

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第3部門第2区分

【発行日】平成27年11月12日(2015.11.12)

【公表番号】特表2014-528485(P2014-528485A)

【公表日】平成26年10月27日(2014.10.27)

【年通号数】公開・登録公報2014-059

【出願番号】特願2014-535962(P2014-535962)

【国際特許分類】

C 07 J	5/00	(2006.01)
C 07 J	9/00	(2006.01)
C 07 J	31/00	(2006.01)
C 07 J	43/00	(2006.01)
C 07 J	7/00	(2006.01)
A 61 K	31/573	(2006.01)
A 61 K	31/575	(2006.01)
A 61 K	31/58	(2006.01)
A 61 P	25/00	(2006.01)
A 61 P	25/22	(2006.01)
A 61 P	25/24	(2006.01)
A 61 P	25/18	(2006.01)
A 61 P	25/04	(2006.01)
A 61 P	25/14	(2006.01)
A 61 P	25/16	(2006.01)
A 61 P	25/28	(2006.01)
A 61 P	25/20	(2006.01)
A 61 P	27/16	(2006.01)

【F I】

C 07 J	5/00	C S P
C 07 J	9/00	
C 07 J	31/00	
C 07 J	43/00	
C 07 J	7/00	
A 61 K	31/573	
A 61 K	31/575	
A 61 K	31/58	
A 61 P	25/00	
A 61 P	25/22	
A 61 P	25/24	
A 61 P	25/18	
A 61 P	25/04	
A 61 P	25/14	
A 61 P	25/16	
A 61 P	25/28	
A 61 P	25/20	
A 61 P	27/16	

【手続補正書】

【提出日】平成27年9月25日(2015.9.25)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

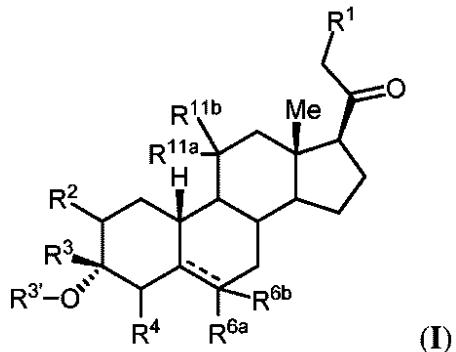
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

式(I)の化合物：

【化126】



またはその薬学的に許容され得る塩であつて；

式中：

R¹は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、-OR^{A1}、-SR^{A1}、-N(R^{A1})₂、-OC(=O)R^{A1}、-OC(=O)OR^{A1}、-OC(=O)SR^{A1}、-OC(=O)N(R^{A1})₂、-SC(=O)R^{A2}、-SC(=O)OR^{A1}、-SC(=O)SR^{A1}、-SC(=O)N(R^{A1})₂、-NHCO(=O)R^{A1}、-NHCO(=O)OR^{A1}、-NHCO(=O)SR^{A1}、-NHCO(=O)N(R^{A1})₂、-OS(=O)₂R^{A2}、-OS(=O)₂OR^{A1}、-SS(=O)₂R^{A2}、-SS(=O)₂OR^{A1}、-S(=O)R^{A2}、-SO₂R^{A2}または-S(=O)₂OR^{A1}であり、ここで、R^{A1}の各存在は、独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、硫黄保護基（硫黄原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、または2つのR^{A1}基が連結して、置換もしくは非置換の複素環式環もしくはヘテロアリール環を形成し；R^{A2}は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

R²は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、-OH、-OR^{B1}、-OC(=O)R^{B1}、-NH₂、-N(R^{B1})₂または-NR^{B1}C(=O)R^{B1}であり、ここで、R^{B1}の各存在は、独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、あるいは2つのR^{B1}基が連結して、置換または非置換の複素環式環を形成し；

R^3 は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

$R^{3'}$ は、水素、 $-C(=O)R^{C1}$ 、 $-C(=O)OR^{C1}$ 、 $-C(=O)SR^{C1}$ 、 $-C(=O)N(R^{C1})_2$ 、 $-S(=O)_2R^{C2}$ 、 $-S(=O)_2OR^{C1}$ 、 $-P(O)_2R^{C2}$ 、 $-P(O)_2OR^{C1}$ 、 $-P(O)(OR^{C1})_2$ 、 $-P(O)(R^{C2})_2$ または $-P(O)(R^{C2})(OR^{C1})$ であり、ここで、 R^{C1} は、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、硫黄保護基（硫黄原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、あるいは 2 つの R^{C1} 基が連結して、置換または非置換の複素環式環を形成し； R^{C2} は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

R^4 は、水素、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換カルボシクリル、置換または非置換ヘテロシクリル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリールから選択され；

R^{6a} および R^{6b} の各々は、独立して、水素、ハロ、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニルまたは置換もしくは非置換アルキニルであるか、あるいは R^{6a} および R^{6b} は、連結して、オキソ(=O)基を形成し；

R^{11a} および R^{11b} の各々は、独立して、水素、ハロ、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、 $-OH$ 、 $-OR^{D1}$ 、 $-OC(=O)R^{D1}$ 、 $-NH_2$ 、 $-N(R^{D1})_2$ または $-NR^{D1}C(=O)R^{D1}$ であり、ここで、 R^{D1} の各存在は、独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、あるいは 2 つの R^{D1} 基が連結して、置換または非置換の複素環式環を形成するか；あるいは R^{11a} および R^{11b} は、連結して、オキソ(=O)基を形成し；

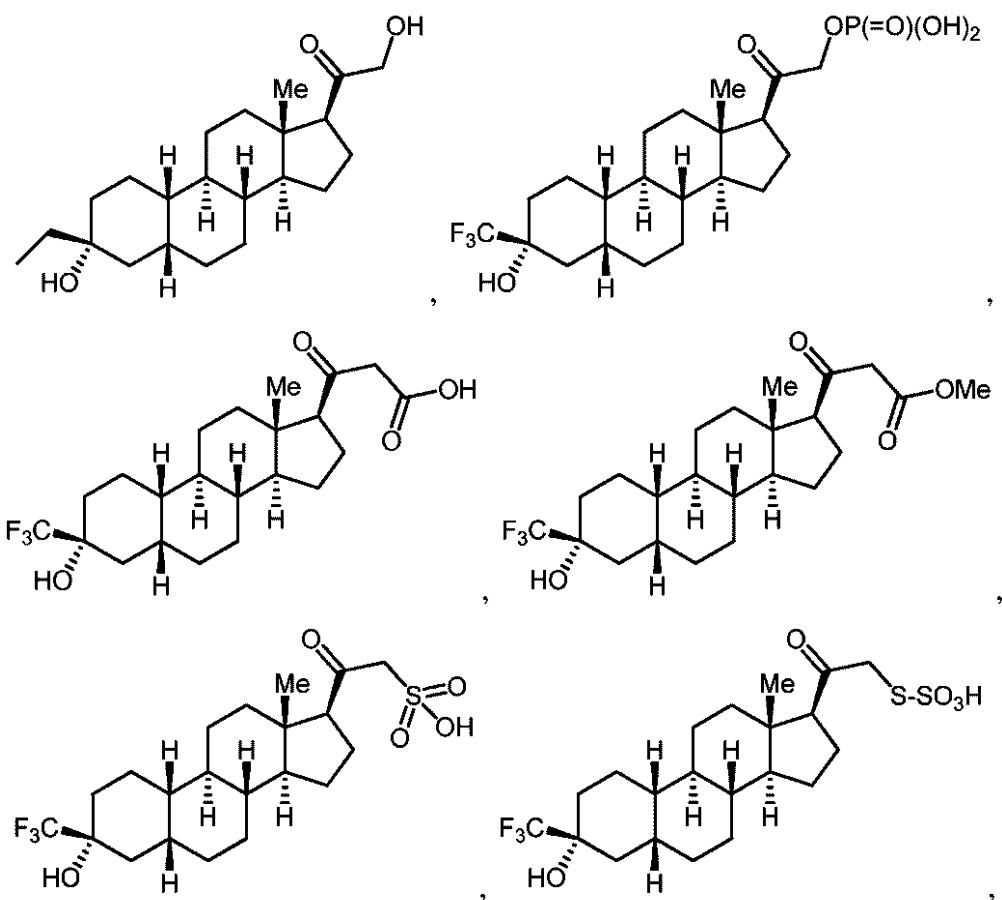
式中、

【化 1 2 7】

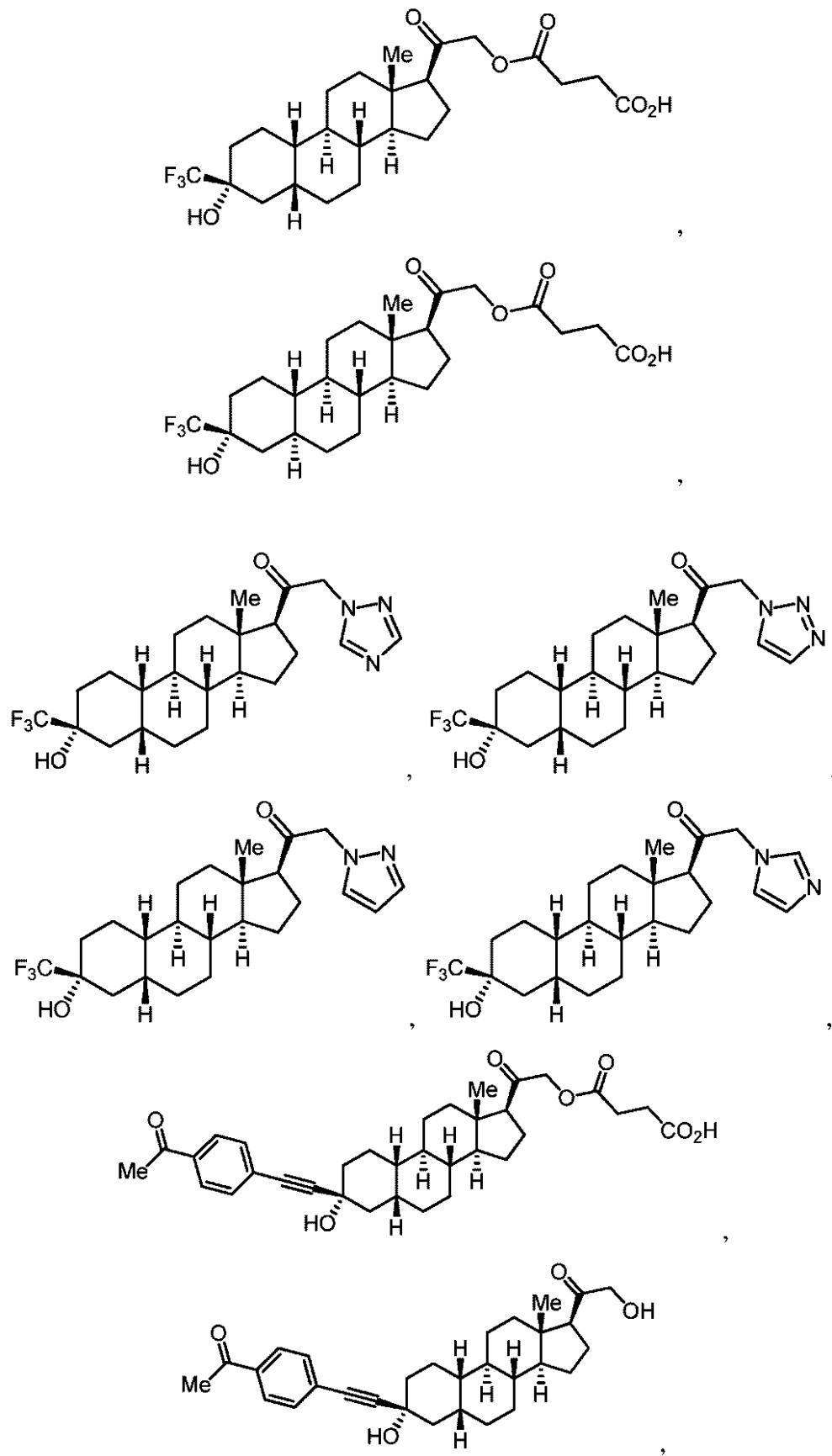
は、単結合または二重結合を表し、二重結合が環 B に存在する場合、 R^{6a} または R^{6b} の一方は、存在せず、単結合が環 B に存在する場合、C 5 における水素は、アルファ位またはベータ位であるが；

ただし、以下の化合物およびその塩：

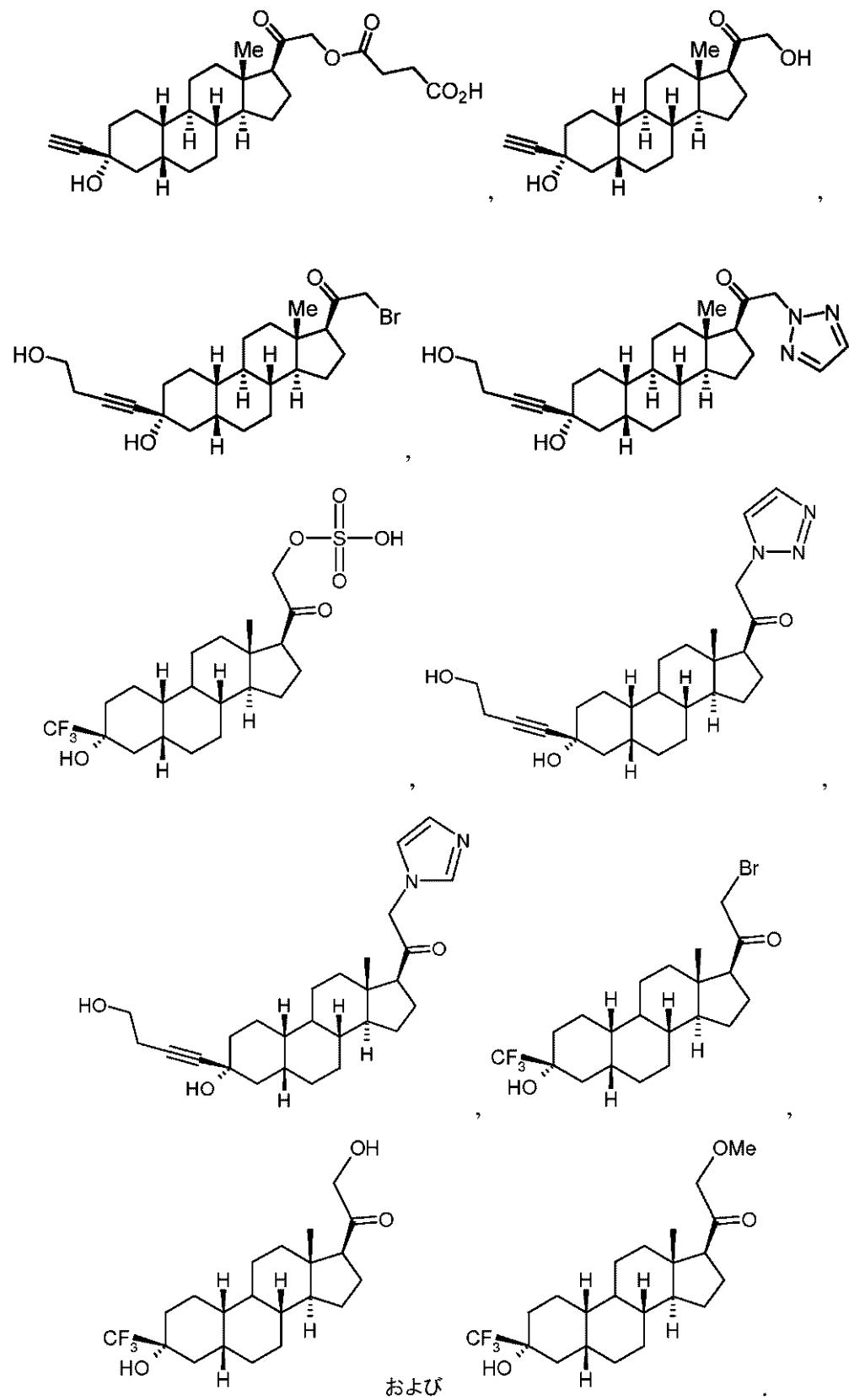
【化 1 2 8】



【化 1 2 9】



【化 1 3 0】

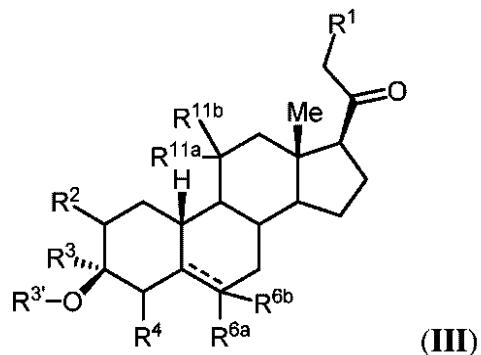


は、明確に排除される、式(I)の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 2】

式(III)の化合物：

【化131】



またはその薬学的に許容され得る塩であって；

式中：

R¹は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、-OR^{A1}、-SR^{A1}、-N(R^{A1})₂、-OC(=O)R^{A1}、-OC(=O)OR^{A1}、-OC(=O)SR^{A1}、-OC(=O)N(R^{A1})₂、-SC(=O)R^{A2}、-SC(=O)OR^{A1}、-SC(=O)SR^{A1}、-SC(=O)N(R^{A1})₂、-NHC(=O)R^{A1}、-NHC(=O)OR^{A1}、-NHC(=O)SR^{A1}、-NHC(=O)N(R^{A1})₂、-OS(=O)₂R^{A2}、-OS(=O)₂OR^{A1}、-S-S(=O)₂R^{A2}、-S-S(=O)₂OR^{A1}、-S(=O)R^{A2}、-SO₂R^{A2}または-S(=O)₂OR^{A1}であり、ここで、R^{A1}の各存在は、独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、硫黄保護基（硫黄原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、または2つのR^{A1}基が連結して、置換もしくは非置換の複素環式環もしくはヘテロアリール環を形成し；R^{A2}は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

R²は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、-OH、-OR^{B1}、-OC(=O)R^{B1}、-NH₂、-N(R^{B1})₂または-NR^{B1}C(=O)R^{B1}であり、ここで、R^{B1}の各存在は、独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、あるいは2つのR^{B1}基が連結して、置換または非置換の複素環式環を形成し；

R³は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

R^{3'}は、水素、-C(=O)R^{C1}、-C(=O)OR^{C1}、-C(=O)SR^{C1}、-C(=O)N(R^{C1})₂、-S(=O)₂R^{C2}、-S(=O)₂OR^{C1}、-P(=O)₂R^{C2}、-P(=O)₂OR^{C1}、-P(=O)(OR^{C1})₂、-P(=O)(RC^{C2})₂または-P(=O)(RC^{C2})(OR^{C1})であり、ここで、R^{C1}は、水

素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、硫黄保護基（硫黄原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、あるいは2つのR^{C₁}基が連結して、置換または非置換の複素環式環を形成し；R^{C₂}は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

R⁴は、水素、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換カルボシクリル、置換または非置換ヘテロシクリル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリールから選択され；

R^{6_a}およびR^{6_b}の各々は、独立して、水素、ハロ、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニルまたは置換もしくは非置換アルキニルであるか、あるいはR^{6_a}およびR^{6_b}は、連結して、オキソ(=O)基を形成し；

R^{1₁_a}およびR^{1₁_b}の各々は、独立して、水素、ハロ、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、-OH、-OR^{D₁}、-OC(=O)R^{D₁}、-NH₂、-N(R^{D₁})₂または-NR^{D₁}C(=O)R^{D₁}であり、ここで、R^{D₁}の各存在は、独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、あるいは2つのR^{D₁}基が連結して、置換または非置換の複素環式環を形成するか；またはR^{1₁_a}およびR^{1₁_b}は、連結して、オキソ(=O)基を形成し；

式中、

【化132】

は、単結合または二重結合を表し、二重結合が環Bに存在する場合、R^{6_a}またはR^{6_b}の一方は存在せず、単結合が環Bに存在する場合、C5における水素は、アルファ位またはベータ位である、

式(III)の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項3】

R¹が、水素、ハロゲン、-OR^{A₁}、-SR^{A₁}、-N(R^{A₁})₂、-OC(=O)R^{A₁}、-OC(=O)OR^{A₁}、-OC(=O)SR^{A₁}、-OC(=O)N(R^{A₁})₂、-SC(=O)R^{A₂}、-SC(=O)OR^{A₁}、-SC(=O)SR^{A₁}、-SC(=O)N(R^{A₁})₂、-NHC(=O)R^{A₁}、-NHC(=O)OR^{A₁}、-NHC(=O)N(R^{A₁})₂、-OS(=O)₂R^{A₂}、-OS(=O)₂OR^{A₁}、-S-S(=O)₂R^{A₂}、-S-S(=O)₂OR^{A₁}、-S(=O)R^{A₂}、-SO₂R^{A₂}または-S(=O)₂OR^{A₁}である、請求項1または2に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項4】

R¹が、水素、ハロゲン、-OR^{A₁}、-N(R^{A₁})₂、-S-S(=O)₂R^{A₂}、置換もしくは非置換ヘテロシクリルまたは置換もしくは非置換ヘテロアリールである、請求項1または2に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項5】

R²が、水素、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、-OH、-OR^{B₁}、-OC(=O)R^{B₁}、-NH₂、-N(R^{B₁})₂または-NR^{B₁}C(=O)R^{B₁}である、請求

項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

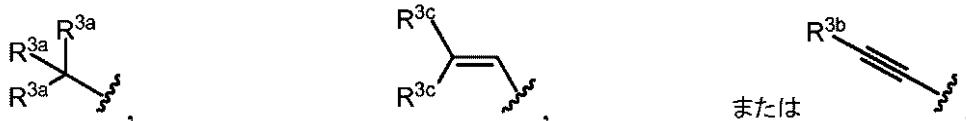
【請求項 6】

R³ が、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニルまたは置換もしくは非置換アルキニルである、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 7】

R³ が、式：

【化 1 3 3】



の基であり、式中、R^{3 a} の各存在は、水素、ハロまたは -OR^{F 1} であり、R^{F 1} は、置換または非置換アルキルであり；R^{3 b} および R^{3 c} の各存在は、独立して、水素、ハロまたは置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリルまたは置換もしくは非置換ヘテロシクリルである、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 8】

R³ が、水素である、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 9】

R⁴ が、水素である、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 10】

R^{6 a} および R^{6 b} の各々が、独立して、水素、ハロ、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニルまたは置換もしくは非置換アルキニルであるか、あるいは R^{6 a} および R^{6 b} は、連結して、オキソ(=O)基を形成する、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 11】

R^{6 a} と R^{6 b} の両方が、水素である、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 12】

R^{6 a} および R^{6 b} の一方が、非水素基である、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 13】

R^{6 a} が、非水素アルファ基である、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 14】

R^{6 a} が、非水素ベータ基である、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 15】

R^{6 a} が、ハロまたはアルキルであり、R^{6 b} が、水素である、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 16】

R^{6 a} および R^{6 b} が、両方ともハロである、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 17】

R^{6 a} および R^{6 b} が、両方ともアルキルである、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 18】

R^{6a} および R^{6b} が、連結して、オキソ基を形成する、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 19】

R¹¹^a および R¹¹^b の各々が、独立して、水素、-OH、-OR^D¹、-OC(=O)R^D¹、-NH₂、-N(R^D¹)₂ もしくは -NR^D¹C(=O)R^D¹ であるか、または R¹¹^a および R¹¹^b が、連結して、オキソ(=O)基を形成する、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 20】

R^{1-1a} と R^{1-1b} の両方が、水素である、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 21】

R^{1-1a} および R^{1-1b} の一方が、非水素基である、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

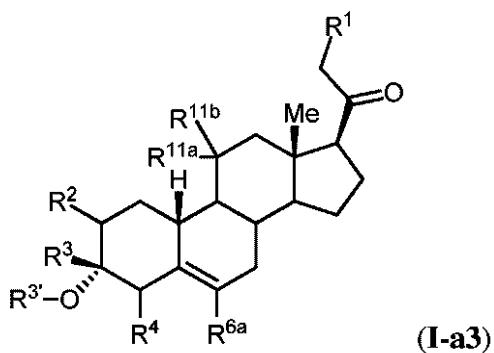
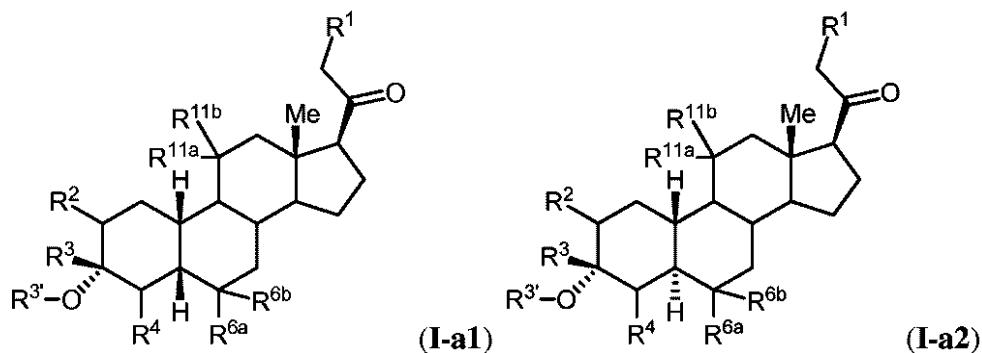
【請求項 2 2】

R^{1-1a} および R^{1-1b} が、連結して、オキソ基を形成する、請求項 1 または 2 に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項 2 3】

前記式(I)の化合物が、式(I-a1)、(I-a2)もしくは(I-a3)：

【化 1 3 4】

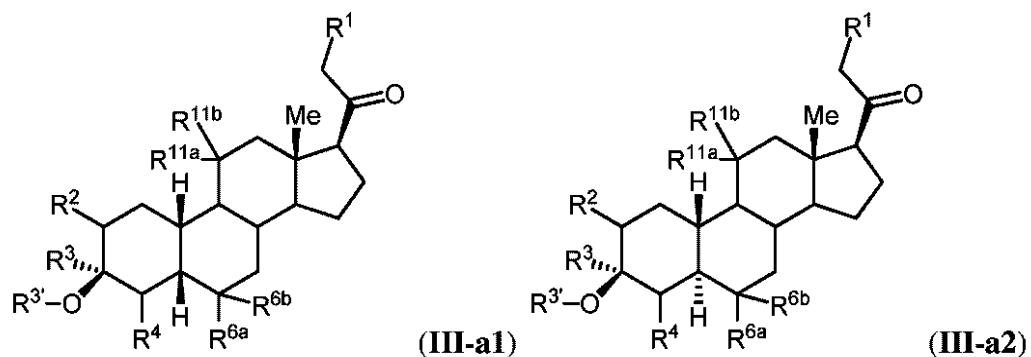


の化合物である、請求項1に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

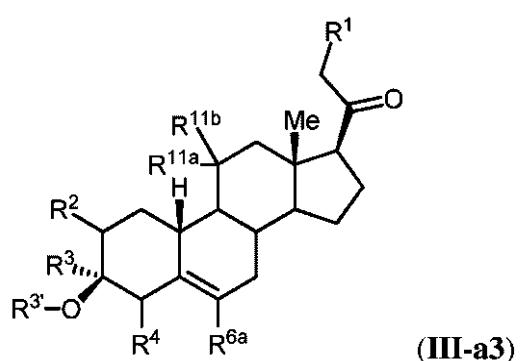
【請求項 24】

式 (I I I) の化合物が、式 (I I I - a 1) 、 (I I I - a 2) もしくは (I I I - a 3) :

【化135】



【化136】

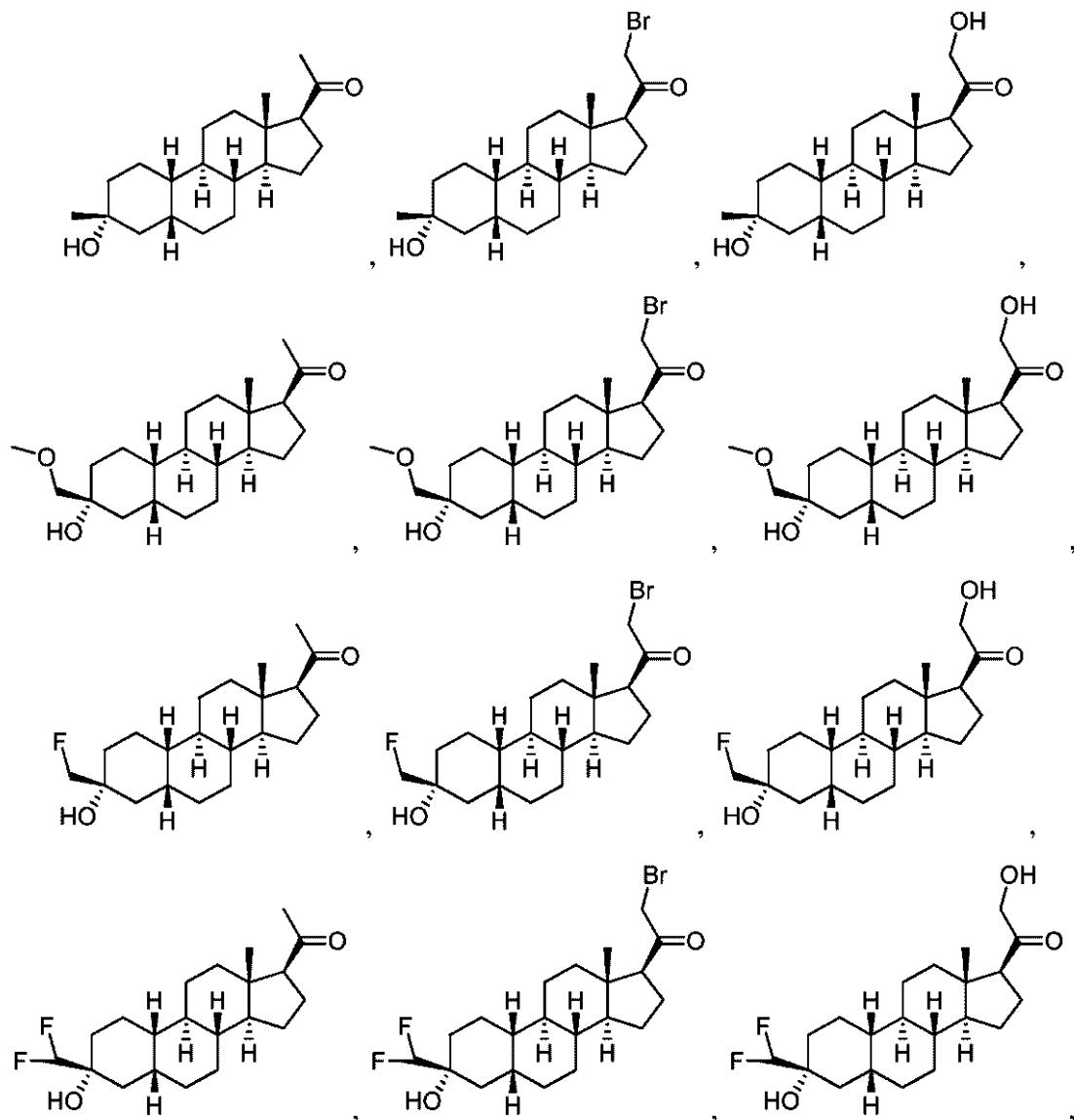


の化合物である、請求項2に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

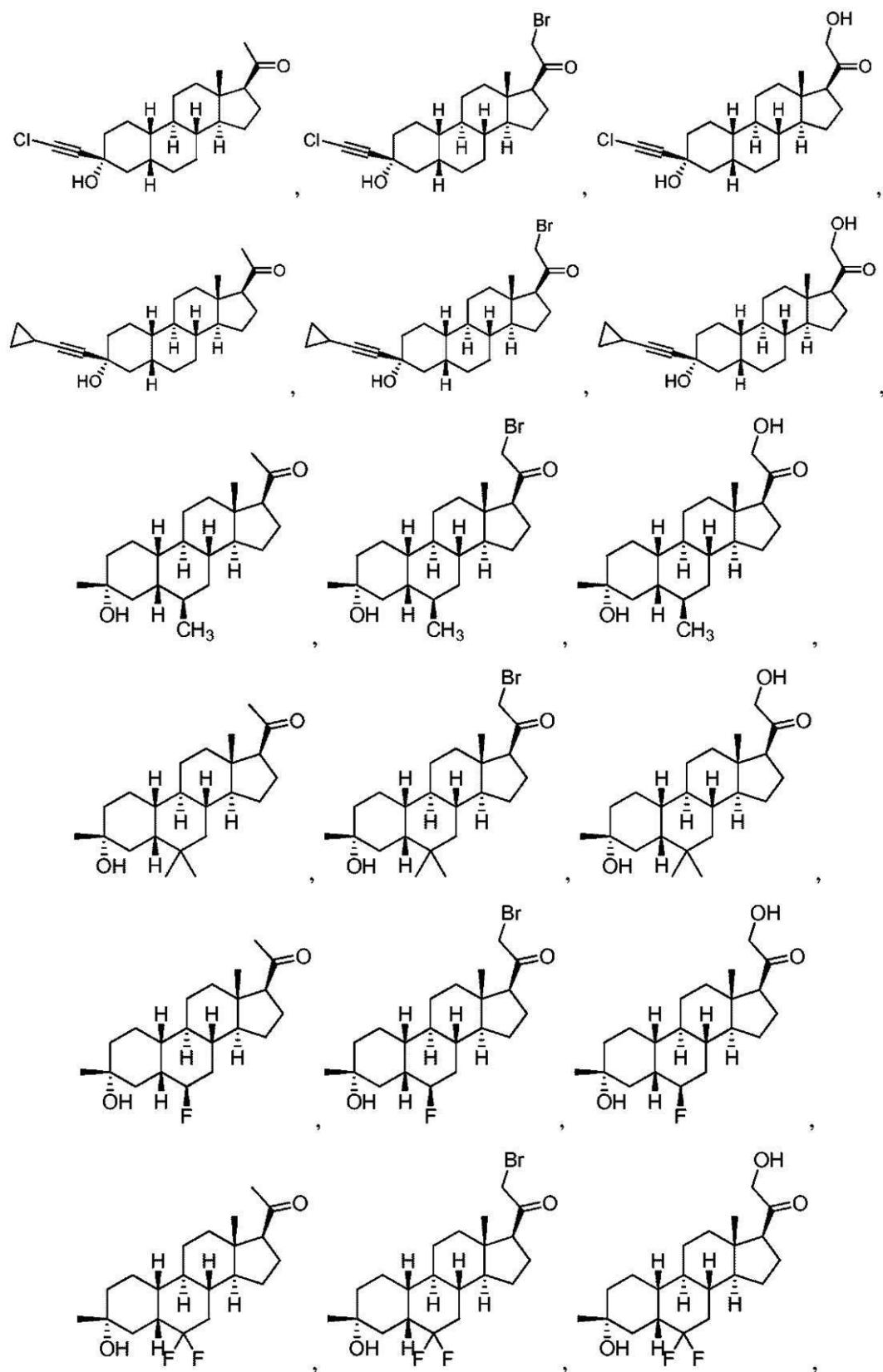
【請求項25】

前記化合物が：

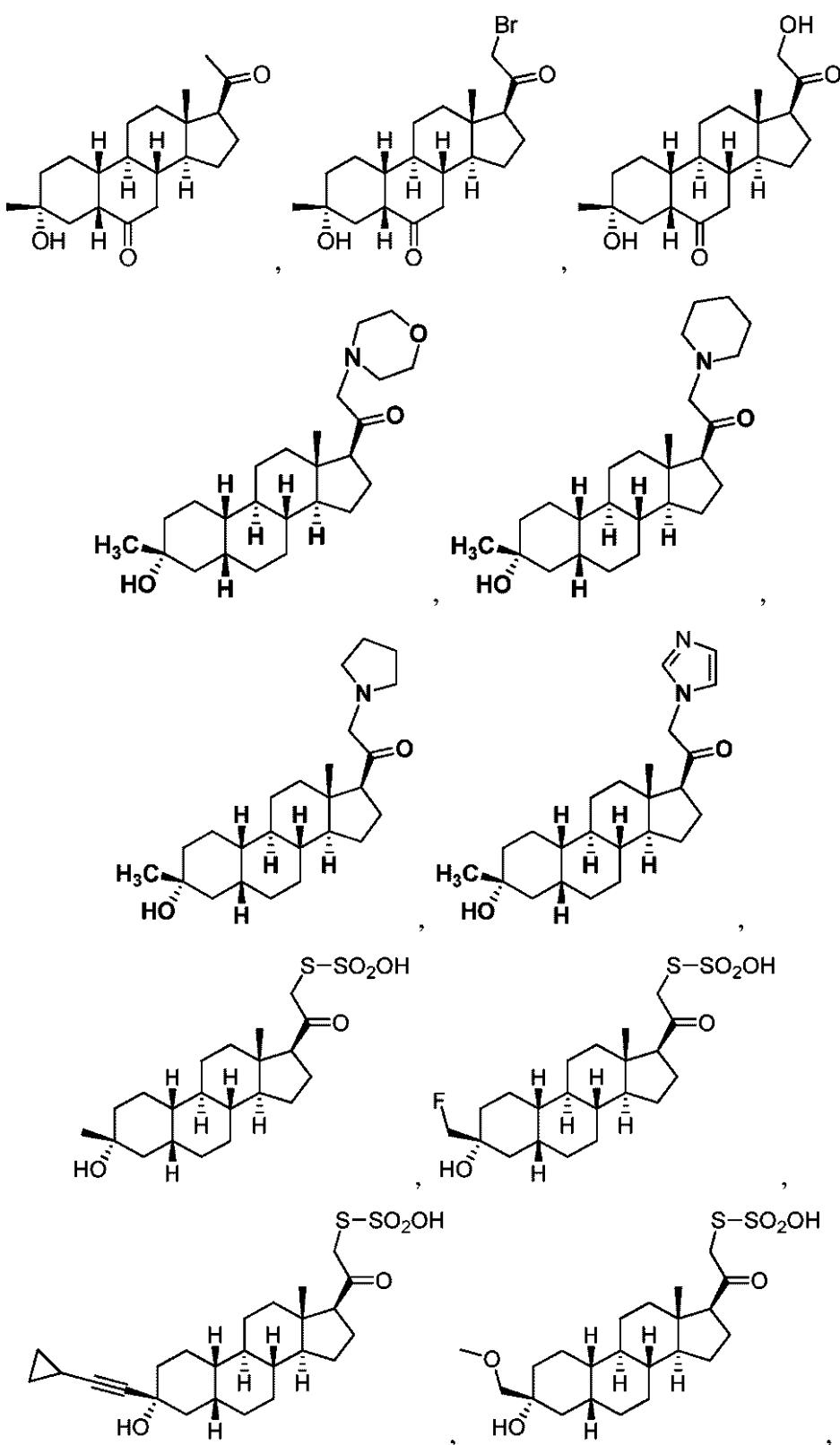
【化 1 3 7】



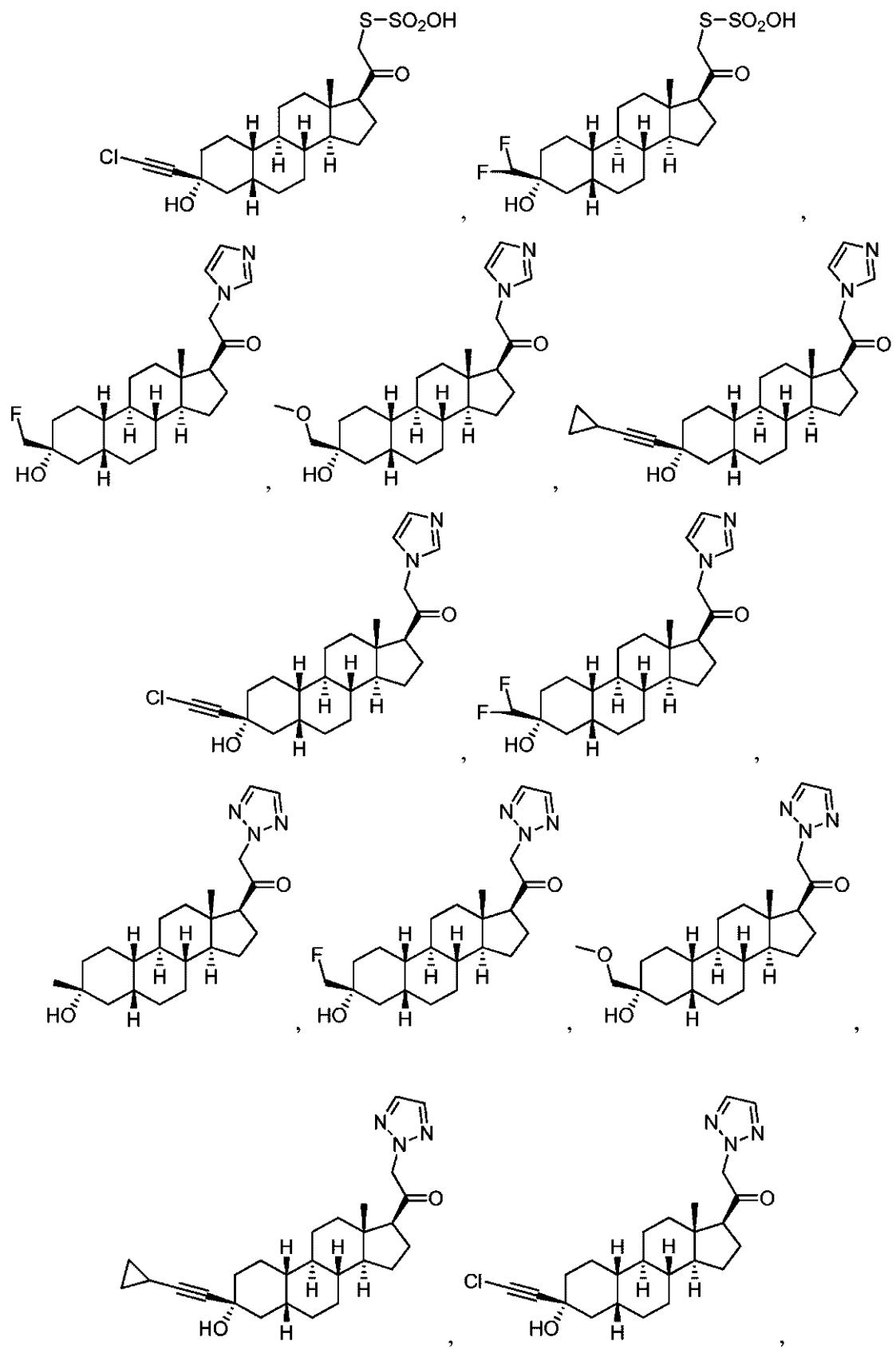
【化 1 3 8】



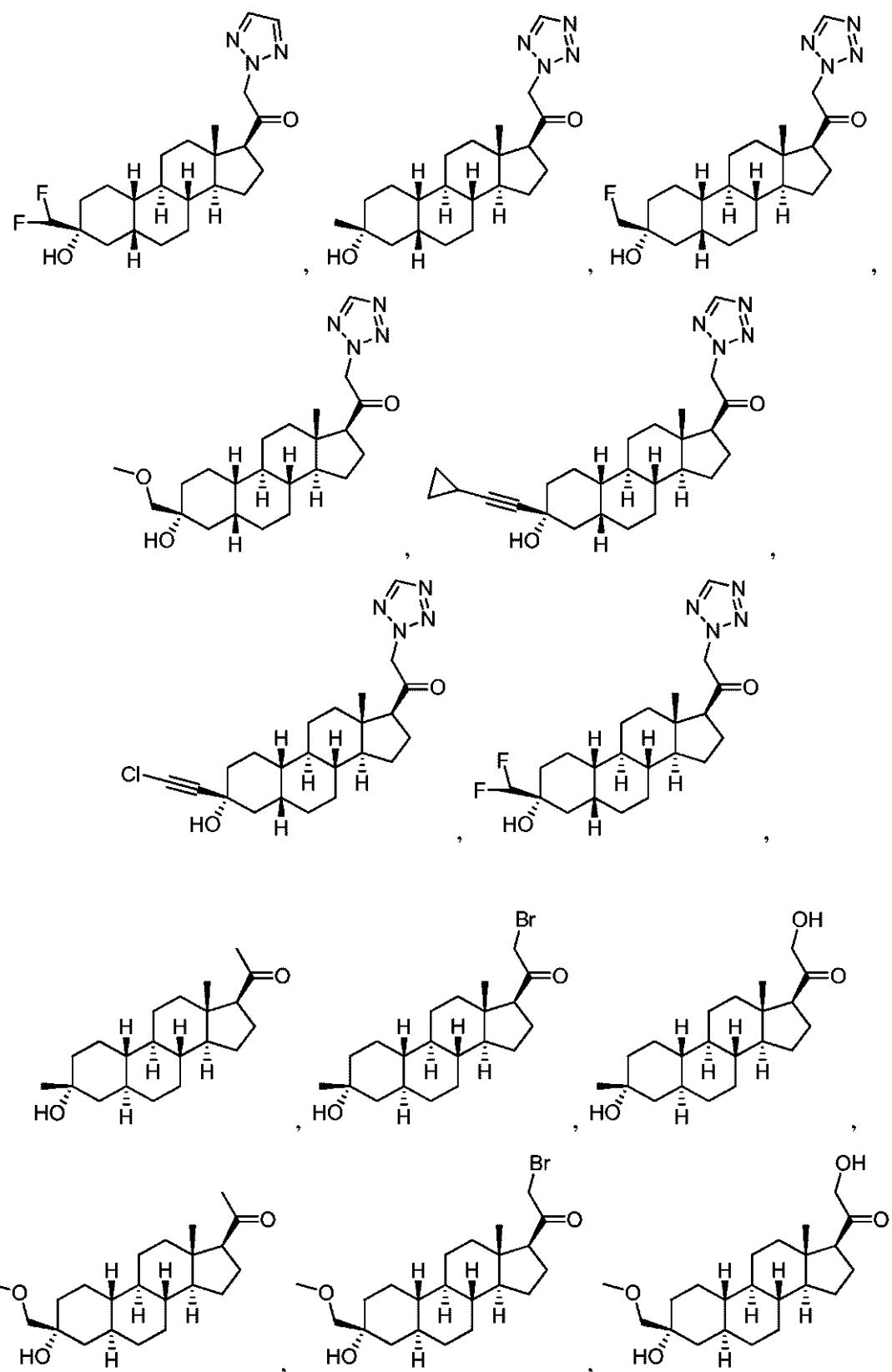
【化 1 3 9】



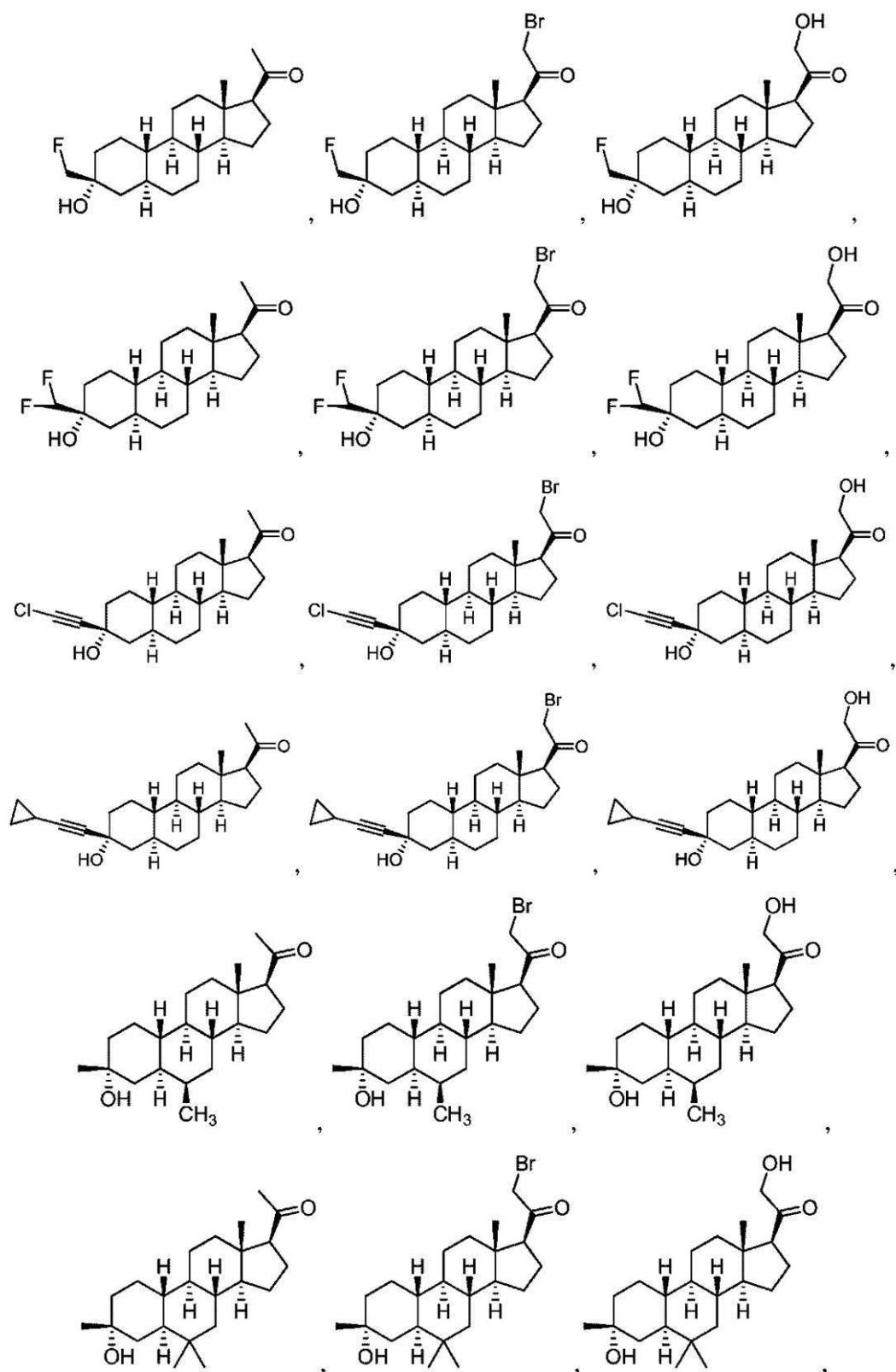
【化 1 4 0】



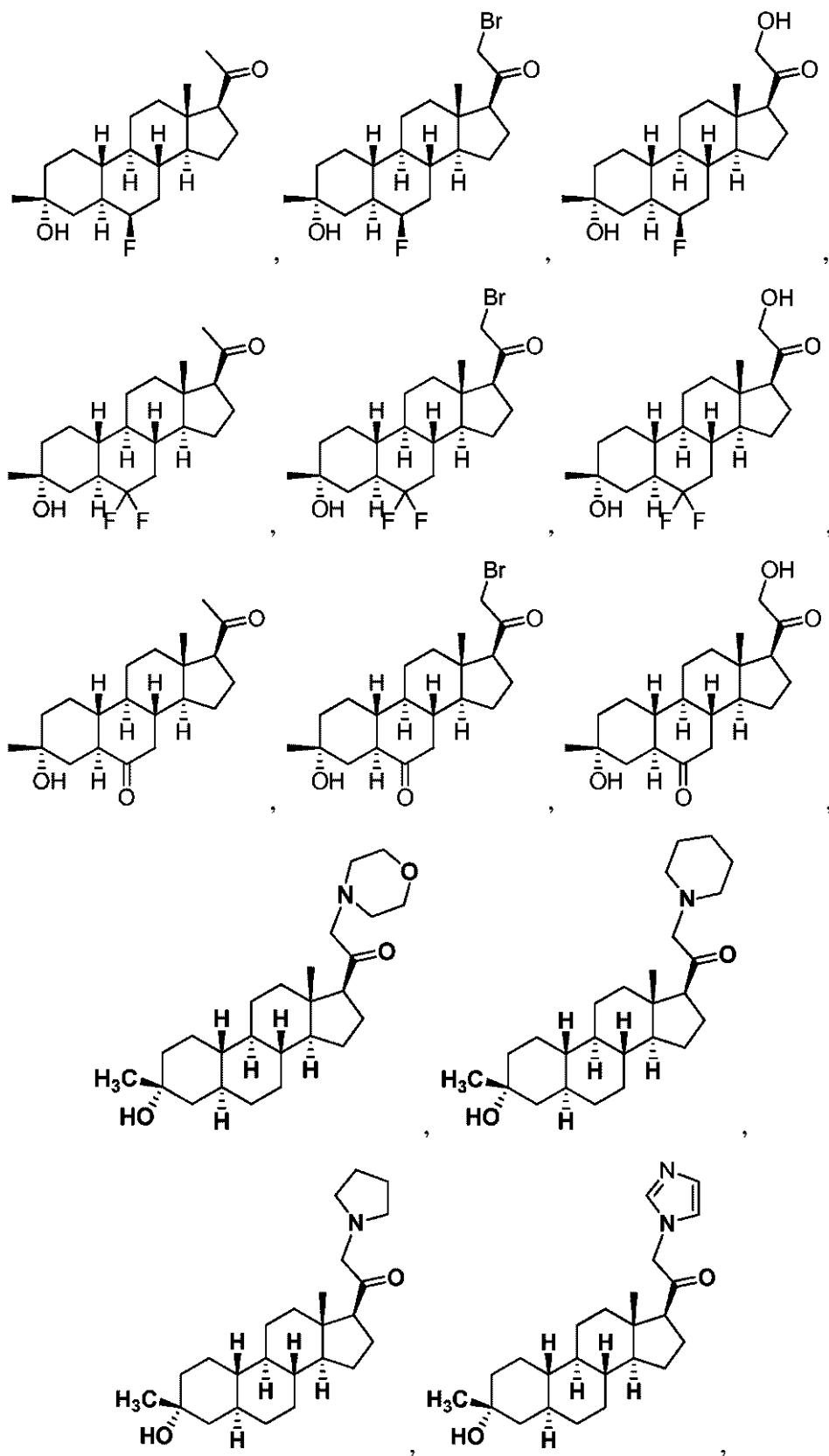
【化 1 4 1】



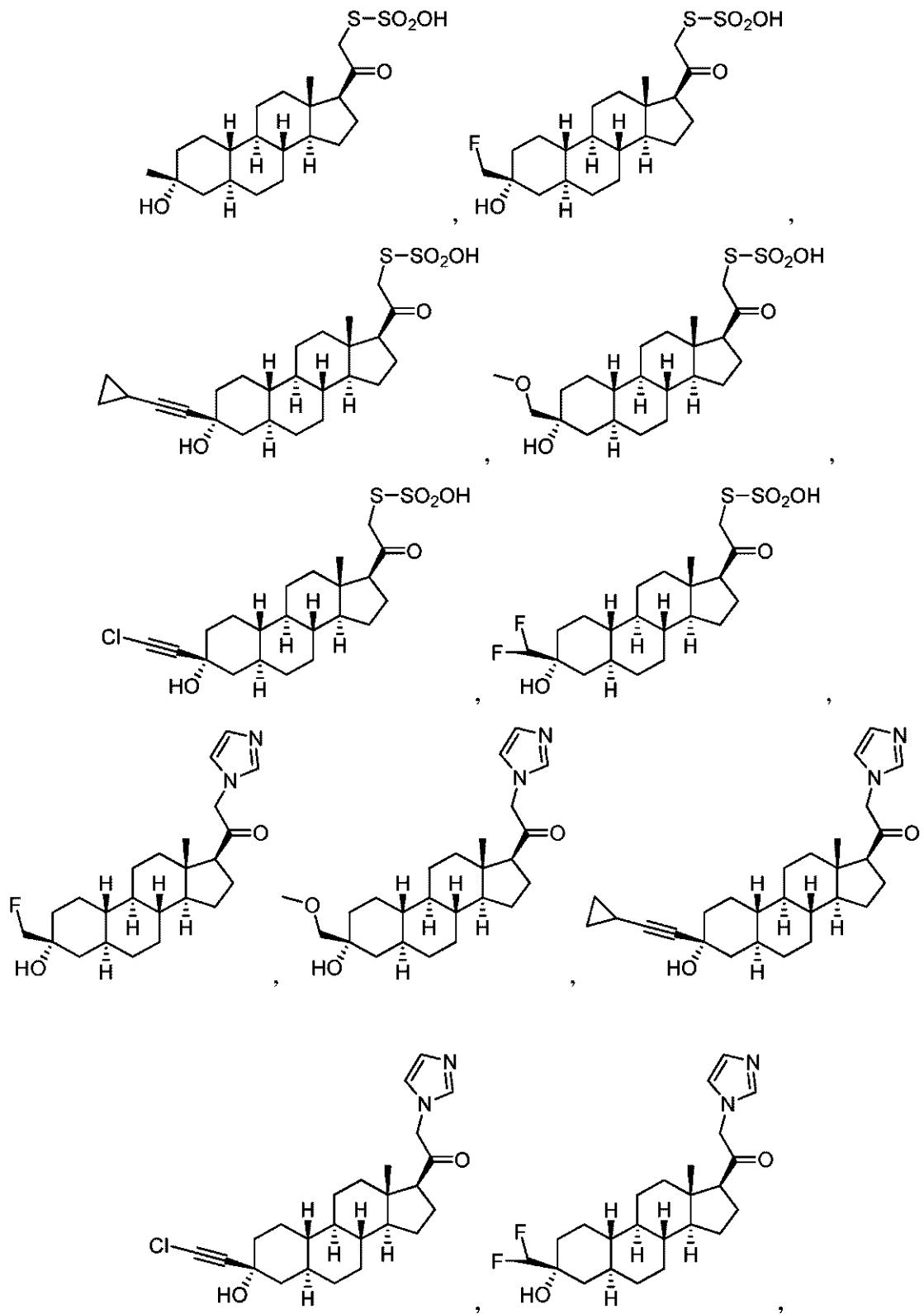
【化 1 4 2】



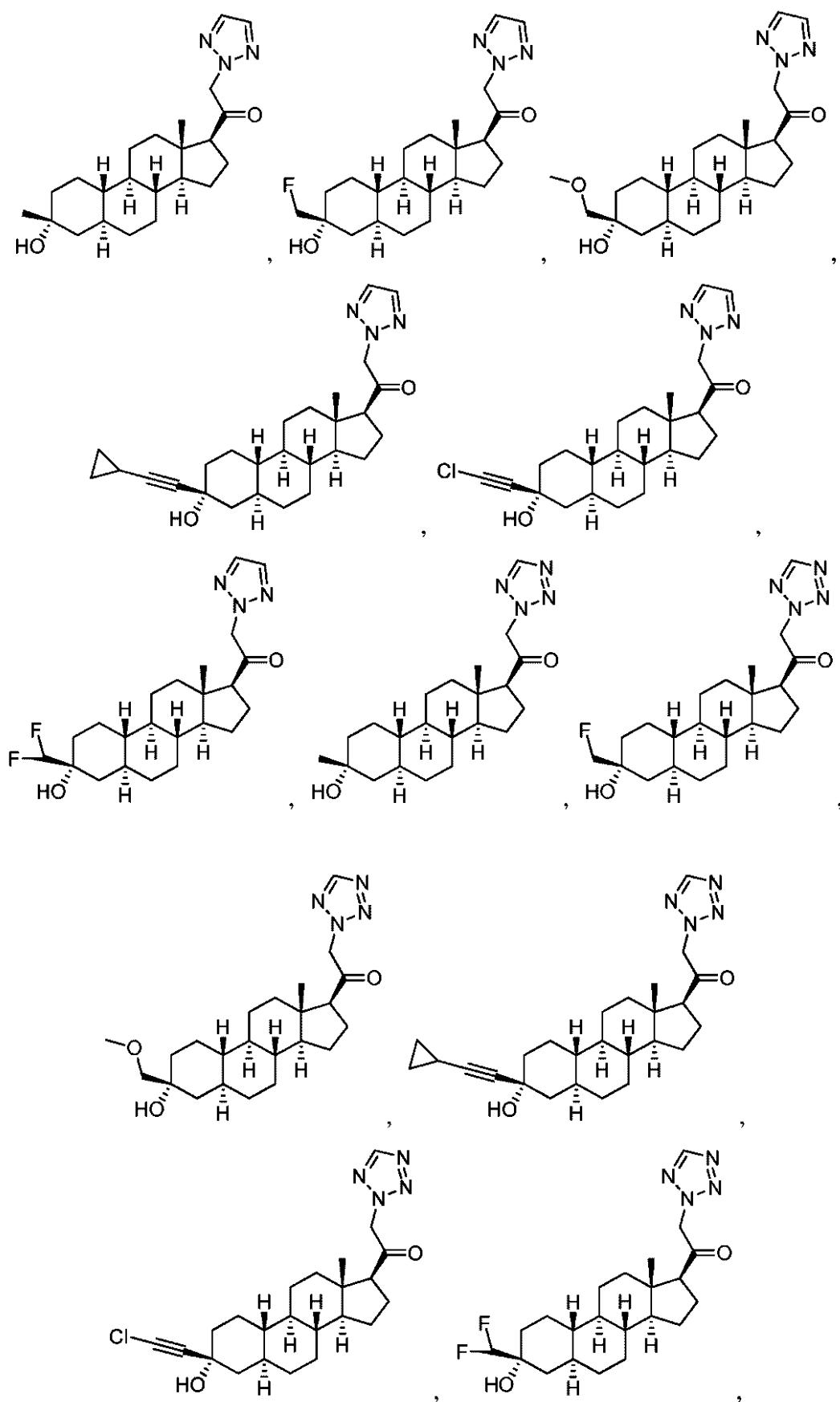
【化 1 4 3】



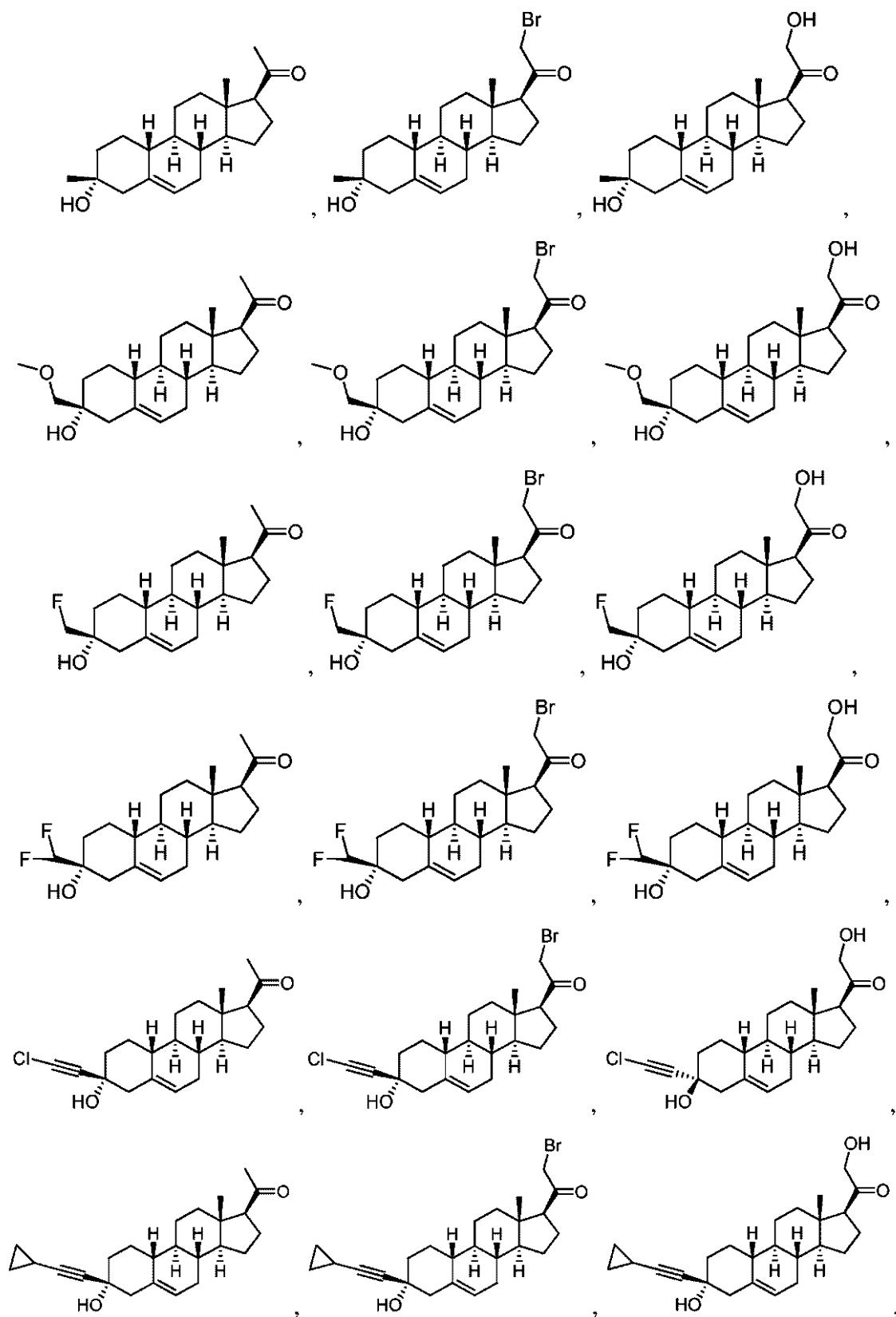
【化 1 4 4】



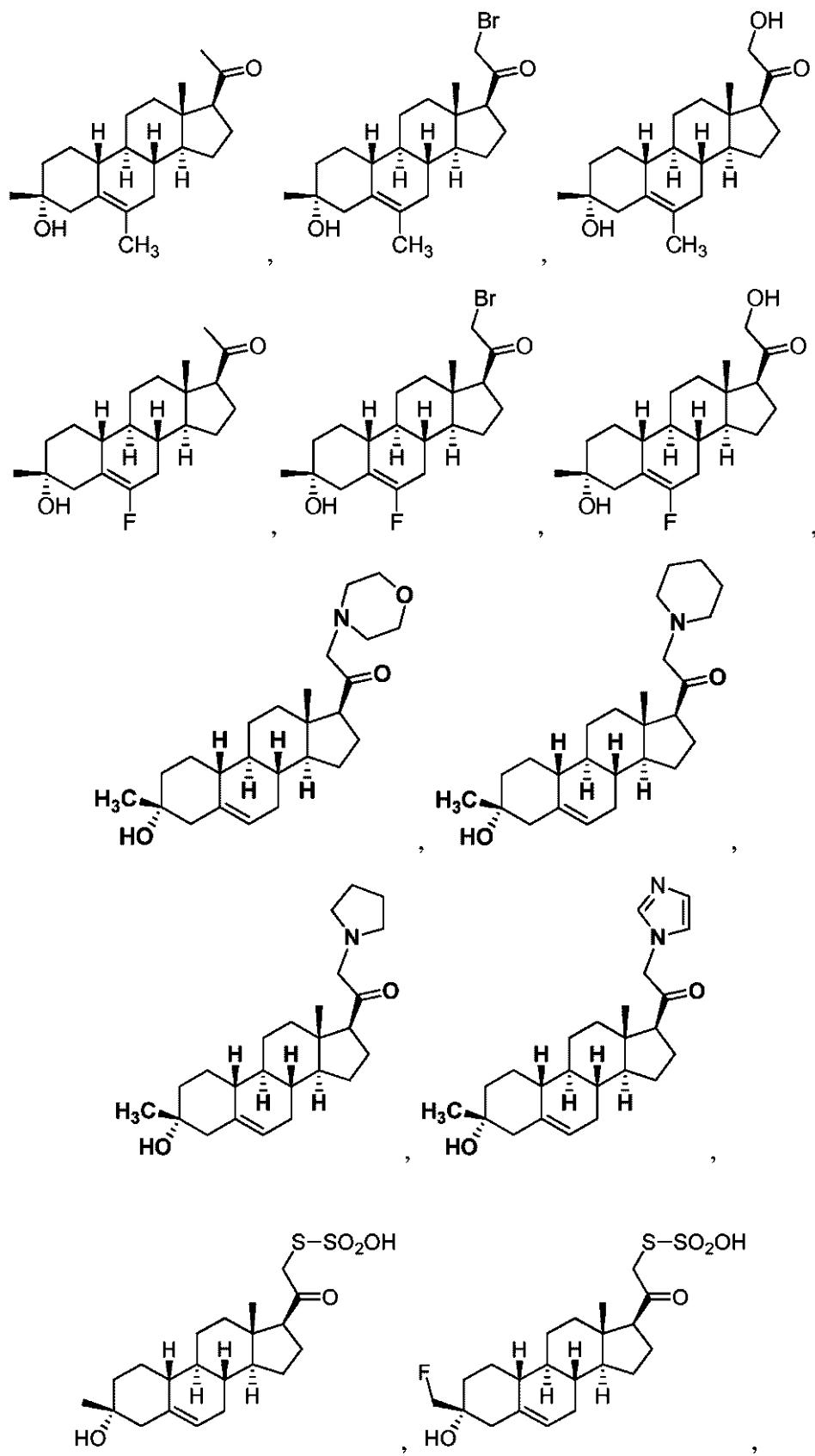
【化 1 4 5】



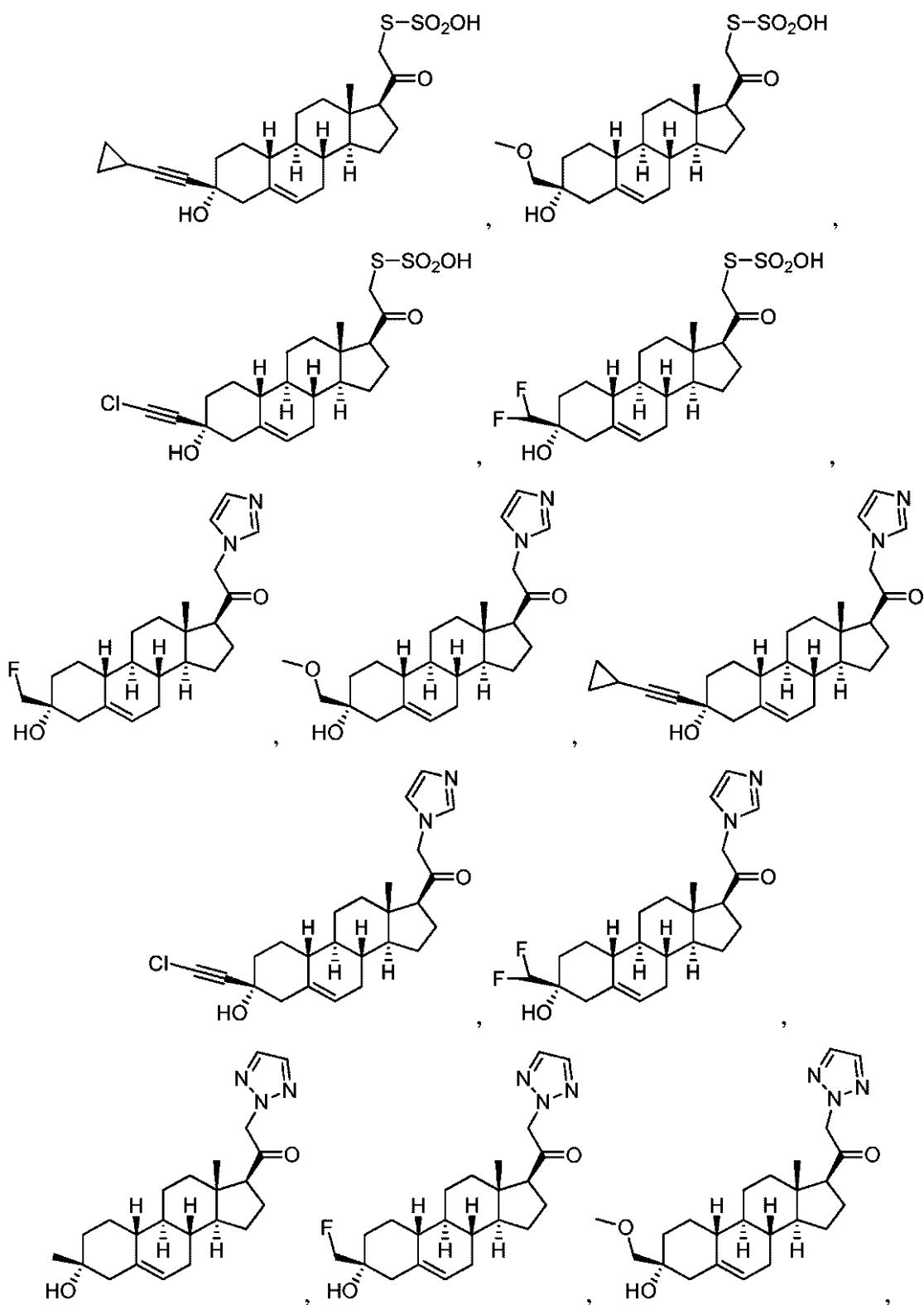
【化 1 4 6】



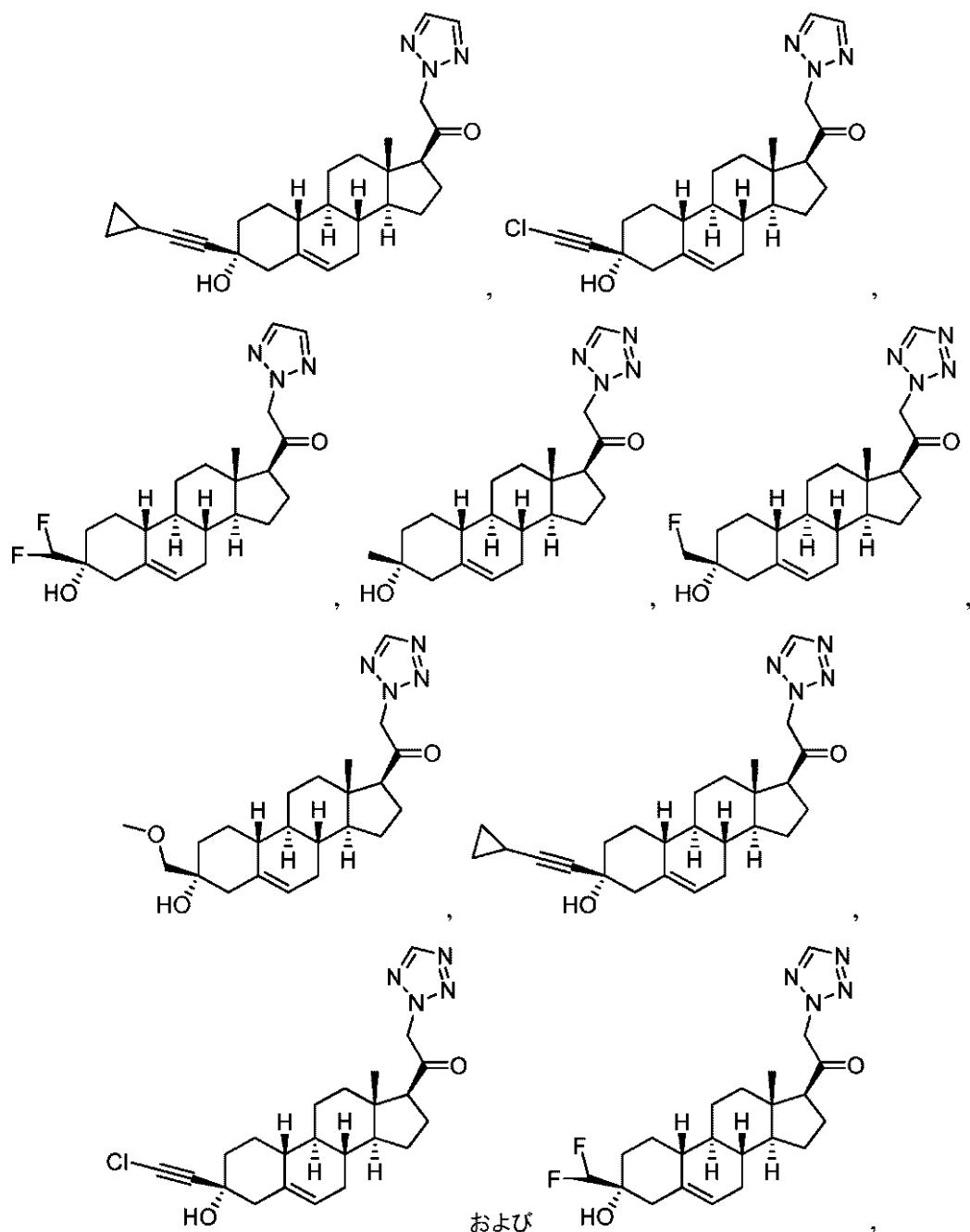
【化 1 4 7】



【化 1 4 8】



【化149】

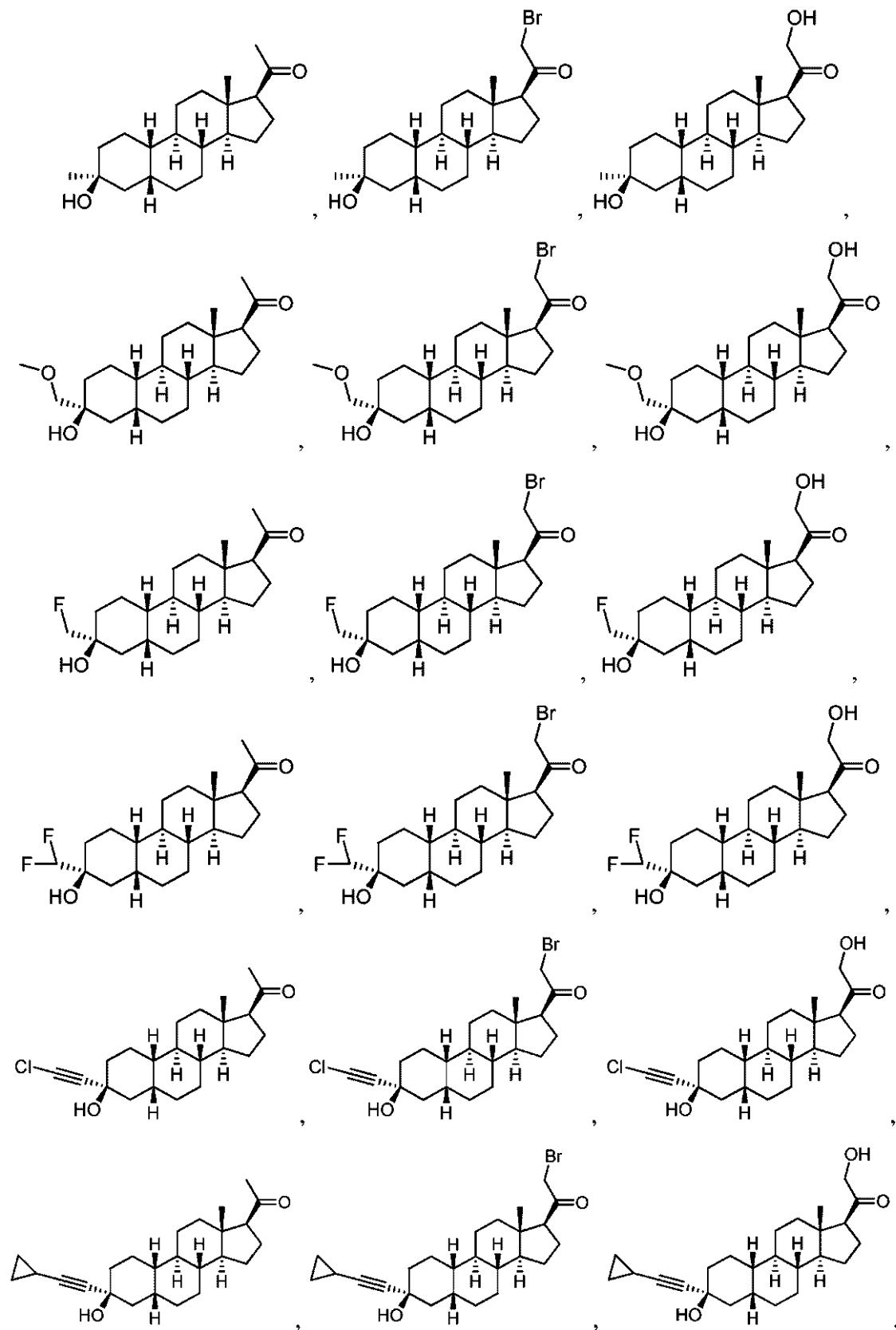


からなる群より選択される、請求項1に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

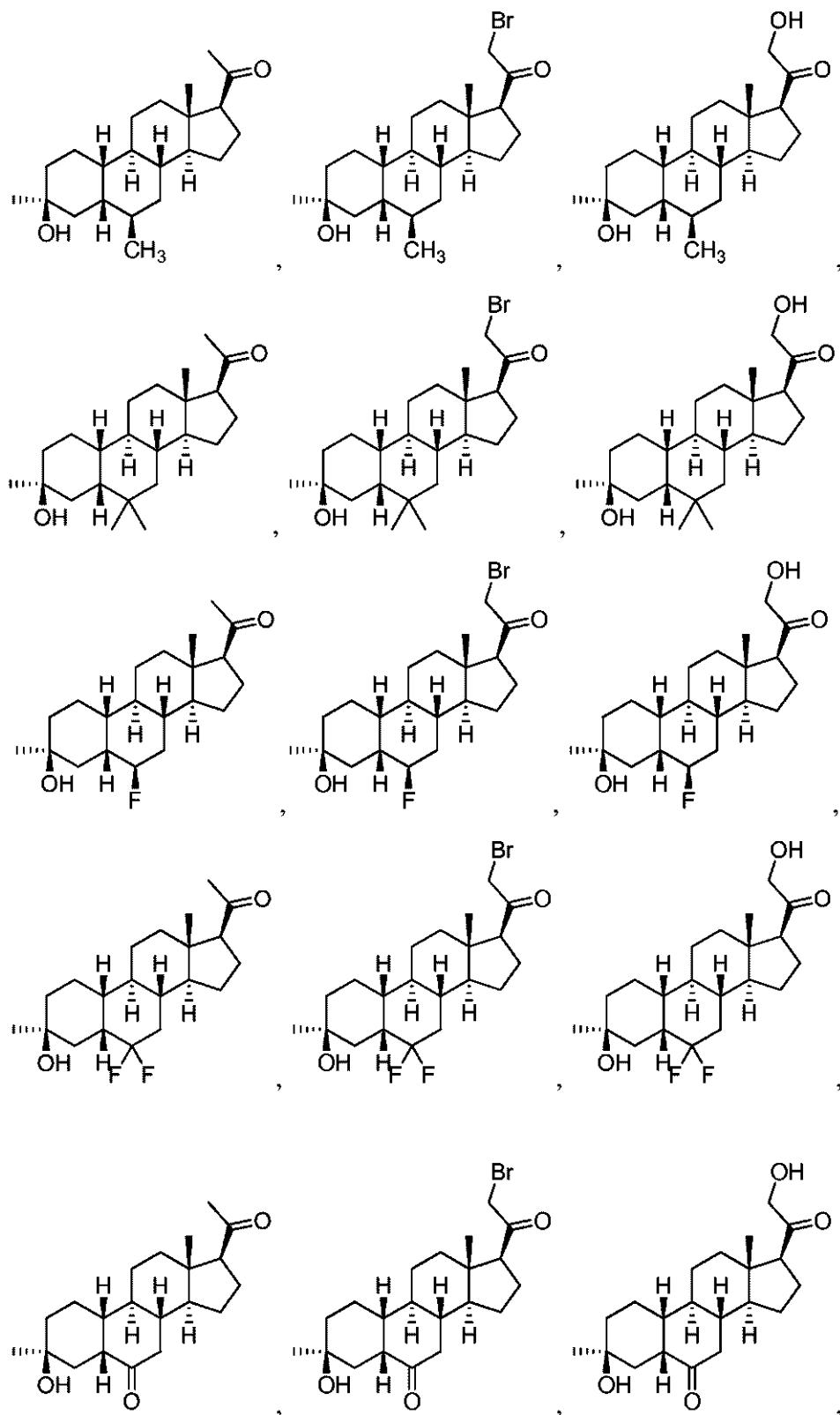
【請求項26】

前記化合物が：

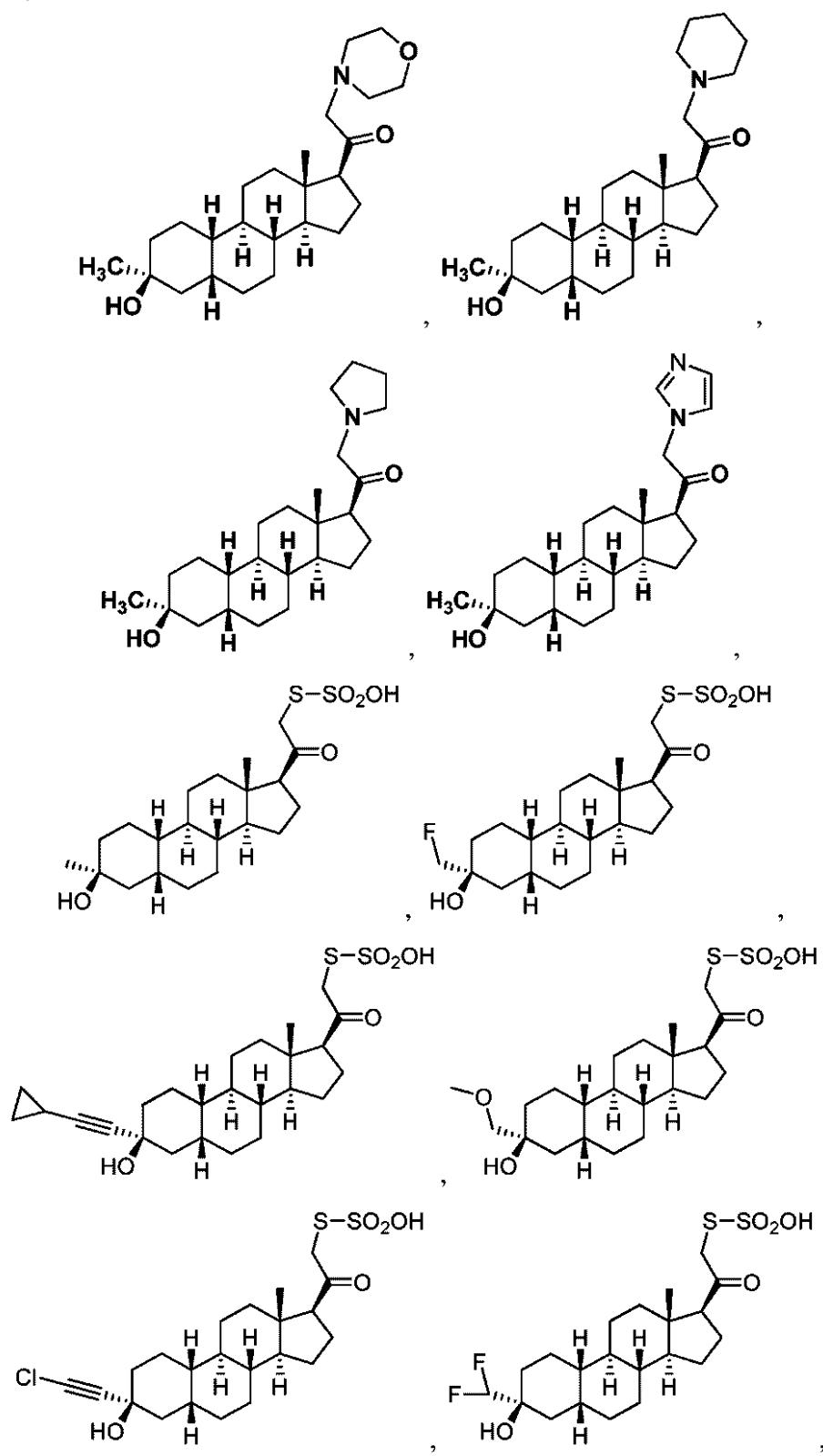
【化 1 5 0】



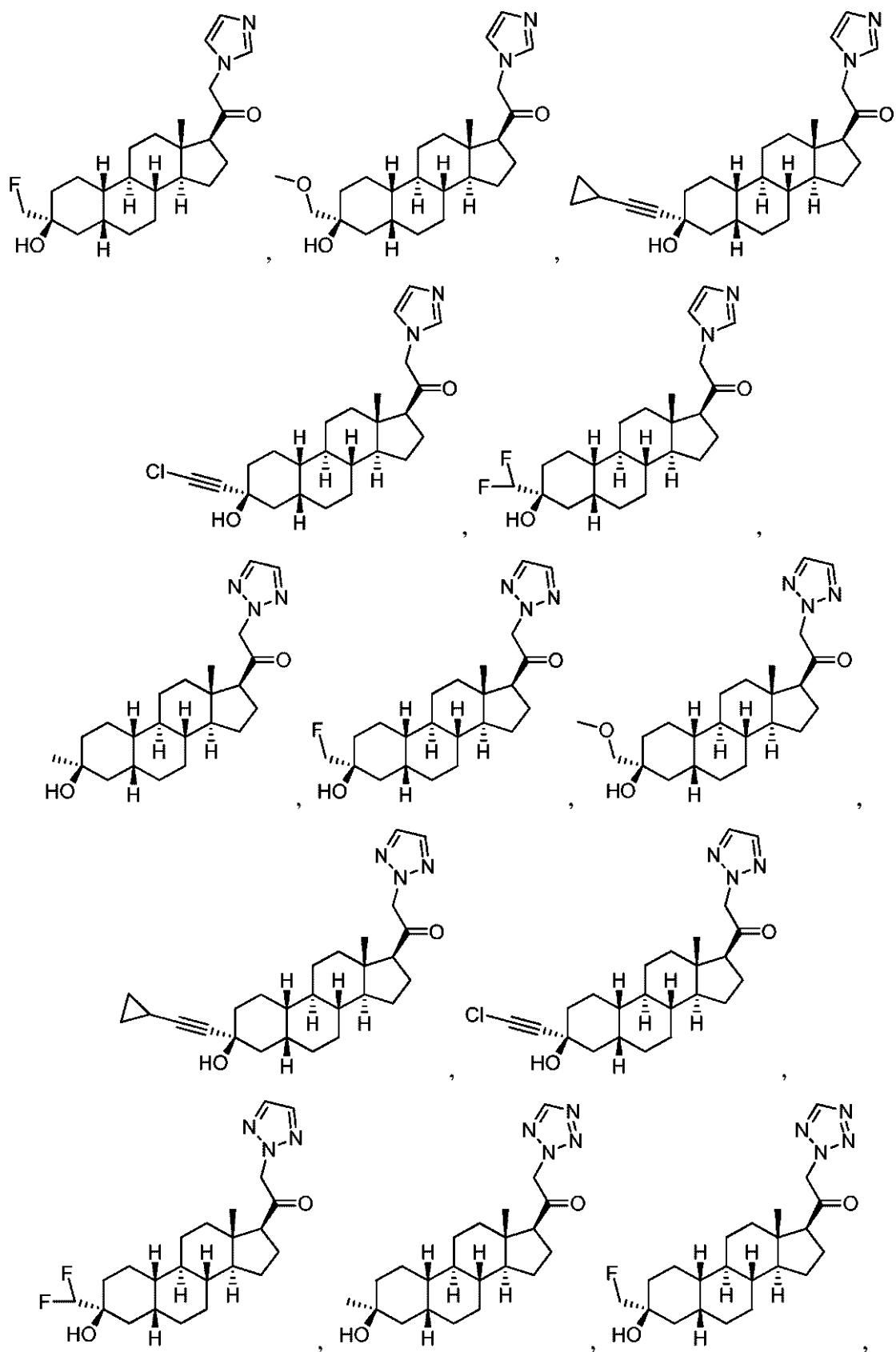
【化 151】



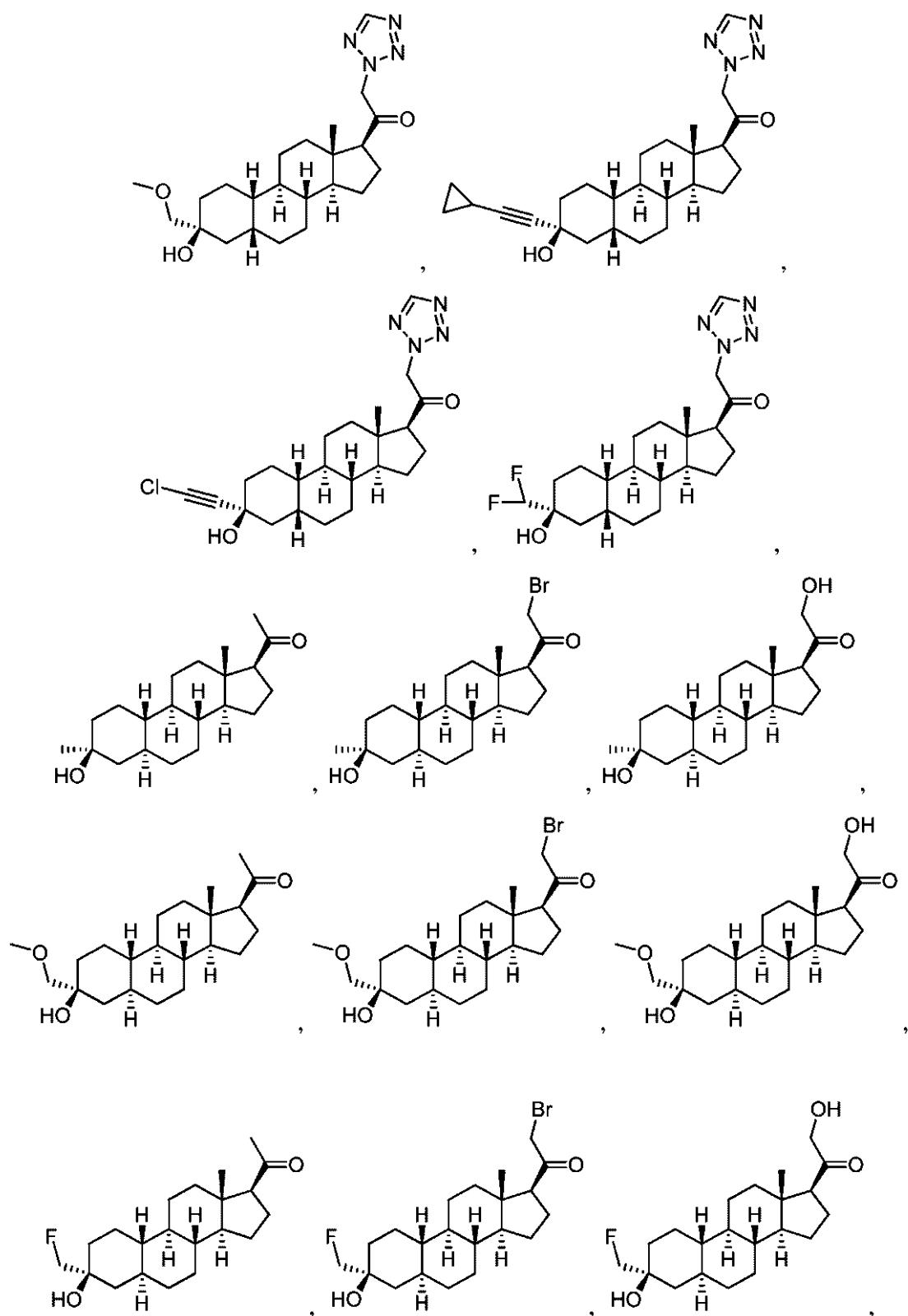
【化 1 5 2】



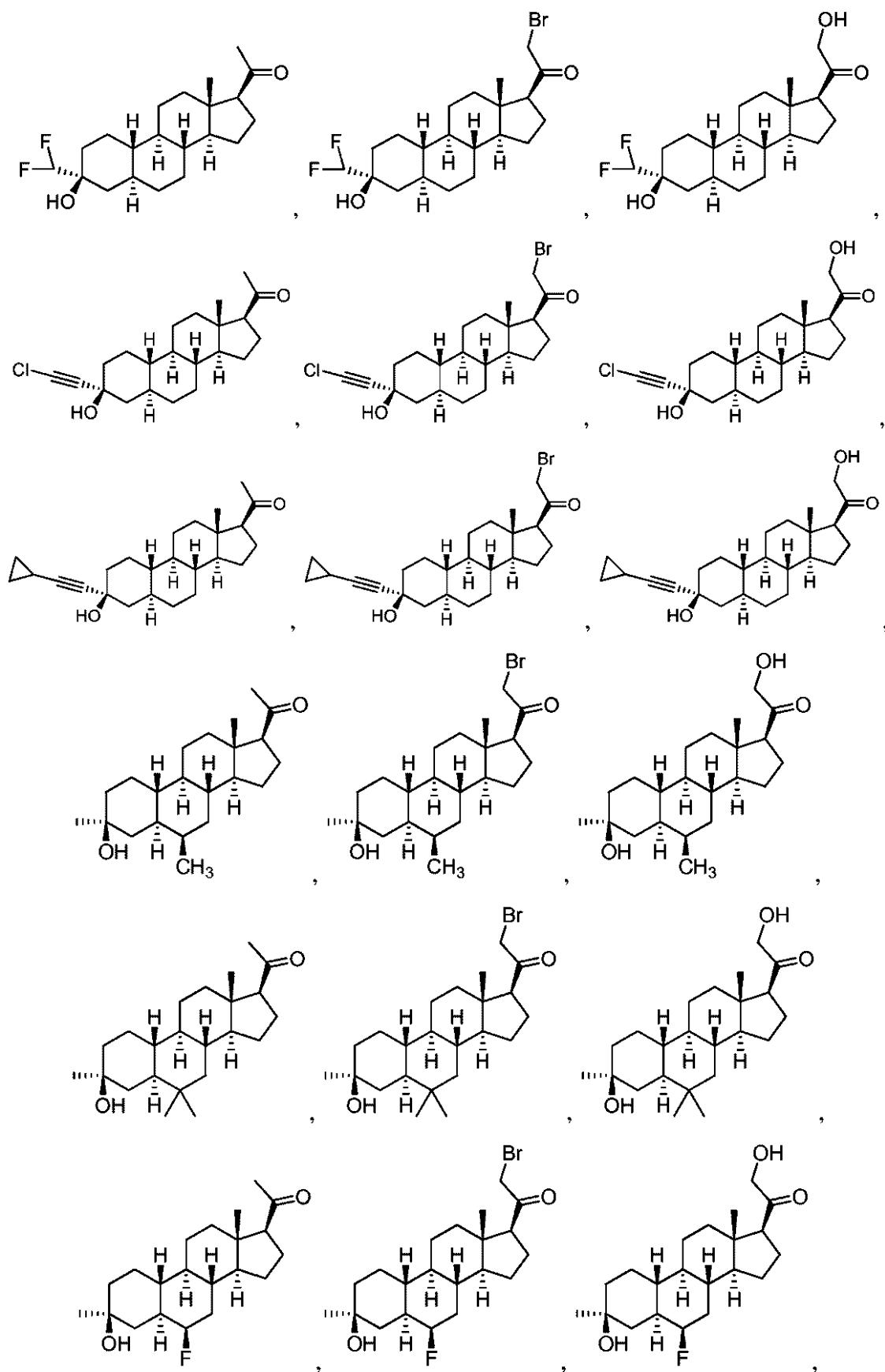
【化 1 5 3】



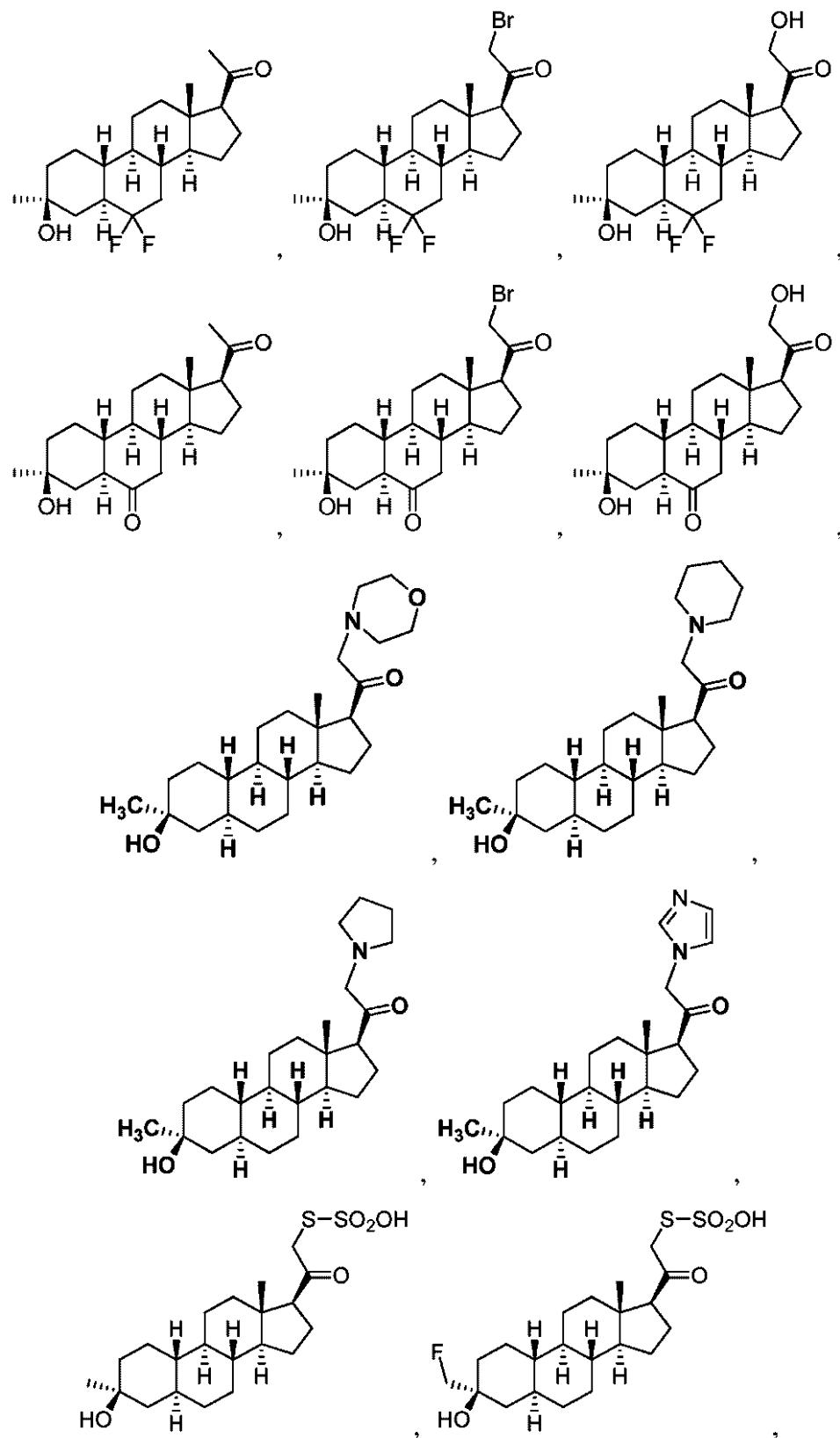
【化 1 5 4】



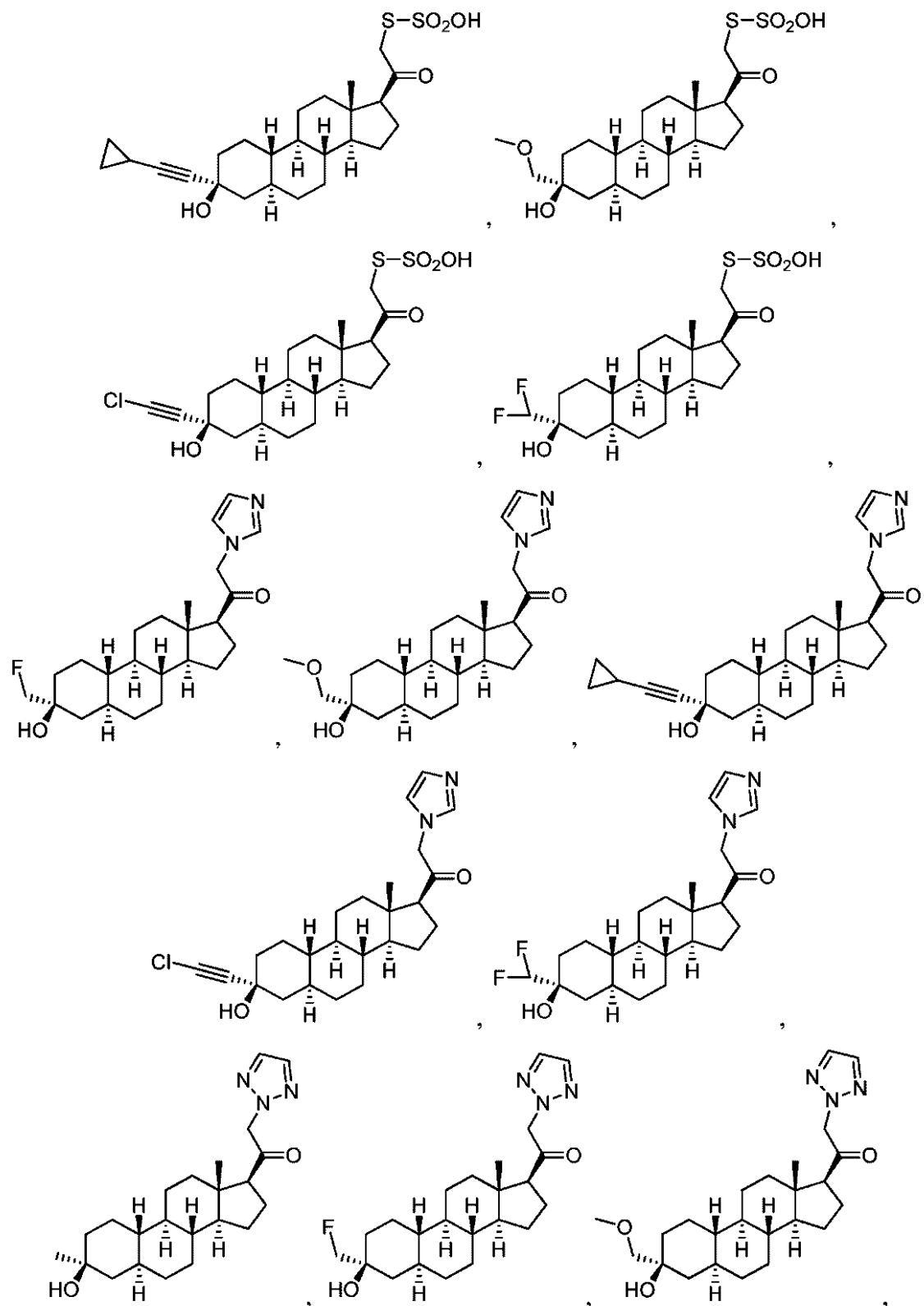
【化 1 5 5】



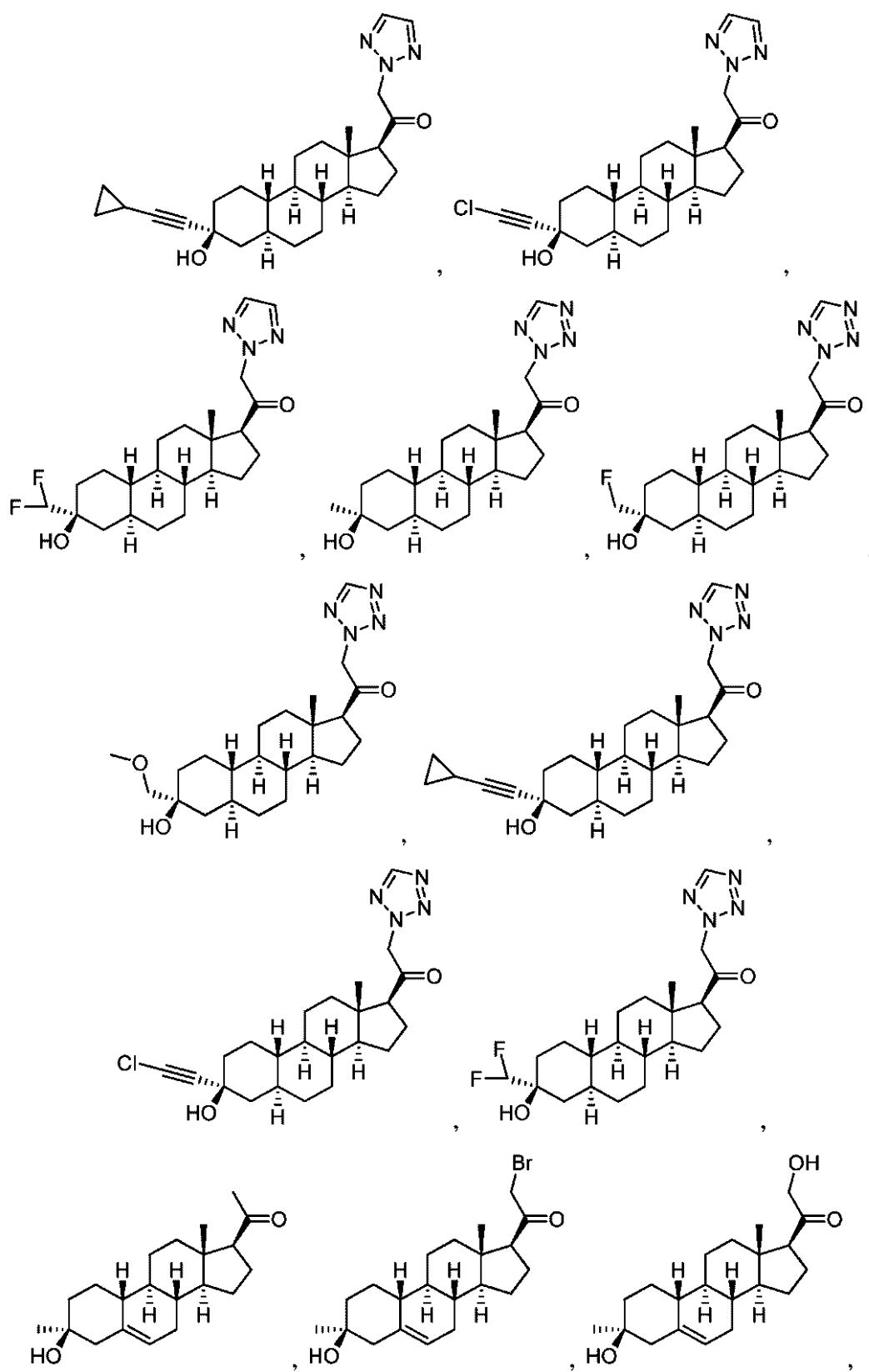
【化 1 5 6】



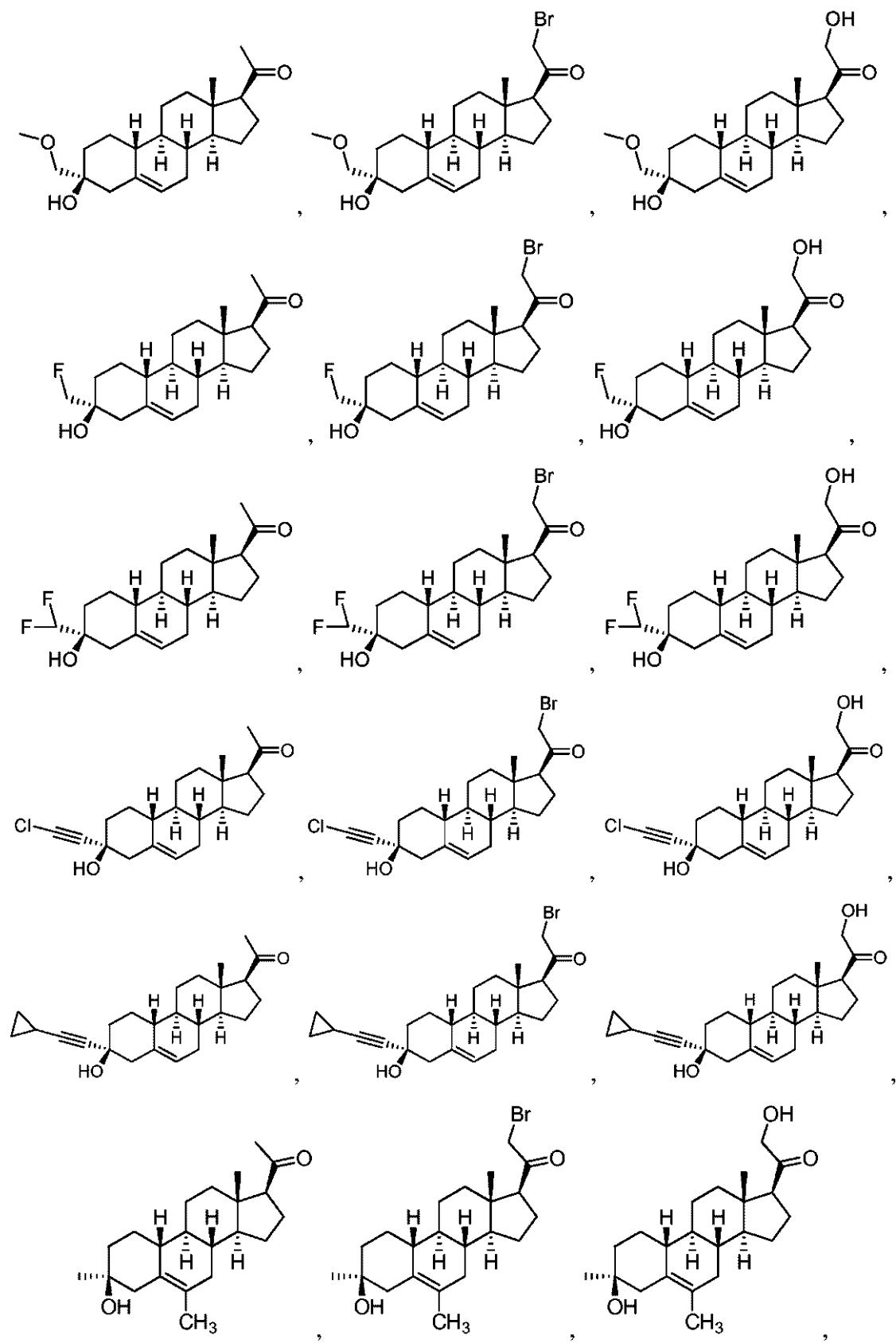
【化 157】



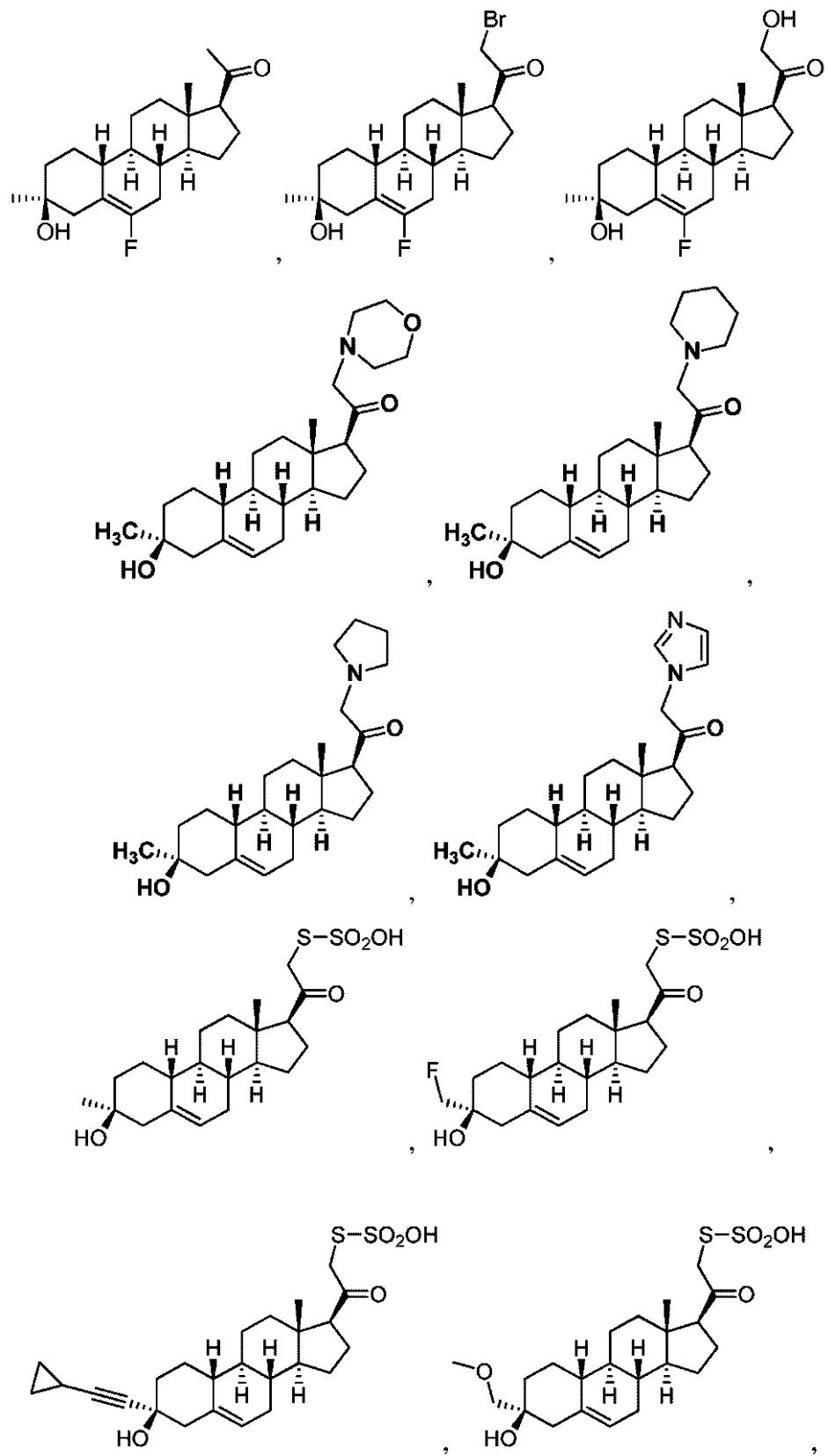
【化 158】



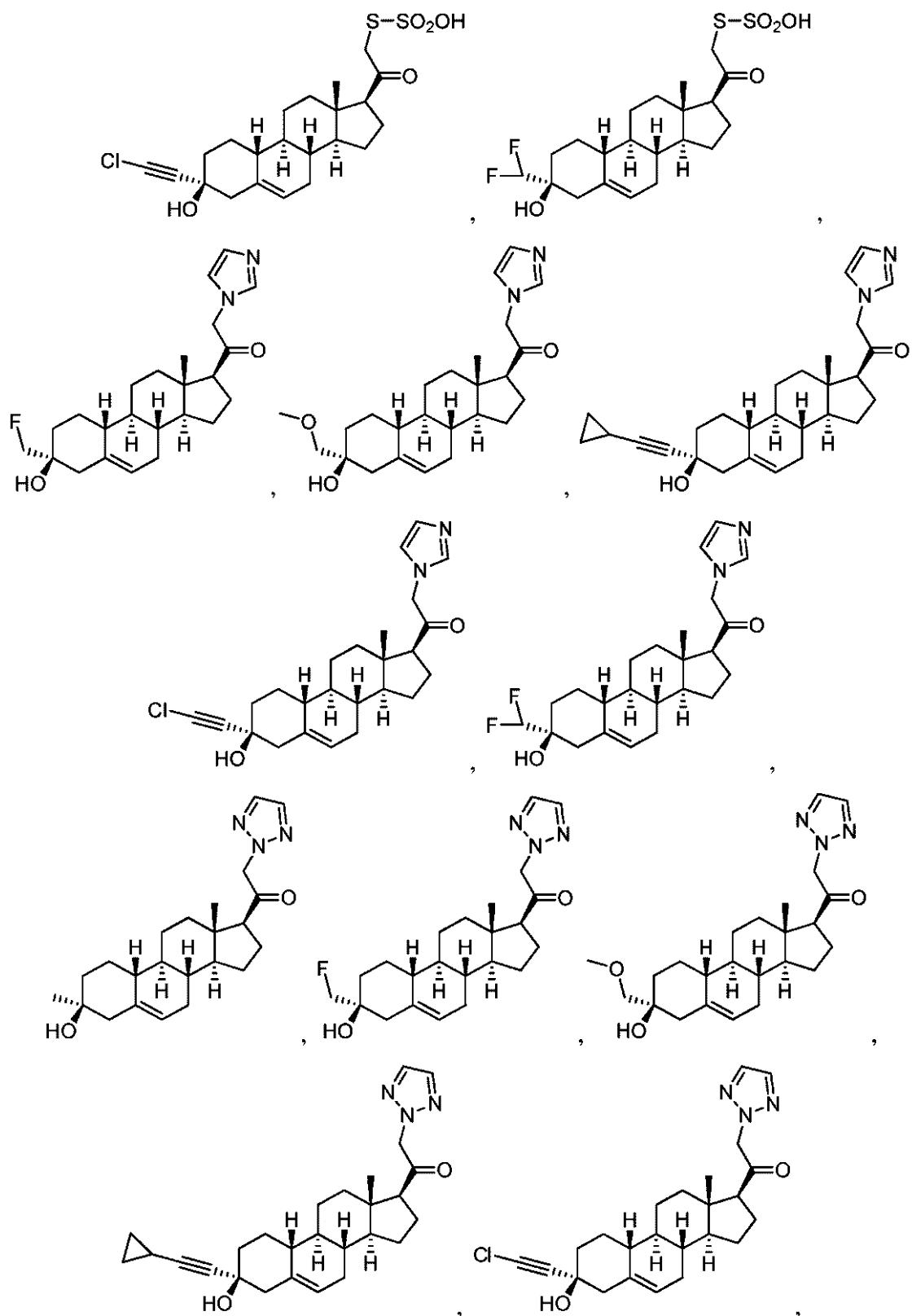
【化 1 5 9】



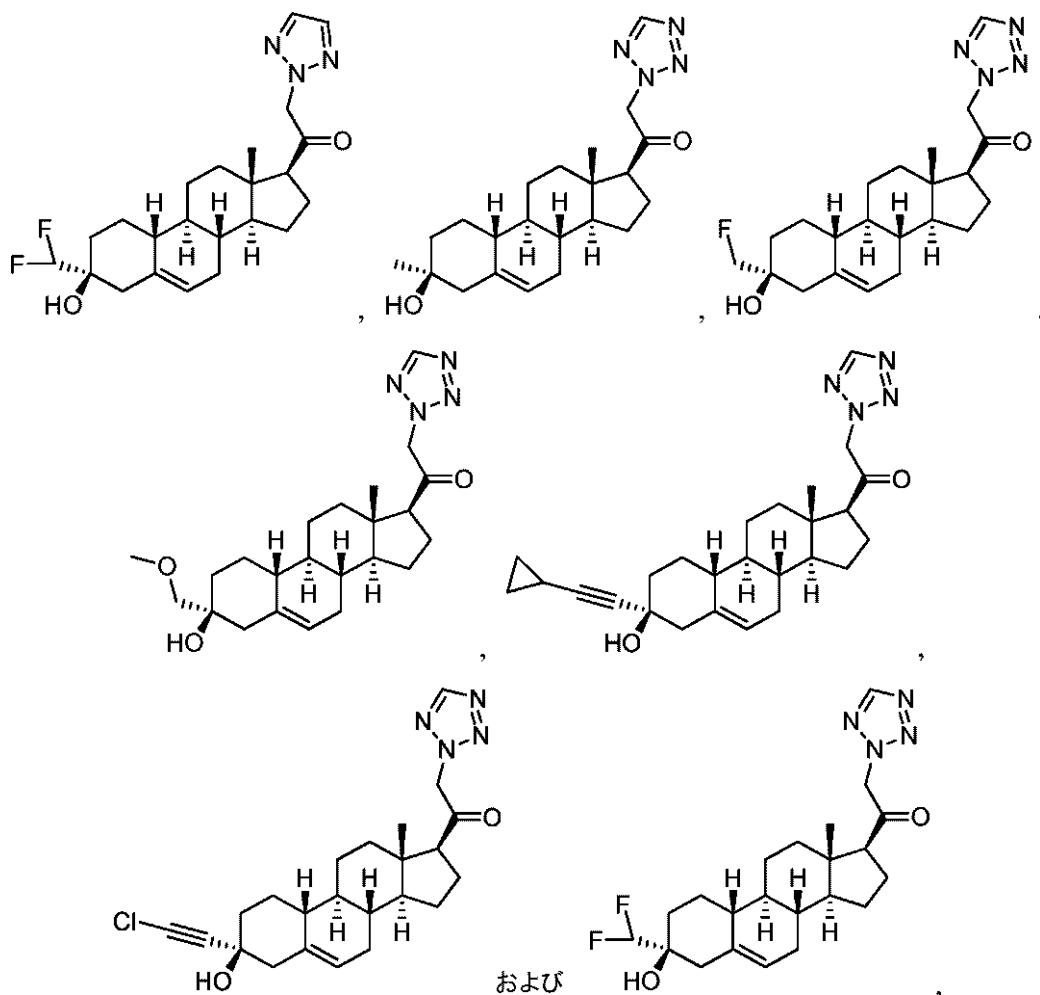
【化 1 6 0】



【化 161】



【化162】



からなる群より選択される、請求項2に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

【請求項27】

薬学的に許容され得るキャリアおよび請求項1～26のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を含む、薬学的組成物。

【請求項28】

CNS関連障害の処置を必要とする被験体におけるCNS関連障害を処置するための組成物であって、有効量の請求項1～21のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を含み、該組成物は該被験体に投与されることを特徴とする、組成物。

【請求項29】

前記CNS関連障害が、不眠、うつ、気分障害、痙攣性障害、記憶障害、注意障害、不安障害、双極性障害、精神分裂病、統合失調感情障害、人格障害、精神病、強迫症、外傷後ストレス障害、自閉症圏障害、気分変調、社会不安障害、強迫性障害、疼痛、睡眠障害、認知症、アルツハイマー病、発作性障害、外傷性脳損傷、脳卒中、嗜癖障害、自閉症、ハンチントン病、パーキンソン病、レット症候群、離脱症候群または耳鳴である、請求項28に記載の組成物。

【請求項30】

前記組成物が、経口的に投与されることを特徴とする、請求項28に記載の組成物。

【請求項31】

前記組成物が、慢性的に投与されることを特徴とする、請求項28に記載の組成物。

【手続補正2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0019

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0019】

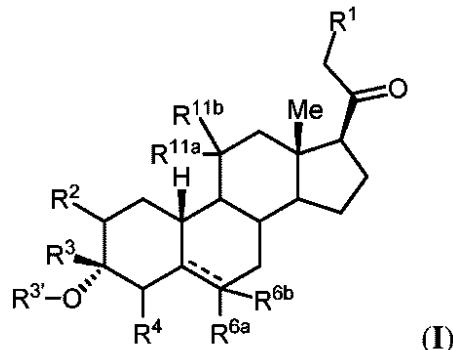
他の目的および利点は、次の詳細な説明、実施例および請求項を考慮することによって、当業者に明らかになるだろう。

本発明は、例えば、以下を提供する。

(項目1)

式(I)の化合物:

【化126】



またはその薬学的に許容され得る塩であって；

式中：

R¹は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、-OR^{A1}、-SR^{A1}、-N(R^{A1})₂、-OC(=O)R^{A1}、-OC(=O)OR^{A1}、-OC(=O)SR^{A1}、-OC(=O)N(R^{A1})₂、-SC(=O)R^{A2}、-SC(=O)OR^{A1}、-SC(=O)SR^{A1}、-SC(=O)N(R^{A1})₂、-NHCO(=O)R^{A1}、-NHCO(=O)OR^{A1}、-NHCO(=O)SR^{A1}、-NHCO(=O)N(R^{A1})₂、-OS(=O)₂R^{A2}、-OS(=O)₂OR^{A1}、-SS(=O)₂R^{A2}、-SS(=O)₂OR^{A1}、-S(=O)R^{A2}、-SO₂R^{A2}または-S(=O)₂OR^{A1}であり、ここで、R^{A1}の各存在は、独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、硫黄保護基（硫黄原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、または2つのR^{A1}基が連結して、置換もしくは非置換の複素環式環もしくはヘテロアリール環を形成し；R^{A2}は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

R²は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、-OH、-OR^{B1}、-OC(=O)R^{B1}、-NH₂、-N(R^{B1})₂または-NR^{B1}C(=O)R^{B1}であり、ここで、R^{B1}の各存在は、独立して、水素、置換もしくは

非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、あるいは2つのR^B₁基が連結して、置換または非置換の複素環式環を形成し；

R³は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

R³は、水素、-C(=O)R^C₁、-C(=O)OR^C₁、-C(=O)SR^C₁、-C(=O)N(R^C₁)₂、-S(=O)₂R^C₂、-S(=O)₂OR^C₁、-P(=O)₂R^C₂、-P(=O)₂OR^C₁、-P(=O)(OR^C₁)₂、-P(=O)(R^C₂)(OR^C₁)₂、または-P(=O)(R^C₂)(OR^C₁)₂であり、ここで、R^C₁は、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、硫黄保護基（硫黄原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、あるいは2つのR^C₁基が連結して、置換または非置換の複素環式環を形成し；R^C₂は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールであり；

R⁴は、水素、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換カルボシクリル、置換または非置換ヘテロシクリル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリールから選択され；

R^{6a}およびR^{6b}の各々は、独立して、水素、ハロ、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニルまたは置換もしくは非置換アルキニルであるか、あるいはR^{6a}およびR^{6b}は、連結して、オキソ(=O)基を形成し；

R^{11a}およびR^{11b}の各々は、独立して、水素、ハロ、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、-OH、-OR^D₁、-OC(=O)R^D₁、-NH₂、-N(R^D₁)₂または-NR^D₁C(=O)R^D₁であり、ここで、R^D₁の各存在は、独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、あるいは2つのR^D₁基が連結して、置換または非置換の複素環式環を形成するか；あるいはR^{11a}およびR^{11b}は、連結して、オキソ(=O)基を形成し；

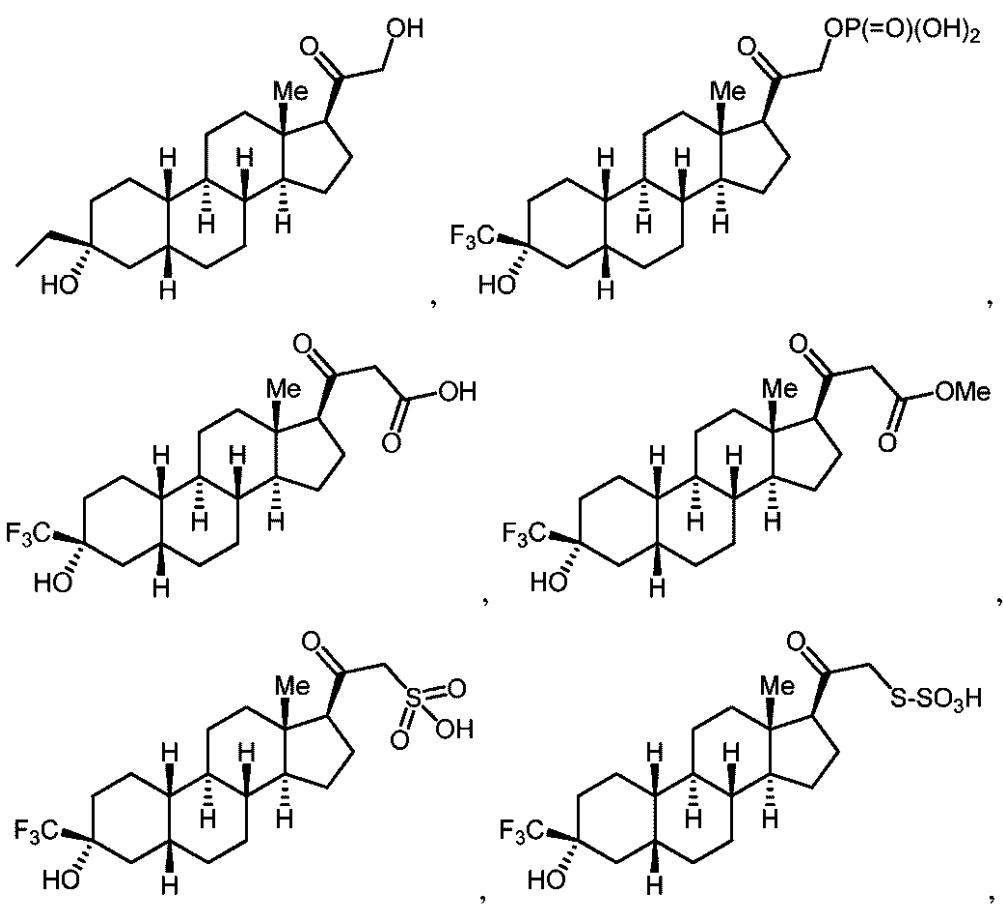
式中、

【化127】

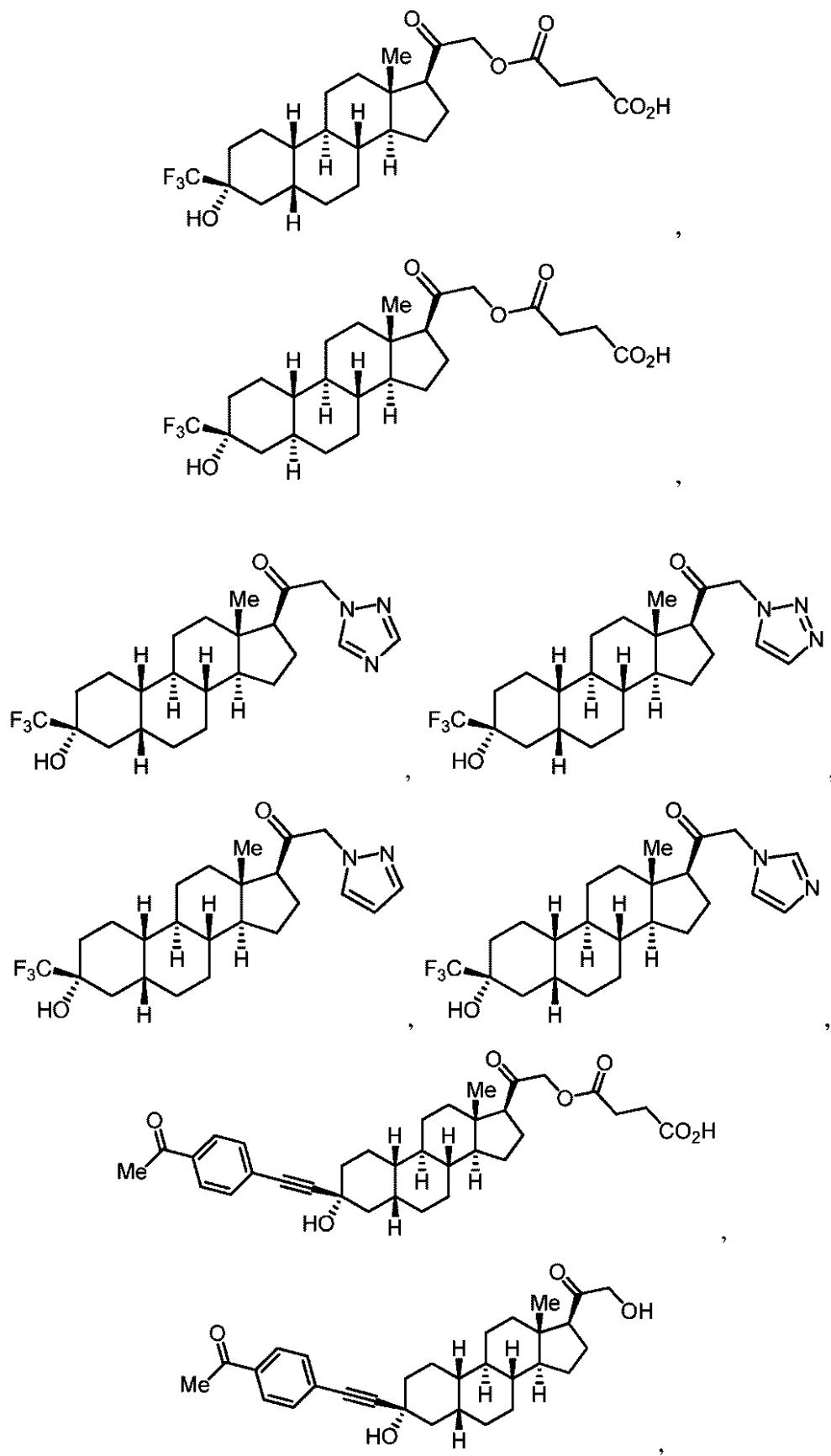
は、単結合または二重結合を表し、二重結合が環Bに存在する場合、R^{6a}またはR^{6b}の一方は、存在せず、単結合が環Bに存在する場合、C5における水素は、アルファ位またはベータ位であるが；

ただし、以下の化合物およびその塩：

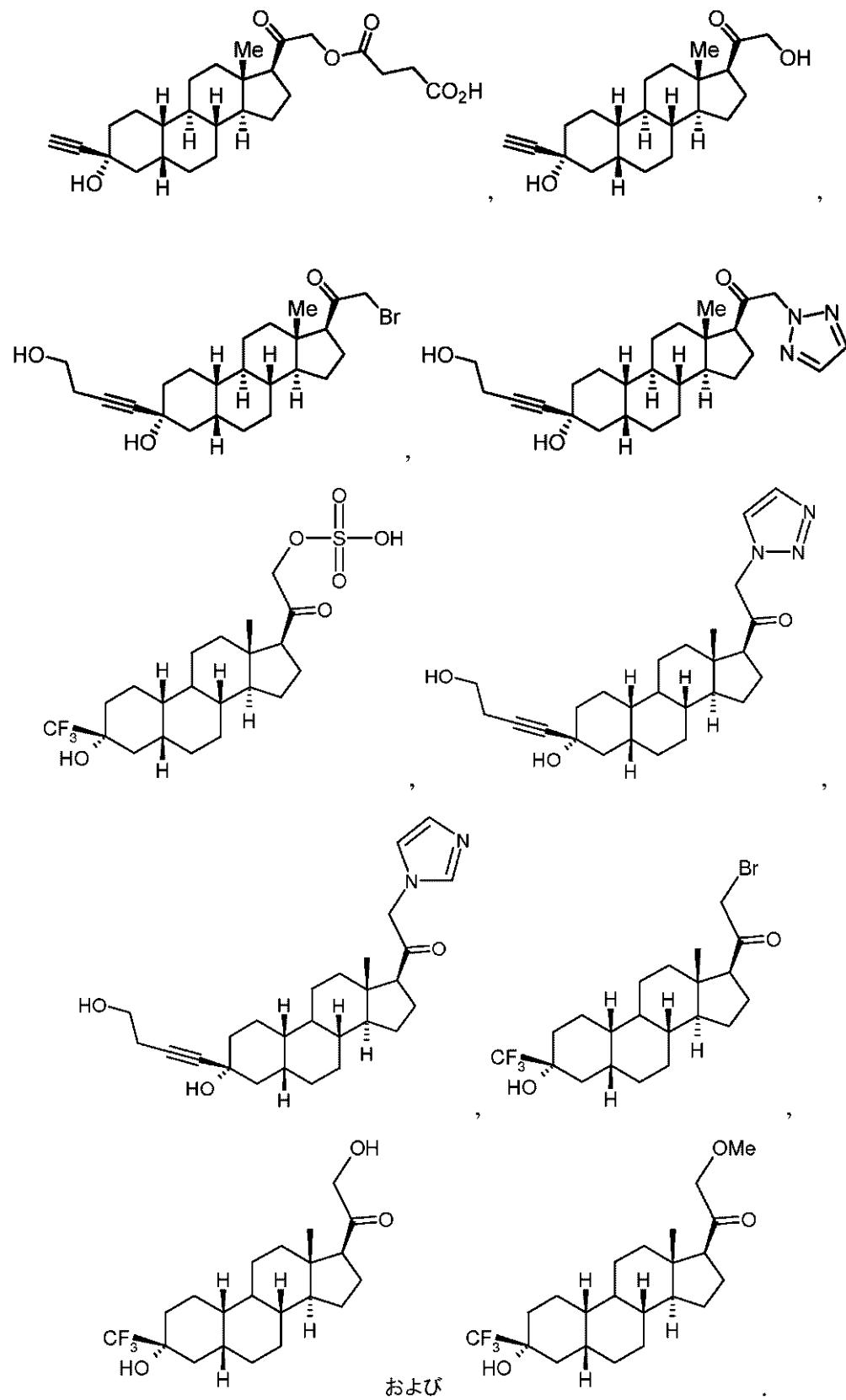
【化 1 2 8】



【化 1 2 9】



【化130】

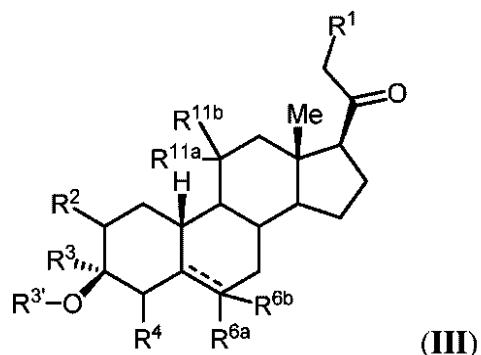


は、明確に排除される、式(I)の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

(項目2)

式(III)の化合物：

【化131】



またはその薬学的に許容され得る塩であつて；

式中：

R¹は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、-OR^A¹、-SR^A¹、-N(R^A¹)₂、-OC(=O)R^A¹、-OC(=O)OR^A¹、-OC(=O)SR^A¹、-OC(=O)N(R^A¹)₂、-SC(=O)R^A²、-SC(=O)OR^A¹、-SC(=O)SR^A¹、-SC(=O)N(R^A¹)₂、-NHC(=O)R^A¹、-NHC(=O)OR^A¹、-NHC(=O)SR^A¹、-NHC(=O)N(R^A¹)₂、-OS(=O)₂R^A²、-OS(=O)₂OR^A¹、-S-S(=O)₂R^A²、-S-S(=O)₂OR^A¹、-S(=O)R^A²、-SO₂R^A²または-S(=O)₂OR^A¹であり、ここで、R^A¹の各存在は、独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、硫黄保護基（硫黄原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、または2つのR^A¹基が連結して、置換もしくは非置換の複素環式環もしくはヘテロアリール環を形成し；R^A²は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

R²は、水素、ハロゲン、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリール、置換もしくは非置換ヘテロアリール、-OH、-OR^B¹、-OC(=O)R^B¹、-NH₂、-N(R^B¹)₂または-NR^B¹C(=O)R^B¹であり、ここで、R^B¹の各存在は、独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、あるいは2つのR^B¹基が連結して、置換または非置換の複素環式環を形成し；

R³は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリールであり；

R^{3'}は、水素、-C(=O)R^C¹、-C(=O)OR^C¹、-C(=O)SR^C¹、-C(=O)N(R^C¹)₂、-S(=O)₂R^C²、-S(=O)₂OR^C¹、-P(=O)₂R^C²、-P(=O)₂OR^C¹、-P(=O)(OR^C¹)₂、-P(=O)(R^C²)₂または-P(=O)(R^C²)(OR^C¹)であり、ここで、R^C¹は、水

素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、硫黄保護基（硫黄原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、あるいは2つのR^{C₁}基が連結して、置換または非置換の複素環式環を形成し；R^{C₂}は、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールであり；

R⁴は、水素、置換または非置換アルキル、置換または非置換アルケニル、置換または非置換アルキニル、置換または非置換カルボシクリル、置換または非置換ヘテロシクリル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリールから選択され；

R^{6_a}およびR^{6_b}の各々は、独立して、水素、ハロ、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニルまたは置換もしくは非置換アルキニルであるか、あるいはR^{6_a}およびR^{6_b}は、連結して、オキソ(=O)基を形成し；

R^{1₁_a}およびR^{1₁_b}の各々は、独立して、水素、ハロ、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、-OH、-OR^{D₁}、-OC(=O)R^{D₁}、-NH₂、-N(R^{D₁})₂、または-NR^{D₁}C(=O)R^{D₁}であり、ここで、R^{D₁}の各存在は、独立して、水素、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニル、置換もしくは非置換アルキニル、置換もしくは非置換カルボシクリル、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、置換もしくは非置換アリールまたは置換もしくは非置換ヘテロアリール、酸素保護基（酸素原子に結合しているとき）、窒素保護基（窒素原子に結合しているとき）であるか、あるいは2つのR^{D₁}基が連結して、置換または非置換の複素環式環を形成するか；またはR^{1₁_a}およびR^{1₁_b}は、連結して、オキソ(=O)基を形成し；

式中、

【化132】

は、単結合または二重結合を表し、二重結合が環Bに存在する場合、R^{6_a}またはR^{6_b}の一方は存在せず、単結合が環Bに存在する場合、C5における水素は、アルファ位またはベータ位である。

式(III)の化合物またはその薬学的に許容され得る塩。

(項目3)

R¹が、水素、ハロゲン、-OR^{A₁}、-SR^{A₁}、-N(R^{A₁})₂、-OC(=O)R^{A₁}、-OC(=O)OR^{A₁}、-OC(=O)SR^{A₁}、-OC(=O)N(R^{A₁})₂、-SC(=O)R^{A₂}、-SC(=O)OR^{A₁}、-SC(=O)SR^{A₁}、-SC(=O)N(R^{A₁})₂、-NH₂、-NHC(=O)R^{A₁}、-NHC(=O)OR^{A₁}、-NHC(=O)N(R^{A₁})₂、-OS(=O)₂R^{A₂}、-OS(=O)₂OR^{A₁}、-S-S(=O)₂R^{A₂}、-S-S(=O)₂OR^{A₁}、-S(=O)R^{A₂}、-SO₂R^{A₂}または-S(=O)₂OR^{A₁}である、項目1または2に記載の化合物。

(項目4)

R¹が、水素、ハロゲン、-OR^{A₁}、-N(R^{A₁})₂、-S-S(=O)₂R^{A₂}、置換もしくは非置換ヘテロシクリルまたは置換もしくは非置換ヘテロアリールである、項目1または2に記載の化合物。

(項目5)

R²が、水素、置換もしくは非置換ヘテロシクリル、-OH、-OR^{B₁}、-OC(=O)R^{B₁}、-NH₂、-N(R^{B₁})₂、または-NR^{B₁}C(=O)R^{B₁}である、項目

1または2に記載の化合物。

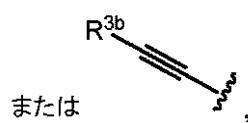
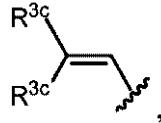
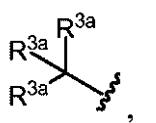
(項目6)

R³が、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニルまたは置換もしくは非置換アルキニルである、項目1または2に記載の化合物。

(項目7)

R³が、式：

【化133】



の基であり、式中、R^{3a}の各存在は、水素、ハロまたは-O-R^{F1}であり、R^{F1}は、置換または非置換アルキルであり；R^{3b}およびR^{3c}の各存在は、独立して、水素、ハロまたは置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換カルボシクリルまたは置換もしくは非置換ヘテロシクリルである、項目1または2に記載の化合物。

(項目8)

R³が、水素である、項目1または2に記載の化合物。

(項目9)

R⁴が、水素である、項目1または2に記載の化合物。

(項目10)

R^{6a}およびR^{6b}の各々が、独立して、水素、ハロ、置換もしくは非置換アルキル、置換もしくは非置換アルケニルまたは置換もしくは非置換アルキニルであるか、あるいはR^{6a}およびR^{6b}は、連結して、オキソ(=O)基を形成する、項目1または2に記載の化合物。

(項目11)

R^{6a}とR^{6b}の両方が、水素である、項目1または2に記載の化合物。

(項目12)

R^{6a}およびR^{6b}の一方が、非水素基である、項目1または2に記載の化合物。

(項目13)

R^{6a}が、非水素アルファ基である、項目1または2に記載の化合物。

(項目14)

R^{6a}が、非水素ベータ基である、項目1または2に記載の化合物。

(項目15)

R^{6a}が、ハロまたはアルキルであり、R^{6b}が、水素である、項目1または2に記載の化合物。

(項目16)

R^{6a}およびR^{6b}が、両方ともハロである、項目1または2に記載の化合物。

(項目17)

R^{6a}およびR^{6b}が、両方ともアルキルである、項目1または2に記載の化合物。

(項目18)

R^{6a}およびR^{6b}が、連結して、オキソ基を形成する、項目1または2に記載の化合物。

(項目19)

R^{11a}およびR^{11b}の各々が、独立して、水素、-OH、-OR^{D1}、-OC(=O)R^{D1}、-NH₂、-N(R^{D1})₂もしくは-NR^{D1}C(=O)R^{D1}であるか、またはR^{11a}およびR^{11b}が、連結して、オキソ(=O)基を形成する、項目1または2に記載の化合物。

(項目20)

R^{11a}とR^{11b}の両方が、水素である、項目1または2に記載の化合物。

(項目21)

R¹ R¹^a および R¹ R¹^b の一方が、非水素基である、項目1または2に記載の化合物。

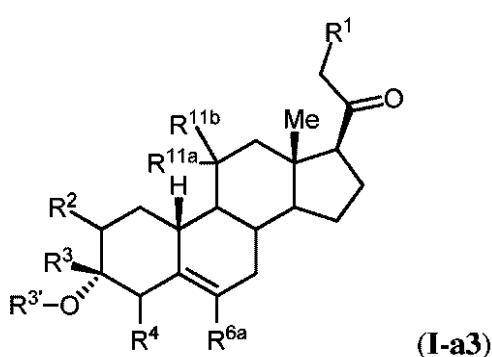
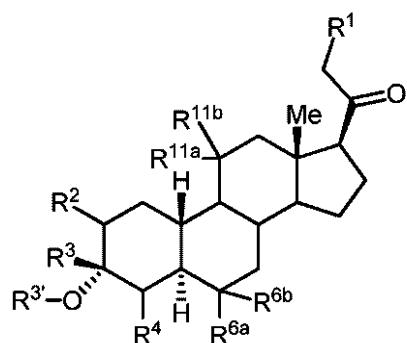
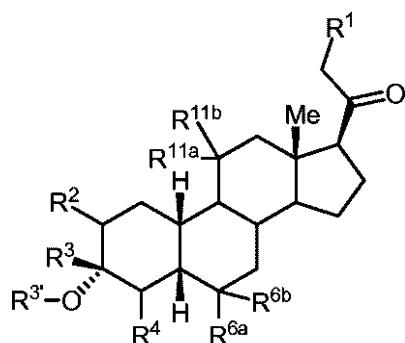
(項目22)

R¹ R¹^a および R¹ R¹^b が、連結して、オキソ基を形成する、項目1または2に記載の化合物。

(項目23)

前記式(I)の化合物が、式(I-a1)、(I-a2)もしくは(I-a3)：

【化134】

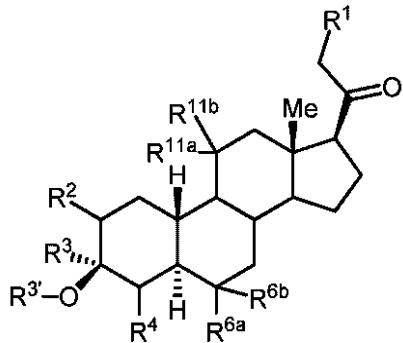
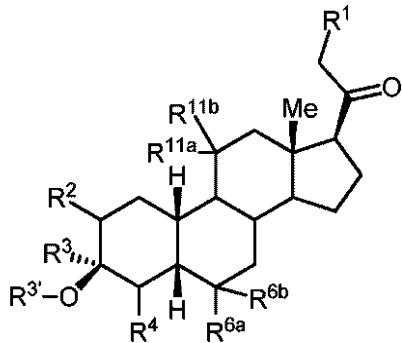


の化合物またはその薬学的に許容され得る塩である、項目1に記載の化合物。

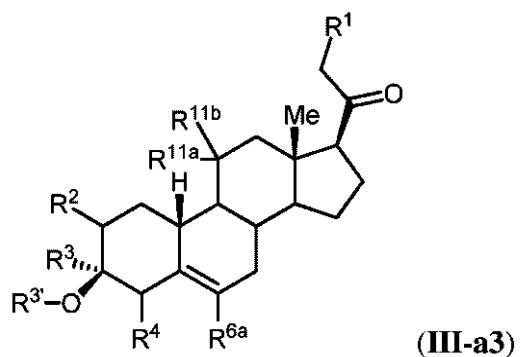
(項目24)

式(III)の化合物が、式(III-a1)、(III-a2)もしくは(III-a3)：

【化135】



【化136】

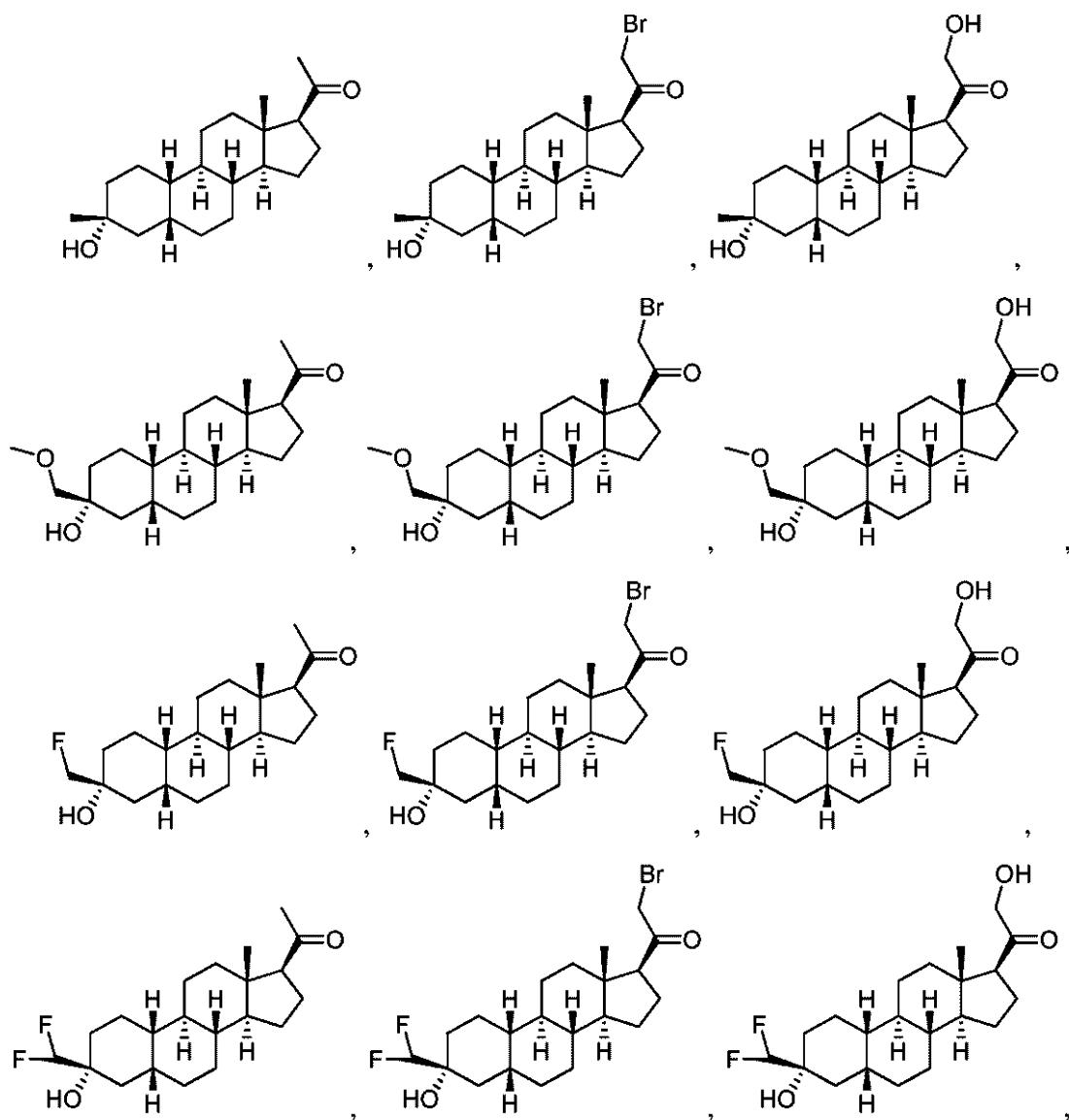


の化合物またはその薬学的に許容され得る塩である、項目2に記載の化合物。

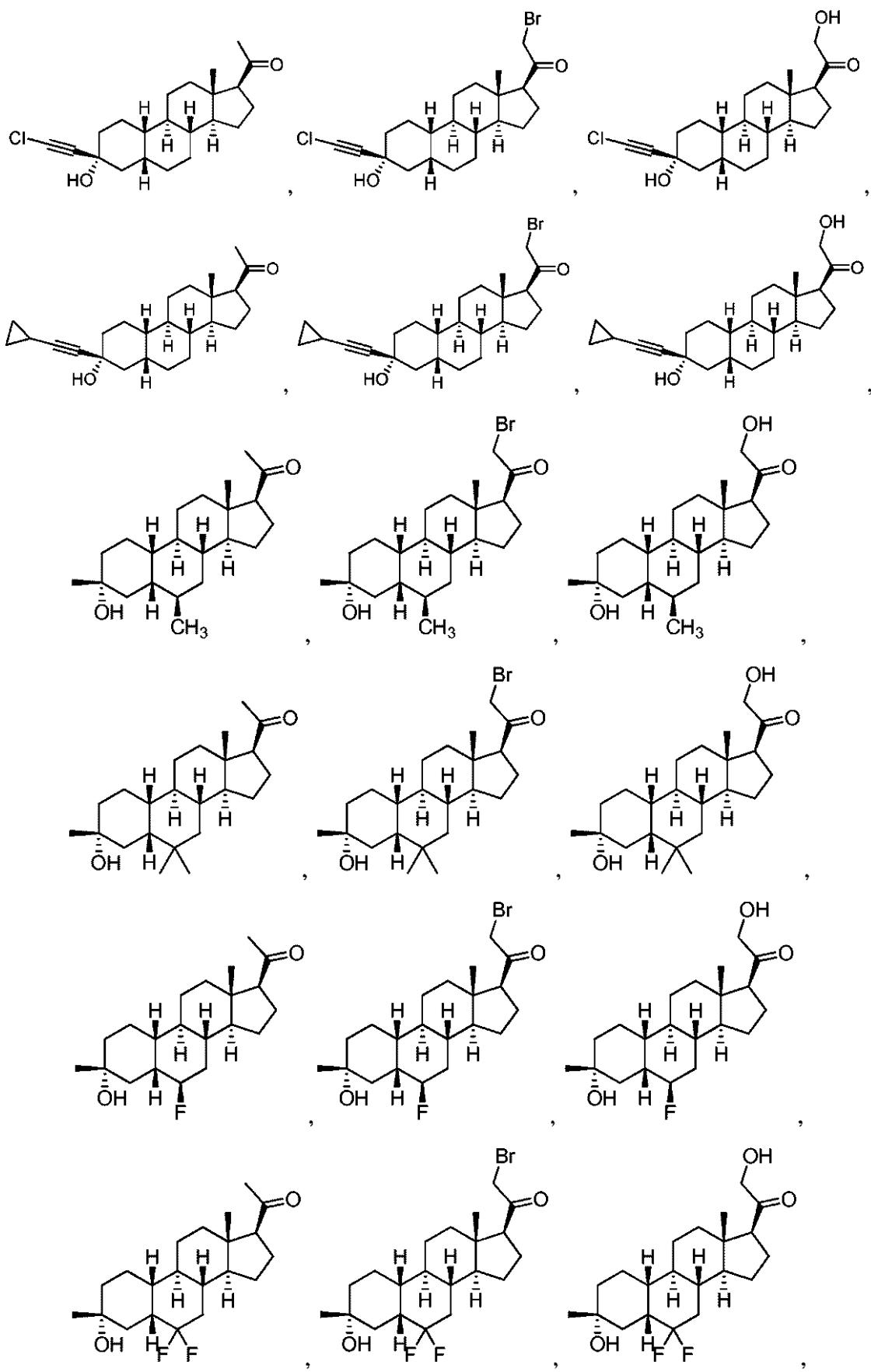
(項目25)

前記化合物が：

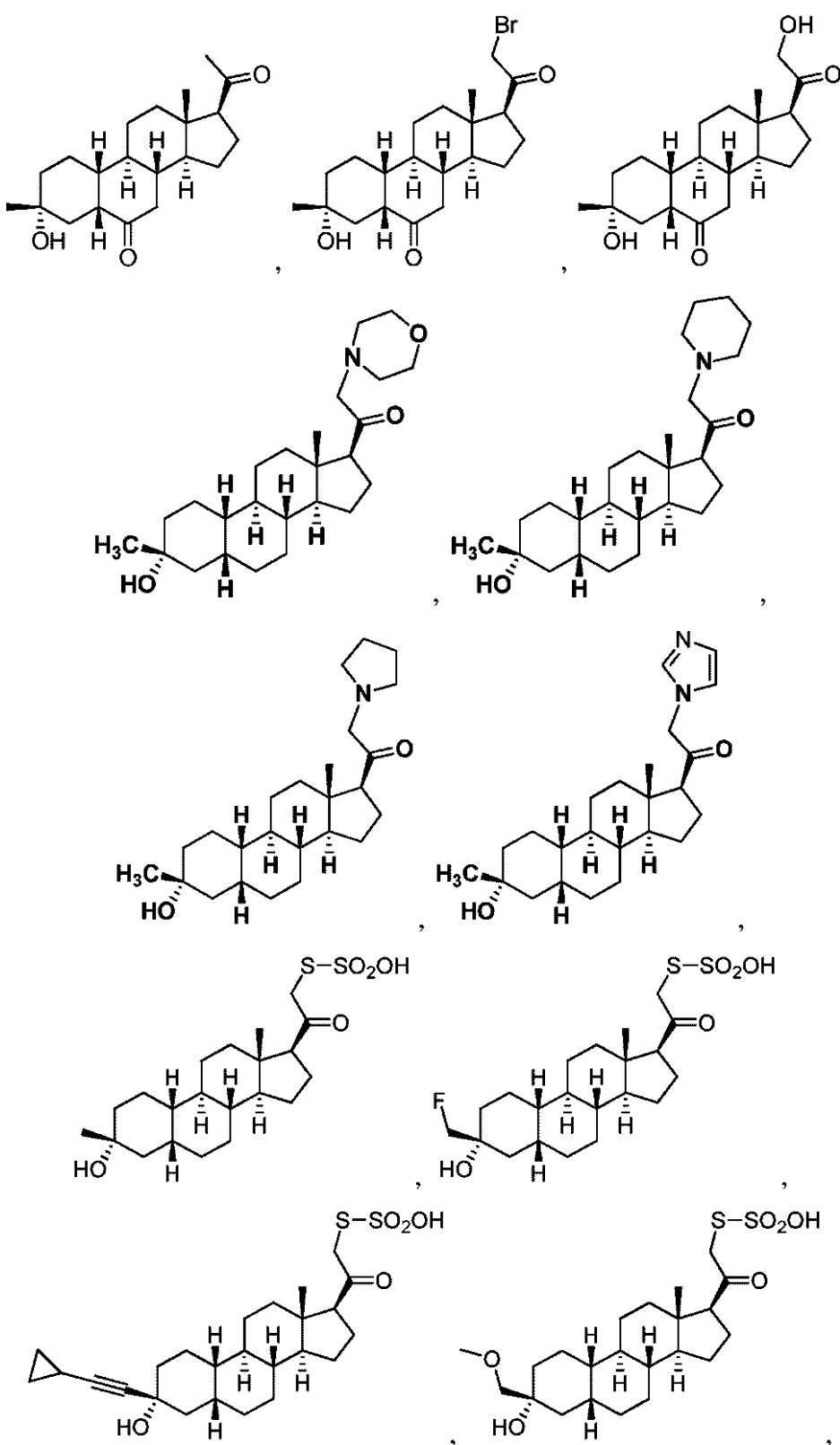
【化137】



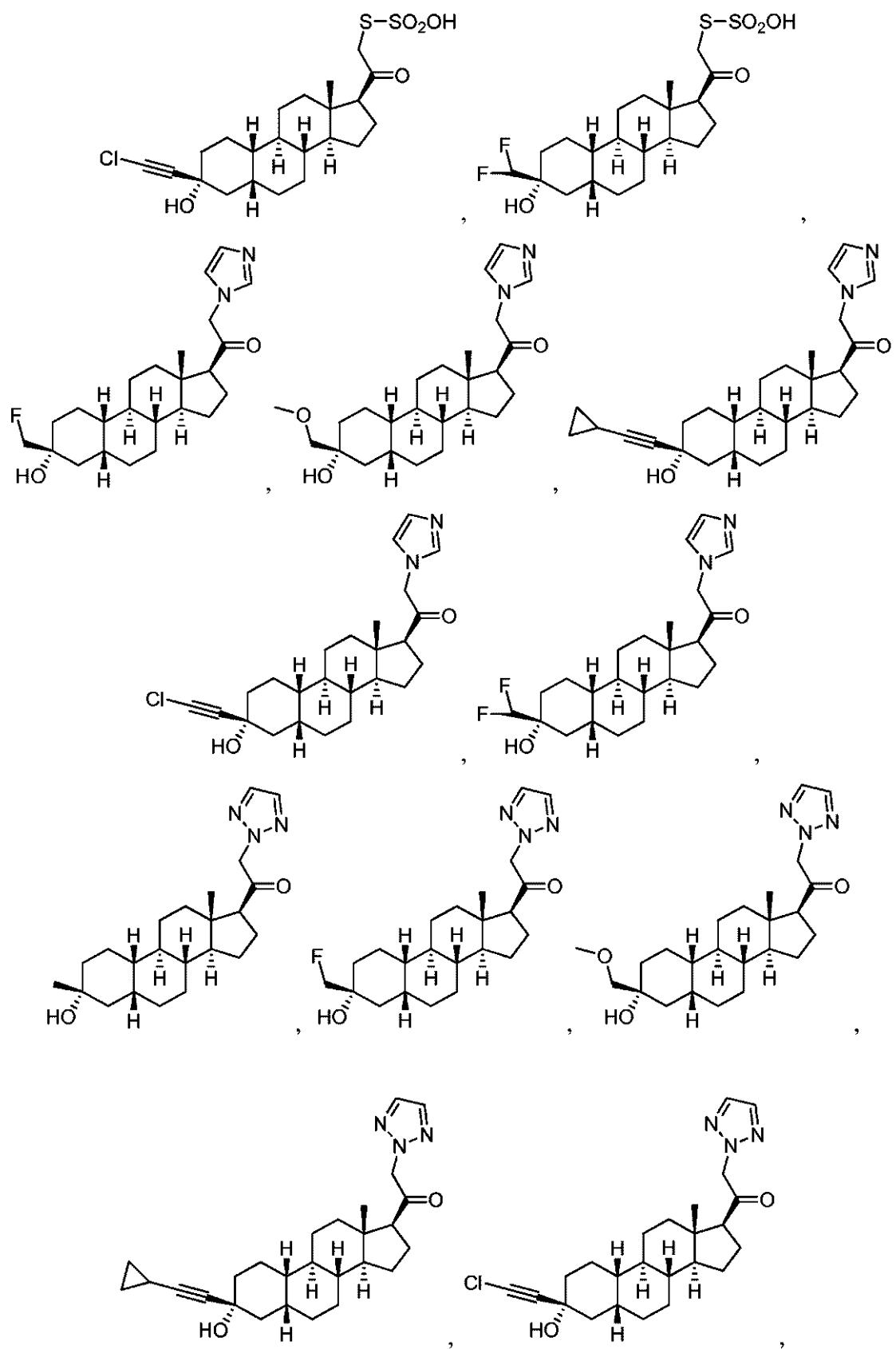
【化 1 3 8】



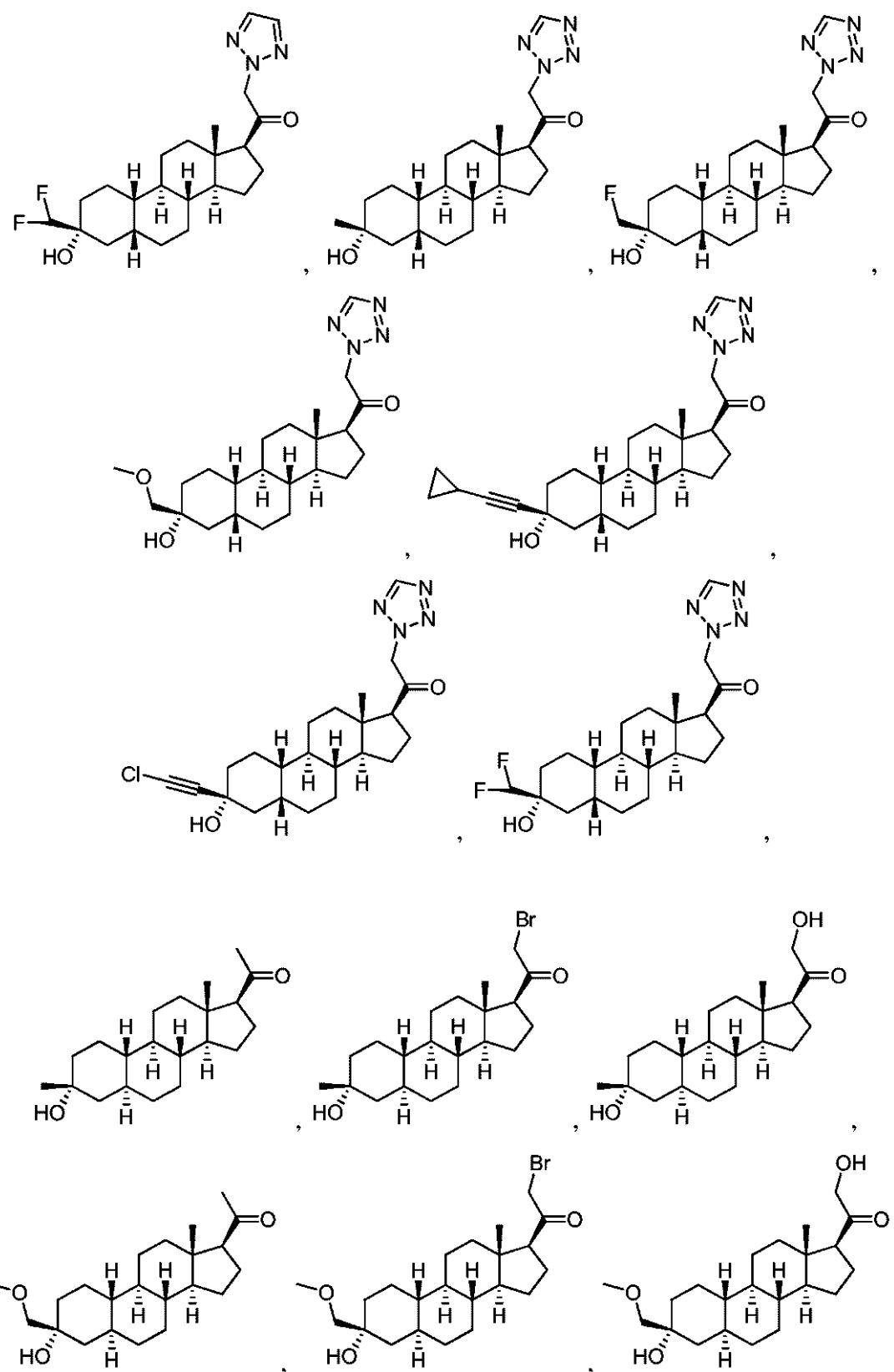
【化 1 3 9】



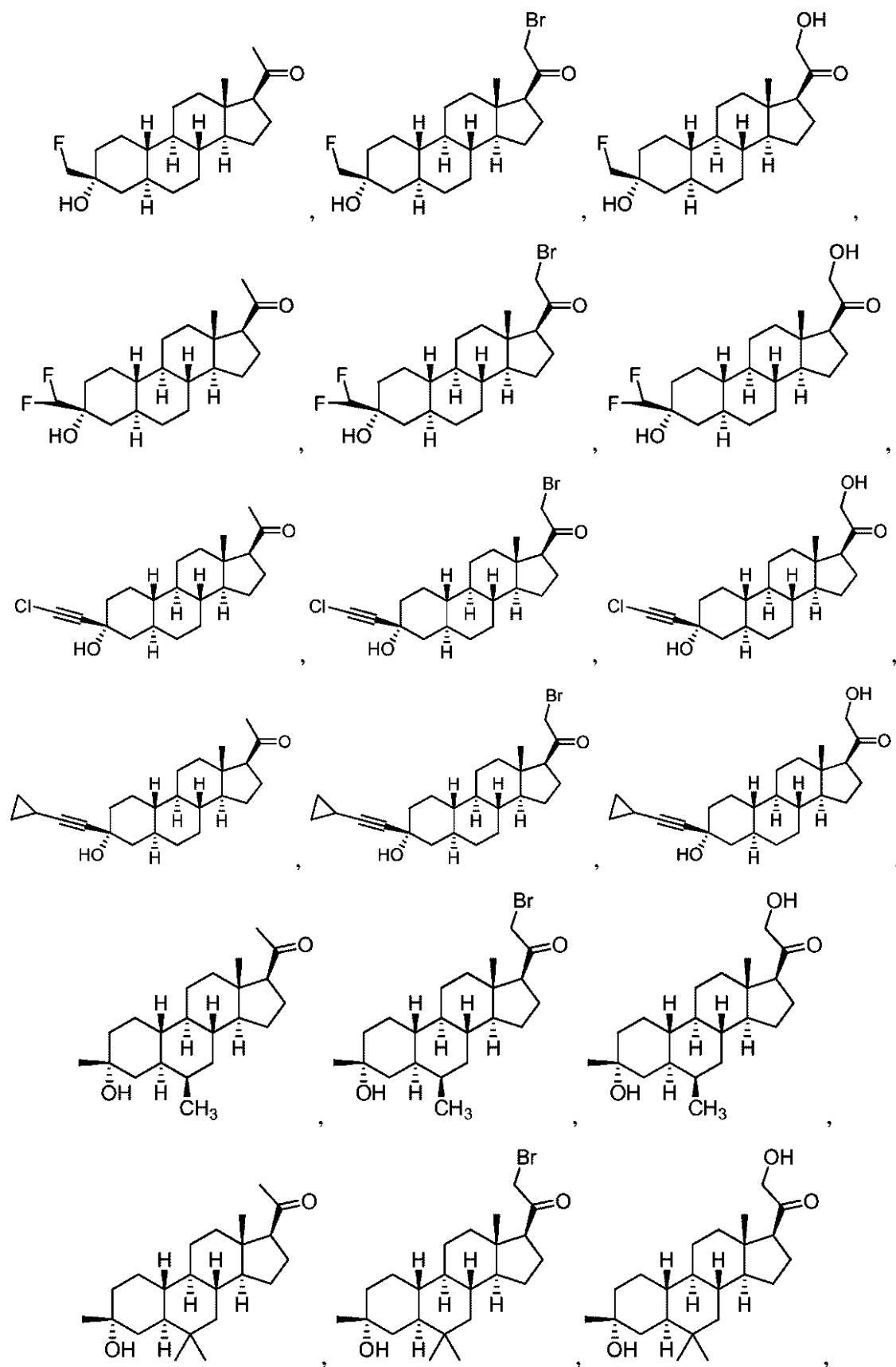
【化 1 4 0】



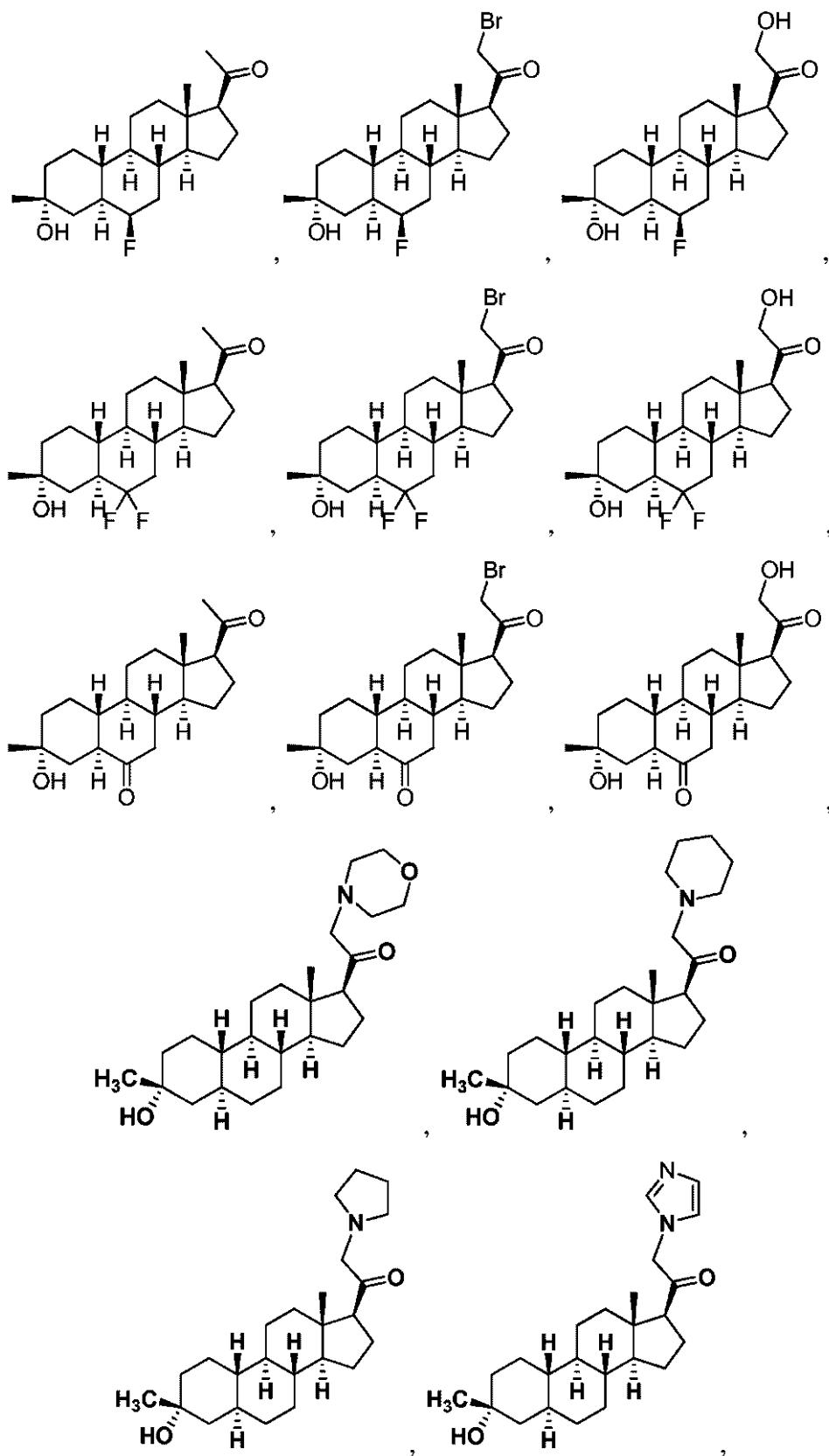
【化 1 4 1】



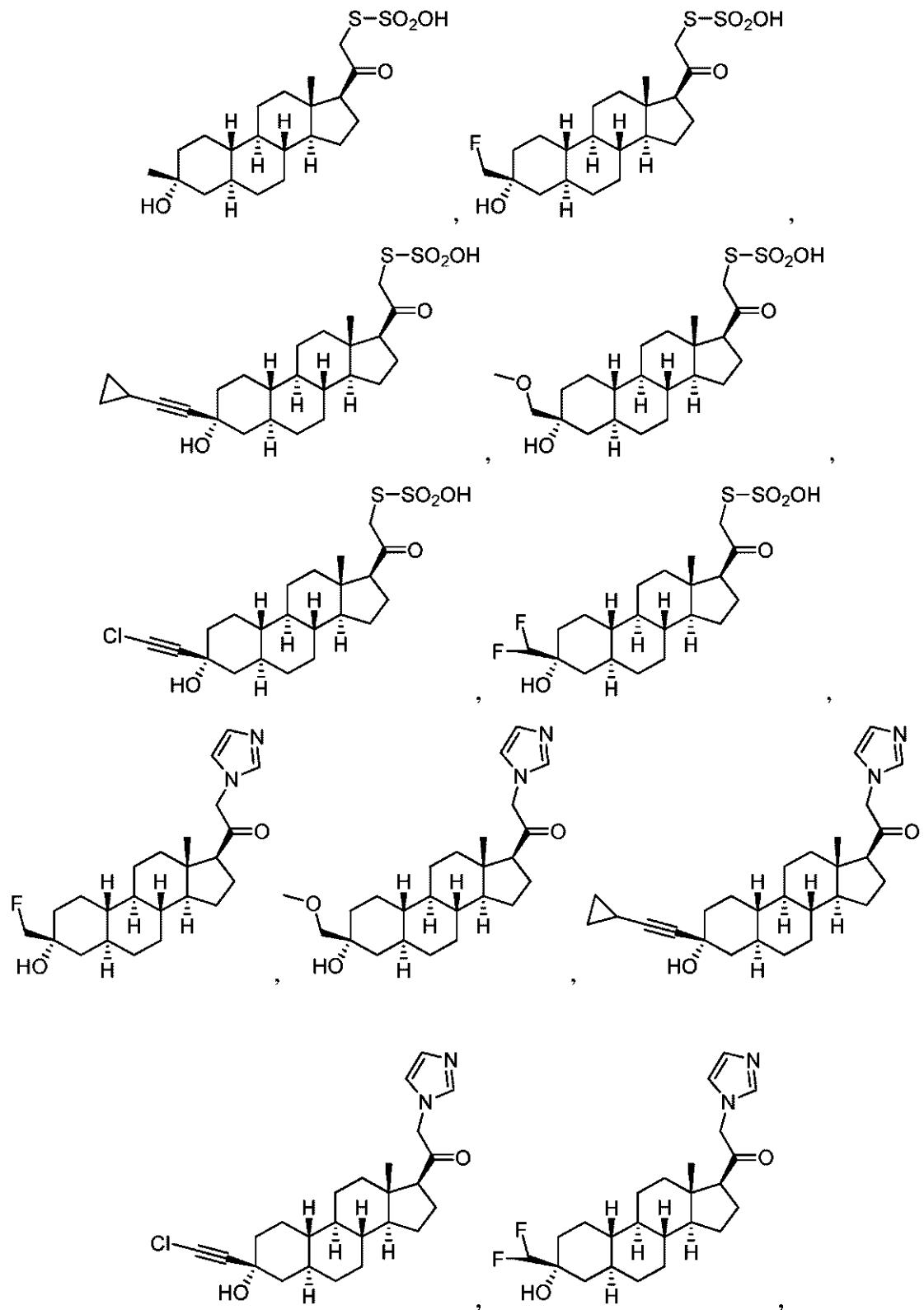
【化 1 4 2】



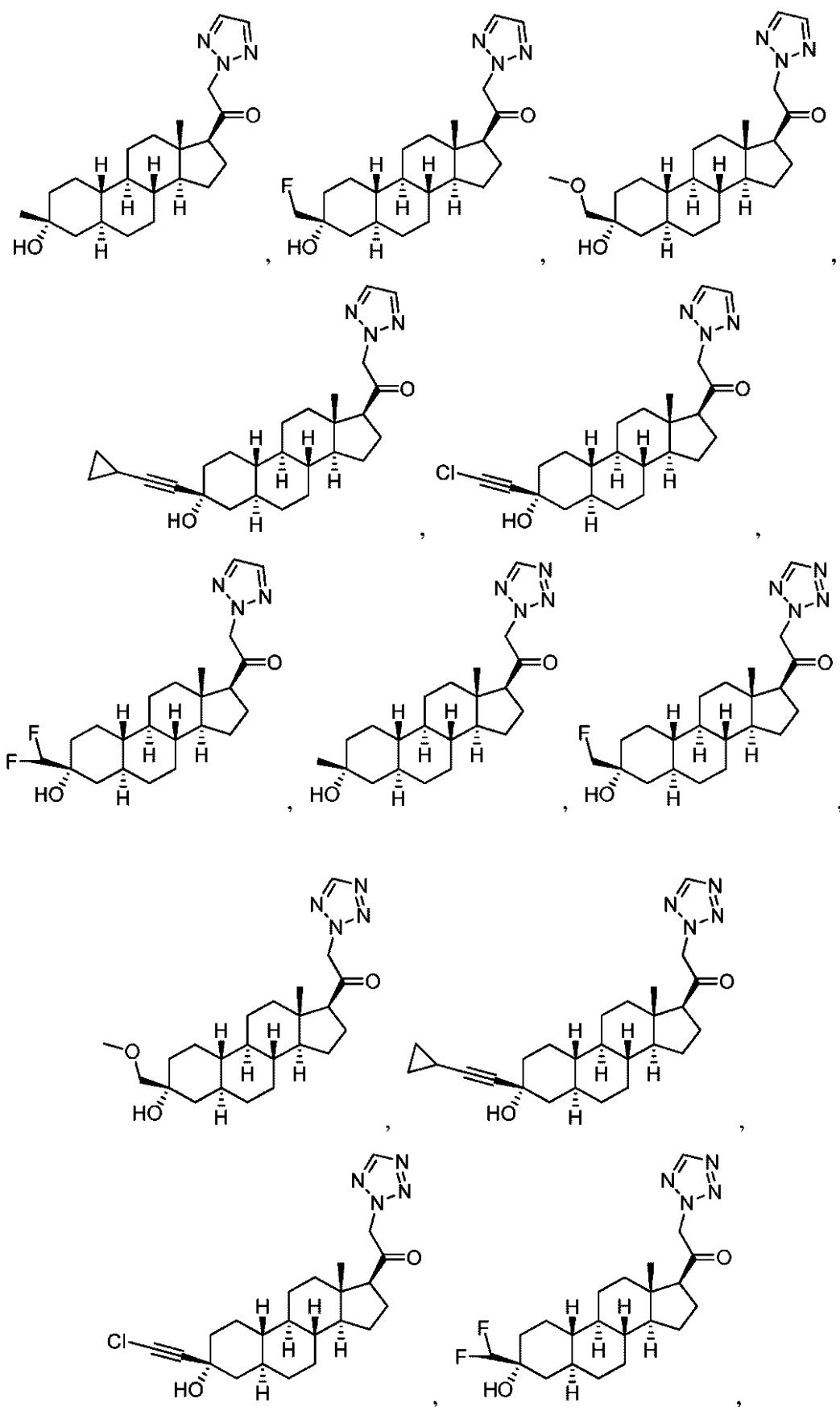
【化 1 4 3】



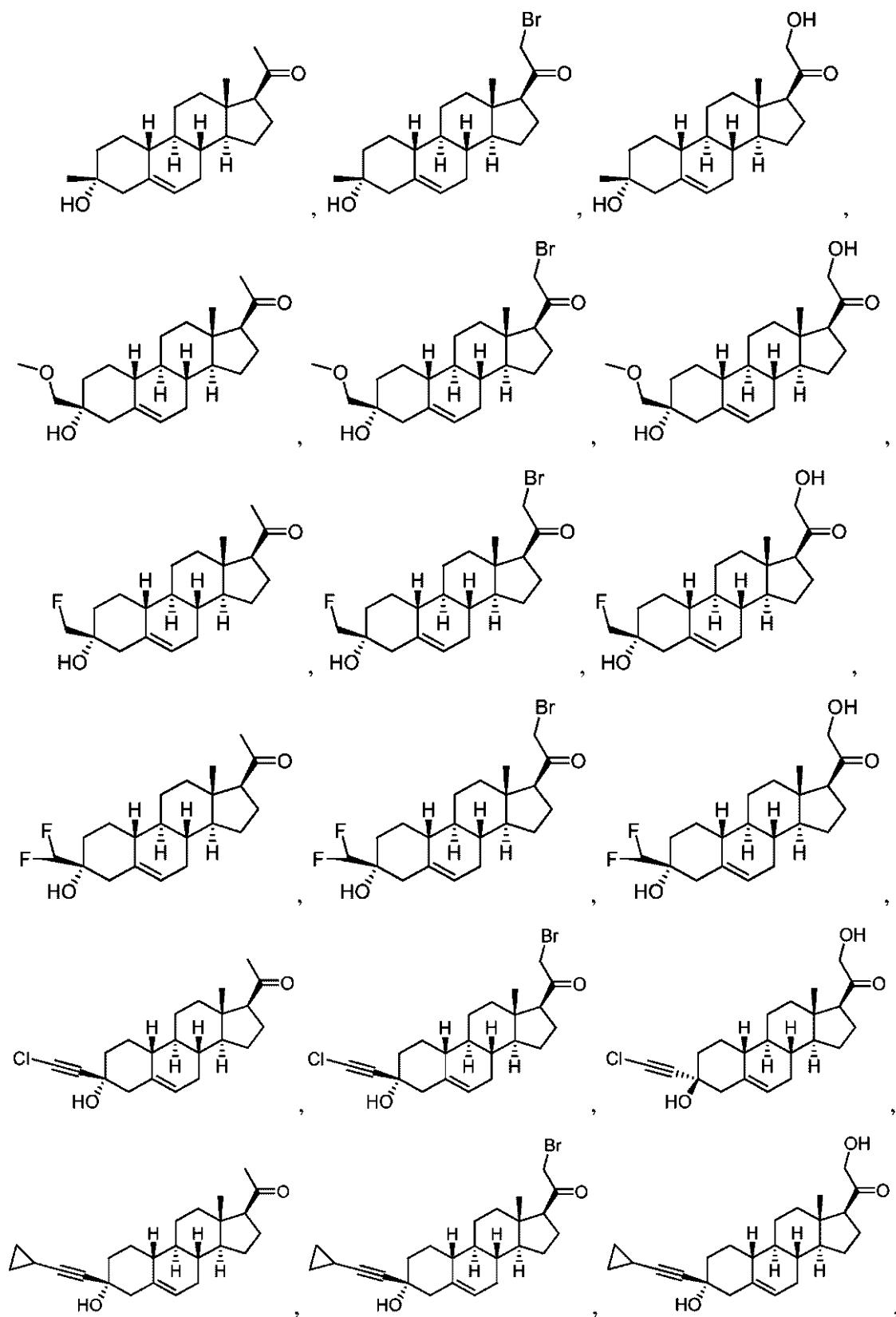
【化 1 4 4】



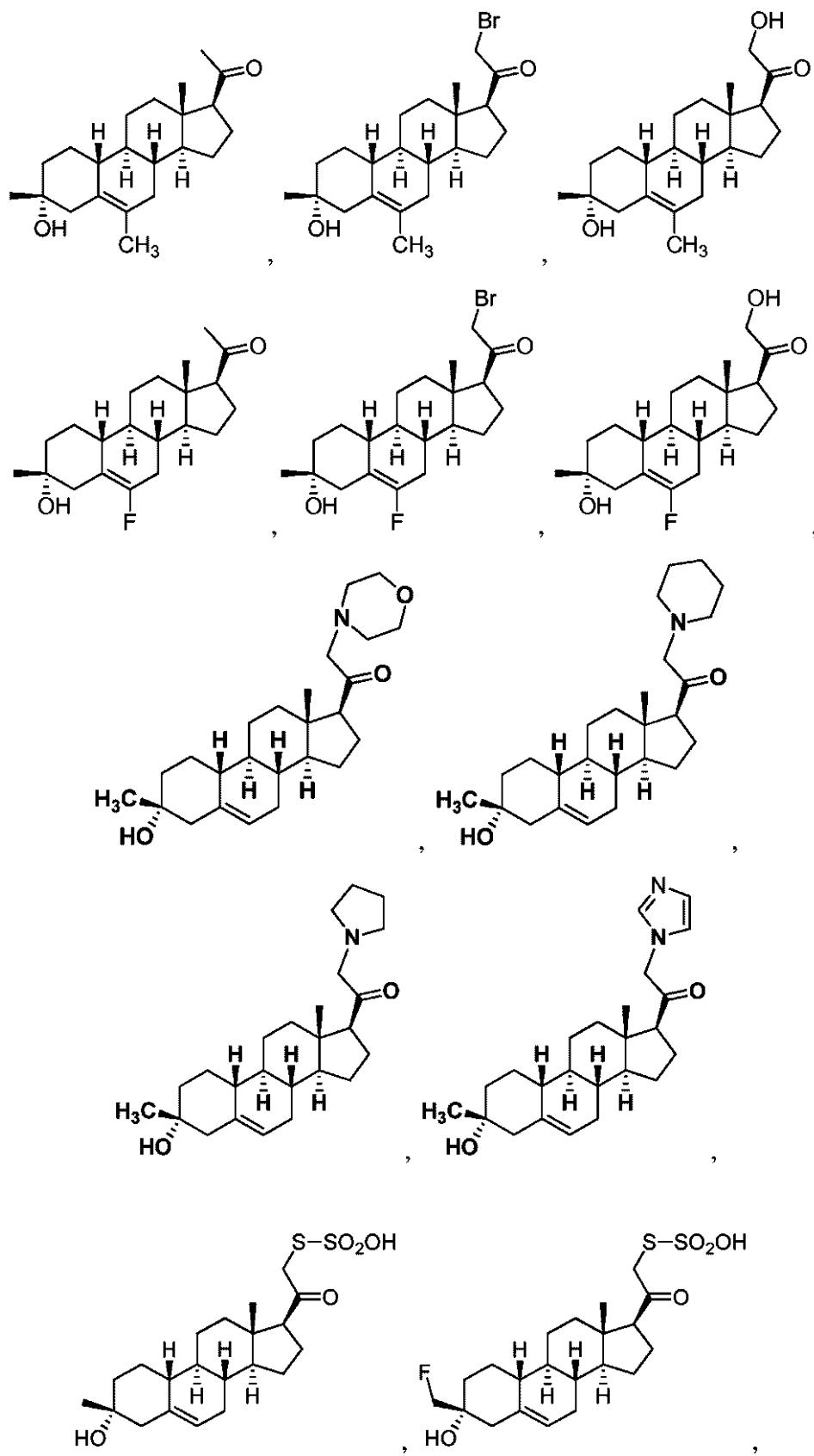
【化 1 4 5】



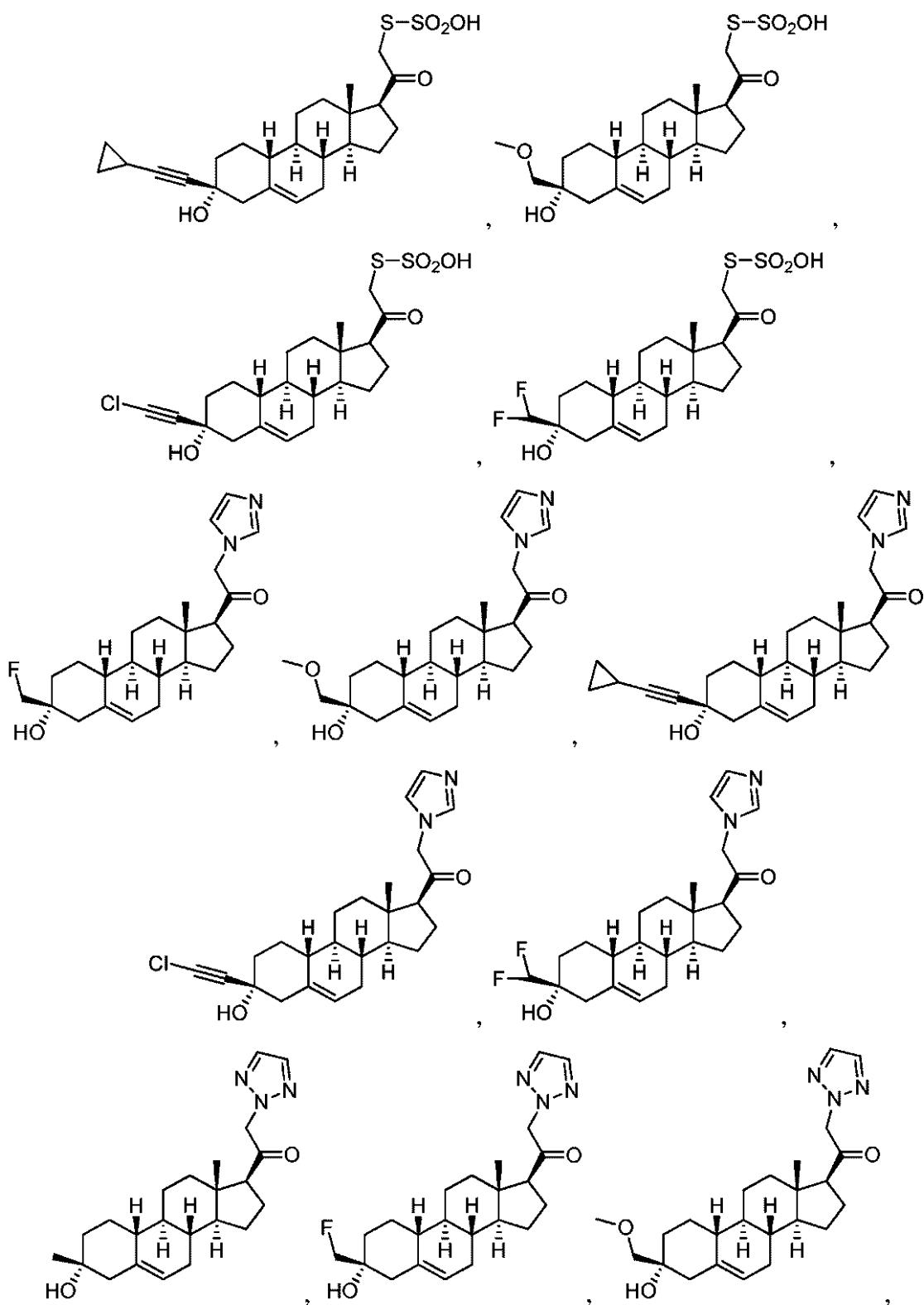
【化 1 4 6】



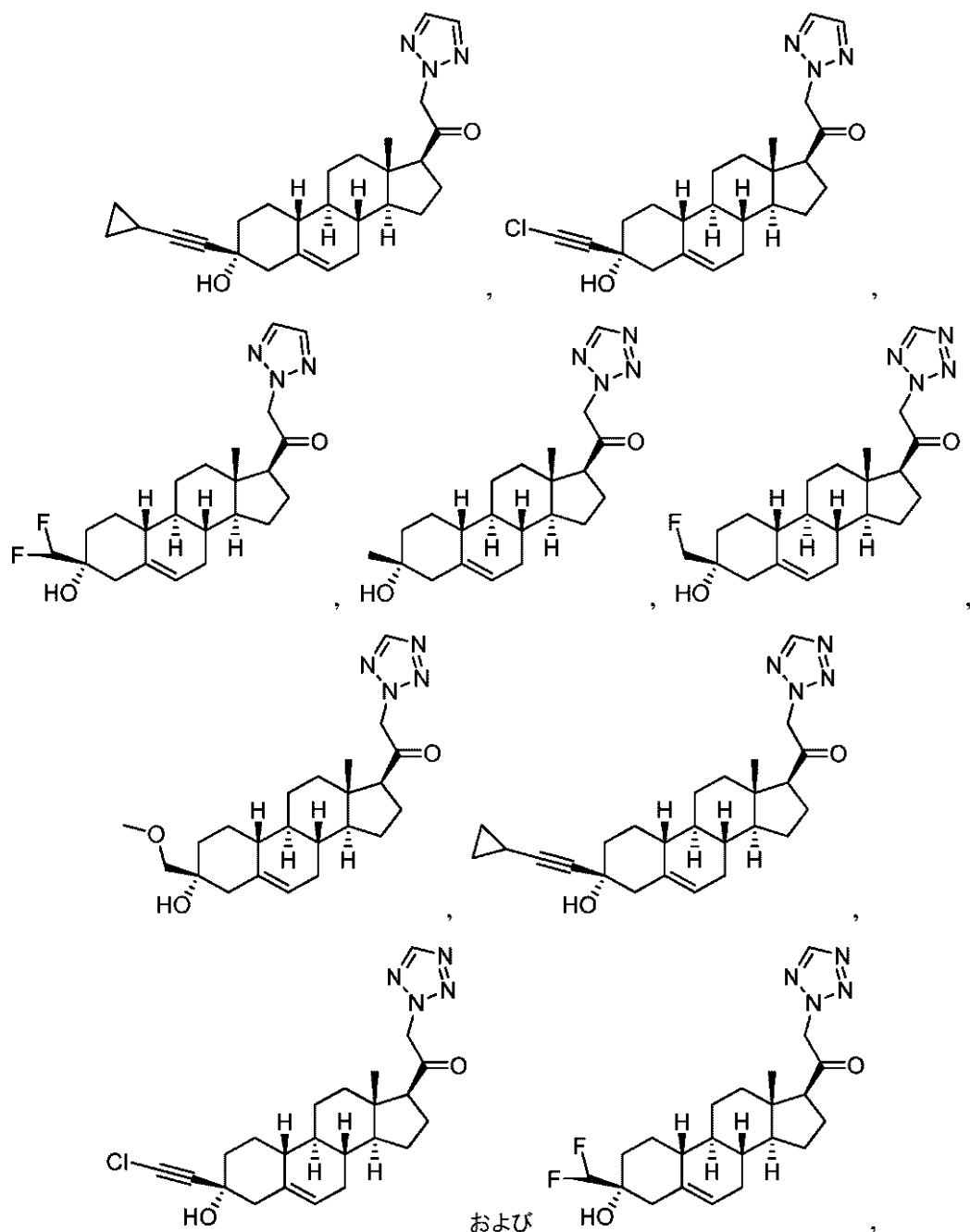
【化 1 4 7】



【化 1 4 8】



【化149】

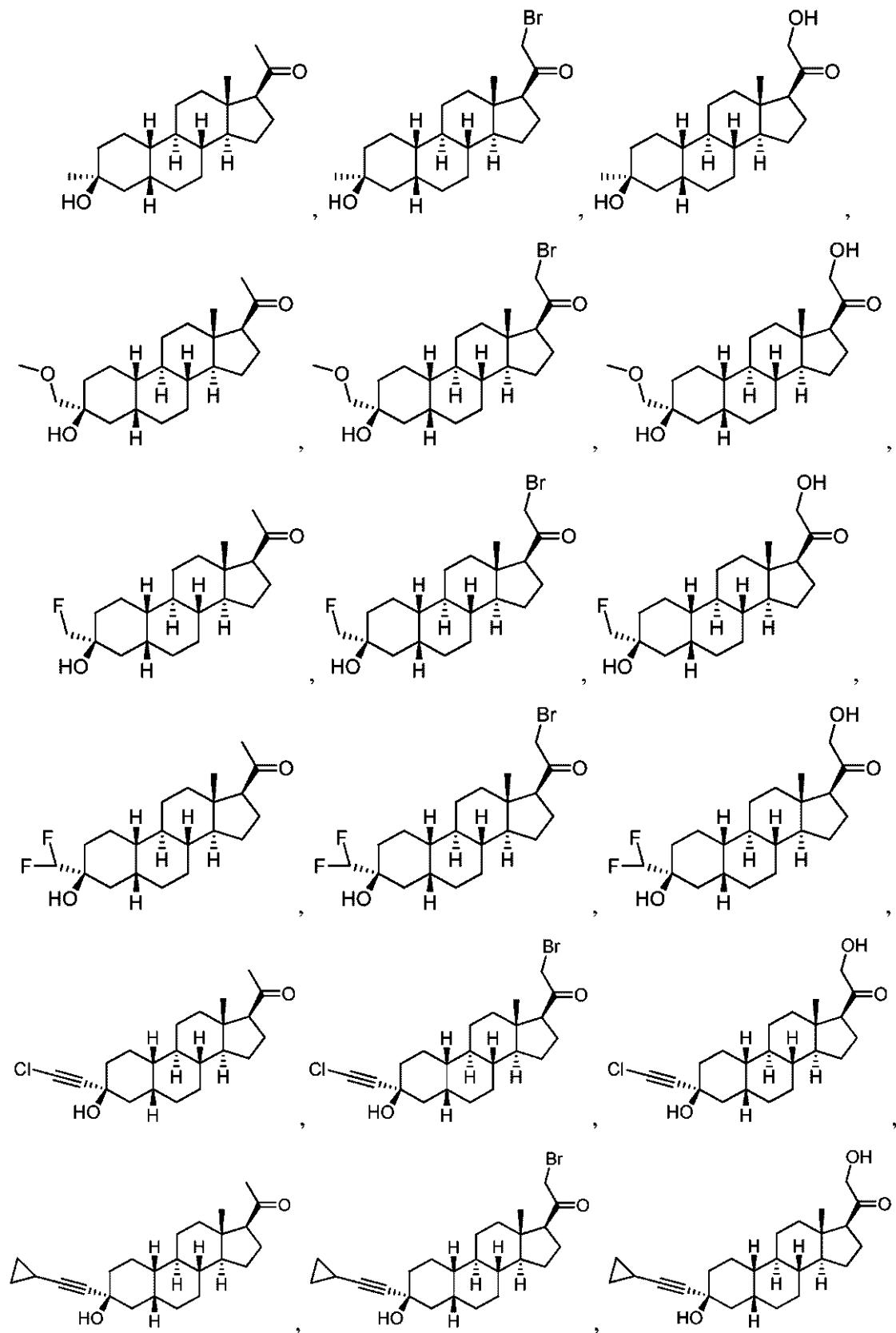


ならびにその薬学的に許容され得る塩からなる群より選択される、項目1に記載の化合物。

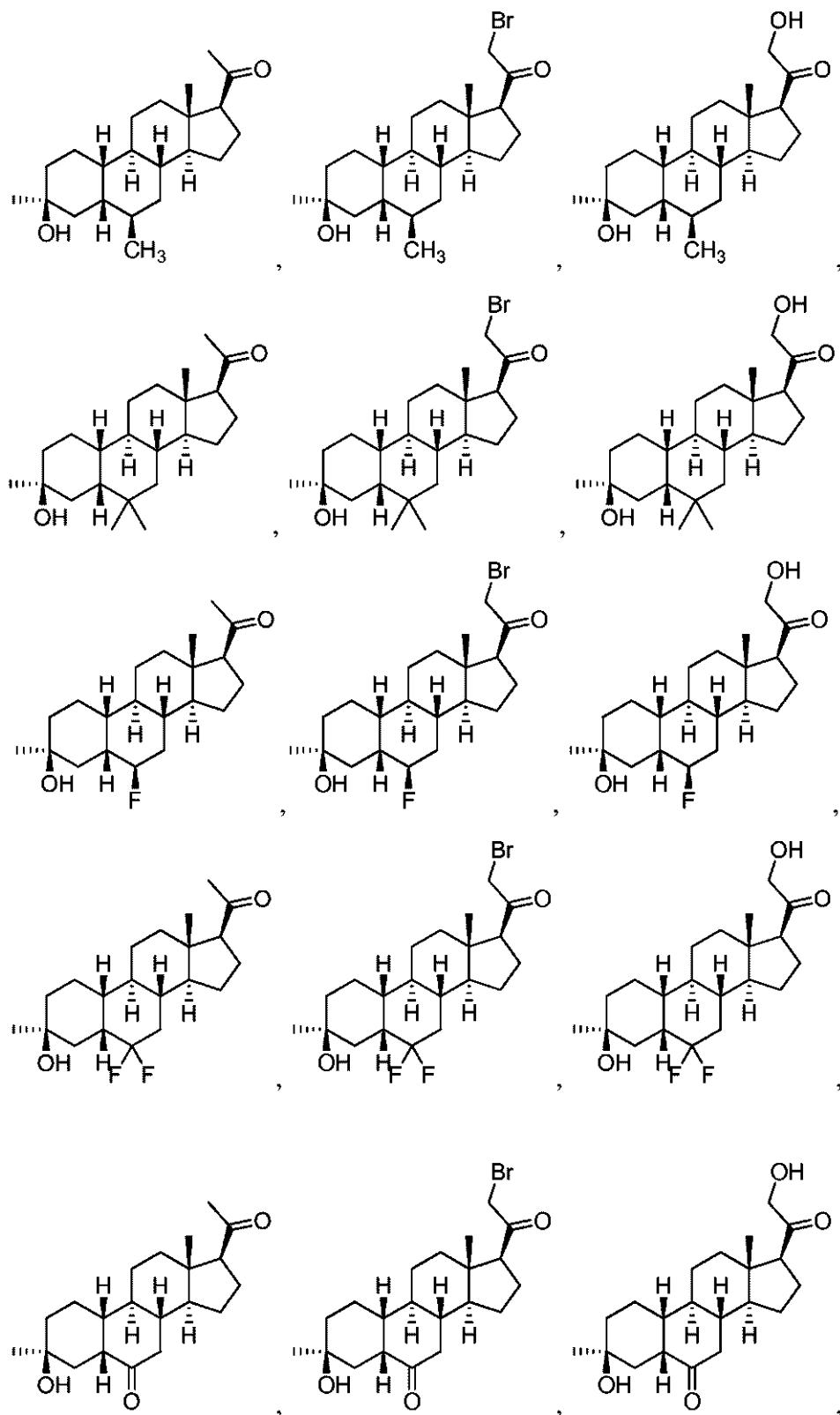
(項目26)

前記化合物が：

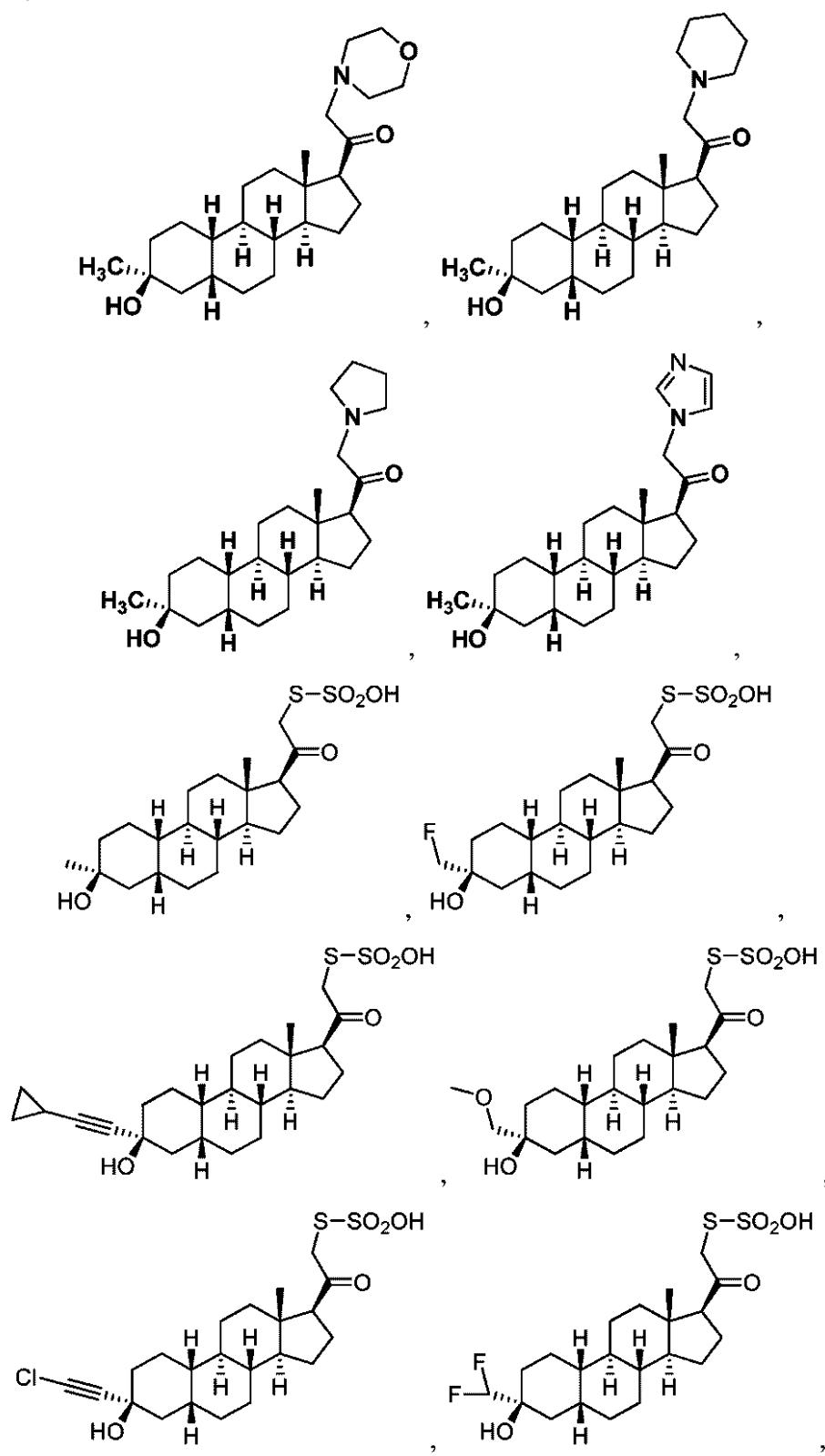
【化 1 5 0】



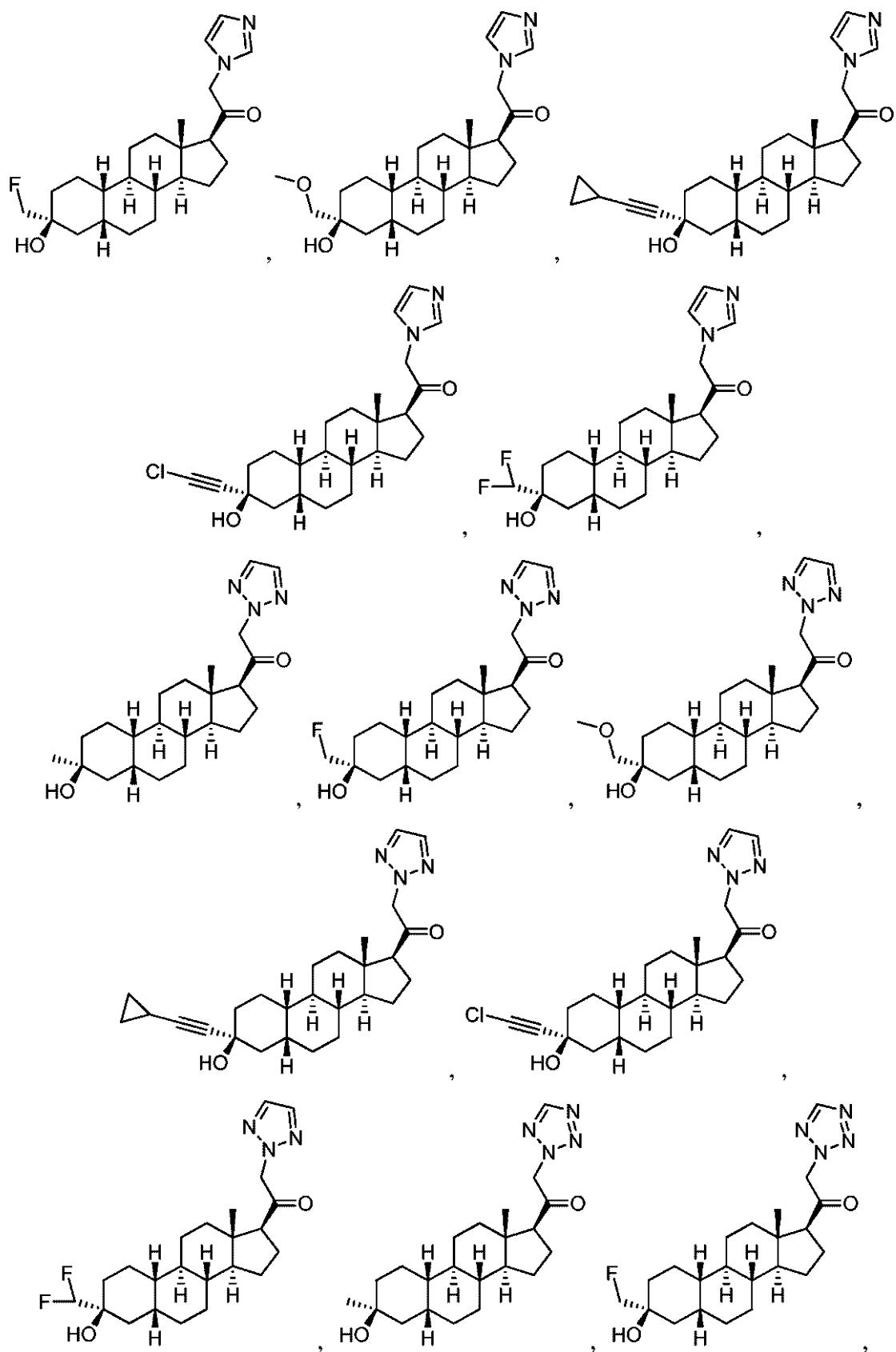
【化 151】



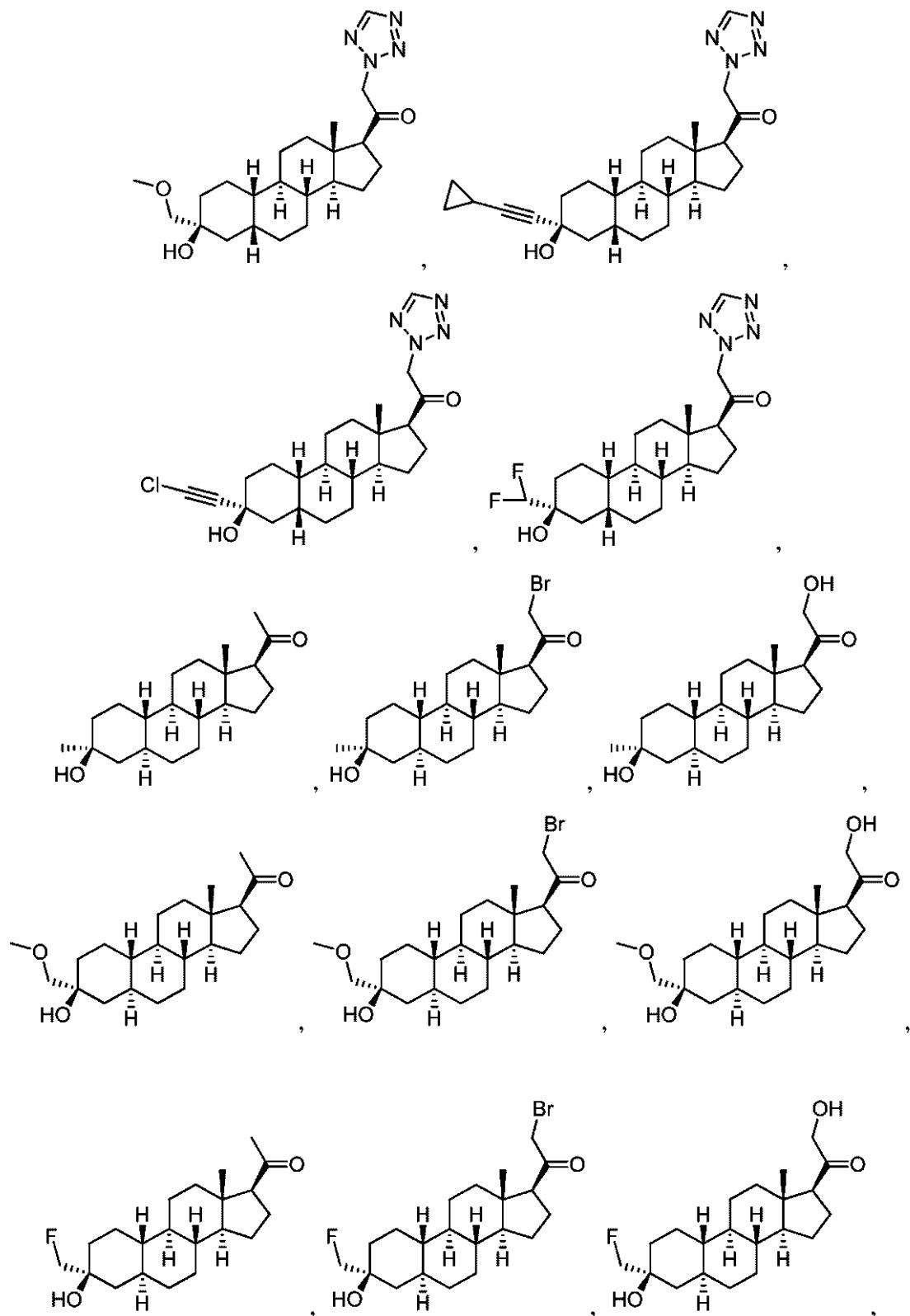
【化 1 5 2】



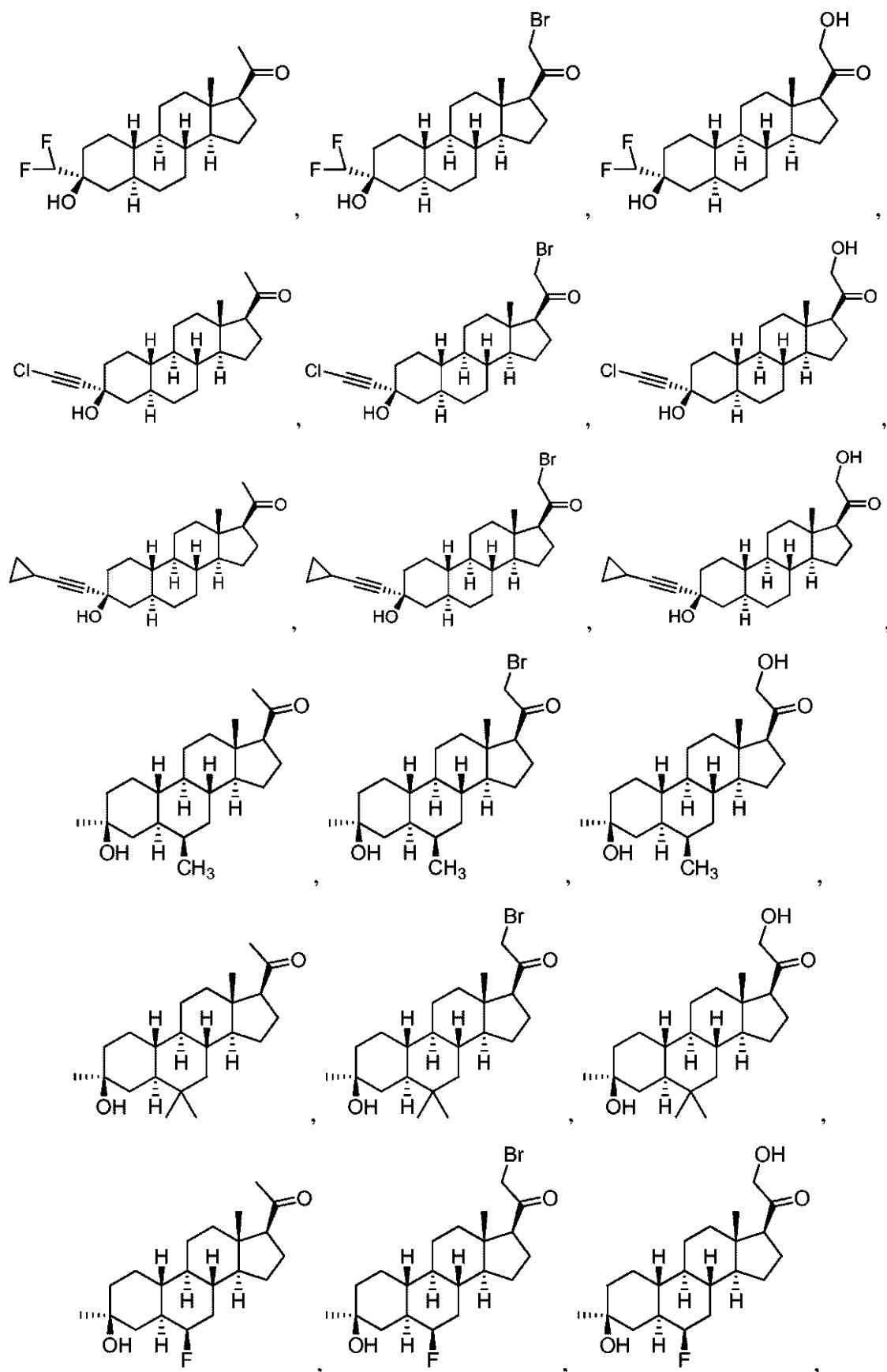
【化 1 5 3】



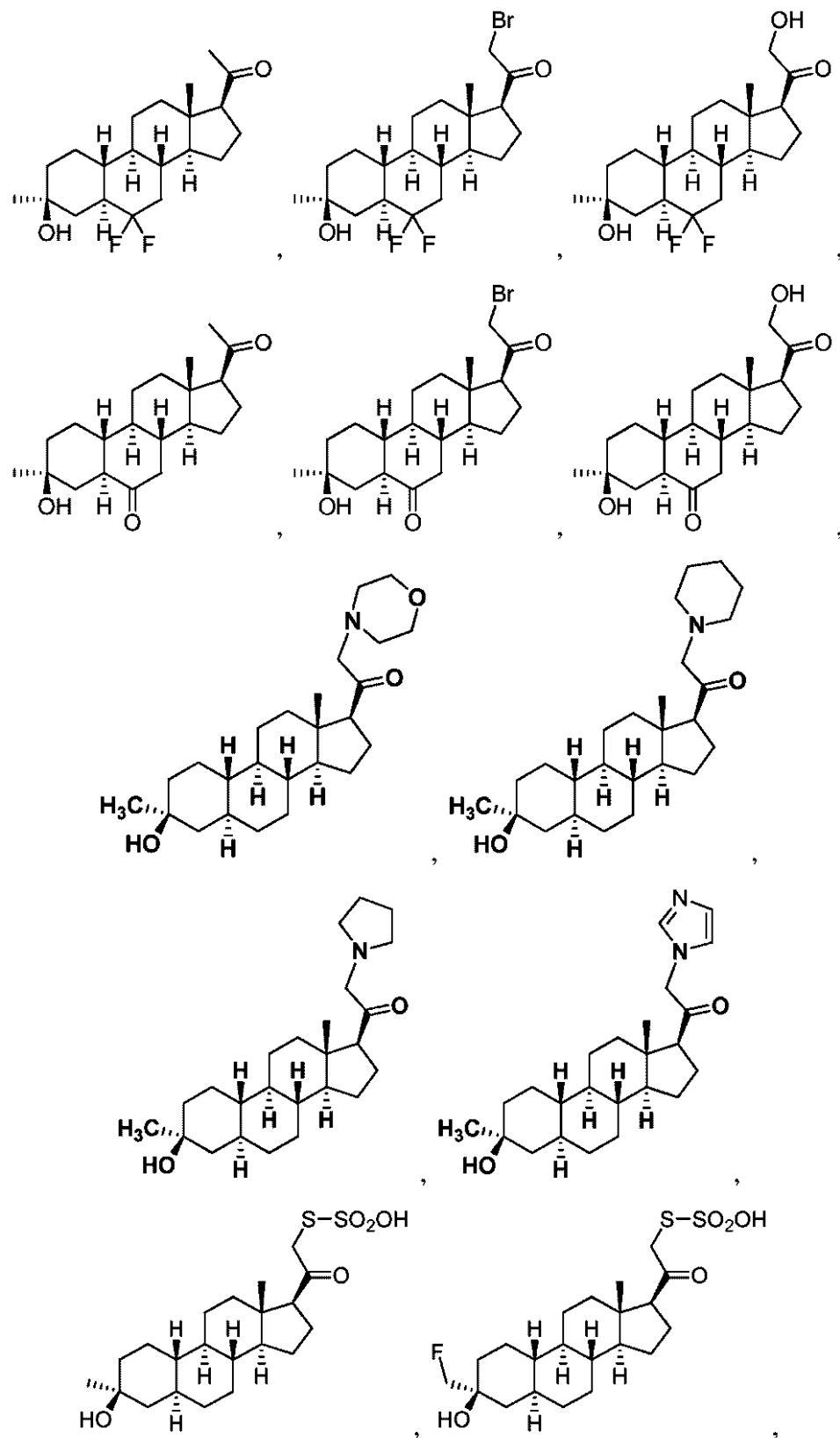
【化 1 5 4】



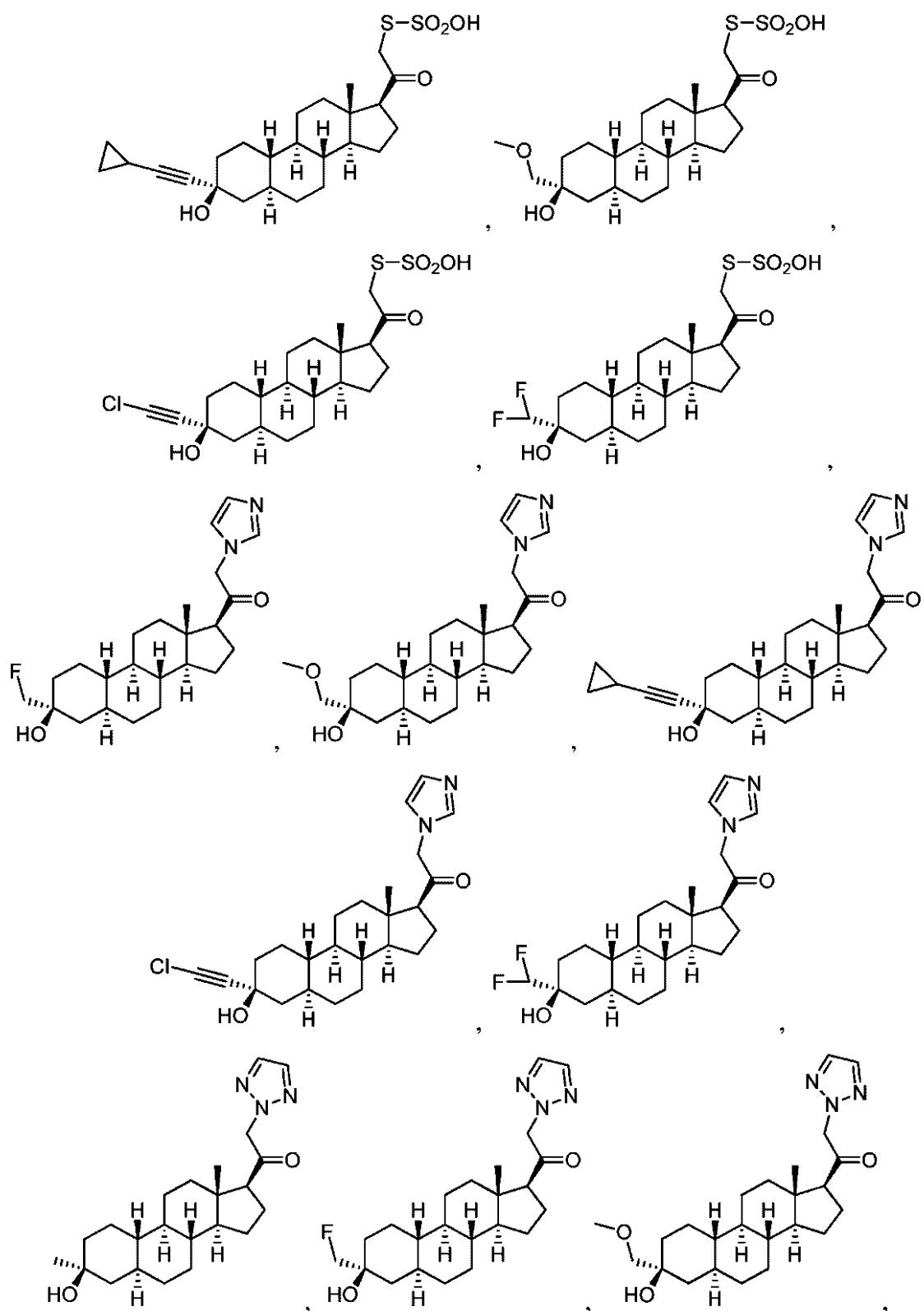
【化 1 5 5】



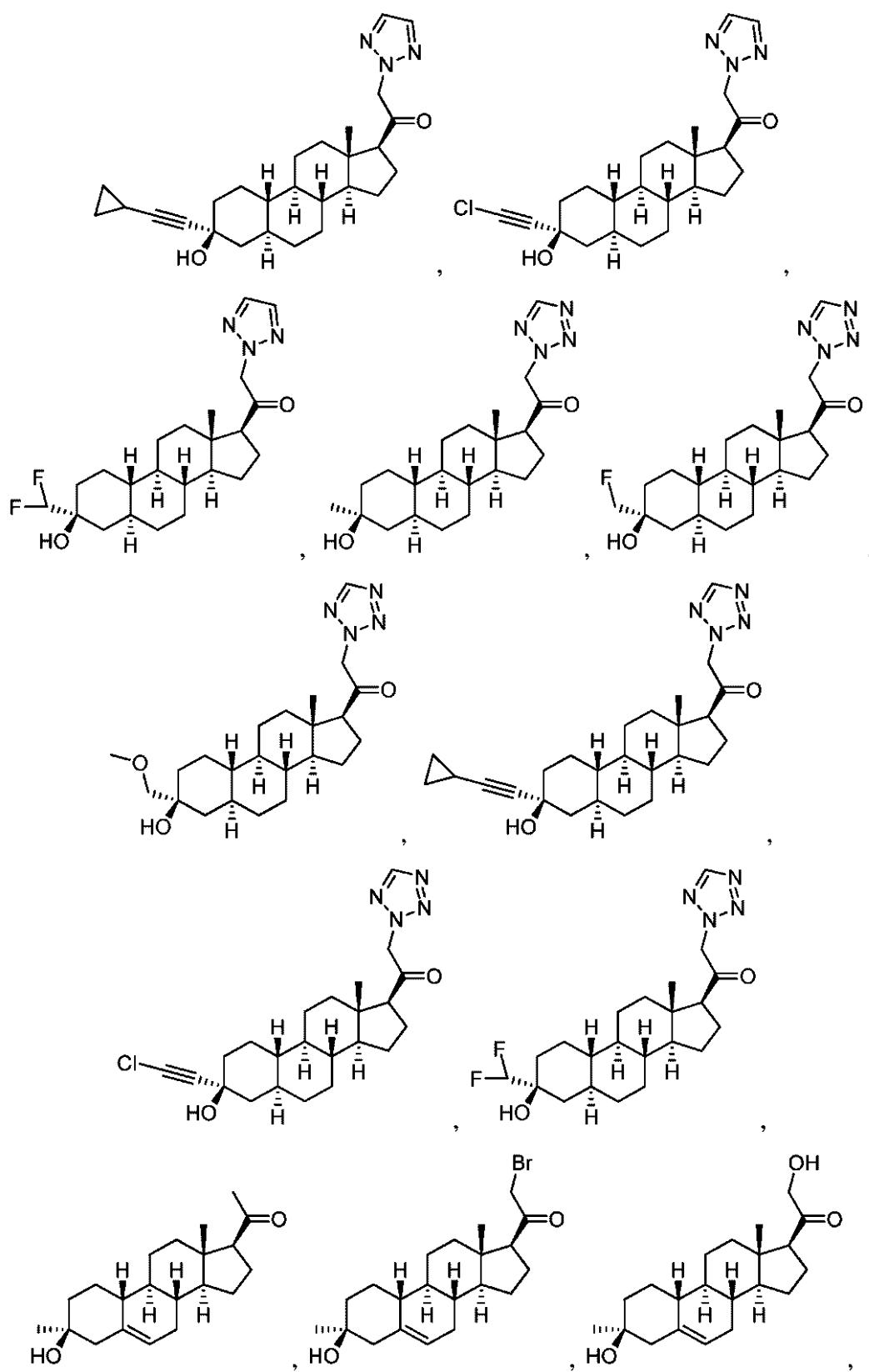
【化 1 5 6】



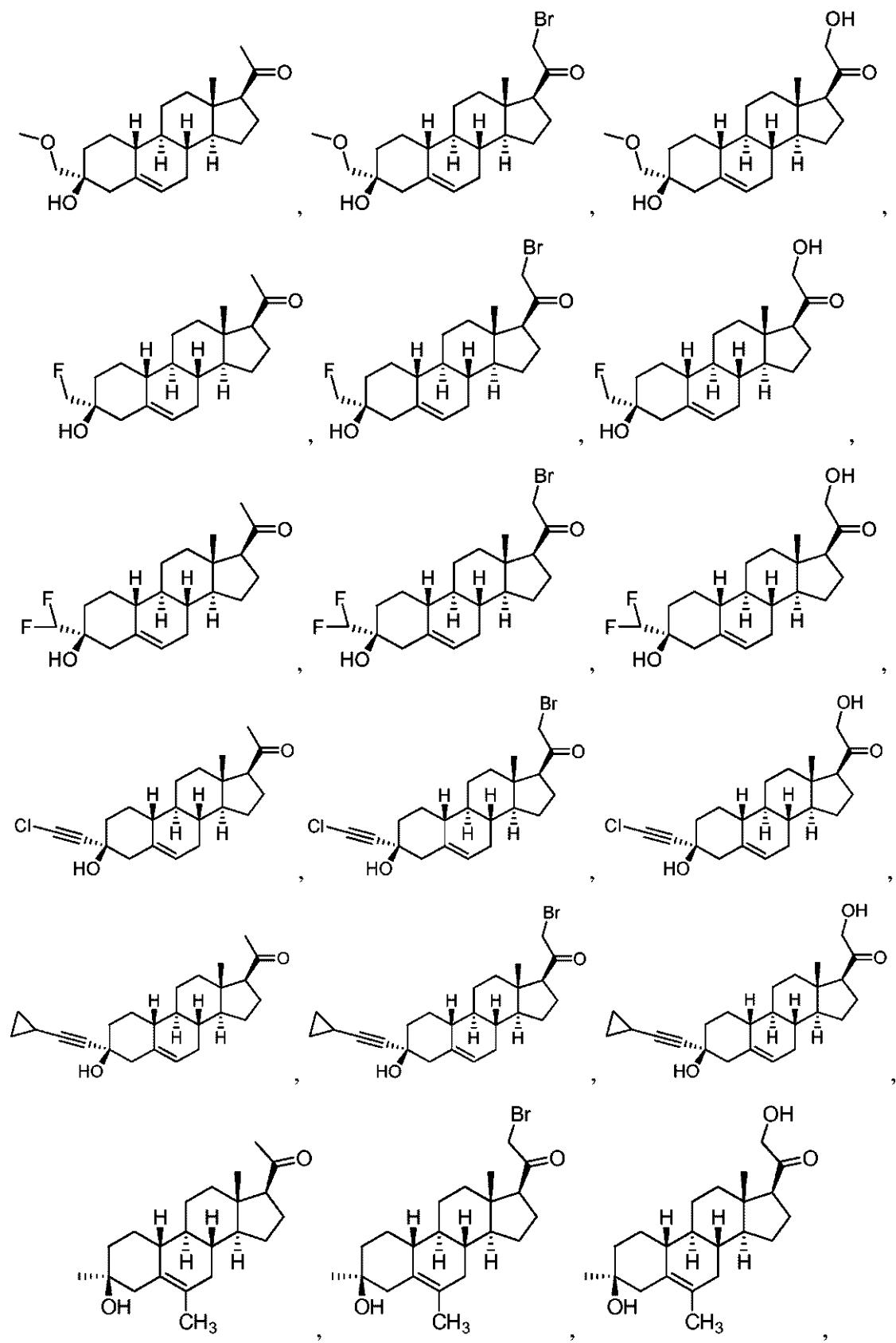
【化 157】



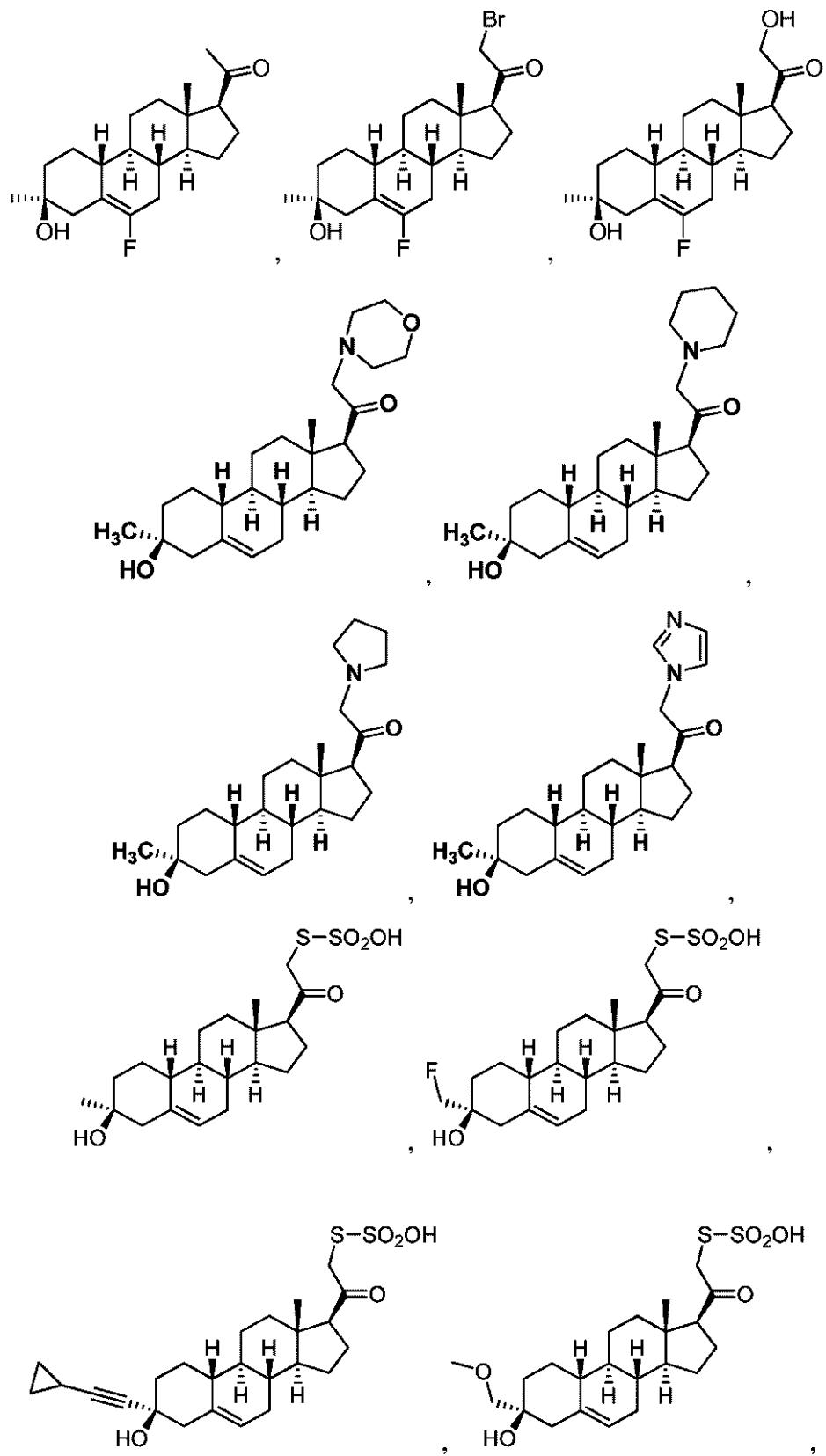
【化 158】



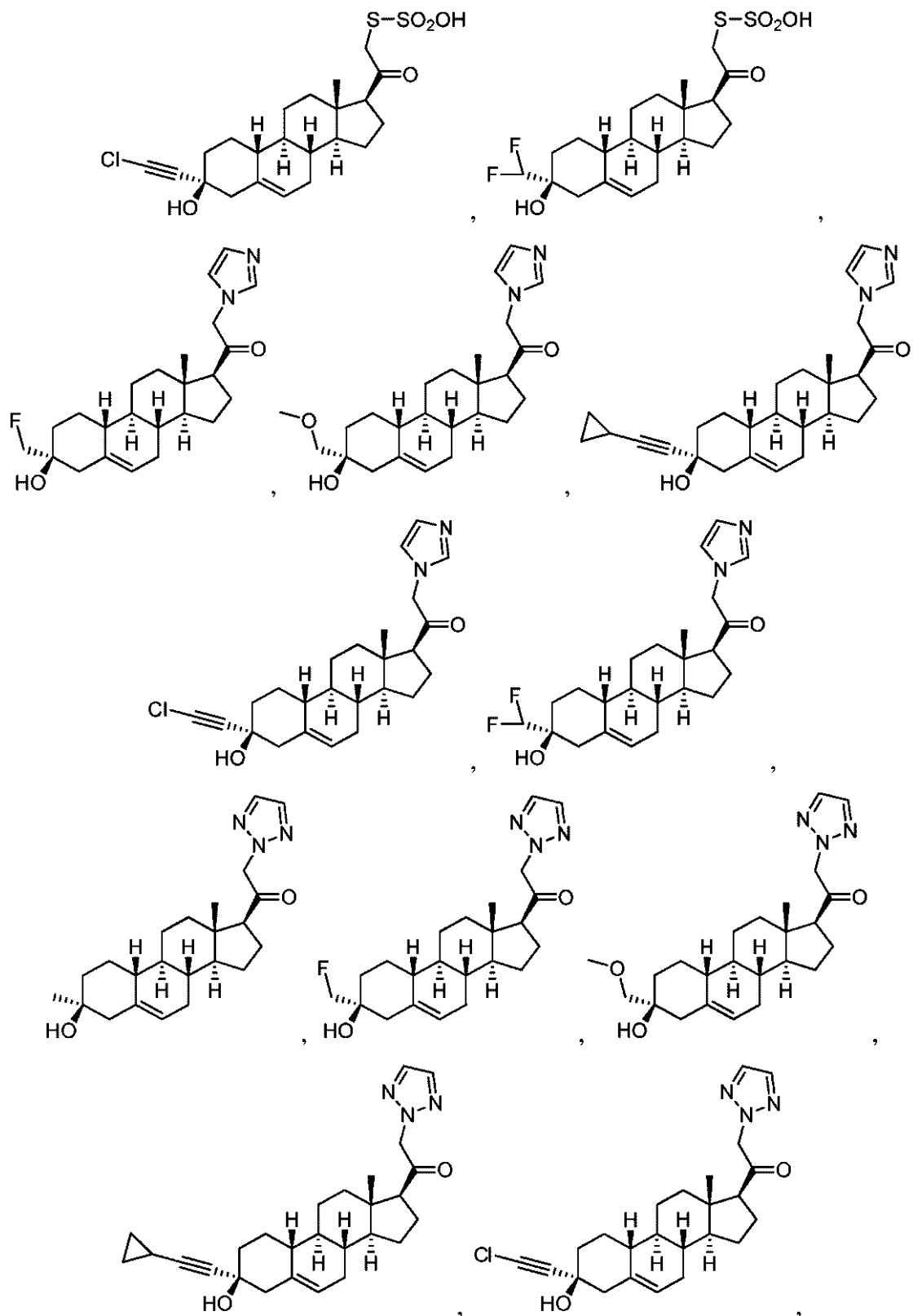
【化 1 5 9】



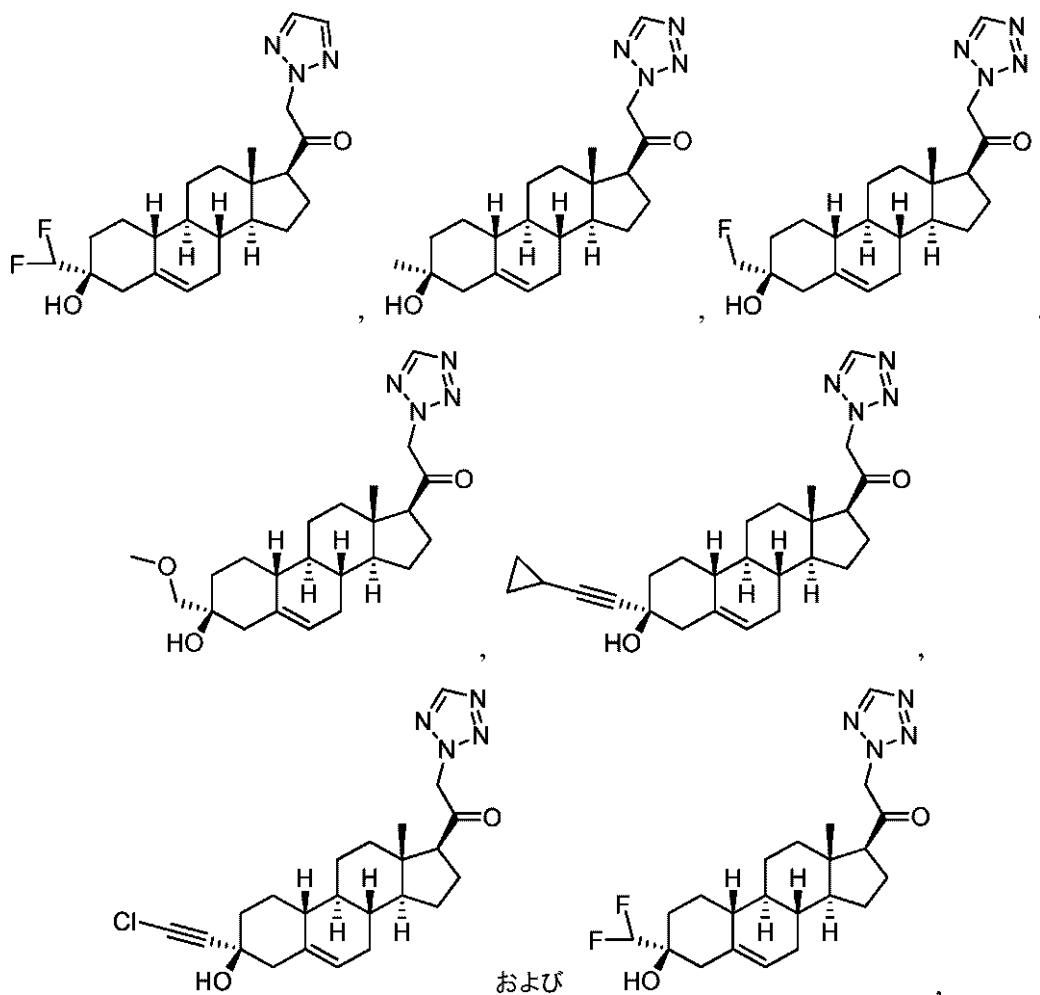
【化 1 6 0】



【化 161】



【化162】



ならびにその薬学的に許容され得る塩からなる群より選択される、項目2に記載の化合物。

(項目27)

薬学的に許容され得るキャリアおよび項目1～26のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を含む、薬学的組成物。

(項目28)

CNS関連障害の処置を必要とする被験体におけるCNS関連障害を処置するための方法であって、有効量の項目1～21のいずれか1項に記載の化合物またはその薬学的に許容され得る塩を該被験体に投与する工程を含む、方法。

(項目29)

前記疾患または症状が、不眠、うつ、気分障害、痙攣性障害、記憶障害、注意障害、不安障害、双極性障害、精神分裂病、うつ、双極性障害、統合失調感情障害、気分障害、不安障害、人格障害、精神病、強迫性障害、外傷後ストレス障害、自閉症圏障害、気分変調、社会不安障害、強迫性障害、疼痛、睡眠障害、記憶障害、認知症、アルツハイマー病、発作性障害、外傷性脳損傷、脳卒中、嗜癖障害、自閉症、ハンチントン病、パーキンソン病、レット症候群、離脱症候群または耳鳴である、項目28に記載の方法。

(項目30)

前記化合物が、経口的に投与される、項目28に記載の方法。

(項目31)

前記化合物が、慢性的に投与される、項目28に記載の方法。