

【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9月24日(2021.9.24)

【公表番号】特表2020-531497(P2020-531497A)

【公表日】令和2年11月5日(2020.11.5)

【年通号数】公開・登録公報2020-045

【出願番号】特願2020-510560(P2020-510560)

【国際特許分類】

C 07 D 491/22 (2006.01)

A 61 K 49/00 (2006.01)

A 61 K 47/64 (2017.01)

C 07 K 7/50 (2006.01)

【F I】

C 07 D 491/22 C S P

A 61 K 49/00

A 61 K 47/64

C 07 K 7/50 Z N A

【手続補正書】

【提出日】令和3年8月16日(2021.8.16)

【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

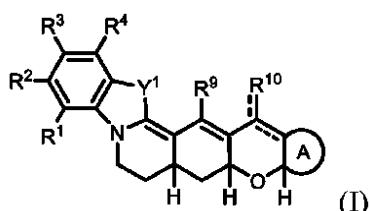
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

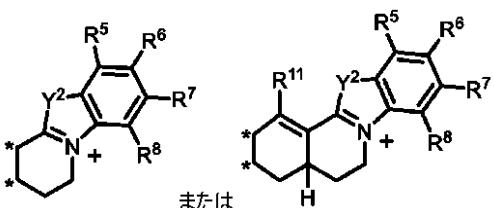
式I：

【化75】



[式中、Aは、

【化76】



であり、各「\*」は、Aの結合点を示し、

【化77】

「-----」

によって表される結合は、原子価の要件を満たすために必要とされるように、単結合または二重結合であり、

$R^1 \sim R^9$  および  $R^{11}$  は、独立に、H、スルホネート、 $-N(R^a)_2$ 、重水素、アルキル、ヘテロアルキル、アルキルスルホネート、アミノアルキル、 $-C(O)OR^a$ 、トリチル、またはコンジュゲート可能な部分、標的化剤もしくは薬物を含む基であり、ここで、各  $R^a$  は、独立に、H、重水素、アルキル、またはヘテロアルキルであり、

$R^{10}$  は、H、重水素、O、アルキル、アリール、アミノ、スルホネート、トリフレート、 $-C(O)OR^b$ 、 $-OR^b$ 、 $-N(R^b)_2$ 、ヘテロアルキル、ヘテロアリール、トリチル、またはコンジュゲート可能な部分、標的化剤もしくは薬物を含む基であり、ここで、各  $R^b$  は、独立に、H、重水素、アルキル、ヘテロアルキル、アリール、またはヘテロアリールであり、

$Y^1$  および  $Y^2$  は、独立に、 $C(R^c)_2$ 、 $N(R^d)$ 、S、O、またはSeであり、ここで、各  $R^c$  は、独立に、アルキル、H、重水素、 $-(OCH_2CH_2)_xOH$  [ $x$  は、2の整数である]、トリチル、またはコンジュゲート可能な部分、標的化剤もしくは薬物を含む基であり、各  $R^d$  は、独立に、H、重水素、アルキル、またはヘテロアルキルである]

による化学構造を有する化合物、またはその立体異性体もしくは薬学的に許容される塩。

#### 【請求項2】

$R^3$  および  $R^6$  のうちの少なくとも1つが、スルホネート、 $-C(O)OR^a$ 、またはコンジュゲート可能な部分、標的化剤もしくは薬物を含む基である、請求項1に記載の化合物。

#### 【請求項3】

$Y^1$  および  $Y^2$  が、 $C(R^c)_2$  であり、各  $R^c$  が、独立に、 $C_1 \sim C_3$  アルキル、 $-(CH_2)_nC(O)R^e$ 、またはHであり、nが、1の整数であり、 $R^e$  が、コンジュゲート可能な部分、標的化剤または薬物である、請求項1または請求項2に記載の化合物。

#### 【請求項4】

式中、

$Y^1$  および  $Y^2$  が、 $C(CH_3)_2$  であり、または

$R^3$  および  $R^6$  が、スルホネートであり、一方の  $R^c$  が、 $-(CH_2)_nC(O)R^e$  である、請求項3に記載の化合物。

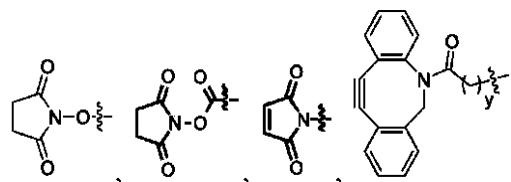
#### 【請求項5】

$R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^7$ 、および  $R^8$  が、Hである、請求項1～4のいずれか一項に記載の化合物。

#### 【請求項6】

前記コンジュゲート可能な部分が、

#### 【化78】

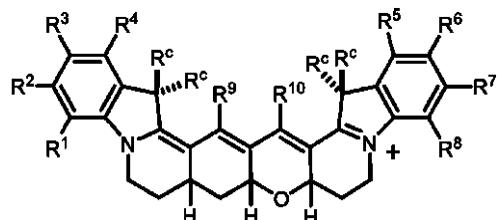


(式中、yは、1の整数である)、またはホスホロアミダイト基である、請求項1～5のいずれか一項に記載の化合物。

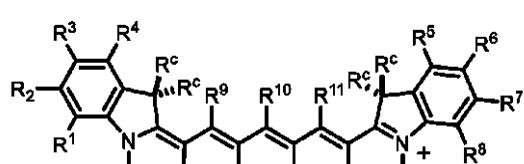
#### 【請求項7】

式IIまたは式III：

## 【化79】



(II) または



(III)

による化学構造を有する、請求項1～6のいずれか一項に記載の化合物。

## 【請求項8】

各R<sup>c</sup>が、-CH<sub>3</sub>であるか、  
R<sup>3</sup>およびR<sup>6</sup>が、スルホネートであるか、  
一方のR<sup>c</sup>が、コンジュゲート可能な部分、標的化剤または薬物を含む基であるか、または  
R<sup>3</sup>およびR<sup>6</sup>が、スルホネートであり、一方のR<sup>c</sup>が、コンジュゲート可能な部分、標的化剤または薬物を含む基である、請求項7に記載の化合物。

## 【請求項9】

前記化合物が、式I-Iによる化学構造を有し、R<sup>1</sup>～R<sup>10</sup>が、Hであるか、  
前記化合物が、式I-IIによる化学構造を有し、R<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>が、Hであり、R<sup>3</sup>およびR<sup>6</sup>のうちの少なくとも1つが、コンジュゲート可能な部分、標的化剤もしくは薬物を含む基であるか、  
前記化合物が、式I-II-Iによる化学構造を有し、R<sup>1</sup>～R<sup>9</sup>およびR<sup>11</sup>が、Hであり、R<sup>10</sup>が、H、O、トリフレート、アリール、-OR<sup>b</sup>もしくは-N(R<sup>b</sup>)<sub>2</sub>であるか、または  
前記化合物が、式I-II-IIによる化学構造を有し、R<sup>9</sup>およびR<sup>11</sup>が、Hであり、R<sup>3</sup>、R<sup>6</sup>、およびR<sup>10</sup>のうちの少なくとも1つが、コンジュゲート可能な部分、標的化剤もしくは薬物を含む基である、請求項7または請求項8に記載の化合物。

## 【請求項10】

R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>、およびR<sup>7</sup>～R<sup>11</sup>が、Hであり、R<sup>3</sup>およびR<sup>6</sup>が、独立に、-SO<sub>3</sub>または-CO<sub>2</sub>R<sup>a</sup>である、請求項7または8に記載の化合物。

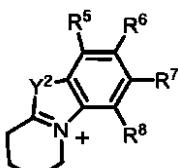
## 【請求項11】

請求項1～10のいずれか一項に記載の化合物および薬学的に許容される担体を含む、医薬組成物。

## 【請求項12】

Aが

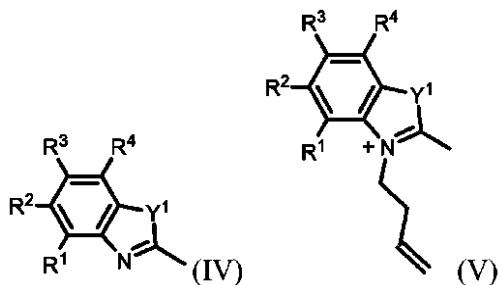
## 【化80】



である、請求項1に記載の化合物を作製するための方法であって、

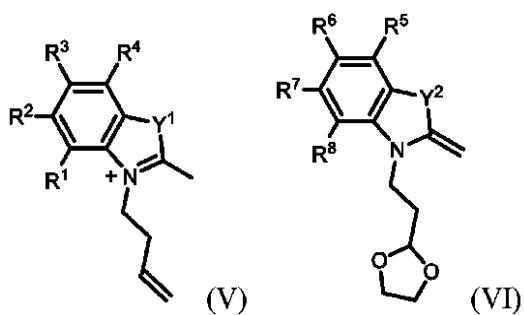
式IVによる化合物を含む溶液を、3-ブテン-1-イルトリフルオロメタンスルホネートと合わせて、式Vによる化合物を生成するステップと、

## 【化 8 1】

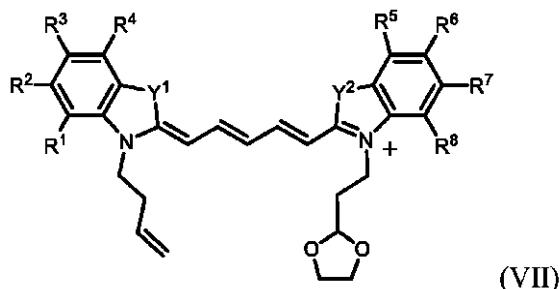


式 V による化合物および式 V I による化合物を含む溶液を、N - ((1 E, 3 Z) - 3 - (フェニルアミノ) プロパ - 1 - エン - 1 - イル) アニリンまたはN - ((1 E, 3 E) - 3 - (フェニルイミノ) プロパ - 1 - エン - 1 - イル) アニリンと合わせて、式 V I I による化合物を形成するステップと、

## 【化 8 2】

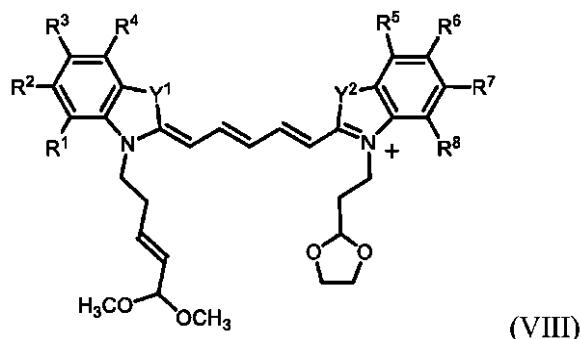


## 【化 8 3】



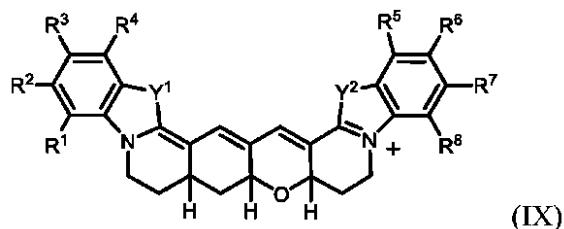
式 V I I による化合物を含む溶液を、ルテニウム触媒の存在下で、3 , 3 - ジメトキシ - 1 - プロパンと合わせて、式 V I I I による化合物を提供するステップと、

## 【化 8 4】



式 V I I I による化合物を、(i) 酸性化 C H C l<sub>3</sub> または (ii) C H<sub>2</sub> C l<sub>2</sub> 中 B B r<sub>3</sub> と合わせて、式 I X による化合物を提供するステップと

## 【化85】

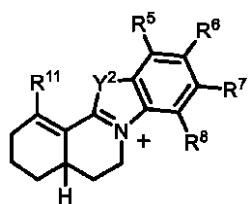


を含む、方法。

## 【請求項13】

Aが

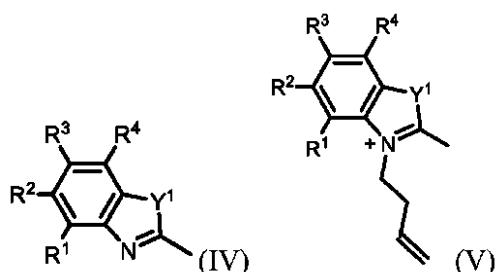
## 【化86】



である、請求項1に記載の化合物を作製するための方法であって、

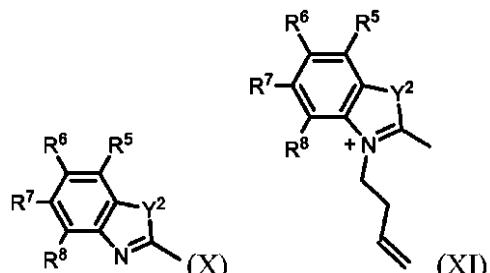
式IVによる化合物を含む溶液を、3-ブテン-1-イルトリフルオロメタンスルホネートと合わせて、式Vによる化合物を生成するステップと、

## 【化87】



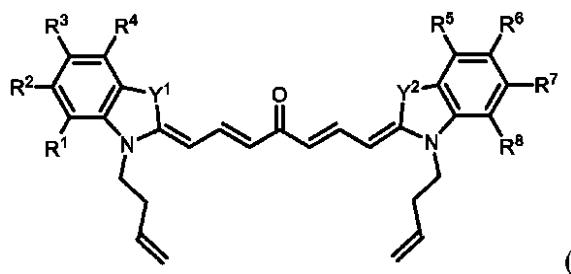
式Xによる化合物を含む溶液を、3-ブテン-1-イルトリフルオロメタンスルホネートと合わせて、式XIによる化合物を生成するステップと、

## 【化88】



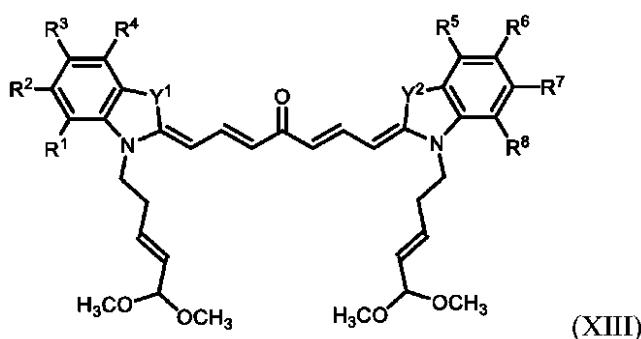
式Vによる化合物および式XIによる化合物を含む溶液[ここで、式Vおよび式XIによる化合物は、同じであっても異なっていてもよい]を、(1E, 4E)-1, 5-ビス(ジメチルアミノ)-ペンタ-1, 4-ジエン-3-オンと合わせて、式XIIによる化合物を生成するステップと、

## 【化 8 9】



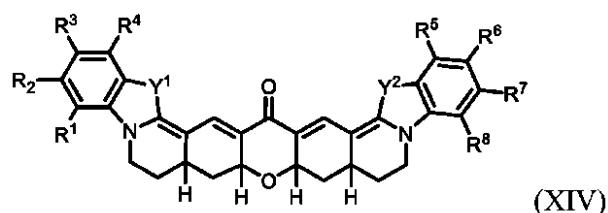
式 X II I による化合物を含む溶液を、ルテニウム触媒の存在下で、3 , 3 -ジメトキシ - 1 - プロパンと合わせて、式 X III I による化合物を提供するステップと、

## 【化 9 0】



式 X III I による化合物を、酸性化テトラヒドロフランの溶液と合わせて、式 X IV による化合物を提供するステップと

## 【化 9 1】

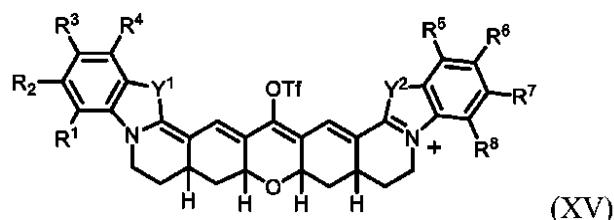


を含む、方法。

## 【請求項 1 4】

式 X IV による化合物を含む溶液を、トリフルオロメタンスルホン酸無水物 (Tf<sub>2</sub>O) と合わせて、式 X V による化合物を提供するステップ

## 【化 9 2】

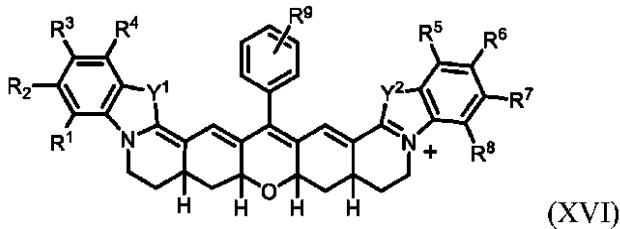


をさらに含む、請求項 1 3 に記載の方法。

## 【請求項 1 5】

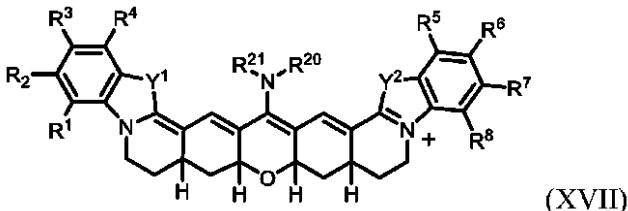
式 X V による化合物を含む溶液を、パラジウム触媒の存在下で、R<sup>g</sup>-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-B(OH)<sub>2</sub> と合わせて、式 X VI による化合物を提供するステップ

## 【化93】



[式中、R<sup>g</sup>は、R<sup>a</sup>、-COOR<sup>a</sup>、または-OR<sup>a</sup>であり、ここでR<sup>a</sup>は、H、重水素、アルキルまたはヘテロアルキルである]、あるいは  
式XVによる化合物を含む溶液を、式NH(R<sup>20</sup>)(R<sup>21</sup>)を有するアミンと合わせて、式XVIIによる化合物を提供するステップ

## 【化94】



(式中、R<sup>20</sup>およびR<sup>21</sup>は、独立に、H、重水素、アルキル、ヘテロアルキル、アリールまたはヘテロアリールである)  
をさらに含む、請求項14に記載の方法。

## 【請求項16】

方法における使用のための、R<sup>1</sup>～R<sup>11</sup>のうちの少なくとも1つが標的化剤を含む請求項1～10のいずれか一項に記載の化合物を含む医薬組成物であって、前記方法は、前記化合物を、前記標的化剤と結合することが可能である標的を含む試料と、前記標的化剤と前記標的を結合させるのに有効な条件下で合わせるステップと、前記標的に結合した前記化合物を可視化することによって、前記標的を画像化するステップであって、  
好ましくは前記化合物を可視化することが、可視または近赤外範囲の波長と選択された強度を有する所定量の光の標的化された適用により、前記試料に照射することであって、ここで、前記所定量の光は、前記化合物の蛍光を生じさせるのに十分であること、および前記化合物によって放出された任意の蛍光を検出することを含む、ステップを含む、医薬組成物。

## 【請求項17】

前記方法が、前記標的を画像化する前に、前記化合物を還元剤と合わせるステップをさらに含む、請求項16に記載の医薬組成物。

## 【請求項18】

前記試料が、対象内の標的領域であり、前記方法が、  
前記医薬組成物を、前記対象に投与するステップと、  
その後、前記対象の標的化部分に、前記量の光の標的化された適用によって、前記化合物に照射するステップと、  
前記対象の前記標的化部分における前記化合物からの任意の蛍光を検出するステップとをさらに含む、請求項16または請求項17に記載の医薬組成物。

## 【請求項19】

前記標的領域が、腫瘍部位であり、前記対象の前記標的化部分が、前記腫瘍部位を含み、前記方法が、前記対象の前記標的化部分における前記蛍光を検出した後に、前記対象から前記腫瘍の少なくとも一部を切除するステップをさらに含む、請求項18に記載の医薬組成物。

## 【請求項20】

活性酸素種を検出するための方法であって、

請求項 1 ~ 10 のいずれか一項による化合物を還元剤と合わせて、還元化合物を提供するステップと、

試料を前記還元化合物と接触させるステップであって、前記試料中に活性酸素種 (ROS) が存在する場合、それにより前記還元化合物が酸化されて、請求項 1 ~ 10 のいずれか一項による化合物が再生される、ステップと、

前記試料に、可視または近赤外範囲の波長と選択された強度を有する所定量の光を照射するステップであって、前記所定量の光は、前記ROSによって前記還元化合物が酸化され、請求項 1 ~ 10 のいずれか一項に記載の化合物が再生される場合に蛍光を生じさせるのに十分である、ステップと、

請求項 1 ~ 10 のいずれか一項に記載の化合物によって放出された任意の蛍光を検出するステップであって、ここで、蛍光は、前記試料中のROSの存在を示す、ステップとを含む、方法。

### 【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0219

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0219】

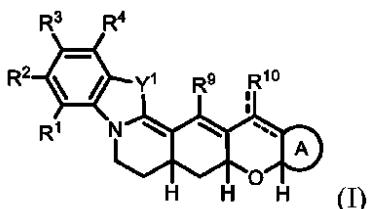
開示される発明の原理を適用することができる多くの実施形態が存在する可能性を考慮して、例示される実施形態は、単に本発明の好ましい例であり、本発明の範囲を制限すると解釈されるべきでないことを認識されたい。むしろ、本発明の範囲は、以下の特許請求の範囲によって定義される。したがって、本発明者らは、本発明のすべてがこれらの特許請求の範囲および趣旨に含まれることを主張する。

本発明は、例えば、以下の項目を提供する。

(項目 1)

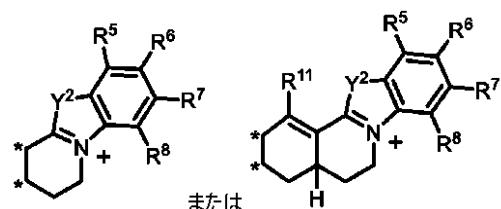
式 I :

【化75】



[式中、A は、

【化76】



であり、各「\*」は、A の結合点を示し、

【化77】

「-----」

によって表される結合は、原子価の要件を満たすために必要とされるように、単結合または二重結合であり、

R<sup>1</sup> ~ R<sup>9</sup> および R<sup>1~1</sup> は、独立に、H、スルホネート、-N(R<sup>a</sup>)<sub>2</sub>、重水素、アルキル、ヘテロアルキル、アルキルスルホネート、アミノアルキル、-C(O)OR<sup>a</sup>、トリチル、またはコンジュゲート可能な部分、標的化剤もしくは薬物を含む基であり、ここで、各 R<sup>a</sup> は、独立に、H、重水素、アルキル、またはヘテロアルキルであり、

R<sup>1~0</sup> は、H、重水素、O、アルキル、アリール、アミノ、スルホネート、トリフレート、-C(O)OR<sup>b</sup>、-OR<sup>b</sup>、-N(R<sup>b</sup>)<sub>2</sub>、ヘテロアルキル、ヘテロアリール、トリチル、またはコンジュゲート可能な部分、標的化剤もしくは薬物を含む基であり、ここで、各 R<sup>b</sup> は、独立に、H、重水素、アルキル、ヘテロアルキル、アリール、またはヘテロアリールであり、

Y<sup>1</sup> および Y<sup>2</sup> は、独立に、C(R<sup>c</sup>)<sub>2</sub>、N(R<sup>d</sup>)、S、O、またはSe であり、ここで、各 R<sup>c</sup> は、独立に、アルキル、H、重水素、-(OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>x</sub>OH [x は、2 の整数である]、トリチル、またはコンジュゲート可能な部分、標的化剤もしくは薬物を含む基であり、各 R<sup>d</sup> は、独立に、H、重水素、アルキル、またはヘテロアルキルである]

による化学構造を有する化合物、またはその立体異性体もしくは薬学的に許容される塩。

(項目 2)

R<sup>3</sup> および R<sup>6</sup> のうちの少なくとも 1 つが、スルホネート、-C(O)OR<sup>a</sup>、またはコンジュゲート可能な部分、標的化剤もしくは薬物を含む基である、項目 1 に記載の化合物。

(項目 3)

Y<sup>1</sup> および Y<sup>2</sup> が、C(R<sup>c</sup>)<sub>2</sub> であり、各 R<sup>c</sup> が、独立に、C<sub>1</sub> ~ C<sub>3</sub> アルキル、-(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>C(O)R<sup>e</sup>、または H であり、n が、1 の整数であり、R<sup>e</sup> が、コンジュゲート可能な部分、標的化剤または薬物である、項目 1 または項目 2 に記載の化合物。

(項目 4)

式中、

Y<sup>1</sup> および Y<sup>2</sup> が、C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> であり、または

R<sup>3</sup> および R<sup>6</sup> が、スルホネートであり、一方の R<sup>c</sup> が、-(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>C(O)R<sup>e</sup> である、項目 3 に記載の化合物。

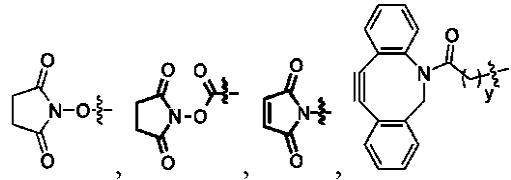
(項目 5)

R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>、R<sup>7</sup>、および R<sup>8</sup> が、H である、項目 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の化合物。

(項目 6)

前記コンジュゲート可能な部分が、

【化 78】

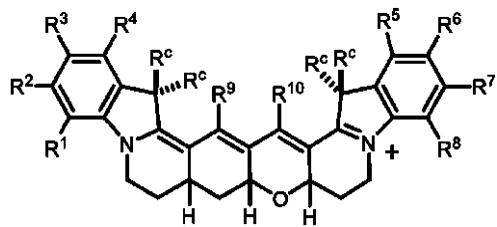


(式中、y は、1 の整数である)、またはホスホロアミダイト基である、項目 1 ~ 5 のいずれか一項に記載の化合物。

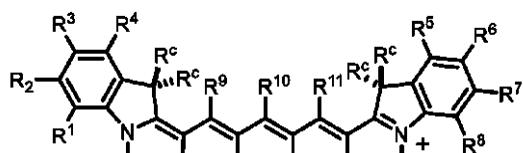
(項目 7)

式 I I または式 I I I :

## 【化79】



(II) または



(III)

による化学構造を有する、項目1～6のいずれか一項に記載の化合物。

## (項目8)

各R<sup>c</sup>が、-CH<sub>3</sub>であるか、

R<sup>3</sup>およびR<sup>6</sup>が、スルホネートであるか、

一方のR<sup>c</sup>が、コンジュゲート可能な部分、標的化剤または薬物を含む基であるか、または

R<sup>3</sup>およびR<sup>6</sup>が、スルホネートであり、一方のR<sup>c</sup>が、コンジュゲート可能な部分、標的化剤または薬物を含む基である、項目7に記載の化合物。

## (項目9)

前記化合物が、式I Iによる化学構造を有し、R<sup>1</sup>～R<sup>10</sup>が、Hであるか、

前記化合物が、式I Iによる化学構造を有し、R<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>が、Hであり、R<sup>3</sup>およびR<sup>6</sup>のうちの少なくとも1つが、コンジュゲート可能な部分、標的化剤もしくは薬物を含む基であるか、

前記化合物が、式I I Iによる化学構造を有し、R<sup>1</sup>～R<sup>9</sup>およびR<sup>11</sup>が、Hであり、R<sup>10</sup>が、H、O、トリフレート、アリール、-OR<sup>b</sup>もしくは-N(R<sup>b</sup>)<sub>2</sub>であるか、または

前記化合物が、式I I Iによる化学構造を有し、R<sup>9</sup>およびR<sup>11</sup>が、Hであり、R<sup>3</sup>、R<sup>6</sup>、およびR<sup>10</sup>のうちの少なくとも1つが、コンジュゲート可能な部分、標的化剤もしくは薬物を含む基である、項目7または項目8に記載の化合物。

## (項目10)

R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>、およびR<sup>7</sup>～R<sup>11</sup>が、Hであり、R<sup>3</sup>およびR<sup>6</sup>が、独立に、-SO<sub>3</sub>または-CO<sub>2</sub>R<sup>a</sup>である、項目7または8に記載の化合物。

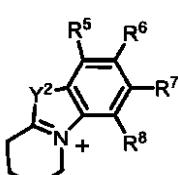
## (項目11)

項目1～10のいずれか一項に記載の化合物および薬学的に許容される担体を含む、医薬組成物。

## (項目12)

Aが

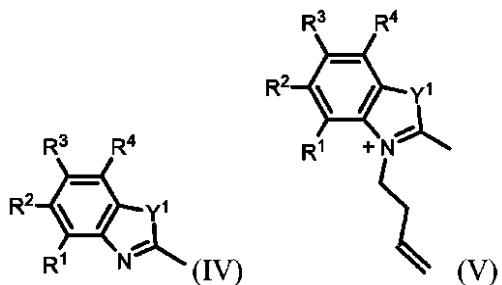
## 【化80】



である、項目1に記載の化合物を作製するための方法であって、

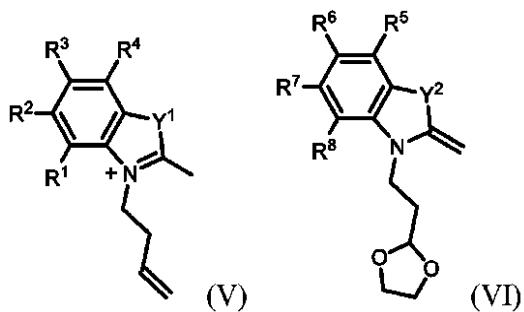
式I Vによる化合物を含む溶液を、3-ブテン-1-イルトリフルオロメタンスルホネートと合わせて、式Vによる化合物を生成するステップと、

## 【化 8 1】

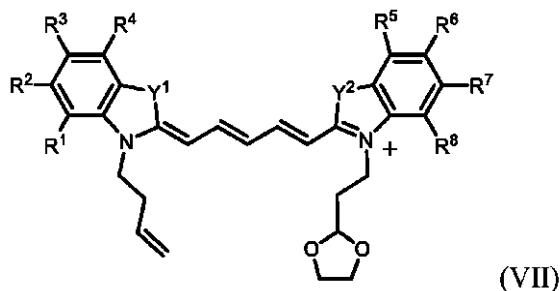


式 V による化合物および式 V I による化合物を含む溶液を、N - ((1 E , 3 Z) - 3 - (フェニルアミノ) プロパ - 1 - エン - 1 - イル) アニリンまたはN - ((1 E , 3 E) - 3 - (フェニルイミノ) プロパ - 1 - エン - 1 - イル) アニリンと合わせて、式 V I I による化合物を形成するステップと、

## 【化 8 2】

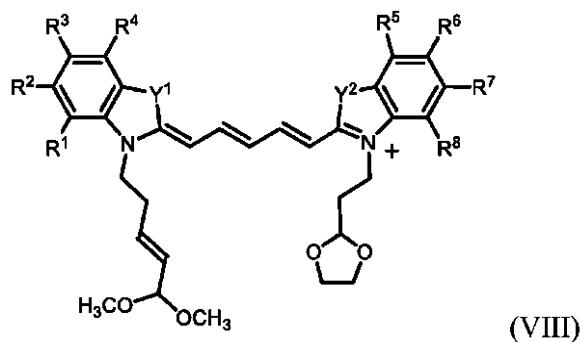


## 【化 8 3】



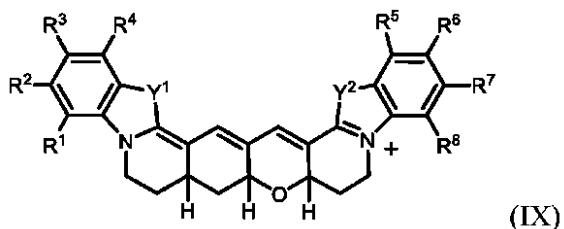
式 V I I による化合物を含む溶液を、ルテニウム触媒の存在下で、3 , 3 - ジメトキシ - 1 - プロパンと合わせて、式 V I I I による化合物を提供するステップと、

## 【化 8 4】



式 V I I I による化合物を、(i) 酸性化 C H C l<sub>3</sub> または (ii) C H<sub>2</sub> C l<sub>2</sub> 中 B B r<sub>3</sub> と合わせて、式 IX による化合物を提供するステップと

【化 8 5】

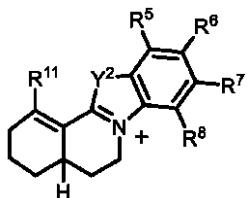


を含む、方法。

( 項目 1 3 )

A が

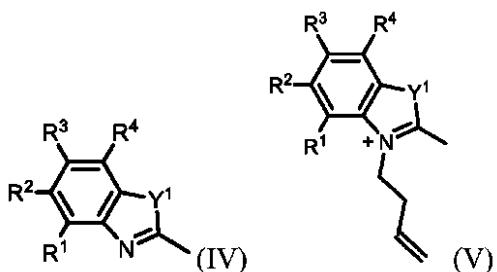
【化 8 6】



である、項目 1 に記載の化合物を作製するための方法であって、

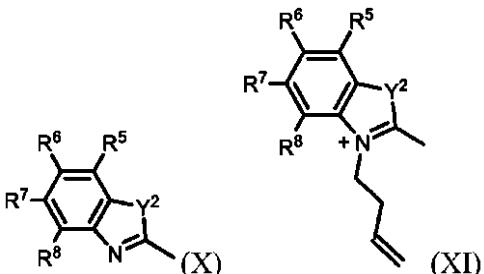
式IVによる化合物を含む溶液を、3-ブテン-1-イルトリフルオロメタンスルホネートと合わせて、式Vによる化合物を生成するステップと、

【化 8 7】



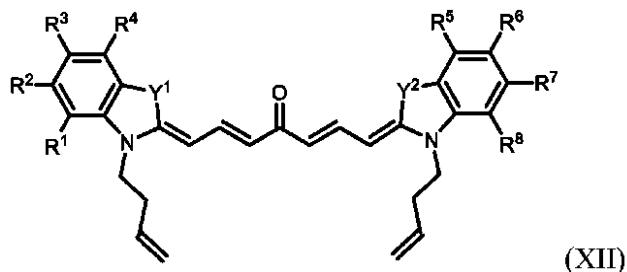
式 X による化合物を含む溶液を、3 - ブテン - 1 - イルトリフルオロメタンスルホネートと合わせて、式 X I による化合物を生成するステップと、

【化 8 8】



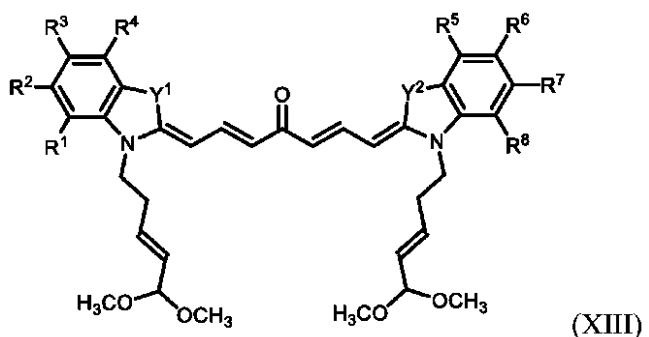
式 V による化合物および式 X I による化合物を含む溶液 [ ここで、式 V および式 X I による化合物は、同じであっても異なっていてもよい ] を、( 1 E , 4 E ) - 1 , 5 - ビス (ジメチルアミノ) - ペンタ - 1 , 4 - ジエン - 3 - オンと合わせて、式 X I I による化合物を生成するステップと、

## 【化 8 9】



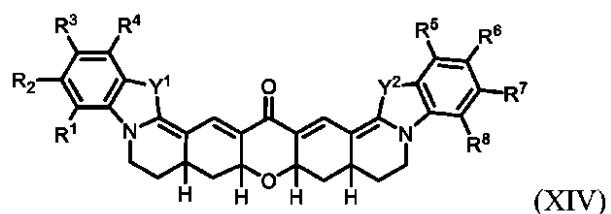
式 X II による化合物を含む溶液を、ルテニウム触媒の存在下で、3 , 3 -ジメトキシ -1 -プロパンと合わせて、式 X III による化合物を提供するステップと、

## 【化 9 0】



式 X II による化合物を、酸性化テトラヒドロフランの溶液と合わせて、式 X IV による化合物を提供するステップと

## 【化 9 1】

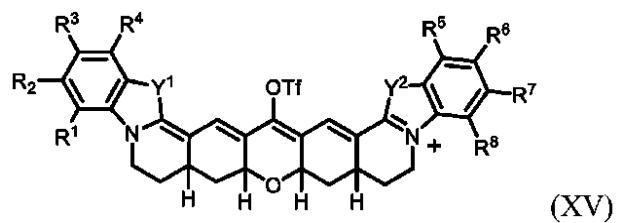


を含む、方法。

## (項目 1 4)

式 X IV による化合物を含む溶液を、トリフルオロメタンスルホン酸無水物 (Tf<sub>2</sub>O) と合わせて、式 X V による化合物を提供するステップ

## 【化 9 2】

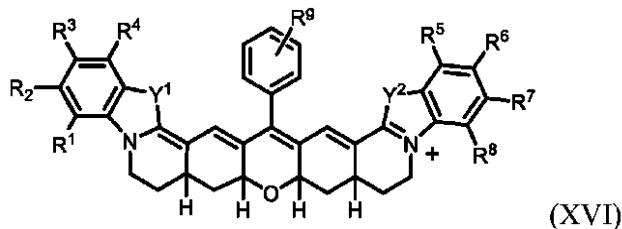


をさらに含む、項目 1 3 に記載の方法。

## (項目 1 5)

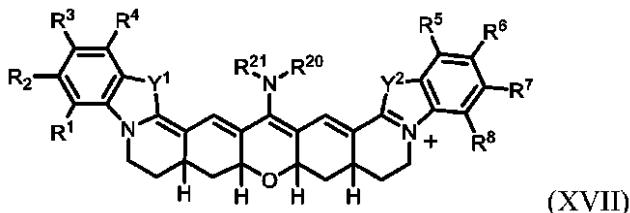
式 X V による化合物を含む溶液を、パラジウム触媒の存在下で、R<sup>g</sup> - C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> - B(OH)<sub>2</sub> と合わせて、式 X VI による化合物を提供するステップ

## 【化93】



[式中、R<sup>g</sup>は、R<sup>a</sup>、-COOR<sup>a</sup>、または-OR<sup>a</sup>であり、ここでR<sup>a</sup>は、H、重水素、アルキルまたはヘテロアルキルである]、あるいは  
式XVによる化合物を含む溶液を、式NH(R<sup>20</sup>)(R<sup>21</sup>)を有するアミンと合わせて、式XVIIによる化合物を提供するステップ

## 【化94】



(式中、R<sup>20</sup>およびR<sup>21</sup>は、独立に、H、重水素、アルキル、ヘテロアルキル、アリールまたはヘテロアリールである)  
をさらに含む、項目14に記載の方法。

## (項目16)

R<sup>1</sup>～R<sup>11</sup>の少なくとも1つが標的化剤を含む項目1～10のいずれか一項に記載の化合物を使用するための方法であって、前記化合物を、前記標的化剤と結合することが可能である標的を含む試料と、前記標的化剤と前記標的を結合させるのに有効な条件下で合わせるステップと、前記標的に結合した前記化合物を可視化することによって、前記標的を画像化するステップであって、好ましくは前記化合物を可視化することが、可視または近赤外範囲の波長と選択された強度を有する所定量の光の標的化された適用により、前記試料に照射することを含み、ここで、前記所定量の光は、前記化合物の蛍光を生じさせるのに十分であり、さらに、前記化合物によって放出された任意の蛍光を検出することを含む、ステップを含む、方法。

## (項目17)

前記標的を画像化する前に、前記化合物を還元剤と合わせるステップをさらに含む、項目16に記載の方法。

## (項目18)

前記試料が、対象内の標的領域であり、前記方法が、前記化合物、または前記化合物を含む医薬組成物を、前記対象に投与するステップと、その後、前記対象の標的化部分に、前記量の光の標的化された適用によって、前記化合物に照射するステップと、

前記対象の前記標的化部分における前記化合物からの任意の蛍光を検出するステップとをさらに含む、項目16または項目17に記載の方法。

## (項目19)

前記標的領域が、腫瘍部位であり、前記対象の前記標的化部分が、前記腫瘍部位を含み、前記方法が、前記対象の前記標的化部分における前記蛍光を検出した後に、前記対象から前記腫瘍の少なくとも一部を切除するステップをさらに含む、項目18に記載の方法。

## (項目20)

活性酸素種を検出するための方法であって、項目1～10のいずれか一項による化合物を還元剤と合わせて、還元化合物を提供するス

ステップと、

試料を前記還元化合物と接触させるステップであって、前記試料中に活性酸素種（ROS）が存在する場合、それにより前記還元化合物が酸化されて、項目1～10のいずれか一項による化合物が再生される、ステップと、

前記試料に、可視または近赤外範囲の波長と選択された強度を有する所定量の光を照射するステップであって、前記所定量の光は、前記ROSによって前記還元化合物が酸化され、項目1～10のいずれか一項に記載の化合物が再生される場合に蛍光を生じさせるのに十分である、ステップと、

項目1～10のいずれか一項に記載の化合物によって放出された任意の蛍光を検出するステップであって、ここで、蛍光は、前記試料中のROSの存在を示す、ステップとを含む、方法。