

【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 07 D 207/337 | (2006.01) |
| A 61 P 31/04 | (2006.01) |
| C 07 D 307/16 | (2006.01) |
| C 07 D 307/24 | (2006.01) |
| C 07 D 405/06 | (2006.01) |
| C 07 D 231/12 | (2006.01) |
| C 07 D 401/10 | (2006.01) |
| C 07 D 401/04 | (2006.01) |
| C 07 D 333/24 | (2006.01) |
| C 07 D 409/04 | (2006.01) |
| C 07 D 405/10 | (2006.01) |
| A 61 P 43/00 | (2006.01) |
| A 61 K 31/341 | (2006.01) |
| A 61 K 31/496 | (2006.01) |
| A 61 K 31/5377 | (2006.01) |
| A 61 K 31/443 | (2006.01) |
| A 61 K 31/40 | (2006.01) |
| A 61 K 31/4439 | (2006.01) |
| A 61 K 31/381 | (2006.01) |
| A 61 K 31/4436 | (2006.01) |

【F I】

| | |
|----------------|-------|
| C 07 D 207/337 | |
| A 61 P 31/04 | |
| C 07 D 307/16 | C S P |
| C 07 D 307/24 | |
| C 07 D 405/06 | |
| C 07 D 231/12 | Z |
| C 07 D 231/12 | B |
| C 07 D 401/10 | |
| C 07 D 401/04 | |
| C 07 D 333/24 | |
| C 07 D 409/04 | |
| C 07 D 405/10 | |
| A 61 P 43/00 | 1 1 1 |
| A 61 K 31/341 | |
| A 61 K 31/496 | |
| A 61 K 31/5377 | |
| A 61 K 31/443 | |
| A 61 K 31/40 | |
| A 61 K 31/4439 | |
| A 61 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

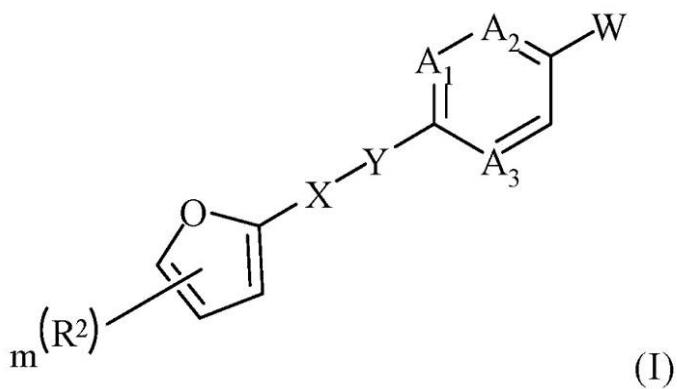
【補正の内容】

【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、又はその重水素化化合物、又はその立体異性体：

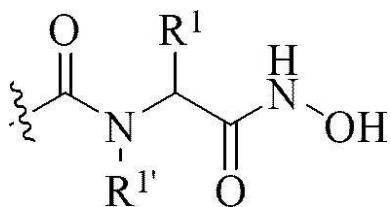
【化1】



その内、

Wは

【化2】



であり、

R¹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、

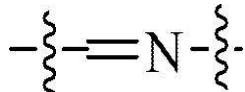
但し、R^{1a}、R^{1b}、R³、R⁴、R⁵、R⁶及びR⁷は、それぞれ独立して、H、C₁₋₆アルキル基及びOHから選択され、

R^{1'}は、水素及びC₁₋₆アルキル基から選択され、

A₁、A₂、A₃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

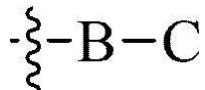
【化3】



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、 $C_{1-6}\text{アルキル基}$ 、 $-OR^9$ 、 $-NR^9R^9'$ 、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、 $C_{1-6}\text{アルキル基}$ 及び $C_{3-6}\text{シクロアルキル基}$ から選択され、

m は、0、1、2又は3である。

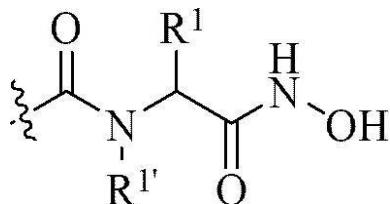
【請求項2】

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、

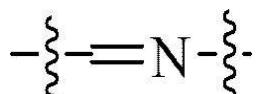
R^1 は、 $-C(R^{1a}, R^{1b})OR^3$ 及び $-C(O)NR^4R^5$ から選択され、但し、 R^{1a} 、 R^{1b} 、 R^3 、 R^4 、 R^5 は、それぞれ独立して、水素原子、メチル基及びヒドロキシル基から選択され、

R^1' は、水素及び $C_{1-4}\text{アルキル基}$ 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

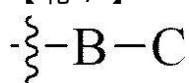
【化6】



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。

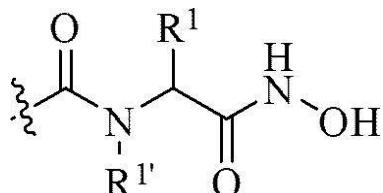
【請求項3】

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、

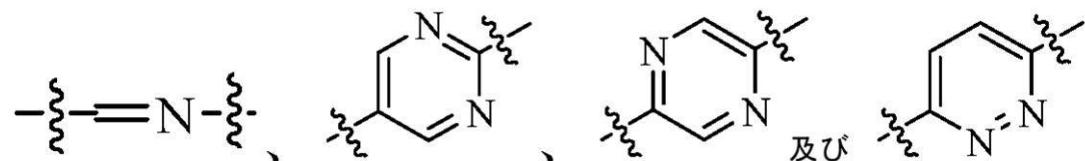
R^1 は、 $-C(H,CH_3)OH$ 及び $-C(O)NHCH_3$ から選択され、

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、

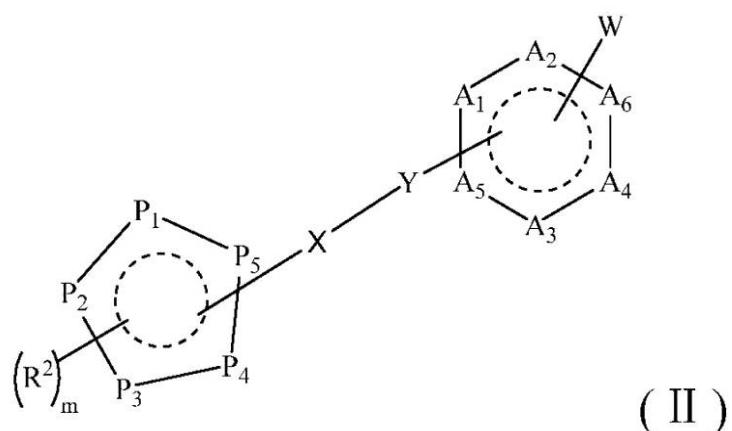
R^2 は $-CH_2OH$ であり、

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C₀₋₈アルキル基)-C(O)-N(R^{1'})-(R¹で置換されても良いC₁₋₈アルキル基)-C(O)-N(H)-OHであり、

R¹は、それぞれ独立して、置換基で置換されても良いC₁₋₈アルキル基、-(置換基で置換されても良いC₀₋₈アルキル基)C(O)NR⁴R⁵、-(置換基で置換されても良いC₀₋₈アルキル基)S(O)₁₋₂R³及び-(置換基で置換されても良いC₀₋₈アルキル基)S(O)₁₋₂NR⁴R⁵から選択され、但し、R³、R⁴及びR⁵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C₁₋₈アルキル基、置換基で置換されても良いC₂₋₈アルケニル基及び置換基で置換されても良いC₂₋₈アルキニル基から選択され、

R^{1'}は、水素原子、ヒドロキシル基、ハロゲン原子、カルボキシル基、置換基で置換されても良いC₁₋₈アルキル基、置換基で置換されても良いC₂₋₈アルケニル基及び置換基で置換されても良いC₂₋₈アルキニル基から選択され、又はR^{1'}はWの定義中の置換基で置換されても良いC₀₋₈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^{1'}は、水素原子、ヒドロキシル基、ハロゲン原子及びC₁₋₈アルキル基から選択され、又はR^{1'}はWの定義中の置換基で置換されても良いC₀₋₈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^{1'}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^{1'}はWの定義中の置換基で置換されても良いC₀₋₈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、

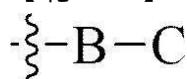
A₁、A₂、A₃、A₄、A₅及びA₆は、それぞれ独立して、CR^aR^a、NR^c、O及びSから選択され、X、Yは、それぞれ独立して、単結合、置換基で置換されても良い5-14員ヘテロアリール基、置換基で置換されても良い6-14員アリール基、-(C=C)-、-(C=C)-、=N-、-C(O)-NR^c-から選択され、但し、X及びYの少なくとも一つは単結合ではなく、好ましくは、X及びYは共に置換基で置換されても良い6-14員アリール基ではなく、好ましくは、X及びYの一方が単結合であると、他方が置換基で置換されても良い6-14員アリール基ではなく、

P₁、P₂、P₃、P₄及びP₅は、それぞれ独立して、CR^aR^a、NR^c、O及びSから選択され、好ましくは、P₁、P₂、P₃、P₄及びP₅は、少なくとも一つがNR^c、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、

R²は出現する度に、それぞれ独立して、

【化11】



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^cから選択される少なくとも一つの原子で取り替えてよい及び/又は置換基で置換されても良いC₁₋₈アルキル基、少なくとも一つ炭素原子がS、O及びNR^cから選択される少なくとも一つの原子で取り替えてよい及び/又は置換基で置換されても良いC₂₋₈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^cから選択される少なくとも一つの原子で取り替えてよい及び/又は置換基で置換されても良いC₂₋₈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、カルボキシル基、ニトロ基、置換基で置換されても良いC₁₋₈アルキル基、置換基で置換されても良いC₁₋₈アルコキシ基、-OR^c、-NR^cR^c、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^a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、カルボキシル基、ニトロ基、-OR^c、-NR^cR^c、-N(OH)R^c、-C(O)R^d

、-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)₁₋₂R^d、-NR^cS(O)₁₋₂R^d、-S(O)₁₋₂-OR^c、置換基で置換されても良いC₁₋₈アルキル基、-(置換基で置換されても良いC₁₋₈アルキル基)OR^c、-(置換基で置換されても良いC₁₋₈アルキル基)NR^cR^c、置換基で置換されても良いC₁₋₈アルコキシ基、置換基で置換されても良いC₂₋₈アルケニル基、置換基で置換されても良いC₂₋₈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、カルボキシル基、-C(O)R^d、-C(O)OR^b、-C(O)NR^bR^b、-S(O)₁₋₂-NR^bR^b、-S(O)₁₋₂R^d、-S(O)₁₋₂-OR^b、置換基で置換されても良いC₁₋₈アルキル基、-(置換基で置換されても良いC₁₋₈アルキル基)OR^b、-(置換基で置換されても良いC₁₋₈アルキル基)NR^bR^b、置換基で置換されても良いC₂₋₈アルケニル基、置換基で置換されても良いC₂₋₈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、カルボキシル基、スルホン酸基、置換基で置換されても良いC₁₋₈アルキル基、置換基で置換されても良いC₁₋₈アルキル基スルホニル基、置換基で置換されても良いC₁₋₈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、ヒドロキシル基、メルカプト、ハロゲン原子、カルボキシル基、ニトロ基、アミノ基、置換基で置換されても良いC₁₋₈アルキル基アミノ基、(置換基で置換されても良いC₁₋₈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C₁₋₈アルキル基、置換基で置換されても良いC₁₋₈アルコキシ基、置換基で置換されても良いC₁₋₈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、ヒドロキシル基、メルカプト、カルボキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ハロゲン原子、スルホン酸基、C₁₋₈アルキル基、C₁₋₈アルコキシ基C₁₋₈アルキル基、ヒドロキシル基C₁₋₈アルキル基、アミノ基C₁₋₈アルキル基、カルボキシル基C₁₋₈アルキル基、エステル基C₁₋₈アルキル基、C₁₋₈アルコキシ基、ヒドロキシル基C₁₋₈アルコキシ基、アミノ基C₁₋₈アルコキシ基、カルボキシル基C₁₋₈アルコキシ基、C₁₋₈アルキル基C₁₋₈アルコキシ基、C₁₋₈アルコキシ基C₁₋₈アルコキシ基、エステル基C₁₋₈アルコキシ基、C₁₋₈アルキル基アミノ基、(C₁₋₈アルキル基)₂アミノ基、アミノ基C₁₋₈アルキル基アミノ基、(アミノ基C₁₋₈アルキル基)₂アミノ基、C₁₋₈アルキル基エステル基、アミノ基カルボニル基、C₁₋₈アルキル基アミノ基カルボニル基、(C₁₋₈アルキル基)₂アミノ基カルボニル基、C₁₋₈アルキル基カルボニル基、C₁₋₈アルキル基カルボニル基カルボニル基、C₁₋₈アルキル基カルボニル基カルボニル基アミノ基、C₁₋₈アルキル基スルホニル基アミノ基、ハロゲン化C₁₋₈アルキル基、ハロゲン化C₁₋₈アルコキシ基、C₁₋₈アルキル基スルホニル基、C₁₋₈アルキル基スルフィニル基、C₁₋₈アルキル基スルファン基、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12】



は環状基に存在しても良い二重結合であり、

条件として、R¹は置換基で置換されたC₁₋₈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C₁₋₈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、

R¹は置換基で置換されたC₁₋₈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、

R¹は置換基で置換されたC₁₋₈アルキル基、且つ置換基にアミノ基、C₁₋₈アルキル基アミノ基又は(C₁₋₈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、

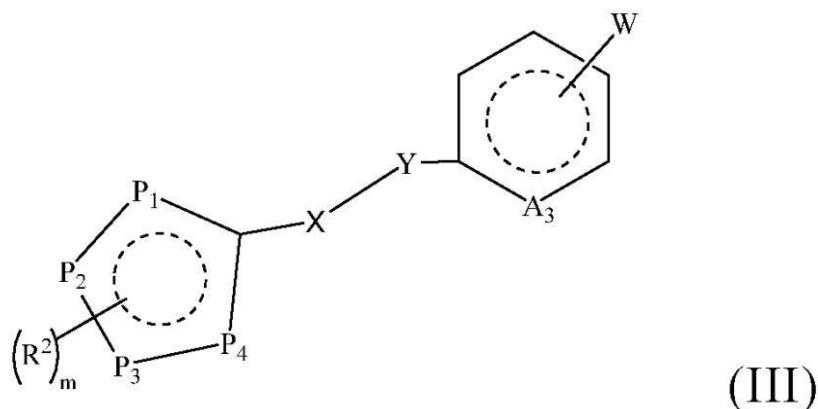
五員環状基にはN原子が一つ存在する場合、五員環状基はN原子以外の原子を通じてXに結合し、

R¹は、-(置換基で置換されても良いC₀₋₈アルキル基)C(O)NR⁴R⁵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13】

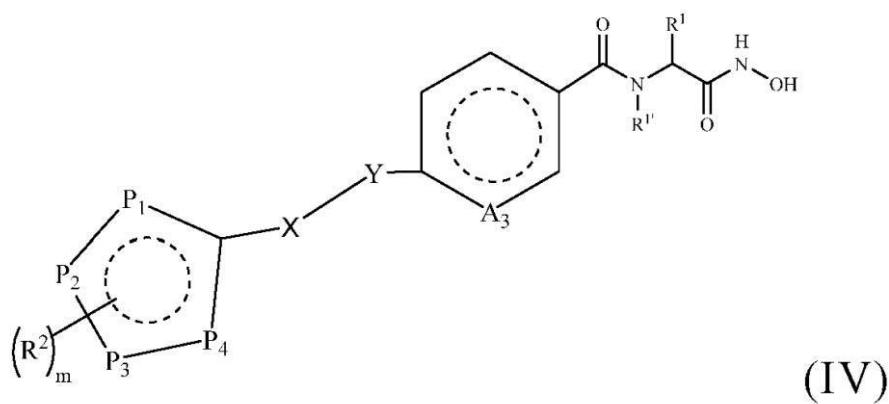


その内、各基は、請求項4の記載と同じ意味である。

【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14】

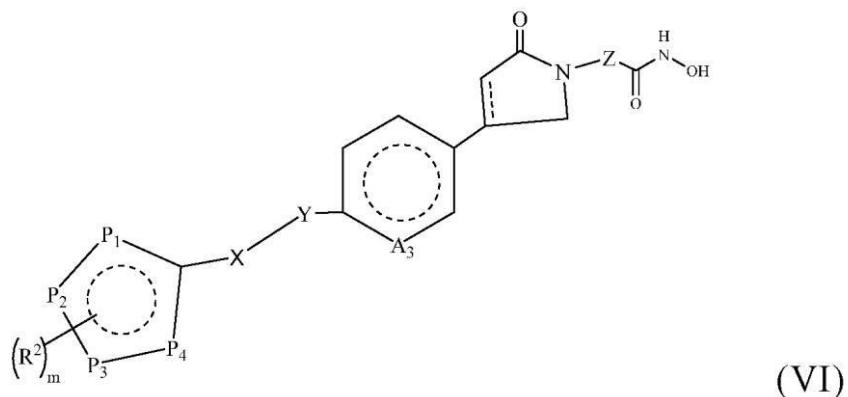
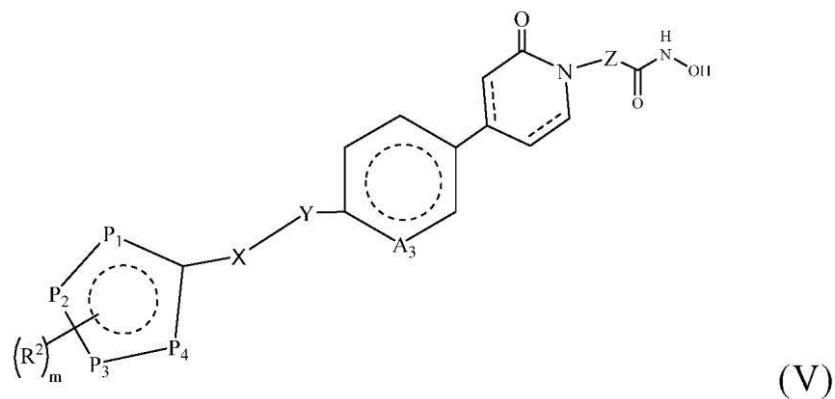


その内、各基は、請求項4の記載と同じ意味である。

【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15】



その内、各基は、請求項4の記載と同じ意味であり、Zは、R¹で置換されても良いC₁₋₈アルキル基であり、

【化16】

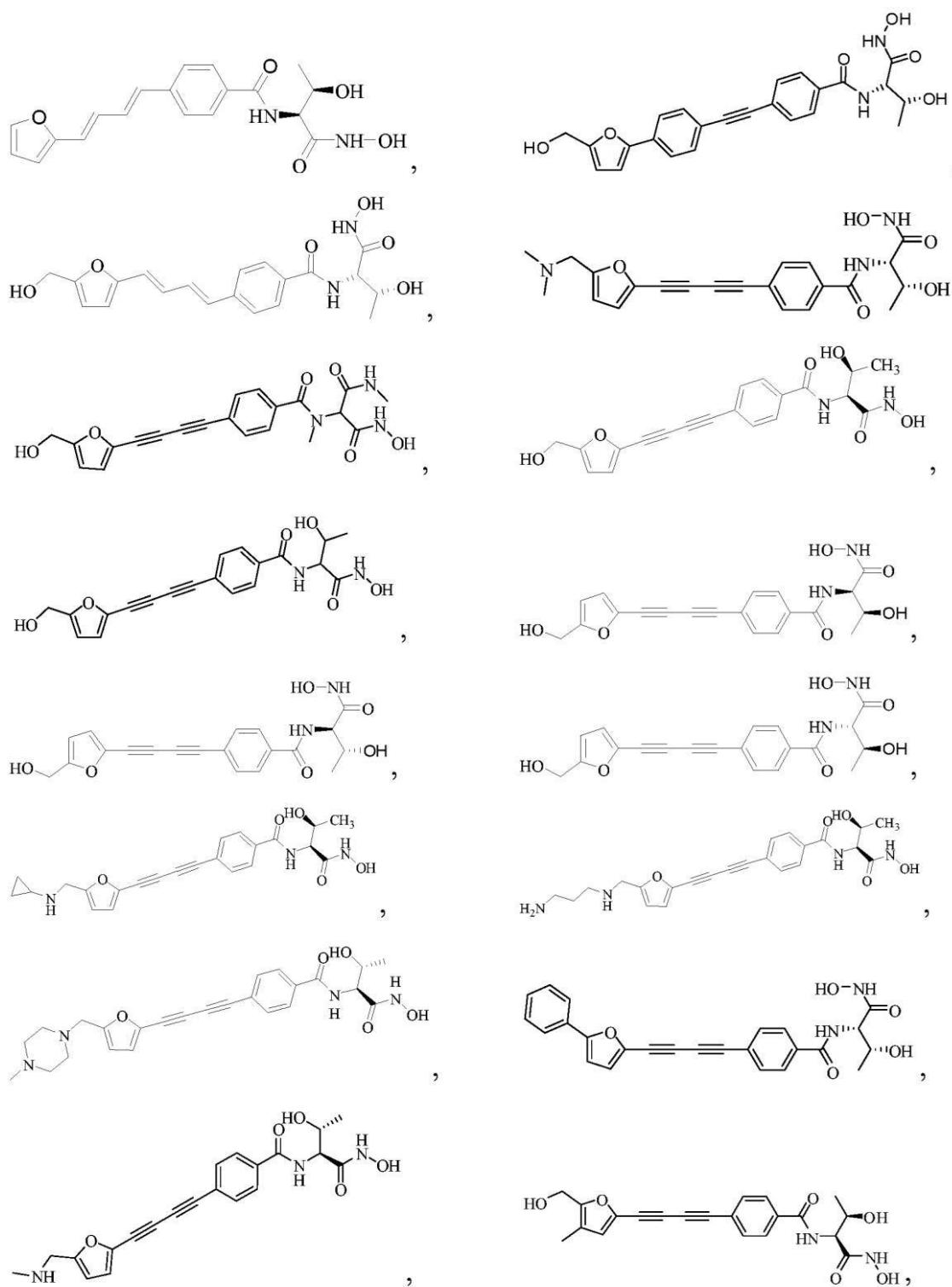
は、一重結合又は二重結合である。

【請求項8】

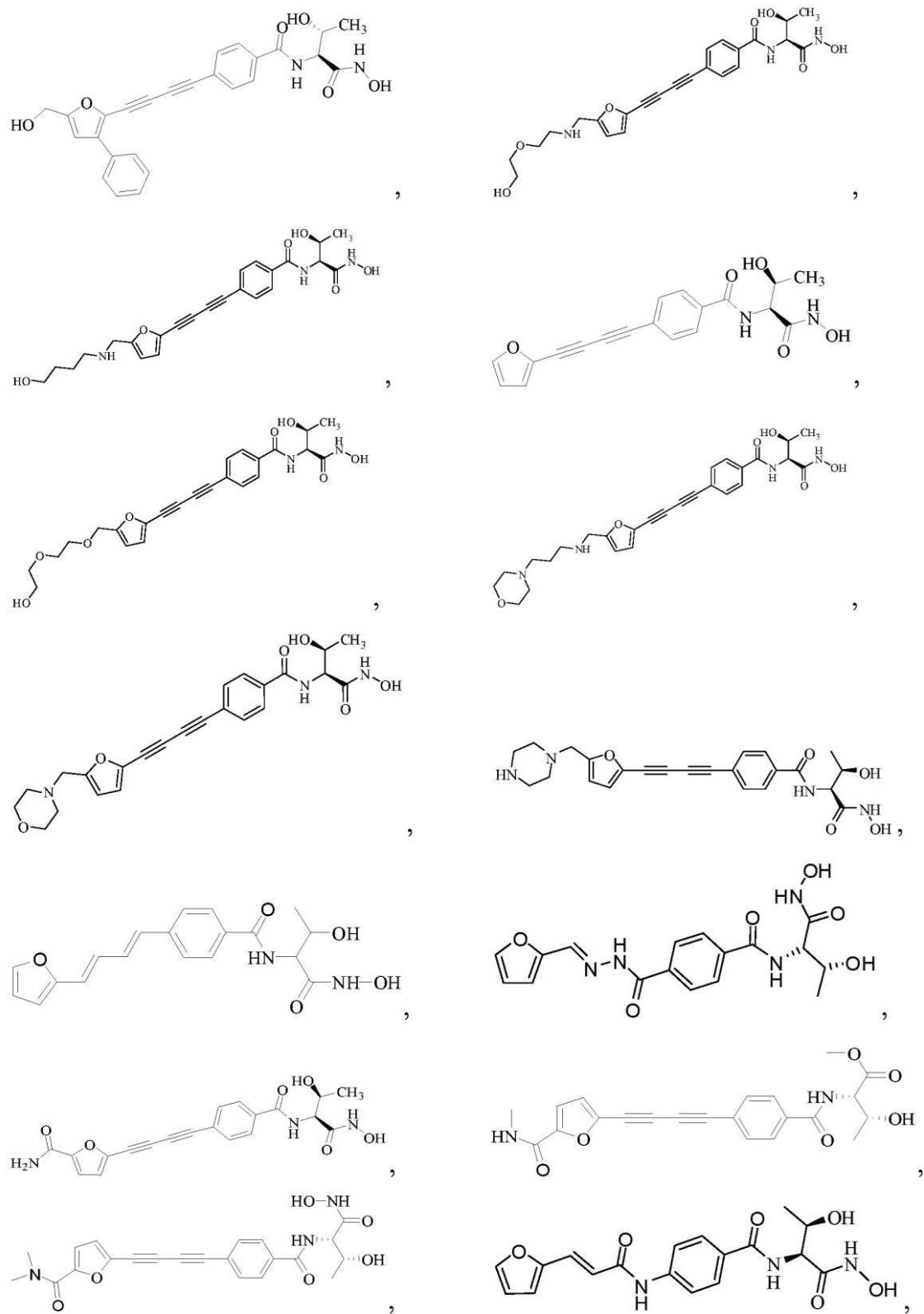
下記の化合物から選択される請求項1又は請求項4に記載の化合物、その薬学的に許容可

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

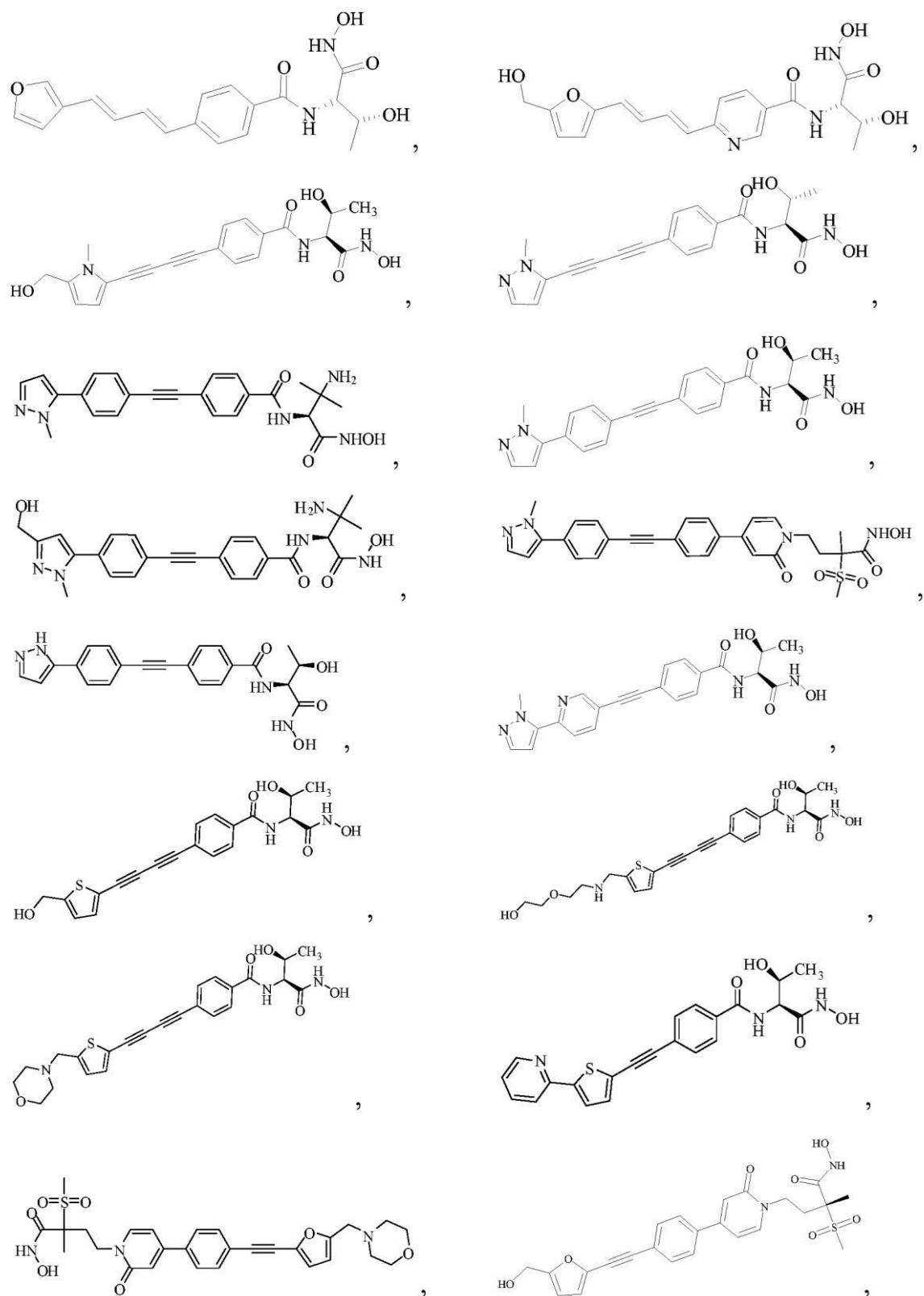
【化 1 7】



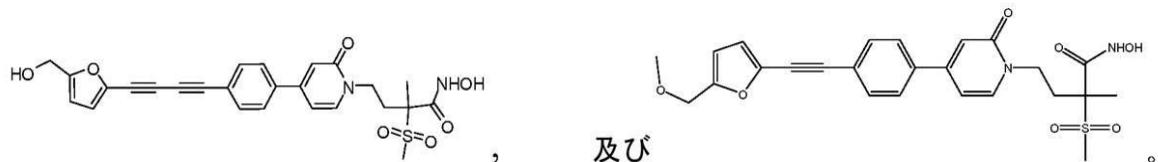
【化 18】



【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。