

ロアルキル、ヘテロシクリル、ヘテロシクリルアルキル、またはカルボニルであり；かつ、

R⁴はアルキル、アルケニル、シクロアルキル、アルキルアリール、アルキルカルボニル、アリール、アリールアルキル、アルキルアリールアルキル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルコキシカルボニル、ヘテロアルキル、ヘテロシクリル、またはヘテロシクリルアルキルであり、

各R¹、R²、R³、およびR⁴は非置換であるか、または下記の置換基の1個以上で置換されており：アルキル、アルケニル、シクロアルキル、アルキルアリール、アルキルカルボニル、アリール、アリールアルキル、アルキルアリールアルキル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルコキシカルボニル、ヘテロアルキル、ヘテロシクリル、もしくはヘテロシクリルアルキル、-NR¹⁹R²⁰、-SH、-S(Pg)、-OH、-PR¹⁹R²⁰、-P(O)R²¹R²²、-CO₂H、=O、ハロ、トリフルオロメチル、シアノ、-CO₂R²⁴、-C(=O)R²⁴、-C(=O)N(R²⁴)₂、-CHO、-CH₂OR²⁴、-OC(=O)R²⁴、-OC(=O)OR²⁴、-OR²⁴、-OC(=O)N(R²⁴)₂、-NR²⁴C(=O)R²⁴、-NR²⁴C(=O)OR²⁴、-NR²⁴SO₂N(R²⁴)₂、-NR²⁴SO₂R²⁴、-SO₃H、-SO₂R²⁴、-SR²⁴、-S(=O)R²⁴、-SO₂N(R²⁴)₂、-N(R²⁴)₂、-NH₂C(=S)NHR²⁴、=NOR²⁴、NO₂、-C(=O)NHOR²⁴、-C(=O)NHNR²⁴R²⁴、-OCH₂CO₂H、2-(1-モルホリノ)エトキシ、またはキレート剤部分；

R¹⁹およびR²⁰は水素、0～3個のR²³で置換されたC₁～₁～₀アルキル、0～3個のR²³で置換されたアリール、0～3個のR²³で置換されたC₃～₁～₀シクロアルキル、0～3個のR²³で置換されたヘテロシクリル-C₁～₁～₀アルキル、0～3個のR²³で置換されたC₆～₁～₀アリール-C₁～₁～₀アルキル、および0～3個のR²³で置換されたヘテロシクリルから各々独立して選択され；

R²¹およびR²²は-OH、0～3個のR²³で置換されたC₁～₁～₀アルキル、0～3個のR²³で置換されたアリール、0～3個のR²³で置換されたC₃～₁～₀シクロアルキル、0～3個のR²³で置換されたヘテロシクリル-C₁～₁～₀アルキル、0～3個のR²³で置換されたC₆～₁～₀アリール-C₁～₁～₀アルキル、および0～3個のR²³で置換されたヘテロシクリルから各々独立して選択され；

各R²³は=O、ハロ、トリフルオロメチル、シアノ、-CO₂R²⁴、-C(=O)R²⁴、-C(=O)N(R²⁴)₂、-CHO、-CH₂OR²⁴、-OC(=O)R²⁴、-OC(=O)OR²⁴、-OR²⁴、-OC(=O)N(R²⁴)₂、-NR²⁴C(=O)R²⁴、-NR²⁴C(=O)OR²⁴、-NR²⁴C(=O)N(R²⁴)₂、-NR²⁴SO₂N(R²⁴)₂、-NR²⁴SO₂R²⁴、-SO₃H、-SO₂R²⁴、-SR²⁴、-S(=O)R²⁴、-SO₂N(R²⁴)₂、-N(R²⁴)₂、-NH₂C(=S)NHR²⁴、=NOR²⁴、-NO₂、-C(=O)NHOR²⁴、-C(=O)NHNR²⁴R²⁴、-OCH₂CO₂H、2-(1-モルホリノ)エトキシ、C₁～₅アルキル、C₂～₄アルケニル、C₃～₆シクロアルキル、C₃～₆シクロアルキルメチル、C₂～₆アルコキシアルキル、0～2個のR²⁴で置換されたアリール、およびヘテロシクリルから独立して選択され；

各R²⁴は水素、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、アルキルアリール、アルキルカルボニル、アリール、アリールアルキル、アルキルアリールアルキル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルコキシカルボニル、ヘテロアルキル、ヘテロシクリル、ヘテロシクリルアルキル、およびカルボニルから独立して選択され；

Pgはチオール保護基であり；かつ、

n'は0～3の整数であるが、ただし

XがNである場合、少なくとも1つのR¹は水素であるものとする]
の化合物であって、少なくとも1つのキレート剤部分を含む化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項 2】

R^1 が水素、アルキル、アリールアルキル、またはアルキルアリールアルキルであり；
 R^2 および R^3 が同一または異なっていてよく、水素、アルキル、アルキルアリール、アリール、アリールアルキル、アルキルアリールアルキル、またはヘテロシクリアルキルであり；

R^4 がアルキル、アルキルアリール、アリール、アリールアルキル、またはアルキルアリールアルキルであり、

R^1 、 R^2 、 R^3 、および R^4 の少なくとも 1 つがキレート剤部分で置換されている、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

R^2 または R^3 が下記の構造、

【化 2】

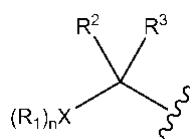


[式中、

n は 0 ~ 6 であり；かつ、

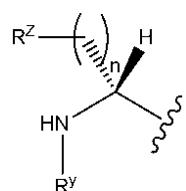
R^2 はアルキル、アリール、シクロアルキル、およびヘテロシクリルから選択される] を含み、または任意に

【化 3】



が下記の構造

【化 4】



[式中、

n は 0 ~ 6 であり；

R^y は水素、アルケニル、およびアルキルから選択され；かつ、

R^2 はアルキル、アリール、シクロアルキル、およびヘテロシクリルから選択される] を含む、前述のいずれかの請求項に記載の化合物。

【請求項 4】

n が 1 または 2 であり；

R^y が水素であり；かつ、

R^2 がアルキル、およびアリールから選択される、請求項 3 に記載の化合物。

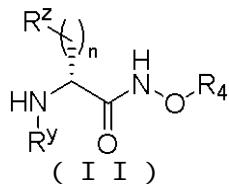
【請求項 5】

R^1 が少なくとも 1 つのキレート剤部分で置換され、任意に R^2 もしくは R^3 が少なくとも 1 つのキレート剤部分で置換され、または任意に R^4 が少なくとも 1 つのキレート剤部分で置換されている、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 6】

化合物が式 (I I)、

【化5】



[式中、

R^4 は少なくとも 1 つのキレート剤部分で置換されたアルキル、アルケニル、シクロアルキル、アルキルアリール、アルキルカルボニル、アリール、アリールアルキル、アルキルアリールアルキル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルコキシカルボニル、ヘテロアルキル、ヘテロシクリル、またはヘテロシクリルアルキルであり；

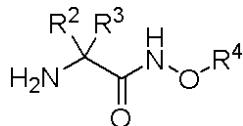
n は 0 ~ 6 であり；

R^y は水素、アルケニル、およびアルキルから選択され；かつ、

R^z はアルキル、アリール、シクロアルキル、およびヘテロシクリルから選択される] の構造を有し、任意に

化合物が式 (I I I)、

【化6】



(I I I)

[式中、

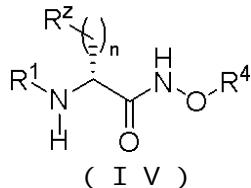
R^2 および R^3 は同一または異なっていてよく、水素、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、アルキルアリール、アルキルカルボニル、アリール、アリールアルキル、アルキルアリールアルキル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルコキシカルボニル、ヘテロアルキル、ヘテロシクリル、ヘテロシクリルアルキル、またはカルボニルであり、かつ、 R^2 および R^3 の少なくとも 1 つは少なくとも 1 つのキレート剤部分で置換されており；かつ、

R^4 はアルキル、アルキルアリールまたはアリールアルキルである]

の構造を有し、または任意に

化合物が式 (I V)、

【化7】



[式中、

R^1 は少なくとも 1 つのキレート剤部分で置換されたアルキル、アルケニル、シクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシアルキル、ヘテロアルキル、またはヘテロシクリルアルキルであり；

n は 0 ~ 6 であり；

R^z はアルキル、アリール、シクロアルキル、およびヘテロシクリルから選択され；かつ、

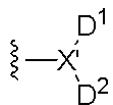
R^4 はアルキルまたはアリールアルキルである]

の構造を有する、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。

【請求項 7】

少なくとも 1 つのキレート剤部分が、

【化 8】



[式中、

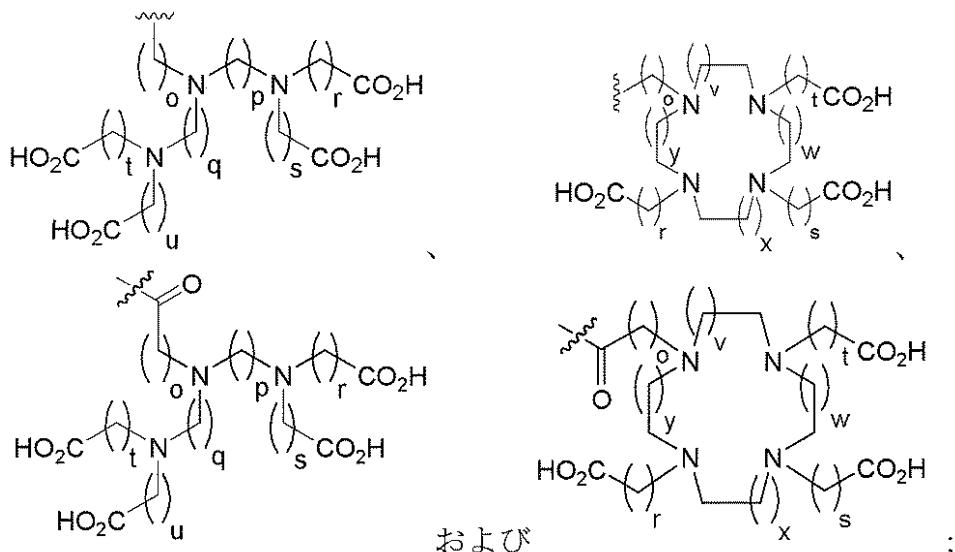
X'はヘテロ原子であり、D¹およびD²の1つは水素であり、かつ、他方はキレート剤部分であり、かつ、任意にX'はNである]

の構造を有する、前述のいずれかの請求項に記載の化合物。

【請求項 8】

D¹およびD²の1つが水素であり、かつ、他方が

【化 9】



[式中、

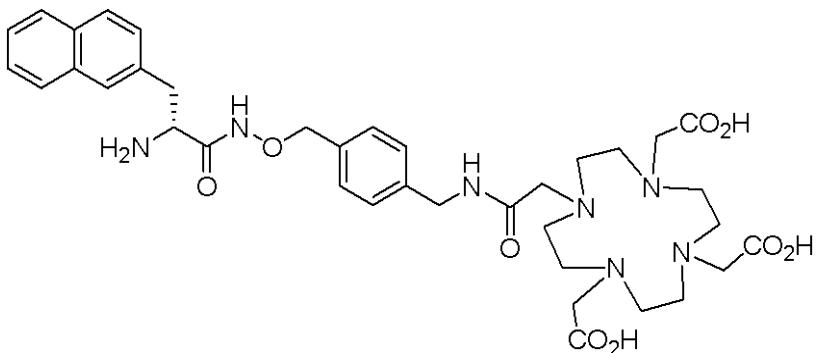
o、p、q、r、s、t、およびuは各々独立して1～6であり；かつ、v、w、x、およびyは各々独立して1～3であり；任意にo、r、s、t、およびuは各々1であり；かつ、pおよびqは各々2であり；または任意にo、r、s、t、v、w、xおよびyは各々1である]

から選択される、前述のいずれかの請求項に記載の化合物。

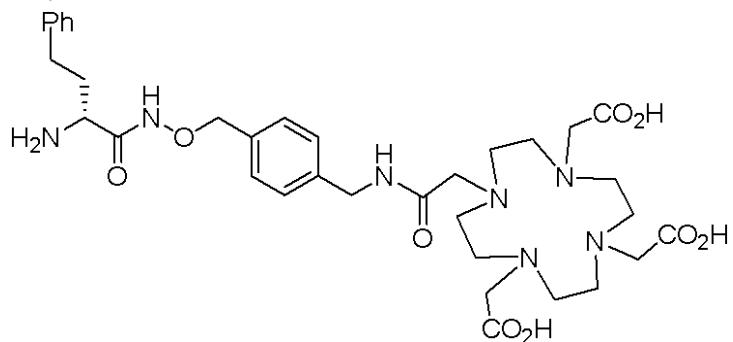
【請求項 9】

化合物が、

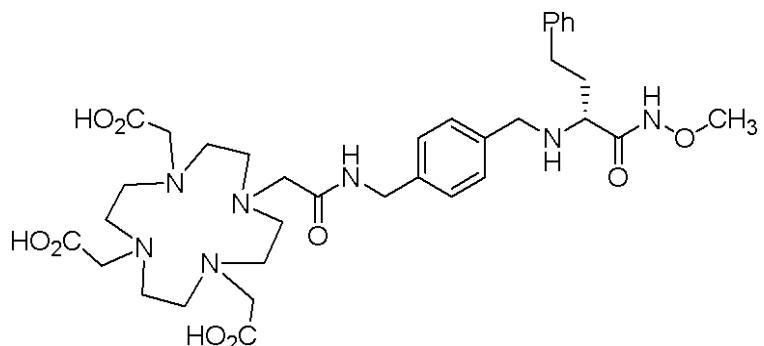
【化 10】



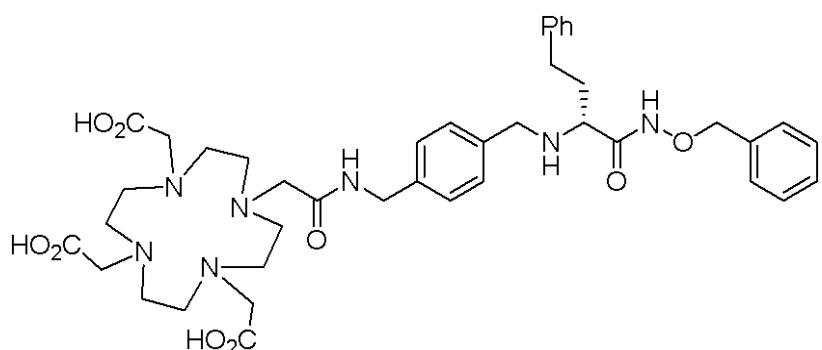
【化 1 1】



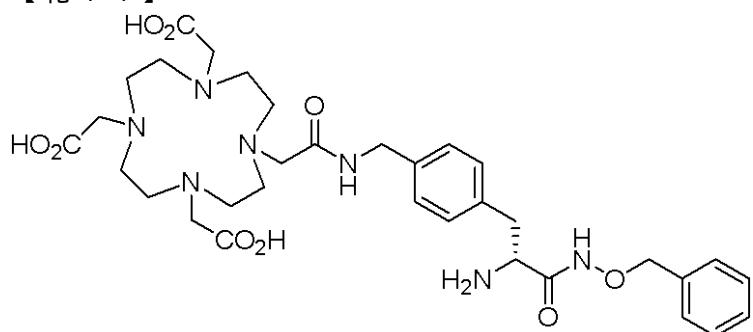
【化 1 2】



【化 1 3】

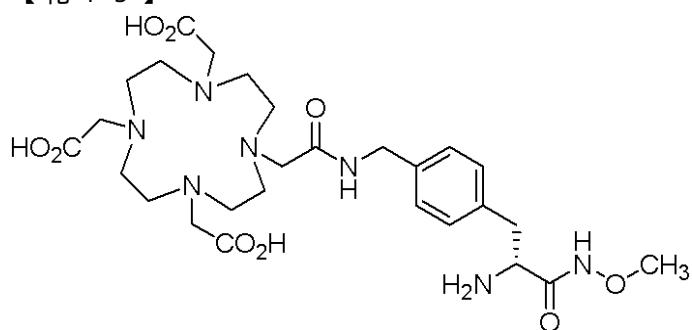


【化 1 4】



または、

【化15】



の構造を有する、請求項1に記載の化合物。

【請求項10】

前述のいずれかの請求項の化合物；および、
少なくとも1つのキレート剤部分に結合した造影剤
を含む診断薬。

【請求項11】

造影剤がエコー源性物質、光学レポーター、ホウ素中性子吸收体、常磁性金属イオン、
強磁性金属、線放射性同位元素、陽電子放射性同位元素、または \times 線吸収体である、請求項10の診断薬。

【請求項12】

造影剤が常磁性金属イオンであり、任意に $\text{Gd}(\text{III})$ である、請求項10の診断薬
。

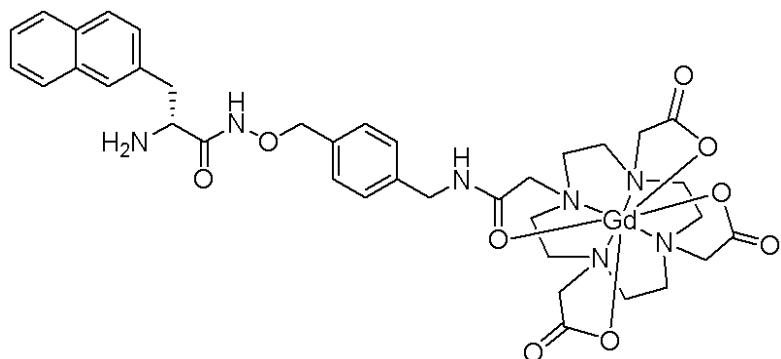
【請求項13】

造影剤が ^{111}In 、 ^{62}Cu 、 ^{64}Cu 、 ^{67}Ga 、 ^{68}Ga 、および ^{153}Gd から選択される
線放射性同位元素または陽電子放射性同位元素である、請求項10の診断薬。

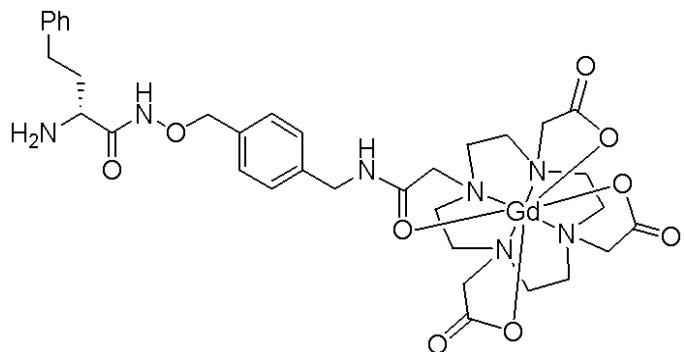
【請求項14】

診断薬が、

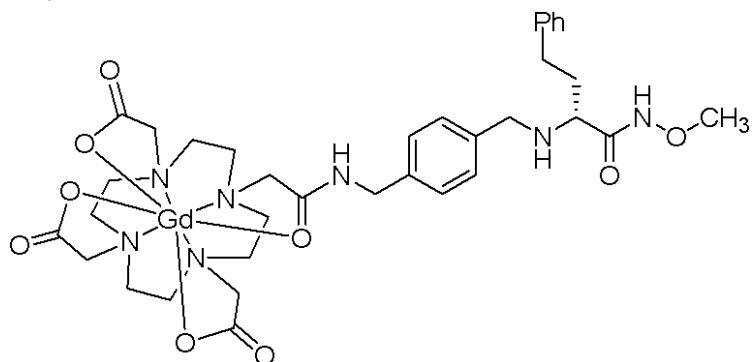
【化16】



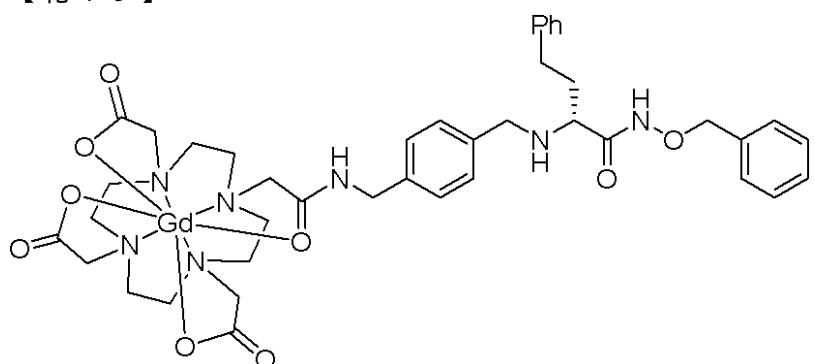
【化17】



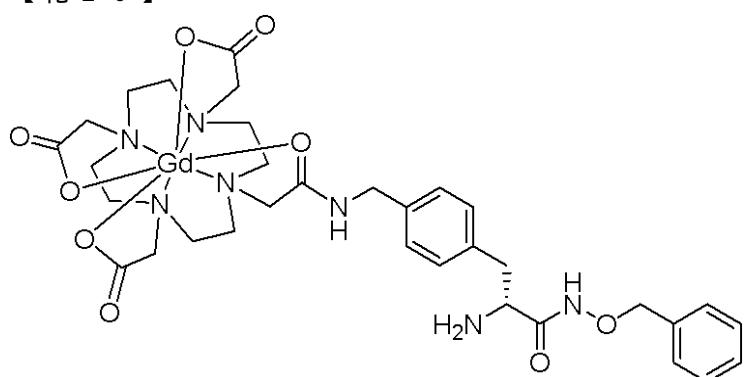
【化18】



【化19】

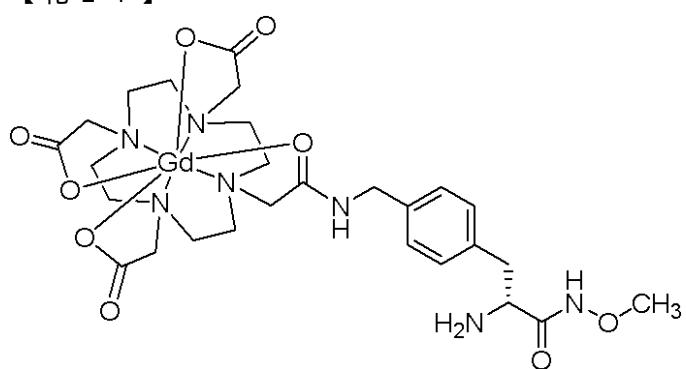


【化20】



または、

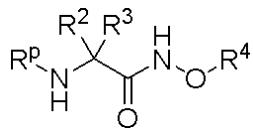
【化21】

の構造を有する、請求項10の診断薬。

【請求項15】

式(V)、

【化22】



(V)

[式中、

 R^p は水素または - アミノ保護基であり；

R^2 および R^3 は同一または異なっていてよく、水素、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、アルキルアリール、アルキルカルボニル、アリール、アリールアルキル、アルキルアリールアルキル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルコキシカルボニル、ヘテロアルキル、ヘテロシクリル、ヘテロシクリルアルキル、またはカルボニルであり；かつ、

R^4 は水素、アルキル、アルキルアリール、またはアルキルアリールアルキルであり、各 R^2 、 R^3 、および R^4 は非置換であるか、または下記の置換基の 1 個以上で置換されており：アルキル、アルケニル、シクロアルキル、アルキルアリール、アルキルカルボニル、アリール、アリールアルキル、アルキルアリールアルキル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルコキシカルボニル、ヘテロアルキル、ヘテロシクリル、もしくはヘテロシクリルアルキル、 $-\text{NR}^{1\sim 9}\text{R}^{2\sim 0}$ 、 $-\text{SH}$ 、 $-\text{S(Pg)}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{PR}^{1\sim 9}\text{R}^2$ 、 $-\text{P(O)R}^{2\sim 1}\text{R}^{2\sim 2}$ 、 $-\text{CO}_2\text{H}$ 、 $=\text{O}$ 、ハロ、トリフルオロメチル、シアノ、 $-\text{CO}_2\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{C(=O)}\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{C(=O)}\text{N}(\text{R}^{2\sim 4})_2$ 、 $-\text{CHO}$ 、 $-\text{CH}_2\text{OR}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{OC(=O)}\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{OC(=O)}\text{OR}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{OR}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{OC(=O)}\text{N}(\text{R}^{2\sim 4})_2$ 、 $-\text{NR}^{2\sim 4}\text{C(=O)}\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{NR}^{2\sim 4}\text{C(=O)}\text{OR}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{NR}^{2\sim 4}\text{C(=O)}\text{N}(\text{R}^{2\sim 4})_2$ 、 $-\text{NR}^{2\sim 4}\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^{2\sim 4})_2$ 、 $-\text{NR}^{2\sim 4}\text{SO}_2\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{SR}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{S(=O)}\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^{2\sim 4})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{2\sim 4})_2$ 、 $-\text{NH}\text{C(=S)}\text{NHR}^{2\sim 4}$ 、 $=\text{NOR}^{2\sim 4}$ 、 NO_2 、 $-\text{C(=O)}\text{NHOR}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{C(=O)}\text{NHNR}^{2\sim 4}\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{OCH}_2\text{CO}_2\text{H}$ 、 $2-(1-\text{モルホリノ})\text{エトキシ}$ 、またはキレート剤部分；

$\text{R}^{1\sim 9}$ および $\text{R}^{2\sim 0}$ は水素、0 ~ 3 個の $\text{R}^{2\sim 3}$ で置換された $\text{C}_{1\sim 10}$ アルキル、0 ~ 3 個の $\text{R}^{2\sim 3}$ で置換されたアリール、0 ~ 3 個の $\text{R}^{2\sim 3}$ で置換された $\text{C}_{3\sim 10}$ シクロアルキル、0 ~ 3 個の $\text{R}^{2\sim 3}$ で置換されたヘテロシクリル - $\text{C}_{1\sim 10}$ アルキル、0 ~ 3 個の $\text{R}^{2\sim 3}$ で置換された $\text{C}_{6\sim 10}$ アリール - $\text{C}_{1\sim 10}$ アルキル、および 0 ~ 3 個の $\text{R}^{2\sim 3}$ で置換されたヘテロシクリルから各々独立して選択され；

$\text{R}^{2\sim 1}$ および $\text{R}^{2\sim 2}$ は $-\text{OH}$ 、0 ~ 3 個の $\text{R}^{2\sim 3}$ で置換された $\text{C}_{1\sim 10}$ アルキル、0 ~ 3 個の $\text{R}^{2\sim 3}$ で置換されたアリール、0 ~ 3 個の $\text{R}^{2\sim 3}$ で置換された $\text{C}_{3\sim 10}$ シクロアルキル、0 ~ 3 個の $\text{R}^{2\sim 3}$ で置換されたヘテロシクリル - $\text{C}_{1\sim 10}$ アルキル、0 ~ 3 個の $\text{R}^{2\sim 3}$ で置換された $\text{C}_{6\sim 10}$ アリール - $\text{C}_{1\sim 10}$ アルキル、および 0 ~ 3 個の $\text{R}^{2\sim 3}$ で置換されたヘテロシクリルから各々独立して選択され；

各 $\text{R}^{2\sim 3}$ は $=\text{O}$ 、ハロ、トリフルオロメチル、シアノ、 $-\text{CO}_2\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{C(=O)}\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{C(=O)}\text{N}(\text{R}^{2\sim 4})_2$ 、 $-\text{CHO}$ 、 $-\text{CH}_2\text{OR}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{OC(=O)}\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{OC(=O)}\text{OR}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{OR}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{OC(=O)}\text{N}(\text{R}^{2\sim 4})_2$ 、 $-\text{NR}^{2\sim 4}\text{C(=O)}\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{NR}^{2\sim 4}\text{C(=O)}\text{OR}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{NR}^{2\sim 4}\text{C(=O)}\text{N}(\text{R}^{2\sim 4})_2$ 、 $-\text{NR}^{2\sim 4}\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^{2\sim 4})_2$ 、 $-\text{NR}^{2\sim 4}\text{SO}_2\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{SO}_2\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{SR}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{S(=O)}\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^{2\sim 4})_2$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{2\sim 4})_2$ 、 $-\text{NH}\text{C(=S)}\text{NHR}^{2\sim 4}$ 、 $=\text{NOR}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{C(=O)}\text{NHOR}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{C(=O)}\text{NHNR}^{2\sim 4}\text{R}^{2\sim 4}$ 、 $-\text{OCH}_2\text{CO}_2\text{H}$ 、 $2-(1-\text{モルホリノ})\text{エトキシ}$ 、 $\text{C}_{1\sim 5}$ アルキル、 $\text{C}_{2\sim 4}$ アルケニル、 $\text{C}_{3\sim 6}$ シクロアルキル、 $\text{C}_{3\sim 6}$ シクロアルキルメチル、 $\text{C}_{2\sim 6}$ アルコキシアルキル、0 ~ 2 個の $\text{R}^{2\sim 4}$ で置換されたアリール、およびヘテロシクリルから独立して選択され；

各 $\text{R}^{2\sim 4}$ は水素、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、アルキルアリール、アルキ

ルカルボニル、アリール、アリールアルキル、アルキルアリールアルキル、アルコキシ、アルコキシアルキル、アルコキシカルボニル、ヘテロアルキル、ヘテロシクリル、ヘテロシクリルアルキル、およびカルボニルから独立して選択され；かつ、

Pgはチオール保護基である】

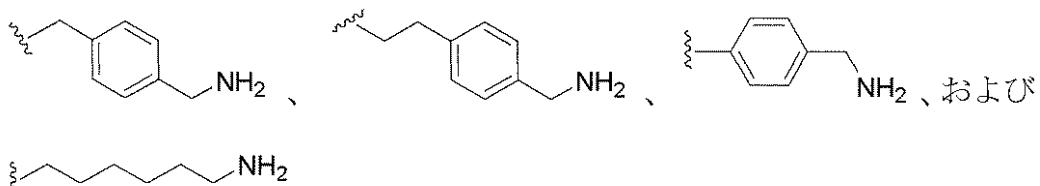
の化合物、またはその医薬的に許容される塩。

【請求項16】

R^pが水素、BoC、またはFmocであり；かつ、

R⁴が水素、アミノ基で置換されたアルキル、またはアルキルアリールアルキルであり、任意に

【化23】

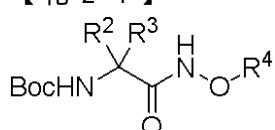


から選択される、請求項15に記載の化合物。

【請求項17】

化合物が式(VI)、

【化24】

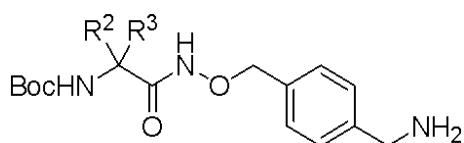


(VI)

の構造を有し；任意に

化合物が式(VII)、

【化25】

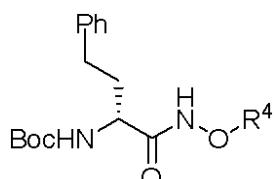


(VII)

の構造を有し；任意に

化合物が式(VIII)、

【化26】

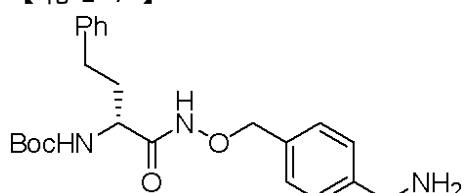


(VIII)

の構造を有し；任意に

化合物が、

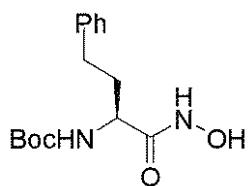
【化27】



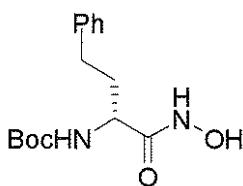
の構造を有し；もしくは任意に

化合物が、

【化 2 8】



もしくは



の構造を有する、請求項 1 5 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 1 8】

診断用造影技術によって患者内における診断薬の集中部位の画像を得るための、請求項 1 0 ~ 1 4 のいずれか 1 項に記載の診断薬。

【請求項 1 9】

患者内のエラスチンに富む組織を検出し、造影し、および / またはモニターするための、請求項 1 8 に記載の診断薬であって、エラスチンに富む組織が任意に動脈壁、子宮、肺、皮膚、および / または靭帯の中にある診断薬。

【請求項 2 0】

患者内の冠動脈ブラーク、頸動脈ブラーク、腸骨 / 大腿動脈ブラーク、大動脈ブラーク、腎動脈ブラーク、いずれかの動脈血管のブラーク、動脈瘤、血管炎、動脈壁の他の疾患、および / または靭帯、子宮、肺もしくは皮膚の損傷もしくは構造変化の存在を検出し、造影し、および / またはモニターするための、請求項 1 8 に記載の診断薬。