

【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4年6月10日(2022.6.10)

【公開番号】特開2022-17221(P2022-17221A)

【公開日】令和4年1月25日(2022.1.25)

【年通号数】公開公報(特許)2022-013

【出願番号】特願2021-145986(P2021-145986)

【国際特許分類】

C 07 D 401/12(2006.01)
 A 61 P 35/00(2006.01)
 A 61 K 31/501(2006.01)
 C 07 D 401/14(2006.01)
 A 61 K 31/5377(2006.01)
 C 07 D 403/04(2006.01)
 A 61 K 31/506(2006.01)
 C 07 D 403/12(2006.01)
 C 07 D 403/14(2006.01)
 C 07 D 487/08(2006.01)
 C 07 D 471/10(2006.01)
 A 61 K 31/551(2006.01)
 C 07 D 487/10(2006.01)
 C 07 D 487/04(2006.01)
 C 07 D 405/14(2006.01)
 C 07 D 471/04(2006.01)
 C 07 D 417/12(2006.01)

10

20

30

40

【F I】

C 07 D 401/12
 A 61 P 35/00
 A 61 K 31/501
 C 07 D 401/14 C S P
 A 61 K 31/5377
 C 07 D 403/04
 A 61 K 31/506
 C 07 D 403/12
 C 07 D 403/14
 C 07 D 487/08
 C 07 D 471/10 1 0 1
 A 61 K 31/551
 C 07 D 487/10
 C 07 D 487/04 1 3 7
 C 07 D 405/14
 C 07 D 471/04 1 0 2
 C 07 D 487/04 1 4 5
 C 07 D 417/12

【手続補正書】

【提出日】令和4年5月31日(2022.5.31)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

50

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

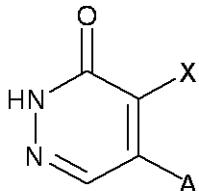
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 I の化合物、

【化 1】



I

10

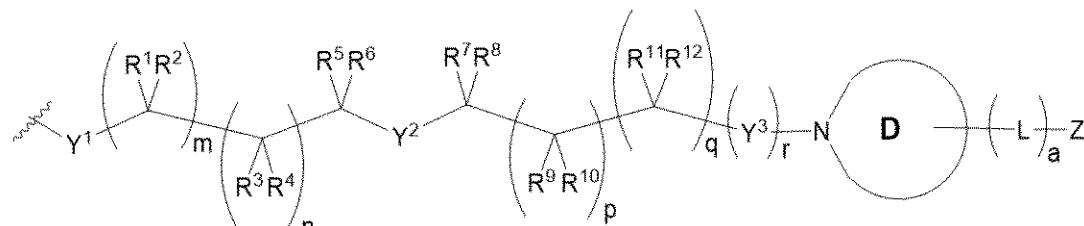
またはその医薬的に許容される塩であって、式中、

X が、 C₁、 Br、 CH₃、 CF₃、 CN、 OCH₃、 エチル、 シクロプロピル、 SCH₃、 またはイソプロピルであり、

A が、 式 (A - 1) を有する基であり、

20

【化 1】



(A - 1)

Y₁、 Y₂、 及び Y₃ が、 各々独立して、 O、 S、 NR_Y、 C(=O)、 C(=O)O、 C(=O)NR_Y、 S(=O)、 S(=O)₂、 S(=O)NR_Y、 S(=O)₂NR_Y、 または NR_YC(=O)NR_Yから選択され、 ここで、 各 R_Y が独立して、 H または C₁ - 4 アルキルであり、

30

L が、 C₁ - 3 アルキレン、 O、 S、 NR_Y、 C(=O)、 C(=O)O、 C(=O)NR_Y、 S(=O)、 S(=O)NR_Y、 または NR_YC(=O)NR_Yであり、

Z が、 H、 CyZ、 ハロ、 C₁ - 6 アルキル、 C₂ - 6 アルケニル、 C₂ - 6 アルキニル、 C₁ - 6 ハロアルキル、 CN、 NO₂、 OR^a、 SR^a、 C(O)R^b、 C(O)NR^cR^d、 C(O)OR^a、 OC(O)R^b、 OC(O)NR^cR^d、 NR^cR^d、 NR^cC(O)R^b、 NR^cC(O)OR^a、 NR^cC(O)NR^cR^d、 C(=NRE)R^b、 C(=NRE)NR^cR^d、 NR^cC(=NRE)NR^cR^d、 NR^cS(O)R^b、 NR^cS(O)₂R^b、 NR^cS(O)₂NR^cR^d、 S(O)R^b、 S(O)NR^cR^d、 S(O)₂R^b、 及び S(O)₂NR^cR^dであり、 Z の前記 C₁ - 6 アルキル、 C₂ - 6 アルケニル、 C₂ - 6 アルキニル、 及び C₁ - 6 ハロアルキルが、 各々任意選択で、 CyZ、 ハロ、 CN、 NO₂、 OR^a、 SR^a、 C(O)R^b、 C(O)NR^cR^d、 C(O)OR^a、 OC(O)R^b、 OC(O)NR^cR^d、 C(=NRE)NR^cR^d、 NR^cC(=NRE)NR^cR^d、 NR^cCR^d、 NR^cCC(O)R^b、 NR^cCC(O)OR^a、 NR^cCC(O)NR^cR^d、 S(O)R^b、 NR^cS(O)R^b、 NR^cS(O)₂R^b、 及び S(O)₂NR^cR^dから独立して選択される 1、 2、 3、 4、 または 5 つの置換基で置換され、

40

NR^cS(O)₂NR^cR^d、 NR^cS(O)₂NR^cR^d、 S(O)R^b、 S(O)NR^cR^d、 S(O)₂R^b、 及び S(O)₂NR^cR^dから独立して選択される 1、 2、 3、 4、 または 5 つの置換基で置換され、

50

CyZが、C₆-10アリール、C₃-7シクロアルキル、5~10員ヘテロアリール、及び4~10員ヘテロシクロアルキルから選択され、各々が任意選択で、ハロ、C₁-6アルキル、C₂-6アルケニル、C₂-6アルキニル、C₁-6ハロアルキル、CN、NO₂、ORA₁、SRA₁、C(O)Rb₁、C(O)NRC₁Rd₁、C(O)ORA₁、OC(O)Rb₁、OC(O)NRC₁Rd₁、C(=NRe₁)NRC₁Rd₁、NRC₁C(=NRe₁)NRC₁Rd₁、NRC₁Rd₁、NRC₁C(O)Rb₁、NRC₁C(O)ORA₁、NRC₁C(O)NRC₁Rd₁、NRC₁S(O)Rb₁、NRC₁S(O)Rb₁、NRC₁S(O)2Rb₁、NRC₁S(O)2NRC₁Rd₁、S(O)Rb₁、S(O)NRC₁Rd₁、S(O)2Rb₁、及びS(O)2NRC₁Rd₁から独立して選択される1、2、3、または4つの置換基と置換され、前記アルキル、C₂-6アルケニル、及びC₂-6アルキニルが任意選択で、ハロ、CN、NO₂、ORA₁、SRA₁、C(O)Rb₁、C(O)NRC₁Rd₁、C(O)ORA₁、OC(O)Rb₁、OC(O)NRC₁Rd₁、C(=NRe₁)NRC₁Rd₁、NRC₁C(=NRe₁)NRC₁Rd₁、NRC₁Rd₁、NRC₁C(O)Rb₁、NRC₁C(O)ORA₁、NRC₁C(O)NRC₁Rd₁、NRC₁S(O)Rb₁、NRC₁S(O)2Rb₁、NRC₁S(O)2NRC₁Rd₁、S(O)Rb₁、S(O)NRC₁Rd₁、S(O)2Rb₁、及びS(O)2NRC₁Rd₁から独立して選択される1、2、または3つの置換基で置換され、

環Dが、八口、C₁ - 6アルキル、C₂ - 6アルケニル、C₂ - 6アルキニル、C₁ - 6八口アルキル、CN、NO₂、OR^a₂、SR^a₂、C(O)R^b₂、C(O)NRC₂Rd₂、C(O)ORA₂、OC(O)Rb₂、OC(O)NRC₂Rd₂、C(=NRe₂)NRC₂Rd₂、NRC₂C(=NRe₂)NRC₂Rd₂、NRC₂Rd₂、NRC₂C(O)Rb₂、NRC₂C(O)ORA₂、NRC₂C(O)NRC₂Rd₂、NRC₂S(O)Rb₂、NRC₂S(O)₂Rb₂、NRC₂S(O)₂NRC₂Rd₂、S(O)Rb₂、S(O)NRC₂Rd₂、S(O)₂Rb₂、及びS(O)₂NRC₂Rd₂から独立して選択される1、2、または3つの基で任意選択で置換される、単環式または多環式4～10員ヘテロシクロアルキル基であり、前記C₁ - 6アルキル、C₂ - 6アルケニル、及びC₂ - 6アルキニルが、各々任意選択で、八口、CN、NO₂、OR^a₂、SR^a₂、C(O)Rb₂、C(O)NRC₂Rd₂、C(O)ORA₂、OC(O)Rb₂、OC(O)NRC₂Rd₂、C(=NRe₂)NRC₂Rd₂、NRC₂C(=NRe₂)NRC₂Rd₂、NRC₂Rd₂、NRC₂C(O)Rb₂、NRC₂C(O)ORA₂、NRC₂C(O)NRC₂Rd₂、NRC₂S(O)Rb₂、NRC₂S(O)₂Rb₂、NRC₂S(O)₂NRC₂Rd₂、S(O)Rb₂、S(O)NRC₂Rd₂、S(O)₂Rb₂、及びS(O)₂NRC₂Rd₂から独立して選択される1、2、または3つの基で置換され、

R 1、R 2、R 3、R 4、R 5、R 6、R 7、R 8、R 9、R 10、R 11、及びR 12
 が、各々独立して、H、ハロ、C₁ - 6アルキル、C₂ - 6アルケニル、C₂ - 6アルキニル、C₁ - 6ハロアルキル、C₆ - 10アリール、C₃ - 7シクロアルキル、5 ~ 10員ヘテロアリール、4 ~ 10員ヘテロシクロアルキル、C₆ - 10アリール - C₁ - 4アルキル、C₃ - 7シクロアルキル - C₁ - 4アルキル、5 ~ 10員ヘテロアリール - C₁ - 4アルキル、4 ~ 10員ヘテロシクロアルキル - C₁ - 4アルキル、CN、NO₂、OR_a₃、SR_a₃、C(O)R_b₃、C(O)NRC₃Rd₃、C(O)ORA₃、OC(O)R_b₃、OC(O)NRC₃Rd₃、NRC₃Rd₃、NRC₃C(O)R_b₃、NRC₃C(O)ORA₃、NRC₃C(O)NRC₃Rd₃、C(=NRe₃)R_b₃、C(=NRe₃)NRC₃Rd₃、NRC₃C(=NRe₃)NRC₃Rd₃、NRC₃S(O)R_b₃、NRC₃S(O)₂R_b₃、NRC₃S(O)₂NRC₃Rd₃、S(O)R_b₃、S(O)NRC₃Rd₃、S(O)₂R_b₃、及びS(O)₂NRC₃Rd₃から選択され、前記R 1、R 2、R 3、R 4、R 5、R 6、R 7、R 8、R 9、R 10、R 11、及びR 12の前記C₁ - 6アルキル、C₂ - 6アルケニル、C₂ - 6アルキニル、C₁ - 6ハロアルキル、C₆ - 10アリール、C₃ - 7シクロアルキル、5 ~ 10

員ヘテロアリール、4～10員ヘテロシクロアルキル、C₆～10アリール-C₁～4アルキル、C₃～7シクロアルキル-C₁～4アルキル、5～10員ヘテロアリール-C₁～4アルキル、及び4～10員ヘテロシクロアルキル-C₁～4アルキルが、各々任意選択で、ハロ、C₁～6アルキル、C₂～6アルケニル、C₂～6アルキニル、C₁～6ハロアルキル、CN、NO₂、OR^a₃、SR^a₃、C(O)R^b₃、C(O)NRC₃Rd₃、C(O)OR^a₃、OC(O)R^b₃、OC(O)NRC₃Rd₃、NRC₃Rd₃、NRC₃C(O)R^b₃、NRC₃C(O)OR^a₃、NRC₃C(O)NRC₃Rd₃、C(=NRe₃)R^b₃、C(=NRe₃)NRC₃Rd₃、NRC₃C(=NRe₃)NRC₃Rd₃、NRC₃S(O)R^b₃、NRC₃S(O)₂R^b₃、NRC₃S(O)₂NRC₃Rd₃、S(O)R^b₃、S(O)NRC₃Rd₃、S(O)₂R^b₃、及びS(O)₂NRC₃Rd₃から独立して選択される1、2、3、4、または5つの置換基で置換されるか、

あるいはR¹及びR³が、それらが結合した前記炭素原子と一緒に、C₅～10シクロアルキル環または5～10員ヘテロシクロアルキル環を形成し、各々が任意選択で、ハロ、C₁～6アルキル、C₂～6アルケニル、C₂～6アルキニル、C₁～6ハロアルキル、CN、NO₂、OR^a₃、SR^a₃、C(O)R^b₃、C(O)NRC₃Rd₃、C(O)OR^a₃、OC(O)R^b₃、OC(O)NRC₃Rd₃、NRC₃Rd₃、NRC₃C(O)R^b₃、NRC₃C(O)OR^a₃、NRC₃C(O)NRC₃Rd₃、C(=NRe₃)R^b₃、C(=NRe₃)NRC₃Rd₃、NRC₃C(=NRe₃)NRC₃Rd₃、NRC₃S(O)R^b₃、NRC₃S(O)₂R^b₃、NRC₃S(O)₂NRC₃Rd₃、S(O)R^b₃、S(O)NRC₃Rd₃、S(O)₂R^b₃、及びS(O)₂NRC₃Rd₃から独立して選択される1、2、または3つの置換基で置換されるか、

あるいはR³及びR⁵が、それらが結合した前記炭素原子と一緒に、C₅～10シクロアルキル環または5～10員ヘテロシクロアルキル環を形成し、各々が任意選択で、ハロ、C₁～6アルキル、C₂～6アルケニル、C₂～6アルキニル、C₁～6ハロアルキル、CN、NO₂、OR^a₃、SR^a₃、C(O)R^b₃、C(O)NRC₃Rd₃、C(O)OR^a₃、OC(O)R^b₃、OC(O)NRC₃Rd₃、NRC₃Rd₃、NRC₃C(O)R^b₃、NRC₃C(O)OR^a₃、NRC₃C(O)NRC₃Rd₃、C(=NRe₃)R^b₃、C(=NRe₃)NRC₃Rd₃、NRC₃C(=NRe₃)NRC₃Rd₃、NRC₃S(O)R^b₃、NRC₃S(O)₂R^b₃、NRC₃S(O)₂NRC₃Rd₃、S(O)R^b₃、S(O)NRC₃Rd₃、S(O)₂R^b₃、及びS(O)₂NRC₃Rd₃から独立して選択される1、2、または3つの置換基で置換されるか、

あるいはR⁷及びR⁹が、それらが結合した前記炭素原子と一緒に、C₅～10シクロアルキル環または5～10員ヘテロシクロアルキル環を形成し、各々が任意選択で、ハロ、C₁～6アルキル、C₂～6アルケニル、C₂～6アルキニル、C₁～6ハロアルキル、CN、NO₂、OR^a₃、SR^a₃、C(O)R^b₃、C(O)NRC₃Rd₃、C(O)OR^a₃、OC(O)R^b₃、OC(O)NRC₃Rd₃、NRC₃Rd₃、NRC₃C(O)R^b₃、NRC₃C(O)OR^a₃、NRC₃C(O)NRC₃Rd₃、C(=NRe₃)R^b₃、C(=NRe₃)NRC₃Rd₃、NRC₃C(=NRe₃)NRC₃Rd₃、NRC₃S(O)R^b₃、NRC₃S(O)₂R^b₃、NRC₃S(O)₂NRC₃Rd₃、S(O)R^b₃、S(O)NRC₃Rd₃、S(O)₂R^b₃、及びS(O)₂NRC₃Rd₃から独立して選択される1、2、または3つの置換基で置換されるか、

あるいはR⁹及びR¹¹が、それらが結合した前記炭素原子と一緒に、C₅～10シクロアルキル環または5～10員ヘテロシクロアルキル環を形成し、各々が任意選択で、ハロ、C₁～6アルキル、C₂～6アルケニル、C₂～6アルキニル、C₁～6ハロアルキル、CN、NO₂、OR^a₃、SR^a₃、C(O)R^b₃、C(O)NRC₃Rd₃、C(O)OR^a₃、OC(O)R^b₃、OC(O)NRC₃Rd₃、NRC₃Rd₃、NRC₃

10

20

30

40

50

$3C(O)Rb_3$ 、 $NRc_3C(O)ORa_3$ 、 $NRc_3C(O)NRc_3Rd_3$ 、 $C(=NRe_3)Rb_3$ 、 $C(=NRe_3)NRc_3Rd_3$ 、 $NRc_3C(=NRe_3)NRc_3Rd_3$ 、 $NRc_3S(O)Rb_3$ 、 $NRc_3S(O)_2Rb_3$ 、 $NRc_3S(O)_2NRc_3Rd_3$ 、 $S(O)Rb_3$ 、 $S(O)NRc_3Rd_3$ 、 $S(O)_2Rb_3$ 、及び $S(O)_2NRc_3Rd_3$ から独立して選択される1、2、または3つの置換基で置換されるか、

あるいは R^5 及び R^7 が、それらが結合した前記炭素原子と一緒に、かつ Y^2 と一緒に、ハロ、 C_{1-6} アルキル、 C_{2-6} アルケニル、 C_{2-6} アルキニル、 C_{1-6} ハロアルキル、 CN 、 NO_2 、 ORa_3 、 SRa_3 、 $C(O)Rb_3$ 、 $C(O)NRc_3Rd_3$ 、 $C(O)ORa_3$ 、 $OC(O)Rb_3$ 、 $OC(O)NRc_3Rd_3$ 、 NRc_3Rd_3 、 $NRc_3C(O)Rb_3$ 、 $NRc_3C(O)ORa_3$ 、 $NRc_3C(O)NRc_3Rd_3$ 、 $C(=NRe_3)Rb_3$ 、 $C(=NRe_3)NRc_3Rd_3$ 、 $NRc_3C(=NRe_3)NRc_3Rd_3$ 、 $NRc_3S(O)Rb_3$ 、 $NRc_3S(O)_2Rb_3$ 、 $NRc_3S(O)_2NRc_3Rd_3$ 、 $S(O)Rb_3$ 、 $S(O)NRc_3Rd_3$ 、 $S(O)_2Rb_3$ 、及び $S(O)_2NRc_3Rd_3$ から独立して選択される1、2、または3つの置換基で置換されるか、

あるいは R^1 及び R^3 と一緒に、それらが結合した前記炭素原子の間に二重結合を形成するか、

あるいは R^3 及び R^5 と一緒に、それらが結合した前記炭素原子の間に二重結合を形成するか、

あるいは R^7 及び R^9 と一緒に、それらが結合した前記炭素原子の間に二重結合を形成するか、

あるいは R^9 及び R^{11} と一緒に、それらが結合した前記炭素原子の間に二重結合を形成するか、

あるいは R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、及び R^{12} と一緒に、それらが結合した前記炭素原子の間に三重結合を形成し、

各 Ra 、 Rb 、 Rc 、 Rd 、 Ra_1 、 Rb_1 、 Rc_1 、 Rd_1 、 Ra_2 、 Rb_2 、 Rc_2 、 Rd_2 、 Ra_3 、 Rb_3 、 Rc_3 、及び Rd_3 が独立して、 H 、 C_{1-6} アルキル、 C_{1-6} ハロアルキル、 C_{2-6} アルケニル、 C_{2-6} アルキニル、 C_{6-10} アリール、 C_{3-7} シクロアルキル、 $5-10$ 員ヘテロアリール、 $4-10$ 員ヘテロシクロアルキル、 C_{6-10} アリール- C_{1-4} アルキル、 C_{3-7} シクロアルキル- C_{1-4} アルキル、 $5-10$ 員ヘテロアリール- C_{1-4} アルキル、及び $4-10$ 員ヘテロシクロアルキル- C_{1-4} アルキルから選択され、前記 Ra 、 Rb 、 Rc 、 Rd 、 Ra_1 、 Rb_1 、 Rc_1 、 Rd_1 、 Ra_2 、 Rb_2 、 Rc_2 、 Rd_2 、 Ra_3 、 Rb_3 、 Rc_3 、及び Rd_3 の前記 C_{1-6} アルキル、 C_{2-6} アルケニル、 C_{2-6} アルキニル、 C_{6-10} アリール、 C_{3-7} シクロアルキル、 $5-10$ 員ヘテロアリール、 $4-10$ 員ヘテロシクロアルキル、 C_{6-10} アリール- C_{1-4} アルキル、 C_{3-7} シクロアルキル- C_{1-4} アルキル、 $5-10$ 員ヘテロアリール- C_{1-4} アルキル、及び $4-10$ 員ヘテロシクロアルキル- C_{1-4} アルキルが任意選択で、ハロ、 C_{1-4} アルキル、 C_{1-4} ハロアルキル、 C_{2-6} アルケニル、 C_{2-6} アルキニル、 CN 、 ORa_7 、 SRa_7 、 $C(O)Rb_7$ 、 $C(O)NRc_7Rd_7$ 、 $C(O)ORa_7$ 、 $OC(O)Rb_7$ 、 $OC(O)NRc_7Rd_7$ 、 NRc_7Rd_7 、 NRc_7Rd_7 、 $NRc_7C(O)Rb_7$ 、 $NRc_7C(O)NRc_7Rd_7$ 、 $NRc_7C(=NRe_7)NRc_7Rd_7$ 、 $NRc_7C(=NRe_7)NRc_3Rd_7$ 、 $S(O)Rb_7$ 、 $S(O)NRc_7Rd_7$ 、 $S(O)_2Rb_7$ 、 $NRc_7S(O)_2Rb_7$ 、 $NRc_7S(O)_2NRc_7Rd_7$ 、及び $S(O)_2NRc_7Rd_7$ から独立して選択される1、2、または3つの置換基で置換されるか、

あるいは Rc 及び Rd が、それらが結合した前記 N 原子と一緒に、 CN 、ハロ、 C_{1-4} アルキル、 C_{1-4} ハロアルキル、 C_{1-6} ハロアルキル、 C_{2-6} アルケニル、 C_{2-6} アルキニル、 CN 、 ORa_7 、 SRa_7 、 $C(O)Rb_7$ 、 $C(O)NRc_7Rd_7$ 、 $C(O)ORa_7$ 、 $OC(O)Rb_7$ 、 $OC(O)NRc_7Rd_7$ 、 NRc_7Rd_7 、 N

10

20

30

40

50

$R_c^7C(O)R_b^7$ 、 $NR_c^7C(O)NR_c^7R_d^7$ 、 $NR_c^7C(O)OR_a^7$ 、 $C(=NRe^7)NR_c^7R_d^7$ 、 $NR_c^7C(=NRe^7)NR_c^3R_d^7$ 、 $S(O)R_b^7$ 、 $S(O)NR_c^7R_d^7$ 、 $S(O)_2R_b^7$ 、 $NR_c^7S(O)_2R_b^7$ 、 $NR_c^7S(O)_2NR_c^7R_d^7$ 及び $S(O)_2NR_c^7R_d^7$ から独立して選択される 1、2、または 3 つの置換基で任意選択で置換される、4~7 員ヘテロシクロアルキル基を形成するか。

あるいは R_c^1 及び R_d^2 が、それらが結合した前記 N 原子と一緒に、 CN 、 H 、 C_1 -4 アルキル、 C_1 -4 ハロアルキル、 C_1 -6 ハロアルキル、 C_2 -6 アルケニル、 C_2 -6 アルキニル、 CN 、 OR_a^7 、 SR_a^7 、 $C(O)R_b^7$ 、 $C(O)NR_c^7R_d^7$ 、 $C(O)OR_a^7$ 、 $OC(O)R_b^7$ 、 $OC(O)NR_c^7R_d^7$ 、 $NR_c^7R_d^7$ 、 $NR_c^7C(O)R_b^7$ 、 $NR_c^7C(O)NR_c^7R_d^7$ 、 $NR_c^7C(O)OR_a^7$ 、 $C(=NRe^7)NR_c^7R_d^7$ 、 $NR_c^7C(=NRe^7)NR_c^3R_d^7$ 、 $S(O)R_b^7$ 、 $S(O)NR_c^7R_d^7$ 、 $S(O)_2R_b^7$ 、 $NR_c^7S(O)_2R_b^7$ 、 $NR_c^7S(O)_2NR_c^7R_d^7$ 及び $S(O)_2NR_c^7R_d^7$ から独立して選択される 1、2、または 3 つの置換基で任意選択で置換される、4~7 員ヘテロシクロアルキル基を形成するか。

あるいは R_c^2 及び R_d^2 が、それらが結合した前記 N 原子と一緒に、 CN 、 H 、 C_1 -4 アルキル、 C_1 -4 ハロアルキル、 C_1 -6 ハロアルキル、 C_2 -6 アルケニル、 C_2 -6 アルキニル、 CN 、 OR_a^7 、 SR_a^7 、 $C(O)R_b^7$ 、 $C(O)NR_c^7R_d^7$ 、 $C(O)OR_a^7$ 、 $OC(O)R_b^7$ 、 $OC(O)NR_c^7R_d^7$ 、 $NR_c^7R_d^7$ 、 $NR_c^7C(O)R_b^7$ 、 $NR_c^7C(O)NR_c^7R_d^7$ 、 $NR_c^7C(O)OR_a^7$ 、 $C(=NRe^7)NR_c^7R_d^7$ 、 $NR_c^7C(=NRe^7)NR_c^3R_d^7$ 、 $S(O)R_b^7$ 、 $S(O)NR_c^7R_d^7$ 、 $S(O)_2R_b^7$ 、 $NR_c^7S(O)_2R_b^7$ 、 $NR_c^7S(O)_2NR_c^7R_d^7$ 及び $S(O)_2NR_c^7R_d^7$ から独立して選択される 1、2、または 3 つの置換基で任意選択で置換される、4~7 員ヘテロシクロアルキル基を形成するか。

あるいは R_c^3 及び R_d^3 が、それらが結合した前記 N 原子と一緒に、 CN 、 H 、 C_1 -4 アルキル、 C_1 -4 ハロアルキル、 C_1 -6 ハロアルキル、 C_2 -6 アルケニル、 C_2 -6 アルキニル、 CN 、 OR_a^7 、 SR_a^7 、 $C(O)R_b^7$ 、 $C(O)NR_c^7R_d^7$ 、 $C(O)OR_a^7$ 、 $OC(O)R_b^7$ 、 $OC(O)NR_c^7R_d^7$ 、 $NR_c^7R_d^7$ 、 $NR_c^7C(O)R_b^7$ 、 $NR_c^7C(O)NR_c^7R_d^7$ 、 $NR_c^7C(O)OR_a^7$ 、 $C(=NRe^7)NR_c^7R_d^7$ 、 $NR_c^7C(=NRe^7)NR_c^3R_d^7$ 、 $S(O)R_b^7$ 、 $S(O)NR_c^7R_d^7$ 、 $S(O)_2R_b^7$ 、 $NR_c^7S(O)_2R_b^7$ 、 $NR_c^7S(O)_2NR_c^7R_d^7$ 及び $S(O)_2NR_c^7R_d^7$ から独立して選択される 1、2、または 3 つの置換基で任意選択で置換される、4~7 員ヘテロシクロアルキル基を形成するか。

R_a^7 、 R_b^7 、 R_c^7 、及び R_d^7 が独立して、 H 、 C_1 -6 アルキル、 C_1 -6 ハロアルキル、 C_2 -6 アルケニル、 C_2 -6 アルキニル、 C_6 -10 アリール、 C_3 -7 シクロアルキル、5~10 員ヘテロアリール、4~10 員ヘテロシクロアルキル、 C_6 -10 アリール- C_1 -4 アルキル、 C_3 -7 シクロアルキル- C_1 -4 アルキル、5~10 員ヘテロアリール- C_1 -4 アルキル、及び 4~10 員ヘテロシクロアルキル- C_1 -4 アルキルから選択され、前記 C_1 -6 アルキル、 C_1 -6 ハロアルキル、 C_2 -6 アルケニル、 C_2 -6 アルキニル、 C_6 -10 アリール、 C_3 -7 シクロアルキル、5~10 員ヘテロアリール、4~10 員ヘテロシクロアルキル、 C_6 -10 アリール- C_1 -4 アルキル、 C_3 -7 シクロアルキル- C_1 -4 アルキル、5~10 員ヘテロアリール- C_1 -4 アルキル、及び 4~10 員ヘテロシクロアルキル- C_1 -4 アルキルが、各々任意選択で、 OH 、 CN 、アミノ、ハロ、 C_1 -6 アルキル、 C_1 -6 アルコキシ、 C_1 -6 ハロアルキル、及び C_1 -6 ハロアルコキシから独立して選択される 1、2、または 3 つの置換基で置換され、

各 Re 、 Re^1 、 Re^2 、 Re^3 、及び Re^7 が独立して、 H 、 C_1 -4 アルキル、及び

10

20

30

40

50

C N から選択され、

a が、0 または 1 であり、

m が、0 または 1 であり、

n が、0 または 1 であり、

p が、0 または 1 であり、

q が、0 または 1 であり、

r が、0 または 1 であり、

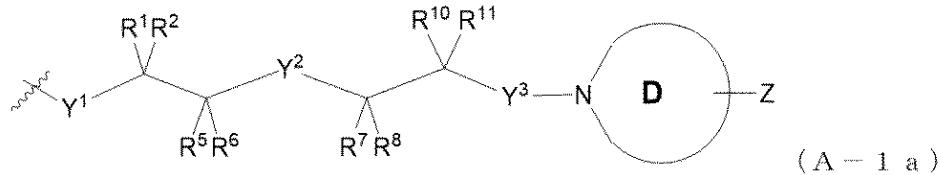
いずれの前述のヘテロアリールまたはヘテロシクロアルキル基も、O、N、及びS から独立して選択される 1、2、3、または 4 個の環形成ヘテロ原子を含み、

いずれの前述のヘテロシクロアルキル基の 1 つまたは複数の環形成 C または N 原子も任意選択で、オキソ(=O) 基と置換される、化合物、またはその医薬的に許容される塩。 10

【請求項 2】

A が、式 (A - 1 a) を有する基である、請求項 1 に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【化 2】



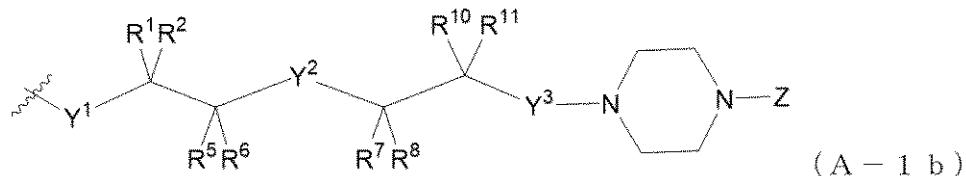
20

20

【請求項 3】

A が、式 (A - 1 b) を有する基である、請求項 1 に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【化 3】



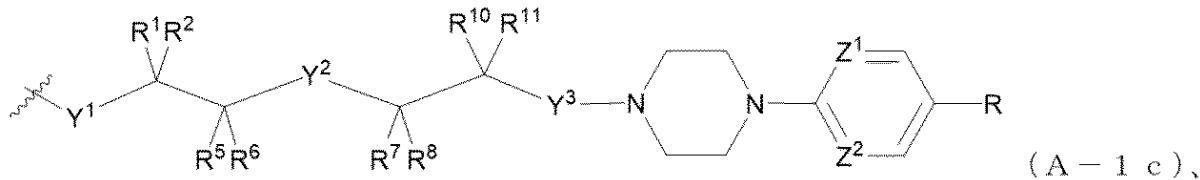
30

30

【請求項 4】

A が、式 (A - 1 c) を有する基であり、

【化 4】



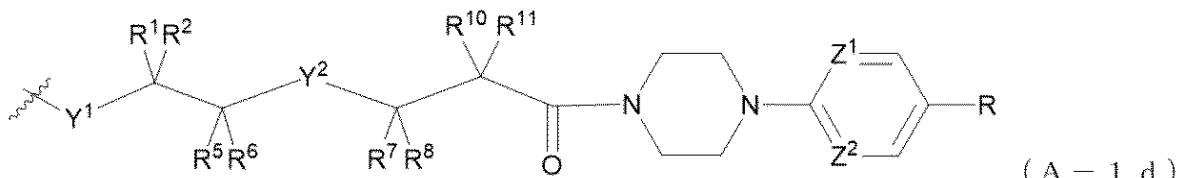
40

式中、Z¹ 及び Z² が、各々独立して、N 及び C H から選択され、R が、C N、C I、または C F₃ である、請求項 1 に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 5】

A が、式 (A - 1 d) を有する基であり、

【化 5】



50

式中、Z¹及びZ²が、各々独立して、N及びC Hから選択され、Rが、CN、CL、またはCF₃である、請求項1に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項6】

Lが、NRYまたはOである、請求項1に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項7】

Xが、CF₃、CH₃、CN、CL、またはBrである、請求項1～3のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項8】

Y¹が、NRYまたはOである、請求項1～7のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 10

【請求項9】

Y¹が、NRY、O、またはSである、請求項1～7のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項10】

Y¹が、NRYである、請求項1～7のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項11】

Y¹が、Oである、請求項1～7のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 20

【請求項12】

Y²が、NRYまたはOである、請求項1～11のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項13】

Y²が、NRY、O、またはSである、請求項1～11のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項14】

Y²が、Oである、請求項1～11のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項15】

Y³が、C(=O)である、請求項1～14のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 30

【請求項16】

Y³が、C(=O)またはS(=O)₂である、請求項1～14のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項17】

RYが、HまたはC₁-4アルキルである、請求項1～16のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項18】

RYが、メチルである、請求項1～16のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 40

【請求項19】

RYが、Hである、請求項1～16のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項20】

Zが、H、CYZ、ハロ、C₁-6アルキル、C₁-6ハロアルキル、CN、NO₂、OR^a、C(O)R^b、C(O)NR^cR^d、C(O)OR^a、NR^cR^d、及びNR^cC(O)R^bであり、Zの前記C₁-6アルキル及びC₁-6ハロアルキルが、各々任意選択で、CYZ、ハロ、CN、NO₂、OR^a、SR^a、C(O)R^b、C(O)NR^cR^d、C(O)OR^a、OC(O)R^b、OC(O)NR^cR^d、及びNR^c 50

C(O)R^bから独立して選択される1、2、3、4、または5つの置換基で置換される、請求項1～19のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項21】

Zが、CyZである、請求項1～19のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項22】

CyZが、5～10員ヘテロアリール及び4～10員ヘテロシクロアルキルから選択され、各々が任意選択で、ハロ、C₁-6アルキル、C₂-6アルケニル、C₂-6アルキニル、C₁-6ハロアルキル、CN、NO₂、OR^a1、SR^a1、C(O)R^b1、C(O)NRC₁Rd_d1、C(O)OR^a1、OC(O)R^b1、OC(O)NRC₁Rd_d1、C(=NRe₁)NRC₁Rd_d1、NRC₁C(=NRe₁)NRC₁Rd_d1、NRC₁Rd_d1、NRC₁C(O)R^b1、NRC₁C(O)OR^a1、NRC₁C(O)NRC₁Rd_d1、NRC₁S(O)R^b1、NRC₁S(O)2R^b1、NRC₁S(O)2NRC₁Rd_d1、S(O)R^b1、S(O)NRC₁Rd_d1、S(O)2R^b1、及びS(O)2NRC₁Rd_d1から独立して選択される1、2、3、または4つの置換基と置換され、前記アルキル、C₂-6アルケニル、及びC₂-6アルキニルが任意選択で、ハロ、CN、NO₂、OR^a1、SR^a1、C(O)R^b1、C(O)NRC₁Rd_d1、C(O)OR^a1、OC(O)R^b1、OC(O)NRC₁Rd_d1、C(=NRe₁)NRC₁Rd_d1、NRC₁C(=NRe₁)NRC₁Rd_d1、NRC₁Rd_d1、NRC₁C(O)R^b1、NRC₁C(O)OR^a1、NRC₁C(O)NRC₁Rd_d1、NRC₁S(O)R^b1、NRC₁S(O)2R^b1、NRC₁S(O)2NRC₁Rd_d1、S(O)R^b1、S(O)NRC₁Rd_d1、S(O)2R^b1、及びS(O)2NRC₁Rd_d1から独立して選択される1、2、または3つの置換基で置換される、請求項1～21のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項23】

CyZが、CN、CF₃、またはC₁と任意選択で置換される、5～10員ヘテロアリールである、請求項1～21のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項24】

CyZが、CN、C₁-6アルキル、C₁-6ハロアルキル、ハロ、またはNRC₁Rd_d1と任意選択で置換される、5～10員ヘテロアリールであり、ここで、C₁-6アルキルが任意選択で、CNまたはNRC₁Rd_d1で置換される、請求項1～21のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項25】

CyZが、ピリジニルまたはピリミジニルであり、各々が任意選択で、CN、CF₃、またはC₁と置換される、請求項1～21のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項26】

環Dが、ハロ、C₁-6アルキル、C₁-6ハロアルキル、CN、NO₂、OR^a2、C(O)R^b2、C(O)NRC₂Rd_d2、C(O)OR^a2、NRC₂Rd_d2、NRC₂C(O)R^b2から独立して選択される1、2、または3つの基で任意選択で置換される、単環式または多環式4～10員ヘテロシクロアルキル基であり、前記C₁-6アルキルが任意選択で、ハロ、CN、NO₂、OR^a2、C(O)R^b2、NRC₂Rd_d2、及びNRC₂C(O)R^b2から独立して選択される1、2、または3つの基で置換される、請求項1～25のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項27】

環Dが、単環式4～10員ヘテロシクロアルキル基である、請求項1～25のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項28】

環Dが、ピペラジニルである、請求項1～25のいずれか1項に記載の化合物、またはそ

10

20

30

40

50

の医薬的に許容される塩。

【請求項 29】

環Dが、ピペラジニル、ジヒドロピリダジニル、ジアゼパニル、ピロリジニル、またはヘキサヒドロピロロ[3,2-b]ピロール-1(2H)-イルである、請求項1～25のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 30】

R¹が、H、ハロ、OR^a3、C₁-6アルキル、C₆-10アリール、5～10員ヘテロアリール、C₆-10アリール-C₁-4アルキルであり、前記C₁-6アルキル、C₆-10アリール、5～10員ヘテロアリール、またはC₆-10アリール-C₁-4アルキルが任意選択で、OR^a3またはNRC₃Rd^d3で置換される、請求項1～29のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。
10

【請求項 31】

R¹が、H、ハロ、OR^a3、C₁-6アルキル、C₆-10アリール、5～10員ヘテロアリール、4～10員ヘテロシクロアルキル、C₆-10アリール-C₁-4アルキル、5～10員ヘテロアリール-C₁-4アルキル、または4～10員ヘテロシクロアルキル-C₁-4アルキルであり、前記C₁-6アルキル、C₆-10アリール、5～10員ヘテロアリール、C₆-10アリール-C₁-4アルキル、5～10員ヘテロアリール-C₁-4アルキル、または4～10員ヘテロシクロアルキル-C₁-4アルキルが任意選択で、OR^a3またはNRC₃Rd^d3で置換される、請求項1～29のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。
20

【請求項 32】

R¹が、C₁-6アルキルである、請求項1～29のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 33】

R¹が、OR^a3で任意選択で置換されるC₁-6アルキルである、請求項1～29のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 34】

R¹が、Hである、請求項1～29のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 35】

R¹が、メチル、エチル、またはイソプロピルである、請求項1～29のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。
30

【請求項 36】

R¹が、メトキシメチルまたはヒドロキシメチルである、請求項1～29のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 37】

R¹が、フェニル、フェニルメチル、またはピリジニルである、請求項1～29のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 38】

R²が、H、ハロ、OR^a3、C₁-6アルキル、C₆-10アリール、5～10員ヘテロアリール、C₆-10アリール-C₁-4アルキルであり、前記C₁-6アルキル、C₆-10アリール、5～10員ヘテロアリール、またはC₆-10アリール-C₁-4アルキルが任意選択で、OR^a3またはNRC₃Rd^d3で置換される、請求項1～37のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。
40

【請求項 39】

R²が、OR^a3である、請求項1～37のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 40】

R²が、Hである、請求項1～37のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。
50

【請求項 4 1】

R₃が、H、ハロ、OR_a3、C₁-6アルキル、C₆-10アリール、5~10員ヘテロアリール、C₆-10アリール-C₁-4アルキルであり、前記C₁-6アルキル、C₆-10アリール、5~10員ヘテロアリール、またはC₆-10アリール-C₁-4アルキルが任意選択で、OR_a3またはNRC₃Rd₃で置換される、請求項1~40のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 4 2】

R₃が、Hである、請求項1~40のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 4 3】

R₃が、メチル、エチル、またはイソプロピルである、請求項1~40のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 4 4】

R₃が、メトキシメチルまたはヒドロキシメチルである、請求項1~40のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 4 5】

R₃が、フェニル、フェニルメチル、またはピリジニルである、請求項1~40のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 4 6】

R₄が、H、ハロ、OR_a3、C₁-6アルキル、C₆-10アリール、5~10員ヘテロアリール、C₆-10アリール-C₁-4アルキルであり、前記C₁-6アルキル、C₆-10アリール、5~10員ヘテロアリール、またはC₆-10アリール-C₁-4アルキルが任意選択で、OR_a3またはNRC₃Rd₃で置換される、請求項1~45のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 4 7】

R₄が、Hである、請求項1~45のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 4 8】

R₅が、H、ハロ、OR_a3、C₁-6アルキル、C₆-10アリール、5~10員ヘテロアリール、C₆-10アリール-C₁-4アルキルであり、前記C₁-6アルキル、C₆-10アリール、5~10員ヘテロアリール、またはC₆-10アリール-C₁-4アルキルが任意選択で、OR_a3またはNRC₃Rd₃で置換される、請求項1~47のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 4 9】

R₅が、Hである、請求項1~47のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 5 0】

R₅が、メチル、エチル、またはイソプロピルである、請求項1~47のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 5 1】

R₅が、メトキシメチルまたはヒドロキシメチルである、請求項1~47のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 5 2】

R₅が、フェニル、フェニルメチル、またはピリジニルである、請求項1~47のいずれか1項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 5 3】

R₆が、H、ハロ、OR_a3、C₁-6アルキル、C₆-10アリール、5~10員ヘテロアリール、C₆-10アリール-C₁-4アルキルであり、前記C₁-6アルキル、C₆-10アリール、5~10員ヘテロアリール、またはC₆-10アリール-C₁-4アルキルが任意選択で、OR_a3またはNRC₃Rd₃で置換される、請求項1~52のい

10

20

30

40

50

すれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 5 4】

R 6 が、H である、請求項 1 ~ 5 2 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 5 5】

R 7 が、H、ハロ、OR^a3、C₁ - 6 アルキル、C₆ - 10 アリール、5 ~ 10 員ヘテロアリール、C₆ - 10 アリール - C₁ - 4 アルキルであり、前記 C₁ - 6 アルキル、C₆ - 10 アリール、5 ~ 10 員ヘテロアリール、または C₆ - 10 アリール - C₁ - 4 アルキルが任意選択で、OR^a3 または NRC₃Rd₃ で置換される、請求項 1 ~ 5 4 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 10

【請求項 5 6】

R 7 が、C₁ - 6 アルキルである、請求項 1 ~ 5 4 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 5 7】

R 7 が、メチルである、請求項 1 ~ 5 4 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 5 8】

R 8 が、H、ハロ、OR^a3、C₁ - 6 アルキル、C₆ - 10 アリール、5 ~ 10 員ヘテロアリール、または C₆ - 10 アリール - C₁ - 4 アルキルであり、前記 C₁ - 6 アルキル、C₆ - 10 アリール、5 ~ 10 員ヘテロアリール、または C₆ - 10 アリール - C₁ - 4 アルキルが任意選択で、OR^a3 または NRC₃Rd₃ で置換される、請求項 1 ~ 5 7 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 20

【請求項 5 9】

R 8 が、H である、請求項 1 ~ 5 7 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 6 0】

R 9 が、H、ハロ、OR^a3、C₁ - 6 アルキル、C₆ - 10 アリール、5 ~ 10 員ヘテロアリール、または C₆ - 10 アリール - C₁ - 4 アルキルであり、前記 C₁ - 6 アルキル、C₆ - 10 アリール、5 ~ 10 員ヘテロアリール、または C₆ - 10 アリール - C₁ - 4 アルキルが任意選択で、OR^a3 または NRC₃Rd₃ で置換される、請求項 1 ~ 5 9 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 30

【請求項 6 1】

R 9 が、H である、請求項 1 ~ 5 9 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 6 2】

R 10 が、H、ハロ、OR^a3、C₁ - 6 アルキル、C₆ - 10 アリール、5 ~ 10 員ヘテロアリール、または C₆ - 10 アリール - C₁ - 4 アルキルであり、前記 C₁ - 6 アルキル、C₆ - 10 アリール、5 ~ 10 員ヘテロアリール、または C₆ - 10 アリール - C₁ - 4 アルキルが任意選択で、OR^a3 または NRC₃Rd₃ で置換される、請求項 1 ~ 5 9 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 40

【請求項 6 3】

R 10 が、H である、請求項 1 ~ 5 9 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 6 4】

R 11 が、H、ハロ、OR^a3、C₁ - 6 アルキル、C₆ - 10 アリール、5 ~ 10 員ヘテロアリール、または C₆ - 10 アリール - C₁ - 4 アルキルであり、前記 C₁ - 6 アルキル、C₆ - 10 アリール、5 ~ 10 員ヘテロアリール、または C₆ - 10 アリール - C₁ - 4 アルキルが任意選択で、OR^a3 または NRC₃Rd₃ で置換される、請求項 1 ~ 6 3 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 6 5】

R 1 1 が、H である、請求項 1 ~ 6 3 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 6 6】

R 1 2 が、H、ハロ、OR^a 3、C₁ - 6 アルキル、C₆ - 1 0 アリール、5 ~ 1 0 員ヘテロアリール、またはC₆ - 1 0 アリール - C₁ - 4 アルキルであり、前記C₁ - 6 アルキル、C₆ - 1 0 アリール、5 ~ 1 0 員ヘテロアリール、またはC₆ - 1 0 アリール - C₁ - 4 アルキルが任意選択で、OR^a 3 またはNRC₃Rd₃で置換される、請求項 1 ~ 6 5 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 6 7】

R 1 2 が、H である、請求項 1 ~ 6 5 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 10

【請求項 6 8】

R₃ 及び R₅ が、それらが結合した前記炭素原子と一緒に、C₅ - 1 0 シクロアルキル環または5 ~ 1 0 員ヘテロシクロアルキル環を形成し、各々が任意選択で、ハロ、C₁ - 6 アルキル、C₂ - 6 アルケニル、C₂ - 6 アルキニル、C₁ - 6 ハロアルキル、CN、NO₂、OR^a 3、SR^a 3、C(O)R^b 3、C(O)NRC₃Rd₃、C(O)OR^a 3、OC(O)R^b 3、OC(O)NRC₃Rd₃、NRC₃Rd₃、NRC₃C(O)R^b 3、NRC₃C(O)OR^a 3、NRC₃C(O)NRC₃Rd₃、C(=NR^e 3)R^b 3、C(=NR^e 3)NRC₃Rd₃、NRC₃C(=NR^e 3)NRC₃Rd₃、NRC₃S(O)R^b 3、NRC₃S(O)₂R^b 3、NRC₃S(O)₂NRC₃Rd₃、S(O)R^b 3、S(O)NRC₃Rd₃、S(O)₂R^b 3、及びS(O)₂NRC₃Rd₃から独立して選択される 1、2、または 3 つの置換基で置換される、請求項 1、6 ~ 4 0、4 6、4 7 および 5 3 ~ 6 7 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 20

【請求項 6 9】

R₃ 及び R₅ が、それらが結合した前記炭素原子と一緒に、C₅ - 1 0 シクロアルキル環または5 ~ 1 0 員ヘテロシクロアルキル環を形成する、請求項 1、6 ~ 4 0、4 6、4 7 および 5 3 ~ 6 7 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 7 0】

R₃ 及び R₅ が、それらが結合した前記炭素原子と一緒に、テトラヒドロフラニル環を形成する、請求項 1、6 ~ 4 0、4 6、4 7 および 5 3 ~ 6 7 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 30

【請求項 7 1】

R₃ 及び R₅ が、それらが結合した前記炭素原子と一緒に、シクロブチルまたはシクロペンチル環を形成する、請求項 1、6 ~ 4 0、4 6、4 7 および 5 3 ~ 6 7 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 7 2】

R₅ 及び R₇ が、それらが結合した前記炭素原子と一緒に、かつ Y₂と一緒に、ハロ、C₁ - 6 アルキル、C₂ - 6 アルケニル、C₂ - 6 アルキニル、C₁ - 6 ハロアルキル、CN、NO₂、OR^a 3、SR^a 3、C(O)R^b 3、C(O)NRC₃Rd₃、C(O)OR^a 3、OC(O)R^b 3、OC(O)NRC₃Rd₃、NRC₃Rd₃、NRC₃C(O)R^b 3、NRC₃C(O)OR^a 3、NRC₃C(O)NRC₃Rd₃、C(=NR^e 3)R^b 3、C(=NR^e 3)NRC₃Rd₃、NRC₃C(=NR^e 3)NRC₃Rd₃、NRC₃S(O)R^b 3、NRC₃S(O)₂R^b 3、NRC₃S(O)₂NRC₃Rd₃、S(O)R^b 3、S(O)NRC₃Rd₃、S(O)₂R^b 3、及びS(O)₂NRC₃Rd₃から独立して選択される 1、2、または 3 つの置換基で任意選択で置換される、5 ~ 1 0 員ヘテロシクロアルキル環を形成する、請求項 1 ~ 4 7、5 3、5 4 および 5 8 ~ 6 7 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 40

【請求項 7 3】

R₅ 及び R₇ が、それらが結合した前記炭素原子と一緒に、かつ Y₂と一緒に、5 ~ 1 0 50

員ヘテロシクロアルキル環を形成する、請求項 1 ~ 4 7、5 3、5 4 および 5 8 ~ 6 7 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 7 4】

R 5 及び R 7 が、それらが結合した前記炭素原子と一緒に、かつ Y 2 と一緒に、テトラヒドロフラニル環またはテトラヒドロピラニル環を形成する、請求項 1 ~ 4 7、5 3、5 4 および 5 8 ~ 6 7 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 7 5】

R 5 及び R 7 が、それらが結合した前記炭素原子と一緒に、かつ Y 2 と一緒に、テトラヒドロフラニル環、テトラヒドロピラニル環、またはピロリジニル環を形成する、請求項 1 ~ 4 7、5 3、5 4 および 5 8 ~ 6 7 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 10

【請求項 7 6】

m が 1 である、請求項 1 および 6 ~ 7 5 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 7 7】

n が 0 である、請求項 1 および 6 ~ 7 6 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 20

【請求項 7 8】

p が 1 である、請求項 1 および 6 ~ 7 7 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 7 9】

q が 0 である、請求項 1 および 6 ~ 7 8 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 8 0】

r が 1 である、請求項 1 および 6 ~ 7 9 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

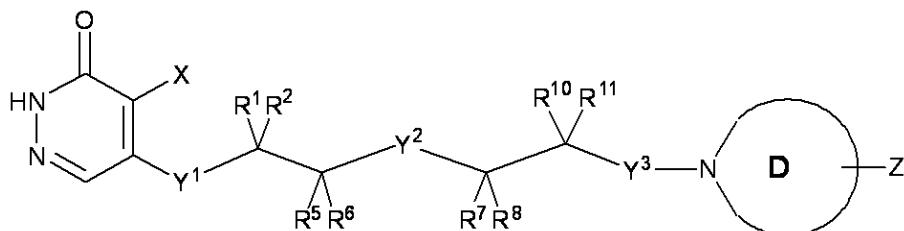
【請求項 8 1】

a が 0 である、請求項 1 および 6 ~ 8 0 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。 30

【請求項 8 2】

式 I I a を有する、請求項 1 に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【化 6】



I I a

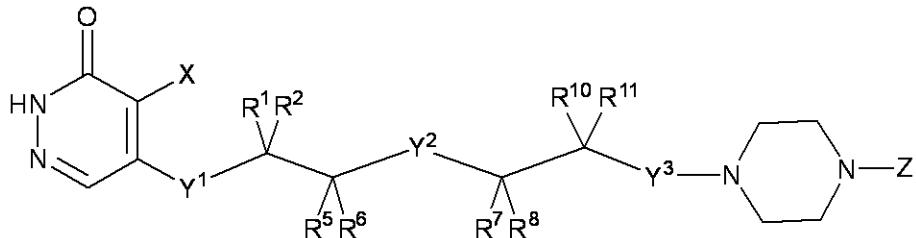
40

【請求項 8 3】

式 I I b を有する、請求項 1 に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

50

【化7】



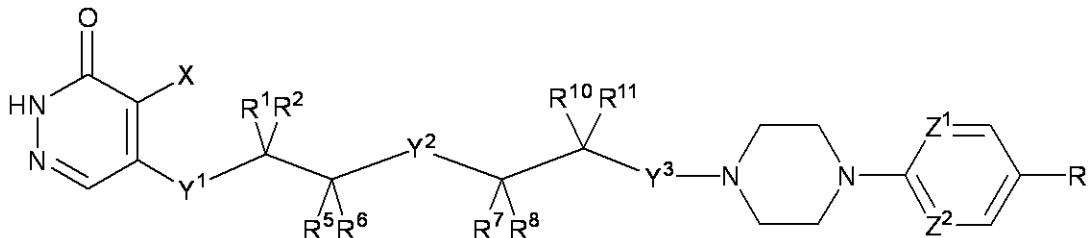
III b

10

【請求項 8 4】

式 III c を有し、

【化8】



20

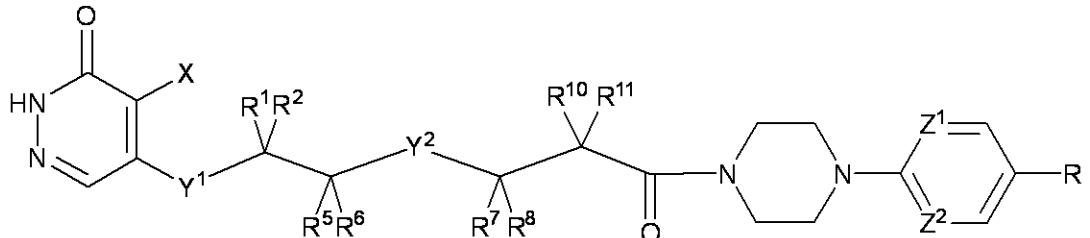
III c

式中、 Z^1 及び Z^2 が、各々独立して、N 及び C H から選択され、R が、C N、C l、または C F 3 である、請求項 1 に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 8 5】

式 III d を有し、

【化9】



30

III d

式中、 Z^1 及び Z^2 が、各々独立して、N 及び C H から選択され、R が、C N、C l、または C F 3 である、請求項 1 に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 8 6】

前記化合物が、5 - [[(2 S) - 1 - (3 - オキソ - 3 - [4 - [5 - (トリフルオロメチル) ピリミジン - 2 - イル] ピペラジン - 1 - イル] プロポキシ) プロパン - 2 - イル] アミノ] - 4 - (トリフルオロメチル) - 2 , 3 - ジヒドロピリダジン - 3 - オン、またはその医薬的に許容される塩である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 8 7】

前記化合物が結晶質である、請求項 8 6 に記載の化合物。

【請求項 8 8】

前記化合物が、約 5 . 8 、約 10 . 8 、約 11 . 9 、及び約 17 . 2 度 (2 シーツ) から

40

50

選択される少なくとも 1 つの特性 X R P D ピークを有する、請求項 8 6 または 8 7 に記載の化合物。

【請求項 8 9】

前記化合物が、約 5 . 8、約 10 . 8、約 11 . 9、約 13 . 3、約 13 . 5、約 15 . 5、及び約 17 . 2 度（2 シーツ）から選択される少なくとも 1 つの特性 X R P D ピークを有する、請求項 8 6 または 8 7 に記載の化合物。

【請求項 9 0】

前記化合物が、図 8 に実質的に示されるような特性ピークを有する X R P D パターンを有する、請求項 8 6 または 8 7 に記載の化合物。

【請求項 9 1】

前記化合物が、約 174 の温度で吸熱ピークを有することを特徴とする D S C サーモグラムを有する、請求項 8 6 ~ 9 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 9 2】

前記化合物が、図 9 に実質的に図示されるような D S C サーモグラムを有する、請求項 8 6 ~ 9 0 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 9 3】

請求項 1 ~ 9 2 のいずれか 1 項に記載の化合物、またはその医薬的に許容される塩と、少なくとも 1 つの医薬的に許容される担体とを含む、医薬組成物。

【請求項 9 4】

P A R P 7 の活性を阻害するための、請求項 9 3 に記載の医薬組成物。

【請求項 9 5】

がんを治療するための、請求項 9 3 に記載の医薬組成物。

【請求項 9 6】

前記がんが、乳癌、中枢神経系の癌、子宮内膜癌、腎臓癌、大腸癌、肺癌、食道癌、卵巣癌、脾臓癌、前立腺癌、胃癌、頭頸部癌（上部気道消化器癌）、尿路癌、または結腸癌である、請求項 9 5 に記載の医薬組成物。

10

20

30

40

50