 0 7 4 6】

50

実施形態では、化合物は、式：
【化 6 2 3】

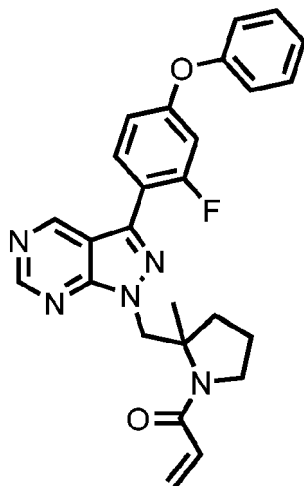


10

を有する。

【0 7 4 7】

実施形態では、化合物は、式：
【化 6 2 4】

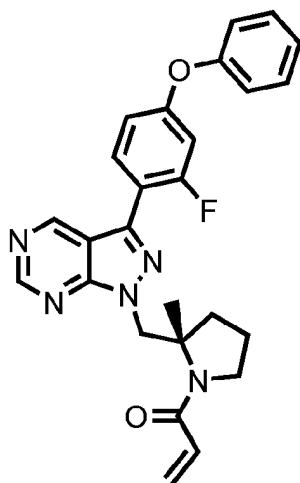


20

を有する。

【0 7 4 8】

実施形態では、化合物は、式：
【化 6 2 5】



40

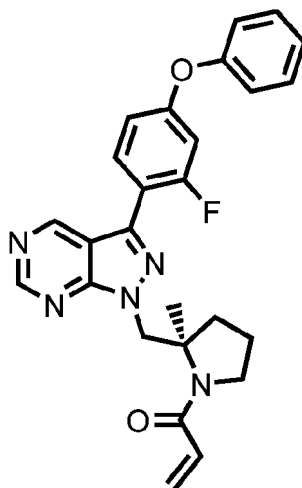
を有する。

50

【0749】

実施形態では、化合物は、式：

【化626】



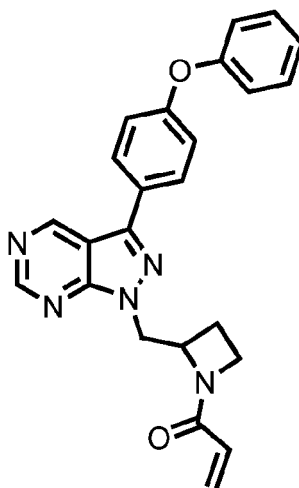
10

を有する。

【0750】

実施形態では、化合物は、式：

【化627】



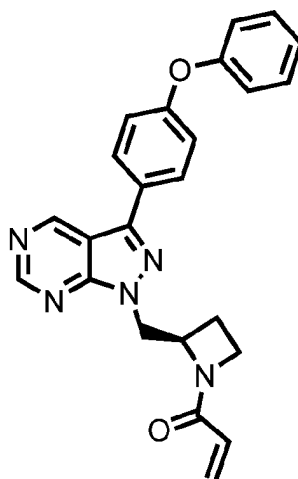
20

を有する。

【0751】

実施形態では、化合物は、式：

【化628】



40

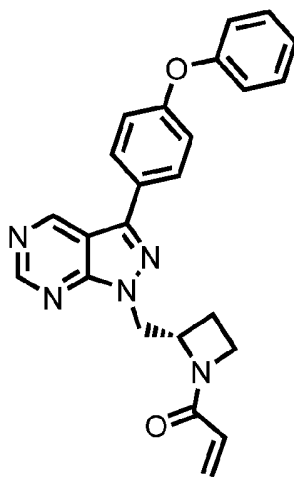
50

を有する。

【0752】

実施形態では、化合物は、式：

【化629】



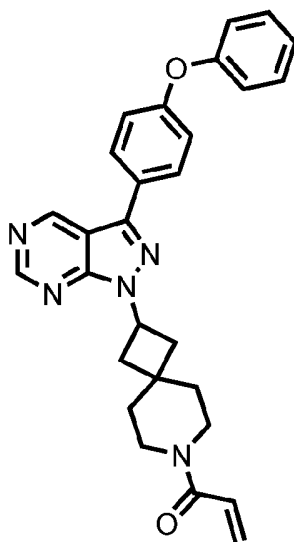
10

を有する。

【0753】

実施形態では、化合物は、式：

【化630】



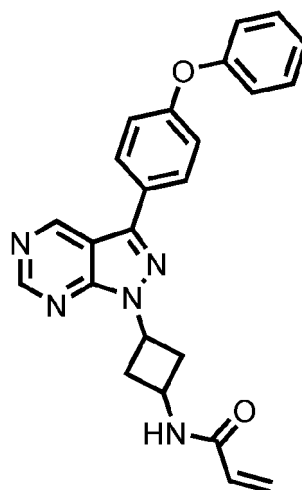
30

を有する。

【0754】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 3 1】



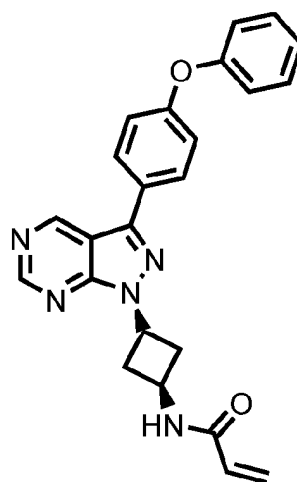
10

を有する。

【0 7 5 5】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 3 2】



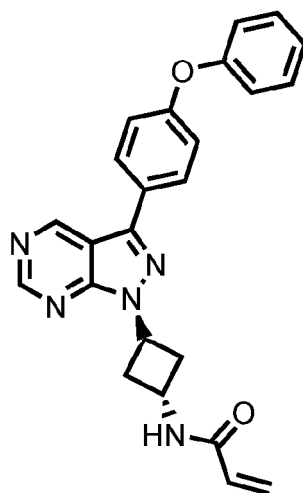
20

を有する。

【0 7 5 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 3 3】



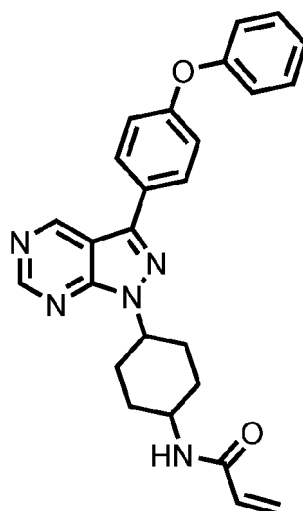
40

を有する。

【0 7 5 7】

50

実施形態では、化合物は、式：
【化 6 3 4】

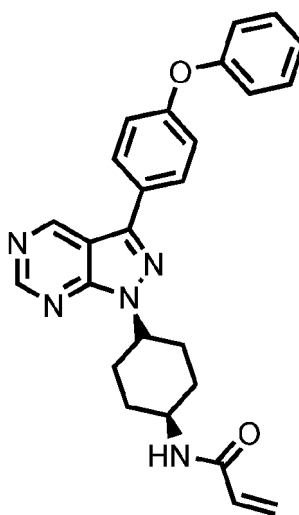


10

を有する。

【0 7 5 8】

実施形態では、化合物は、式：
【化 6 3 5】



20

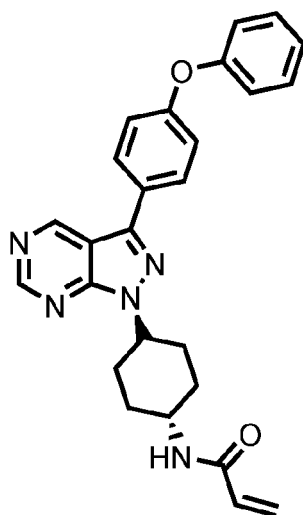
を有する。

【0 7 5 9】

実施形態では、化合物は、式：

30

【化 6 3 6】



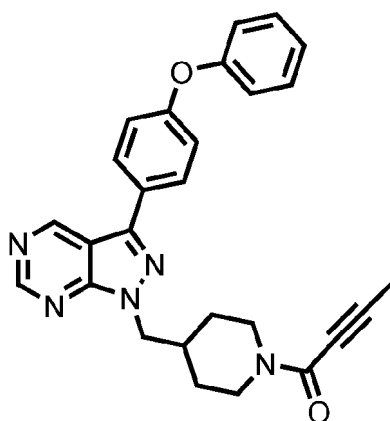
10

を有する。

【0 7 6 0】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 3 7】



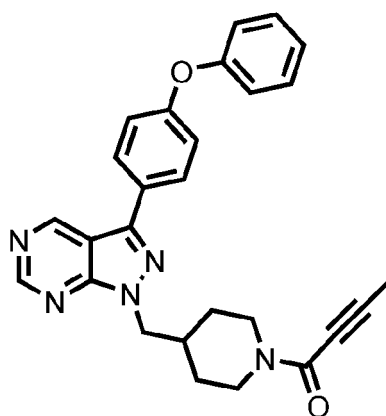
20

を有する。

【0 7 6 1】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 3 8】



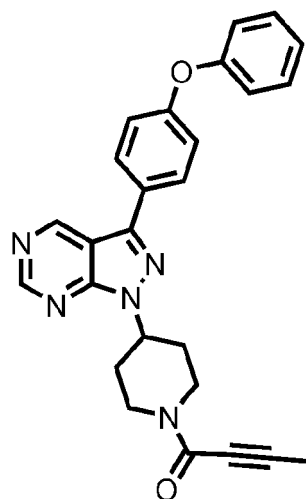
40

を有する。

【0 7 6 2】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 3 9】



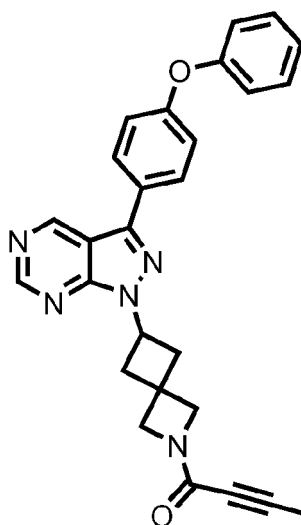
10

を有する。

【0 7 6 3】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 4 0】



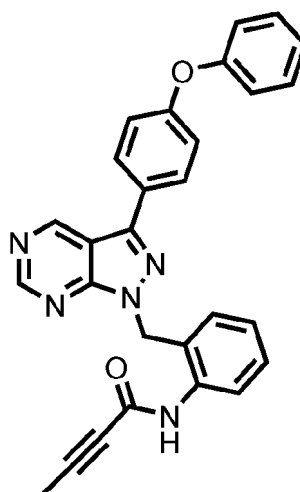
20

を有する。

【0 7 6 4】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 4 1】



40

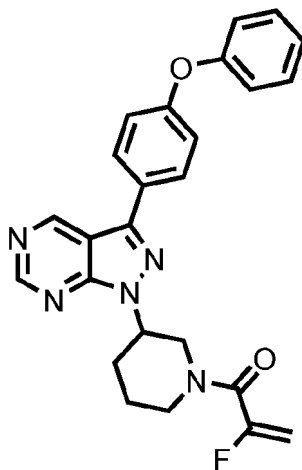
50

を有する。

【0765】

実施形態では、化合物は、式：

【化642】



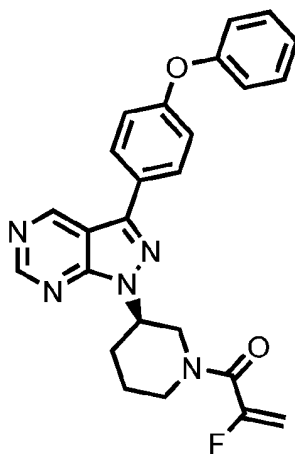
10

を有する。

【0766】

実施形態では、化合物は、式：

【化643】



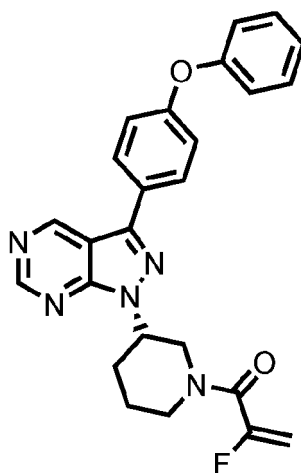
30

を有する。

【0767】

実施形態では、化合物は、式：

【化644】



40

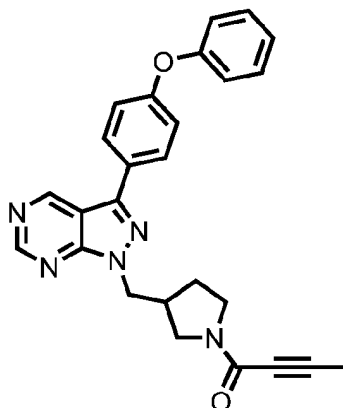
50

を有する。

【0768】

実施形態では、化合物は、式：

【化645】



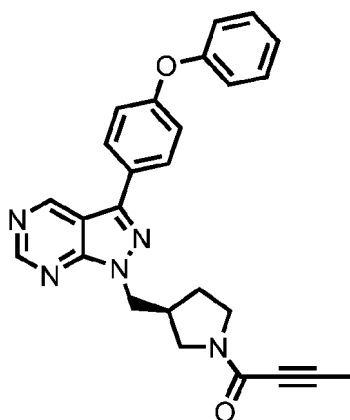
10

を有する。

【0769】

実施形態では、化合物は、式：

【化646】



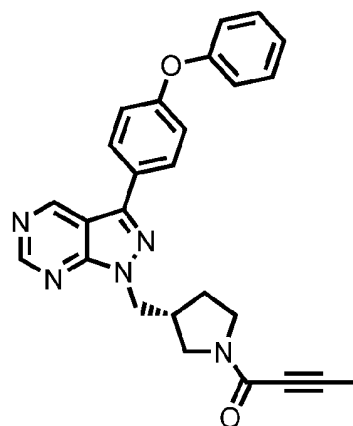
20

を有する。

【0770】

実施形態では、化合物は、式：

【化647】



40

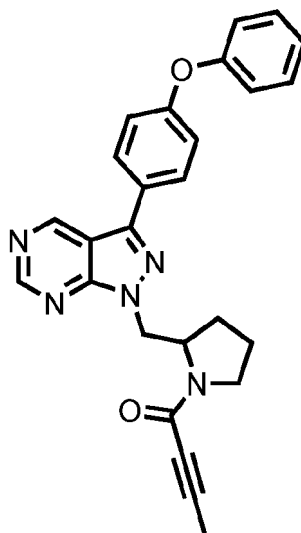
を有する。

【0771】

実施形態では、化合物は、式：

50

【化 6 4 8】



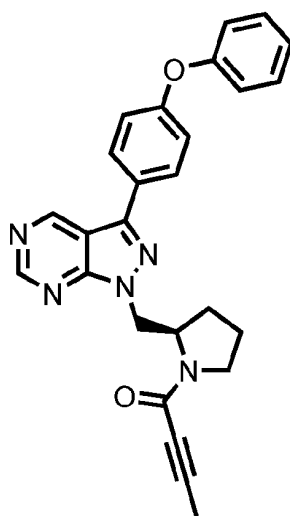
10

を有する。

【 0 7 7 2】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 4 9】



20

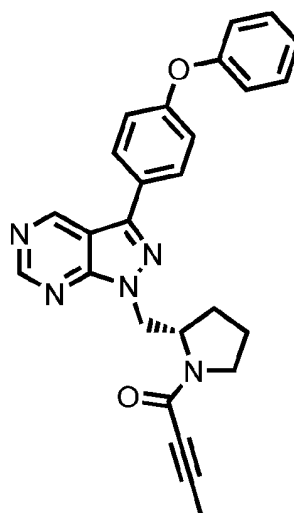
を有する。

【 0 7 7 3】

実施形態では、化合物は、式：

30

【化 6 5 0】



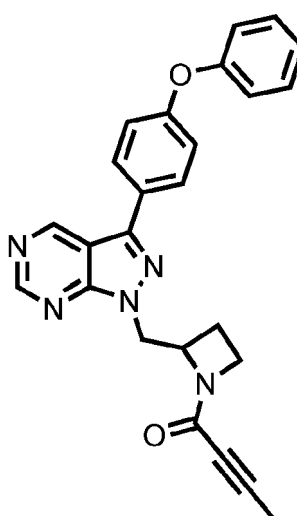
10

を有する。

【0 7 7 4】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 5 1】



20

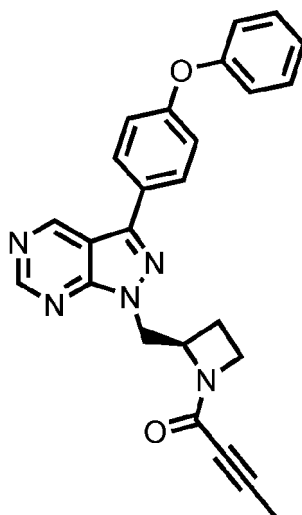
を有する。

【0 7 7 5】

実施形態では、化合物は、式：

30

【化 6 5 2】



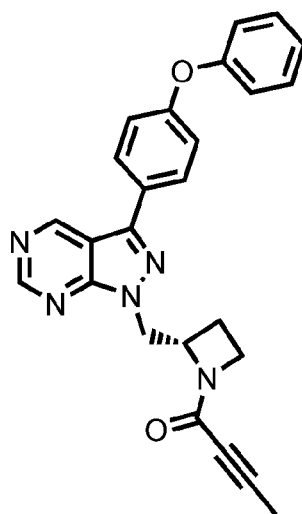
10

を有する。

【0 7 7 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 5 3】



20

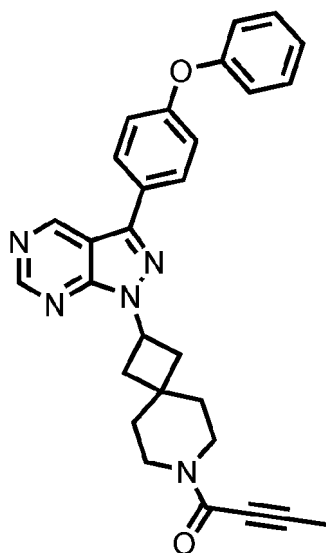
を有する。

【0 7 7 7】

実施形態では、化合物は、式：

30

【化 6 5 4】



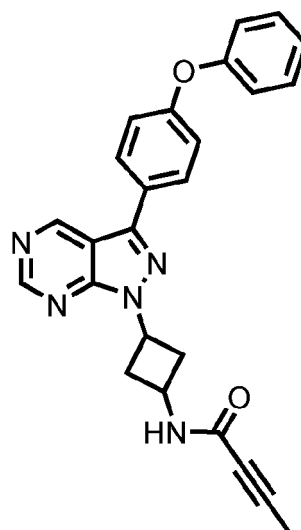
10

を有する。

【0 7 7 8】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 5 5】



20

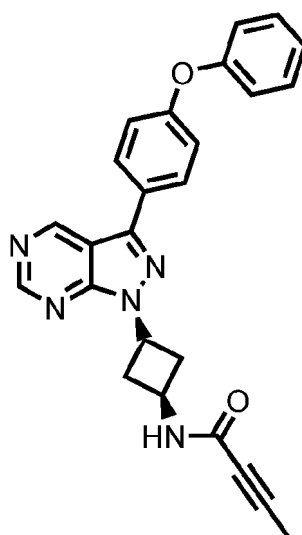
30

を有する。

【0 7 7 9】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 5 6】



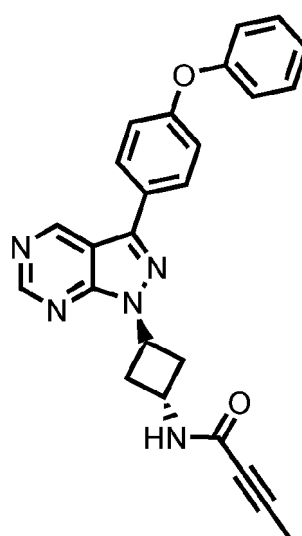
10

を有する。

【0 7 8 0】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 5 7】



20

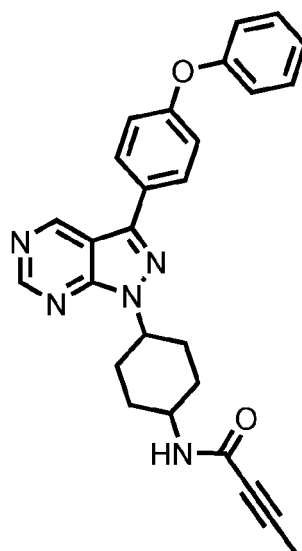
を有する。

【0 7 8 1】

実施形態では、化合物は、式：

30

【化 6 5 8】



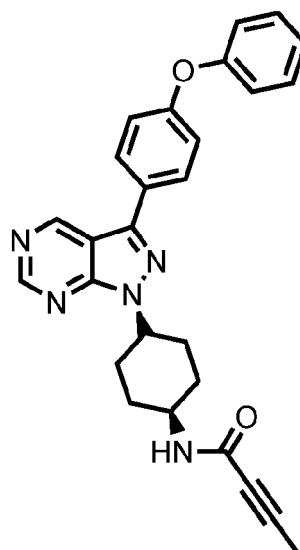
10

を有する。

【 0 7 8 2】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 5 9】



20

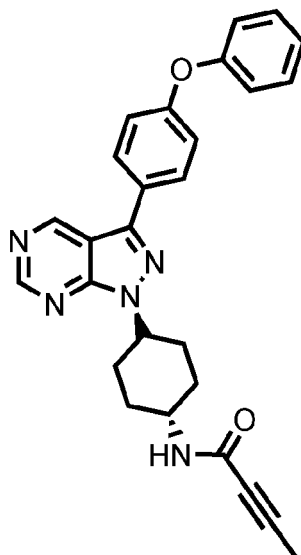
30

を有する。

【 0 7 8 3】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 6 0】



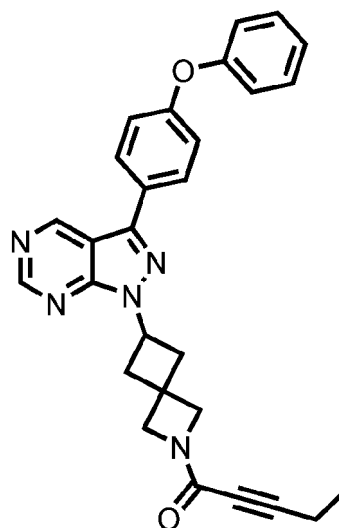
10

を有する。

【 0 7 8 4】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 6 1】



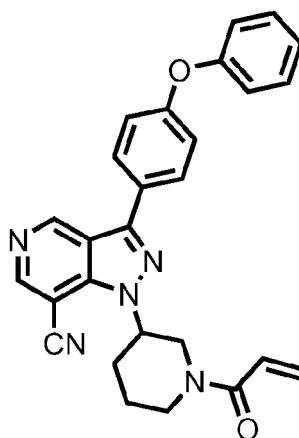
30

を有する。

【 0 7 8 5】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 6 2】



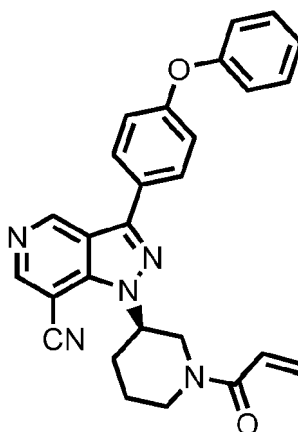
10

を有する。

【0 7 8 6】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 6 3】



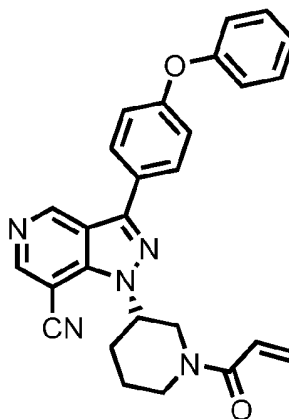
20

を有する。

【0 7 8 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 6 4】



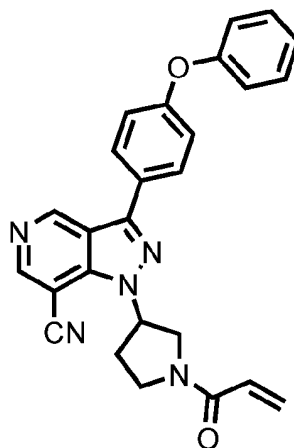
40

を有する。

【0 7 8 8】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 6 5】



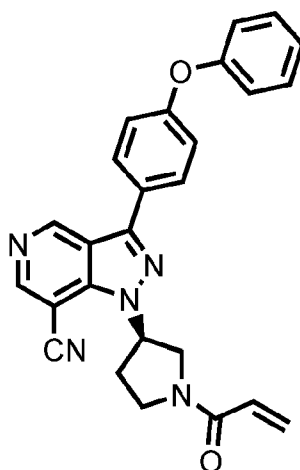
10

を有する。

【0 7 8 9】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 6 6】



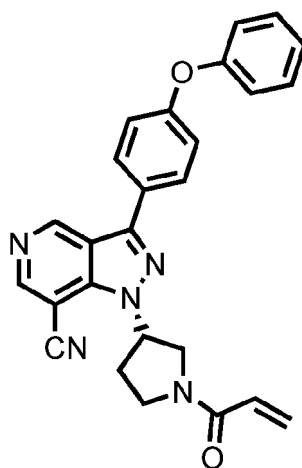
20

を有する。

【0 7 9 0】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 6 7】



40

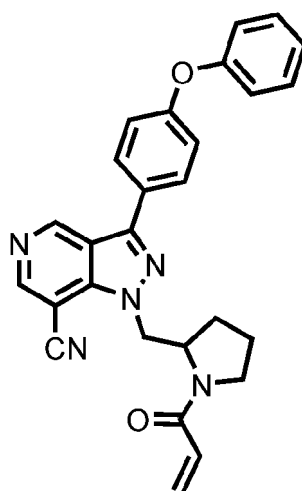
を有する。

【0 7 9 1】

実施形態では、化合物は、式：

50

【化 6 6 8】



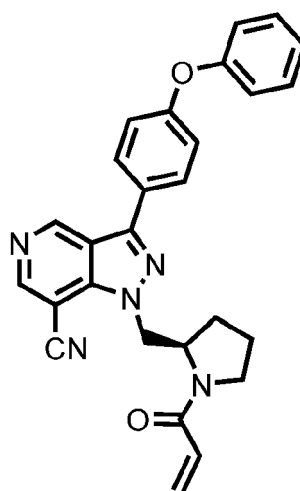
10

を有する。

【0 7 9 2】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 6 9】



20

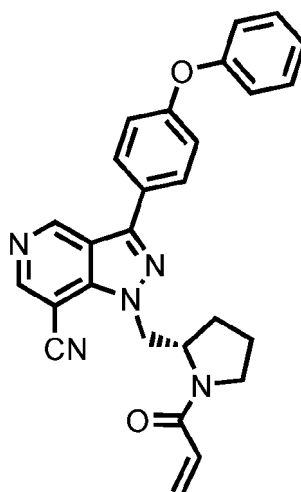
30

を有する。

【0 7 9 3】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 7 0】



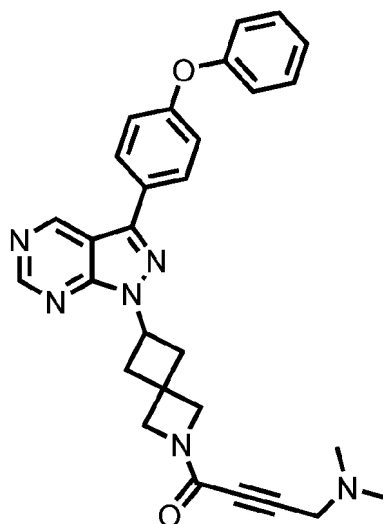
40

を有する。

【0 7 9 4】

50

実施形態では、化合物は、式：
【化 6 7 1】

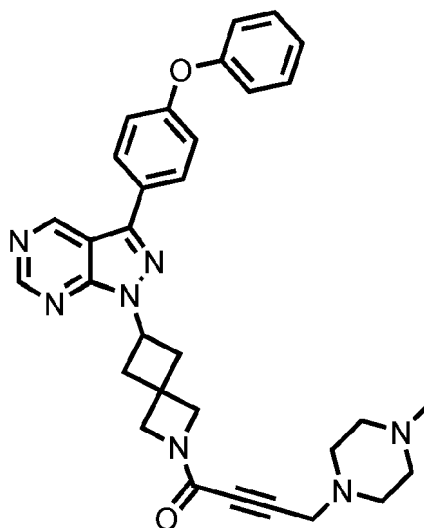


10

を有する。

【0 7 9 5】

実施形態では、化合物は、式：
【化 6 7 2】



20

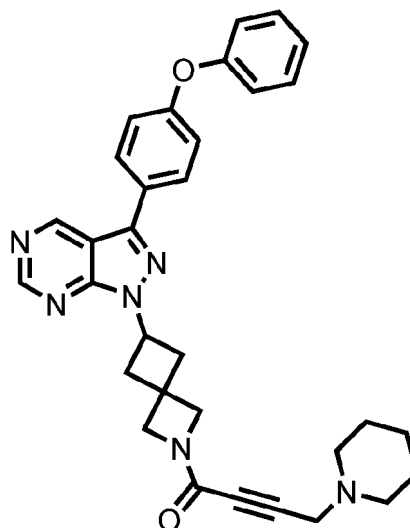
を有する。

【0 7 9 6】

実施形態では、化合物は、式：

30

【化 6 7 3】



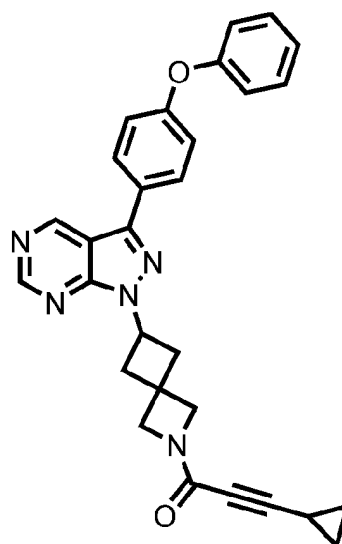
10

を有する。

【 0 7 9 7】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 7 4】



20

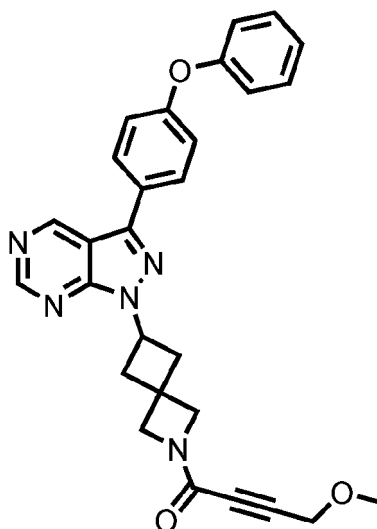
30

を有する。

【 0 7 9 8】

実施形態では、化合物は、式：

【化 6 7 5】



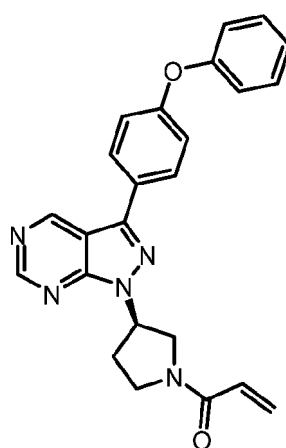
10

を有する。

【 0 7 9 9】

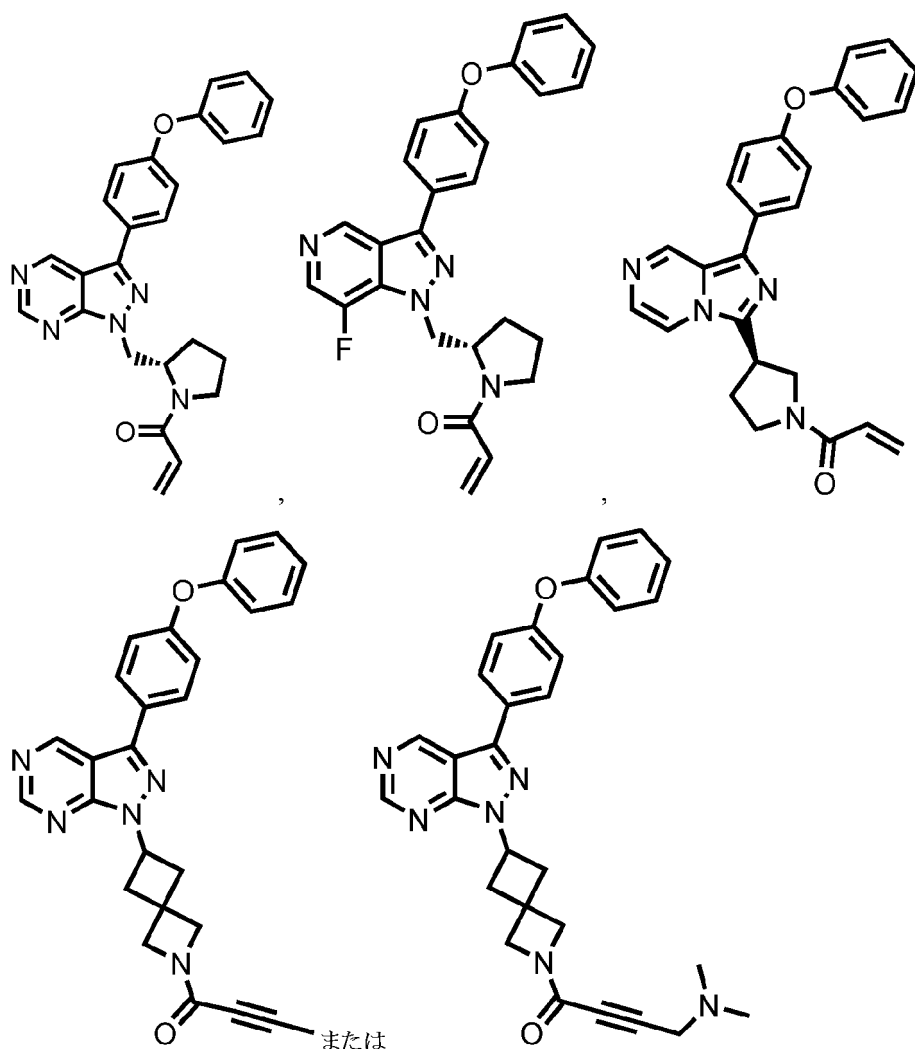
実施形態では、化合物は、式：

【化 6 7 6】



20

30



10

20

を有する。

【0800】

30

いくつかの実施形態では、本明細書に記載されるような化合物は、 R^1 または R^2 、及び／または他の変数の複数の例を含み得る。そのような実施形態では、各変数は、必要に応じて異なり得、より明確にするために、各群を区別するよう適切に標識化され得る。例えば、 R^1 及び／または R^2 がそれぞれ異なる場合、それらは、例えば、 $R^{1 \cdot 1}$ 、 $R^{1 \cdot 2}$ 、 $R^{1 \cdot 3}$ 、 $R^{1 \cdot 4}$ 、 $R^{1 \cdot 5}$ 、 $R^{2 \cdot 1}$ 、 $R^{2 \cdot 2}$ 、 $R^{2 \cdot 3}$ 、または $R^{2 \cdot 4}$ とそれぞれ称され得、式中、 R^1 の定義は、 $R^{1 \cdot 1}$ 、 $R^{1 \cdot 2}$ 、 $R^{1 \cdot 3}$ 、 $R^{1 \cdot 4}$ 、 $R^{1 \cdot 5}$ と仮定され；及び／または R^2 は、 $R^{2 \cdot 1}$ 、 $R^{2 \cdot 2}$ 、 $R^{2 \cdot 3}$ 、 $R^{2 \cdot 4}$ と仮定される。複数の例に現われるとともに異なっている、 R^1 及び／または R^2 、及び／または他の変数の定義内で使用される変数は同様に、より明確にするために、各群を区別するよう適切に標識化され得る。いくつかの実施形態では、化合物は、本明細書（例えば、一態様、実施形態、実施例、請求項、表、模式図、図面、または図）に記載の化合物である。

40

【0801】

実施形態では、他に明記されない限り、本明細書に記載の化合物は、全ての立体異性体のラセミ混合物である。実施形態では、他に明記されない限り、本明細書に記載の化合物は、全てのエナンチオマーのラセミ混合物である。実施形態では、他に明記されない限り、本明細書に記載の化合物は、2つの対向する立体異性体のラセミ混合物である。実施形態では、他に明記されない限り、本明細書に記載の化合物は、2つの対向するエナンチオマーのラセミ混合物である。実施形態では、他に明記されない限り、本明細書に記載の化合物は、単一の立体異性体である。実施形態では、他に明記されない限り、本明細書に記

50

載の化合物は、単一のエナンチオマーである。実施形態では、化合物は、本明細書（例えば、一態様、実施形態、実施例、図、表、模式図、または請求項）に記載される化合物である。

【0802】

III. 医薬組成物

態様では、本明細書に記載の化合物またはその医薬的に許容可能な塩と、医薬的に許容可能な賦形剤とを含む、医薬組成物が提供される。

【0803】

医薬組成物の実施形態では、化合物、またはその医薬的に許容可能な塩は、治療上有効な量で含まれている。

10

【0804】

医薬組成物の実施形態では、医薬組成物は、第2の薬剤（例えば、治療剤）を含む。医薬組成物の実施形態では、医薬組成物は、治療上有効な量で第2の薬剤（例えば、治療剤）を含む。医薬組成物の実施形態では、第2の薬剤は、がんを治療するための薬剤である。実施形態では、第2の薬剤は、抗がん剤である。実施形態では、第2の薬剤は、化学療法薬である。実施形態では、第2の薬剤は、抗炎症剤である。

【0805】

IV. 治療の方法

態様では、がんの治療方法であって、それを必要とする対象に有効量の本明細書に記載の化合物を投与することを含む、方法が提供される。

20

【0806】

態様では、炎症性疾患の治療方法であって、それを必要とする対象に有効量の本明細書に記載の化合物を投与することを含む、方法が提供される。実施形態では、疾患は、多発性硬化症である。実施形態では、炎症性疾患は、脳炎を含む。実施形態では、炎症性疾患は、アルツハイマー病関連脳炎（すなわち、アルツハイマー病と関連する脳組織における炎症）を含む。実施形態では、炎症性疾患は、パーキンソン病関連脳炎（すなわち、パーキンソン病と関連する脳組織における炎症）を含む。

【0807】

態様では、有効量の本明細書に記載の化合物を、それを必要とする対象に投与することを含む、ブルトン型チロシinkinase活性と関連する疾患の治療方法が提供される。実施形態では、疾患は、異常なブルトン型チロシinkinase活性と関連する。実施形態では、疾患は、異常なミクログリア活性と関連する。例えば、異常なミクログリア活性を有する疾患は、その内容全体があらゆる目的で参照によって組み込まれる Graeber et al. (FEBS Letters, Volume 585, Issue 23, 1 December 2011, Pages 3798-3805)、Deenen et al. (Curr Med-Chem. 2007; 14(11):1189-97)、及び Reus et al. (Neuroscience. 2015 Aug 6; 300:141-54) において見つけることができる。実施形態では、疾患は、精神障害または神経障害である。実施形態では、疾患は、自閉症、レット症候群、脆弱X症候群、心筋梗塞、緑内障、結節性硬化症、神経因性疼痛、不安、慢性神経変性、うつ病、癲癇、HIV関連痴呆、または神経炎症である。

30

40

【0808】

態様では、脳卒中の治療方法であって、それを必要とする対象に有効量の本明細書に記載の化合物を投与することを含む、方法が提供される。

【0809】

態様では、有効量の本明細書に記載の化合物を、それを必要とする対象に投与することを含む、自己免疫疾患（例えば、脳の自己免疫疾患、神経学的な疾患、CNS、脳、脳脊髄液、眼、または脊髄における自己免疫疾患）の治療方法が提供される。実施形態では、疾患は、多発性硬化症である。実施形態では、疾患は、脳炎である。実施形態では、疾患は、ギラン・バレー症候群である。実施形態では、疾患は、視神経脊髄炎である。実施形

50

態では、疾患は、脊髄炎である。実施形態では、疾患は、視神経炎である。実施形態では、疾患は、傍腫瘍性神経障害（例えば、傍腫瘍性オプソクローヌス・ミオクローヌス）である。実施形態では、疾患は、慢性自己免疫性神経障害（例えば、慢性炎症性脱髄性多発神経障害、多巣性運動ニューロパチー、またはIgM抗ミエリン関連糖タンパク質神経障害）である。実施形態では、疾患は、スティッフパーソン症候群である。実施形態では、疾患は、炎症性ミオパチー（例えば、多発性筋炎、皮膚筋炎、または封入体筋炎）である。実施形態では、疾患は、重症筋無力症である。

【0810】

実施形態では、がんは、血液がん（hematological cancer）である。実施形態では、がんは、血液がん（blood cancer）である。実施形態では、がんは、転移がんである。実施形態では、がんは、脳に転移している血液がんである。実施形態では、がんは、別のがん（例えば、血液がん）転移による脳がんである。実施形態では、がんは、白血病である。実施形態では、がんは、（例えば、CNS、脳、脳脊髄液、眼、または脊髄における）B細胞関連がんである。実施形態では、がんは、（例えば、CNS、脳、脳脊髄液、眼、または脊髄における）リンパ腫である。実施形態では、がんは、びまん性大細胞型B細胞リンパ腫である。実施形態では、がんは、多発性骨髄腫である。実施形態では、がんは、（例えば、CNS、脳、脳脊髄液、眼、または脊髄における）マンツル細胞リンパ腫である。実施形態では、がんは、（例えば、CNS、脳、脳脊髄液、眼、または脊髄における）慢性リンパ性白血病である。実施形態では、がんは、（例えば、CNS、脳、脳脊髄液、眼、または脊髄における）ヴァルデンストレームマクログロブリン血症である。実施形態では、がんは、（例えば、CNS、脳、脳脊髄液、眼、または脊髄における）非ホジキンリンパ腫である。実施形態では、がんは、濾胞性リンパ腫である。実施形態では、がんは、バーキットリンパ腫である。実施形態では、がんは、脾臓辺縁帯リンパ腫である。実施形態では、がんは、粘膜関連リンパ組織リンパ腫である。実施形態では、がんは、ホジキンリンパ腫である。実施形態では、がんは、原発性中枢神経系リンパ腫（例えば、びまん性大細胞型B細胞リンパ腫）である。実施形態では、がんは、星細胞腫、非定型奇形腫様／ラブドイド腫瘍、軟骨肉腫、脈絡叢、頭蓋咽頭腫、上衣腫、胚細胞腫瘍、膠芽腫、神経膠腫、血管腫、少年毛様細胞性星細胞腫、脂肪腫、リンパ腫、髄芽腫、髄膜腫、神経線維腫、神経細胞性腫瘍、混合神経細胞膠細胞性腫瘍、乏突起星細胞腫、乏突起神経膠腫、松果体腫瘍、下垂体腫瘍、またはシュワン細胞腫である。実施形態では、疾患は、HIV関連中枢神経系リンパ腫である。

【0811】

実施形態では、方法は、第2の薬剤（例えば、治療剤）を投与することを含む。実施形態では、方法は、治療上有効な量で第2の薬剤（例えば、治療剤）を投与することを含む。実施形態では、第2の薬剤は、がんを治療するための薬剤である。実施形態では、第2の薬剤は、抗がん剤である。実施形態では、第2の薬剤は、化学療法薬である。実施形態では、第2の薬剤は、抗炎症剤である。

【0812】

V. 阻害の方法

態様では、ブルトン型チロシンキナーゼを本明細書に記載の化合物と接触させることを含む、ブルトン型チロシンキナーゼ活性の阻害方法が提供される。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼは、ヒトブルトン型チロシンキナーゼである。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼは、中枢神経系内である。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼは、脳内である。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼは、脊椎内である。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼは、脊髄内である。実施形態では、方法は、インビトロで行われる。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼは、細胞または対象（例えば、ヒト、またはがん対象）内である。

【0813】

実施形態では、阻害は、競合的阻害である。実施形態では、阻害は、不可逆的である。実施形態では、阻害は、可逆的である。実施形態では、化合物は、ブルトン型チロシンキ

10

20

30

40

50

ナーゼと共有結合している。

【0814】

化合物がブルトン型チロシンキナーゼと共有結合している場合、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤と共有結合したブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）は、以下に記載されるように形成される（「BTK化合物付加物」とも本明細書で呼ばれる）。実施形態では、得られる共有結合は、可逆的である。得られる共有結合が可逆的である場合、結合は、タンパク質が変性する際に反転する。従って、実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼが変性する際の化合物とブルトン型チロシンキナーゼの共有結合の可逆性は、（不可逆性と比較して）化合物の投与後の対象における自己免疫応答を回避または減少させる。さらに、実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼが変性する際の化合物とブルトン型チロシンキナーゼの共有結合の可逆性は、（不可逆性と比較して）対象における化合物の毒性（例えば、肝毒性）を回避または減少させる。

10

【0815】

VI. ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質

態様では、本明細書に記載の化合物と共有結合したブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、本明細書に記載の化合物、または本明細書に記載の化合物の一部）を提供する。

【0816】

実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質は、本明細書に記載の化合物の一部（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤の一部、または本明細書に記載の化合物の一部）と（例えば、可逆的にまたは不可逆的に）共有結合している。

20

【0817】

実施形態では、化合物は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質のシステイン残基と結合する。実施形態では、化合物は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質のシステイン残基と共有結合する。実施形態では、化合物は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質のシステイン残基と可逆的に共有結合する。実施形態では、化合物は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質のシステイン残基と不可逆的に共有結合する。実施形態では、化合物は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質のアスパラギン残基と（例えば、共有結合的に、不可逆的に共有結合的に、または可逆的に共有結合的に）結合する。実施形態では、化合物は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質のグルタミン残基と（例えば、共有結合的に、不可逆的に共有結合的に、または可逆的に共有結合的に）結合する。実施形態では、化合物は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質のアルギニン残基と（例えば、共有結合的に、不可逆的に共有結合的に、または可逆的に共有結合的に）結合する。実施形態では、化合物は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質のチロシン残基と（例えば、共有結合的に、不可逆的に共有結合的に、または可逆的に共有結合的に）結合する。

30

【0818】

実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質は、本明細書に記載の化合物の一部（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤の一部、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニストの一部、または本明細書に記載の化合物の一部）と（例えば、可逆的にまたは不可逆的に）共有結合する。

40

【0819】

実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質は、対象の中枢神経系内である。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質は、対象の脳内である。

【0820】

態様では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、本明細書に記載の化合物、または本明細書に記載の化合物の一部）と共

50

有結合したブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトBTK）を提供する。

【0821】

実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）は、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、本明細書に記載の化合物、または本明細書に記載の化合物の一部）と共有結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）は、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、本明細書に記載の化合物、または本明細書に記載の化合物の一部）と不可逆的に共有結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）は、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、本明細書に記載の化合物、または本明細書に記載の化合物の一部）と可逆的に共有結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）は、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物）の一部と共有結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）は、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物）の一部と不可逆的に共有結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）は、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物）の一部と可逆的に共有結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物）は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）のシステイン残基（例えば、ヒトBTKのCys481、またはヒトBTKのCys481に対応するシステイン）と結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物）の一部は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）のシステイン残基（例えば、ヒトBTKのCys481、またはヒトBTKのCys481に対応するシステイン）と結合する。

【0822】

実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物）は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）のシステイン481と結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物）は、RefSeq（タンパク質）NP_000052に対応するブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）のシステイン481と結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物）は、RefSeq（タンパク質）NP_000052に対応するブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）の（例えば、活性部位における）疎水性基と相互作用する（例えば、接触する）。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物）は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）の活性部位と相互作用する（例えば、接触する）。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物）は、RefSeq（タンパク質）NP_000052に対応するブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）の活性部位と相互作用する（例えば、接触する）。

【0823】

実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、ブルトン型チロシンキナ

10

20

30

40

50

ーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物)は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)のシステイン481に対応するアミノ酸と結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤(例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物)は、RefSeq(タンパク質)NP_000052に対応するブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)のシステイン481に対応するアミノ酸と結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤(例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物)は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)の活性部位に対応するアミノ酸と相互作用する(例えば、接触する)。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤(例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物)は、RefSeq(タンパク質)NP_000052に対応するブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)の活性部位に対応するアミノ酸と相互作用する(例えば、接触する)。

10

【0824】

実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤(例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物)の一部は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)のシステイン481と結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤(例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物)の一部は、RefSeq(タンパク質)NP_000052に対応するブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)のシステイン481と結合する。

20

【0825】

実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤(例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物)の一部は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)のシステイン481に対応するアミノ酸と結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤(例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物)の一部は、RefSeq(タンパク質)NP_000052に対応するブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)のシステイン481に対応するアミノ酸と結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤(例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物)の一部は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)の活性部位に対応するアミノ酸と相互作用する(例えば、接触する)。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤(例えば、ブルトン型チロシンキナーゼアンタゴニスト、または本明細書に記載の化合物)の一部は、RefSeq(タンパク質)NP_000052に対応するブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)の活性部位に対応するアミノ酸と相互作用する(例えば、接触する)。

30

【0826】

態様では、本明細書に記載の化合物または本明細書に記載の化合物の一部と共有結合したブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)を提供する。

40

【0827】

実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)は、本明細書に記載の化合物と共有結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)は、本明細書に記載の化合物と不可逆的に共有結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)は、本明細書に記載の化合物と可逆的に共有結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質(例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ)は、本明細書に記載の化合物の一部と共有結合する

50

。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）は、本明細書に記載の化合物の一部と不可逆的に共有結合する。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）は、本明細書に記載の化合物の一部と可逆的に共有結合する。実施形態では、化合物は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）のシステイン残基と結合する。実施形態では、化合物の一部は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼ）のシステイン残基と結合する。

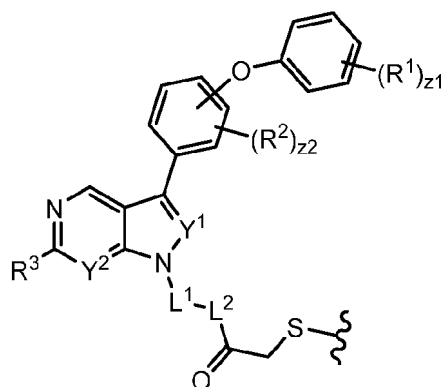
【0828】

実施形態では、本明細書に記載の化合物と共有結合したブルトン型チロシンキナーゼタンパク質は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と本明細書に記載の化合物の間の反応の生成物である。共有結合したブルトン型チロシンキナーゼタンパク質とブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、本明細書に記載の化合物）は、反応物ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質とブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤または化合物の残基であり、各々の反応物は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質とブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤または化合物の間の共有結合に関与していることが理解されるであろう。共有結合したブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と本明細書に記載の化合物の実施形態では、E置換基の残基は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と本明細書に記載の化合物の残基の間の共有結合を含む、リンカーである。ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質がブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、本明細書に記載の化合物）と共有結合する場合、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、本明細書に記載の化合物）は、予備反応したブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、本明細書に記載の化合物）の残基を形成し、結合は、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（例えば、本明細書に記載の化合物）の残基をブルトン型チロシンキナーゼタンパク質の残基（例えば、システイン硫黄、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのシステイン481に対応するアミノ酸の硫黄、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのシステイン481の硫黄）に接続させることが当業者には理解されるであろう。ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤（本明細書に記載の化合物）の残基は、ブルトン型チロシンキナーゼ阻害剤の一部とも呼ばれ得る。実施形態では、E置換基の残基は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-NH-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)-$ 、 $-NHC(O)NH-$ 、 $-NHC(O)NH-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、 $-CH_2NH-$ 、置換（例えば、置換基、サイズ限定置換基、または低級置換基で置換）または非置換のアルキレン（例えば、 C_1-C_8 、 C_1-C_6 、 C_1-C_4 、または C_1-C_2 ）、置換（例えば、置換基、サイズ限定置換基、または低級置換基で置換）または非置換のヘテロアルキレン（例えば、2～8員、2～6員、4～6員、2～3員、または4～5員）、置換（例えば、置換基、サイズ限定置換基、または低級置換基で置換）または非置換のシクロアルキレン（例えば、 C_3-C_8 、 C_3-C_6 、 C_4-C_6 、または C_5-C_6 ）、置換（例えば、置換基、サイズ限定置換基、または低級置換基で置換）または非置換のヘテロシクロアルキレン（例えば、3～8員、3～6員、4～6員、4～5員、または5～6員）、置換（例えば、置換基、サイズ限定置換基、または低級置換基で置換）または非置換のアリーレン（例えば、 C_6-C_{10} またはフェニル）、または置換（例えば、置換基、サイズ限定置換基、または低級置換基で置換）または非置換のヘテロアリーレン（例えば、5～10員、5～9員、または5～6員）から選択されるリンカーである。

【0829】

非限定例として、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と共有結合した本明細書に記載の化合物は、式：

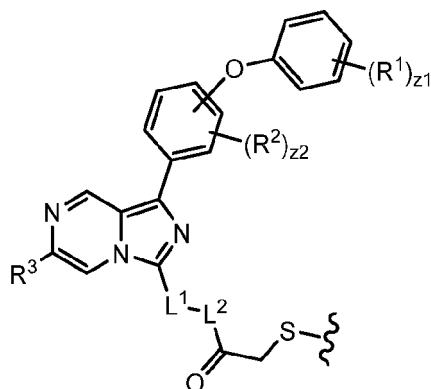
【化 6 7 7】



10

を有し得、式中、Sは、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質の残基と結合している、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質システイン（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのシステイン481に対応する）の硫黄であり、 R^1 、 $z1$ 、 R^2 、 $z2$ 、 R^3 、 Y^2 、 Y^1 、 L^1 、及び L^2 は、本明細書に記載される通りである。非限定例として、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と共有結合した本明細書に記載の化合物は、式：

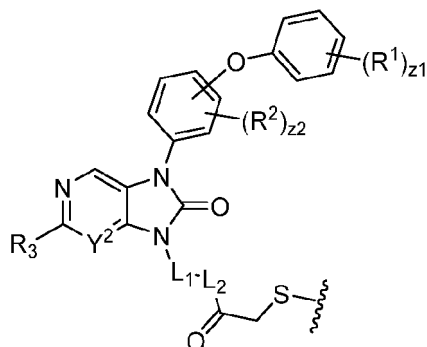
【化 6 7 8】



20

を有し得、式中、Sは、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質の残基と結合している、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質システイン（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのシステイン481に対応する）の硫黄であり、 R^1 、 $z1$ 、 R^2 、 $z2$ 、 R^3 、 L^1 、及び L^2 は、本明細書に記載される通りである。非限定例として、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と共有結合した本明細書に記載の化合物は、式：

【化 6 7 9】



30

40

を有し得、式中、Sは、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質の残基と結合している、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質システイン（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのシステイン481に対応する）の硫黄であり、 R^1 、 $z1$ 、 R^2 、 $z2$ 、 R^3 、 Y^2 、 L^1 、及び L^2 は、本明細書に記載される通りである。

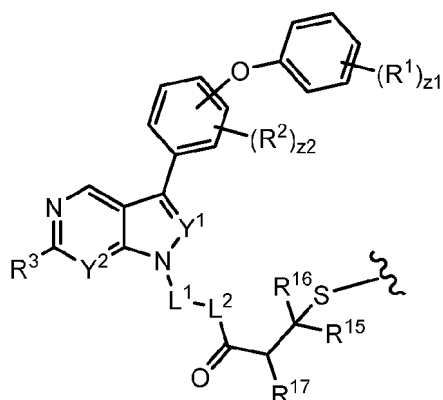
【0 8 3 0】

非限定例として、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と共有結合した本明細書に記

50

載の化合物は、式：

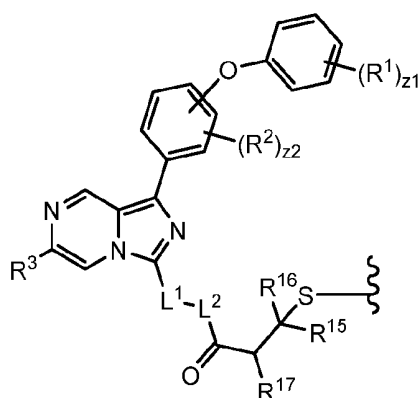
【化 6 8 0】



10

を有し得、式中、Sは、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質の残基と結合している、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質システイン（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのシステイン481に対応する）の硫黄であり、 R^1 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、 $z1$ 、 R^2 、 $z2$ 、 R^3 、 Y^2 、 L^1 、及び L^2 は、本明細書に記載される通りである。非限定例として、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と共有結合した本明細書に記載の化合物は、式：

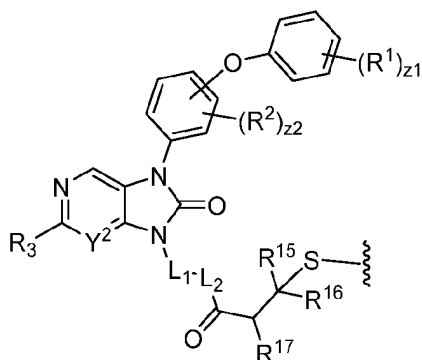
【化 6 8 1】



30

を有し得、式中、Sは、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質の残基と結合している、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質システイン（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのシステイン481に対応する）の硫黄であり、 R^1 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、 $z1$ 、 R^2 、 $z2$ 、 R^3 、 Y^2 、 L^1 、及び L^2 は、本明細書に記載される通りである。非限定例として、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と共有結合した本明細書に記載の化合物は、式：

【化 6 8 2】



40

を有し得、式中、Sは、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質の残基と結合している、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質システイン（例えば、ヒトブルトン型チロシンキ

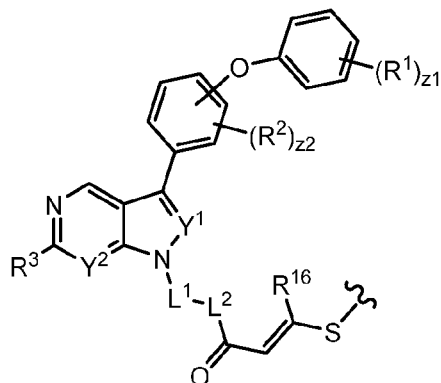
50

ナーゼのシステイン 481 に対応する) の硫黄であり、 R^1 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、 $z1$ 、 R^2 、 $z2$ 、 R^3 、 Y^2 、 L^1 、及び L^2 は、本明細書に記載される通りである。

【0831】

非限定例として、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と共有結合した本明細書に記載の化合物は、式：

【化683】

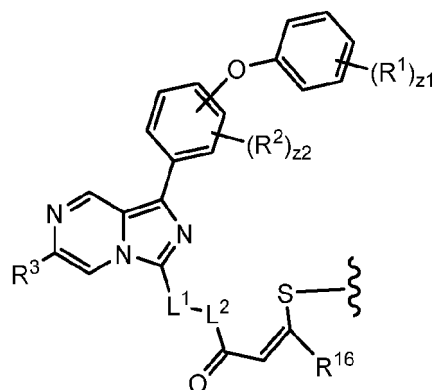


10

を有し得、式中、S は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質の残基と結合している、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質システイン（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのシステイン 481 に対応する）の硫黄であり、 R^1 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、 $z1$ 、 R^2 、 $z2$ 、 R^3 、 Y^2 、 L^1 、及び L^2 は、本明細書に記載される通りである。非限定例として、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と共有結合した本明細書に記載の化合物は、式：

20

【化684】

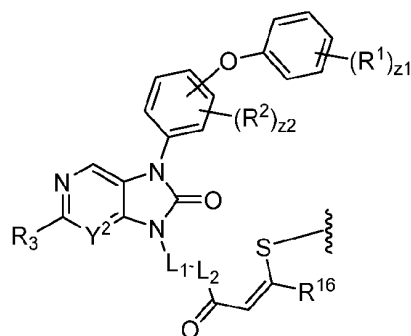


30

を有し得、式中、S は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質の残基と結合している、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質システイン（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのシステイン 481 に対応する）の硫黄であり、 R^1 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、 $z1$ 、 R^2 、 $z2$ 、 R^3 、 Y^2 、 L^1 、及び L^2 は、本明細書に記載される通りである。非限定例として、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と共有結合した本明細書に記載の化合物は、式：

40

【化 6 8 5】

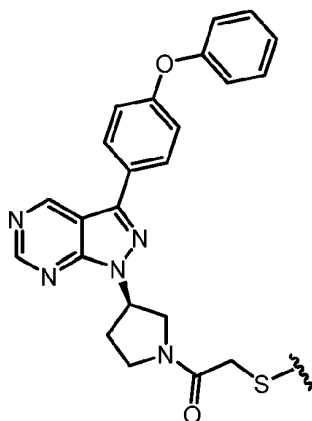


を有し得、式中、Sは、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質の残基と結合している、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質システイン（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのシステイン481に対応する）の硫黄であり、 R^1 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、 $z1$ 、 R^2 、 $z2$ 、 R^3 、 Y^2 、 L^1 、及び L^2 は、本明細書に記載される通りである。

【0832】

非限定例として、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と共有結合した本明細書に記載の化合物は、式：

【化 6 8 6】

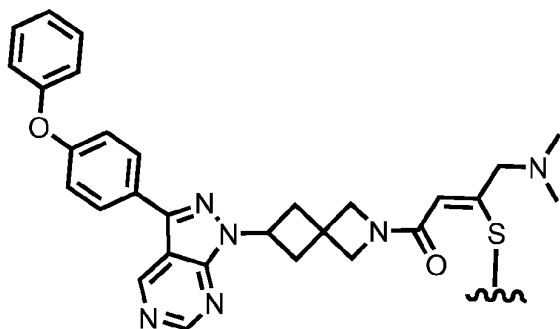


を有し得、式中、Sは、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質の残基と結合している、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質システイン（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのシステイン481に対応する）の硫黄である。

【0833】

非限定例として、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と共有結合した本明細書に記載の化合物は、式：

【化 6 8 7】

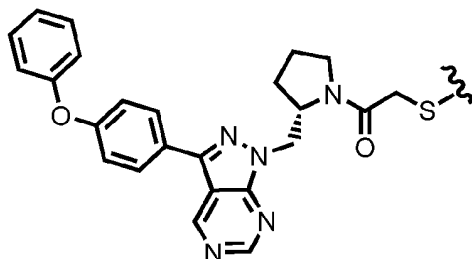


を有し得、式中、Sは、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質の残基と結合している、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質システイン（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのシステイン481に対応する）の硫黄である。

【0834】

非限定例として、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と共有結合した本明細書に記載の化合物は、式：

【化 6 8 8】



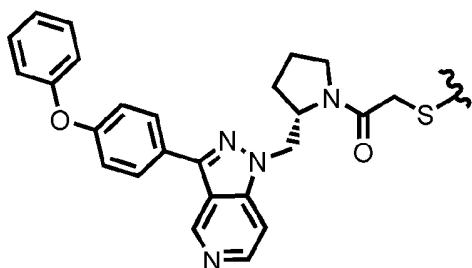
10

を有し得、式中、S は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質の残基と結合している、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質システイン（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのシステイン 481 に対応する）の硫黄である。

【0 8 3 5】

非限定例として、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質と共有結合した本明細書に記載の化合物は、式：

【化 6 8 9】



20

を有し得、式中、S は、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質の残基と結合している、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質システイン（例えば、ヒトブルトン型チロシンキナーゼのシステイン 481 に対応する）の硫黄である。

実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼは、インビトロである。実施形態では、ブルトン型チロシンキナーゼは、細胞または対象（例えば、ヒト、またはがん対象）内である。

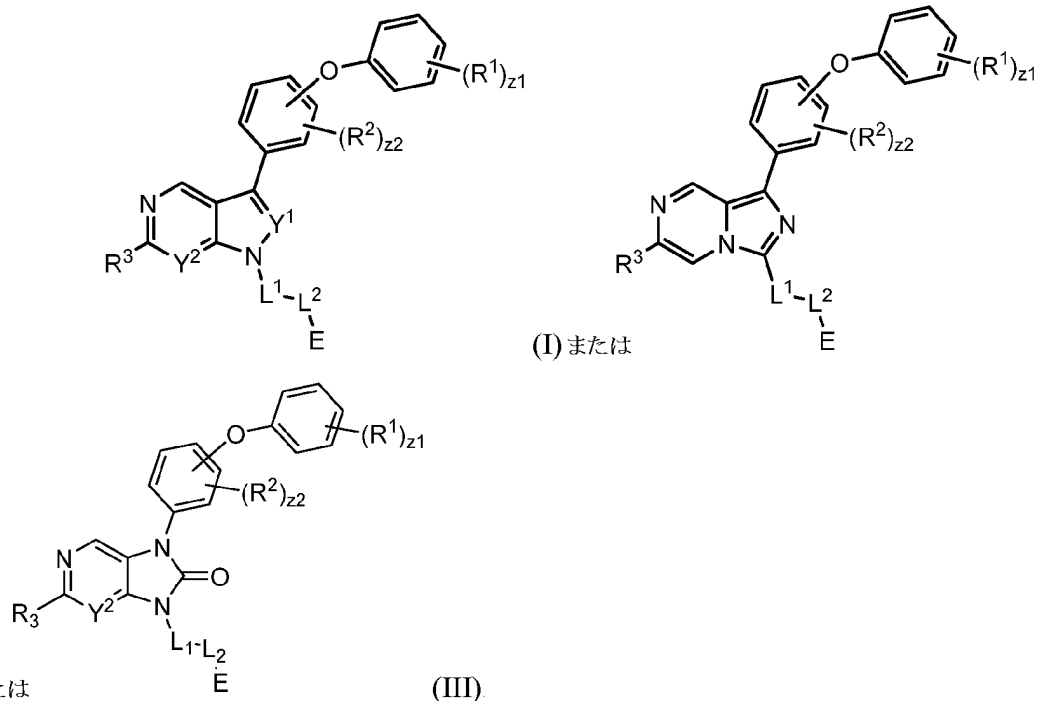
30

【0 8 3 6】

V I I . 実施形態

実施形態 P 1 . 式：

【化 6 9 0】



10

20

を有する化合物であって、

式中、 R^1 は独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CHX^1_2$ 、 $-CH_2X^1$ 、 $-OCX^1_3$ 、 $-OCH_2X^1$ 、 $-OCHX^1_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n1}R^{1D}$ 、 $-SO_{v1}NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-NHC(O)NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-N(O)_{m1}$ 、 $-NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-C(O)R^{1C}$ 、 $-C(O)-OR^{1C}$ 、 $-C(O)NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-OR^{1D}$ 、 $-NR^{1A}SO_2R^{1D}$ 、 $-NR^{1A}C(O)R^{1C}$ 、 $-NR^{1A}C(O)OR^{1C}$ 、 $-NR^{1A}OR^{1C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；2 個の隣接する R^1 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく； $z1$ は、0～5 の整数であり； R^2 は独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CHX^2_2$ 、 $-CH_2X^2$ 、 $-OCX^2_3$ 、 $-OCH_2X^2$ 、 $-OCHX^2_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n2}R^{2D}$ 、 $-SO_{v2}NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-NHC(O)NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-N(O)_{m2}$ 、 $-NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-C(O)R^{2C}$ 、 $-C(O)-OR^{2C}$ 、 $-C(O)NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-OR^{2D}$ 、 $-NR^{2A}SO_2R^{2D}$ 、 $-NR^{2A}C(O)R^{2C}$ 、 $-NR^{2A}C(O)OR^{2C}$ 、 $-NR^{2A}OR^{2C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；2 個の隣接する R^2 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく； $z2$ は、0～4 の整数であり； R^3 は、水素または $-NH_2$ であり； Y^1 は、N または $C(R^4)$ であり； R^4 は、水素、ハロゲン、 $-CX^4_3$ 、 $-CHX^4_2$ 、 $-CH_2X^4$ 、 $-OCX^4_3$ 、 $-OCH_2X^4$ 、 $-OCHX^4_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n4}R^{4D}$ 、 $-SO_{v4}NR^{4A}R^{4B}$ 、 $-NHC(O)NR^{4A}R^{4B}$ 、 $-N(O)_{m4}$ 、 $-NR^{4A}R^{4B}$ 、 $-C(O)R^{4C}$ 、 $-C(O)-OR^{4C}$ 、 $-C(O)NR^{4A}R^{4B}$ 、 $-OR^{4D}$ 、 $-NR^{4A}SO_2R^{4D}$ 、 $-NR^{4A}C(O)R^{4C}$ 、 $-NR^{4A}C(O)OR^{4C}$ 、 $-NR^{4A}OR^{4C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、

30

40

50

置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり； Y^2 は、NまたはC(R^5)であり； R^5 は、水素、ハロゲン、 $-CX^5_3$ 、 $-CHX^5_2$ 、 $-CH_2X^5$ 、 $-OCX^5_3$ 、 $-OCH_2X^5$ 、 $-OCHX^5_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n5}R^{5D}$ 、 $-SO_{v5}NR^{5A}R^{5B}$ 、 $-NHC(O)NR^{5A}R^{5B}$ 、 $-N(O)_m5$ 、 $-NR^{5A}R^{5B}$ 、 $-C(O)R^{5C}$ 、 $-C(O)-OR^{5C}$ 、 $-C(O)NR^{5A}R^{5B}$ 、 $-OR^{5D}$ 、 $-NR^{5A}SO_2R^{5D}$ 、 $-NR^{5A}C(O)R^{5C}$ 、 $-NR^{5A}C(O)OR^{5C}$ 、 $-NR^{5A}OR^{5C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり； L^1 は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NR^6-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NR^6-$ 、 $-NR^6C(O)-$ 、 $-NR^6C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)NR^6-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、置換もしくは非置換のアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、置換もしくは非置換のシクロアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のアリーレン、または置換もしくは非置換のヘテロアリーレンであり； R^6 は、水素、ハロゲン、 $-CX^6_3$ 、 $-CHX^6_2$ 、 $-CH_2X^6$ 、 $-OCX^6_3$ 、 $-OCH_2X^6$ 、 $-OCHX^6_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n6}R^{6D}$ 、 $-SO_{v6}NR^{6A}R^{6B}$ 、 $-NHC(O)NR^{6A}R^{6B}$ 、 $-N(O)_m6$ 、 $-NR^{6A}R^{6B}$ 、 $-C(O)R^{6C}$ 、 $-C(O)-OR^{6C}$ 、 $-C(O)NR^{6A}R^{6B}$ 、 $-OR^{6D}$ 、 $-NR^{6A}SO_2R^{6D}$ 、 $-NR^{6A}C(O)R^{6C}$ 、 $-NR^{6A}C(O)OR^{6C}$ 、 $-NR^{6A}OR^{6C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり； L^2 は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NR^7-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NR^7-$ 、 $-NR^7C(O)-$ 、 $-NR^7C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)NR^7-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、置換もしくは非置換のアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、置換もしくは非置換のシクロアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のアリーレン、または置換もしくは非置換のヘテロアリーレンであり； R^7 は、水素、ハロゲン、 $-CX^7_3$ 、 $-CHX^7_2$ 、 $-CH_2X^7$ 、 $-OCX^7_3$ 、 $-OCH_2X^7$ 、 $-OCHX^7_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n7}R^{7D}$ 、 $-SO_{v7}NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-NHC(O)NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-N(O)_m7$ 、 $-NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-C(O)R^{7C}$ 、 $-C(O)-OR^{7C}$ 、 $-C(O)NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-OR^{7D}$ 、 $-NR^{7A}SO_2R^{7D}$ 、 $-NR^{7A}C(O)R^{7C}$ 、 $-NR^{7A}C(O)OR^{7C}$ 、 $-NR^{7A}OR^{7C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり； E は、求電子部分であり；各 R^{1A} 、 R^{1B} 、 R^{1C} 、 R^{1D} 、 R^{2A} 、 R^{2B} 、 R^{2C} 、 R^{2D} 、 R^{4A} 、 R^{4B} 、 R^{4C} 、 R^{4D} 、 R^{5A} 、 R^{5B} 、 R^{5C} 、 R^{5D} 、 R^{6A} 、 R^{6B} 、 R^{6C} 、 R^{6D} 、 R^{7A} 、 R^{7B} 、 R^{7C} 、及び R^{7D} は独立して、水素、 $-CX_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX_2$ 、 $-CH_2X$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；同一の窒素原子と結合した R^{1A} 及び R^{1B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{2A} 及び R^{2B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{4A} 及び R^{4B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{5A} 及び

10

20

30

40

50

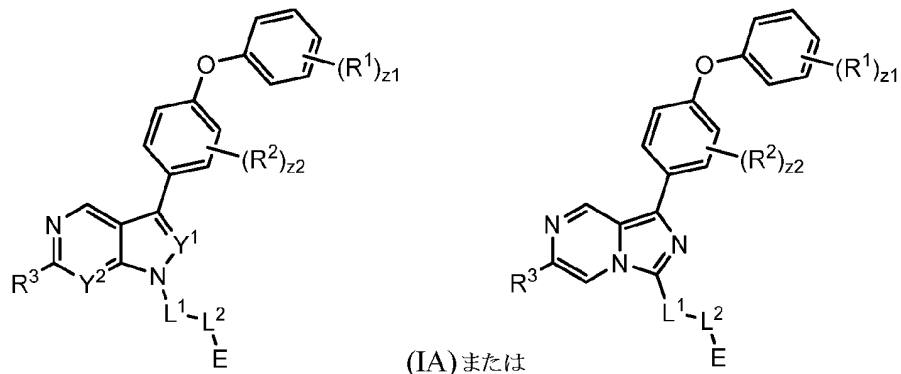
R^{5B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{7A} 及び R^{7B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；各 X、X¹、X²、X⁴、X⁵、X⁶、及び X⁷ は独立して、-F、-Cl、-Br、または -I であり；n₁、n₂、n₄、n₅、n₆、及び n₇ は独立して、0～4 の整数であり；及び m₁、m₂、m₄、m₅、m₆、m₇、v₁、v₂、v₄、v₅、v₆、及び v₇ は独立して、1～2 の整数である、化合物。

10

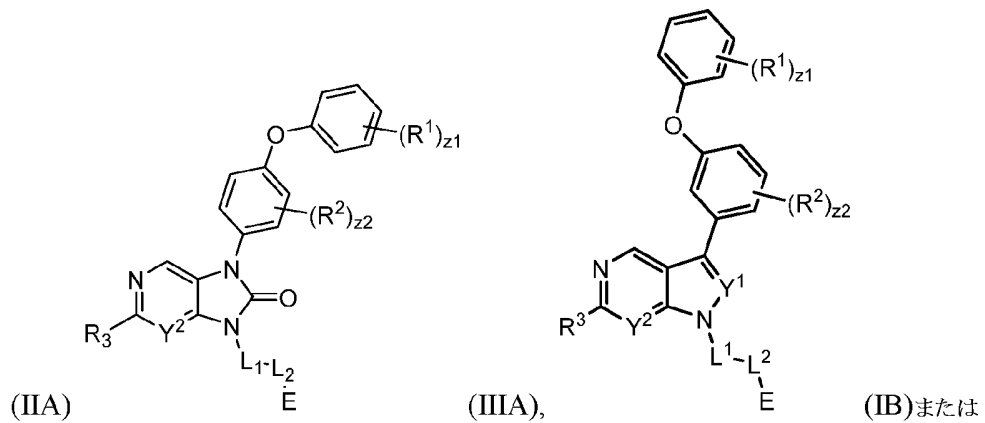
【0837】

実施形態 P 2. 式：

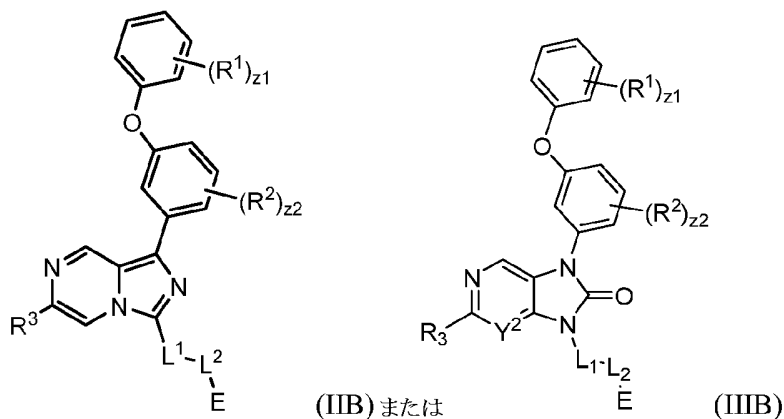
【化691】



20



30



40

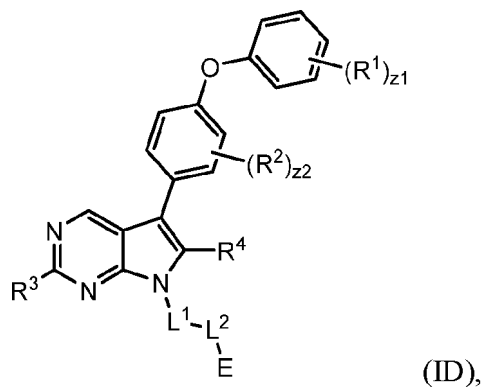
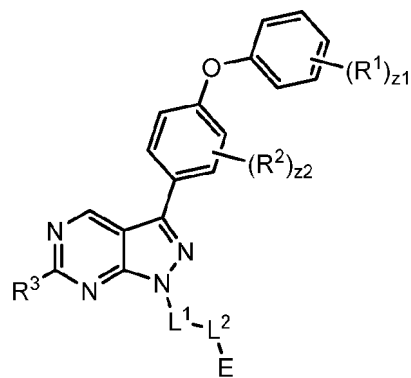
を有する、請求項 1 に記載の化合物。

【0838】

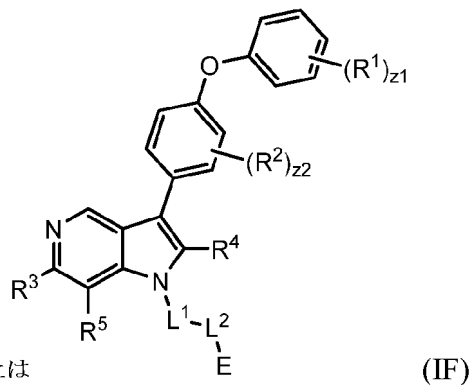
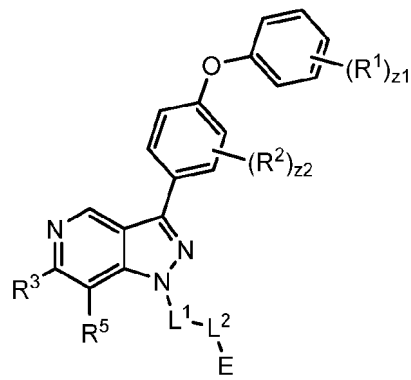
実施形態 P 3. 式：

50

【化 6 9 2】



10



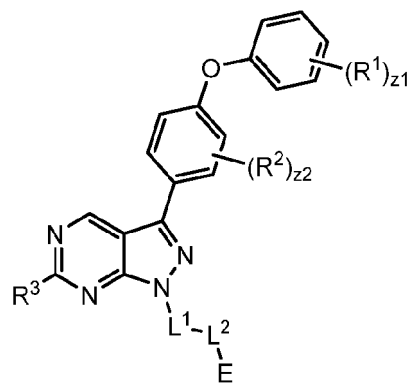
20

を有する、請求項 1 に記載の化合物。

【0 8 3 9】

実施形態 P 4. 式：

【化 6 9 3】



30

を有する、請求項 1 に記載の化合物。

【0 8 4 0】

実施形態 P 5. R³ が、水素である、請求項 1 ～ 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

40

【0 8 4 1】

実施形態 P 6. R³ が、-NH₂ である、請求項 1 ～ 4 のいずれか 1 項に記載の化合物

。

【0 8 4 2】

実施形態 P 7. R¹ が独立して、ハロゲン、-CX¹₃、-CN、-OH、-NH₂、-COOH、-CONH₂、-NO₂、-SH、-OCX¹₃、-OCHX¹₂、-CHX¹₂、-CH₂X¹、置換もしくは非置換の C₁-C₈ アルキル、または置換もしくは非置換の 2 ～ 8 員ヘテロアルキルであり；2 個の隣接する R¹ 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換の C₃-C₈ シクロアルキル、置換もしくは非置換の 3 ～ 8 員ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のフェニル、または置換もしくは非置換の

50

5～6員ヘテロアリールを形成し得る、請求項1～6のいずれか1項に記載の化合物。

【0843】

実施形態P8. R^1 が独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CN$ 、非置換の C_1-C_4 アルキル、または非置換の2～4員ヘテロアルキルである、請求項1～6のいずれか1項に記載の化合物。

【0844】

実施形態P9. R^1 が独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CN$ 、非置換のメチル、非置換のエチル、非置換のメトキシ、または非置換のエトキシである、請求項1～6のいずれか1項に記載の化合物。

【0845】

実施形態P10. z_1 が、0である、請求項1～9のいずれか1項に記載の化合物。

【0846】

実施形態P11. z_1 が、1である、請求項1～9のいずれか1項に記載の化合物。

【0847】

実施形態P12. R^2 が独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-OCX^2_3$ 、 $-OCHX^2_2$ 、 $-CHX^2_2$ 、 $-CH_2X^2$ 、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、または置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキルであり；2個の隣接する R^2 置換基が、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のフェニル、または置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る、請求項1～11のいずれか1項に記載の化合物。

【0848】

実施形態P13. R^2 が独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CN$ 、非置換の C_1-C_4 アルキル、または非置換の2～4員ヘテロアルキルである、請求項1～11のいずれか1項に記載の化合物。

【0849】

実施形態P14. R^2 が独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CN$ 、非置換のメチル、非置換のエチル、非置換のメトキシ、または非置換のエトキシである、請求項1～11のいずれか1項に記載の化合物。

【0850】

実施形態P15. z_2 が、0である、請求項1～14のいずれか1項に記載の化合物。

【0851】

実施形態P16. z_2 が、1である、請求項1～14のいずれか1項に記載の化合物。

【0852】

実施形態P17. L^1 が、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキレン、置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキレン、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキレン、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のフェニレン、または置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリーレンである、請求項1～16のいずれか1項に記載の化合物。

【0853】

実施形態P18. L^1 が、結合である、請求項1～16のいずれか1項に記載の化合物。

【0854】

実施形態P19. L^1 が、置換もしくは非置換の C_1-C_6 アルキレン、置換もしくは非置換の2～6員ヘテロアルキレン、置換もしくは非置換の C_3-C_6 シクロアルキレン、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のフェニレン、または置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリーレンである、請求項1～16のいずれか1項に記載の化合物。

【0855】

10

20

30

40

50

実施形態 P 2 0. L^1 が、非置換の $C_1 - C_6$ アルキレン、非置換の 2～6 員ヘテロアルキレン、または非置換の $C_3 - C_6$ シクロアルキレンである、請求項 1～16 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0856】

実施形態 P 2 1. L^1 が、非置換のメチレンである、請求項 1～16 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0857】

実施形態 P 2 2. L^2 が、 $-NR^7-$ 、または E に直接結合した環窒素を含む置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレンである、請求項 1～21 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

【0858】

実施形態 P 2 3. L^2 が、 $-NR^7-$ である、請求項 1～21 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0859】

実施形態 P 2 4. R^7 が、水素、置換もしくは非置換の $C_1 - C_6$ アルキル、または置換もしくは非置換の 2～6 員ヘテロアルキルである、請求項 23 に記載の化合物。

【0860】

実施形態 P 2 5. R^7 が、水素または非置換の $C_1 - C_3$ アルキルである、請求項 23 に記載の化合物。

【0861】

20

実施形態 P 2 6. R^7 が、水素である、請求項 23 に記載の化合物。

【0862】

実施形態 P 2 7. L^2 が、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレンである、請求項 1～21 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0863】

実施形態 P 2 8. L^2 が、置換もしくは非置換のピペリジニレン、または置換もしくは非置換のピロリンジニレンである、請求項 1～21 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0864】

実施形態 P 2 9. L^2 が、非置換のピペリジニレンまたは非置換のピロリンジニレンである、請求項 1～21 のいずれか 1 項に記載の化合物。

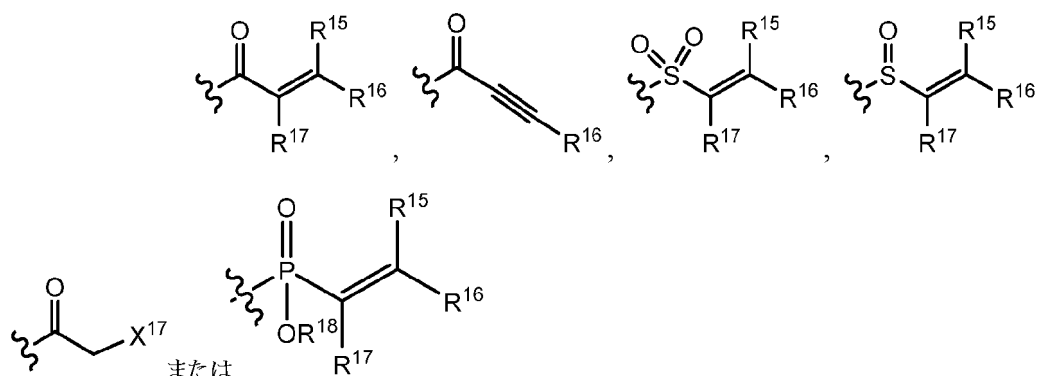
30

【0865】

実施形態 P 3 0. E が、共有結合性のシステイン修飾部分である、請求項 1～29 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0866】

実施形態 P 3 1. E が、
【化 6 9 4】



40

であり； R^{15} が独立して、水素、ハロゲン、 CX^{15}_3 、 $-CHX^{15}_2$ 、 $-CH_2X^{15}$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n15}R^{15D}$ 、 $-SO_{v15}NR^{15A}R^{15B}$ 、 $-NHN R^{15A}R^{15B}$ 、 $-ONR^{15A}R^{15B}$ 、 $-NHC=(O)NHN R^{15A}R^{15B}$ 、 $-NHC(O)NR^{15A}R^{15B}$ 、 $-N(O)_m15$ 、 $-NR^{15A}R^{15B}$ 、 $-C(O)$

50

R^{15C} 、 $-C(O)-OR^{15C}$ 、 $-C(O)NR^{15A}R^{15B}$ 、 $-OR^{15D}$ 、
 $-NR^{15A}SO_2R^{15D}$ 、 $-NR^{15A}C(O)R^{15C}$ 、 $-NR^{15A}C(O)OR^{15C}$ 、 $-NR^{15A}OR^{15C}$ 、 $-OCX^{15}_3$ 、 $-OCHX^{15}_2$ 、置換もしくは
 非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロ
 アルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール
 、置換もしくは非置換のヘテロアリールであり； R^{16} が独立して、水素、ハロゲン、 CX^{16}_3 、 $-CHX^{16}_2$ 、 $-CH_2X^{16}$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n16}R^{16D}$ 、 $-SO_{v16}NR^{16A}R^{16B}$ 、 $-NHN R^{16A}R^{16B}$ 、 $-ONR^{16A}R^{16B}$ 、 $-NHC=(O)NHN R^{16A}R^{16B}$ 、 $-NHC(O)NR^{16A}R^{16B}$ 、 $-N(O)_{m16}$ 、 $-NR^{16A}R^{16B}$ 、 $-C(O)R^{16C}$ 、 $-C(O)-OR^{16C}$ 、 $-C(O)NR^{16A}R^{16B}$ 、 $-OR^{16D}$ 、 $-NR^{16A}SO_2R^{16D}$ 、 $-NR^{16A}C(O)R^{16C}$ 、 $-NR^{16A}C(O)OR^{16C}$ 、 $-NR^{16A}OR^{16C}$ 、 $-OCX^{16}_3$ 、 $-OCHX^{16}_2$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロ
 アルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロア
 ルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；
 R^{17} が独立して、水素、ハロゲン、 CX^{17}_3 、 $-CHX^{17}_2$ 、 $-CH_2X^{17}$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n17}R^{17D}$ 、 $-SO_{v17}NR^{17A}R^{17B}$ 、 $-NHN R^{17A}R^{17B}$ 、 $-ONR^{17A}R^{17B}$ 、 $-NHC=(O)NHN R^{17A}R^{17B}$ 、 $-NHC(O)NR^{17A}R^{17B}$ 、 $-N(O)_{m17}$ 、 $-NR^{17A}R^{17B}$ 、 $-C(O)R^{17C}$ 、 $-C(O)-OR^{17C}$ 、 $-C(O)NR^{17A}R^{17B}$ 、 $-OR^{17D}$ 、 $-NR^{17A}SO_2R^{17D}$ 、 $-NR^{17A}C(O)R^{17C}$ 、 $-NR^{17A}C(O)OR^{17C}$ 、 $-NR^{17A}OR^{17C}$ 、 $-OCX^{17}_3$ 、 $-OCHX^{17}_2$ 、置換もしくは非置換の
 アルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル
 、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換も
 しくは非置換のヘテロアリールであり； R^{18} が独立して、水素、 $-CX^{18}_3$ 、 $-CHX^{18}_2$ 、 $-CH_2X^{18}$ 、 $-C(O)R^{18C}$ 、 $-C(O)OR^{18C}$ 、 $-C(O)NR^{18A}R^{18B}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールであり； R^{15A} 、 R^{15B} 、 R^{15C} 、 R^{15D} 、 R^{16A} 、 R^{16B} 、 R^{16C} 、 R^{16D} 、 R^{17A} 、 R^{17B} 、 R^{17C} 、 R^{17D} 、 R^{18A} 、 R^{18B} 、 R^{18C} 、 R^{18D} が独立して、水素、 $-CX_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX_2$ 、 $-CH_2X$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；同一の窒素原子と結合した R^{15A} 及び R^{15B} 置換基が、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{16A} 及び R^{16B} 置換基が、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{17A} 及び R^{17B} 置換基が、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{18A} 及び R^{18B} 置換基が、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；各 X 、 X^{15} 、 X^{16} 、 X^{17} 、及び X^{18} が独立して、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、または $-I$ であり； $n15$ 、 $n16$ 、 $n17$ 、 $v15$ 、 $v16$ 、及び $v17$ が独立して、 $0\sim 4$ の整数であり；及び $m15$ 、 $m16$ 、及び $m17$ が独立して、 $1\sim 2$ の整数である、請求項 $1\sim 29$ のいずれか1項に記載の化合物。

【0867】

実施形態P32. R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、及び R^{18} が、水素である、請求項31に

10

20

30

40

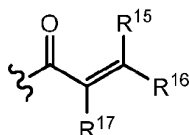
50

記載の化合物。

【0868】

実施形態P33. Eが、

【化695】

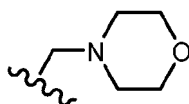


である、請求項31～32のいずれか1項に記載の化合物。

【0869】

実施形態P34. R¹⁵が、水素であり；R¹⁶が、水素、-CH₃、-CH₂NR^{16A}R^{16B}、または

【化696】



であり；R¹⁷が、水素であり；及びR^{16A}及びR^{16B}が独立して、水素または非置換のアルキルである、請求項33に記載の化合物。

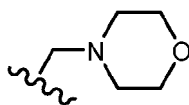
【0870】

実施形態P35. R^{16A}及びR^{16B}が独立して、非置換のメチルである、請求項34に記載の化合物。

【0871】

実施形態P36. R¹⁵が、水素であり；R¹⁶が、水素であり；R¹⁷が、水素、-CH₃、-CH₂NR^{17A}R^{17B}、または

【化697】



であり；及びR^{17A}、及びR^{17B}が独立して、水素または非置換のアルキルである、請求項33に記載の化合物。

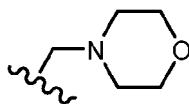
【0872】

実施形態P37. R^{17A}及びR^{17B}が独立して、非置換のメチルである、請求項36に記載の化合物。

【0873】

実施形態P38. R¹⁵が、水素、-CH₃、-CH₂NR^{15A}R^{15B}、または

【化698】



であり；R¹⁶が、水素であり；R¹⁷が、水素であり；及びR^{15A}及びR^{15B}が独立して、水素または非置換のアルキルである、請求項33に記載の化合物。

【0874】

実施形態P39. R^{15A}及びR^{15B}が独立して、非置換のメチルである、請求項38に記載の化合物。

【0875】

実施形態P40. R⁴が、水素、置換もしくは非置換のC₁-C₈アルキル、または置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキルである、請求項1～39のいずれか1項に記載の化合物。

【0876】

実施形態P41. R⁵が、水素、置換もしくは非置換のC₁-C₈アルキル、または置

10

20

30

40

50

換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキルである、請求項1～40のいずれか1項に記載の化合物。

【0877】

実施形態P42. 化合物が、中枢神経系の外側に投与した後に、患者の中枢神経系に入ることができる、請求項1～41のいずれか1項に記載の化合物。

【0878】

実施形態P43. 請求項1～42のいずれか1項に記載の化合物、及び医薬的に許容可能な賦形剤を含む、医薬組成物。

【0879】

実施形態P44. ブルトン型チロシンキナーゼを、有効量の請求項1～42のいずれか1項に記載の化合物と接触させることを含む、ブルトン型チロシンキナーゼ活性の阻害方法。

10

【0880】

実施形態P45. がんの治療方法であって、それを必要とする対象に有効量の請求項1～42のいずれか1項に記載の化合物を投与することを含む、方法。

【0881】

実施形態P46. 請求項1～42のいずれか1項に記載の化合物と共有結合した、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質。

【0882】

実施形態P47. 化合物が、タンパク質のシステイン残基と結合している、請求項46に記載のブルトン型チロシンキナーゼタンパク質。

20

【0883】

実施形態P48. 請求項1～42のいずれか1項に記載の化合物の一部と共有結合した、請求項46に記載のブルトン型チロシンキナーゼタンパク質。

【0884】

実施形態P49. 請求項1～42のいずれか1項に記載の化合物の一部に不可逆的に共有結合した、請求項46に記載のブルトン型チロシンキナーゼタンパク質。

【0885】

実施形態P50. ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質が、対象の中枢神経系内である、請求項46～49のいずれか1項に記載のブルトン型チロシンキナーゼタンパク質。

30

【0886】

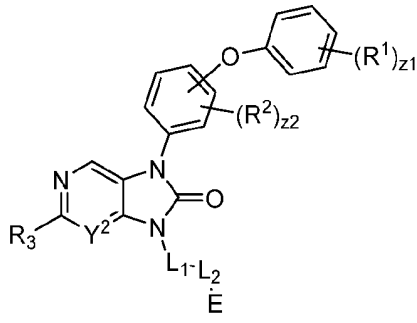
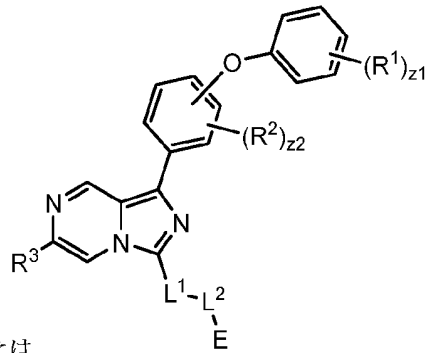
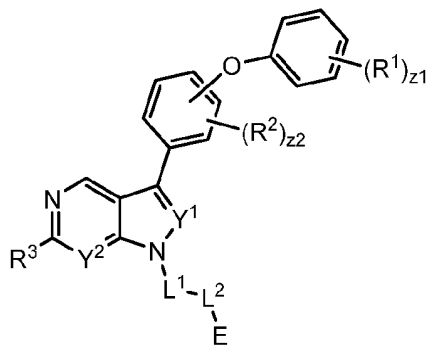
実施形態P51. ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質が、対象の脳内である、請求項46～49のいずれか1項に記載のブルトン型チロシンキナーゼタンパク質。

【0887】

VI. さらなる実施形態

実施形態1. 式：

【化 6 9 9】



を有する化合物であって、

式中、 R^1 は独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CHX^1_2$ 、 $-CH_2X^1$ 、 $-OCX^1_3$ 、 $-OCH_2X^1$ 、 $-OCHX^1_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n1}R^{1D}$ 、 $-SO_{v1}NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-NHC(O)NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-N(O)_{m1}$ 、 $-NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-C(O)R^{1C}$ 、 $-C(O)-OR^{1C}$ 、 $-C(O)NR^{1A}R^{1B}$ 、 $-OR^{1D}$ 、 $-NR^{1A}SO_2R^{1D}$ 、 $-NR^{1A}C(O)R^{1C}$ 、 $-NR^{1A}C(O)OR^{1C}$ 、 $-NR^{1A}OR^{1C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；2 個の隣接する R^1 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく； $z1$ は、0～5 の整数であり； R^2 は独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CHX^2_2$ 、 $-CH_2X^2$ 、 $-OCX^2_3$ 、 $-OCH_2X^2$ 、 $-OCHX^2_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n2}R^{2D}$ 、 $-SO_{v2}NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-NHC(O)NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-N(O)_{m2}$ 、 $-NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-C(O)R^{2C}$ 、 $-C(O)-OR^{2C}$ 、 $-C(O)NR^{2A}R^{2B}$ 、 $-OR^{2D}$ 、 $-NR^{2A}SO_2R^{2D}$ 、 $-NR^{2A}C(O)R^{2C}$ 、 $-NR^{2A}C(O)OR^{2C}$ 、 $-NR^{2A}OR^{2C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；2 個の隣接する R^2 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく； $z2$ は、0～4 の整数であり； R^3 は、水素または $-NH_2$ であり； Y^1 は、N または $C(R^4)$ であり； R^4 は、水素、ハロゲン、 $-CX^4_3$ 、 $-CHX^4_2$ 、 $-CH_2X^4$ 、 $-OCX^4_3$ 、 $-OCH_2X^4$ 、 $-OCHX^4_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n4}R^{4D}$ 、 $-SO_{v4}NR^{4A}R^{4B}$ 、 $-NHC(O)NR^{4A}R^{4B}$ 、 $-N(O)_{m4}$ 、 $-NR^{4A}R^{4B}$ 、 $-C(O)R^{4C}$ 、 $-C(O)-OR^{4C}$ 、 $-C(O)NR^{4A}R^{4B}$ 、 $-OR^{4D}$ 、 $-NR^{4A}SO_2R^{4D}$ 、 $-NR^{4A}C(O)R^{4C}$ 、 $-NR^{4A}C(O)OR^{4C}$ 、 $-NR^{4A}OR^{4C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、

置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり； Y^2 は、NまたはC(R^5)であり； R^5 は、水素、ハロゲン、 $-CX^5_3$ 、 $-CHX^5_2$ 、 $-CH_2X^5$ 、 $-OCX^5_3$ 、 $-OCH_2X^5$ 、 $-OCHX^5_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n5}R^{5D}$ 、 $-SO_{v5}NR^{5A}R^{5B}$ 、 $-NHC(O)NR^{5A}R^{5B}$ 、 $-N(O)_m5$ 、 $-NR^{5A}R^{5B}$ 、 $-C(O)R^{5C}$ 、 $-C(O)-OR^{5C}$ 、 $-C(O)NR^{5A}R^{5B}$ 、 $-OR^{5D}$ 、 $-NR^{5A}SO_2R^{5D}$ 、 $-NR^{5A}C(O)R^{5C}$ 、 $-NR^{5A}C(O)OR^{5C}$ 、 $-NR^{5A}OR^{5C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり； L^1 は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NR^6-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NR^6-$ 、 $-NR^6C(O)-$ 、 $-NR^6C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)NR^6-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、置換もしくは非置換のアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、置換もしくは非置換のシクロアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のアリーレン、または置換もしくは非置換のヘテロアリーレンであり； R^6 は、水素、ハロゲン、 $-CX^6_3$ 、 $-CHX^6_2$ 、 $-CH_2X^6$ 、 $-OCX^6_3$ 、 $-OCH_2X^6$ 、 $-OCHX^6_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n6}R^{6D}$ 、 $-SO_{v6}NR^{6A}R^{6B}$ 、 $-NHC(O)NR^{6A}R^{6B}$ 、 $-N(O)_m6$ 、 $-NR^{6A}R^{6B}$ 、 $-C(O)R^{6C}$ 、 $-C(O)-OR^{6C}$ 、 $-C(O)NR^{6A}R^{6B}$ 、 $-OR^{6D}$ 、 $-NR^{6A}SO_2R^{6D}$ 、 $-NR^{6A}C(O)R^{6C}$ 、 $-NR^{6A}C(O)OR^{6C}$ 、 $-NR^{6A}OR^{6C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり； L^2 は、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、 $-NR^7-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)NR^7-$ 、 $-NR^7C(O)-$ 、 $-NR^7C(O)NH-$ 、 $-NHC(O)NR^7-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-OC(O)-$ 、置換もしくは非置換のアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロアルキレン、置換もしくは非置換のシクロアルキレン、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のアリーレン、または置換もしくは非置換のヘテロアリーレンであり； R^7 は、水素、ハロゲン、 $-CX^7_3$ 、 $-CHX^7_2$ 、 $-CH_2X^7$ 、 $-OCX^7_3$ 、 $-OCH_2X^7$ 、 $-OCHX^7_2$ 、 $-CN$ 、 $-SO_{n7}R^{7D}$ 、 $-SO_{v7}NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-NHC(O)NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-N(O)_m7$ 、 $-NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-C(O)R^{7C}$ 、 $-C(O)-OR^{7C}$ 、 $-C(O)NR^{7A}R^{7B}$ 、 $-OR^{7D}$ 、 $-NR^{7A}SO_2R^{7D}$ 、 $-NR^{7A}C(O)R^{7C}$ 、 $-NR^{7A}C(O)OR^{7C}$ 、 $-NR^{7A}OR^{7C}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり； E は、求電子部分であり；各 R^{1A} 、 R^{1B} 、 R^{1C} 、 R^{1D} 、 R^{2A} 、 R^{2B} 、 R^{2C} 、 R^{2D} 、 R^{4A} 、 R^{4B} 、 R^{4C} 、 R^{4D} 、 R^{5A} 、 R^{5B} 、 R^{5C} 、 R^{5D} 、 R^{6A} 、 R^{6B} 、 R^{6C} 、 R^{6D} 、 R^{7A} 、 R^{7B} 、 R^{7C} 、及び R^{7D} は独立して、水素、 $-CX_3$ 、 $-CN$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CHX_2$ 、 $-CH_2X$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；同一の窒素原子と結合した R^{1A} 及び R^{1B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{2A} 及び R^{2B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{4A} 及び R^{4B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{5A} 及び

10

20

30

40

50

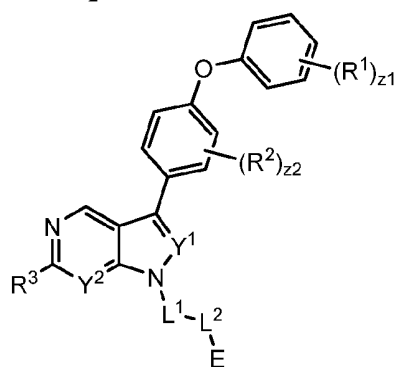
R^{5B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{6A} 及び R^{6B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{7A} 及び R^{7B} 置換基は、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；各 X、X¹、X²、X⁴、X⁵、X⁶、及び X⁷ は独立して、-F、-Cl、-Br、または -I であり；n₁、n₂、n₄、n₅、n₆、及び n₇ は独立して、0～4 の整数であり；及び m₁、m₂、m₄、m₅、m₆、m₇、v₁、v₂、v₄、v₅、v₆、及び v₇ は独立して、1～2 の整数である、化合物。

10

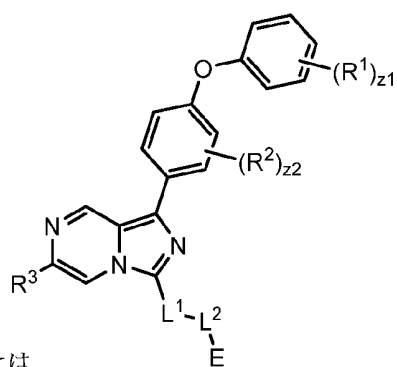
【0888】

実施形態2. 式：

【化700】

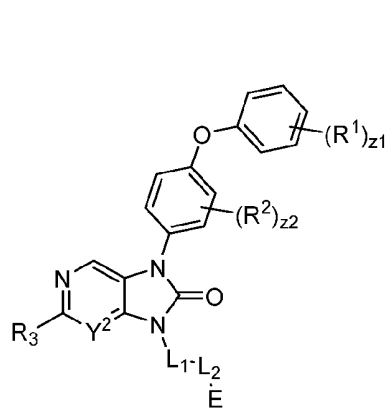


(IA)または

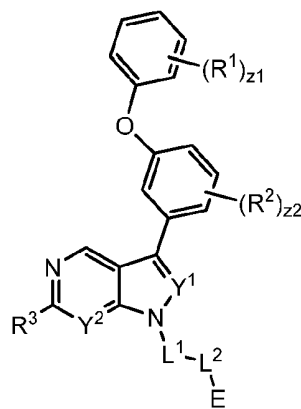


(IIA)

20

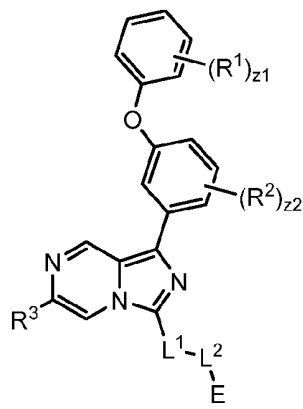


(IIIA),

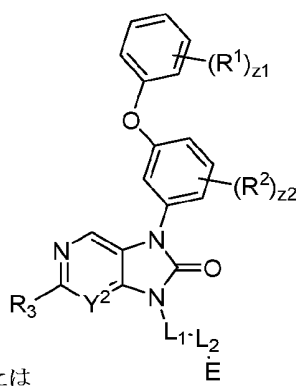


(IB)または

30



(IIB)または



(IIIB)

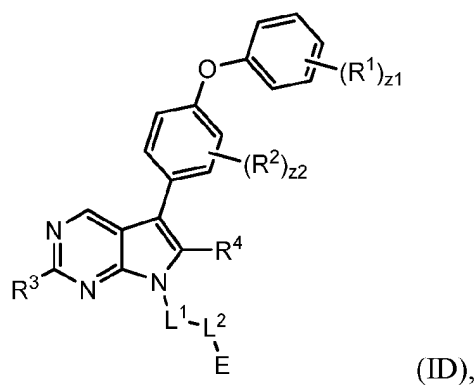
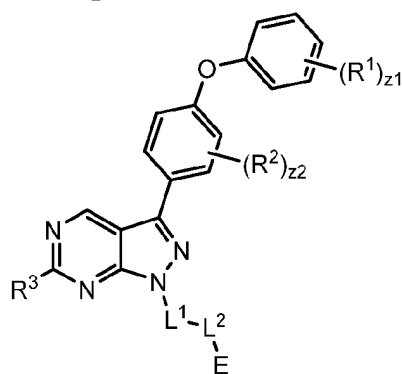
40

を有する、実施形態1に記載の化合物。

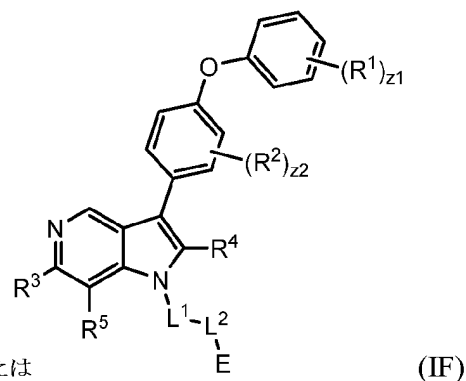
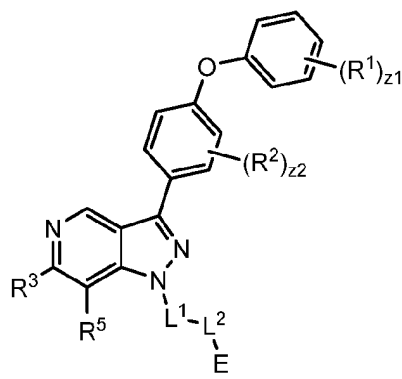
【0889】

実施形態3. 式：

【化 7 0 1】



10



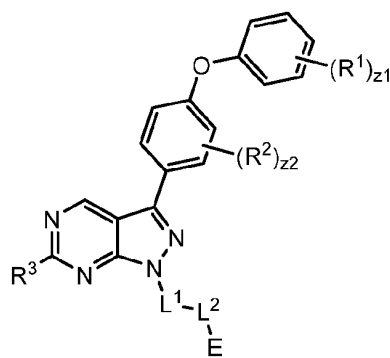
20

を有する、実施形態 1 に記載の化合物。

【0 8 9 0】

実施形態 4. 式：

【化 7 0 2】



30

を有する、実施形態 1 に記載の化合物。

【0 8 9 1】

実施形態 5. R^3 が、水素である、実施形態 1 ～ 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0 8 9 2】

実施形態 6. R^3 が、 $-NH_2$ である、実施形態 1 ～ 4 のいずれか 1 項に記載の化合物

40

【0 8 9 3】

実施形態 7. R^1 が独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-OCX^1_3$ 、 $-OCHX^1_2$ 、 $-CHX^1_2$ 、 $-CH_2X^1$ 、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、または置換もしくは非置換の 2 ～ 8 員ヘテロアルキルであり；2 個の隣接する R^1 置換基が、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、置換もしくは非置換の 3 ～ 8 員ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のフェニル、または置換もしくは非置換の 5 ～ 6 員ヘテロアリールを形成し得る、実施形態 1 ～ 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

50

【0894】

実施形態8. R^1 が独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CN$ 、非置換の C_1-C_4 アルキル、または非置換の2～4員ヘテロアルキルである、実施形態1～6のいずれか1項に記載の化合物。

【0895】

実施形態9. R^1 が独立して、ハロゲン、 $-CX^1_3$ 、 $-CN$ 、非置換のメチル、非置換のエチル、非置換のメトキシ、または非置換のエトキシである、実施形態1～6のいずれか1項に記載の化合物。

【0896】

実施形態10. z_1 が、0である、実施形態1～9のいずれか1項に記載の化合物。

10

【0897】

実施形態11. z_1 が、1である、実施形態1～9のいずれか1項に記載の化合物。

【0898】

実施形態12. R^2 が独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-NH_2$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SH$ 、 $-OCX^2_3$ 、 $-OCHX^2_2$ 、 $-CHX^2_2$ 、 $-CH_2X^2$ 、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、または置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキルであり；2個の隣接する R^2 置換基が、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキル、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のフェニル、または置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリールを形成し得る、実施形態1～11のいずれか1項に記載の化合物。

20

【0899】

実施形態13. R^2 が独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CN$ 、非置換の C_1-C_4 アルキル、または非置換の2～4員ヘテロアルキルである、実施形態1～11のいずれか1項に記載の化合物。

【0900】

実施形態14. R^2 が独立して、ハロゲン、 $-CX^2_3$ 、 $-CN$ 、非置換のメチル、非置換のエチル、非置換のメトキシ、または非置換のエトキシである、実施形態1～11のいずれか1項に記載の化合物。

【0901】

30

実施形態15. z_2 が、0である、実施形態1～14のいずれか1項に記載の化合物。

【0902】

実施形態16. z_2 が、1である、実施形態1～14のいずれか1項に記載の化合物。

【0903】

実施形態17. L^1 が、結合、 $-S(O)_2-$ 、 $-S(O)_2-Ph-$ 、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキレン、置換もしくは非置換の2～8員ヘテロアルキレン、置換もしくは非置換の C_3-C_8 シクロアルキレン、置換もしくは非置換の3～8員ヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のフェニレン、または置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリーレンである、実施形態1～16のいずれか1項に記載の化合物。

【0904】

40

実施形態18. L^1 が、結合である、実施形態1～16のいずれか1項に記載の化合物。

【0905】

実施形態19. L^1 が、置換もしくは非置換の C_1-C_6 アルキレン、置換もしくは非置換の2～6員ヘテロアルキレン、置換もしくは非置換の C_3-C_6 シクロアルキレン、置換もしくは非置換の3～6員ヘテロシクロアルキレン、置換もしくは非置換のフェニレン、または置換もしくは非置換の5～6員ヘテロアリーレンである、実施形態1～16のいずれか1項に記載の化合物。

【0906】

実施形態20. L^1 が、非置換の C_1-C_6 アルキレン、非置換の2～6員ヘテロアル

50

キレン、または非置換の $C_3 - C_6$ シクロアルキレンである、実施形態 1 ～ 16 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0907】

実施形態 21. L^1 が、非置換のメチレンである、実施形態 1 ～ 16 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0908】

実施形態 22. L^2 が、 $-NR^7-$ 、または E に直接結合した環窒素を含む置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレンである、実施形態 1 ～ 21 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0909】

実施形態 23. L^2 が、 $-NR^7-$ 、または E に直接結合した環窒素を含む置換もしくは非置換のスピロ環式ヘテロシクロアルキレンである、実施形態 1 ～ 21 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0910】

実施形態 24. L^2 が、 $-NR^7-$ である、実施形態 1 ～ 21 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0911】

実施形態 25. R^7 が、水素、置換もしくは非置換の $C_1 - C_6$ アルキル、または置換もしくは非置換の 2 ～ 6 員ヘテロアルキルである、実施形態 24 に記載の化合物。

【0912】

実施形態 26. R^7 が、水素または非置換の $C_1 - C_3$ アルキルである、実施形態 24 に記載の化合物。

【0913】

実施形態 27. R^7 が、水素である、実施形態 24 に記載の化合物。

【0914】

実施形態 28. L^2 が、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキレンである、実施形態 1 ～ 21 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0915】

実施形態 29. L^2 が、置換もしくは非置換のピペリジニレン、または置換もしくは非置換のピロリンジニレンである、実施形態 1 ～ 21 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0916】

実施形態 30. L^2 が、非置換のピペリジニレンまたは非置換のピロリンジニレンである、実施形態 1 ～ 21 のいずれか 1 項に記載の化合物。

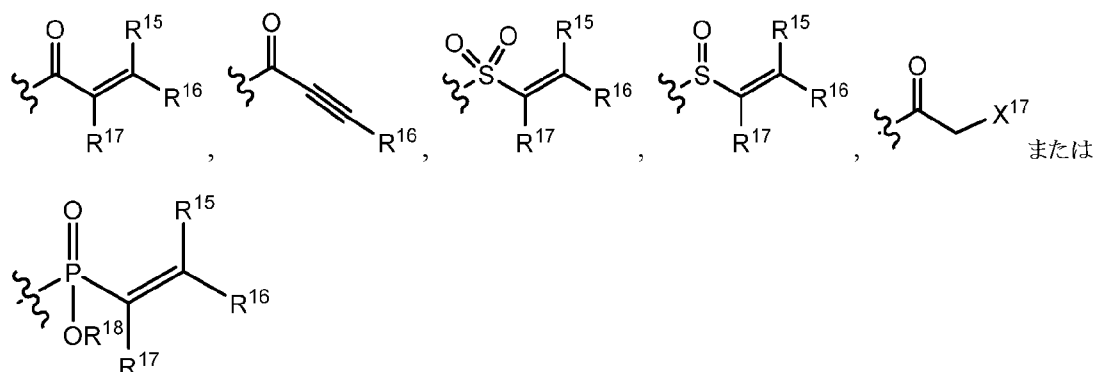
【0917】

実施形態 31. E が、共有結合性のシステイン修飾部分である、実施形態 1 ～ 30 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0918】

実施形態 32. E が、

【化703】



であり； R^{15} が独立して、水素、ハロゲン、 CX^{15}_3 、 $-CHX^{15}_2$ 、 $-CH_2X$

10

20

30

40

50

R^{15} 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n15}R^{15D}$ 、 $-\text{SO}_{v15}NR^{15A}R^{15B}$ 、 $-\text{NHN}R^{15A}R^{15B}$ 、 $-\text{ON}R^{15A}R^{15B}$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NHN}R^{15A}R^{15B}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})NR^{15A}R^{15B}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m15}$ 、 $-\text{NR}^{15A}R^{15B}$ 、 $-\text{C}(\text{O})R^{15C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^{15C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})NR^{15A}R^{15B}$ 、 $-\text{OR}^{15D}$ 、 $-\text{NR}^{15A}\text{SO}_2R^{15D}$ 、 $-\text{NR}^{15A}\text{C}(\text{O})R^{15C}$ 、 $-\text{NR}^{15A}\text{C}(\text{O})\text{OR}^{15C}$ 、 $-\text{NR}^{15A}\text{OR}^{15C}$ 、 $-\text{OCX}^{15}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{15}_2$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールであり； R^{16} が独立して、水素、ハロゲン、 CX^{16}_3 、 $-\text{CHX}^{16}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{16}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n16}R^{16D}$ 、 $-\text{SO}_{v16}NR^{16A}R^{16B}$ 、 $-\text{NHN}R^{16A}R^{16B}$ 、 $-\text{ON}R^{16A}R^{16B}$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NHN}R^{16A}R^{16B}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})NR^{16A}R^{16B}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m16}$ 、 $-\text{NR}^{16A}R^{16B}$ 、 $-\text{C}(\text{O})R^{16C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^{16C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})NR^{16A}R^{16B}$ 、 $-\text{OR}^{16D}$ 、 $-\text{NR}^{16A}\text{SO}_2R^{16D}$ 、 $-\text{NR}^{16A}\text{C}(\text{O})R^{16C}$ 、 $-\text{NR}^{16A}\text{C}(\text{O})\text{OR}^{16C}$ 、 $-\text{NR}^{16A}\text{OR}^{16C}$ 、 $-\text{OCX}^{16}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{16}_2$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールであり； R^{17} が独立して、水素、ハロゲン、 CX^{17}_3 、 $-\text{CHX}^{17}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{17}$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SO}_{n17}R^{17D}$ 、 $-\text{SO}_{v17}NR^{17A}R^{17B}$ 、 $-\text{NHN}R^{17A}R^{17B}$ 、 $-\text{ON}R^{17A}R^{17B}$ 、 $-\text{NHC}=(\text{O})\text{NHN}R^{17A}R^{17B}$ 、 $-\text{NHC}(\text{O})NR^{17A}R^{17B}$ 、 $-\text{N}(\text{O})_{m17}$ 、 $-\text{NR}^{17A}R^{17B}$ 、 $-\text{C}(\text{O})R^{17C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{OR}^{17C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})NR^{17A}R^{17B}$ 、 $-\text{OR}^{17D}$ 、 $-\text{NR}^{17A}\text{SO}_2R^{17D}$ 、 $-\text{NR}^{17A}\text{C}(\text{O})R^{17C}$ 、 $-\text{NR}^{17A}\text{C}(\text{O})\text{OR}^{17C}$ 、 $-\text{NR}^{17A}\text{OR}^{17C}$ 、 $-\text{OCX}^{17}_3$ 、 $-\text{OCHX}^{17}_2$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールであり； R^{18} が独立して、水素、 $-\text{CX}^{18}_3$ 、 $-\text{CHX}^{18}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}^{18}$ 、 $-\text{C}(\text{O})R^{18C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^{18C}$ 、 $-\text{C}(\text{O})NR^{18A}R^{18B}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールであり； R^{15A} 、 R^{15B} 、 R^{15C} 、 R^{15D} 、 R^{16A} 、 R^{16B} 、 R^{16C} 、 R^{16D} 、 R^{17A} 、 R^{17B} 、 R^{17C} 、 R^{17D} 、 R^{18A} 、 R^{18B} 、 R^{18C} 、 R^{18D} が独立して、水素、 $-\text{CX}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{CHX}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{X}$ 、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、または置換もしくは非置換のヘテロアリールであり；同一の窒素原子と結合した R^{15A} 及び R^{15B} 置換基が、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{16A} 及び R^{16B} 置換基が、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{17A} 及び R^{17B} 置換基が、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；同一の窒素原子と結合した R^{18A} 及び R^{18B} 置換基が、任意選択で連結されて、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、または置換もしくは非置換のヘテロアリールを形成してもよく；各 X 、 X^{15} 、 X^{16} 、 X^{17} 、及び X^{18} が独立して、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、または $-\text{I}$ であり； $n15$ 、 $n16$ 、 $n17$ 、 $v15$ 、 $v16$ 、及び $v17$ が独立して、 $0\sim 4$ の整数であり；及び $m15$ 、 $m16$ 、及び $m17$ が独立して、 $1\sim 2$ の整数である、実施形態 $1\sim 30$ のいずれか1項に記載の化

10

20

30

40

50

合物。

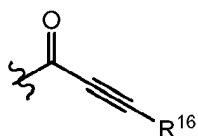
【0919】

実施形態33. R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、及び R^{18} が、水素である、実施形態32に記載の化合物。

【0920】

実施形態34. Eが、

【化704】



10

である、実施形態32に記載の化合物。

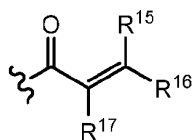
【0921】

実施形態35. R^{16} が、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換のアルキル、置換もしくは非置換のヘテロアルキル、置換もしくは非置換のシクロアルキル、置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換のヘテロアリールである、実施形態34に記載の化合物。

【0922】

実施形態36. Eが、

【化705】



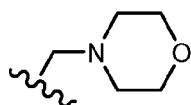
20

である、実施形態32～33のいずれか1項に記載の化合物。

【0923】

実施形態37. R^{15} が、水素であり； R^{16} が、水素、 $-CH_3$ 、 $-CH_2NR^{16}$ 、 AR^{16B} 、または

【化706】



30

であり； R^{17} が、水素であり；及び R^{16A} 及び R^{16B} が独立して、水素または非置換のアルキルである、実施形態36に記載の化合物。

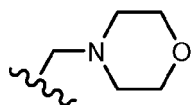
【0924】

実施形態38. R^{16A} 及び R^{16B} が独立して、非置換のメチルである、実施形態37に記載の化合物。

【0925】

実施形態39. R^{15} が、水素であり； R^{16} が、水素であり； R^{17} が、水素、 $-CH_3$ 、 $-CH_2NR^{17A}R^{17B}$ 、または

【化707】



40

であり；及び R^{17A} 、及び R^{17B} が独立して、水素または非置換のアルキルである、実施形態36に記載の化合物。

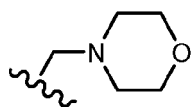
【0926】

実施形態40. R^{17A} 及び R^{17B} が独立して、非置換のメチルである、実施形態39に記載の化合物。

【0927】

50

実施形態 4 1. R^{15} が、水素、 $-CH_3$ 、 $-CH_2NR^{15A}R^{15B}$ 、または
【化 7 0 8】



であり； R^{16} が、水素であり； R^{17} が、水素であり；及び R^{15A} 及び R^{15B} が独立して、水素または非置換のアルキルである、実施形態 3 6 に記載の化合物。

【0 9 2 8】

実施形態 4 2. R^{15A} 及び R^{15B} が独立して、非置換のメチルである、実施形態 4 1 に記載の化合物。

10

【0 9 2 9】

実施形態 4 3. R^4 が、水素、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、または置換もしくは非置換の 2～8 員ヘテロアルキルである、実施形態 1～4 2 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0 9 3 0】

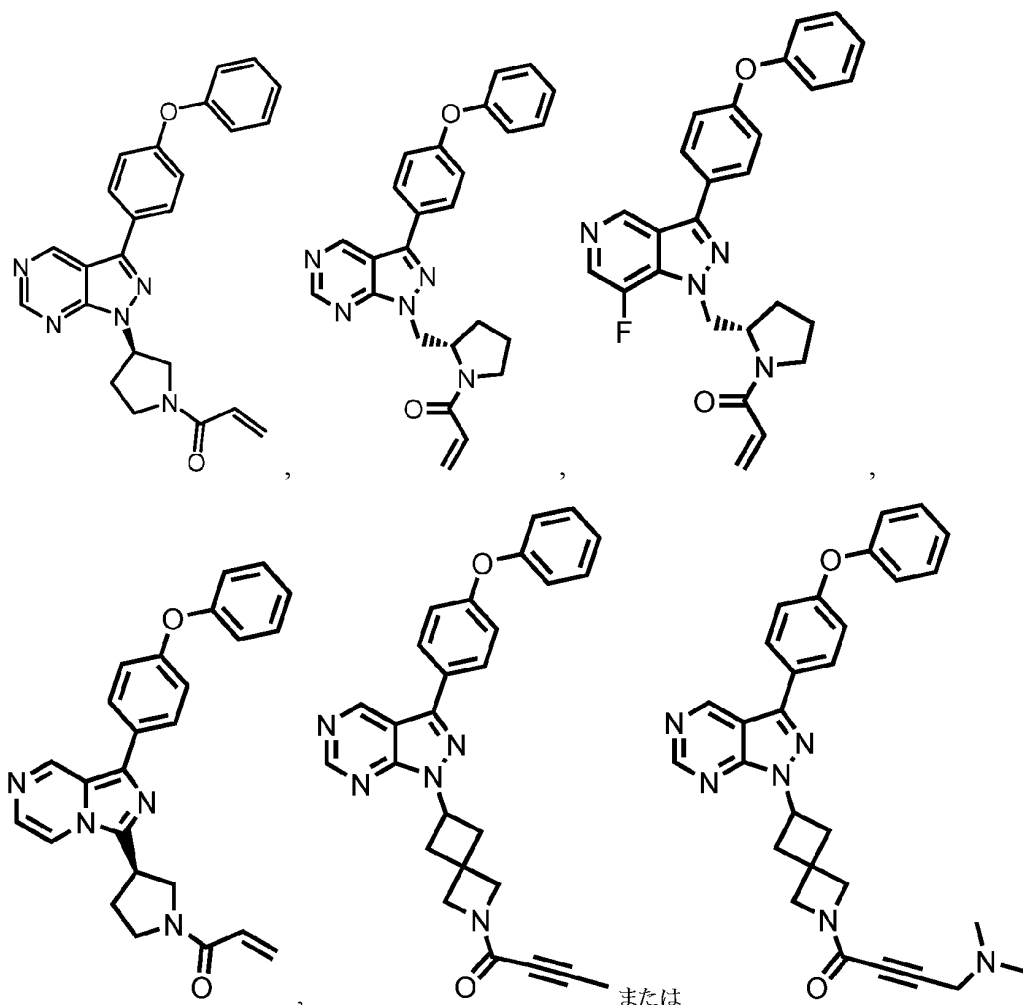
実施形態 4 4. R^5 が、水素、置換もしくは非置換の C_1-C_8 アルキル、または置換もしくは非置換の 2～8 員ヘテロアルキルである、実施形態 1～4 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0 9 3 1】

実施形態 4 5. 化合物が、式：

20

【化 7 0 9】



30

40

を有する、実施形態 1 の化合物。

【0 9 3 2】

50

実施形態 46. 化合物が、中枢神経系の外側に投与した後に、患者の中枢神経系に入ることができる、実施形態 1～45 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【0933】

実施形態 47. 実施形態 1～46 のいずれか 1 項に記載の化合物、及び医薬的に許容可能な賦形剤を含む、医薬組成物。

【0934】

実施形態 48. ブルトン型チロシンキナーゼを、有効量の実施形態 1～46 のいずれか 1 項に記載の化合物と接触させることを含む、ブルトン型チロシンキナーゼ活性の阻害方法。

【0935】

実施形態 49. がんの治療方法であって、それを必要とする対象に有効量の実施形態 1～46 のいずれか 1 項に記載の化合物を投与することを含む、方法。

【0936】

実施形態 50. 実施形態 1～46 のいずれか 1 項に記載の化合物と共有結合した、ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質。

【0937】

実施形態 51. 化合物が、タンパク質のシステイン残基と結合している、実施形態 50 に記載のブルトン型チロシンキナーゼタンパク質。

【0938】

実施形態 52. 実施形態 1～46 のいずれか 1 項に記載の化合物の一部と共有結合した、実施形態 50 に記載のブルトン型チロシンキナーゼタンパク質。

【0939】

実施形態 53. 実施形態 1～46 のいずれか 1 項に記載の化合物の一部に不可逆的に共有結合した、実施形態 50 に記載のブルトン型チロシンキナーゼタンパク質。

【0940】

実施形態 54. ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質が、対象の中枢神経系内である、実施形態 50～53 のいずれか 1 項に記載のブルトン型チロシンキナーゼタンパク質。

【0941】

実施形態 55. ブルトン型チロシンキナーゼタンパク質が、対象の脳内である、実施形態 50～53 のいずれか 1 項に記載のブルトン型チロシンキナーゼタンパク質。

【0942】

実施形態 56. 炎症性疾患の治療方法であって、それを必要とする対象に有効量の実施形態 1～46 のいずれか 1 項に記載の化合物を投与することを含む、方法。

【0943】

実施形態 57. 炎症性疾患が、多発性硬化症、脳炎、アルツハイマー病関連脳炎、またはパーキンソン病関連脳炎である、実施形態 56 に記載の方法。

【0944】

実施形態 58. 異常なブルトン型チロシンキナーゼ活性と関連する疾患の治療方法であって、それを必要とする対象に有効量の実施形態 1～46 のいずれか 1 項に記載の化合物を投与することを含む、方法。

【0945】

実施形態 59. 疾患が、精神障害または神経障害である、実施形態 58 に記載の方法。

【0946】

実施形態 60. 疾患が、自閉症、レット症候群、脆弱 X 症候群、心筋梗塞、緑内障、結節性硬化症、神経因性疼痛、不安、慢性神経変性、うつ病、癲癇、HIV 関連痴呆、または神経炎症である、実施形態 58 に記載の方法。

【0947】

実施形態 61. 脳卒中の治療方法であって、それを必要とする対象に有効量の実施形態 1～46 のいずれか 1 項に記載の化合物を投与することを含む、方法。

【0948】

10

20

30

40

50

実施形態 62. 自己免疫疾患の治療方法であって、それを必要とする対象に有効量の実施形態 1～46 のいずれか 1 項に記載の化合物を投与することを含む、方法。

【0949】

本明細書に記載された実施例及び実施形態は、例示のみを目的とするものであること、及びこれらの観点からの様々な修正または変更は、当業者に示唆されており、本出願の精神及び範囲、並びに添付特許請求の範囲に含まれていることを理解されたい。本明細書中で引用した全ての刊行物、特許、及び特許出願は、その内容全体があらゆる目的で参照によって組み込まれる。

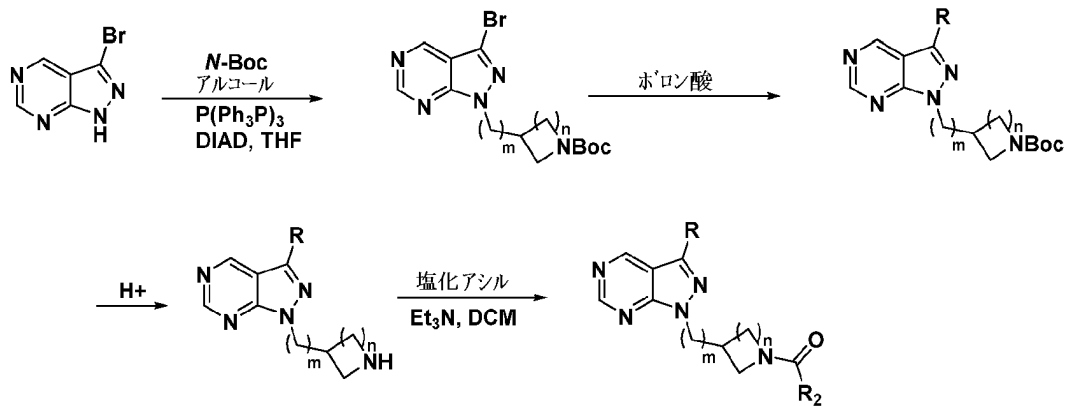
【実施例】

【0950】

実施例 A. 化合物を調製するための一般的な合成方法

スキーム 1：方法 A

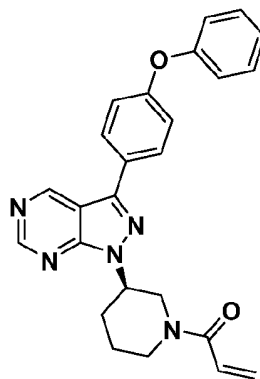
【化 710】



【0951】

実施例 1：(R) - 1 - (3 - (3 - (4 - フェノキシフェニル) - 1H - ピラゾロ [3, 4 - d] ピリミジン - 1 - イル) ピペリジン - 1 - イル) プロパン - 2 - エン - 1 - オン；(化合物 A9)：

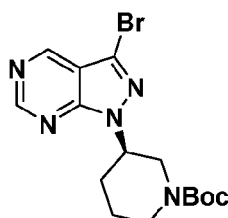
【化 711】



【0952】

ステップ 1：tert - ブチル (R) - 3 - (3 - ブロモ - 1H - ピラゾロ [3, 4 - d] ピリミジン - 1 - イル) ピペリジン - 1 - カルボキシレート

【化 712】



10

20

30

40

50

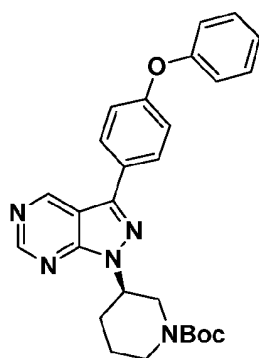
【0953】

DIAD (0.9 mL、4.5 mmol) を THF (10 mL) 中の TPP (1186 mg、4.5 mmol) 及び tert-ブチル (3S)-3-ヒドロキシピペリジン-1-カルボキシレート (910 mg、4.5 mmol) の溶液に添加した。5 分後、3-ブロモ-1H-ピラゾロ [3, 4-d] ピリミジン (300 mg、1.5 mmol) を添加した。4 時間後、反応混合物を濃縮した。残渣を酢酸エチル (10 mL) 中に溶解し、沈殿物が形成されるまでヘキサンを攪拌しながら添加した。沈殿物をろ過によって除去し、ろ液を濃縮した。濃縮物をシリカゲルクロマトグラフィー (0~60% のヘキサン: EtOAc) で精製し、表題の化合物 (528 mg、1.38 mmol、92% 収率) を得た。

10

【0954】

ステップ2: tert-ブチル (R)-3-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ [3, 4-d] ピリミジン-1-イル) ピペリジン-1-カルボキシレート
【化713】



20

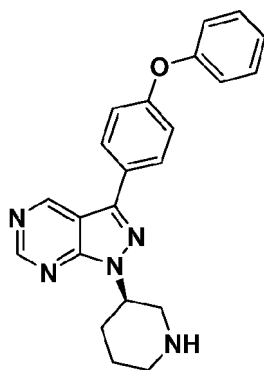
【0955】

トルエン (6 mL) / 水 (1 mL) 中の tert-ブチル (3R)-3-(3-ブロモピラゾロ [3, 4-d] ピリミジン-1-イル) ピペリジン-1-カルボキシレート (200 mg、0.52 mmol)、(4-フェノキシフェニル) ボロン酸 (146 mg、0.68 mmol)、及び K_2CO_3 (217 mg、1.6 mmol) の混合物を脱ガスした。その後、Pd(dppf)Cl₂ (38.28 mg、0.0500 mmol) を添加し、混合物を再び脱ガスした。混合物を 90 °C で一晩攪拌した。溶媒を蒸発させ、粗残渣を順相クロマトグラフィー (0~80% のヘキサン: EtOAc) を介して精製し、表題の化合物 (208 mg、0.44 mmol、84% 収率) を得た。これを次のステップで使用した。

30

【0956】

ステップ3: (R)-3-(4-フェノキシフェニル)-1-(ピペリジン-3-イル)-1H-ピラゾロ [3, 4-d] ピリミジン
【化714】



40

【0957】

tert-ブチル (3R)-3-[3-(4-フェノキシフェニル)ピラゾロ [3, 4

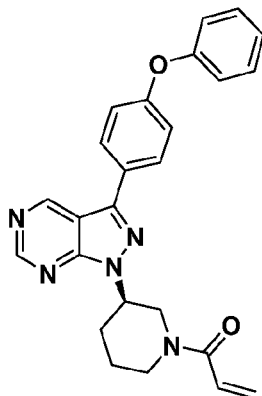
50

－d] ピリミジン－1－イル] ピペリジン－1－カルボキシレート（60 mg、0.13 mmol）をDCM（2 mL）中に溶解した。TFA（0.29 mL、3.82 mmol）を添加し、混合物を室温で30分間攪拌した。溶媒を蒸発させ、粗残渣を次のステップで精製せずに使用した。100%収率を想定した。

【0958】

ステップ4：（R）－1－（3－（3－（4－フェノキシフェニル）－1H－ピラゾロ[3, 4－d] ピリミジン－1－イル）ピペリジン－1－イル）プロパー2－エン－1－オン

【化715】



10

【0959】

3－（4－フェノキシフェニル）－1－〔（3R）－3－ピペリジル〕ピラゾロ[3, 4－d]ピリミジン（47 mg、0.13 mmol）をTHF（3 mL）、及び K_2CO_3 （2 mL）の飽和水性溶液中に溶解した。塩化アクリロイル（10.28 μ L、0.1300 mmol）を添加し、混合物を室温で15分間攪拌した。有機層を蒸発させ、粗残渣を順相クロマトグラフィー（10～80%のヘキサン：EtOAc）で精製し、表題の化合物（20 mg、0.05 mmol、36%収率）を得た。MS： m/z 426.2 $[M+H]^+$ 。

【0960】

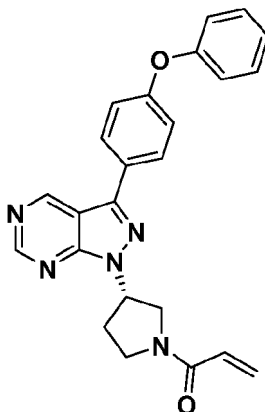
以下の化合物は、スキーム1：方法Aによって調製した。

30

【0961】

実施例2：（S）－1－（3－（3－（4－フェノキシフェニル）－1H－ピラゾロ[3, 4－d]ピリミジン－1－イル）ピペリジン－1－イル）プロパー2－エン－1－オン；（化合物A12）：

【化716】



40

MS： m/z 412.3 $[M+H]^+$ 。

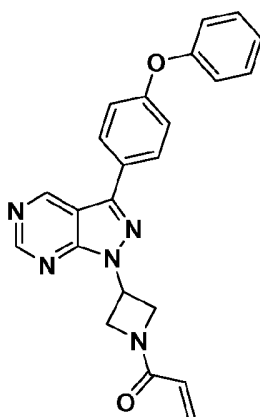
【0962】

実施例3：1－（3－（3－（4－フェノキシフェニル）－1H－ピラゾロ[3, 4－d]ピリミジン－1－イル）アゼチジン－1－イル）プロパー2－エン－1－オン；（化

50

合物 A 1 3) :

【化 7 1 7】



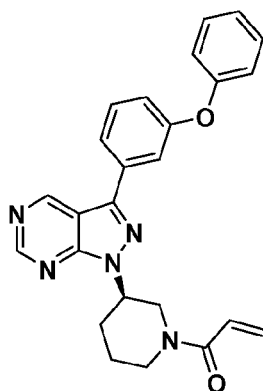
10

MS : m/z 398.1 $[M+H]^+$ 。

【0963】

実施例 6 : (R) - 1 - (3 - (3 - (3 - フェノキシフェニル) - 1H - ピラゾロ [3, 4 - d] ピリミジン - 1 - イル) ピペリジン - 1 - イル) プロパー 2 - エン - 1 - オン ; (化合物 A 1) :

【化 7 1 8】



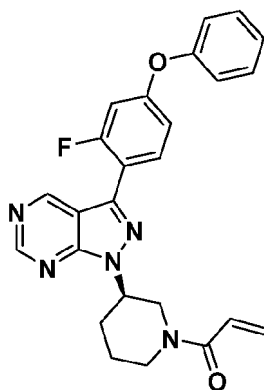
20

MS : m/z 425.6 $[M+H]^+$ 。

【0964】

実施例 7 : (R) - 1 - (3 - (3 - (2 - フルオロ - 4 - フェノキシフェニル) - 1H - ピラゾロ [3, 4 - d] ピリミジン - 1 - イル) ピペリジン - 1 - イル) プロパー 2 - エン - 1 - オン ; (化合物 A 2) :

【化 7 1 9】



40

MS : m/z 443.7 $[M+H]^+$ 。

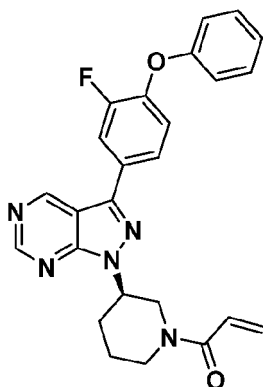
【0965】

実施例 8 : (R) - 1 - (3 - (3 - (3 - フルオロ - 4 - フェノキシフェニル) - 1H -

50

H-ピラゾロ [3, 4-d] ピリミジン-1-イル) ピペリジン-1-イル) プロパー 2-エン-1-オン; (化合物 A 3):

【化 7 2 0】



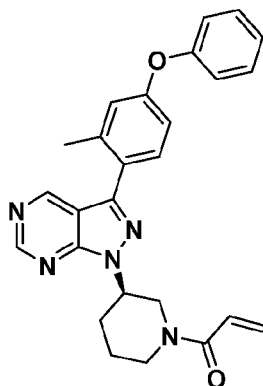
10

MS: m/z 443.6 [M+H]⁺.

【0966】

実施例 9: (R)-1-((3-((3-(2-methyl-4-phenoxyphenyl)-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-1-yl)piperidin-1-yl)prop-2-en-1-yl)-4-fluorophenyl)-4-phenoxyphenyl; (化合物 A 4):

【化 7 2 1】



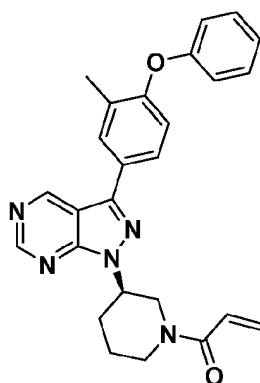
20

MS: m/z 439.6 [M+H]⁺.

【0967】

実施例 10: (R)-1-((3-((3-(3-methyl-4-phenoxyphenyl)-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-1-yl)piperidin-1-yl)prop-2-en-1-yl)-4-fluorophenyl)-4-phenoxyphenyl; (化合物 A 5):

【化 7 2 2】



40

MS: m/z 440.0 [M+H]⁺.

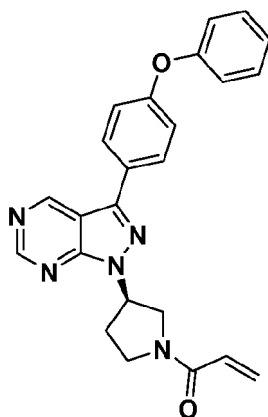
【0968】

実施例 11: (R)-1-((3-((3-(4-phenoxyphenyl)-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-1-yl)piperidin-1-yl)prop-2-en-1-yl)-4-fluorophenyl)-4-phenoxyphenyl; (化合物 A 6):

50

オン；（化合物 A 6）

【化 7 2 3】



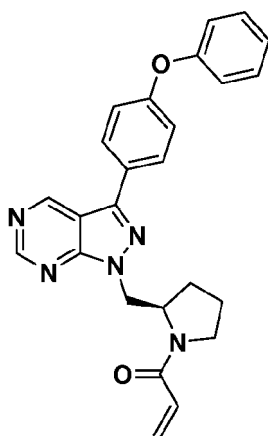
10

MS : m/z 412.1 $[M+H]^+$ 。

【0969】

実施例 12 : (R)-1-((2-((3-(4-phenoxyphenyl)-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-1-yl)methyl)pyrrolidin-1-yl)propyl)pyrrolidine-2-one；（化合物 A 7）：

【化 7 2 4】



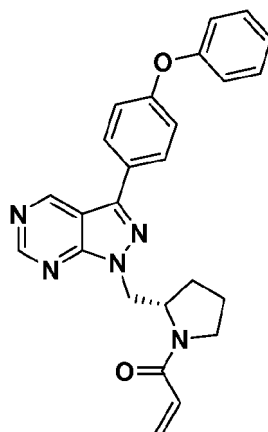
20

MS : m/z 425.9 $[M+H]^+$ 。

【0970】

実施例 13 : (S)-1-((2-((3-(4-phenoxyphenyl)-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-1-yl)methyl)pyrrolidin-1-yl)propyl)pyrrolidine-2-one；（化合物 A 8）：

【化 7 2 5】



40

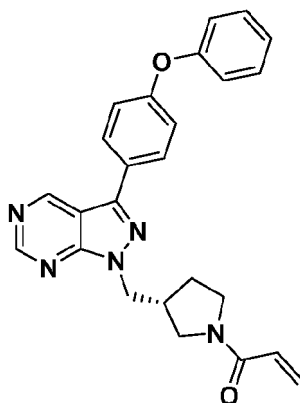
MS : m/z 426.1 $[M+H]^+$ 。

50

【0971】

実施例14：(R)-1-(3-((3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)ピロリジン-1-イル)プロパン-2-オン；(化合物A14)：

【化726】



10

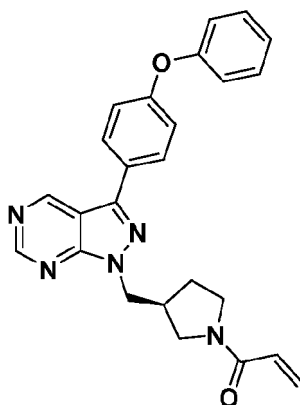
MS: m/z 425.9 $[M+H]^+$ 。

【0972】

実施例15：(S)-1-(3-((3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)ピロリジン-1-イル)プロパン-2-オン；(化合物A15)：

20

【化727】



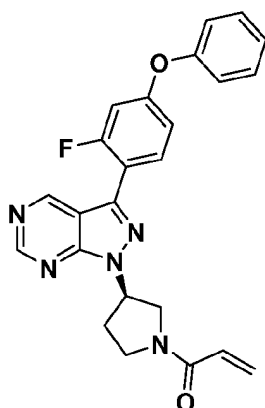
30

MS: m/z 425.9 $[M+H]^+$ 。

【0973】

実施例16：(R)-1-(3-((3-(2-フルオロ-4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)ピロリジン-1-イル)プロパン-2-オン；(化合物A17)：

【化728】



40

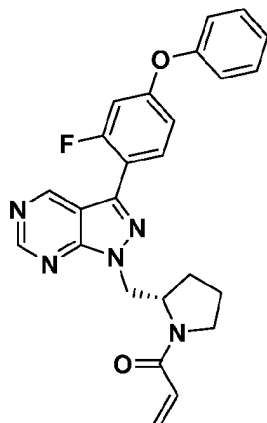
50

MS : m/z 430.1 $[M+H]^+$.

【0974】

実施例17 : (S)-1-(2-((3-(2-フルオロ-4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)ピロリジン-1-イル)プロパン-2-オン ; (化合物A19) :

【化729】



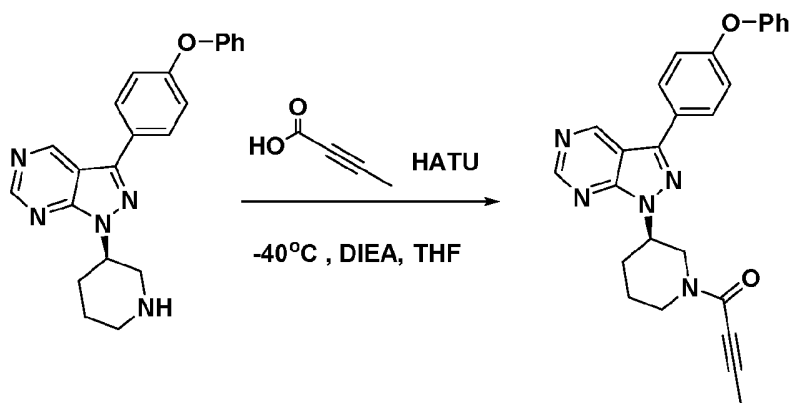
10

MS : m/z 443.9 $[M+H]^+$.

【0975】

スキーム2 : 方法B

【化730】

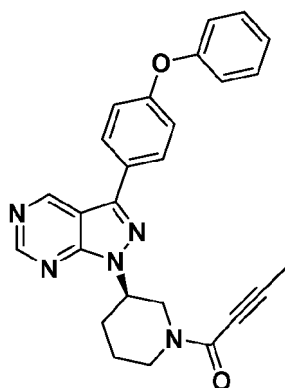


30

【0976】

実施例18 : (R)-1-(3-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)ピペリジン-1-イル)ブタン-2-オン ; (化合物A16) :

【化731】



40

【0977】

50

ステップ1：(R)-1-(3-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)ピペリジン-1-イル)ブター2-イン-1-オン

【0978】

DMF (5 mL) 中の (R)-3-(4-フェノキシフェニル)-1-(ピペリジン-3-イル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン (180 mg、0.44 mmol)、ブター2-イン酸 (44 mg、0.52 mmol)、及び HATU (201 mg、0.53 mmol) の溶液に、DIPEA (129 mg、1 mmol) を添加した。得られた混合物を室温で2時間攪拌した後、水 (10 mL) で急冷した。反応物を EtOAc (25 mL×2) で抽出し、生理食塩水 (25 mL×3) で洗浄し、Na₂SO₄ で乾燥させて、ろ過し、濃縮して、粗生成物を得た。順相クロマトグラフィー (DCM:MeOH = 0~10%) によるさらなる精製で、表題の化合物 (110 mg、57%) を黄色固体として得た。MS: m/z 438.1 [M+H]⁺。

10

【0979】

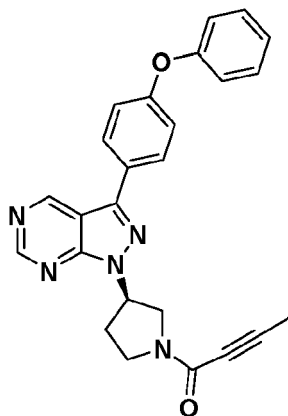
以下の化合物は、スキーム2：方法Bによって調製した。

【0980】

実施例19：(R)-1-(3-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)ピロリジン-1-イル)ブター2-イン-1-オン；(化合物A18)：

【化732】

20



30

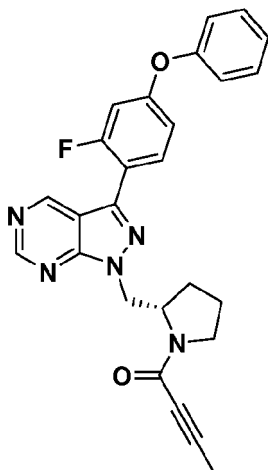
MS: m/z 424.1 [M+H]⁺。

【0981】

実施例20：(S)-1-(2-(3-(2-フルオロ-4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)ピロリジン-1-イル)ブター2-イン-1-オン；(化合物A20)：

【化733】

40



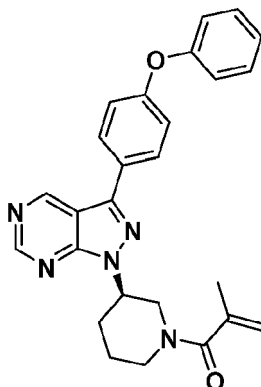
50

MS : m/z 456.2 $[M+H]^+$.

【0982】

実施例 21 : (R)-2-メチル-1-(3-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)ピペリジン-1-イル)プロパン-2-エン-1-オン ; (化合物 A21) :

【化734】



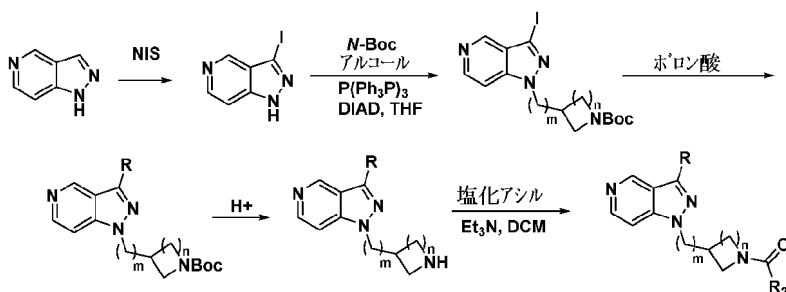
10

MS : m/z 440.1 $[M+H]^+$.

【0983】

スキーム 3 : 方法 C

【化735】

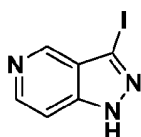


20

【0984】

ステップ 1 : 3-ヨード-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン

【化736】



30

【0985】

1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン (833 mg, 7 mmol) を DMF (10 mL) 中に溶解し、NIS (1.89 g, 8.4 mmol) を添加した。反応混合物を 80 °C で 3 時間攪拌した後、H₂O で急冷し、EtOAc で抽出した。有機相を生理食塩水で洗浄し、無水 Na₂SO₄ で乾燥させて、ろ過した後、濃縮して、3-ヨード-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン (1.4 g) を得た。粗材料をさらに精製することなく使用した。

40

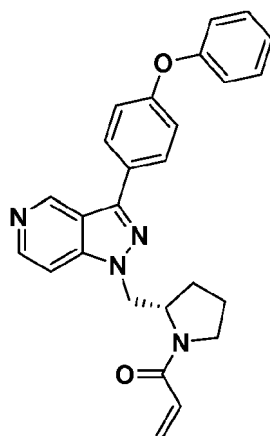
【0986】

以下の化合物は、スキーム 1 : 方法 A と同様の方法で調製した。

【0987】

実施例 22 : (S)-1-(2-((3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-1-イル)メチル)ピロリジン-1-イル)プロパン-2-エン-1-オン ; (化合物 A22) :

【化 7 3 7】



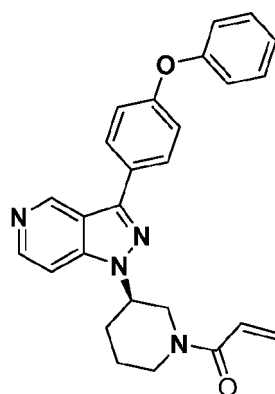
10

MS : m/z 424.9 $[M+H]^+$ 。

【0988】

実施例 23 : (R)-1-(3-(3-(4-phenoxyphenyl)-1H-pyrazolo[4,3-c]pyridin-1-yl)piperidin-1-yl)propan-2-one ; (化合物 A 23) :

【化 7 3 8】



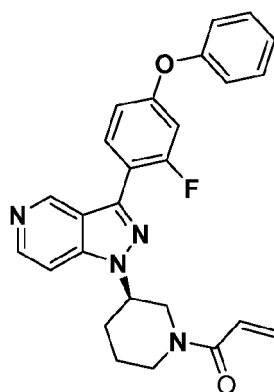
20

MS : m/z 425.2 $[M+H]^+$ 。

【0989】

実施例 24 : (R)-1-(3-(3-(2-fluoro-4-phenoxyphenyl)-1H-pyrazolo[4,3-c]pyridin-1-yl)piperidin-1-yl)propan-2-one ; (化合物 A 24) :

【化 7 3 9】



40

MS : m/z 443.2 $[M+H]^+$ 。

【0990】

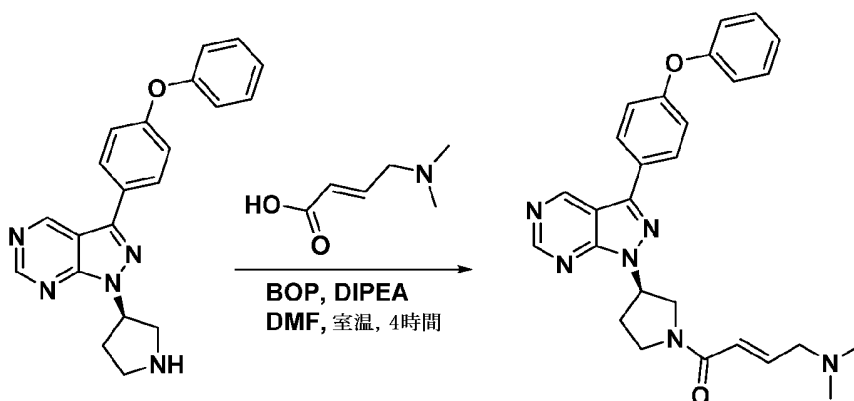
スキーム 4 : 方法 D

50

【0991】

実施例25：(R, E)-4-(ジメチルアミノ)-1-(3-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-1-イル)ピロリジン-1-イル)ブター-2-エン-1-オン；(化合物A25)

【化740】



10

【0992】

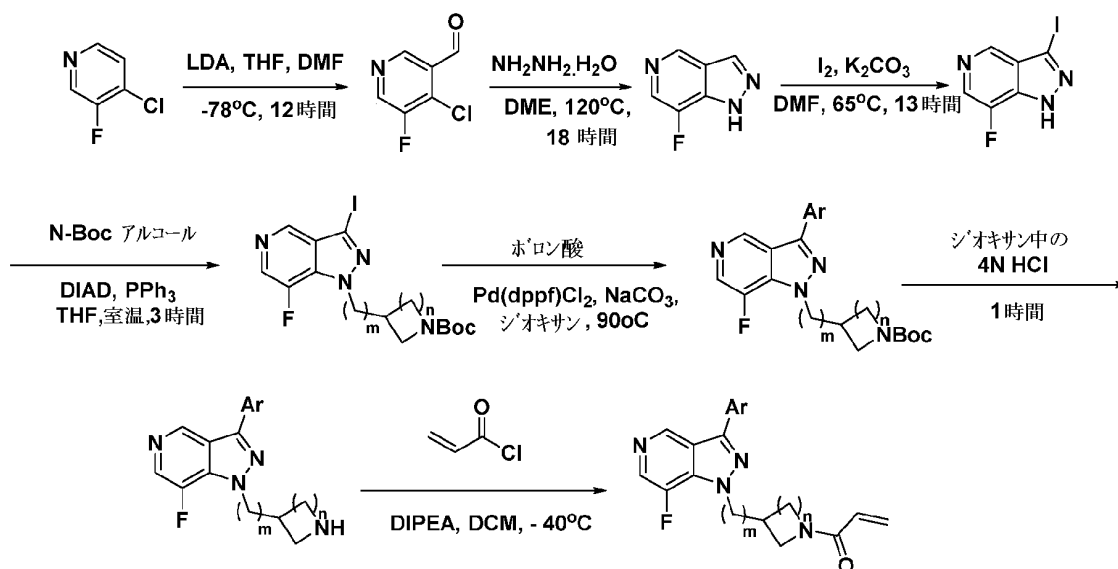
ステップ1：DIPEA (144 mg、1.12 mmol) を、DMF (6 mL) 中の (R)-3-(4-フェノキシフェニル)-1-(ピロリジン-3-イル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン (220 mg、0.56 mmol)、(E)-4-(ジメチルアミノ)ブター-2-エン酸 (87 mg、0.67 mmol)、及びBOP (296 mg、0.67 mmol) 攪拌溶液に0℃で添加した。混合物を室温で4時間攪拌した後、生理食塩水 (2×25 mL) で洗浄し、Na₂SO₄ で乾燥させた後、濃縮した。粗残渣をMeOH/DCMによるフラッシュカラムクロマトグラフィーで精製し、(R, E)-4-(ジメチルアミノ)-1-(3-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-1-イル)ピロリジン-1-イル)ブター-2-エン-1-オン (51 mg、16%) を白色固体として得た。MS：m/z 469.2 [M+H]⁺。

20

【0993】

スキーム5：方法E

【化741】

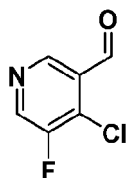


40

【0994】

ステップ1：4-クロロ-5-フルオロニコチンアルデヒド

【化 7 4 2】



【0 9 9 5】

アルゴン下で -78°C のTHF (20 mL) 中のLDA (THF中で2.0 M、13.7 mL、27.4 mmol) の希釈溶液に、無水THF (5 mL) 中の4-クロロ-3-フルオロピリジン (3 g、22.8 mmol) を添加した。得られた混合物を -78°C で2.5時間攪拌した後、DMF (2.028 g、27.4 mmol) を添加し、反応物を室温に温め、飽和 NH_4Cl で急冷し、EtOAc (3×100 mL) で抽出した。組み合わせた抽出物を無水 Na_2SO_4 で乾燥させて、ろ過し、濃縮した。残渣をコンビフラッシュ (0~30%、石油エーテル中でEtOAc) で精製し、4-クロロ-5-フルオロニコチンアルデヒド (460 mg、12%) をオフホワイト固体としてを得た。

10

【0 9 9 6】

ステップ2：7-フルオロ-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン

【化 7 4 3】



20

【0 9 9 7】

封管中で、DME (2.5 mL) 中の4-クロロ-5-フルオロニコチンアルデヒド (460 mg、2.9 mmol) の攪拌溶液に、ヒドラジン水和物 (0.577 g、11.532 mmol) を添加した。得られた混合物を 120°C で一晩攪拌した後、水で希釈し、EtOAcで抽出した。有機相を生理食塩水で洗浄し、無水 Na_2SO_4 で乾燥させて、ろ過し、濃縮して、7-フルオロ-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン (334 mg、85%) を黄色固体として得た。

【0 9 9 8】

ステップ3：7-フルオロ-3-ヨード-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン

【化 7 4 4】



30

【0 9 9 9】

DMF (4 mL) 中の7-フルオロ-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン (334 mg、2.4 mmol) の攪拌溶液に、 I_2 (512 g、4.9 mmol) 及び K_2CO_3 (678 mg、4.9 mmol) を添加した。得られた混合物を 65°C で13時間攪拌した後、水で希釈し、EtOAcで抽出した。有機相を生理食塩水で洗浄し、無水 Na_2SO_4 で乾燥させて、ろ過し、濃縮して、7-フルオロ-3-ヨード-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン (400 mg、62%) を黄色固体として得た。

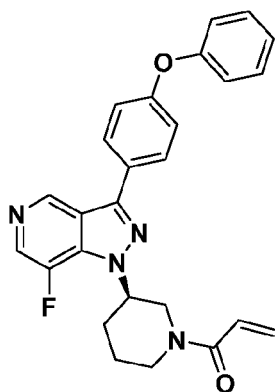
40

以下の化合物は、スキーム1：方法Aと同様の方法で調製した。

【1 0 0 0】

実施例26：(R)-1-(3-(7-フルオロ-3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン-1-イル) ピペリジン-1-イル) プロパ-2-エン-1-オン；(化合物A26)：

【化 7 4 5】



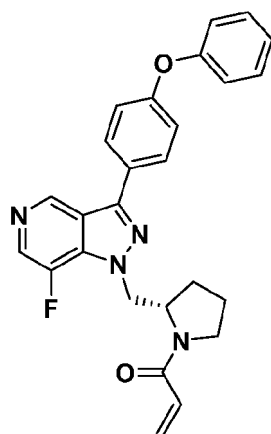
10

MS : m/z 443.1 [M+H]⁺.

【1001】

実施例 27 : (S)-1-(2-((7-フルオロ-3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-1-イル)メチル)ピロリジン-1-イル)プロパン-2-エン-1-オン ; (化合物 A 27) :

【化 7 4 6】



20

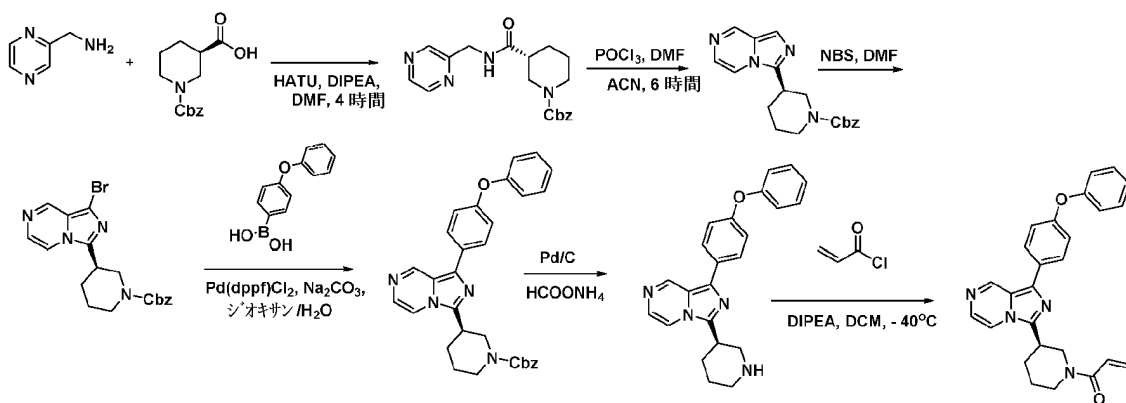
MS : m/z 443.1 [M+H]⁺.

30

【1002】

スキーム 6 : 方法 F

【化 7 4 7】

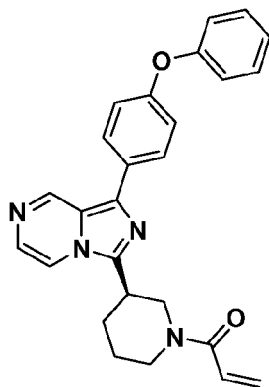


40

【1003】

実施例 28 : (R)-1-(3-(1-(4-フェノキシフェニル)イミダゾ[1,5-a]ピラジン-3-イル)ピペリジン-1-イル)プロパン-2-エン-1-オン ; (化合物 A 28) :

【化 7 4 8】

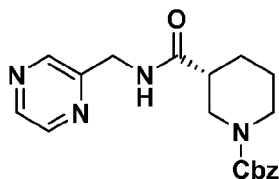


10

【1 0 0 4】

ステップ1：ベンジル（R）－3－（（ピラジン－2－イルメチル）カルバモイル）ピペリジン－1－カルボキシレート

【化 7 4 9】



20

【1 0 0 5】

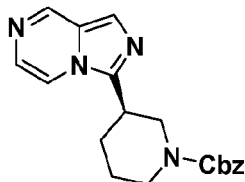
DMF（10 mL）中のピラジン－2－イルメタンアミン（500 mg、4.58 mmol）、（R）－1－（（ベンジルオキシ）カルボニル）ピペリジン－3－カルボン酸（1.2 g、4.6 mmol）、及びHATU（2.01 g、5.5 mmol）の混合物に、DIPEA（1.2 g、9.2 mmol）を添加した。混合物を室温で4時間攪拌した後、水（40 mL）で希釈し、EtOAc（30 mL×3）で抽出した。組み合わせた有機層を生理食塩水（50 mL）で洗浄し、無水Na₂SO₄で乾燥させて、ろ過し、濃縮して、ベンジル（R）－3－（（ピラジン－2－イルメチル）カルバモイル）ピペリジン－1－カルボキシレート（2.1 g、粗）を得た。

30

【1 0 0 6】

ステップ2：ベンジル（R）－3－（イミダゾ〔1，5－a〕ピラジン－3－イル）ピペリジン－1－カルボキシレート

【化 7 5 0】



【1 0 0 7】

ACN（40 mL）中の（R）－3－（（ピラジン－2－イルメチル）カルバモイル）ピペリジン－1－カルボキシレート（2.1 g、5.9 mmol）の溶液に、POCl₃（2 mL）及びDMF（2 mL）を0℃でゆっくり添加した。反応物を室温で2時間攪拌した後、0℃に冷却し、砕氷と水性NH₄OH（100 mL）の混合物にゆっくり注いだ。得られた混合物をEtOAc（80 mL×3）で抽出し、生理食塩水（100 mL）で洗浄し、無水Na₂SO₄で乾燥させて、ろ過し、濃縮して、ベンジル（R）－3－（イミダゾ〔1，5－a〕ピラジン－3－イル）ピペリジン－1－カルボキシレート（1.99 g、粗）を得た。

40

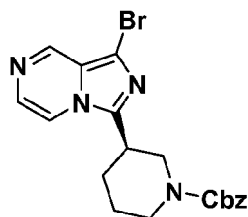
【1 0 0 8】

ステップ3：ベンジル（R）－3－（1－ブロモイミダゾ〔1，5－a〕ピラジン－3

50

－イル) ピペリジン－1－カルボキシレート

【化 7 5 1】



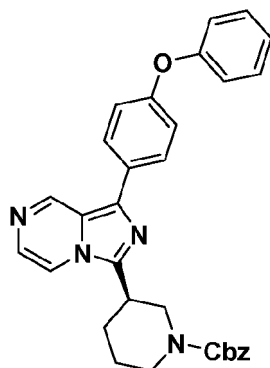
【1009】

ベンジル (R)－3－(イミダゾ [1, 5－a] ピラジン－3－イル) ピペリジン－1
－カルボキシレート (1. 99 g、5. 9 mmol) を DMF (12 mL) 中に溶解し、
0℃に冷却した。3 mL の DMF 中に溶解した NBS (1. 054 g、5. 92 mmol)
(10) をゆっくりを添加し、室温で1時間攪拌した。反応混合物を飽和 NaHCO₃ (50 mL)
で急冷し、EtOAc (50 mL×3) で抽出した。組み合わせた有機相を生理食塩
水 (80 mL) で洗浄し、無水 Na₂SO₄ で乾燥させて、ろ過し、濃縮して、ベンジル
(R)－3－(1－ブロモイミダゾ [1, 5－a] ピラジン－3－イル) ピペリジン－1
－カルボキシレート (2. 01 g、粗) を得た。

【1010】

ステップ4：ベンジル (R)－3－(1－(4－フェノキシフェニル) イミダゾ [1,
5－a] ピラジン－3－イル) ピペリジン－1－カルボキシレート

【化 7 5 2】



【1011】

Pd(dppf)Cl₂ (178 mmol、0. 243 mmol) を、ジオキサン (18
mL) / 水 (6 mL) 中のベンジル (R)－3－(1－ブロモイミダゾ [1, 5－a] ピ
ラジン－3－イル) ピペリジン－1－カルボキシレート (2. 01 g、4. 86 mmol)
(30)、(4－フェノキシフェニル) ボロン酸 (1. 25 g、5. 83 mmol)、及び Na
₂CO₃ (1. 03 g、9. 72 mmol) の脱ガス混合物に N₂ 雰囲気下で添加した。
混合物を 90℃で4時間攪拌し、LC/MSが反応の完了を示した後、溶媒を蒸発させ、
粗残渣を順相クロマトグラフィー (Hex: EtOAc = 0～80%) で精製し、ベンジ
ル (R)－3－(1－(4－フェノキシフェニル) イミダゾ [1, 5－a] ピラジン－3
－イル) ピペリジン－1－カルボキシレート (1. 136 g、47%) を得た。

【1012】

ステップ5：(R)－1－(4－フェノキシフェニル)－3－(ピペリジン－3－イル)
イミダゾ [1, 5－a] ピラジン

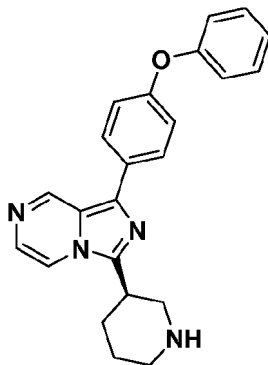
10

20

30

40

【化 7 5 3】



10

【1013】

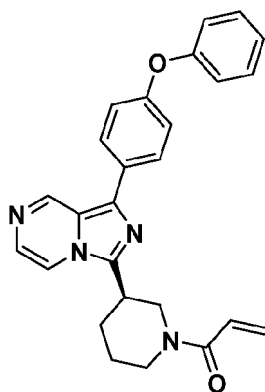
メタノール（14 mL）中のベンジル（R）-3-（1-（4-フェノキシフェニル）イミダゾ〔1, 5-a〕ピラジン-3-イル）ピペリジン-1-カルボキシレート（504 mg、1 mmol）の攪拌溶液に、Pd/C（100 mg）及びギ酸アンモニウム（630 g、10 mmol）を添加した。溶液を60℃で3時間攪拌し、ろ過し、ろ液を濃縮した後、水（30 mL）を添加し、EtOAcで抽出した。有機層を無水Na₂SO₄で乾燥させて、ろ過し、濃縮して、（R）-1-（4-フェノキシフェニル）-3-（ピペリジン-3-イル）イミダゾ〔1, 5-a〕ピラジンを黄色固体（330 mg、粗）として得た。

20

【1014】

ステップ6：（R）-1-（3-（1-（4-フェノキシフェニル）イミダゾ〔1, 5-a〕ピラジン-3-イル）ピペリジン-1-イル）プロパー-2-エン-1-オン

【化 7 5 4】



30

【1015】

-40℃でDCM（10 mL）中の黄色固体として（R）-1-（4-フェノキシフェニル）-3-（ピペリジン-3-イル）イミダゾ〔1, 5-a〕ピラジン（190 mg、0.514 mmol）、及びDIPEA（133 mg、1.028 mmol）の溶液に、塩化アクリロイル（46 mg、0.514 mmol）をゆっくり添加した。得られた混合物を-40℃で10分間攪拌した後、溶媒を蒸発させ、粗残渣を順相クロマトグラフィー（DCM：MeOH=0~10%）で精製し、（R）-1-（3-（1-（4-フェノキシフェニル）イミダゾ〔1, 5-a〕ピラジン-3-イル）ピペリジン-1-イル）プロパー-2-エン-1-オン（15 mg、5%）を白色固体として得た。MS：m/z 424.9 [M+H]⁺。

40

【1016】

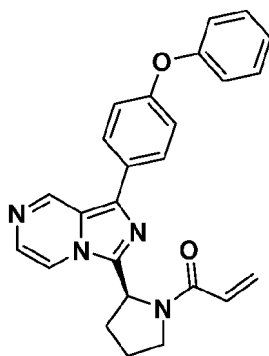
以下の化合物は、スキーム6：方法Fによって調製した。

【1017】

実施例29：（S）-1-（2-（1-（4-フェノキシフェニル）イミダゾ〔1, 5-a〕ピラジン-3-イル）ピロリジン-1-イル）プロパー-2-エン-1-オン；（化

50

合物 A 29) :
【化 7 5 5】



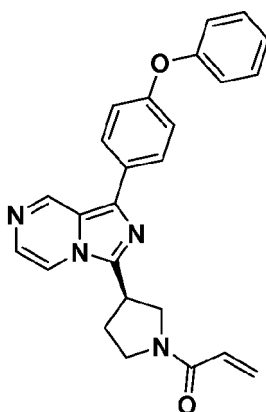
10

MS : m/z 411.1 $[M+H]^+$ 。

【1018】

実施例 30 : (R)-1-(3-(1-(4-phenoxyphenyl)imidazo[1,5-a]pyrazin-3-yl)pyrrolidin-1-yl)prop-2-en-1-one ; (化合物 A 30) :

【化 7 5 6】



20

MS : m/z 411.2 $[M+H]^+$ 。

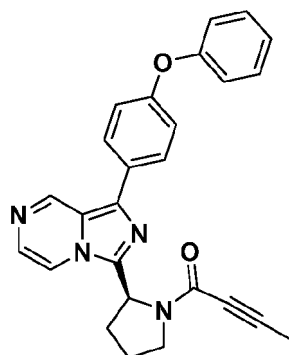
30

以下の化合物は、スキーム 6 : 方法 F、及びスキーム 2 : 方法 B によって調製した。

【1019】

実施例 31 : (S)-1-(2-(1-(4-phenoxyphenyl)imidazo[1,5-a]pyrazin-3-yl)pyrrolidin-1-yl)but-2-yn-1-one ; (化合物 A 31) :

【化 7 5 7】



40

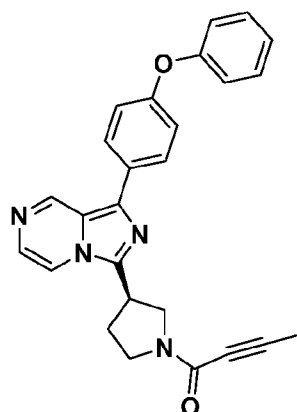
MS : m/z 422.9 $[M+H]^+$ 。

【1020】

実施例 32 : (R)-1-(3-(1-(4-phenoxyphenyl)imidazo[1,5-a]pyrazin-3-yl)pyrrolidin-1-yl)but-2-yn-1-one ; (化合物 A 32) :

50

物 A 3 2) :
【化 7 5 8】



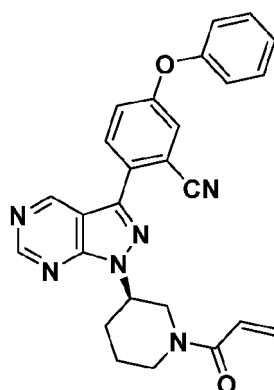
10

MS : m/z 423.1 [M+H]⁺.

【1021】

実施例 33 : (R) - 2 - (1 - (1 - アクリロイルピペリジン - 3 - イル) - 1 H - ピラゾロ [3, 4 - d] ピリミジン - 3 - イル) - 5 - フェノキシベンゾニトリル ; (化合物 A 3 3) :

【化 7 5 9】

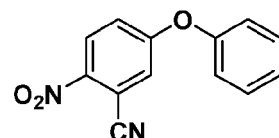


20

【1022】

ステップ 1 : 2 - ニトロ - 5 - フェノキシベンゾニトリル

【化 7 6 0】



30

【1023】

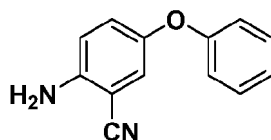
THF (3.0 mL) 中の NaH (2.6 g、65.7 mmol) のスラリーに、5-フルオロ-2-ニトロベンゾニトリル (9.1 g、54.8 mmol)、及びフェノール (5.16 g、54.8 mmol) を添加した。反応バイアルに蓋をして、反応混合物を室温で 50 分間攪拌した。水 (50 mL) 及び EtOAc (150 mL) を添加した。層を分離し、水性層を EtOAc (2 × 150 mL) で抽出した。組み合わせた有機層を生理食塩水 (3 mL) で洗浄した後、50 °C にて窒素気流下で濃縮し、2-ニトロ-5-フェノキシベンゾニトリル (10.0 g、76%) を黄色固体として得た。

40

【1024】

ステップ 2 : 2 - アミノ - 5 - フェノキシベンゾニトリル

【化 7 6 1】



【1 0 2 5】

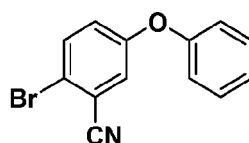
AcOH (150 mL) 中の 2-ニトロ-5-フェノキシベンゾニトリル (10.0 g、41.7 mmol) 及び Fe 粉末 (9.32 g、166.8 mmol) の混合物に、EtOH (150 mL) を 50℃ に 2 時間加熱し、反応混合物を室温に冷却し、EA (250 mL) で希釈し、セライトを介してろ過した後、ろ液を飽和 NaHCO₃ (250 mL × 3) で洗浄した。有機層を Na₂SO₄ で乾燥させて、ろ過し、濃縮して、粗生成物を得た。カラムクロマトグラフィー (SiO₂、200~300 m、PE/EtOAc = 5/1 による溶出) によるさらなる精製で、2-アミノ-5-フェノキシベンゾニトリル (8.1 g、93%) を黄色固体として得た。

10

【1 0 2 6】

ステップ 3: 2-ブロモ-5-フェノキシベンゾニトリル

【化 7 6 2】



20

【1 0 2 7】

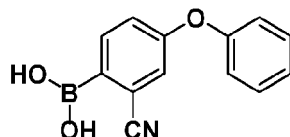
0℃ で CH₃CN (50.0 mL) 中の CuBr₂ (10.2 g、45.7 mmol) 及び tert-ブチルニトリル (6.8 mL、57.4 mmol) のスラリーに、CH₃CN (100 mL) 中の 2-アミノ-5-(フェニルオキシ)ベンゾニトリル (8.0 g、38.1 mmol) の溶液を添加した。氷浴を除去し、反応物を室温で 10 分間攪拌した。6 M の水性 HCl (50 mL)、生理食塩水 (50 mL)、及び EtOAc (100 mL) を添加した。層を分離し、水性層を EtOAc (200 × 2 mL) で抽出した。組み合わせた有機層を 6 M の水性 HCl (50 mL) 及び生理食塩水 (2 mL) で洗浄し、濃縮して、粗生成物を得た。フラッシュカラムクロマトグラフィー (0~20% の EtOAc/ヘキサン) を介したさらなる精製により、2-ブロモ-5-フェノキシベンゾニトリル (4.5 g、42%) を黄色固体として得た。

30

【1 0 2 8】

ステップ 4: (2-シアノ-4-フェノキシフェニル) ボロン酸

【化 7 6 3】



【1 0 2 9】

2-ブロモ-5-フルオロベンゾニトリル (2.0 g、7.4 mmol) 及びホウ酸トリイソプロピル (2.4 mL、11.0 mmol) を、トルエン (48 mL)、及びテトラヒドロフラン (12 mL) の混合物中に溶解し、溶液をドライアイス/アセトン浴中で冷却した。ヘキサン中の n-BuLi の溶液 (2.5 M、4.5 mL、11.0 mmol) を 1 時間かけて滴下して添加した後、反応物を室温に温めて、18 時間かけて攪拌した。混合物を氷浴で冷却し、pH が 1 に到達するまで 2 N の水性 HCl 溶液で処理し、室温に温めた時点で、層を分離し、水性層を EtOAc で 2 回抽出した。組み合わせた有機層を水で 2 回、飽和 NaCl で 1 回洗浄し、MgSO₄ で乾燥させて、濃縮し、(2-シアノ-4-フェノキシフェニル) ボロン酸 (1.1 g、62%) を得た。

40

【1 0 3 0】

50

実施例 33 は、スキーム 1：方法 A と同様の方法で提供した。MS：m/z 451.1 [M+H]⁺。

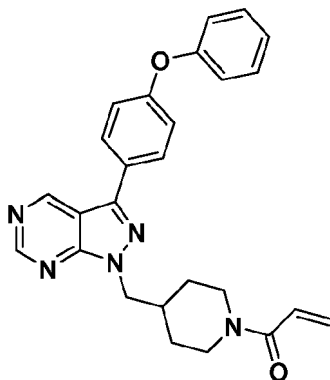
【1031】

以下の化合物は、スキーム 1：方法 A によって調製した。

【1032】

実施例 34：1-（4-（（3-（4-フェノキシフェニル）-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル）メチル）ピペリジン-1-イル）プロパー-2-エン-1-オン；（化合物 A 34）：

【化 764】



10

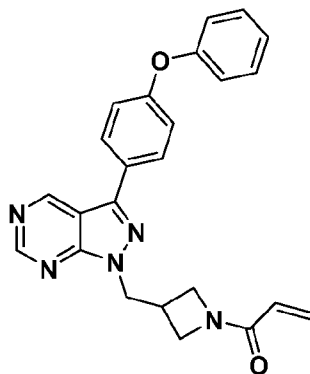
MS：m/z 440.0 [M+H]⁺。

20

【1033】

実施例 35：1-（3-（（3-（4-フェノキシフェニル）-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル）メチル）アゼチジン-1-イル）プロパー-2-エン-1-オン；（化合物 A 35）：

【化 765】



30

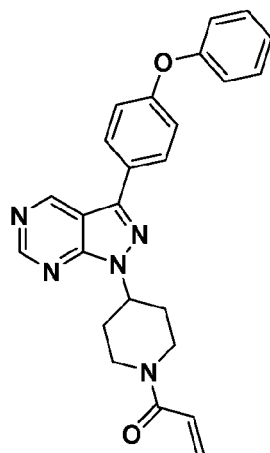
MS：m/z 412.2 [M+H]⁺。

【1034】

実施例 36：1-（4-（3-（4-フェノキシフェニル）-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル）ピペリジン-1-イル）プロパー-2-エン-1-オン；（化合物 A 36）：

40

【化 7 6 6】



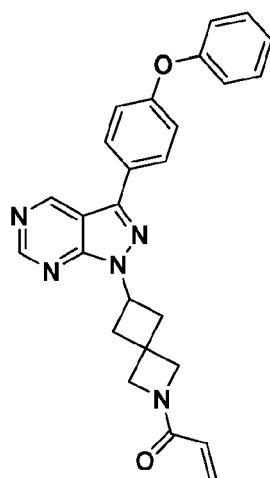
10

MS : m/z 426.2 [M+H]⁺。

【1035】

実施例 37 : 1- (6- (3- (4-フェノキシフェニル) -1H-ピラゾロ [3, 4-d] ピリミジン-1-イル) -2-アザスピロ [3. 3] ヘプタン-2-イル) プロパ-2-エン-1-オン ; (化合物 A 37) :

【化 7 6 7】



20

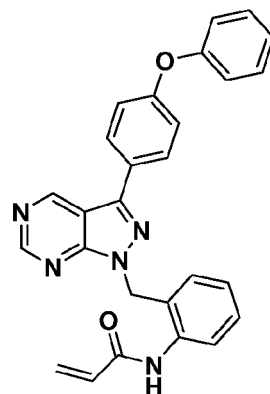
30

MS : m/z 438.1 [M+H]⁺。

【1036】

実施例 38 : N- (2- ((3- (4-フェノキシフェニル) -1H-ピラゾロ [3, 4-d] ピリミジン-1-イル) メチル) フェニル) アクリルアミド ; (化合物 A 38) :

【化 7 6 8】



40

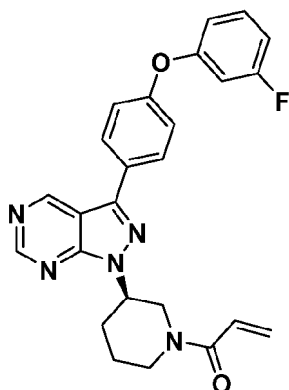
MS : m/z 448.1 [M+H]⁺。

50

【1037】

実施例39：(R)-1-(3-(3-(4-(3-フルオロフェノキシ)フェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)ピペリジン-1-イル)プロパン-2-エン-1-オン；(化合物A39)：

【化769】



10

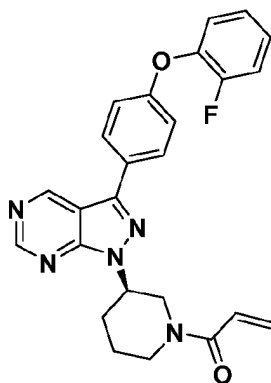
MS: m/z 444.1 $[M+H]^+$.

【1038】

実施例40：(R)-1-(3-(3-(4-(2-フルオロフェノキシ)フェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)ピペリジン-1-イル)プロパン-2-エン-1-オン；(化合物A40)：

20

【化770】



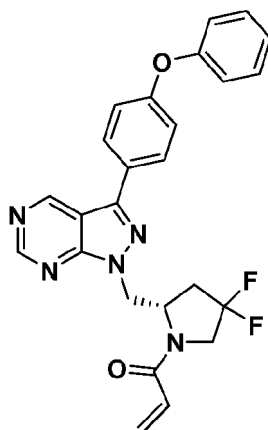
30

MS: m/z 444.2 $[M+H]^+$.

【1039】

実施例41：(S)-1-(4,4-ジフルオロ-2-((3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)ピロリジン-1-イル)プロパン-2-エン-1-オン；(化合物A41)：

【化771】



40

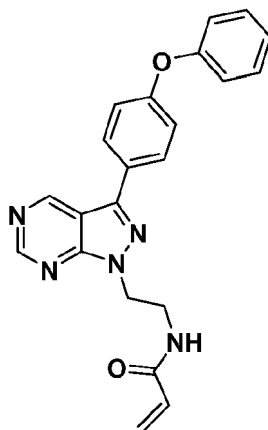
50

MS : m/z 462.3 $[M+H]^+$.

【1040】

実施例42 : N-(2-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)エチル)アクリルアミド ; (化合物A42) :

【化772】



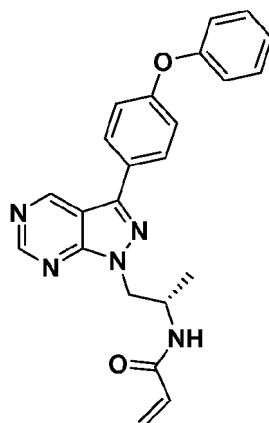
10

MS : m/z 396.0 $[M+H]^+$.

【1041】

実施例43 : (S)-N-(1-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)プロパン-2-イル)アクリルアミド ; (化合物A43) :

【化773】



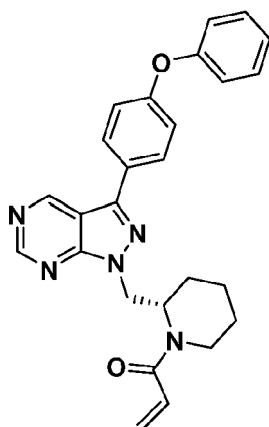
30

MS : m/z 400.0 $[M+H]^+$.

【1042】

実施例44 : (S)-1-(2-((3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)ピペリジン-1-イル)プロパン-2-エノール ; (化合物A44) :

【化 7 7 4】



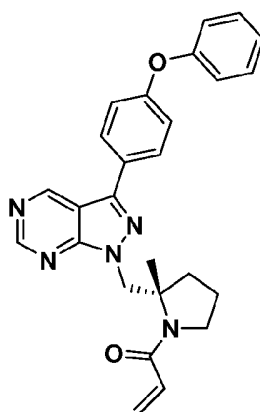
10

MS : m/z 439.9 $[M+H]^+$ 。

【1043】

実施例 45 : (S)-1-((2-methyl-2-((3-(4-phenoxyphenyl)-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-1-yl)methyl)pyrrolidin-1-yl)propyl)propan-2-one ; (化合物 A 45) :

【化 7 7 5】



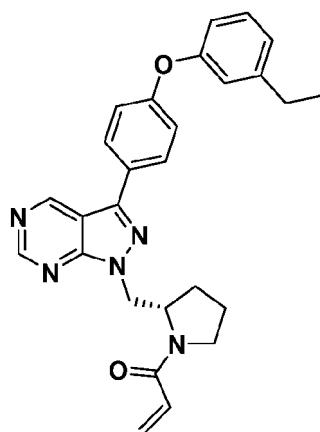
20

MS : m/z 440.3 $[M+H]^+$ 。

【1044】

実施例 46 : (S)-1-((2-((3-(4-(3-ethylphenoxy)phenyl)-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-1-yl)methyl)pyrrolidin-1-yl)propyl)propan-2-one ; (化合物 A 46) :

【化 7 7 6】



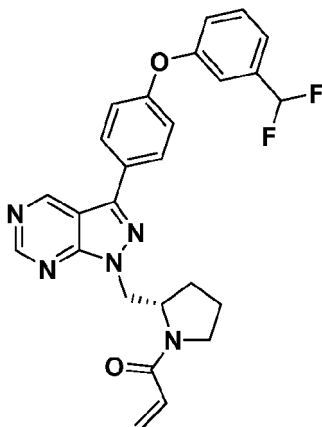
40

MS : m/z 453.8 $[M+H]^+$ 。

【1045】

50

実施例 47：(S)-1-(2-((3-(4-(3-(ジフルオロメチル)フェノキシ)フェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)ピロリジン-1-イル)プロパン-2-エン-1-オン；(化合物 A 47)：
【化 777】



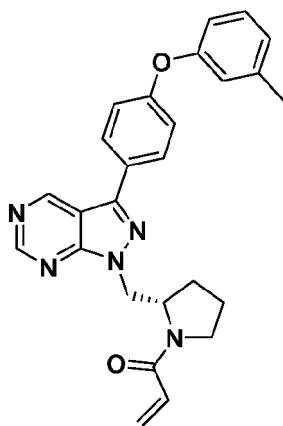
10

MS: m/z 476.3 $[M+H]^+$.

【1046】

実施例 48：(S)-1-(2-((3-(4-(4-methoxyphenyl)-1H-pyrazolo[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)ピロリジン-1-イル)プロパン-2-エン-1-オン；(化合物 A 48)：
【化 778】

20



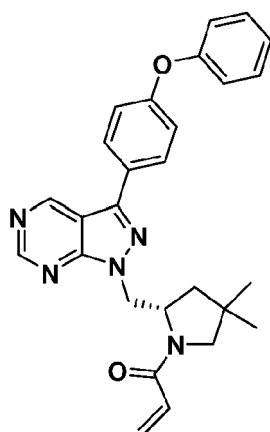
30

MS: m/z 440.0 $[M+H]^+$.

【1047】

実施例 49：(S)-1-(4,4-ジメチル-2-((3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)ピロリジン-1-イル)プロパン-2-エン-1-オン；(化合物 A 49)：

【化 7 7 9】



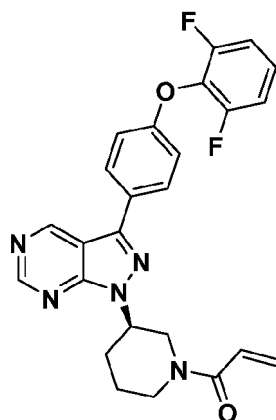
10

MS : m/z 454.2 $[M+H]^+$ 。

【1048】

実施例 50 : (R) - 1 - (3 - (3 - (4 - (2 , 6 - ジフルオロフェノキシ) フェニル) - 1 H - ピラゾロ [3 , 4 - d] ピリミジン - 1 - イル) ピペリジン - 1 - イル) プロパー 2 - エン - 1 - オン ; (化合物 A 50) :

【化 7 8 0】



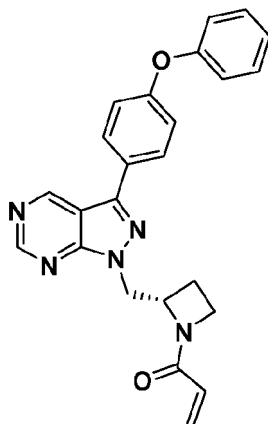
20

MS : m/z 462.1 $[M+H]^+$ 。

【1049】

実施例 51 : (S) - 1 - (2 - ((3 - (4 - フェノキシフェニル) - 1 H - ピラゾロ [3 , 4 - d] ピリミジン - 1 - イル) メチル) アゼチジン - 1 - イル) プロパー 2 - エン - 1 - オン ; (化合物 A 51) :

【化 7 8 1】



40

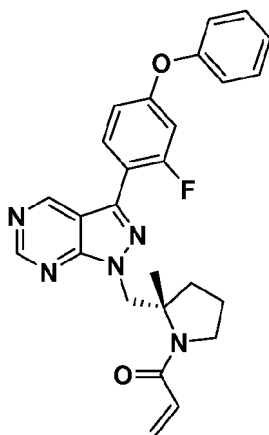
MS : m/z 412.2 $[M+H]^+$ 。

50

【1050】

実施例52：(S)-1-(2-((3-(2-フルオロ-4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)-2-メチルピロリジン-1-イル)プロパン-2-オン；(化合物A52)：

【化782】



10

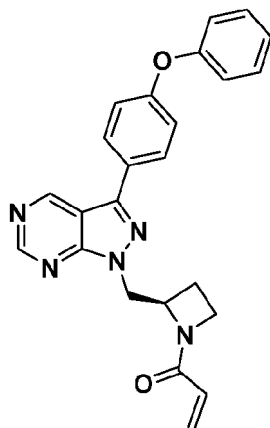
MS: m/z 458.1 $[M+H]^+$.

【1051】

実施例53：(R)-1-(2-((3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)アゼチジン-1-イル)プロパン-2-オン；(化合物A53)：

20

【化783】



30

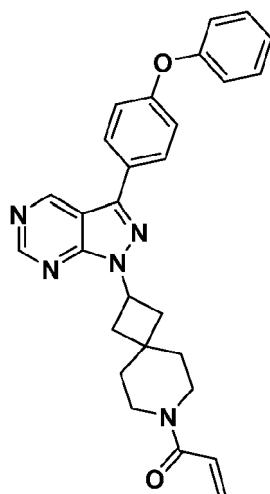
MS: m/z 411.9 $[M+H]^+$.

【1052】

実施例54：1-(2-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)-7-アザスピロ[3.5]ノナン-7-イル)プロパン-2-オン；(化合物A54)：

40

【化 7 8 4】



10

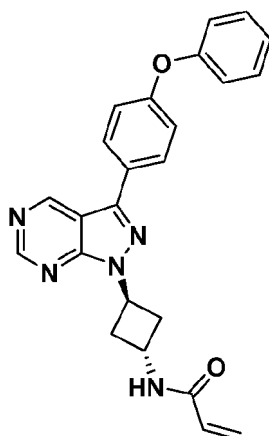
MS : m/z 466.3 $[M+H]^+$ 。

【1053】

実施例 55 : N-(1R,3R)-3-(3-(4-phenoxyphenyl)-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-1-yl)cyclobutylacrylamide ; (化合物 A 55) :

【化 7 8 5】

20



30

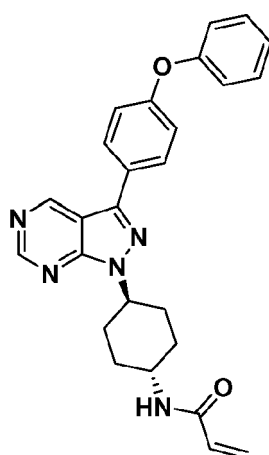
MS : m/z 411.8 $[M+H]^+$ 。

【1054】

実施例 56 : N-(1R,4R)-4-(3-(4-phenoxyphenyl)-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-1-yl)cyclohexylacrylamide ; (化合物 A 56) :

【化 7 8 6】

40



50

MS : m/z 440.3 $[M+H]^+$.

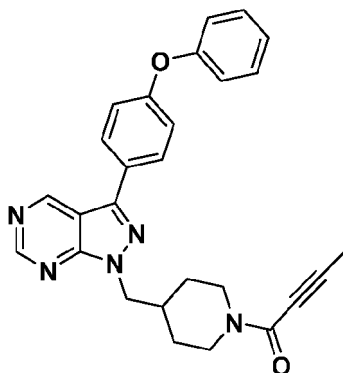
【1055】

以下の化合物は、スキーム1：方法A、及びスキーム2：方法Bによって調製した。

【1056】

実施例57：1-（4-（（3-（4-フェノキシフェニル）-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル）メチル）ピペリジン-1-イル）ブター-2-イン-1-オン；（化合物A57）：

【化787】



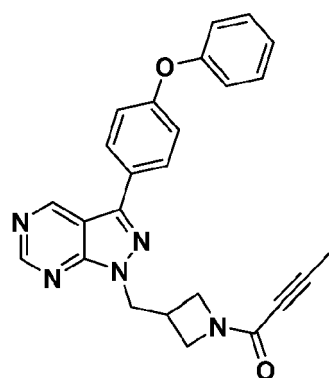
10

MS : m/z 451.9 $[M+H]^+$.

【1057】

実施例58：1-（3-（（3-（4-フェノキシフェニル）-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル）メチル）アゼチジン-1-イル）ブター-2-イン-1-オン；（化合物A58）：

【化788】



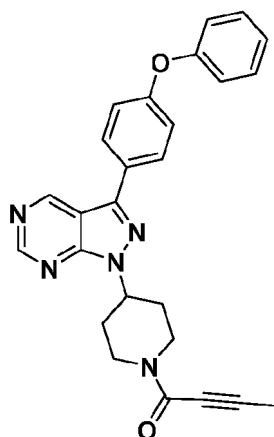
30

MS : m/z 424.1 $[M+H]^+$.

【1058】

実施例59：1-（4-（3-（4-フェノキシフェニル）-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル）ピペリジン-1-イル）ブター-2-イン-1-オン；（化合物A59）：

【化 7 8 9】



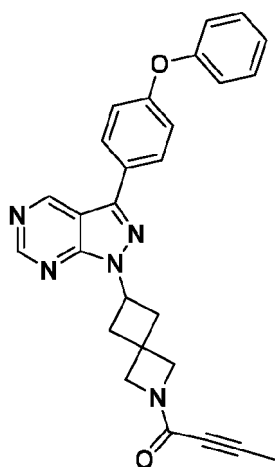
10

MS : m/z 438.1 $[M+H]^+$ 。

【1059】

実施例 60 : 1-(6-(3-(4-phenoxyphenyl)-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-1-yl)-2-azaspiro[3.3]heptan-2-yl)but-2-yn-1-one ; (化合物 A 60) :

【化 7 9 0】



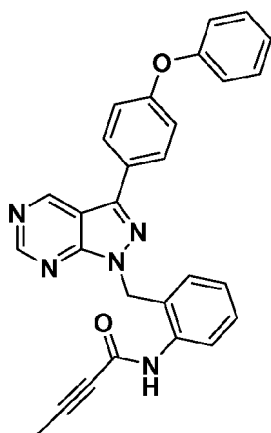
20

MS : m/z 450.1 $[M+H]^+$ 。

【1060】

実施例 61 : N-(2-((3-(4-phenoxyphenyl)-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-1-yl)methyl)phenyl)but-2-ynamide ; (化合物 A 61) :

【化 7 9 1】



40

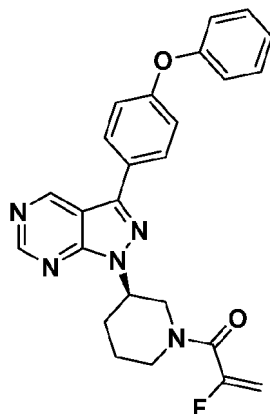
50

MS : m/z 460.3 [M+H]⁺.

【1061】

実施例62 : (R)-2-フルオロ-1-(3-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)ピペリジン-1-イル)プロパン-2-エン-1-オン ; (化合物A62) :

【化792】



10

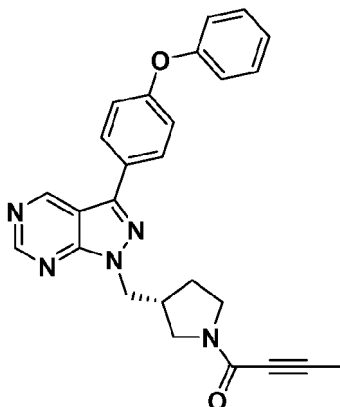
MS : m/z 444.3 [M+H]⁺.

【1062】

実施例63 : (R)-1-(3-(3-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)ピロリジン-1-イル)ブタン-2-オン-1-オン ; (化合物A63) :

20

【化793】



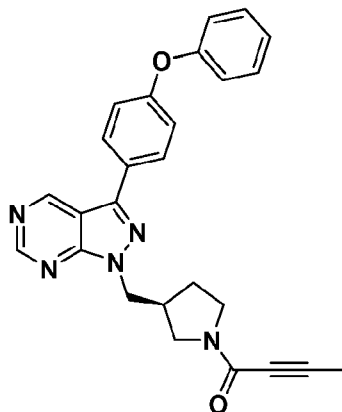
30

MS : m/z 437.9 [M+H]⁺.

【1063】

実施例64 : (S)-1-(3-(3-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)ピロリジン-1-イル)ブタン-2-オン-1-オン ; (化合物A64) :

【化 7 9 4】



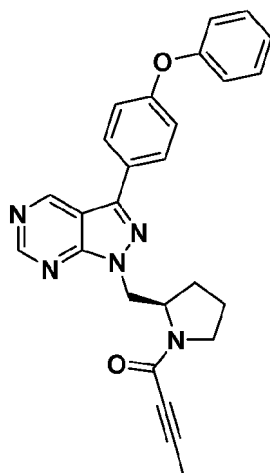
10

MS : m/z 437.9 $[M+H]^+$ 。

【1064】

実施例 65 : (R) - 1 - (2 - ((3 - (4 - フェノキシフェニル) - 1 H - ピラゾ
ロ [3 , 4 - d] ピリミジン - 1 - イル) メチル) ピロリジン - 1 - イル) ブター 2 - イ
ン - 1 - オン ; (化合物 A 6 5) :

【化 7 9 5】



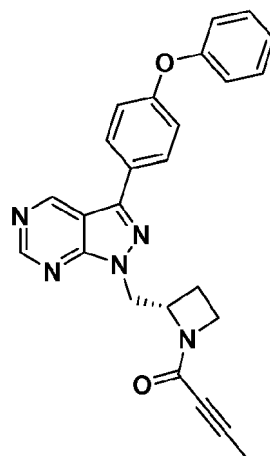
20

MS : m/z 437.9 $[M+H]^+$ 。

【1065】

実施例 66 : (S) - 1 - (2 - ((3 - (4 - フェノキシフェニル) - 1 H - ピラゾ
ロ [3 , 4 - d] ピリミジン - 1 - イル) メチル) アゼチジン - 1 - イル) ブター 2 - イ
ン - 1 - オン ; (化合物 A 6 6) :

【化 7 9 6】



40

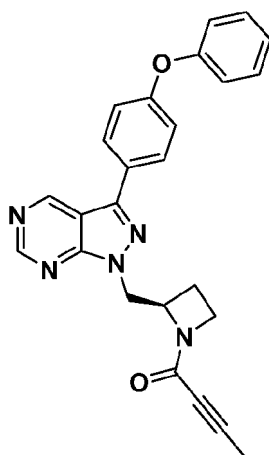
MS : m/z 423.9 $[M+H]^+$ 。

50

【1066】

実施例67：(R)-1-(2-((3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)メチル)アゼチジン-1-イル)ブター-2-イン-1-オン；(化合物A67)：

【化797】



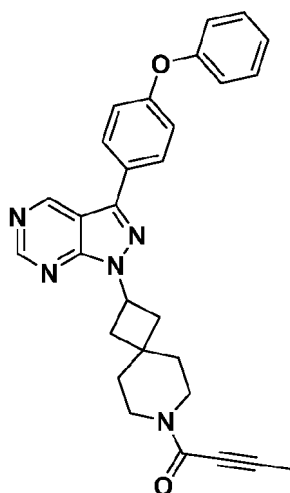
10

MS：m/z 423.9 [M+H]⁺。

【1067】

実施例68：1-(2-((3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)-7-アザスピロ[3.5]ノナン-7-イル)ブター-2-イン-1-オン；(化合物A68)：

【化798】



30

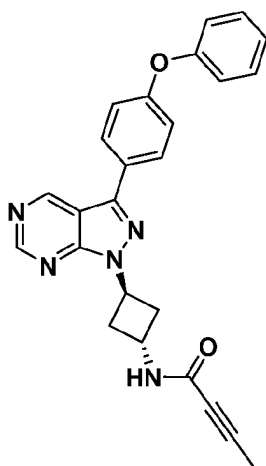
MS：m/z 478.2 [M+H]⁺。

【1068】

実施例69：N-((1R,3R)-3-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)シクロブチル)ブター-2-イナミド；(化合物A69)：

40

【化 7 9 9】



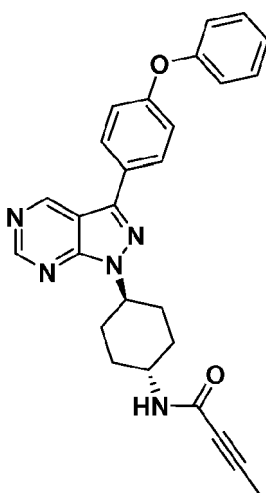
10

MS : m/z 424.3 $[M+H]^+$ 。

【1069】

実施例 70 : N-((1R, 4R)-4-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3, 4-d]ピリミジン-1-イル)シクロヘキシル)ブター-2-イナミド ;
(化合物 A 70) :

【化 8 0 0】



20

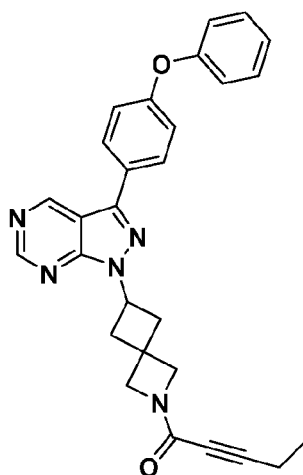
MS : m/z 452.3 $[M+H]^+$ 。

【1070】

実施例 71 : 1-(6-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3, 4-d]ピリミジン-1-イル)-2-アザスピロ[3.3]ヘプタン-2-イル)ペンタ-2-イン-1-オン ; (化合物 A 71) :

30

【化 8 0 1】

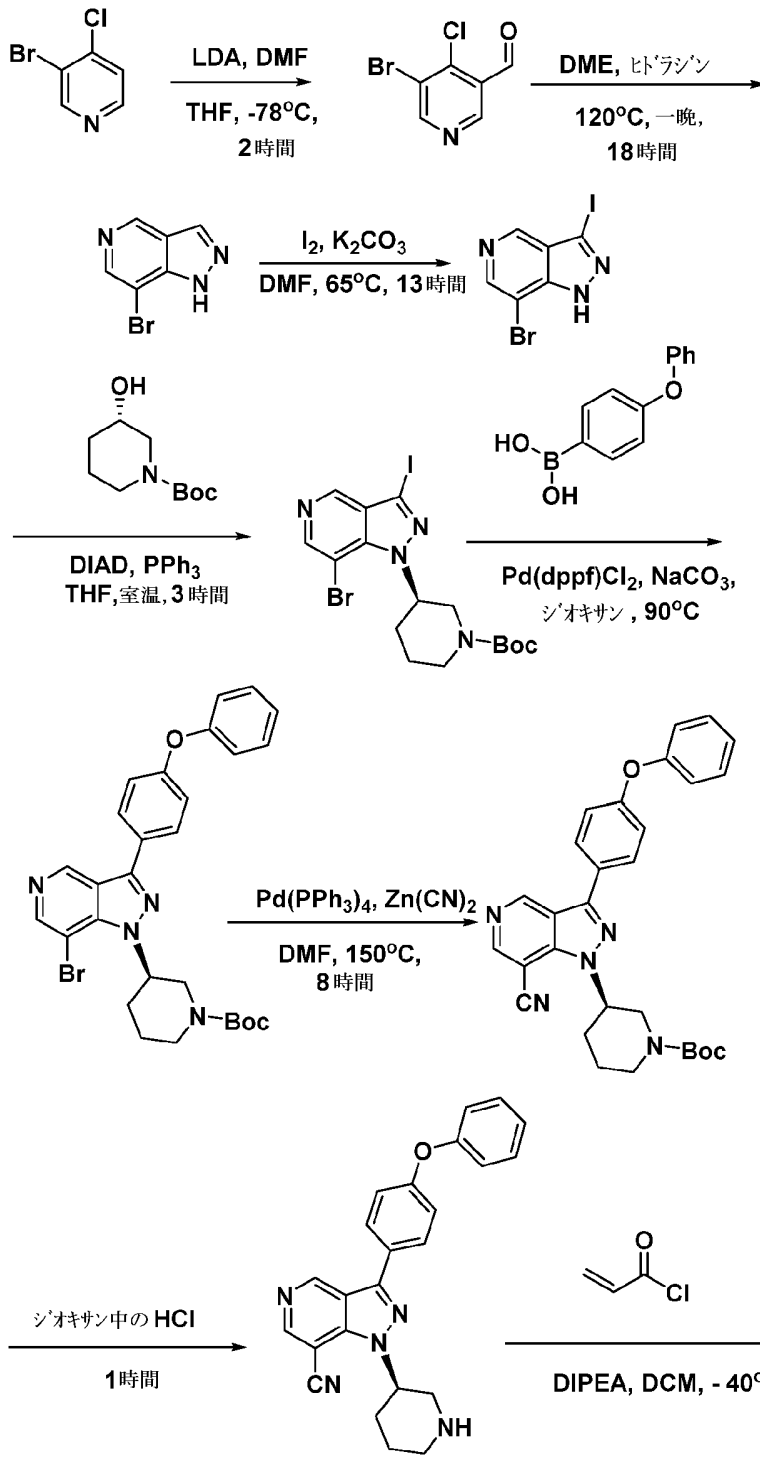


MS : m/z 452.3 [M+H]⁺。

【1071】

スキーム7：方法G

【化 8 0 2】



【1 0 7 2】

実施例 72 : (R) - 1 - (1 - アクリロイルピペリジン - 3 - イル) - 3 - (4 - フェノキシフェニル) - 1H - ピラゾロ [4, 3 - c] ピリジン - 7 - カルボニトリル ; (化合物 A 72) :

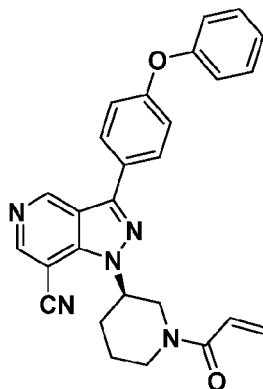
10

20

30

40

【化 8 0 3】

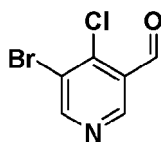


10

【1 0 7 3】

ステップ 1 : 5-ブロモ-4-クロロニコチンアルデヒド

【化 8 0 4】



【1 0 7 4】

LDA (THF 中で 2.0 M、34.55 mL、69.1 mmol) 及び THF (20 mL) の溶液に、無水 THF (5 mL) 中の 3-ブロモ-4-クロロピリジン (11 g、57.6 mmol) を -78°C にてアルゴン下で添加した。得られた混合物を -78°C で 2.5 時間攪拌した。DMF (5.4 mL、69.1 mmol) を添加し、反応物を室温に温めた。反応物を飽和 NH_4Cl で急冷し、EtOAc ($3 \times 100\text{ mL}$) で抽出した。組み合わせた抽出物を無水 Na_2SO_4 で乾燥させて、ろ過し、濃縮した。残渣をコンビフラッシュ (0~30%、石油エーテル中の EtOAc) で精製し、5-ブロモ-4-クロロニコチンアルデヒド (8.2 g、66%) を淡黄色固体として得た。

20

【1 0 7 5】

ステップ 2 : 7-ブロモ-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン

【化 8 0 5】



【1 0 7 6】

DME (5 mL) 中の 5-ブロモ-4-クロロニコチンアルデヒド (1 g、4.54 mmol) の攪拌溶液に、ヒドラジン水和物 (1.135 g、18.14 mmol) を添加した。得られた混合物を、 120°C で一晚、封管中で攪拌した。水を添加して、混合物を希釈した後、EtOAc で抽出した。有機相を生理食塩水で洗浄し、無水 Na_2SO_4 で乾燥させて、ろ過し、濃縮し、7-ブロモ-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン (670 mg、74%) を黄色固体として得た。

40

【1 0 7 7】

ステップ 3 : 7-ブロモ-3-ヨード-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン

【化 8 0 6】



50

【1078】

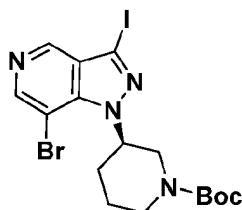
DMF (6 mL) 中の7-ブロモ-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン (670 mg、3.4 mmol) の攪拌溶液に、 I_2 (710 mg、6.8 mmol) 及び K_2CO_3 (940 mg、6.8 mmol) を添加した。得られた混合物を65℃で13時間攪拌した。水を添加し、混合物を希釈した後、EtOAcで抽出した。有機相を生理食塩水で洗浄し、無水 Na_2SO_4 で乾燥させて、ろ過し、濃縮し、7-ブロモ-3-ヨード-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン (960 mg、88%) を黄色固体として得た。

【1079】

ステップ4: tert-ブチル (R)-3-(7-ブロモ-3-ヨード-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン-1-イル) ピペリジン-1-カルボキシレート

10

【化807】



【1080】

DIAD (461 mg、2.28 mmol) を、THF (7 mL) 中のTPP (598 mg、2.28 mmol)、7-ブロモ-3-ヨード-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン (246 mg、0.76 mmol)、及び tert-ブチル (S)-3-ヒドロキシピペリジン-1-カルボキシレート (458 mg、2.28 mmol) の混合物に添加した。室温で4時間攪拌後、混合物を濃縮し、残渣を得、これをEtOAc (10 mL) 及びヘキサン中で沈殿させた。形成された固体をろ過によって除去し、ろ液を濃縮し、残渣を得た。これを順相シリカゲルクロマトグラフィー (Hex: EtOAc = 0~60%) で精製し、tert-ブチル (R)-3-(7-ブロモ-3-ヨード-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン-1-イル) ピペリジン-1-カルボキシレート (472 mg、99%) を得た。

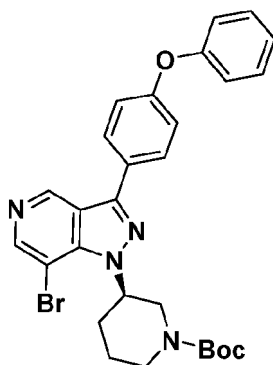
20

【1081】

ステップ5: tert-ブチル (R)-3-(7-ブロモ-3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン-1-イル) ピペリジン-1-カルボキシレート

30

【化808】



40

【1082】

$Pd(dppf)Cl_2$ (34 mg、0.0468 mmol) を、 N_2 保護下で、ジオキサン (9 mL) / 水 (3 mL) 中の tert-ブチル (R)-3-(7-ブロモ-3-ヨード-1H-ピラゾロ [4, 3-c] ピリジン-1-イル) ピペリジン-1-カルボキシレート (472 mg、0.933 mmol)、(4-フェノキシフェニル) ボロン酸 (152 mg、0.71 mmol)、及び Na_2CO_3 (198 mg、0.868 mmol) の脱ガス混合物に添加した。混合物を90℃で4時間攪拌した後、混合物を濃縮し、粗

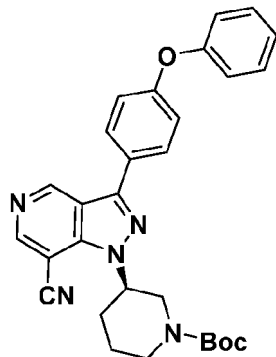
50

残渣を得た。これを順相クロマトグラフィー（HeX：EtOAc＝0～80％）で精製し、tert-ブチル（R）-3-（7-ブロモ-3-（4-フェノキシフェニル）-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-1-イル）ピペリジン-1-カルボキシレート（196mg、38％）を褐色固体として得た。

【1083】

ステップ6：tert-ブチル（R）-3-（7-シアノ-3-（4-フェノキシフェニル）-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-1-イル）ピペリジン-1-カルボキシレート

【化809】



10

【1084】

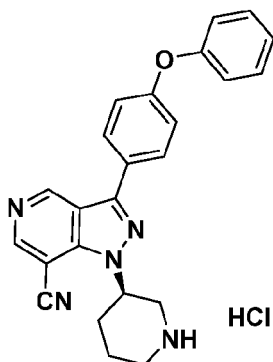
tert-ブチル（R）-3-（7-ブロモ-3-（4-フェノキシフェニル）-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-1-イル）ピペリジン-1-カルボキシレート（196mg、0.357mmol）、Zn(CN)₂（84mg、0.714mmol）、及びDMF（3mL）の混合物を、アルゴン下で、150℃で8時間攪拌した。混合物をろ過し、ろ液をEtOAcで希釈し、水及び生理食塩水で洗浄した後、無水Na₂SO₄で乾燥させて、ろ過し、濃縮し、粗残渣を得た。これを順相クロマトグラフィー（HeX：EtOAc＝0～80％）で精製し、tert-ブチル（R）-3-（7-シアノ-3-（4-フェノキシフェニル）-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-1-イル）ピペリジン-1-カルボキシレート（69mg、39％）を白色固体として得た。

20

【1085】

ステップ7：（R）-3-（4-フェノキシフェニル）-1-（ピペリジン-3-イル）-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-7-カルボニトリルヒドロクロリド

【化810】



40

【1086】

HCl/ジオキサン（4M、4mL）中のtert-ブチル（R）-3-（7-シアノ-3-（4-フェノキシフェニル）-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-1-イル）ピペリジン-1-カルボキシレート（69mg、0.139mmol）の溶液を25℃で3時間攪拌した。混合物を濃縮し、残渣を得、これに塩酸（1N、10mL）を添加した後、EtOAcで抽出した。水性相を濃縮し、（R）-3-（4-フェノキシフェニル）-1-（ピペリジン-3-イル）-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-7-カル

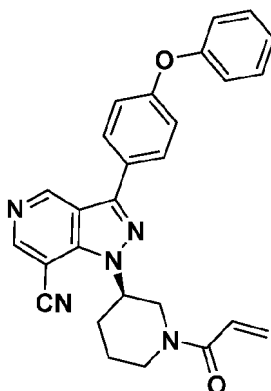
50

ボニトリルヒドロクロリド (68 mg、99%) を黄色固体として得た。

【1087】

ステップ8: (R)-1-(1-アクリロイルピペリジン-3-イル)-3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-7-カルボニトリル

【化811】



10

【1088】

-40℃でDCM (5 mL) 中の (R)-3-(4-フェノキシフェニル)-1-(ピペリジン-3-イル)-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-7-カルボニトリルヒドロクロリド (69 mg、0.16 mmol)、及びDIPEA (41 mg、0.32 mmol) の溶液に、塩化アクリロイル (15 mg、0.16 mmol) の溶液をゆっくり添加した。得られた混合物を-40℃で5分間攪拌した。その後、混合物をEtOAcで抽出し、Na₂SO₄で乾燥させた後、ろ過した。ろ液を蒸発させ、粗残渣を順相クロマトグラフィー (DCM:MeOH=0~20%) で精製し、(R)-1-(1-アクリロイルピペリジン-3-イル)-3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-7-カルボニトリル (20 mg、25%) を白色固体として得た。MS:m/z 450.3 [M+H]⁺。

20

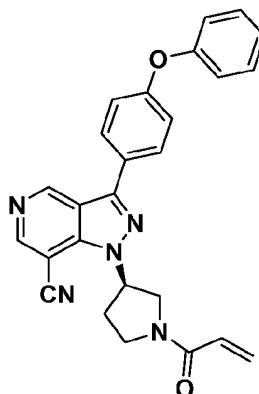
【1089】

以下の化合物は、スキーム7:方法Gによって調製した。

【1090】

実施例73: (R)-1-(1-アクリロイルピロリジン-3-イル)-3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-7-カルボニトリル; (化合物A73):

【化812】



40

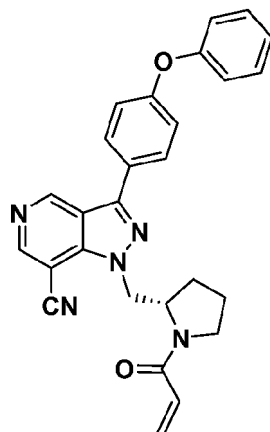
MS:m/z 436.3 [M+H]⁺。

【1091】

実施例74: (S)-1-((1-アクリロイルピロリジン-2-イル)メチル)-3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[4,3-c]ピリジン-7-カルボニトリル; (化合物A74):

50

【化 8 1 3】



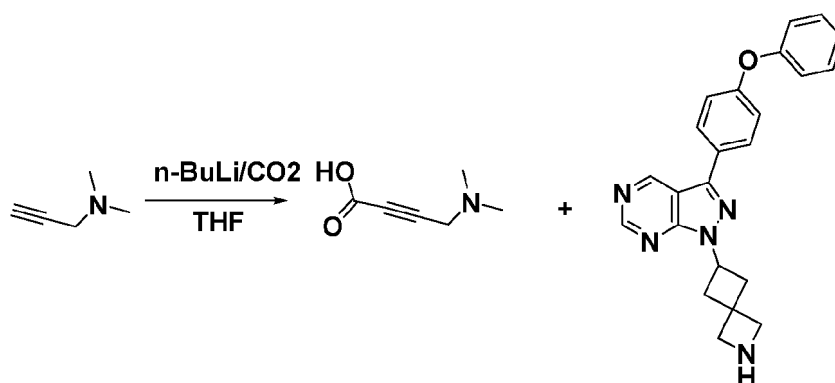
10

MS : m/z 450.3 [M+H]⁺。

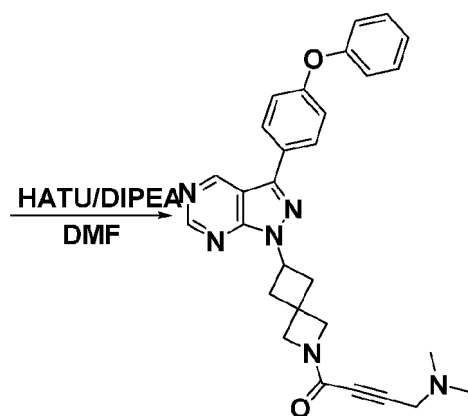
【1092】

スキーム 8 : 方法 H

【化 8 1 4】



20



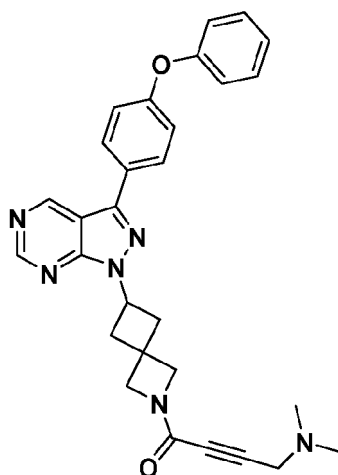
30

【1093】

実施例 75 : 4-(ジメチルアミノ)-1-(6-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)-2-アザスピロ[3.3]ヘプタン-2-イル)ブタン-2-イン-1-オン ; (化合物 A 75) :

40

【化 8 1 5】

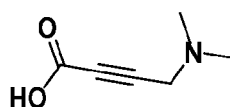


10

【1094】

ステップ1：4-(ジメチルアミノ)ブター2-イン酸

【化 8 1 6】



20

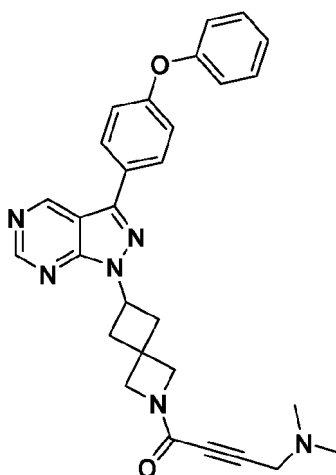
【1095】

ヘキサン中の $n\text{-BuLi}$ (2.5 M、24.06 mmol、9.62 mL) を、乾燥 THF (10 mL) 中の N, N-ジメチルプロパー2-イン-1-アミン (24.06 mmol、2.59 mL) の溶液に -78°C でゆっくり添加した。混合物を -78°C で1時間攪拌した後、クラッシュした (crushed) CO_2 (241 mmol、10.59 g) を一部添加し、反応混合物をさらに10分間攪拌した。得られた溶液を水に注ぎ、酢酸エチルで洗浄した。水性層を蒸発させて、粗アミノ酸を得た。それをメタノール中に溶解し、不溶性塩を、ろ過を介して除去した。ろ液を蒸発させて、4-(ジメチルアミノ)ブター2-イン酸 (1.5 g、50%) を得た。

【1096】

ステップ2：4-(ジメチルアミノ)-1-(6-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)-2-アザスピロ[3.3]ヘプタン-2-イル)ブター2-イン-1-オン

【化 8 1 7】



40

【1097】

DMF (50 mL) 中の 3-(4-フェノキシフェニル)-1-(2-アザスピロ[3.3]ヘプタン-6-イル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン (150 mg、

50

0.4 mmol) (スキーム 1：方法 A)、4-(ジメチルアミノ)ブタ-2-イン酸 (51 mg、0.4 mmol)、及び HATU (152 mg、0.4 mmol) の溶液に、DIPEA (129 mg、1 mmol) を添加した。得られた混合物を室温で 2 時間攪拌した後、10 mL の水を添加した。混合物を EtOAc (15 mL × 2) で抽出し、生理食塩水 (15 mL × 3) で洗浄し、Na₂SO₄ で乾燥させて、ろ過し、濃縮し、残渣を得た。これを分取 TLC で精製し、4-(ジメチルアミノ)-1-(6-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)-2-アザスピロ[3.3]ヘプタン-2-イル)ブタ-2-イン-1-オン (16 mg、8%) を白色固体として得た。MS: m/z 493.2 [M+H]⁺。

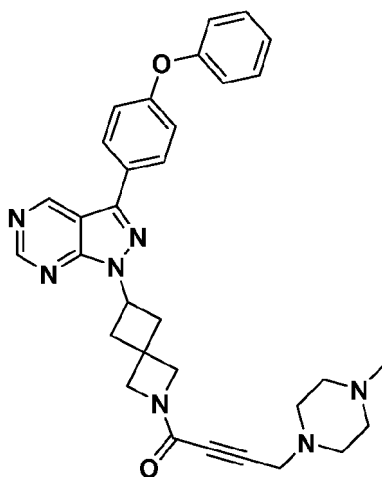
【1098】

以下の化合物は、スキーム 8：方法 H によって調製した。

【1099】

実施例 76：4-(4-メチルピペラジン-1-イル)-1-(6-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)-2-アザスピロ[3.3]ヘプタン-2-イル)ブタ-2-イン-1-オン；(化合物 A76)：

【化 818】

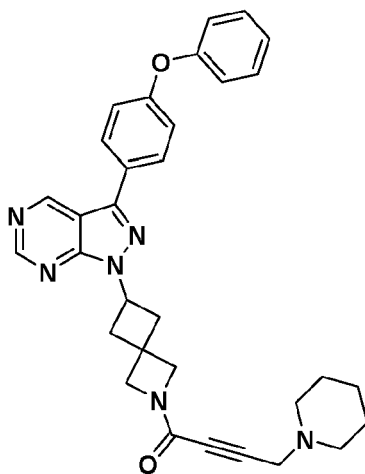


MS: m/z 548.3 [M+H]⁺。

【1100】

実施例 77：1-(6-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)-2-アザスピロ[3.3]ヘプタン-2-イル)-4-(ピペリジン-1-イル)ブタ-2-イン-1-オン；(化合物 A77)：

【化 819】

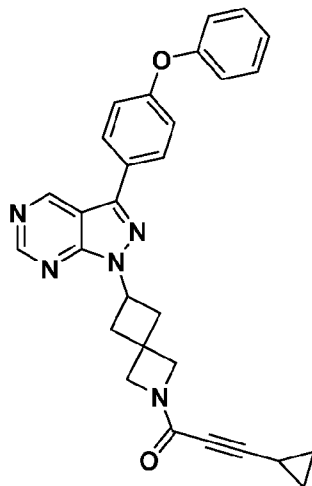


MS: m/z 532.7 [M+H]⁺。

【1101】

実施例 78：3-シクロプロピル-1-(6-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)-2-アザスピロ[3.3]ヘプタン-2-イル)プロパン-2-イン-1-オン；(化合物 A 78)：

【化 8 2 0】



10

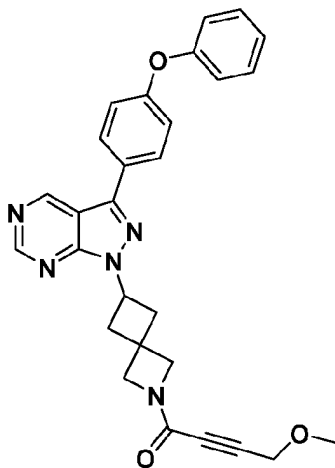
MS：m/z 476.2 [M+H]⁺。

【1102】

実施例 79：4-メトキシ-1-(6-(3-(4-フェノキシフェニル)-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-1-イル)-2-アザスピロ[3.3]ヘプタン-2-イル)ブタン-2-イン-1-オン；(化合物 A 79)：

20

【化 8 2 1】



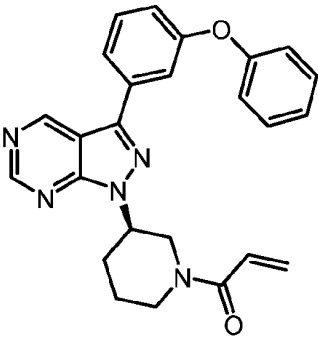
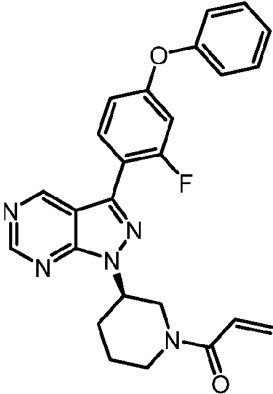
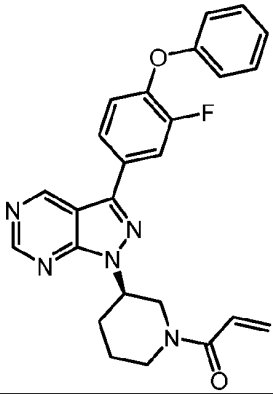
30

MS：m/z 479.7 [M+H]⁺。

実施例 B：化合物（例えば、BTK阻害剤、BTKアンタゴニスト、BTK調節物質）の特徴付け。アッセイ結果の主要素：A=<100 nM；B=100~500 nM；C=>500 nMを留意されたい。

40

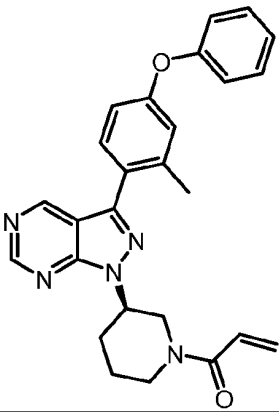
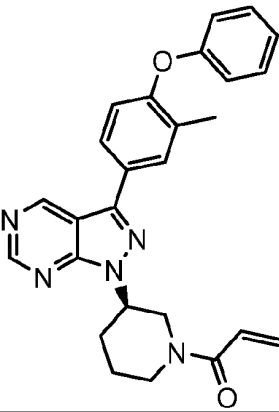
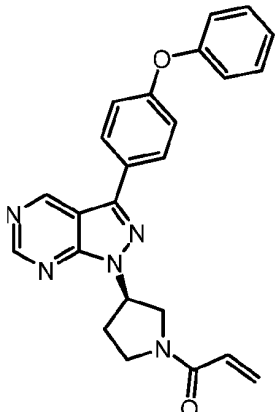
【表 1】

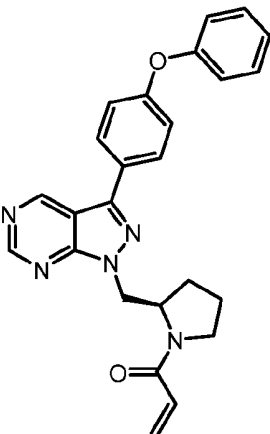
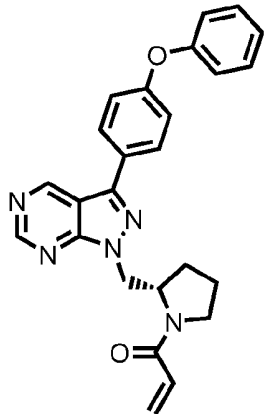
化合物	アッセイ結果
	化合物 : A1 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B
	化合物 : A2 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) B TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A3 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A

10

20

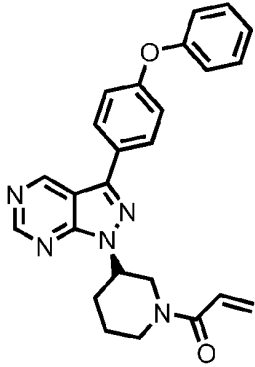
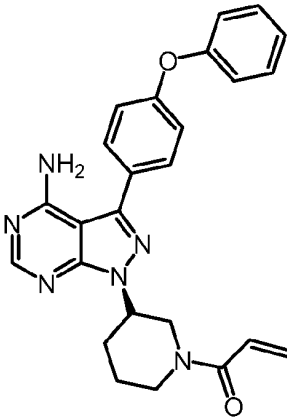
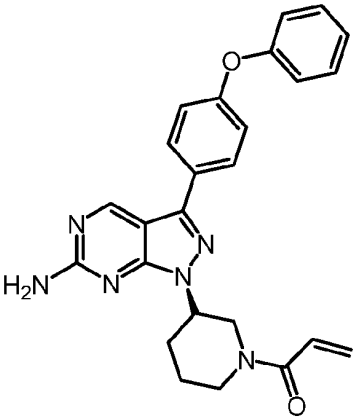
30

	化合物 : A4 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A	10
	化合物 : A5 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B	20
	化合物 : A6 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A	30

	化合物 : A7 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B
	化合物 : A8 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A

10

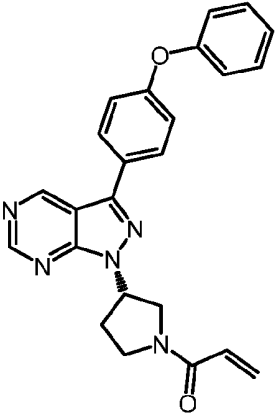
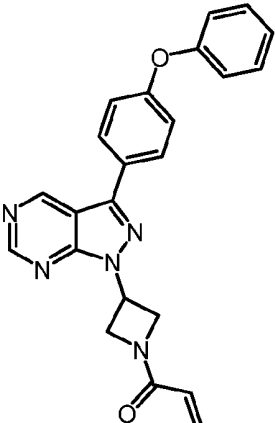
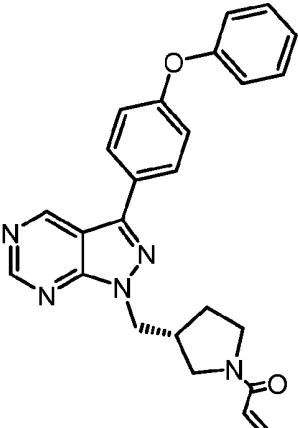
20

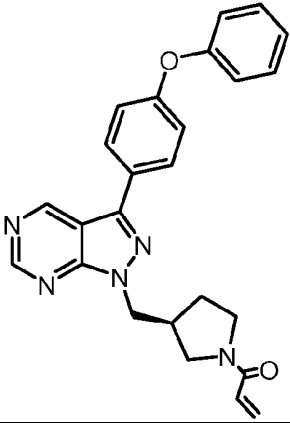
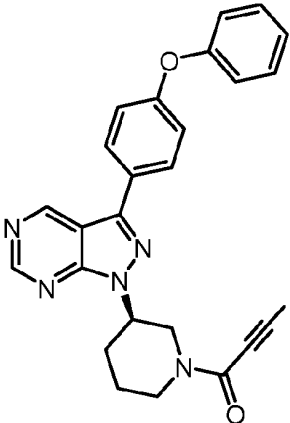
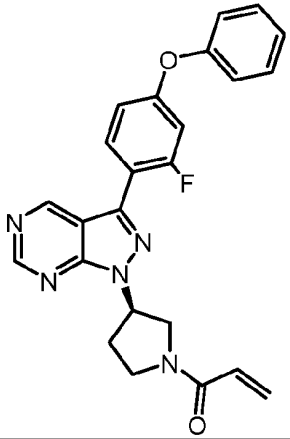
	化合物 : A9 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A10 ITK IC50 (nM) A BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) A RLK IC50 (nM) A EGFR (nM) A TEC (nM) A
	化合物 : A11 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C RLK IC50 (nM) B

10

20

30

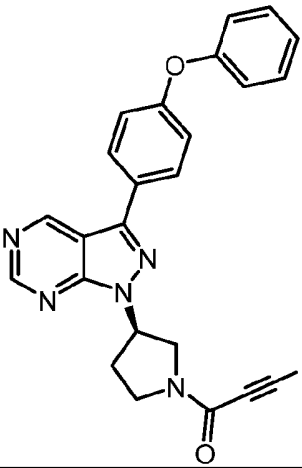
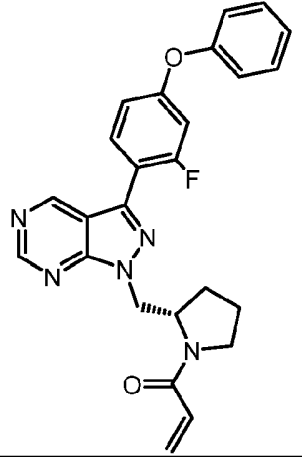
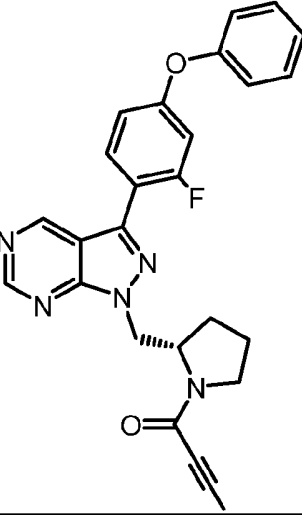
	化合物 : A12 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B	10
	化合物 : A13 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B	20
	化合物 : A14 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B	30

	化合物 : A15 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B
	化合物 : A16 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) C JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C
	化合物 : A17 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A

10

20

30

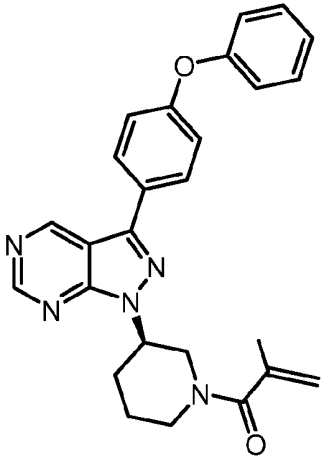
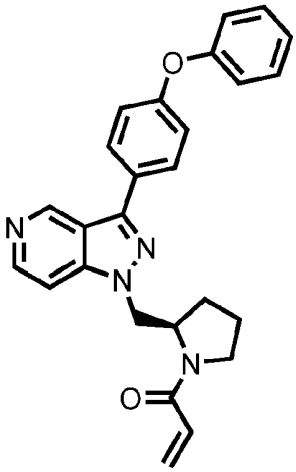
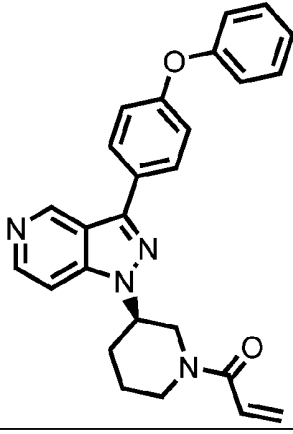
	化合物 : A18 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C
	化合物 : A19 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A20 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C

10

20

30

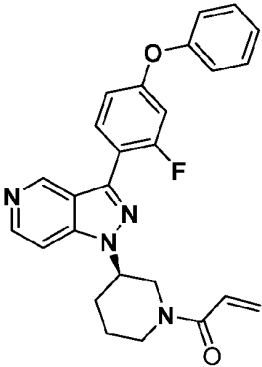
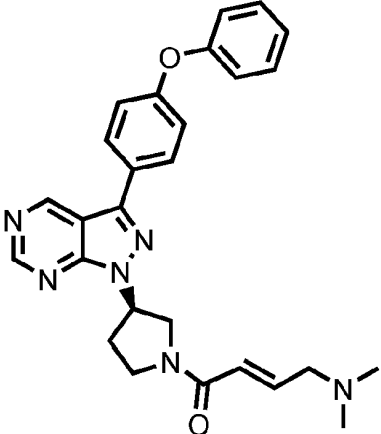
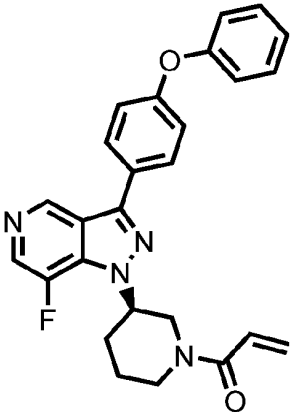
40

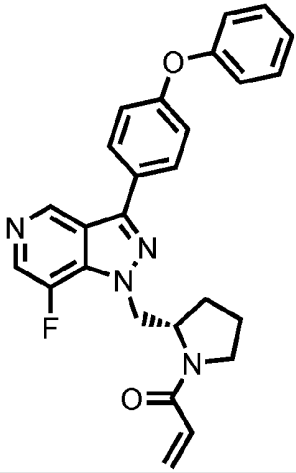
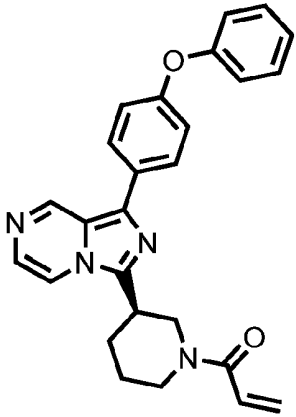
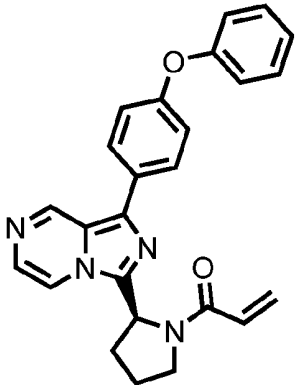
	化合物 : A21 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) C JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C
	化合物 : A22 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A23 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A

10

20

30

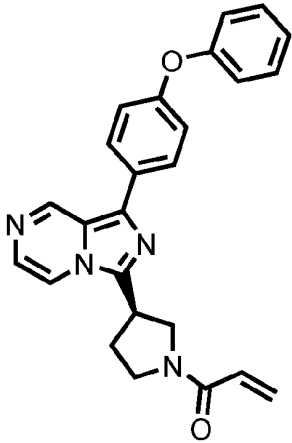
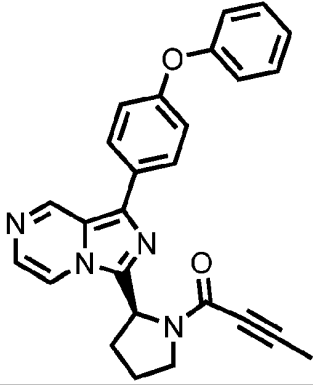
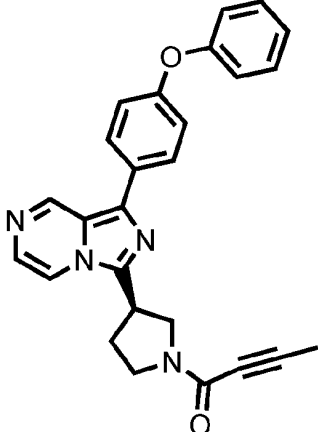
	化合物 : A24 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A	10
	化合物 : A25 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C	20
	化合物 : A26 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A	30

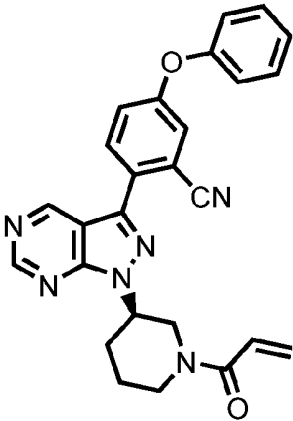
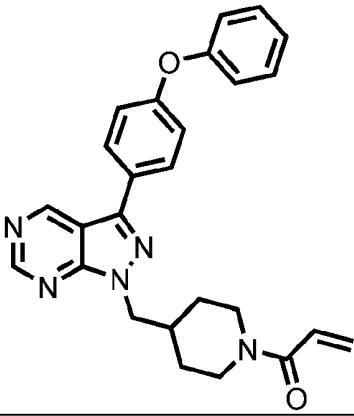
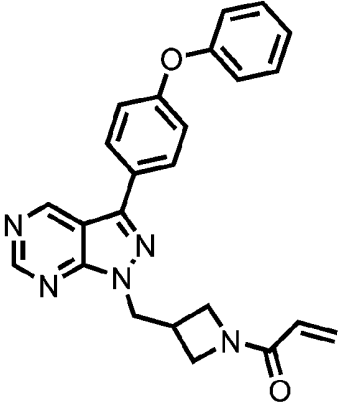
	化合物 : A27 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A28 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A29 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B

10

20

30

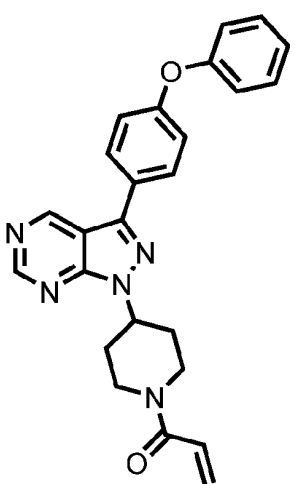
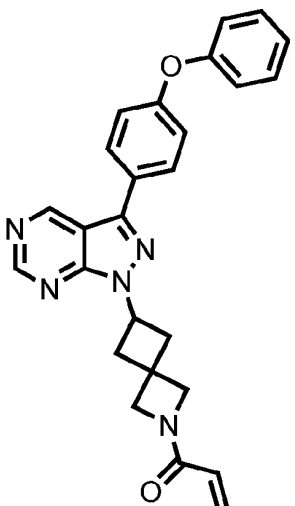
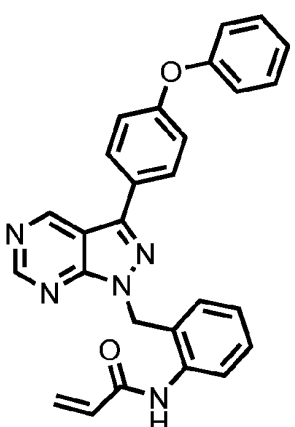
	化合物 : A30 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A31 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) C JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C
	化合物 : A32 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B

	化合物 : A33 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C
	化合物 : A34 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C
	化合物 : A35 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B

10

20

30

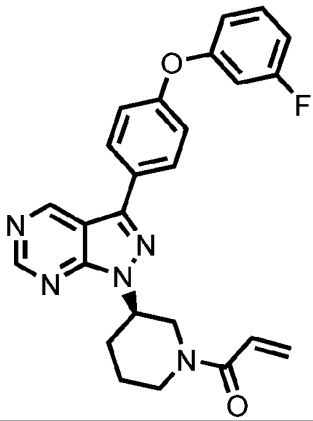
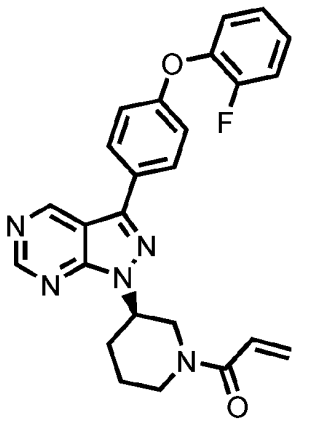
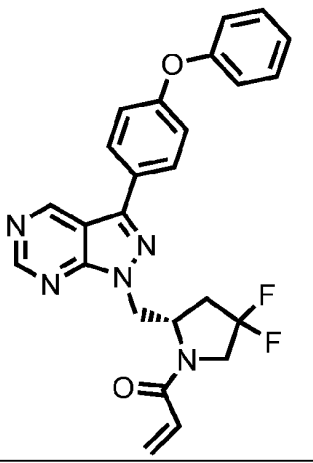
	化合物 : A36 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B
	化合物 : A37 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B
	化合物 : A38 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A

10

20

30

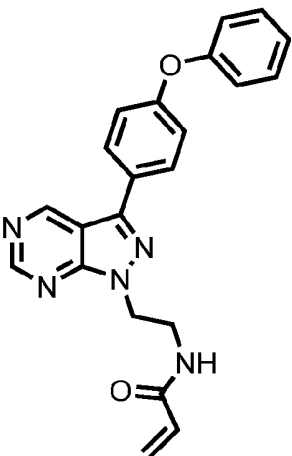
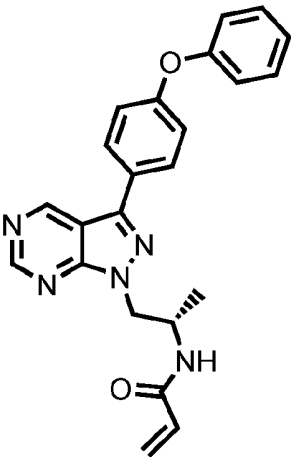
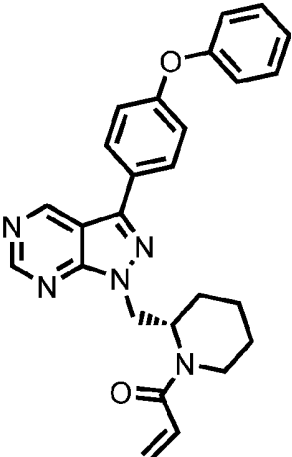
40

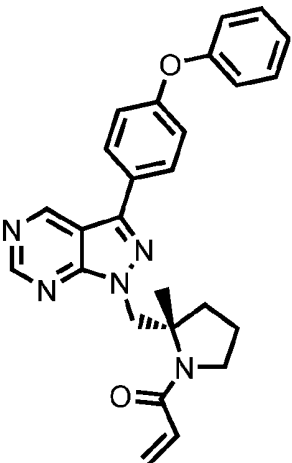
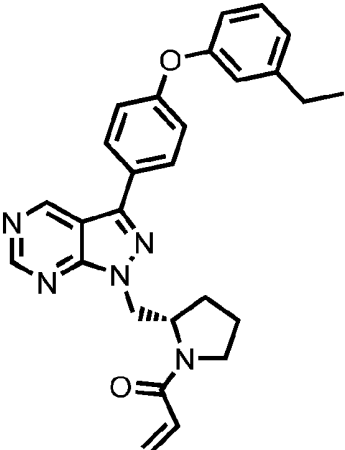
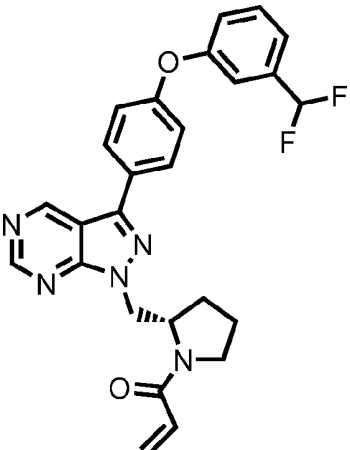
	化合物 : A39 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A40 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A41 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A

10

20

30

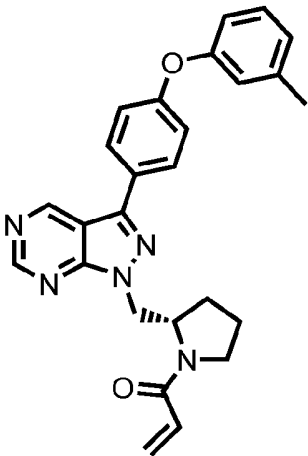
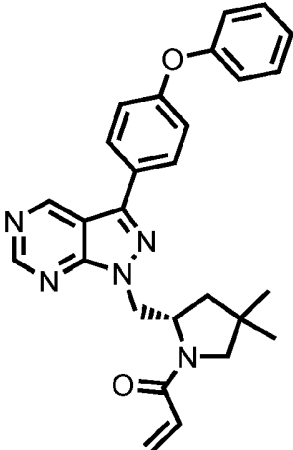
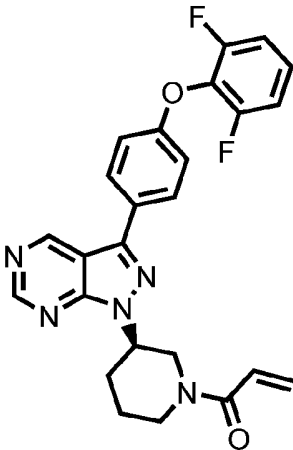
	化合物 : A42 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C	10
	化合物 : A43 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B	20
	化合物 : A44 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B	30

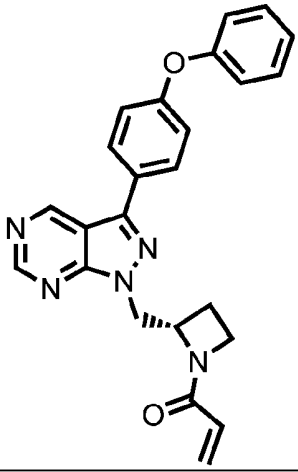
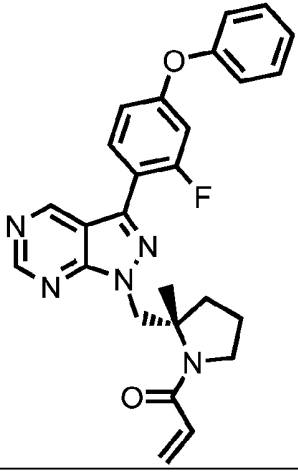
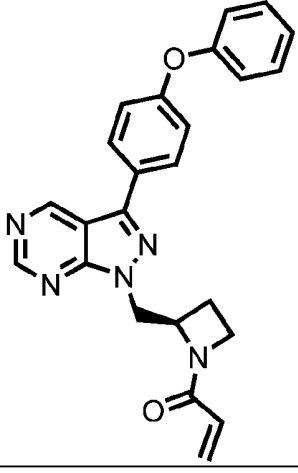
	化合物 : A45 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A46 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A47 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A

10

20

30

	化合物 : A48 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A	10
	化合物 : A49 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A	20
	化合物 : A50 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B	30

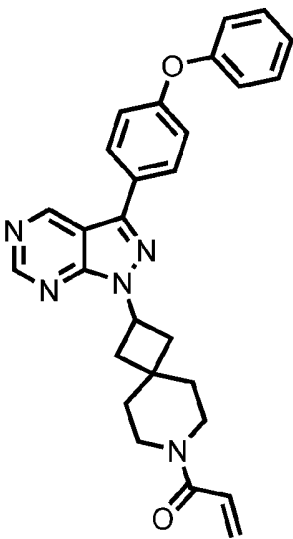
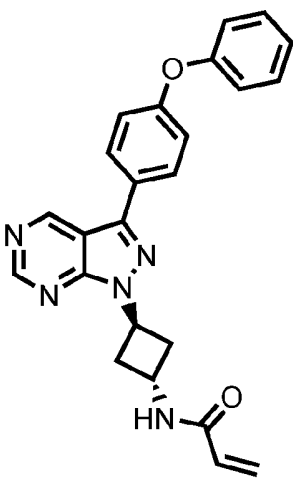
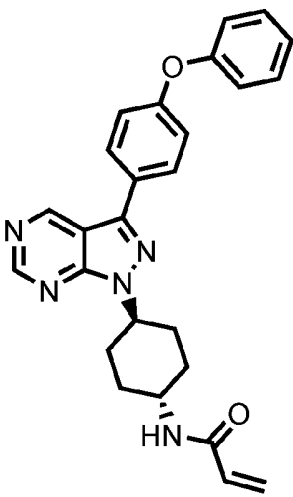
	化合物 : A51 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A52 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A53 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A

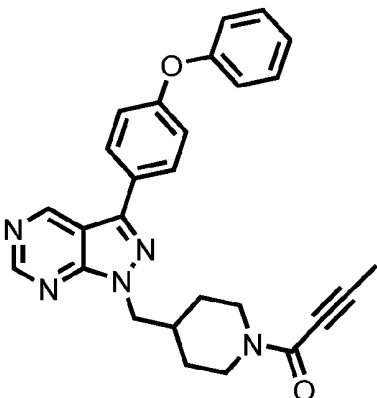
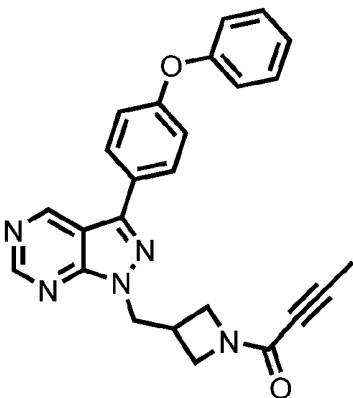
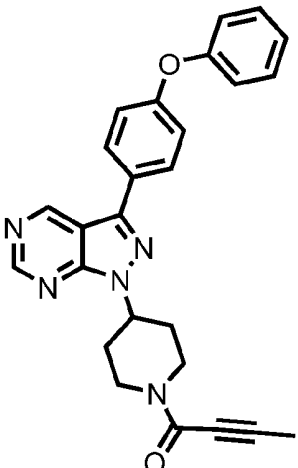
10

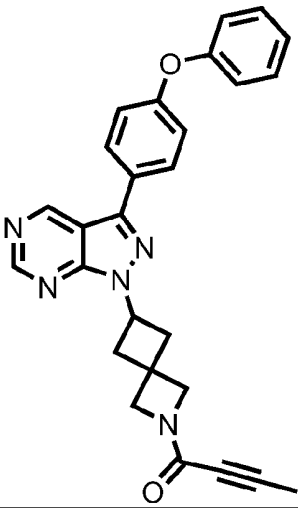
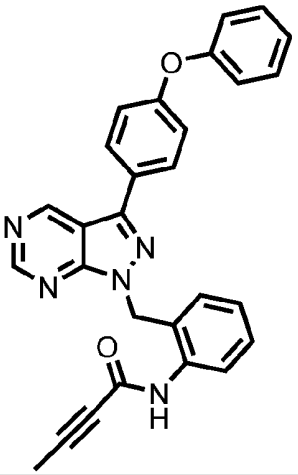
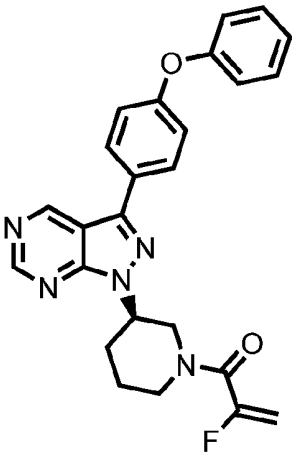
20

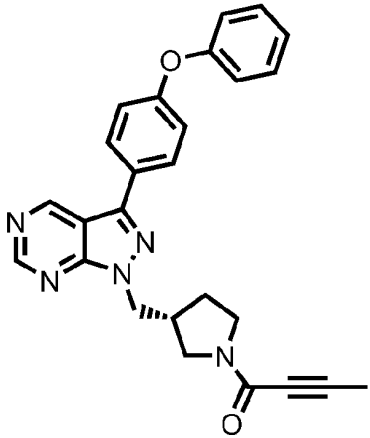
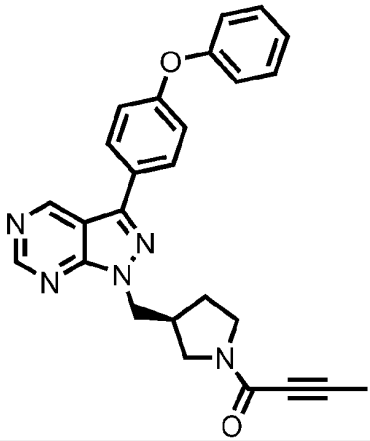
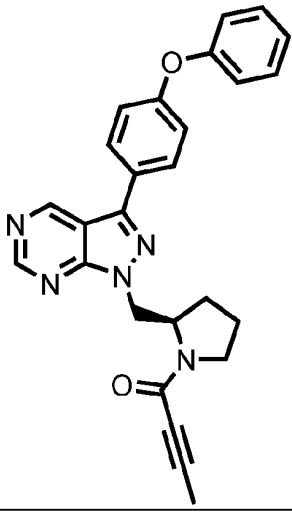
30

40

	化合物 : A54 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) C JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C	10
	化合物 : A55 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C	20
	化合物 : A56 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) C JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C	30
		40

	化合物 : A57 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) C JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C	10
	化合物 : A58 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) C JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C	20
	化合物 : A59 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C	30

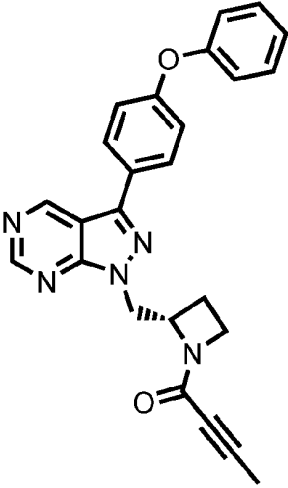
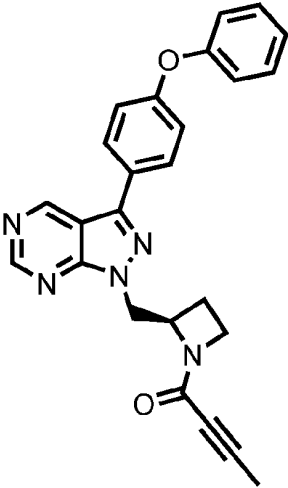
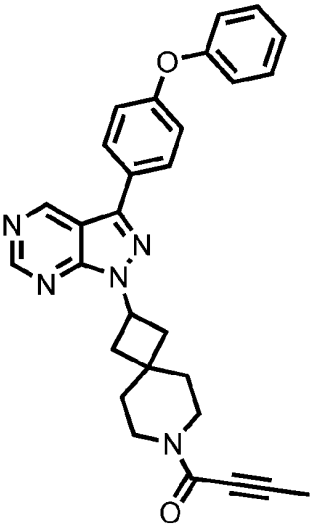
	化合物 : A60 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A	10
	化合物 : A61 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) C JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A	20
	化合物 : A62 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B	30

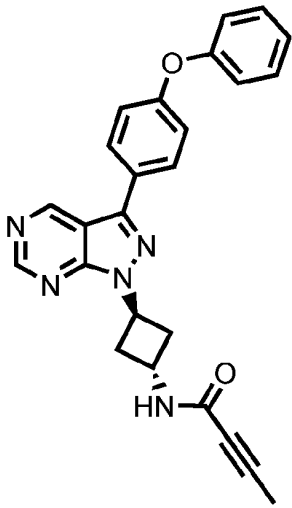
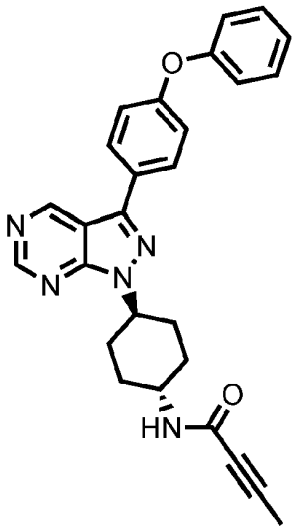
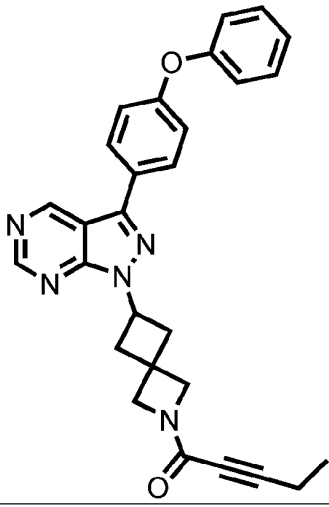
	化合物 : A63 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C
	化合物 : A64 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B
	化合物 : A65 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C

10

20

30

	化合物 : A66 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C	10
	化合物 : A67 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C	20
	化合物 : A68 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) C JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C	30
		40

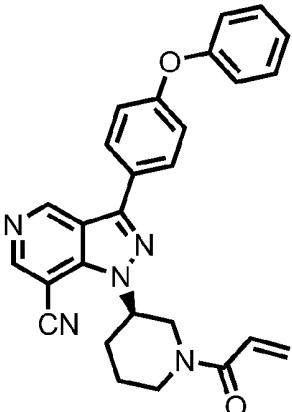
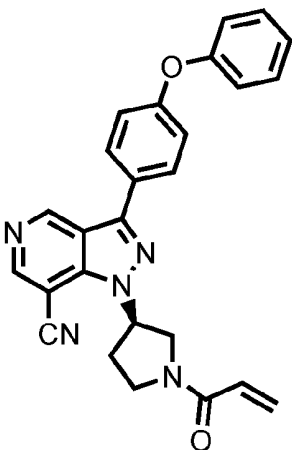
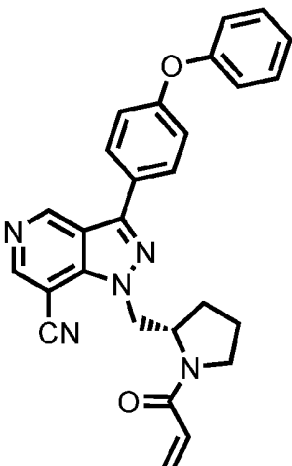
	化合物 : A69 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C
	化合物 : A70 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) C JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C
	化合物 : A71 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) B

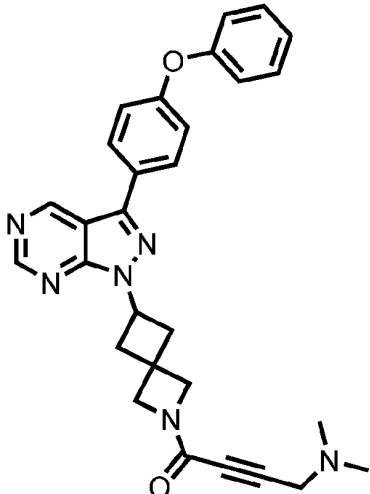
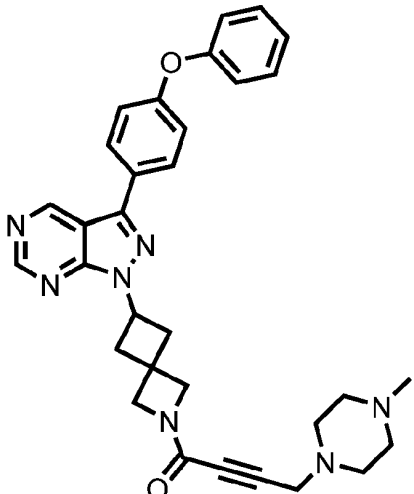
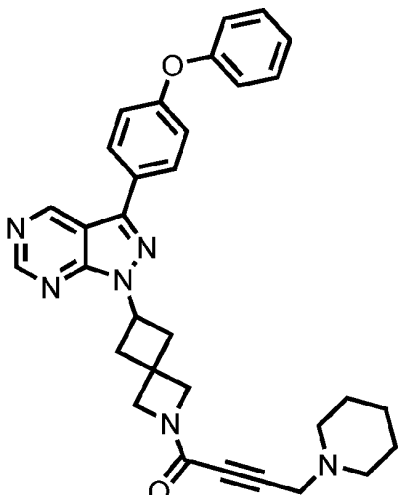
10

20

30

40

	化合物 : A72 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A	10
	化合物 : A73 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A	20
	化合物 : A74 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C	30

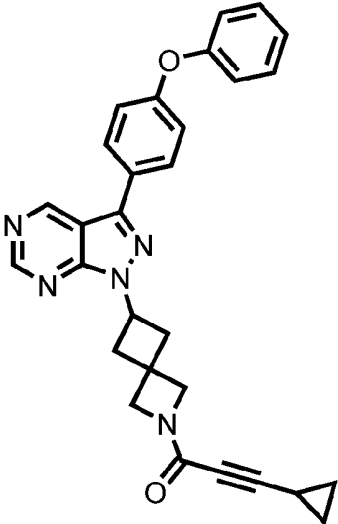
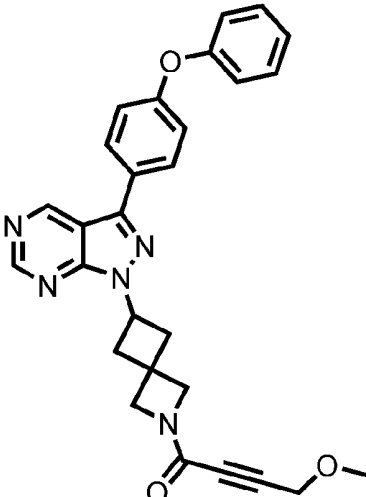
	化合物 : A75 ITK IC50 (nM) B BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) B TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A76 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A
	化合物 : A77 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A

10

20

30

40

	化合物 : A78 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) B JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) C
	化合物 : A79 ITK IC50 (nM) C BTK IC50 (nM) A JAK3 IC50 (nM) C TXK IC50 (nM) A

A = < 1 0 0 n M ; B = 1 0 0 ~ 5 0 0 n M ; C = > 5 0 0 n M

10

20

30

フロントページの続き

(51)Int.Cl.

F I

A 6 1 P	29/00	(2006.01)	A 6 1 K	31/4985	
A 6 1 P	25/00	(2006.01)	C 0 7 D	487/04	1 4 4
A 6 1 P	25/28	(2006.01)	A 6 1 P	29/00	
A 6 1 P	25/16	(2006.01)	A 6 1 P	25/00	
A 6 1 P	27/06	(2006.01)	A 6 1 P	25/28	
A 6 1 P	9/10	(2006.01)	A 6 1 P	25/16	
A 6 1 P	25/24	(2006.01)	A 6 1 P	27/06	
A 6 1 P	25/22	(2006.01)	A 6 1 P	9/10	
A 6 1 P	25/08	(2006.01)	A 6 1 P	25/24	
A 6 1 P	31/18	(2006.01)	A 6 1 P	25/22	
A 6 1 P	9/00	(2006.01)	A 6 1 P	25/08	
A 6 1 P	37/06	(2006.01)	A 6 1 P	31/18	
			A 6 1 P	9/00	
			A 6 1 P	37/06	

(72)発明者 ハドソン, ライアン

アメリカ合衆国、カリフォルニア・9 4 0 1 0、バーリンゲーム、ミッテン・ロード・8 6 3、スイート・1 0 2、コーバス・ファーマシューティカルズ・インコーポレイテッド気付

(72)発明者 ボーソレイユ, アンーマリー

アメリカ合衆国、カリフォルニア・9 4 0 1 0、バーリンゲーム、ミッテン・ロード・8 6 3、スイート・1 0 2、コーバス・ファーマシューティカルズ・インコーポレイテッド気付

(72)発明者 ミラー, リチャード・エイ

アメリカ合衆国、カリフォルニア・9 4 0 1 0、バーリンゲーム、ミッテン・ロード・8 6 3、スイート・1 0 2、コーバス・ファーマシューティカルズ・インコーポレイテッド気付

(72)発明者 バーナー, エリック

アメリカ合衆国、カリフォルニア・9 4 0 1 0、バーリンゲーム、ミッテン・ロード・8 6 3、スイート・1 0 2、コーバス・ファーマシューティカルズ・インコーポレイテッド気付

審査官 東 裕子

(56)参考文献 特表2 0 1 4－5 2 0 8 6 3 (JP, A)

特表2 0 1 9－5 0 2 7 6 3 (JP, A)

米国特許出願公開第2 0 1 6／0 0 0 0 7 9 2 (US, A 1)

MOSSINE, Andrew V., Bioconjugate Chemistry, 2016年03月25日, 27, 1382-1389

ZOU, Yi, Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 2016年, 26, 3052-3059

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C 0 7 D

C A p l u s / R E G I S T R Y (STN)