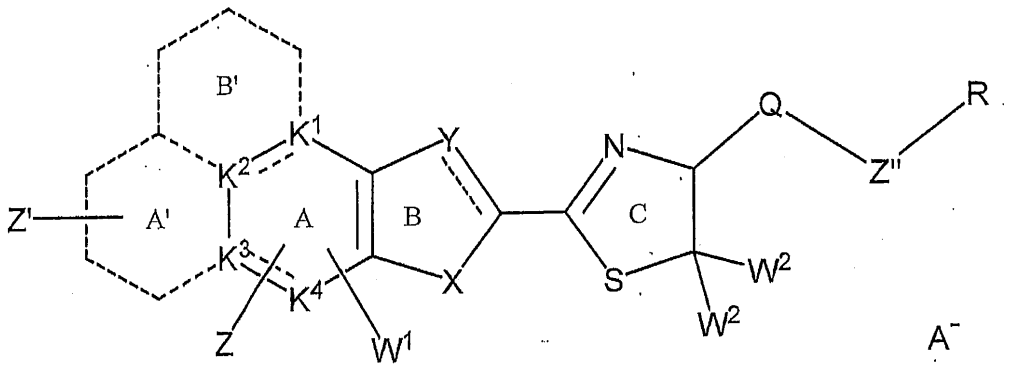
【公報種別】特許法第１７条の２の規定による補正の掲載
【部門区分】第３部門第２区分
【発行日】平成21年7月16日(2009.7.16)

【公表番号】特表2008-545746(P2008-545746A)
【公表日】平成20年12月18日(2008.12.18)
【年通号数】公開・登録公報2008-050
【出願番号】特願2008-514754(P2008-514754)
【国際特許分類】
Ｃ０７Ｄ 277/10　(2006.01)
Ｃ０７Ｄ 277/66　(2006.01)
Ｃ０７Ｄ 417/14　(2006.01)
Ｃ０７Ｄ 417/04　(2006.01)
Ｃ１２Ｑ　1/66　(2006.01)
Ｃ１２Ｑ　1/25　(2006.01)
Ｃ１２Ｑ　1/26　(2006.01)
Ｃ１２Ｑ　1/34　(2006.01)
Ｃ１２Ｑ　1/48　(2006.01)
Ｇ０１Ｎ　33/15　(2006.01)
Ｇ０１Ｎ　33/50　(2006.01)
Ｇ０１Ｎ　21/76　(2006.01)
【ＦＩ】
Ｃ０７Ｄ 277/10　ＣＳＰ
Ｃ０７Ｄ 277/66
Ｃ０７Ｄ 417/14
Ｃ０７Ｄ 417/04
Ｃ１２Ｑ　1/66
Ｃ１２Ｑ　1/25
Ｃ１２Ｑ　1/26
Ｃ１２Ｑ　1/34
Ｃ１２Ｑ　1/48
Ｇ０１Ｎ　33/15　Ｚ
Ｇ０１Ｎ　33/50　Ｚ
Ｇ０１Ｎ　21/76

【手続補正書】
【提出日】平成21年6月1日(2009.6.1)
【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：

【化１】

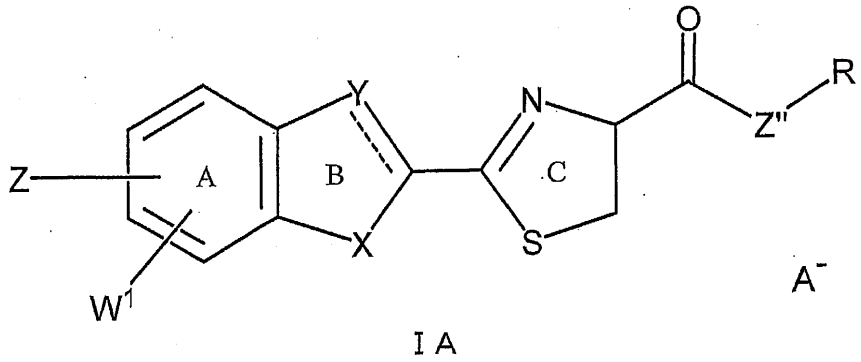


I

（式中、
Ｙは、Ｎ、Ｎ－酸化物、Ｎ－（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルキル、またはＣＨを表し；
ＹがＮを表すときに、ＸはＳを表さず；
ＸはＳ、Ｏ、ＣＨ＝ＣＨ、Ｎ＝ＣＨ、または、ＣＨ＝Ｎを表し；
ＸがＳを表すときに、ＹはＮを表さず；
ＺおよびＺ’は独立して、Ｈ、ＯＲ、ＮＨＲ、または、ＮＲＲを表し；
Ｚ’’は、Ｏ、Ｓ、ＮＨ、ＮＨＲ、または、Ｎ＝Ｎを表し；
Ｑは、カルボニル、または、ＣＨ$_2$を表し；
Ｗ^{1}は、Ｈ、ハロ、（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルキル、（Ｃ$_2$－Ｃ$_{20}$）アルケニル、ヒドロキシル、または、（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルコキシを表し；あるいは、
Ｗ^{1}およびＺは、両方とも環Ａ上のケト基を表し、環Ａにおいて任意の２重結合を表している破線の少なくとも１つが、存在しておらず；
各Ｗ^{2}は独立して、Ｈ、ハロ、（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルキル、（Ｃ$_2$－Ｃ$_4$）アルケニル、ヒドロキシル、または、（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルコキシを表し；
各Ｋ^1、Ｋ^2、Ｋ^3、およびＫ^{4}は独立して、ＣＨ、Ｎ、Ｎ－酸化物、または、Ｎ－（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルキルを表し、Ｋ^{1}とＫ^{2}との間の破線およびＫ^{3}とＫ^{4}との間の破線は、任意の２重結合を表し；
Ａ’およびＢ’は、環Ａと融合した任意の芳香環を表し、融合した３環系を形成するために、Ａ’とＢ’とのうちの１つだけが化合物に存在しており；
Ｂ’が存在しているときにＺ基が存在し、
Ａ’が存在しているときにＺ基が存在しておらず；
環Ｂの破線は、任意の２重結合を表し；
各Ｒは独立して、Ｈ、（Ｃ$_1$－Ｃ$_{20}$）アルキル、（Ｃ$_2$－Ｃ$_{20}$）アルケニル、（Ｃ$_2$－Ｃ$_{20}$）アルキニル、（Ｃ$_3$－Ｃ$_{20}$）シクロアルキル、（Ｃ$_1$－Ｃ$_{12}$）アルコキシ、（Ｃ$_6$－Ｃ$_{30}$）アリール、ヘテロアリール、複素環、（Ｃ$_1$－Ｃ$_{20}$）アルキルスルホキシ、（Ｃ$_6$－Ｃ$_{30}$）アリールスルホキシ、ヘテロアリールスルホキシ、（Ｃ$_1$－Ｃ$_{20}$）アルキルスルホニル、（Ｃ$_6$－Ｃ$_{30}$）アリールスルホニル、ヘテロアリールスルホニル、（Ｃ$_1$－Ｃ$_{20}$）アルキルスルフィニル、（Ｃ$_6$－Ｃ$_{30}$）アリールスルフィニル、ヘテロアリールスルフィニル、（Ｃ$_1$－Ｃ$_{20}$）アルコキシカルボニル、アミノ、ＮＨ（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルキル、Ｎ（（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルキル）$_2$、トリ（Ｃ$_1$－Ｃ$_{20}$）アンモニウム（Ｃ$_1$－Ｃ$_{20}$）アルキル、ヘテロアリール（Ｃ$_1$－Ｃ$_{20}$）アルキル、第４級窒素を有しているヘテロアリール、第４級窒素を有しているヘテロアリールカルボニル、（Ｃ$_6$－Ｃ$_{30}$）アリールチオ、（Ｃ$_1$－Ｃ$_{20}$）アルキルホスフェート、（Ｃ$_1$－Ｃ$_{20}$）アルキルホスホネート、（Ｃ$_6$－Ｃ$_{30}$）アリールホスフェート、（Ｃ$_6$－Ｃ$_{30}$）アリールホスホネート、ホスフェート、サルフェート、もしくは、サッカライドを表すか、または、Ｚ’’が酸素を表すときに任意のＭ$^+$（ここでＭは、アルカリ金属を表す）を表すか；あるいは、
ＺまたはＺ’がＮＲ^{1}Ｒ^{1}を表すときに、Ｒ^{1}Ｒ^{1}は、それらが結合しているＮと一緒

にヘテロアリール基または複素環基を形成しており；
任意のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、アミノ基、アリール基、ヘテロアリール基、または、複素環基は、（C_1－C_{20}）アルキル、（C_2－C_{20}）アルケニル、（C_2－C_{20}）アルキニル、（C_3－C_{20}）シクロアルキル、（C_1－C_{20}）アルコキシル、（C_1－C_{20}）アルキルカルボニル、（C_1－C_{20}）アルキルカルボキシル、ハロ、ヒドロキシル、－ＣＯＯR^X、－SO_2R^X、－SO_3R^X、ニトロ、アミノ、（C_1－C_{20}）アルキル－Ｓ（Ｏ）－、（C_1－C_{20}）アルキル－SO_2－、ホスフェート、（C_1－C_{20}）アルキルホスフェート、（C_1－C_{20}）アルキルホスホネート、ＮＨ（C_1－C_6）アルキル、ＮＨ（C_1－C_6）アルキニル、Ｎ（（C_1－C_6）アルキル）$_2$、Ｎ（（C_1－C_6）アルキニル）$_2$、メルカプト、（C_1－C_{20}）アルキルチオ、（C_6－C_{30}）アリール、（C_6－C_{30}）アリールチオ、トリフルオロメチル、＝Ｏ、ヘテロアリール、および、複素環から選択される１、２、３、４または５の置換基（ここで、各置換基は１－３のＲ基で置換されていてもよい）で置換されていてもよく；
R^Xは、Ｈ、（C_1－C_6）アルキル、または、（C_6－C_{30}）アリールを表し；
ＺまたはＺ’が窒素部分を含有しているときに、前記Ｚもしくは前記Ｚ’の窒素部分の１つまたは両方の水素は、（C_1－C_{20}）アルキル、または、Ｌ基によって置き換えられてもよく（ここで、Ｌはアミノ酸ラジカル、最大で２０アミノ酸部分を有しているペプチドラジカル、または非ルシフェラーゼの基質である任意の他の低分子を表す）；ただし、Ｌがアミノ酸ラジカルまたはペプチドラジカルを表すときに、W^2の少なくとも１つはＨを表さず；
Ｚがヒドロキシル基または窒素部分を表すときに、前記ヒドロキシル基または窒素部分のＨは、（ＨＯ）$_2$Ｐ（Ｏ）－ＯＣＨ$_2$－、スルホ、または－PO_3H_2により、あるいは、１～約１２の炭素原子の炭素鎖を介してＺ基に結合したセファロスポラニン酸により、置き換えられてもよく；ただし、環Ｂが、チアゾール環を表すときに、前記スルホ基または前記－PO_3H_2基は、（C_1－C_6）アルキレン基を介してヒドロキシル基の酸素に結合しており；
ＺまたはＺ’がヒドロキシル基または窒素部分を表すとき、あるいは、Ｚ’’－Ｒがヒドロキシル基を表すときに、前記ヒドロキシル基または窒素部分の１つのＨは、Ｌ’基－リンカー（ここで、Ｌ’は、前記リンカーを自由にするために、酵素により除去可能な基を表し、リンカーは、１以上の窒素原子、酸素原子、カルボニル基、置換されていてもよい芳香環、または、ペプチド結合により割り込まれてもよい、自己切断可能な炭素鎖を表す）により置き換えられてもよく、リンカーは、リンカーの１つの端末にある酸素原子またはＮＨ基を介して、Ｌ’に結合しており、リンカーのもう１つの端末は、Ｚ基、Ｚ’基、または、Ｚ’’－Ｒ環基と、エーテル、エステル、または、アミド結合を形成しており；
ＺがＯＲを表すときに、一般式Ｉで示される化合物は、一般式Ｉで示される化合物の２量体の間に架橋を形成するための（C_1－C_{12}）アルキルジラジカルを含有しているリンカーを介して、２つの環Ａにおいて結合した２量体であってもよく（ここで、（C_1－C_{12}）アルキルジラジカルは、１～４の酸素原子、窒素原子、または、置換されていてもよいアリール基、ヘテロアリール基、もしくは複素環基により割り込まれていてもよく、一般式Ｉの化合物の２量体に結合している各Ｚ基のＲ基は、前記架橋により置き換えられている）；
A^-はアニオンを表し、第４級窒素が存在するときに存在し；
環Ａおよび環Ｂが、ナフタレンまたはキノリン環系を形成するときに、W^1は水素を表さず；
環Ａの置換基がＯＨを表すときに、－Ｑ－Ｚ’’－Ｒは、－Ｃ（Ｏ）－ＮＨ－NH_2を表さず；
ＹがＮまたはＣＨを表し、ＸがＣＨ＝ＣＨを表し、W^1がＨを表すときに、ＺはK^3に結合したＯＨを表さず；

ＹがＮまたはＣＨを表し、ＸがＣＨ＝ＣＨを表し、ＺがＨを表すときに、W^1はK^3に結合したＯＨではない）
で示される化合物、または、その塩。
【請求項２】
一般式ＩＡ：
【化２】



ＩＡ

（式中、
Ｙは、Ｎ、Ｎ－酸化物、Ｎ－（C_1－C_6）アルキル、または、ＣＨを表し；
ＹがＮを表すときに、ＸはＳを表さず；
ＸはＳ、Ｏ、ＣＨ＝ＣＨ、Ｎ＝ＣＨ、または、ＣＨ＝Ｎを表し；
ＸがＳを表すときに、ＹはＮを表さず；
ＺはＨ、ＯＲ、ＮＨＲ、または、ＮＲＲを表し；
Ｚ’’はＯ、Ｓ、ＮＨ、ＮＨＲ、または、Ｎ＝Ｎを表し；
W^1は、Ｈ、ハロ、ヒドロキシル、（C_1－C_6）アルキル、または、（C_1－C_6）アルコキシを表し；
環Ｂの破線は、任意の２重結合を表し；
各Ｒは独立して、Ｈ、（C_1－C_{20}）アルキル、（C_2－C_{20}）アルケニル、（C_2－C_{20}）アルキニル、（C_3－C_{20}）シクロアルキル、（C_1－C_{12}）アルコキシ、（C_6－C_{30}）アリール、ヘテロアリール、複素環、（C_1－C_{20}）アルキルスルホキシ、（C_6－C_{30}）アリールスルホキシ、ヘテロアリールスルホキシ、（C_1－C_{20}）アルキルスルホニル、（C_6－C_{30}）アリールスルホニル、ヘテロアリールスルホニル、（C_1－C_{20}）アルキルスルフィニル、（C_6－C_{30}）アリールスルフィニル、ヘテロアリールスルフィニル、（C_1－C_{20}）アルコキシカルボニル、アミノ、ＮＨ（C_1－C_6）アルキル、Ｎ（（C_1－C_6）アルキル）$_2$、トリ（C_1－C_{20}）アンモニウム（C_1－C_{20}）アルキル、ヘテロアリール（C_1－C_{20}）アルキル、第４級窒素を有しているヘテロアリール、第４級窒素を有しているヘテロアリールカルボニル、（C_6－C_{30}）アリールチオ、（C_1－C_{20}）アルキルホスフェート、（C_1－C_{20}）アルキルホスホネート、（C_6－C_{30}）アリールホスフェート、（C_6－C_{30}）アリールホスホネート、ホスフェート、サルフェート、もしくはサッカライドを表すか、または、Ｚ’’が酸素を表すときに任意のM^+（ここで、Ｍはアルカリ金属を表す）を表すか；あるいは、
ＺまたはＺ’が、NR^1R^1を表すときに、R^1R^1は、それらが結合しているＮと一緒にヘテロアリール基、または複素環基を形成しており；
任意のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、アミノ基、アリール基、ヘテロアリール基、または複素環基は、（C_1－C_{20}）アルキル、（C_2－C_{20}）アルケニル、（C_2－C_{20}）アルキニル、（C_3－C_{20}）シクロアルキル、（C_1－C_{20}）アルコキシル、（C_1－C_{20}）アルキルカルボニル、（C_1－C_{20}）アルキルカルボキシル、ハロ、ヒドロキシル、－ＣＯＯR^X、－SO_2R^X、－SO_3R^X、ニトロ、アミノ、（C_1－C_{20}）アルキル－Ｓ（Ｏ）－、（C_1－C_{20}）アルキル－SO_2－、ホスフェート、（C_1－C_{20}）アルキルホスフェート、

（Ｃ$_1$－Ｃ$_{20}$）アルキルホスホネート、ＮＨ（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルキル、ＮＨ（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルキニル、Ｎ（（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルキル）$_2$、Ｎ（（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルキニル）$_2$、メルカプト、（Ｃ$_1$－Ｃ$_{20}$）アルキルチオ、（Ｃ$_6$－Ｃ$_{30}$）アリール、（Ｃ$_6$－Ｃ$_{30}$）アリールチオ、トリフルオロメチル、＝Ｏ、ヘテロアリール、および、複素環から選択される１、２、３、４または５の置換基（ここで、各置換基は１－３のＲ基で置換されていてもよい）で置換されていてもよく；

Ｒ^{X}は、Ｈ、（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルキル、または、（Ｃ$_6$－Ｃ$_{30}$）アリールを表し；

Ａ$^-$はアニオンを表し、第４級窒素が存在するときに存在し；

環Ａおよび環Ｂが、ナフタレンまたはキノリン環系を形成するときに、Ｗ^{1}は水素を表さず；

環Ａの置換基がＯＨを表すときに、－Ｑ－Ｚ’’－Ｒは、－Ｃ（Ｏ）－ＮＨ－ＮＨ$_2$を表さず；

ＹがＮまたはＣＨを表し、ＸがＣＨ＝ＣＨを表し、Ｗ^{1}がＨを表すときに、Ｚは環Ａの６位の炭素に結合されたＯＨを表さず；

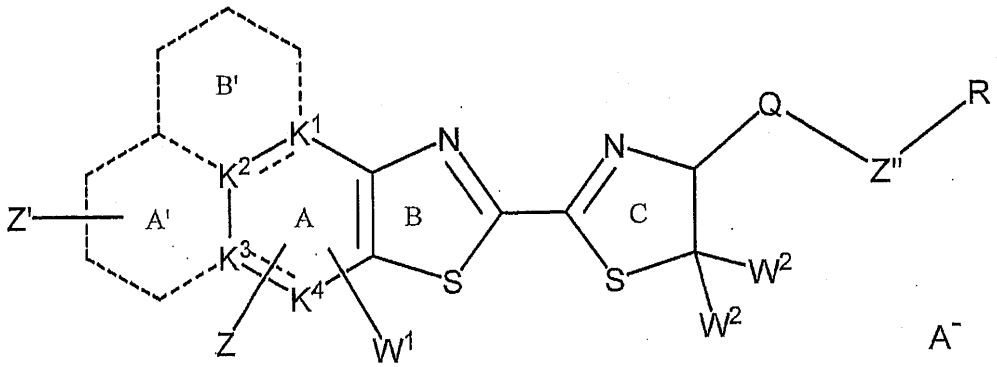
ＹがＮまたはＣＨを表し、ＸがＣＨ＝ＣＨを表し、ＺがＨを表すときに、Ｗ^{1}は環Ａの６位の炭素に結合されたＯＨではない）

で示される、請求項１に記載の化合物、またはその塩。

【請求項３】

一般式ＩＩ：

【化３】



Ⅱ

（式中、

ＺおよびＺ’は独立して、ＯＲ^1、ＮＨＲ^1、または、ＮＲ^{1}Ｒ^{1}を表し；

Ｚ’’は、Ｏ、Ｓ、ＮＨ、ＮＨＲ、または、Ｎ＝Ｎを表し；

Ｑはカルボニル、または、ＣＨ$_2$を表し；

Ｗ^{1}は、Ｈ、ハロ、（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルキル、（Ｃ$_2$－Ｃ$_{20}$）アルケニル、ヒドロキシル、または、（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルコキシを表し；あるいは、

Ｗ^{1}およびＺは、両方とも環Ａのケト基を表し、環Ａにおいて任意の２重結合を表している破線の少なくとも１つが、存在しておらず；

各Ｗ^{2}は独立して、Ｈ、ハロ、（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルキル、（Ｃ$_2$－Ｃ$_4$）アルケニル、ヒドロキシル、または（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルコキシを表し；

各Ｋ^1、Ｋ^2、Ｋ^3、および、Ｋ^{4}は独立して、ＣＨ、Ｎ、Ｎ－酸化物、または、Ｎ－（Ｃ$_1$－Ｃ$_6$）アルキルを表し、Ｋ^{1}とＫ^{2}との間、Ｋ^{3}とＫ^{4}との間の破線は任意の２重結合を表し；

Ａ’およびＢ’は、環Ａと融合した任意の芳香環を表し、融合した３環系を形成するために、Ａ’とＢ’とのうちの１つだけが化合物に存在しており；

Ｂ’が存在しているときにＺ基が存在し、

Ａ’が存在しているときにＺ基が存在していなく；

Ｒは、Ｈ、（Ｃ$_1$－Ｃ$_{20}$）アルキル、（Ｃ$_2$－Ｃ$_{20}$）アルケニル、（Ｃ$_2$－Ｃ$_{20}$）アルキニル、（Ｃ$_3$－Ｃ$_{20}$）シクロアルキル、（Ｃ$_1$－Ｃ$_{12}$）アルコキシ、（Ｃ$_6$

－C_{30}）アリール、ヘテロアリール、複素環、（C_1－C_{20}）アルキルスルホキシ、（C_6－C_{30}）アリールスルホキシ、ヘテロアリールスルホキシ、（C_1－C_{20}）アルコキシカルボニル、アミノ、ＮＨ（C_1－C_6）アルキル、Ｎ（（C_1－C_6）アルキル）$_2$、トリ（C_1－C_{20}）アンモニウム（C_1－C_{20}）アルキル、ヘテロアリール（C_1－C_{20}）アルキル、第４級窒素を有しているヘテロアリール、第４級窒素を有しているヘテロアリールカルボニル、もしくはサッカライドを表すか、または、Ｚ’’が酸素を表すときに任意のM^+（ここでＭはアルカリ金属を表す）を表し；

R^1は、（C_6－C_{30}）アリール、ヘテロアリール、複素環、（C_1－C_{20}）アルキルチオ、（C_1－C_{20}）アルキル－Ｓ（Ｏ）－、（C_1－C_{20}）アルキル－SO_2、－SO_3（C_1－C_{20}）アルキル、サッカライド、（C_1－C_{20}）アルキルホスフェート、（C_1－C_{20}）アルキルホスホネート、（C_6－C_{30}）アリールチオ、（C_6－C_{30}）アリール－Ｓ（Ｏ）－、（C_6－C_{30}）アリール－SO_2、－SO_3（C_6－C_{30}）アリール、（C_6－C_{30}）アリールホスフェート、もしくは（C_6－C_{30}）アリールホスホネートを表すか、または、R^1は、R^2で置換された（C_1－C_{20}）を表し；

R^2は（C_2－C_{20}）アルケニル、（C_2－C_{20}）アルキニル、（C_3－C_{20}）シクロアルキル、（C_1－C_{20}）アルコキシル、（C_1－C_{20}）アルキルカルボニル、（C_1－C_{20}）アルキルカルボキシル、ヒドロキシル、－ＣＯＯR^X、－SO_3R^X、（C_1－C_{20}）アルキルチオ、（C_6－C_{30}）アリールチオ、（C_1－C_{20}）アルキル－Ｓ（Ｏ）－、（C_1－C_{20}）アルキル－SO_2－、ニトロ、アミノ、ＮＨ（C_1－C_6）アルキル、ＮＨ（C_1－C_6）アルキニル、Ｎ（（C_1－C_6）アルキル）$_2$、または、Ｎ（（C_1－C_6）アルキニル）$_2$、メルカプト、サッカライド、または、トリフルオロメチルを表し；あるいは、

ＺまたはＺ’がNR^1R^1を表すときに、R^1R^1は、それらが結合しているＮと一緒にヘテロアリール基または複素環基を形成し；

任意のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、アミノ基、アリール基、ヘテロアリール基、または、複素環基は、（C_1－C_{20}）アルキル、（C_2－C_{20}）アルケニル、（C_2－C_{20}）アルキニル、（C_3－C_{20}）シクロアルキル、（C_1－C_{20}）アルコキシル、（C_1－C_{20}）アルキルカルボニル、（C_1－C_{20}）アルキルカルボキシル、ハロ、ヒドロキシル、－ＣＯＯR^X、－SO_2R^X、－SO_3R^X、（C_1－C_{20}）アルキル－Ｓ（Ｏ）－、（C_1－C_{20}）アルキル－SO_2－、ホスフェート、（C_1－C_{20}）アルキルホスフェート、（C_1－C_{20}）アルキルホスホネート、ニトロ、アミノ、ＮＨ（C_1－C_6）アルキル、ＮＨ（C_1－C_6）アルキニル、Ｎ（（C_1－C_6）アルキル）$_2$、Ｎ（（C_1－C_6）アルキニル）$_2$、メルカプト、（C_1－C_{20}）アルキルチオ、（C_6－C_{30}）アリール、（C_6－C_{30}）アリールチオ、トリフルオロメチル、＝Ｏ、ヘテロアリール、および、複素環から選択される１、２、３、４または５の置換基（ここで、各置換基は、１－３のＲ基で置換されていてもよい）で置換されていてもよく；

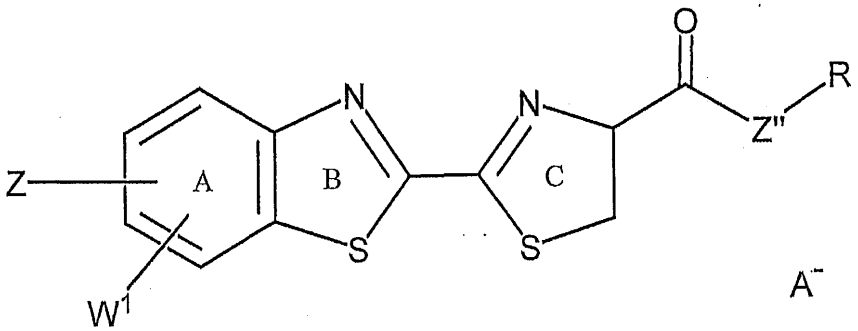
R^Xは、Ｈ、または、（C_1－C_6）アルキルを表し；

ＺまたはＺ’が窒素部分を含有しているときに、前記ＺまたはＺ’の窒素部分のＨは、Ｌ基によって置き換えられてもよく（ここで、Ｌはアミノ酸ラジカル、最大で２０アミノ酸部分を有しているペプチドラジカル、または非ルシフェラーゼの基質である任意の他の低分子を表す）；ただしＬがアミノ酸ラジカル、または、ペプチドラジカルを表すときに、W^1またはW^2の少なくとも１つがＨを表さず；

Ｚがヒドロキシル基または窒素部分を表すときに、ヒドロキシルまたは窒素部分のＨが、（ＨＯ）$_2$Ｐ（Ｏ）－ＯＣＨ$_2$－、スルホ、－PO_3H_2により、あるいは、１－約１２炭素原子の炭素鎖を介して、Ｚ基に結合したセファロスポラニン酸によって置き換えられてもよく；ただし、前記スルホ基または－PO_3H基は、（C_1－C_6）アルキレン基を介してヒドロシキル基の酸素に結合しており；

ＺまたはＺ’がヒドロキシル基または窒素部分を表すとき、あるいは、Ｚ’’－Ｒがヒ

ドロキシル基を表すときに、ヒドロシキルまたは窒素部分の１つのＨがＬ’基－リンカーにより置き換えられてもよく（ここで、Ｌ’基は、前記リンカーを自由にするために、酵素により除去可能な基を表し、
リンカーは、１以上の窒素原子、酸素原子、カルボニル基、置換されていてもよい芳香環、またはペプチド結合により割り込まれてもよい、自己切断可能な炭素鎖を表す）、リンカーは、前記リンカーの１つの端に酸素原子またはＮＨ基を介して、Ｌ’に結合されており、前記リンカーのもう１つの端は、Ｚ基、Ｚ’基、または、Ｚ’’－Ｒ基と、エーテル、エステル、または、アミド結合を形成しており；
ＺはＯＲ^{1}を表すときに、一般式ＩＩで示される化合物は、一般式ＩＩで示される化合物の２量体の間に架橋を形成するための（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{12}$）アルキルジラジカルを含有しているリンカーを介して、２つの環Ａにおいて結合した任意の２量体であってもよく（ここで、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{12}$）アルキルジラジカルは、１－４の酸素原子、窒素原子、または、置換されていてもよいアリール基、ヘテロアリール基、もしくは複素環により割り込まれいてもよく、一般式ＩＩで示される化合物の２量体に結合している各Ｚ基のＲ^{1}基は、前記架橋により置き換えられている）；
サッカライドは、直接Ｋ^{3}と結合しておらず；
Ａ$^{-}$はアニオンを表し、第４級窒素が存在するときに存在する）
で示される、請求項１に記載の化合物、または、その塩。
【請求項４】
一般式ＩＩＡ：
【化４】



ＩＩＡ

（式中、
ＺはＯＲ^{1}、ＮＨＲ^{1}、または、ＮＲ^{1}Ｒ^{1}を表し；
Ｚ’’は、Ｏ、Ｓ、ＮＨ、ＮＨＲ、または、Ｎ＝Ｎを表し；
Ｗ^{1}は、Ｈ、ハロ、ヒドロキシル、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$）アルキル、または（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$）アルコキシを表し；
Ｒは、Ｈ、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキル、（Ｃ$_{2}$－Ｃ$_{20}$）アルケニル、（Ｃ$_{2}$－Ｃ$_{20}$）アルキニル、（Ｃ$_{3}$－Ｃ$_{20}$）シクロアルキル、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{12}$）アルコキシ、（Ｃ$_{6}$－Ｃ$_{30}$）アリール、ヘテロアリール、複素環、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキルスルホキシ、（Ｃ$_{6}$－Ｃ$_{30}$）アリールスルホキシ、ヘテロアリールスルホキシ、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルコキシカルボニル、アミノ、ＮＨ（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$）アルキル、Ｎ（（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$）アルキル）$_{2}$、トリ（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アンモニウム（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキル、ヘテロアリール（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキル、第４級窒素を有しているヘテロアリール、第４級窒素を有しているヘテロアリールカルボニル、もしくはサッカライドを表すか、または、Ｚ’’が酸素を表すときに、任意のＭ$^{+}$（ここで、Ｍはアルカリ金属を表す）を表し；
Ｒ^{1}は、（Ｃ$_{6}$－Ｃ$_{30}$）アリール、ヘテロアリール、複素環、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキルチオ、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキル－Ｓ（Ｏ）－、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキル－ＳＯ$_{2}$、－ＳＯ$_{3}$（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキル、サッカライド、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキルホスフェート、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキルホスホネート、（Ｃ$_{6}$－Ｃ$_{30}$）アリールチオ、（Ｃ$_{6}$－Ｃ$_{30}$）アリール－Ｓ（Ｏ）－、（Ｃ$_{6}$－Ｃ$_{30}$）アリール－ＳＯ$_{2}$、－ＳＯ$_{3}$（Ｃ

$_{6}$－Ｃ$_{30}$）アリール、（Ｃ$_{6}$－Ｃ$_{30}$）アリールホスフェート、もしくは（Ｃ$_{6}$－Ｃ$_{30}$）アリールホスホネートを表すか、または、Ｒ^{1}は、Ｒ^{2}で置換された（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキルを表し；

Ｒ^{2}は、（Ｃ$_{2}$－Ｃ$_{20}$）アルケニル、（Ｃ$_{2}$－Ｃ$_{20}$）アルキニル、（Ｃ$_{3}$－Ｃ$_{20}$）シクロアルキル、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルコキシル、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキルカルボニル、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキルカルボキシル、ヒドロキシル、－ＣＯＯＲ^{X}、－ＳＯ$_{3}$Ｒ^{X}、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキルチオ、（Ｃ$_{6}$－Ｃ$_{30}$）アリールチオ、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキル－Ｓ（Ｏ）－、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキル－ＳＯ$_{2}$－、ニトロ、アミノ、ＮＨ（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$）アルキル、ＮＨ（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$）アルキニル、Ｎ（（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$）アルキル）$_{2}$、またはＮ（（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$）アルキニル）$_{2}$、メルカプト、サッカライド、または、トリフルオロメチルを表し；または、

ＺまたはＺ’がＮＲ^{1}Ｒ^{1}を表すときに、Ｒ^{1}Ｒ^{1}は、それらが結合しているＮと一緒にヘテロアリール基または複素環基を形成しており；

任意のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、アミノ基、アリール基、ヘテロアリール基、または、複素環基は、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキル、（Ｃ$_{2}$－Ｃ$_{20}$）アルケニル、（Ｃ$_{2}$－Ｃ$_{20}$）アルキニル、（Ｃ$_{3}$－Ｃ$_{20}$）シクロアルキル、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルコキシル、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキルカルボニル、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキルカルボキシル、ハロ、ヒドロキシル、－ＣＯＯＲ^{X}、－ＳＯ$_{2}$Ｒ^{X}、－ＳＯ$_{3}$Ｒ^{X}、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキル－Ｓ（Ｏ）－、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキル－ＳＯ$_{2}$－、ホスフェート、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキルホスフェート、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキルホスホネート、ニトロ、アミノ、ＮＨ（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$）アルキル、ＮＨ（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$）アルキニル、Ｎ（（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$）アルキル）$_{2}$、Ｎ（（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$）アルキニル）$_{2}$、メルカプト、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキルチオ、（Ｃ$_{6}$－Ｃ$_{30}$）アリール、（Ｃ$_{6}$－Ｃ$_{30}$）アリールチオ、トリフルオロメチル、＝Ｏ、ヘテロアリール、および複素環から選択される１、２、３、４、または、５の置換基（ここで、各置換基は、１－３のＲ基で置換されていてもよい）で置換されてもよく；

Ｒ^{X}は、Ｈまたは（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$）アルキルを表し；

ＺがＯＲ^{1}を表すときに、一般式ＩＩＡで示される化合物は、一般式ＩＩＡで示される化合物の２量体の間に架橋を形成するための（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{12}$）アルキルジラジカルを含有しているリンカーを介して、２つの環Ａにおいて結合した２量体であってもよく（ここで、（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{12}$）アルキルジラジカルは、１－４の酸素原子、窒素原子、または、置換されていてもよいアリール基、ヘテロアリール基、もしくは複素環基により割り込まれていてもよく、一般式ＩＩで示される化合物の２量体に結合している各Ｚ基のＲ^{1}基は、前記架橋により置き換えられている）；

サッカライドは直接Ｋ^{3}と結合しておらず；

Ａ$^{-}$はアニオンを表し、第４級窒素が存在するときに存在する）

で示される、請求項１に記載の化合物、または、その塩。

【請求項５】

前記環Ｂが、５員環または６員環であり；

Ｙが、ＮまたはＣＨを表し；

Ｘが、ＣＨ＝ＣＨ、Ｎ＝ＣＨ、または、ＣＨ＝Ｎを表し；

環Ｂの前記破線が２重結合として存在している、請求項１に記載の化合物。

【請求項６】

Ｙが、ＮまたはＣＨを表し；

ＸがＣＨ＝ＣＨを表す、請求項２に記載の化合物。

【請求項７】

Ｋ^{1}－Ｋ^{4}のそれぞれが、ＣＨを表し；

環Ａ’および環Ｂ’が存在していない、請求項１または３に記載の化合物。

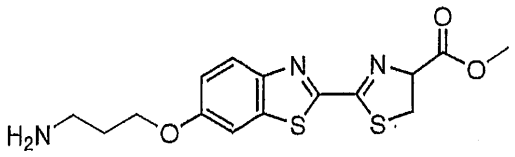
【請求項８】

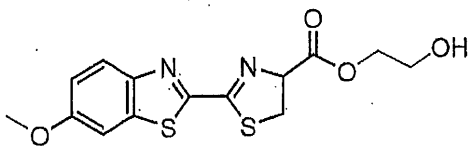
Ｑが、カルボニルを表し；

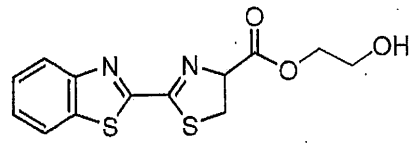
Ｚ’’－Ｒが、－ＯＨまたはＯ（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキルを表し；
各Ｗ^{2}がＨ、メチルまたはＦを表す、請求項１または３に記載の化合物。
【請求項９】
ＺがＯＲを表し、Ｒが：
置換されていてもよい（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{20}$）アルキル基もしくは（Ｃ$_{6}$－Ｃ$_{30}$）アリール基、ヘテロアリール基、もしくは複素環基；
１－５のハロ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、ホスフェート基、アルキルカルボキシル基、もしくは、アルコキシカルボニル基で置換されていてもよいフェニルもしくはベンジル；または、
ホスフェートもしくはサルフェートを表す、請求項１に記載の化合物。
【請求項１０】
Ｗ^{1}がＦ、Ｃｌ、Ｂｒ、または、Ｉを表す、請求項１または３に記載の化合物。
【請求項１１】
Ｋ^{1}、Ｋ^{2}、Ｋ^{3}、Ｋ^{4}の１つがＮ－酸化物を表し、Ｚが、Ｈ、ＯＨ、または、アミノを表す、請求項１または３に記載の化合物。
【請求項１２】
Ｚ’’－Ｒが、－ＯＨもしくは－Ｏ－（Ｃ$_{1}$－Ｃ$_{6}$）アルキルを表し、または、ＺがＮＲ^{1}Ｒ^{1}を表すときに、Ｒ^{1}Ｒ^{1}が、それらが結合しているＮと一緒にヘテロアリール基または複素環基を形成している、請求項２または４に記載の化合物。
【請求項１３】
試料の中にある、非ルシフェラーゼ酵素に媒介される反応のための分子の存在または量を、検出もしくは決定するための方法であって：
ａ）試料、非ルシフェラーゼ酵素に媒介される反応のための第１反応混合物、および、非ルシフェラーゼの基質であるルシフェリン誘導体を接触させて、第１混合物を生じさせる工程；
ｂ）前記第１混合物の少なくとも一部、および甲虫ルシフェラーゼに媒介される反応のための第２反応混合物を接触させて、第２混合物を生じさせる工程；ならびに、
ｃ）前記第２混合物中の発光を検出または決定することによって、試料の中にある、非ルシフェラーゼ酵素に媒介される反応のための分子の存在または量を、検出もしくは決定する工程；
を含んでおり、
前記分子が前記試料の中に存在している場合に、第１混合物は甲虫ルシフェラーゼの基質である発光性生成物を含んでおり、
前記誘導体は、アミノ基にペプチド結合を介して、プロテアーゼ基質を含むように修飾され、さらに、保護されたカルボキシル基を有していてもよいアミノルシフェリン、Ｄ－ルシフェリン－Ｏ－サルフェート、Ｄ－ルシフェリン－Ｏ－ホスフェート、Ｄ－ルシフェリル－Ｌ－フェニルアラニン、Ｄ－ルシフェリル－Ｌ－Ｎ$^{\alpha}$－アルギニン、またはシトクロムＰ４５０酵素の基質ではない、方法。
【請求項１４】
前記非ルシフェラーゼ酵素が、モノアミンオキシダーゼ、フラビンモノオキシゲナーゼ、グリコシダーゼ、グルタチオンＳトランスフェラーゼ、プロテアーゼ、ペプチダーゼ、ホスファターゼ、サルファターゼ、デアセチラーゼ、デホルミラーゼ、デアルキラーゼ、エステラーゼ、デヒドロゲナーゼ、ペプチダーゼ、デメチラーゼ、または、Ｐ４５０酵素である、請求項１３に記載の方法。
【請求項１５】
試料の中にある、分子の存在または量を検出するための方法であって：
ａ）試料、非酵素に媒介される反応のための第１反応混合物、およびルシフェリン誘導体を接触させて、分子の存在下において、甲虫ルシフェラーゼの基質である発光性生成物を含んでいる第１混合物を生じさせる工程；
ｂ）前記第１混合物の少なくとも一部、甲虫ルシフェラーゼに媒介される反応のための

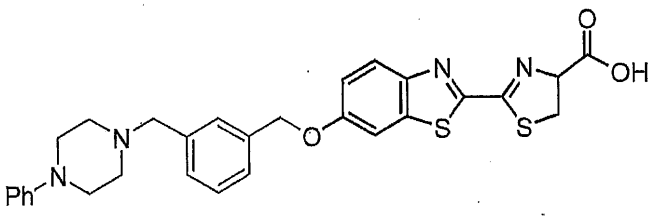
第２反応混合物を接触させて、第２混合物を生じさせる工程；ならびに、
ｃ）前記第２混合物中の発光を検出または決定することによって、前記分子の存在または量を、検出もしくは決定する工程；
を含んでいる方法。
【請求項１６】
試料の中にある、シトクロムＰ４５０酵素に媒介される反応のための分子の存在または量を、検出もしくは決定するための方法であって：
ａ）試料、シトクロムＰ４５０酵素に媒介される反応のための第１反応混合物、シトクロムＰ４５０酵素の基質であるルシフェリン誘導体を接触させて、第１混合物を生じさせる工程；
を含んでおり、
前記分子が試料の中に存在する場合に、前記第１混合物が、甲虫ルシフェラーゼの基質である発光性生成物を含んでおり、
前記誘導体が、一般式Ｉまたは一般式ＩＩで示される化合物である、方法。
【請求項１７】
下記に示された構造：

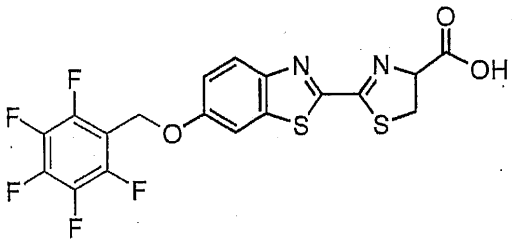
【化５】

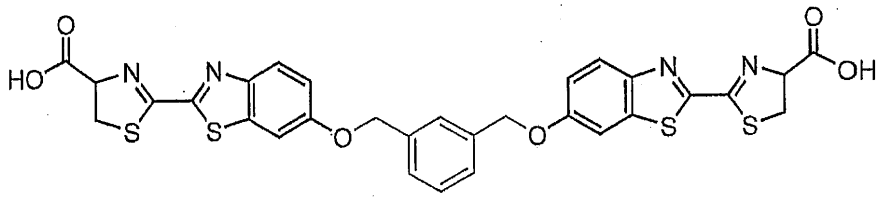


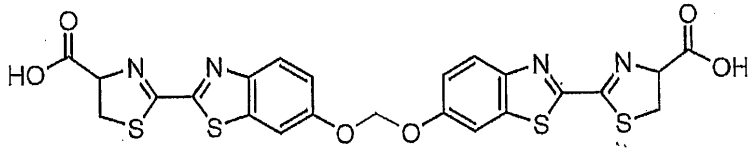


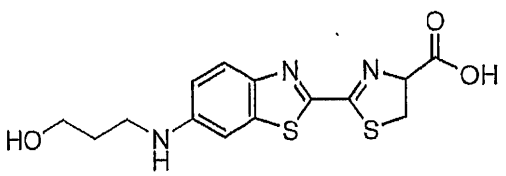




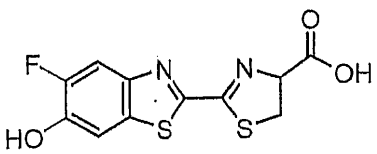








または



のうちの何れか１つを備えている、請求項１に記載の化合物。