

【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】令和 3 年 12 月 2 日 (2021.12.2)

【公表番号】特表 2021-513543 (P2021-513543A)

【公表日】令和 3 年 5 月 27 日 (2021.5.27)

【年通号数】公開・登録公報 2021-024

【出願番号】特願 2020-543112 (P2020-543112)

【国際特許分類】

C 0 7 D 207/337 (2006.01)

A 6 1 P 31/04 (2006.01)

C 0 7 D 307/16 (2006.01)

C 0 7 D 307/24 (2006.01)

C 0 7 D 405/06 (2006.01)

C 0 7 D 231/12 (2006.01)

C 0 7 D 401/10 (2006.01)

C 0 7 D 401/04 (2006.01)

C 0 7 D 333/24 (2006.01)

C 0 7 D 409/04 (2006.01)

C 0 7 D 405/10 (2006.01)

A 6 1 P 43/00 (2006.01)

A 6 1 K 31/341 (2006.01)

A 6 1 K 31/496 (2006.01)

A 6 1 K 31/5377 (2006.01)

A 6 1 K 31/443 (2006.01)

A 6 1 K 31/40 (2006.01)

A 6 1 K 31/4439 (2006.01)

A 6 1 K 31/381 (2006.01)

A 6 1 K 31/4436 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 D 207/337

A 6 1 P 31/04

C 0 7 D 307/16 C S P

C 0 7 D 307/24

C 0 7 D 405/06

C 0 7 D 231/12 Z

C 0 7 D 231/12 B

C 0 7 D 401/10

C 0 7 D 401/04

C 0 7 D 333/24

C 0 7 D 409/04

C 0 7 D 405/10

A 6 1 P 43/00 1 1 1

A 6 1 K 31/341

A 6 1 K 31/496

A 6 1 K 31/5377

A 6 1 K 31/443

A 6 1 K 31/40

A 6 1 K 31/4439

A 6 1 K 31/381

A 6 1 K 31/4436

【手続補正書】

【提出日】令和3年10月22日(2021.10.22)

【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

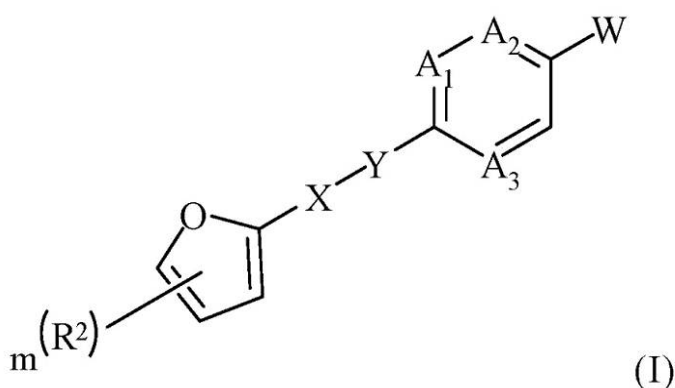
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

一般式(I)で表される化合物、その薬学的に許容可能な塩、そのエステル、そのプロドラッグ、その溶媒和物、又はその重水素化合物、又はその立体異性体：

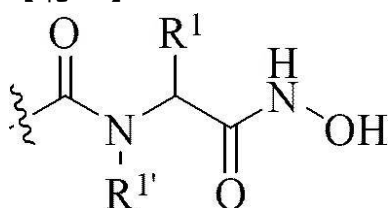
【化1】



その内、

Wは

【化2】



であり、

$R^1$  は、 $-(CH_2)_{0-4}C(R^{1a}, R^{1b})(CH_2)_{0-4}OR^3$ 、 $-(CH_2)_{0-4}C(O)NR^4R^5$ 、 $-(CH_2)_{0-4}C(R^{1a}, R^{1b})NR^4R^5$ 、 $-(CH_2)_{0-4}C(R^{1a}, R^{1b})(CH_2)_{0-4}S(O)_{0-2}R^6$  及び  $-(CH_2)_{0-4}C(R^{1a}, R^{1b})(CH_2)_{0-4}SC(O)R^7$  から選択され、

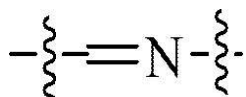
但し、 $R^{1a}$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$  及び  $R^7$  は、それぞれ独立して、H、 $C_{1-6}$ アルキル基及びOHから選択され、

$R^{1'}$  は、水素及び $C_{1-6}$ アルキル基から選択され、

$A_1$ 、 $A_2$ 、 $A_3$  は、それぞれ独立して、CH及びヘテロ原子から選択され、

X、Yは、それぞれ独立して、ベンゼン環基、3-8員不飽和複素環基、アルケニル基、アルキニル基及び

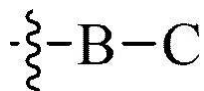
【化3】



から選択され、

$R^2$  は、

【化 4】



であり、

Bは、存在しないし、又は、 $-(C_{1-8}\text{アルキル基})-$ であり、但し、前記 $-(C_{1-8}\text{アルキル基})$ における0~2個炭素原子がO又は $NR^8$ で取り替えても良く、

Cは、 $C_{1-6}$ アルキル基、 $-OR^9$ 、 $-NR^9R^{9'}$ 、フェニル及び3-8員飽和及び/又は不飽和の複素環基から選択され、

$R^8$ 、 $R^9$ 及び $R^{9'}$ は、それぞれ独立して、水素原子、 $C_{1-6}$ アルキル基及び $C_{3-6}$ シクロアルキル基から選択され、

mは、0、1、2又は3である。

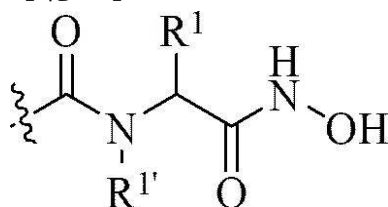
【請求項 2】

請求項1に記載の化合物、その薬学的に許容可能な塩、そのエステル、そのプロドラッグ、その溶媒和物、又はその重水素化合物、又はその立体異性体：

その内、

Wは

【化 5】



であり、

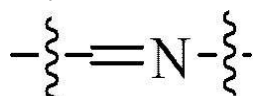
$R^1$ は、 $-C(R^{1a}, R^{1b})OR^3$ 及び $-C(O)NR^4R^5$ から選択され、但し、 $R^{1a}$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ は、それぞれ独立して、水素原子、メチル基及びヒドロキシル基から選択され、

$R^{1'}$ は、水素及び $C_{1-4}$ アルキル基から選択され、

$A_1$ 、 $A_2$ 、 $A_3$ は、それぞれ独立して、CH及びNから選択され、

X、Yは、それぞれ独立して、ベンゼン環基、5-6員不飽和複素環基、アルケニル基、アルキニル基及び

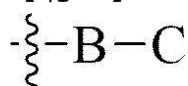
【化 6】



から選択され、

$R^2$  は

【化 7】



であり、

Bは、存在しないし、又は、 $-(C_{1-4}\text{アルキル基})-$ であり、

Cは、 $-OR^9$ 及び $-NR^9R^{9'}$ から選択され、

$R^9$ 、 $R^{9'}$  は、それぞれ独立して、水素原子、メチル基、エチル基、イソプロピル基から選択され、

$m$ は、0、1又は2である。

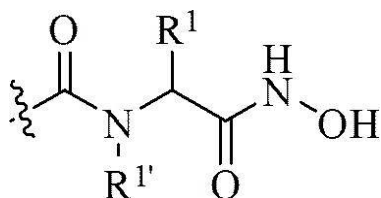
【請求項3】

請求項1又は請求項2に記載の化合物、その薬学的に許容可能な塩、そのエステル、そのプロドラッグ、その溶媒和物、又はその重水素化合物、又はその立体異性体：

その内、

$W$ は

【化8】



であり、

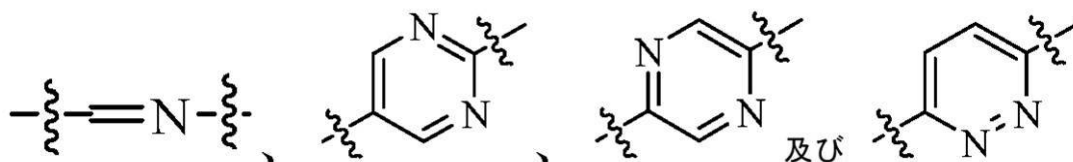
$R^1$  は、 $-C(H, CH_3)OH$  及び  $-C(O)NHCH_3$  から選択され、

$R^{1'}$  は、水素、メチル基、エチル基から選択され、

$A_1$ 、 $A_2$ 、 $A_3$  は、それぞれ独立して、CH及びNから選択され、

$X$ 、 $Y$ は、それぞれ独立して、ベンゼン環基、ピロール環基、イミダゾール環基、ピラゾール環基、1,2,3-トリアゾール環基、1,2,4-トリアゾール環基、テトラゾール環基、フラン環、オキサゾール環基、イソオキサゾール環基、1,2,4-オキサジアゾール環基、ピリジン環基、アルケニル基、アルキニル基、

【化9】



から選択され、

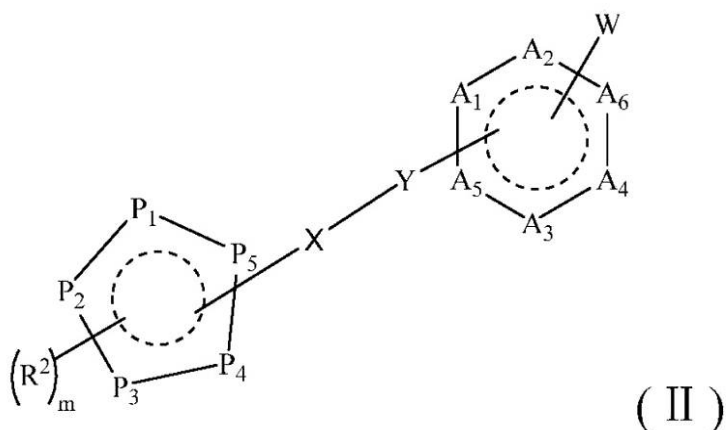
$R^2$  は  $-CH_2OH$  であり、

$m$ は、0又は1である。

【請求項4】

一般式(II)で表される化合物、その薬学的に許容可能な塩、そのエステル、そのプロドラッグ、その溶媒和物、又はその重水素化合物、又はその立体異性体：

【化10】



その内、

Wは-(置換基で置換されても良い $C_{0-8}$ アルキル基)-C(O)-N(R<sup>1'</sup>)-(R<sup>1</sup>で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基)-C(O)-N(H)-OHであり、

R<sup>1</sup>は、それぞれ独立して、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基、-(置換基で置換されても良い $C_{0-8}$ アルキル基)C(O)NR<sup>4</sup>R<sup>5</sup>、-(置換基で置換されても良い $C_{0-8}$ アルキル基)S(O)<sub>1-2</sub>R<sup>3</sup>及び-(置換基で置換されても良い $C_{0-8}$ アルキル基)S(O)<sub>1-2</sub>NR<sup>4</sup>R<sup>5</sup>から選択され、但し、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>及びR<sup>5</sup>は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基、置換基で置換されても良い $C_{2-8}$ アルケニル基及び置換基で置換されても良い $C_{2-8}$ アルキニル基から選択され、

R<sup>1'</sup>は、水素原子、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、カルボキシ基、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基、置換基で置換されても良い $C_{2-8}$ アルケニル基及び置換基で置換されても良い $C_{2-8}$ アルキニル基から選択され、又はR<sup>1'</sup>はWの定義中の置換基で置換されても良い $C_{0-8}$ アルキル基における炭素原子に結合して、N、C(O)と一緒に、5-6員複素環基を形成してもよく、好ましくはR<sup>1'</sup>は、水素原子、ヒドロキシ基、ハロゲン原子及び $C_{1-8}$ アルキル基から選択され、又はR<sup>1'</sup>はWの定義中の置換基で置換されても良い $C_{0-8}$ アルキル基における炭素原子に結合して、N、C(O)と一緒に、5-6員不飽和複素環基を形成してもよく、更に好ましくはR<sup>1'</sup>は、水素原子、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、sec-ブチル基及びt-ブチル基から選択され、又はR<sup>1'</sup>はWの定義中の置換基で置換されても良い $C_{0-8}$ アルキル基における炭素原子に結合して、N、C(O)と一緒に、6員不飽和複素環基を形成してもよく、

A<sub>1</sub>、A<sub>2</sub>、A<sub>3</sub>、A<sub>4</sub>、A<sub>5</sub>及びA<sub>6</sub>は、それぞれ独立して、CR<sup>a</sup>R<sup>a</sup>、NR<sup>c</sup>、O及びSから選択され、

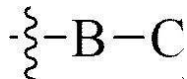
X、Yは、それぞれ独立して、単結合、置換基で置換されても良い5-14員ヘテロアリール基、置換基で置換されても良い6-14員アリール基、-(C=C)-、-(C-C)-、=N-、-C(O)-NR<sup>c</sup>-から選択され、但し、X及びYの少なくとも一つは単結合ではなく、好ましくは、X及びYは共に置換基で置換されても良い6-14員アリール基ではなく、好ましくは、X及びYの一方が単結合であると、他方が置換基で置換されても良い6-14員アリール基ではなく、

P<sub>1</sub>、P<sub>2</sub>、P<sub>3</sub>、P<sub>4</sub>及びP<sub>5</sub>は、それぞれ独立して、CR<sup>a</sup>R<sup>a</sup>、NR<sup>c</sup>、O及びSから選択され、好ましくは、P<sub>1</sub>、P<sub>2</sub>、P<sub>3</sub>、P<sub>4</sub>及びP<sub>5</sub>は、少なくとも一つがNR<sup>c</sup>、O及びSから選択され、より好ましくは、Xは、五員環状基のC原子に結合し、

mは、0-4の整数であり、好ましくは0、1、2又は3であり、

R<sup>2</sup>は出現する度に、それぞれ独立して、

【化 1 1】



であり、

Bは出現する度に、独立して、単結合、又は、それぞれ独立して、少なくとも一つ炭素原子がS、O及びNR<sup>c</sup>から選択される少なくとも一つの原子で取り替えてもよい及び/又は置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基、少なくとも一つ炭素原子がS、O及びNR<sup>c</sup>から選択される少なくとも一つの原子で取り替えてもよい及び/又は置換基で置換されても良い $C_{2-8}$ アルケニル基及び少なくとも一つ炭素原子がS、O及びNR<sup>c</sup>から選択される少なくとも一つの原子で取り替えてもよい及び/又は置換基で置換されても良い $C_{2-8}$ アルキニル基から選択され、

Cは出現する度に、独立して、水素原子、シアノ基、メルカプト、ハロゲン原子、カルボキシ基、ニトロ基、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルコキシ基、-OR<sup>c</sup>、-NR<sup>c</sup>R<sup>c</sup>、置換基で置換されても良い3-12員シクロアルキル基、置換基で置換されても良い3-12員複素環基、置換基で置換されても良い5-14員ヘテロアリール基及び置換基で置換されても良い6-14員アリール基から選択され、

R<sup>a</sup>は存在しないし、又は存在する度に、それぞれ独立して、水素原子、シアノ基、メルカプト、ハロゲン原子、カルボキシ基、ニトロ基、-OR<sup>c</sup>、-NR<sup>c</sup>R<sup>c</sup>、-N(OH)R<sup>c</sup>、-C(O)R<sup>d</sup>

、 $-C(O)OR^c$ 、 $-C(O)NR^cR^c$ 、 $-OC(O)NR^cR^c$ 、 $-NR^cC(O)OR^c$ 、 $-NR^cC(O)R^d$ 、 $-S(O)_{1-2}-NR^cR^c$ 、 $-S(O)_{1-2}R^d$ 、 $-NR^cS(O)_{1-2}R^d$ 、 $-S(O)_{1-2}-OR^c$ 、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基、 $-(置換基で置換されても良いC_{1-8}アルキル基)OR^c$ 、 $-(置換基で置換されても良いC_{1-8}アルキル基)NR^cR^c$ 、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルコキシ基、置換基で置換されても良い $C_{2-8}$ アルケニル基、置換基で置換されても良い $C_{2-8}$ アルキニル基、置換基で置換されても良い3-12員シクロアルキル基、置換基で置換されても良い3-12員複素環基、置換基で置換されても良い6-14員アリール基及び置換基で置換されても良い5-14員ヘテロアリール基から選択され、

$R^c$ は存在しないし、又は存在する度に、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、カルボキシ基、 $-C(O)R^d$ 、 $-C(O)OR^b$ 、 $-C(O)NR^bR^b$ 、 $-S(O)_{1-2}-NR^bR^b$ 、 $-S(O)_{1-2}R^d$ 、 $-S(O)_{1-2}-OR^b$ 、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基、 $-(置換基で置換されても良いC_{1-8}アルキル基)OR^b$ 、 $-(置換基で置換されても良いC_{1-8}アルキル基)NR^bR^b$ 、置換基で置換されても良い $C_{2-8}$ アルケニル基、置換基で置換されても良い $C_{2-8}$ アルキニル基、置換基で置換されても良い3-12員シクロアルキル基、置換基で置換されても良い3-12員複素環基、置換基で置換されても良い6-14員アリール基及び置換基で置換されても良い5-14員ヘテロアリール基から選択され、又は二つ $R^c$ は同じ原子に結合する場合、二つ $R^c$ が結合する原子と一緒に、置換基で置換されても良い3-12員複素環を形成してもよく、

$R^b$ は存在する度に、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、カルボキシ基、スルホン酸基、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基スルホニル基、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基スルフィニル基、置換基で置換されても良い3-12員シクロアルキル基、置換基で置換されても良い3-12員複素環基、置換基で置換されても良い6-14員アリール基及び置換基で置換されても良い5-14員ヘテロアリール基から選択され、又は二つ $R^b$ は同じ原子に結合する場合、二つ $R^b$ が結合する原子と一緒に、置換基で置換されても良い3-12員複素環を形成してもよく、

$R^d$ は存在する度に、それぞれ独立して、水素原子、ヒドロキシ基、メルカプト、ハロゲン原子、カルボキシ基、ニトロ基、アミノ基、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基アミノ基、 $(置換基で置換されても良いC_{1-8}アルキル基)_2$ アミノ基、スルホン酸基、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルコキシ基、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基スルホニル基、置換基で置換されても良い $C_{1-8}$ アルキル基スルフィニル基、置換基で置換されても良い3-12員シクロアルキル基、置換基で置換されても良い3-12員複素環基、置換基で置換されても良い6-14員アリール基及び置換基で置換されても良い5-14員ヘテロアリール基から選択され、

前記「置換基で置換されても良い」において置換基は、それぞれ独立して、ヒドロキシ基、メルカプト、カルボキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ハロゲン原子、スルホン酸基、 $C_{1-8}$ アルキル基、 $C_{1-8}$ アルコキシ基 $C_{1-8}$ アルキル基、ヒドロキシ基 $C_{1-8}$ アルキル基、アミノ基 $C_{1-8}$ アルキル基、カルボキシ基 $C_{1-8}$ アルキル基、エステル基 $C_{1-8}$ アルキル基、 $C_{1-8}$ アルコキシ基、ヒドロキシ基 $C_{1-8}$ アルコキシ基、アミノ基 $C_{1-8}$ アルコキシ基、カルボキシ基 $C_{1-8}$ アルコキシ基、 $C_{1-8}$ アルキル基 $C_{1-8}$ アルコキシ基、 $C_{1-8}$ アルコキシ基 $C_{1-8}$ アルコキシ基、エステル基 $C_{1-8}$ アルコキシ基、 $C_{1-8}$ アルキル基アミノ基、 $(C_{1-8}アルキル基)_2$ アミノ基、アミノ基 $C_{1-8}$ アルキル基アミノ基、 $(アミノ基C_{1-8}アルキル基)_2$ アミノ基、 $C_{1-8}$ アルキル基エステル基、アミノ基カルボニル基、 $C_{1-8}$ アルキル基アミノ基カルボニル基、 $(C_{1-8}アルキル基)_2$ アミノ基カルボニル基、 $C_{1-8}$ アルキル基カルボニル基、 $C_{1-8}$ アルキル基カルボニル基オキシ基、 $C_{1-8}$ アルキル基カルボニル基アミノ基、 $C_{1-8}$ アルキル基スルホニル基アミノ基、ハロゲン化 $C_{1-8}$ アルキル基、ハロゲン化 $C_{1-8}$ アルコキシ基、 $C_{1-8}$ アルキル基スルホニル基、 $C_{1-8}$ アルキル基スルフィニル基、 $C_{1-8}$ アルキル基スルファニル基、3-12員シクロアルキル基、6-14員アリール基、3-12員複素環基、5-14員ヘテロアリール基及びオキソ基から選択され、

五員環状基及び六員環状基において、

## 【化 1 2】



は環状基に存在しても良い二重結合であり、

条件として、 $R^1$ は置換基で置換された $C_{1-8}$ アルキル基、且つ置換基にヒドロキシル基が存在する際、前記 $C_{1-8}$ アルキル基において、各炭素原子には水素原子を少なくとも一つ結合し、

$R^1$ は置換基で置換された $C_{1-8}$ アルキル基、且つ置換基にヒドロキシル基が存在する際、五員環状基はイミダゾール環基ではなく、

$R^1$ は置換基で置換された $C_{1-8}$ アルキル基、且つ置換基にアミノ基、 $C_{1-8}$ アルキル基アミノ基又は $(C_{1-8}$ アルキル基) $_2$ アミノ基が存在する際、X及びYの少なくとも一つは、置換基で置換されても良い6-14員アリール基であり、

五員環状基はチオフェン環基である場合、mは0ではなく、

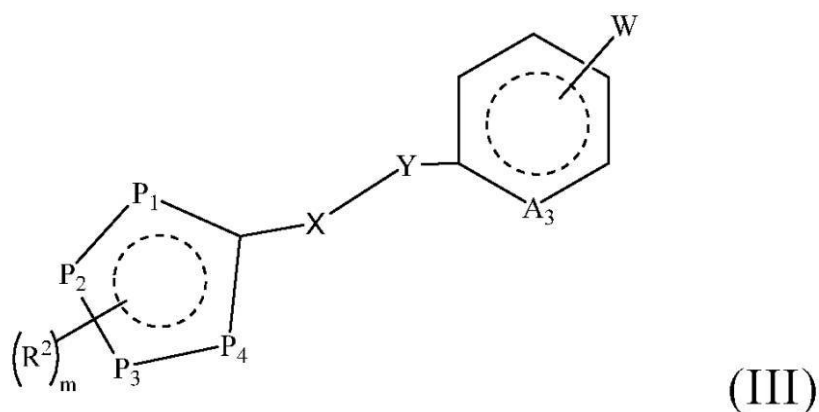
五員環状基にはN原子が一つ存在する場合、五員環状基はN原子以外の原子を通じてXに結合し、

$R^1$ は、 $-(置換基で置換されても良いC_{0-8}アルキル基)C(O)NR^4R^5$ である場合、X及びYは何れも単結合ではなく、五員環状基はフラン環であり、且つmは0ではない。

## 【請求項 5】

下記(III)で表される請求項4に記載の化合物、その薬学的に許容可能な塩、そのエステル、そのプロドラッグ、その溶媒和物、又はその重水素化化合物、又はその立体異性体であり、

## 【化 1 3】

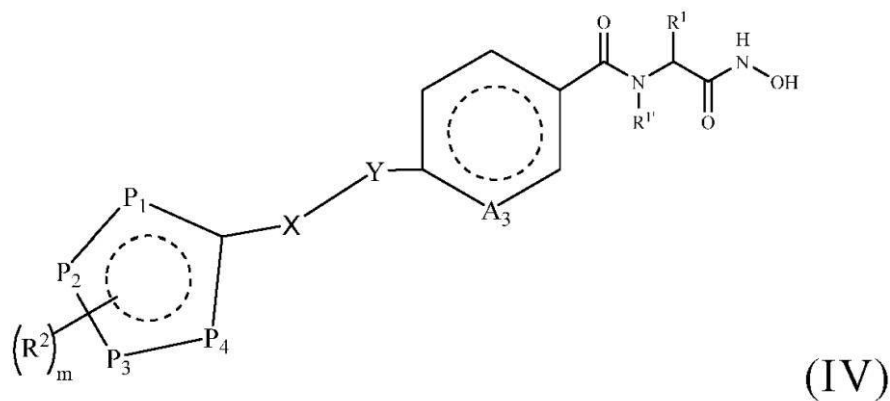


その内、各基は、請求項4の記載と同じ意味である。

## 【請求項 6】

一般式(IV)で表される請求項4又は請求項5に記載の化合物、その薬学的に許容可能な塩、そのエステル、そのプロドラッグ、その溶媒和物、又はその重水素化化合物、又はその立体異性体であり、

## 【化 1 4】

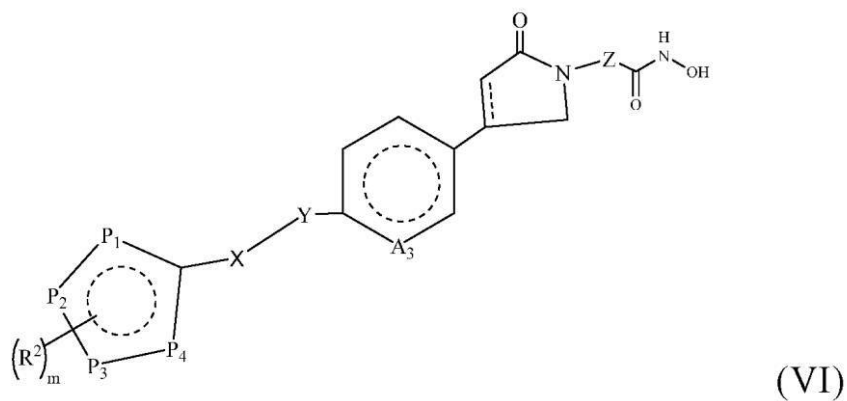
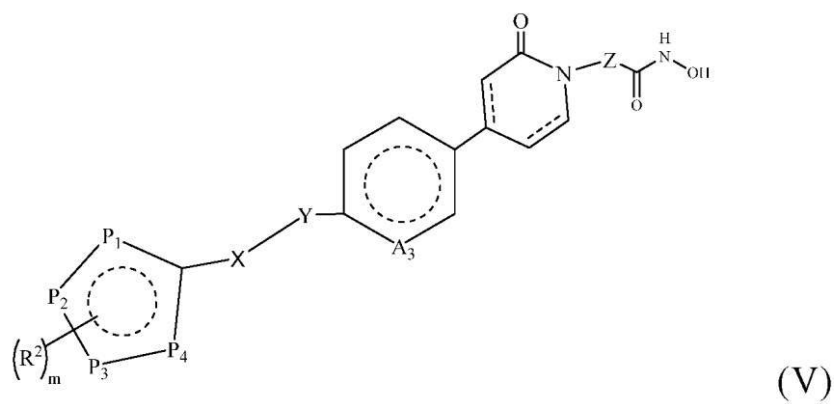


その内、各基は、請求項4の記載と同じ意味である。

## 【請求項 7】

一般式(V)又は一般式(VI)で表される請求項4に記載の化合物、その薬学的に許容可能な塩、そのエステル、そのプロドラッグ、その溶媒和物、又はその重水素化化合物、又はその立体異性体であり、

## 【化 1 5】



その内、各基は、請求項4の記載と同じ意味であり、Zは、R<sup>1</sup>で置換されても良いC<sub>1-8</sub>アルキル基であり、

## 【化 1 6】

は、一重結合又は二重結合である。

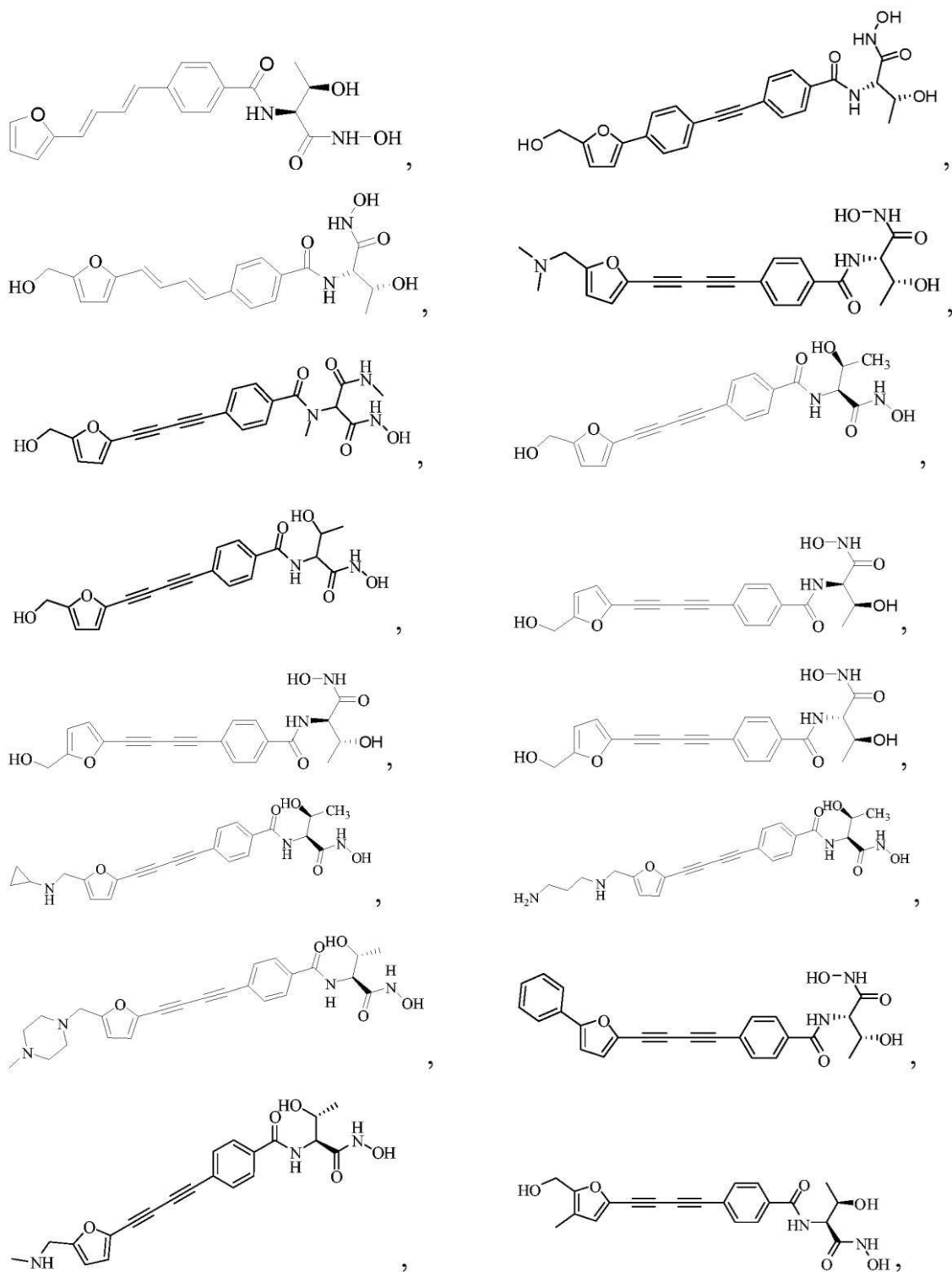
## 【請求項 8】

下記の化合物から選択される請求項1又は請求項4に記載の化合物、その薬学的に許容可

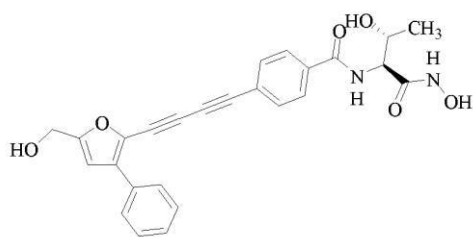


能な塩、そのエステル、そのプロドラッグ、その溶媒和物、又はその重水素化合物、又はその立体異性体であり、

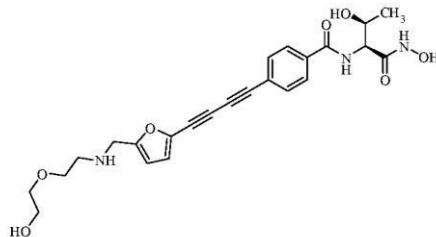
【化 17】



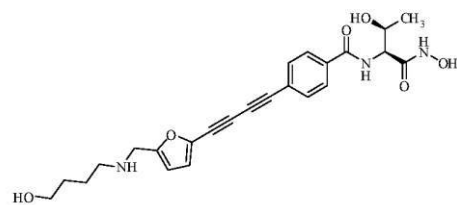
## 【化 18】



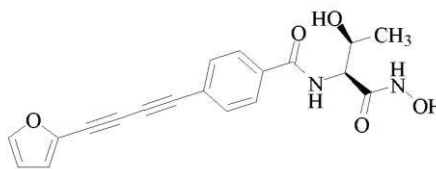
,



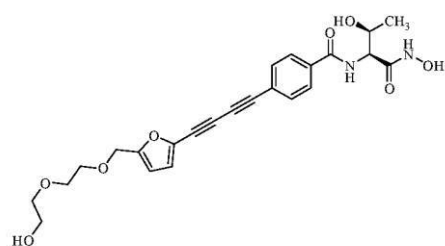
,



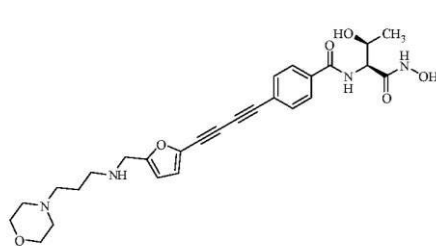
,



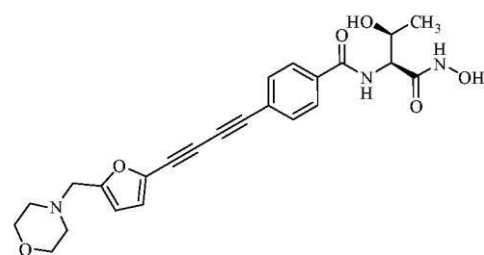
,



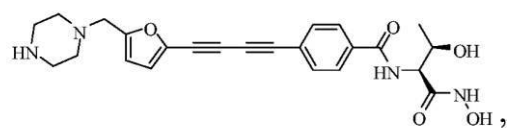
,



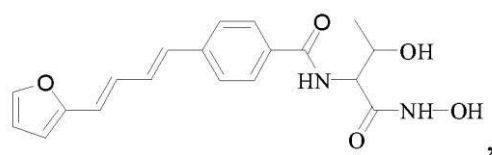
,



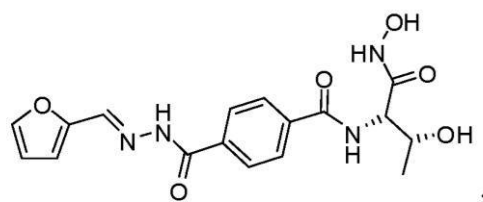
,



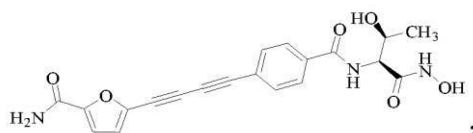
,



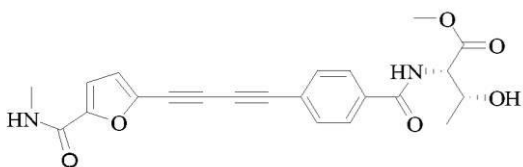
,



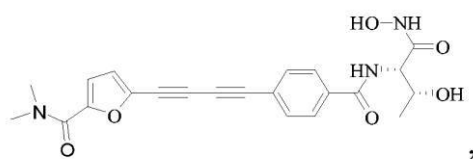
,



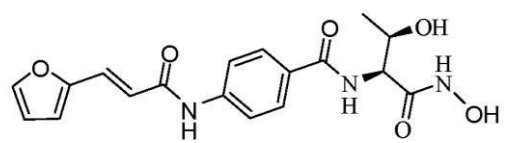
,



,

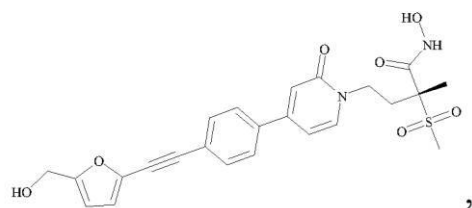
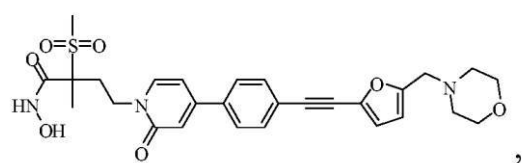
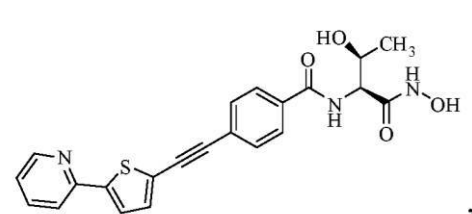
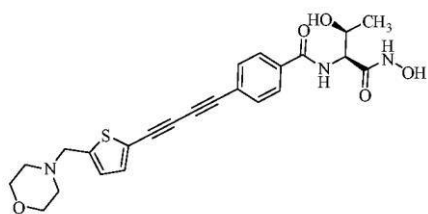
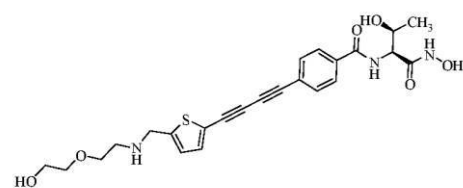
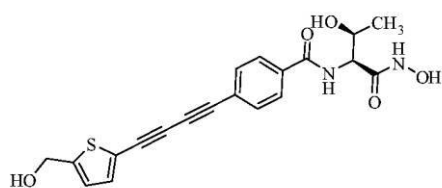
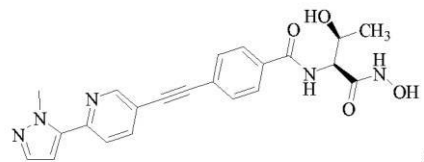
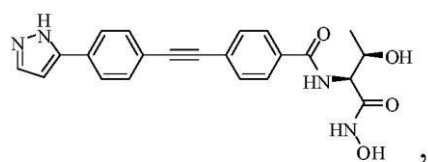
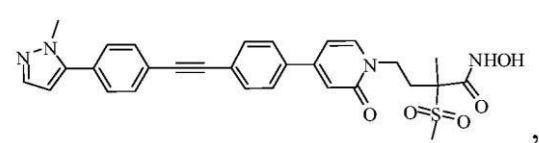
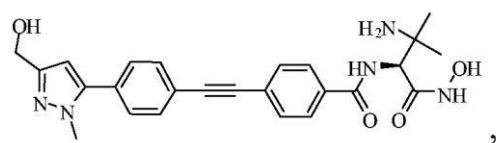
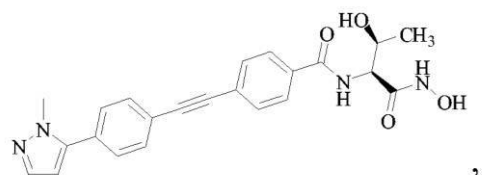
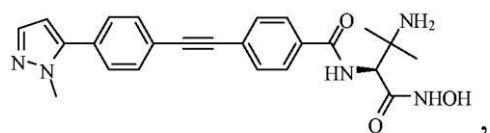
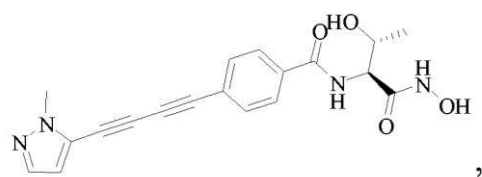
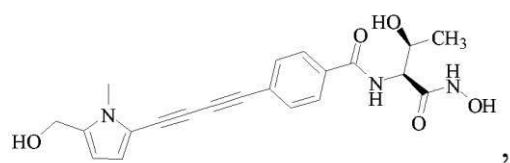
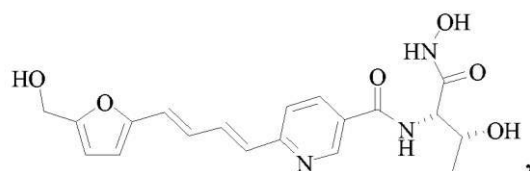
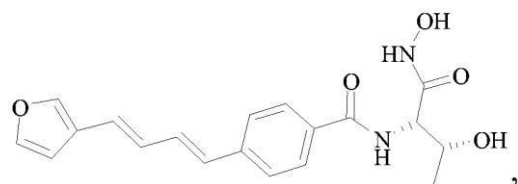


,

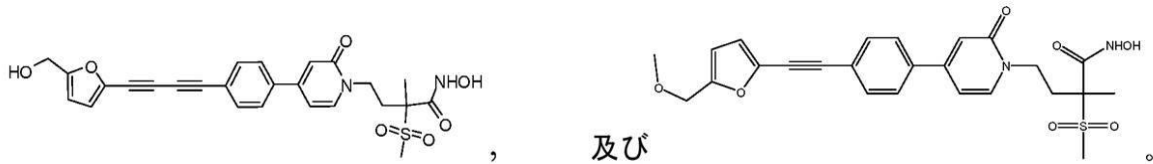


,

【化 19】



## 【化 2 0】



## 【請求項 9】

請求項1-8の何れかに記載の化合物、その薬学的に許容可能な塩、そのエステル、そのプロドラッグ、その溶媒和物、又はその重水素化合物、又はその立体異性体を含む医薬品組成物。

## 【請求項 10】

請求項1-8の何れかに記載の化合物、その薬学的に許容可能な塩、そのエステル、そのプロドラッグ、その溶媒和物、又はその重水素化合物、又はその立体異性体、請求項9に記載の組成物の、感染症、好ましくはグラム陰性細菌より引き起こされた感染症を治療及び/又は予防するための医薬品の製造への用途。