

【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7月26日(2021.7.26)

【公表番号】特表2020-520902(P2020-520902A)

【公表日】令和2年7月16日(2020.7.16)

【年通号数】公開・登録公報2020-028

【出願番号】特願2019-562312(P2019-562312)

【国際特許分類】

C 07 K 5/02 (2006.01)

A 61 K 51/04 (2006.01)

A 61 K 47/64 (2017.01)

A 61 P 35/00 (2006.01)

A 61 P 35/04 (2006.01)

【F I】

C 07 K 5/02

A 61 K 51/04 1 0 0

A 61 K 51/04 2 0 0

A 61 K 47/64

A 61 P 35/00

A 61 P 35/04

【手続補正書】

【提出日】令和3年5月21日(2021.5.21)

【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

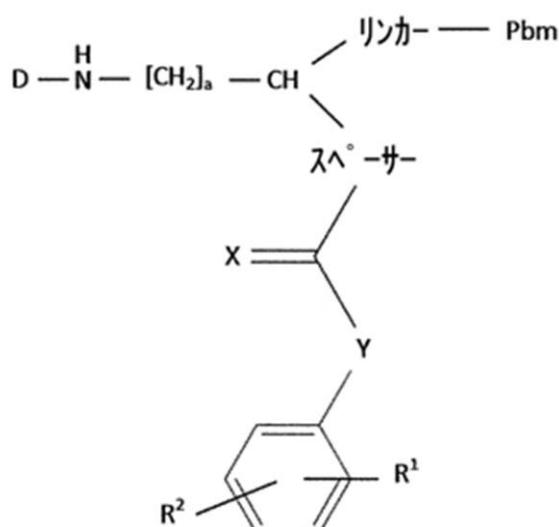
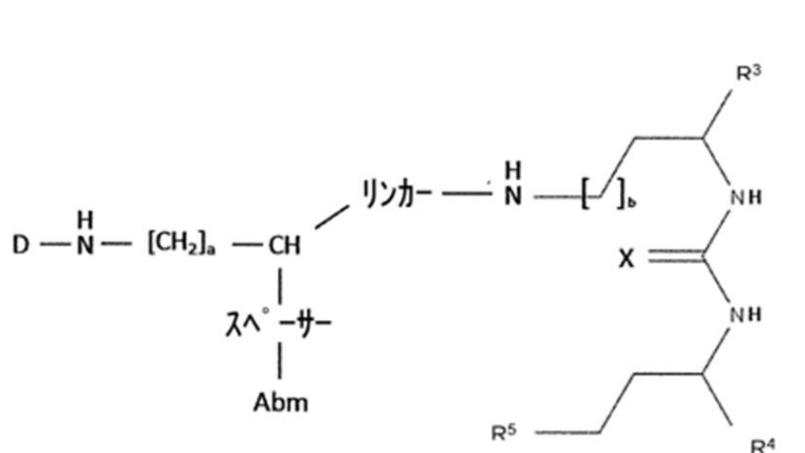
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

一般式(1)(i)又は(1)(ii)：

【化1】



(式中、

A b mは、アルブミン結合体であり、

P b mは、PSMA結合体であり、

Dは、キレーターであり、好ましくは1,4,7,10-テトラアザシクロドデカン-1,4,7,10-四酢酸(DOTA)、N,N'-ビス[2-ヒドロキシ-5-(カルボキシエチル)-ベンジル]エチレンジアミン-N,N'-二酢酸(HBED-CC)、1,4,7-トリアザシクロノナン-1,4,7-三酢酸(NOTA)、2-(4,7-ビス(カルボキシメチル)-1,4,7-トリアゾナン-1-イル)ペンタン二酸(NODAGA)、2-(4,7,10-トリス(カルボキシメチル)-1,4,7,10-テトラアザシクロドデカン-1-イル)-ペンタン二酸(DOTAGA)、1,4,7-トリアザシクロノナン-1-[メチル(2-カルボキシエチル)-ホスフィン酸]-4,7-ビス[メチル(2-ヒドロキシメチル)ホスフィン酸](NOPO)、3,6,9,15-テトラアザビシクロ[9,3,1]ペンタデカ-1(15),11,13-トリエン-3,6,9-三酢酸(PECTA)、N'-{5-[アセチル(ヒドロキシ)アミノ]ペンチル}-N-[5-{4-[5-アミノペンチル](ヒドロキシ)アミノ]-4-オキソブタノイル}アミノ)ペンチル]-N-ヒドロキシスクシンアミド(DFO)、及びジエチレントリアミン五酢酸(DTPA)、又はそれらの誘導体から選択され、

Xは、それぞれ独立して、O、N、S、又はPから選択され、

R¹ 及び R² は、それぞれ独立して、H、F、C₁、Br、I、分岐状、非分岐状、又は環状のC₁-C_{1,2}ヒドロカルビル、C₂-C_{1,2}アルケニル、C₂-C_{1,2}アルキニル、OR⁶、OCOR⁶、CHO、COR⁶、CH₂OR⁶、NR⁶R⁷、CONR⁶R⁷、COOR⁶、CH₂NR⁶R⁷、SR⁶、=O、=S、又は=NHから選択される、又はR¹とR²が結合して、分岐状、非分岐状、又は環状のC₁-C_{1,0}ヒドロカルビル基を含む環状構造を形成し、前記ヒドロカルビル基は、最大2個のヘテロ原子が介在していてもよく、F、C₁、Br、I、OR⁶、OCOR⁶、COOR⁶、CHO、COR⁶、CH₂OR⁶、NR⁶R⁷、CH₂NR⁶R⁷、及びSR⁷、=O、=S、及び=NHから独立して選択される最大3個の基で置換されていてもよく、

Yは、単結合、又は線状、分岐状、又は環状の任意に置換された、最大2個のヘテロ原子が介在していてもよいC₁-C_{1,2}アルキル、OR⁶、OCOR⁶、CHO、COR⁶、CH₂OR⁶、NR⁶R⁷、COOR⁶、CH₂NR⁶R⁷、SR⁶、=O、=S、又は=NHから選択され、非隣接CH₂基の1以上は、独立して、-O-、-CO-、-C O-O-、-O-CO-、-NR⁶-、-NR⁶-CO-、-CO-NR⁶-、-NR⁶-COO-、-O-CO-NR⁶-、-NR⁶-CO-NR⁶-、-CH=CH-、-C C-、-O-CO-O-、SR⁶-、SO₃R⁶-で置き換えられていてもよく、

R⁶ 及び R⁷ は、それぞれ独立して、H又は分岐状、非分岐状、又は環状のC₁-C_{1,2}ヒドロカルビルから選択され、

R³、R⁴、及びR⁵ は、それぞれ独立して、-COH、-CO₂H、-SO₂H、-SO₃H、-SO₄H、-PO₂H、-PO₃H、-PO₄H₂、-C(O)-(C₁-C_{1,0})アルキル、-C(O)-O(C₁-C_{1,0})アルキル、-C(O)-NHR⁸、又は-C(O)-NR⁸R⁹から選択され、R⁸及びR⁹は、それぞれ独立して、H、結合、(C₁-C_{1,0})アルキレン、F、C₁、Br、I、C(O)、C(S)、-C(S)-NH-ベンジル-、-C(O)-NH-ベンジル、-C(O)-(C₁-C_{1,0})アルキレン、-(CH₂)_p-NH-C(O)-(CH₂)_q、-(CH_rCH₂)_t-NH-C(O)-(CH₂)_p、-(CH₂)_p-CO-COH、-(CH₂)_p-CO-CO₂H、-(CH₂)_p-C(O)NH-C[(CH₂)_q-COH]₃、-C[(CH₂)_p-COH]₃、-(CH₂)_p-C(O)NH-C[(CH₂)_q-CO₂H]₃、-C[(CH₂)_p-CO₂H]₃、又は-(CH₂)_p-(C₅-C_{1,4})ヘテロアリールから選択され、

スペーサーは、少なくとも1つのC-N結合を含み、

リンカーは、本明細書で定義される一般式(6)で特徴付けられ、

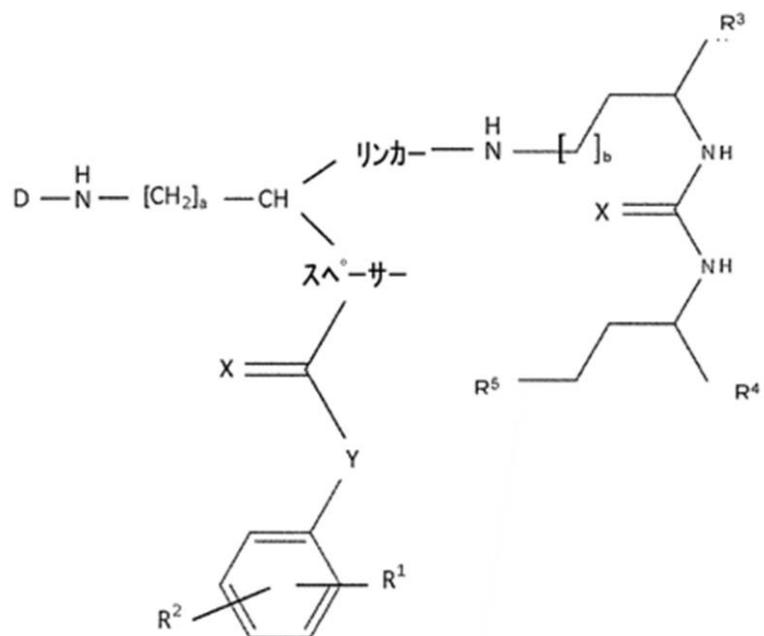
a、b、p、q、r、tは、それぞれ独立して、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、又は10から選択される整数である。)

で表されることを特徴とする化合物、又はその薬学的に許容される塩、エステル、溶媒和物、若しくは放射標識錯体。

【請求項2】

一般式(1a)：

【化2】



(式中、

Dは、キレーターであり、好ましくは1, 4, 7, 10 - テトラアザシクロドデカン - 1, 4, 7, 10 - 四酢酸(DOTA)、N, N" - ビス[2 - ヒドロキシ - 5 - (カルボキシエチル)ベンジル]エチレンジアミン - N, N" - 二酢酸(HBED-CC)、1, 4, 7 - トリアザシクロノナン - 1, 4, 7 - 三酢酸(NOTA)、2 - (4, 7 - ピス(カルボキシメチル) - 1, 4, 7 - トリアゾナン - 1 - イル)ペンタン二酸(NODAGA)、2 - (4, 7, 10 - トリス(カルボキシメチル) - 1, 4, 7, 10 - テトラアザシクロドデカン - 1 - イル)ペンタン二酸(DOTAGA)、1, 4, 7 - トリアザシクロノナンホスフィン酸(TRAP)、1, 4, 7 - トリアザシクロノナン - 1 - [メチル(2 - カルボキシエチル) - ホスフィン酸] - 4, 7 - ピス[メチル(2 - ヒドロキシメチル)ホスフィン酸](NOPO)、3, 6, 9, 15 - テトラアザビシクロ[9, 3, 1.]ペントデカ - 1(15), 11, 13 - トリエン - 3, 6, 9 - 三酢酸(PTCA)、N' - {5 - [アセチル(ヒドロキシ)アミノ]ペンチル} - N - [5 - {4 - [(5 - アミノペンチル)(ヒドロキシ)アミノ] - 4 - オキソブタノイル}アミノ]ペンチル] - N - ヒドロキシスクシンアミド(DFO)、及びジエチレントリアミン五酢酸(DTPA)、又はそれらの誘導体から選択され、

Xは、それぞれ独立して、O、N、S、又はPから選択され、

R¹及びR²は、それぞれ独立して、H、F、C1、Br、I、分岐状、非分岐状、又は環状の任意に置換されたC₁ - C_{1,2}ヒドロカルビル、C₂ - C_{1,2}アルケニル、C₂ - C_{1,2}アルキニル、OR⁶、OCOR⁶、CHO、COR⁶、CH₂OR⁶、NR⁶R⁷、CONR⁶R⁷、COOR⁶、CH₂NR⁶R⁷、SR⁶、=O、=S、又は=NHから選択される、又はR¹とR²が結合して、分岐状、非分岐状、又は環状のC₁ - C_{1,0}ヒドロカルビル基を含む環状構造を形成し、前記ヒドロカルビル基は、最大2個のヘテロ原子が介在していてもよく、F、C1、Br、I、OR⁶、OCOR⁶、COOR⁶、CHO、COR⁶、CH₂OR⁶、NR⁶R⁷、CH₂NR⁶R⁷、及びSR⁷、=O、=S、及び=NHから独立して選択される最大3個の基で置換されていてもよく、

Yは、単結合、又は線状、分岐状、又は環状の任意に置換された、最大2個のヘテロ原子が介在していてもよいC₁ - C_{1,2}アルキル、OR⁶、OCOR⁶、CHO、COR⁶、CH₂OR⁶、NR⁶R⁷、COOR⁶、CH₂NR⁶R⁷、SR⁶、=O、=S、又は=NHから選択され、非隣接CH₂基の1以上は、独立して、-O-、-CO-、-C

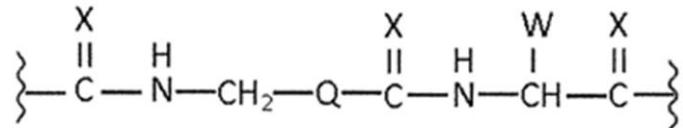
O - O - 、 - O - CO - 、 - NR⁶ - 、 - NR⁶ - CO - 、 - CO - NR⁶ - 、 - NR⁶ - COO - 、 - O - CO - NR⁶ - 、 - NR⁶ - CO - NR⁶ - 、 - CH = CH - 、 - C C - 、 - O - CO - O - 、 SR⁶ - 、 SO₃R⁶ - で置き換えられていてもよく、 R⁶ 及び R⁷ は、それぞれ独立して、 H 又は分岐状、非分岐状、又は環状の C₁ - C₁₂ ヒドロカルビルから選択され、

R³、R⁴、及びR⁵は、それぞれ独立して、 - COH、 - CO₂H、 - SO₂H、 - SO₃H、 - SO₄H、 - PO₂H、 - PO₃H、 - PO₄H₂、 - C(O) - (C₁ - C₁₀) アルキル、 - C(O) - O(C₁ - C₁₀) アルキル、 - C(O) - NH R⁸、又は - C(O) - NR⁸ R⁹ から選択され、 R⁸ 及び R⁹ は、それぞれ独立して、 H、結合、 (C₁ - C₁₀) アルキレン、 F、 Cl、 Br、 I、 C(O)、 C(S)、 - C(S) - NH - ベンジル - 、 - C(O) - NH - ベンジル、 - C(O) - (C₁ - C₁₀) アルキレン、 - (CH₂)_p - NH、 - (CH₂)_p - (C₁ - C₁₀) アルキレン、 - (CH₂)_p - NH - C(O) - (CH₂)_q、 - (CH_rCH₂)_t - NH - C(O) - (CH₂)_p、 - (CH₂)_p - CO - COH、 - (CH₂)_p - CO - CO₂H、 - (CH₂)_p - C(O)NH - C[(CH₂)_q - COH]₃、 - C[(CH₂)_p - COH]₃、 - (CH₂)_p - C(O)NH - C[(CH₂)_q - CO₂H]₃、 - C[(CH₂)_p - CO₂H]₃、又は - (CH₂)_p - (C₅ - C₁₄) ヘテロアリールから選択され、

スペーサーは、少なくとも 1 つの C - N 結合を含み、

リンカーは、一般式(6)：

【化 3】



(6)

(式中、

X は、それぞれ独立して、 O、N、S、又は P から選択され、

Q は、置換又は非置換のアルキル、アルキルアリール、及びシクロアルキルから選択され、好ましくは置換又は非置換の C₅ - C₁₄ アリール、 C₅ - C₁₄ アルキルアリール、又は C₅ - C₁₄ シクロアルキルから選択され、

W は、 - (CH₂)_c - アリール又は - (CH₂)_c - ヘテロアリールから選択され、c は、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、又は 1 から選択される整数である。) で特徴付けられ、

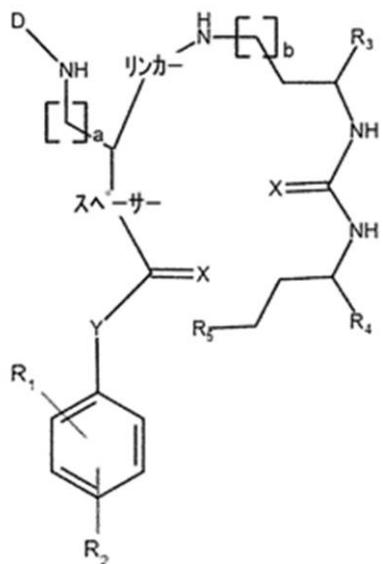
a、b、p、q、r、t は、それぞれ独立して、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、又は 10 から選択される整数である。)

で特徴付けられる請求項 1 に記載の化合物、又はその薬学的に許容される塩、エステル、溶媒和物、若しくは放射標識錯体。

【請求項 3】

一般式(11)：

【化4】



(11)

(式中、

Dは、キレーターであり、好ましくは1,4,7,10-テトラアザシクロドデカン-1,4,7,10-四酢酸(DOTA)、N,N'-ビス[2-ヒドロキシ-5-(カルボキシエチル)ベンジル]エチレンジアミン-N,N'-二酢酸(HBED-CC)、1,4,7-トリアザシクロノナン-1,4,7-三酢酸(NOTA)、2-(4,7-ビス(カルボキシメチル))-1,4,7-トリアゾナン-1-イル)ペンタン二酸(NODAGA)、2-(4,7,10-トリス(カルボキシメチル))-1,4,7,10-テトラアザシクロドデカン-1-イル)-ペンタン二酸(DOTAGA)、1,4,7-トリアザシクロノナン-1-[メチル(2-カルボキシエチル)ホスフィン酸](TRAP)、1,4,7-トリアザシクロノナン-1-[メチル(2-ヒドロキシメチル)ホスフィン酸](NOPO)、3,6,9,15-テトラアザビシクロ[9,3,1.1]ペンタデカ-1(15),11,13-トリエン-3,6,9-三酢酸(PTCA)、N'-{5-[アセチル(ヒドロキシ)アミノ]ペンチル}-N-[5-{4-[5-アミノペンチル](ヒドロキシ)アミノ]-4-オキソブタノイル}アミノ)ペンチル]-N-ヒドロキシスクシンアミド(DFO)、及びジエチレントリアミン五酢酸(DTPA)、又はそれらの誘導体から選択され、

Xは、それぞれ独立して、O、N、S、又はPから選択され、

R¹及びR²は、それぞれ独立して、H、F、Cl、Br、I、分岐状、非分岐状、又は環状の任意に置換されたC₁-C_{1,2}ヒドロカルビル、C₂-C_{1,2}アルケニル、C₂-C_{1,2}アルキニル、OR⁶、OCOR⁶、CHO、COR⁶、CH₂OR⁶、NR⁶R⁷、CONR⁶R⁷、COOR⁶、CH₂NR⁶R⁷、SR⁶、=O、=S、又は=NHから選択される、又はR¹とR²が結合して、分岐状、非分岐状、又は環状のC₁-C_{1,0}ヒドロカルビル基を含む環状構造を形成し、前記ヒドロカルビル基は、最大2個のヘテロ原子が介在していてもよく、F、Cl、Br、I、OR⁶、OCOR⁶、COOR⁶、CHO、COR⁶、CH₂OR⁶、NR⁶R⁷、CH₂NR⁶R⁷、及びSR⁷、=O、=S、及び=NHから独立して選択される最大3個の基で置換されていてもよく、

Yは、単結合、又は線状、分岐状、又は環状の任意に置換された、最大2個のヘテロ原子が介在していてもよいC₁-C_{1,2}アルキル、OR⁶、OCOR⁶、CHO、COR⁶、CH₂OR⁶、NR⁶R⁷、COOR⁶、CH₂NR⁶R⁷、SR⁶、=O、=S、又は=NHから選択され、非隣接CH₂基の1以上は、独立して、-O-、-CO-、-CO-O-、-O-CO-、-NR⁶-CO-、-NR⁶-CO-O-、-CO-NR⁶-、-NR⁶

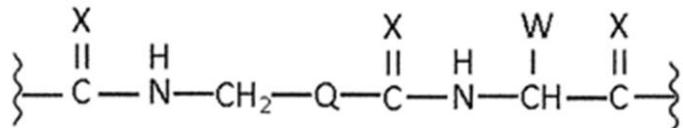
- COO-、 - O-CO-NR⁶-、 - NR⁶-CO-NR⁶-、 - CH=CH-、 - CR-、 - O-CO-O-、 SR⁶-、 SO₃R⁶-で置き換えられていてもよく、 R⁶ 及び R⁷ は、それぞれ独立して、 H 又は分岐状、非分岐状、又は環状の C₁-C₁₂ ヒドロカルビルから選択され、

R³、R⁴、及び R⁵ は、それぞれ独立して、 - COH、 - CO₂H、 - SO₂H、 - SO₃H、 - SO₄H、 - PO₂H、 - PO₃H、 - PO₄H₂、 - C(O)- (C₁-C₁₀) アルキル、 - C(O)-O(C₁-C₁₀) アルキル、 - C(O)-NHR⁸、又は - C(O)-NR⁸R⁹ から選択され、 R⁸ 及び R⁹ は、それぞれ独立して、 H、結合、 (C₁-C₁₀) アルキレン、 F、 Cl、 Br、 I、 C(O)、 C(S)、 - C(S)-NH-ベンジル-、 - C(O)-NH-ベンジル、 - C(O)-(C₁-C₁₀) アルキレン、 - (CH₂)_p-NH、 - (CH₂)_p-(C₁-C₁₀) アルキレン、 - (CH₂)_p-NH-C(O)-(CH₂)_q、 - (CH_rCH₂)_t-NH-C(O)-(CH₂)_p、 - (CH₂)_p-CO-COH、 - (CH₂)_p-CO-CO₂H、 - (CH₂)_p-C(O)NH-C[(CH₂)_q-COH]₃、 - C[(CH₂)_q-CO₂H]₃、 - C[(CH₂)_p-CO₂H]₃、又は - (CH₂)_p-(C₅-C₁₄) ヘテロアリールから選択され、

スペーサーは、少なくとも 1 つの C-N 結合を含み、

リンカーは、一般式(6)：

【化 5】



(6)

(式中、

X は、それぞれ独立して、 O、 N、 S、又は P から選択され、

Q は、置換又は非置換のアルキル、アルキルアリール、及びシクロアルキルから選択され、好ましくは置換又は非置換の C₅-C₁₄ アリール、 C₅-C₁₄ アルキルアリール、又は C₅-C₁₄ シクロアルキルから選択され、

W は、 - (CH₂)_c-アリール又は - (CH₂)_c-ヘテロアリールから選択され、 c は、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、又は 1 から選択される整数である。) で特徴付けられ、

a、b、p、q、r、t は、それぞれ独立して、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、又は 10 から選択される整数である。)

で特徴付けられる請求項 1 から 2 のいずれかに記載の化合物、又はその薬学的に許容される塩、エステル、溶媒和物、若しくは放射標識錯体。

【請求項 4】

前記 D が、DOTA、DOTA、HBED-CC、NOTA、NODAGA、DOTA-GA、TRAP、NOPO、PCTA、DFO、DTPA、又はそれらの誘導体から選択され、最も好ましくは、DOTA、NODAGA、DO3AP、DO3AP^{PtA}、又は DO3AP^A^Bⁿ から選択される請求項 1 から 3 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 5】

各 X が、O である請求項 1 から 4 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 6】

Y が、線状又は分岐状の任意に置換された C₁-C₁₂ ヒドロカルビル、より好ましく

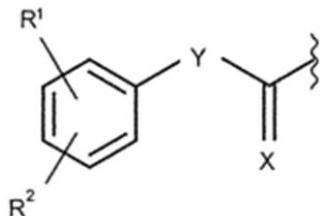
は線状又は分岐状の任意に置換された $C_1 - C_{10}$ ヒドロカルビル、更により好ましくは線状又は分岐状の任意に置換された $C_1 - C_6$ ヒドロカルビル、更により好ましくは線状又は分岐状の任意に置換された $C_1 - C_3$ ヒドロカルビルであり、Yが、好ましくは線状の $C_1 - C_3$ ヒドロカルビルである請求項 1 から 5 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 7】

R¹ 及び R² は、それぞれ独立して、H、ハロゲン、好ましくはヨウ素又は臭素、及び C₁ - 6 アルキル、好ましくは C₁ - 3 アルキル、更により好ましくはメチルから選択され、

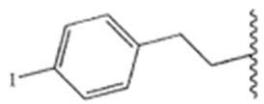
一般式 (1) において、以下の基 :

【化 6】

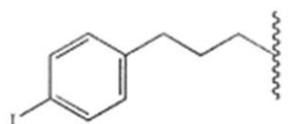


が、好ましくは構造式 (2a)、(2b)、又は (2c) :

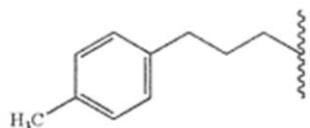
【化 7】



(2a)



(2b)



(2c)

のいずれかで特徴付けられる請求項 1 から 6 のいずれかに記載の化合物。

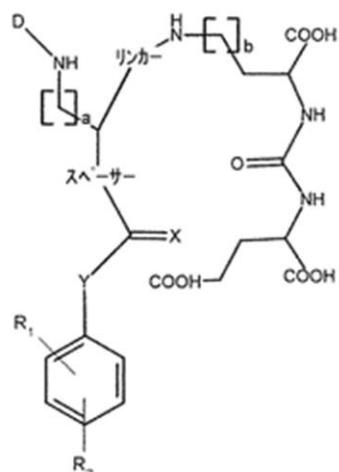
【請求項 8】

R³、R⁴、及び R⁵ が、それぞれ独立して、-COH、-CO₂H、-SO₂H、-SO₃H、-SO₄H、-PO₂H、-PO₃H、-PO₄H₂ から選択され、R³、R⁴、及び R⁵ が、それぞれ好ましくは -CO₂H から選択される請求項 1 から 7 のいずれかに記載の化合物。

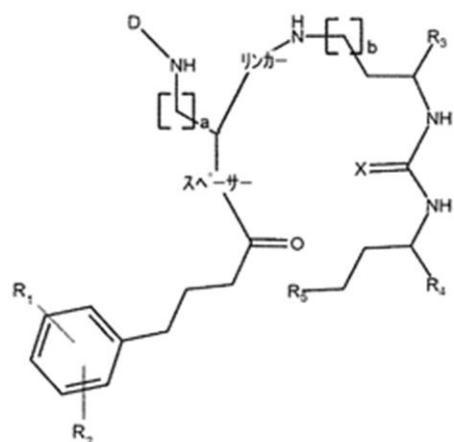
【請求項 9】

一般式 (11.1) ~ (11.3) :

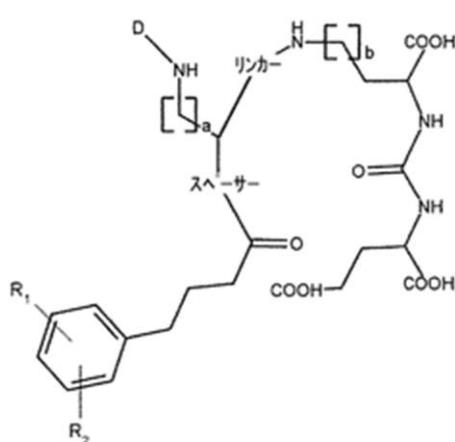
【化 8】



(11.1)



(11.2)



(11.3)

のいずれかで特徴付けられる請求項 3 から 8 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 10】

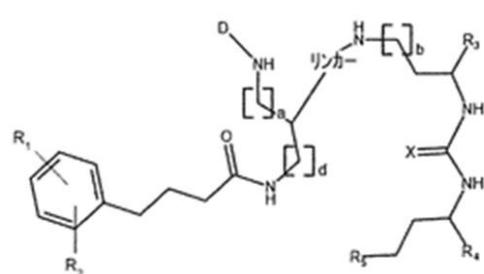
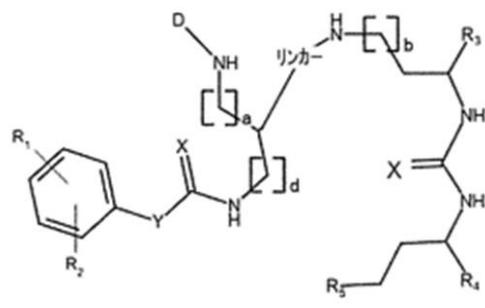
前記スペーザーが、線状又は分岐状の任意に置換された C₁ - C₂₀ ヒドロカルビル、より好ましくは C₁ - C₁₂ ヒドロカルビル、更により好ましくは C₂ - C₆ ヒドロカルビル、更により好ましくは C₂ - C₄ ヒドロカルビルを含み、前記ヒドロカルビルが、好ましくは N から選択される少なくとも 1 個、任意に最大 4 個のヘテロ原子を含み、

前記スペーザーが、好ましくは - [C H R^{1 0}]_u - N R^{1 1} - (式中、R^{1 0} 及び R^{1 1} は、それぞれ独立して、H 及び分岐状、非分岐状、又は環状 C₁ - C₁₂ ヒドロカルビルから選択され、u は、1、2、3、4、5、6、7、8、9、又は 10 から選択される整数である。) を含む請求項 1 から 9 のいずれかに記載の化合物。

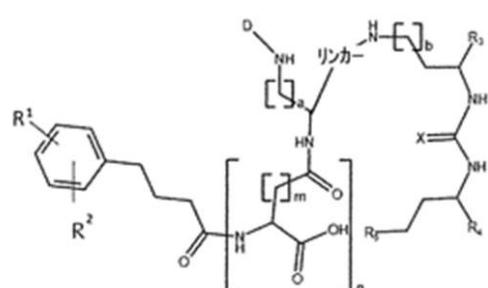
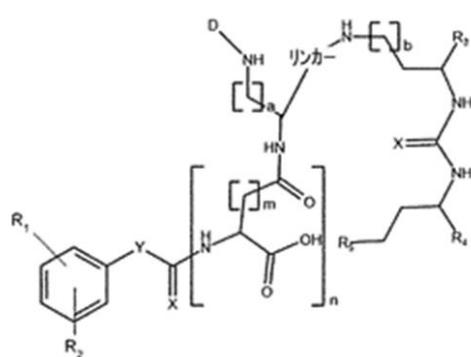
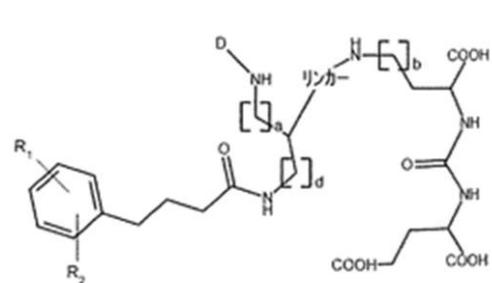
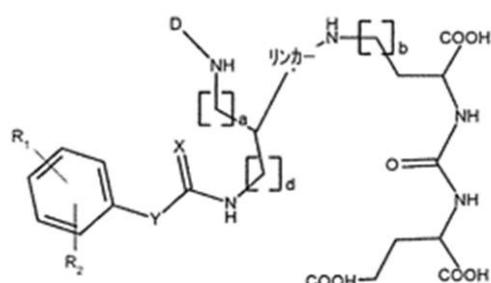
【請求項 11】

一般式 (12.1) ~ (12.4) 又は (13.1) ~ (13.4) :

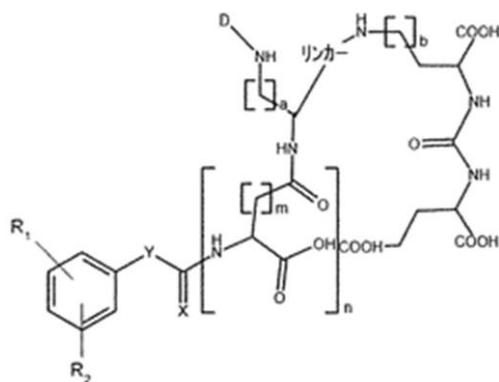
【化9】



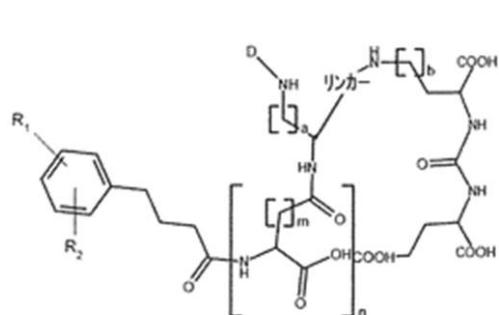
【化10】



【化 1 1】



(13.3)



(13,4)

(式中、D、スペーサー、リンクバー、X、R¹～R⁵、a、b、m、nは、請求項3で定義した通りであり、dは、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、又は10から選択される整数であり、より好ましくは、

Dは、キレーターであり、好ましくは1, 4, 7, 10-テトラアザシクロドデカン-1, 4, 7, 10-四酢酸(D O T A)、N, N”-ビス[2-ヒドロキシ-5-(カルボキシエチル)-ベンジル]エチレンジアミン-N, N”-二酢酸(H B E D - C C)、1, 4, 7-トリアザシクロノナン-1, 4, 7-三酢酸(N O T A)、2-(4, 7-ビス(カルボキシメチル)-1, 4, 7-トリアゾナン-1-イル)ペンタン二酸(N O D A G A)、2-(4, 7, 10-トリス(カルボキシメチル)-1, 4, 7, 10-テトラアザシクロドデカン-1-イル)-ペンタン二酸(D O T A G A)、1, 4, 7-トリアザシクロノナンホスフリン酸(T R A P)、1, 4, 7-トリアザシクロノナン-1-[メチル(2-カルボキシエチル)-ホスフリン酸]-4, 7-ビス[メチル(2-ヒドロキシメチル)ホスフリン酸](N O P O)、3, 6, 9, 15-テトラアザビシクロ[9, 3, 1.]ペントデカ-1(15), 11, 13-トリエン-3, 6, 9-三酢酸(P C T A)、N’-{5-[アセチル(ヒドロキシ)アミノ]ペンチル}-N-[5-{4-[5-アミノペンチル](ヒドロキシ)アミノ]-4-オキソブタノイル}アミノ)ペンチル]-N-ヒドロキシスクシンアミド(D F O)、及びジエチレントリアミン五酢酸(D T P A)、又はそれらの誘導体から選択され、

R¹ 及び R² は、それぞれ独立して、好ましくは H、ハロゲン、好ましくはヨウ素又は臭素、及び C₁ - 6 アルキル、好ましくは C₁ - 3 アルキル、更により好ましくはメチルから選択され、

リンカーは、上に定義される一般式(6)で特徴付けられ、より好ましくは、リンカーは、上に定義される一般式(6a)で特徴付けられ、

a、b、d、m、nは、それぞれ独立して、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、又は10から選択される整数であり、より好ましくは、a及びbは、それぞれ独立して、0、1、2、3、4、5、又は6から選択される整数であり、b、d、及びmは、それぞれ独立して、1、2、3、4、5、又は6から選択される整数である。)のいずれかで特徴付けられる請求項3から10のいずれかに記載の化合物、又はその薬学的に許容される塩、エステル、溶媒和物、若しくは放射標識錯体。

【請求項 1 2】

Q が、C₅ - C₇ シクロアルキルから選択され、Q が、好ましくはシクロヘキシルである請求項 1 から 11 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 1 3】

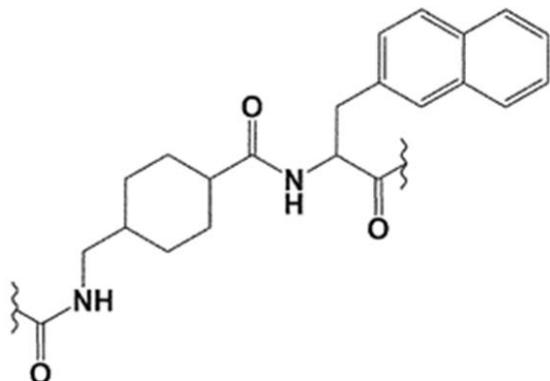
Wが、- (CH₂)₅- : ナフチル、- (CH₂)₅- : フェニル、- (CH₂)₅- : ピフ

エニル、- (C H₂)_c - インドリル、- (C H₂)_c - ベンゾチアゾリルから選択され
、c は、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、又は10から選択される整数であり
、Wが、好ましくは- (C H₂) - ナフチルである請求項1から12のいずれかに記載の
化合物。

【請求項14】

前記リンカーが、一般式(6a)：

【化12】

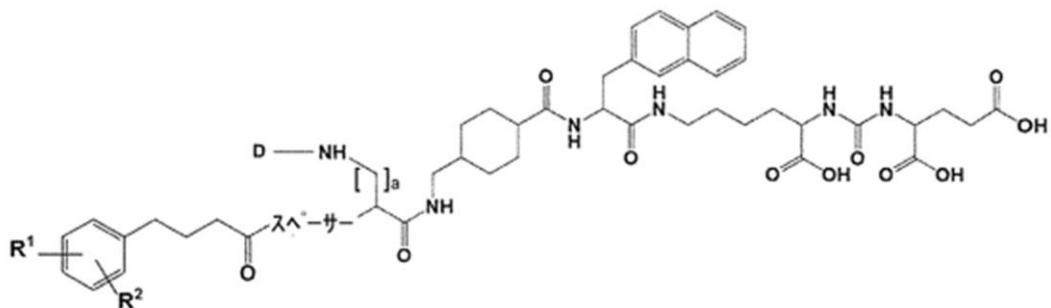


(6a)

で特徴付けられ、

前記化合物は、好ましくは一般式(1c)：

【化13】

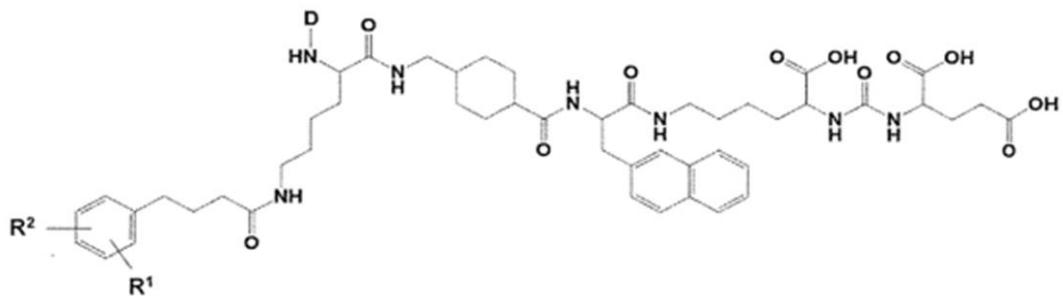


(1c)

で特徴付けられる、又はその薬学的に許容される塩、エステル、溶媒和物、若しくは放射
標識錯体である、

前記化合物は、より好ましくは一般式(7a)：

【化14】

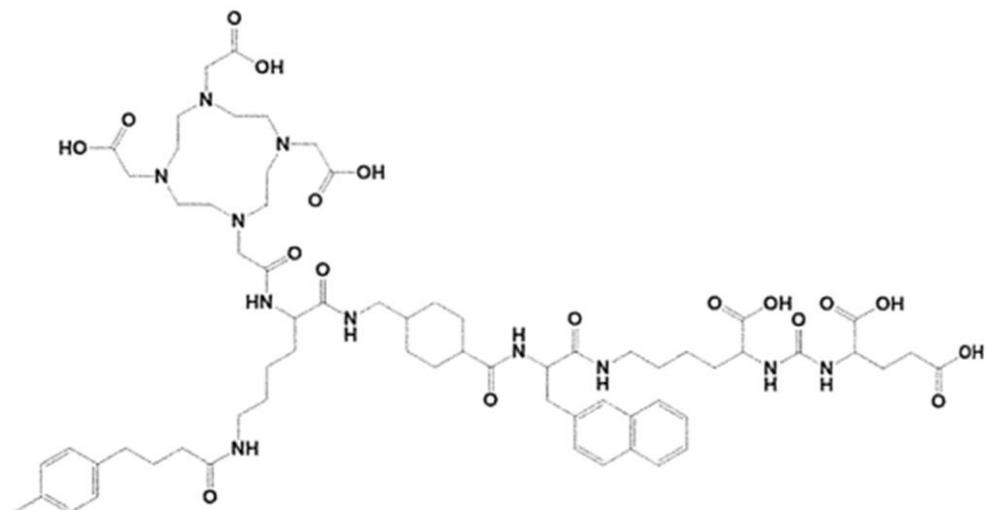


(7a)

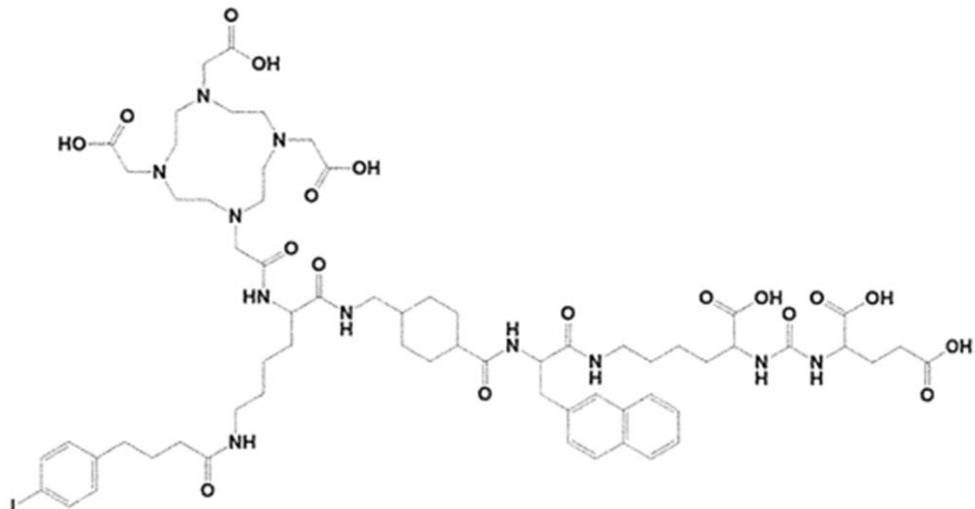
で特徴付けられる、又はその薬学的に許容される塩、エステル、溶媒和物、若しくは放射標識錯体である。

前記化合物は、最も好ましくは構造式(7a)(i)、(7a)(ii)、又は(7a)(iii)：

【化15】

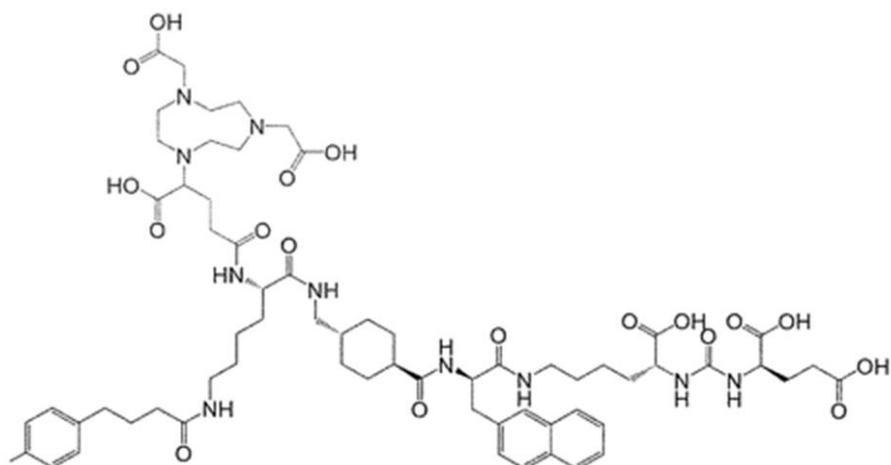


(7a)(i)



(7a)(ii)

【化16】



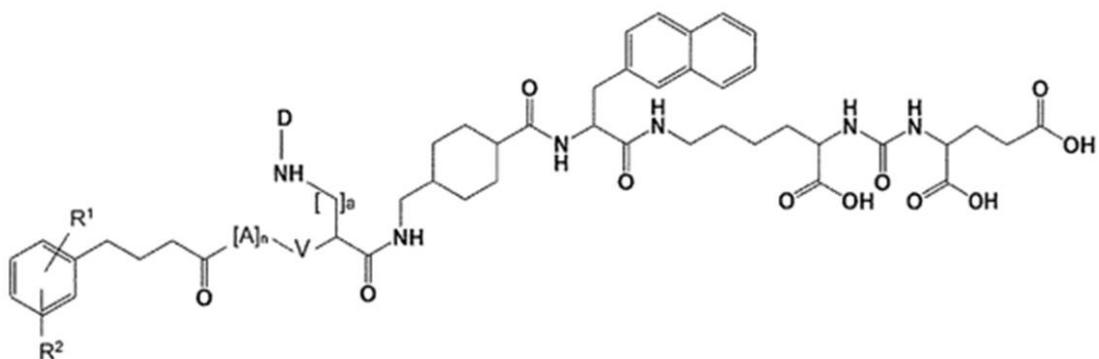
(7a)(iii)

で特徴付けられる、又はその薬学的に許容される塩、エステル、溶媒和物、若しくは放射標識錯体である請求項1から13のいずれかに記載の化合物。

【請求項15】

前記スペーサーが、少なくとも1つのアミノ酸残基を含み、
前記化合物が、好ましくは一般式(7b)：

【化17】



(7b)

(式中、

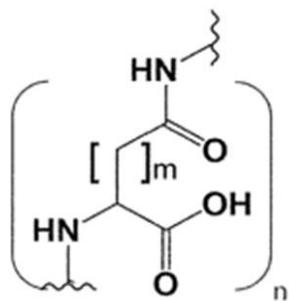
Aは、アミノ酸残基であり、Vは、単結合、N、又は最大3個のヘテロ原子を含む任意に置換されたC₁-C₁₂ヒドロカルビルから選択され、前記ヘテロ原子は、好ましくはNから選択され、nは、1、2、3、4、又は5から選択される整数である。)

で特徴付けられる、又はその薬学的に許容される塩、エステル、溶媒和物、若しくは放射標識錯体である、及び/又は

前記アミノ酸残基が、好ましくは(D-/L-)アスパラギン酸、グルタミン酸、又はリジンから選択され、

前記スペーサーが、より好ましくは式(3b)又は式(3c)：

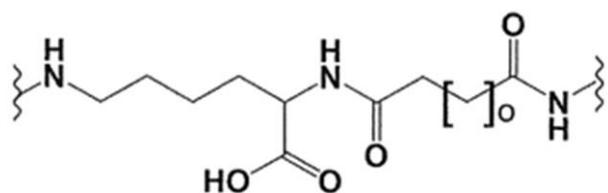
【化18】



(3b)

(式中、 m は、1又は2から選択される整数であり、 n は、1、2、3、4、又は5、好ましくは1、2、又は3から選択される整数である。)；

【化19】

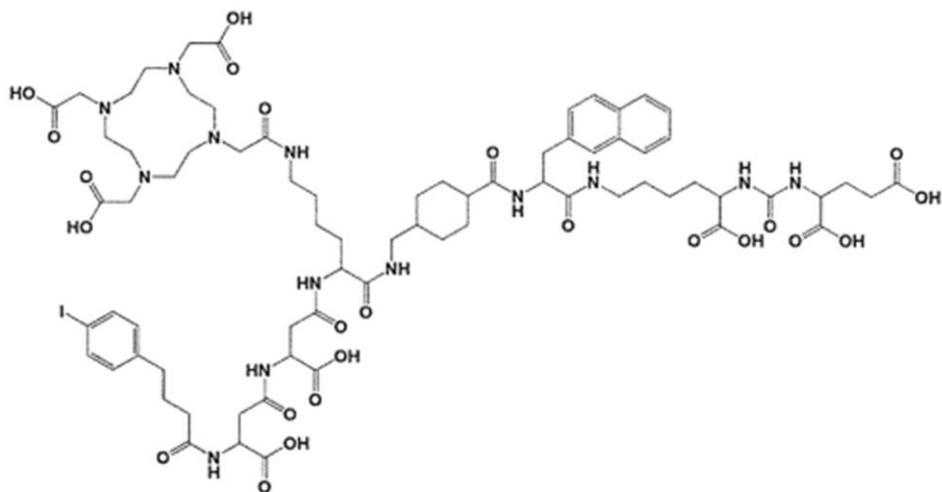


(3c)

(式中、 o は、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、又は10から選択される整数である。)で特徴付けられる、及び／又は

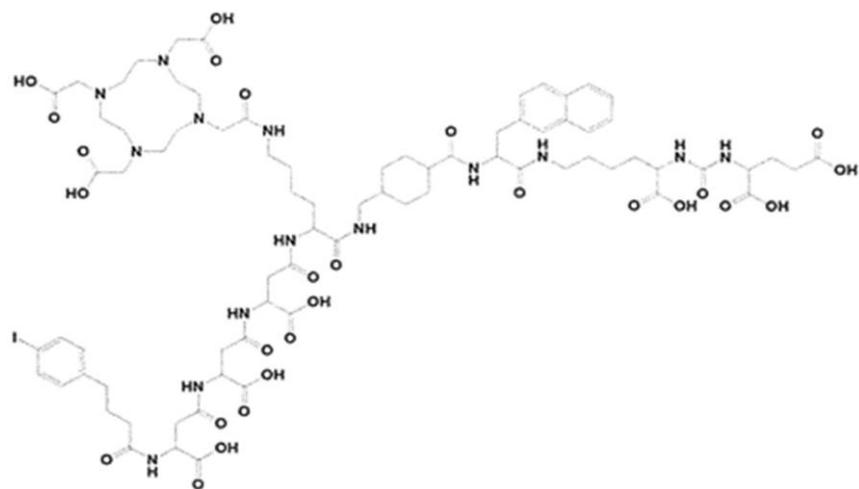
前記化合物が、より好ましくは構造式(7b)(i)、(7b)(ii)、又は(7b)(iii)：

【化20】

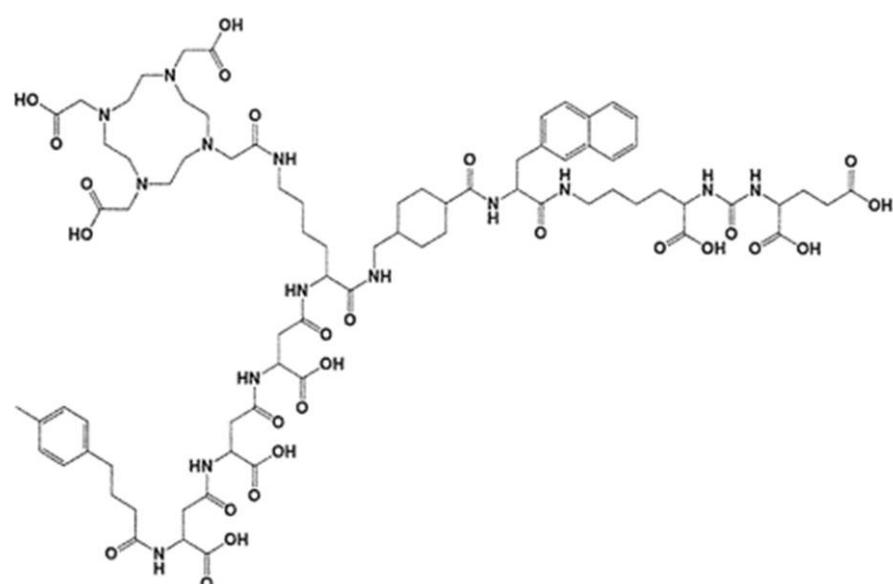


(7b)(i)

【化21】



(7b)(ii)

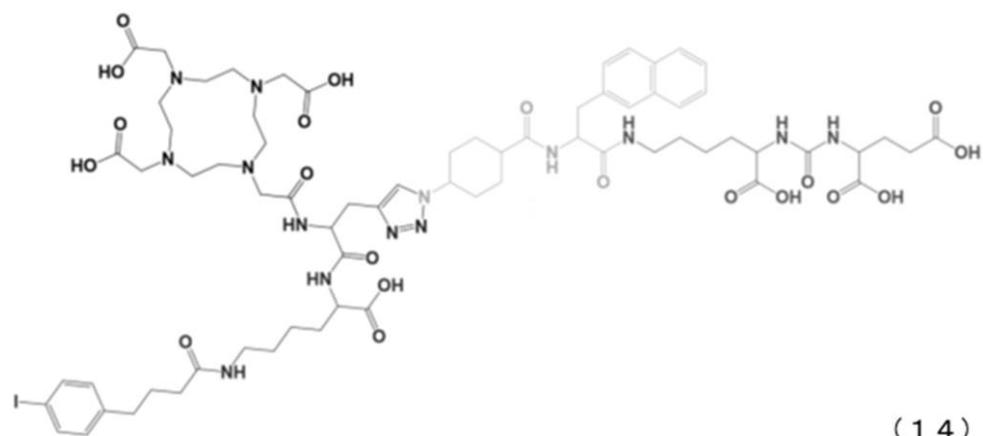


(7b)(iii)

で特徴付けられる、又は

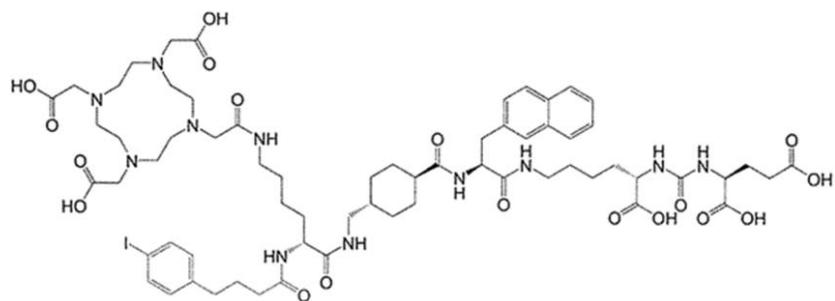
前記化合物が、より好ましくは構造式(14)、(15)、又は(16)：

【化22】

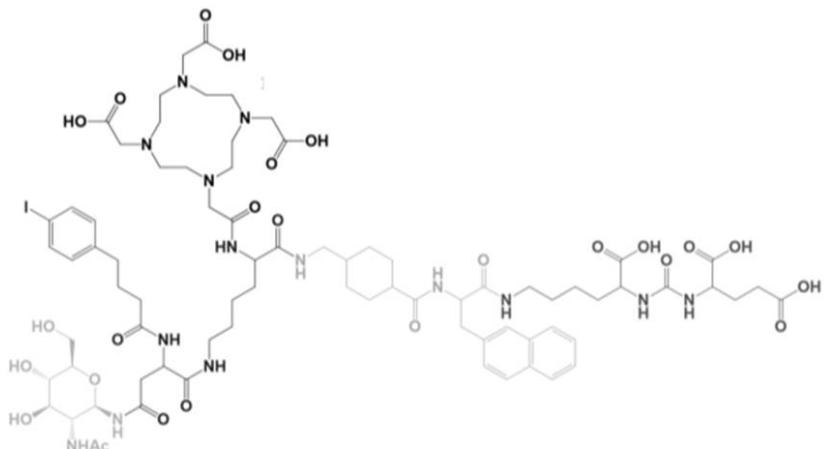


(14)

【化23】



(15)



(16)

で特徴付けられる、又は(7b)(i)、(7b)(ii)、(7b)(iii)、(14)、(15)、又は(16)の薬学的に許容される塩、エステル、溶媒和物、若しくは放射標識錯体である請求項1から13及び構造式(6a)に言及している限りにおいての請求項14のいずれかに記載の化合物。

【請求項16】

放射標識錯体の調製のための、請求項1から15のいずれかに記載の化合物の使用。

【請求項17】

放射性核種と、請求項1から16のいずれかに記載の化合物とを含み、金属が、好ましくは⁹₄Tc、⁹₉mTc、⁹₀In、¹₁¹In、⁶₇Ga、⁶₈Ga、⁸₆Y、⁹₀Y、¹₇⁷Lu、¹₅¹Tb、¹₈⁶Re、¹₈⁸Re、⁶₄Cu、⁶₇Cu、⁵₅Co、⁵₇Co、⁴₃Sc、⁴₄Sc、⁴₇Sc、²₂⁵Ac、²₁³Bi、²₁²Bi、²₁²Pb、²₂⁷Th、¹₅³Sm、¹₆⁶Ho、¹₅²Gd、¹₅³Gd、¹₅⁷Gd、又は¹₆⁶Dyからなる群から選択されることを特徴とする放射標識錯体。

【請求項18】

請求項1から15のいずれかに記載の化合物又は請求項17に記載の放射標識錯体と、薬学的に許容される担体及び/又は賦形剤とを含むことを特徴とする医薬組成物、又は請求項1から15のいずれかに記載の化合物又はその薬学的に許容される塩、エステル、溶媒和物、又は放射標識錯体、請求項17に記載の放射標識錯体、又はここで定義される医薬組成物を含むことを特徴とするキット。

【請求項19】

医薬及び/又は診断薬における使用のための、特に、前立腺癌、肺臓癌、腎癌、又は膀胱癌を診断、治療、及び/又は予防する方法における使用のための、又は陽電子放出断層撮影(PET)又は単一光子放出コンピュータ断層撮影(SPECT)を含む放射線イメージングのための、請求項1から15のいずれかに記載の化合物、請求項17に記載の放射標識錯体、請求項18に記載の医薬組成物、又は請求項18に記載のキット。

【請求項20】

前立腺特異的膜抗原（P S M A）を発現する細胞及び／又は組織の存在を検出する方法における使用のための、請求項1から15のいずれかに記載の化合物、請求項17に記載の放射標識錯体、請求項18に記載の医薬組成物、又は請求項18に記載のキット。

【請求項21】

請求項19から20のいずれかに記載の使用のための化合物、放射標識錯体、医薬組成物、又はキットにおいて、前記使用が、

- (a) 前記化合物、放射標識錯体、又は医薬組成物を患者に投与することと、
- (b) 前記患者から放射線画像を取得することとを含む、化合物、放射標識錯体、医薬組成物、又はキット。