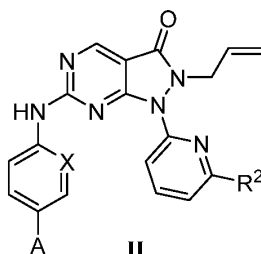


## 权利要求

1. 一种如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体：



其中，A 为被 1 个或 2 个  $R^1$  取代的  $C_3$ - $C_{20}$  环烷基；

X 为 CH 或 N；

$R^1$  独立地为卤素、 $-OR^{1-1}$ 、 $-SR^{1-2}$ 、 $-CN$ 、 $-NR^{1-3}R^{1-4}$ 、 $-C(=O)R^{1-5}$ 、 $-C(=NR^{1-6})R^{1-7}$ 、 $=N-O-R^{1-9}$ 、或、任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-8}$  取代的： $C_2$ - $C_7$  烯基、 $C_2$ - $C_8$  炔基、 $C_3$ - $C_{14}$  环烷基、 $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基、 $C_6$ - $C_{10}$  芳基或  $C_1$ - $C_7$  杂芳基；

$R^{1-1}$  独立地为任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-1-1}$  取代的： $C_1$ - $C_7$  烷基、 $C_2$ - $C_7$  烯基、 $C_2$ - $C_7$  炔基、 $C_3$ - $C_{14}$  环烷基、 $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基、 $C_6$ - $C_{10}$  芳基、或、 $C_1$ - $C_7$  杂芳基；

$R^{1-1-1}$  独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、 $C_1$ - $C_7$  烷基、 $C_1$ - $C_7$  烷氧基、 $C_1$ - $C_7$  烷硫基、 $C_2$ - $C_7$  烯基、 $C_2$ - $C_7$  炔基、 $C_3$ - $C_{14}$  环烷基、 $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基、 $C_6$ - $C_{10}$  芳基、 $C_1$ - $C_7$  杂芳基、或、被 1 个或 2 个  $R^{1-1-1-1}$  取代的氨基； $R^{1-1-1-1}$  独立地为  $C_1$ - $C_7$  烷基或  $C_3$ - $C_{14}$  环烷基；

$R^{1-2}$  独立地为氢、任选被 1、2 或 3 个  $R^{1-2-1}$  取代的： $C_1$ - $C_7$  烷基、 $C_2$ - $C_7$  烯基、 $C_2$ - $C_7$  炔基、 $C_3$ - $C_{14}$  环烷基、 $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基、 $C_6$ - $C_{10}$  芳基、或、 $C_1$ - $C_7$  杂芳基；

$R^{1-2-1}$  独立地为氢、卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、 $C_1$ - $C_7$  烷基、 $C_1$ - $C_7$  烷氧基、 $C_1$ - $C_7$  烷硫基、 $C_2$ - $C_7$  烯基、 $C_2$ - $C_7$  炔基、 $C_3$ - $C_{14}$  环烷基、 $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基、 $C_6$ - $C_{10}$  芳基、 $C_1$ - $C_7$  杂芳基、或、被 1 个或 2 个  $R^{1-2-1-1}$  取代的氨基； $R^{1-2-1-1}$  独立地为  $C_1$ - $C_7$  烷基或  $C_3$ - $C_{14}$  环烷基；

$R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、 $-S(=O)_2R^{1-3-1}$ 、 $-C(=O)R^{1-3-2}$ 、 $-C(=NR^{1-3-3})NR^{1-3-5}R^{1-3-6}$ 、 $-S(=O)_2NR^{1-3-7}R^{1-3-8}$ 、 $-C(=O)NR^{1-3-9}R^{1-3-10}$ 、或、任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-3-11}$  取代的： $C_1$ - $C_7$  烷基、 $C_2$ - $C_7$  烯基、 $C_2$ - $C_7$  炔基、 $C_3$ - $C_{14}$  环烷基、 $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基、 $C_6$ - $C_{10}$  芳基、或、 $C_1$ - $C_7$  杂芳基；

或者， $R^{1-3}$ 、 $R^{1-4}$  以及与其相连的氮原子共同形成任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-3-12}$  取

代的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基；所述的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基中的 1 个或 2 个以上的亚甲基任选地、独立地被氧原子、硫原子、亚磺酰基、磺酰基、羰基、亚乙烯基或-N(R<sup>1-3-13</sup>)-替换；R<sup>1-3-13</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-3-1</sup> 和 R<sup>1-3-2</sup> 独立地为任选被 1 个或 2 个 R<sup>1-3-1-1</sup> 取代的：C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基或 C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基；R<sup>1-3-1-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-3-3</sup> 独立地为氢、-CN、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-3-5</sup>、R<sup>1-3-6</sup>、R<sup>1-3-7</sup>、R<sup>1-3-8</sup>、R<sup>1-3-9</sup> 和 R<sup>1-3-10</sup> 独立地为氢、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

或者，R<sup>1-3-5</sup>、R<sup>1-3-6</sup> 以及与其相连的氮原子共同形成任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>1-3-5-1</sup> 取代的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基；所述的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基中的 1 个或 2 个以上的亚甲基任选地、独立地被氧原子、硫原子、亚磺酰基、磺酰基、羰基、亚乙烯基或-N(R<sup>1-3-5-2</sup>)-替换；R<sup>1-3-5-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；R<sup>1-3-5-2</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

或者，R<sup>1-3-7</sup>、R<sup>1-3-8</sup> 以及与其相连的氮原子共同形成任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>1-3-7-1</sup> 取代的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基；所述的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基中的 1 个或 2 个以上的亚甲基任选地、独立地被氧原子、硫原子、亚磺酰基、磺酰基、羰基、亚乙烯基或-N(R<sup>1-3-7-2</sup>)-替换；R<sup>1-3-7-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；R<sup>1-3-7-2</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

或者，R<sup>1-3-9</sup>、R<sup>1-3-10</sup> 以及与其相连的氮原子共同形成任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>1-3-9-1</sup> 取代的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基；所述的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基中的 1 个或 2 个以上的亚甲基任选地、独立地被氧原子、硫原子、亚磺酰基、磺酰基、羰基、亚乙烯基或-N(R<sup>1-3-9-2</sup>)-替换；R<sup>1-3-9-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；R<sup>1-3-9-2</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-3-11</sup> 独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷氧基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷硫基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基、或、被 1 个或 2 个 R<sup>1-3-11-1</sup> 取代的氨基；R<sup>1-3-11-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-3-12</sup> 独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷氧基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷硫基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基、或、被 1 个或 2 个 R<sup>1-3-12-1</sup> 取代的氨基；R<sup>1-3-12-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-5</sup> 独立地为氢、-NR<sup>1-5-1</sup>R<sup>1-5-2</sup>、-OR<sup>1-5-3</sup>、或、任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>1-5-4</sup> 取代的：C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基或、

或、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基；

R<sup>1-5-1</sup> 和 R<sup>1-5-2</sup> 独立地为氢、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、或、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

或者，R<sup>1-5-1</sup>、R<sup>1-5-2</sup> 以及与其相连的氮原子共同形成任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>1-5-1-1</sup> 取代的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基；所述的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基中的 1 个或 2 个以上的亚甲基任选地、独立地被氧原子、硫原子、亚磺酰基、磺酰基、羰基、亚乙烯基或-N(R<sup>1-5-1-2</sup>)-替换；R<sup>1-5-1-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；R<sup>1-5-1-2</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-5-3</sup> 独立地为氢、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基或 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基；

R<sup>1-5-4</sup> 独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷氧基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷硫基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基、或、被 1 个或 2 个 R<sup>1-5-4-1</sup> 取代的氨基；R<sup>1-5-4-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-6</sup> 独立地为氢、-CN、-OH、或、任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>1-6-1</sup> 取代的：C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基、或、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基；

R<sup>1-6-1</sup> 独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷氧基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷硫基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基、或、被 1 个或 2 个 R<sup>1-6-1-1</sup> 取代的氨基；R<sup>1-6-1-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-7</sup> 独立地为氢、-OR<sup>1-7-1</sup>、-NR<sup>1-7-2</sup>R<sup>1-7-3</sup>、或、任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>1-7-4</sup> 取代的：C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基、或、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基；

R<sup>1-7-1</sup> 独立地为氢、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基或 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基；

R<sup>1-7-2</sup> 和 R<sup>1-7-3</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、或、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

或者，R<sup>1-7-2</sup>、R<sup>1-7-3</sup> 以及与其相连的氮原子共同形成任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>1-7-2-1</sup> 取代的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基；所述的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基中的 1 个或 2 个以上的亚甲基任选地、独立地被氧原子、硫原子、亚磺酰基、磺酰基、羰基、亚乙烯基或-N(R<sup>1-7-2-2</sup>)-替换；R<sup>1-7-2-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；R<sup>1-7-2-2</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-7-4</sup> 独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷氧基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>

烷硫基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub>烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub>炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>芳基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>杂芳基、或、被1个或2个R<sup>1-7-4-1</sup>取代的氨基；R<sup>1-7-4-1</sup>独立地为C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>烷基或C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>环烷基；

R<sup>1-8</sup>独立地为氧代、卤素、-OH、氨基、巯基、氰基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>烷氧基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>烷硫基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub>烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub>炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>芳基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>杂芳基、或、被1个或2个R<sup>1-8-1</sup>取代的氨基；R<sup>1-8-1</sup>独立地为C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>烷基或C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>环烷基；

R<sup>1-9</sup>独立地为氢或C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>烷基；

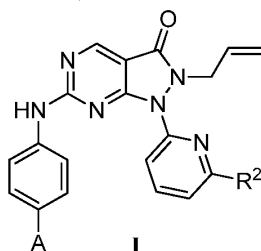
R<sup>2</sup>为-OR<sup>2-1</sup>、氰基、羧基、或、任选被1个、2个或3个R<sup>2-2</sup>取代的：C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub>烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>环烷基或C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>杂环烷基；

R<sup>2-1</sup>为C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub>烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub>炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>芳基或C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>杂芳基；

R<sup>2-2</sup>独立地为卤素、羟基、氨基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>环烷基或C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>杂环烷基；

以上任一种情况下，所述的C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>杂环烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>杂芳基中的杂原子独立地选自硼、硅、氧、硫、硒、氮和磷中的一种或多种；杂原子数独立地为1个、2个、3个或4个。

2. 如权利要求1所述的如式II所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体，其特征在于，其为如式I所示的吡唑酮并嘧啶类化合物：



其中，A为被1个或2个R<sup>1</sup>取代的C<sub>3</sub>~C<sub>20</sub>环烷基；

R<sup>1</sup>独立地为卤素、-OR<sup>1-1</sup>、-SR<sup>1-2</sup>、-CN、-NR<sup>1-3</sup>R<sup>1-4</sup>、-C(=O)R<sup>1-5</sup>、-C(=NR<sup>1-6</sup>)R<sup>1-7</sup>、或、任选被1个、2个或3个R<sup>1-8</sup>取代的：C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub>烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>8</sub>炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>芳基或C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>杂芳基；

R<sup>1-1</sup>独立地为任选被1个、2个或3个R<sup>1-1-1</sup>取代的：C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub>烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub>炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub>杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>芳基、或、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub>杂芳基；

$R^{1-1-1}$  独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、 $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_1\sim C_7$  烷氧基、 $C_1\sim C_7$  烷硫基、 $C_2\sim C_7$  烯基、 $C_2\sim C_7$  炔基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基、 $C_1\sim C_7$  杂芳基、或、被 1 个或 2 个  $R^{1-1-1-1}$  取代的氨基； $R^{1-1-1-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-2}$  独立地为氢、任选被 1、2 或 3 个  $R^{1-2-1}$  取代的： $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_2\sim C_7$  烯基、 $C_2\sim C_7$  炔基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基、或、 $C_1\sim C_7$  杂芳基；

$R^{1-2-1}$  独立地为氢、卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、 $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_1\sim C_7$  烷氧基、 $C_1\sim C_7$  烷硫基、 $C_2\sim C_7$  烯基、 $C_2\sim C_7$  炔基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基、 $C_1\sim C_7$  杂芳基、或、被 1 个或 2 个  $R^{1-2-1-1}$  取代的氨基； $R^{1-2-1-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、 $-S(=O)_2R^{1-3-1}$ 、 $-C(=O)R^{1-3-2}$ 、 $-C(=NR^{1-3-3})NR^{1-3-5}R^{1-3-6}$ 、 $-S(=O)_2NR^{1-3-7}R^{1-3-8}$ 、 $-C(=O)NR^{1-3-9}R^{1-3-10}$ 、或、任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-3-11}$  取代的： $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_2\sim C_7$  烯基、 $C_2\sim C_7$  炔基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基、或、 $C_1\sim C_7$  杂芳基；

或者， $R^{1-3}$ 、 $R^{1-4}$  以及与其相连的氮原子共同形成任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-3-12}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基；所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基中的 1 个或 2 个以上的亚甲基任选地、独立地被氧原子、硫原子、亚磺酰基、磺酰基、羰基、亚乙烯基或  $-N(R^{1-3-13})$ - 替换； $R^{1-3-13}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-3-1}$  和  $R^{1-3-2}$  独立地为任选被 1 个或 2 个  $R^{1-3-1-1}$  取代的： $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_2\sim C_7$  烯基、 $C_2\sim C_7$  炔基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基或  $C_6\sim C_{10}$  芳基； $R^{1-3-1-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-3-3}$  独立地为氢、 $-CN$ 、 $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_2\sim C_7$  烯基、 $C_2\sim C_7$  炔基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-3-5}$ 、 $R^{1-3-6}$ 、 $R^{1-3-7}$ 、 $R^{1-3-8}$ 、 $R^{1-3-9}$  和  $R^{1-3-10}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_2\sim C_7$  烯基、 $C_2\sim C_7$  炔基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

或者， $R^{1-3-5}$ 、 $R^{1-3-6}$  以及与其相连的氮原子共同形成任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-3-5-1}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基；所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基中的 1 个或 2 个以上的亚甲基任选地、独立地被氧原子、硫原子、亚磺酰基、磺酰基、羰基、亚乙烯基或  $-N(R^{1-3-5-2})$ - 替换； $R^{1-3-5-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基； $R^{1-3-5-2}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

或者， $R^{1-3-7}$ 、 $R^{1-3-8}$  以及与其相连的氮原子共同形成任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-3-7-1}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基；所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基中的 1 个或 2 个以上的亚甲基任选地、独立地被氧原子、硫原子、亚磺酰基、磺酰基、羰基、亚乙烯基或  $-N(R^{1-3-7-2})$ - 替换； $R^{1-3-7-1}$

独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；R<sup>1-3-7-2</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

或者，R<sup>1-3-9</sup>、R<sup>1-3-10</sup> 以及与其相连的氮原子共同形成任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>1-3-9-1</sup> 取代的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基；所述的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基中的 1 个或 2 个以上的亚甲基任选地、独立地被氧原子、硫原子、亚磺酰基、磺酰基、羰基、亚乙烯基或-N(R<sup>1-3-9-2</sup>)-替换；R<sup>1-3-9-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；R<sup>1-3-9-2</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-3-11</sup> 独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷氧基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷硫基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基、或、被 1 个或 2 个 R<sup>1-3-11-1</sup> 取代的氨基；R<sup>1-3-11-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-3-12</sup> 独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷氧基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷硫基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基、或、被 1 个或 2 个 R<sup>1-3-12-1</sup> 取代的氨基；R<sup>1-3-12-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-5</sup> 独立地为氢、-NR<sup>1-5-1</sup>R<sup>1-5-2</sup>、-OR<sup>1-5-3</sup>、或、任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>1-5-4</sup> 取代的：C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基或、或、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基；

R<sup>1-5-1</sup> 和 R<sup>1-5-2</sup> 独立地为氢、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、或、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

或者，R<sup>1-5-1</sup>、R<sup>1-5-2</sup> 以及与其相连的氮原子共同形成任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>1-5-1-1</sup> 取代的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基；所述的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基中的 1 个或 2 个以上的亚甲基任选地、独立地被氧原子、硫原子、亚磺酰基、磺酰基、羰基、亚乙烯基或-N(R<sup>1-5-1-2</sup>)-替换；R<sup>1-5-1-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；R<sup>1-5-1-2</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-5-3</sup> 独立地为氢、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基或 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基；

R<sup>1-5-4</sup> 独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷氧基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷硫基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基、或、被 1 个或 2 个 R<sup>1-5-4-1</sup> 取代的氨基；R<sup>1-5-4-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-6</sup> 独立地为氢、-CN、-OH、或、任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>1-6-1</sup> 取代的：C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烯基、C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 炔基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基、或、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基；

$R^{1-6-1}$  独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、 $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_1\sim C_7$  烷氧基、 $C_1\sim C_7$  烷硫基、 $C_2\sim C_7$  烯基、 $C_2\sim C_7$  炔基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基、 $C_1\sim C_7$  杂芳基、或、被 1 个或 2 个  $R^{1-6-1-1}$  取代的氨基； $R^{1-6-1-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-7}$  独立地为氢、 $-OR^{1-7-1}$ 、 $-NR^{1-7-2}R^{1-7-3}$ 、或、任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-7-4}$  取代的： $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_2\sim C_7$  烯基、 $C_2\sim C_7$  炔基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基、或、 $C_1\sim C_7$  杂芳基；

$R^{1-7-1}$  独立地为氢、 $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_2\sim C_7$  烯基、 $C_2\sim C_7$  炔基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基或  $C_1\sim C_7$  杂芳基；

$R^{1-7-2}$  和  $R^{1-7-3}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_2\sim C_7$  烯基、 $C_2\sim C_7$  炔基、或、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

或者， $R^{1-7-2}$ 、 $R^{1-7-3}$  以及与其相连的氮原子共同形成任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-7-2-1}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基；所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基中的 1 个或 2 个以上的亚甲基任选地、独立地被氧原子、硫原子、亚磺酰基、磺酰基、羰基、亚乙烯基或  $-N(R^{1-7-2-2})$ - 替换； $R^{1-7-2-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基； $R^{1-7-2-2}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-7-4}$  独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、 $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_1\sim C_7$  烷氧基、 $C_1\sim C_7$  烷硫基、 $C_2\sim C_7$  烯基、 $C_2\sim C_7$  炔基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基、 $C_1\sim C_7$  杂芳基、或、被 1 个或 2 个  $R^{1-7-4-1}$  取代的氨基； $R^{1-7-4-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-8}$  独立地为卤素、 $-OH$ 、氨基、巯基、氰基、 $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_1\sim C_7$  烷氧基、 $C_1\sim C_7$  烷硫基、 $C_2\sim C_7$  烯基、 $C_2\sim C_7$  炔基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基、 $C_1\sim C_7$  杂芳基、或、被 1 个或 2 个  $R^{1-8-1}$  取代的氨基； $R^{1-8-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^2$  为  $-OR^{2-1}$ 、氰基、羧基、或、任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{2-2}$  取代的： $C_2\sim C_7$  烷基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基；

$R^{2-1}$  为  $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_2\sim C_7$  烯基、 $C_2\sim C_7$  炔基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基或  $C_1\sim C_7$  杂芳基；

$R^{2-2}$  独立地为卤素、羟基、氨基、 $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_1\sim C_7$  烷氧基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基；

以上任一种情况下，所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_1\sim C_7$  杂芳基中的杂原子独立地选自硼、硅、氧、硫、硒、氮和磷中的一种或多种；杂原子数独立地为 1 个、2 个、3 个或 4 个。

3. 如权利要求 1 或 2 所述的如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体，其特征在于，当 A 为被 1 个或 2 个  $R^1$  取代的  $C_3\sim C_{20}$  环烷基时，所述的  $C_3\sim C_{20}$  环烷基为  $C_3\sim C_{20}$  单环环烷基、 $C_3\sim C_{20}$  螺环环烷基、 $C_3\sim C_{20}$  稠环环烷基或  $C_3\sim C_{20}$  桥环环烷基；

和/或，当 A 为被 1 个或 2 个  $R^1$  取代的  $C_3\sim C_{20}$  环烷基时，所述的  $C_3\sim C_{20}$  环烷基为  $C_3\sim C_{20}$  饱和环烷基；

和/或，当  $R^1$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基时，所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  螺环杂环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  稠环杂环烷基或  $C_3\sim C_{14}$  桥环杂环烷基；

和/或，当  $R^1$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基时，所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基的杂原子上无取代；

和/或，当  $R^1$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基时，所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基中的亚甲基不被替代；

和/或，当  $R^1$  独立地为被 1 个  $R^{1-8}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基时，所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  螺环杂环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  稠环杂环烷基或  $C_3\sim C_{14}$  桥环杂环烷基；

和/或，当  $R^1$  独立地为被 1 个  $R^{1-8}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基时，除  $R^{1-8}$  外，所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基的杂原子上无取代；

和/或，当  $R^1$  独立地为被 1 个  $R^{1-8}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基时，所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基中的亚甲基不被替代；

和/或，当  $R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基时，所述的  $C_1\sim C_7$  烷基为  $C_1\sim C_3$  烷基；

和/或，当  $R^{1-3-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基时，所述的  $C_1\sim C_7$  烷基为  $C_1\sim C_3$  烷基；

和/或，当  $R^{1-3-2}$  为  $C_3\sim C_{14}$  环烷基时，所述的  $C_3\sim C_{14}$  环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  螺环环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  稠环环烷基或  $C_3\sim C_{14}$  桥环环烷基；

和/或，当  $R^{1-3-2}$  为  $C_3\sim C_{14}$  环烷基时，所述的  $C_3\sim C_{14}$  环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  饱和环烷基；

和/或，当  $R^{1-5}$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基时，所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  螺环杂环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  稠环杂环烷基或  $C_3\sim C_{14}$  桥环杂环烷基；

和/或，当  $R^{1-5}$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基时，所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基的杂原子上无取代；

和/或，当  $R^{1-5}$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基时，所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基中的亚甲基不被替代；

和/或，当  $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基时，所述的  $C_1\sim C_7$  烷基为  $C_1\sim C_3$  烷基；

和/或, 当  $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  螺环环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  稠环环烷基或  $C_3\sim C_{14}$  桥环环烷基;

和/或, 当  $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  饱和环烷基;

和/或, 当  $R^{1-5-3}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基时, 所述的  $C_1\sim C_7$  烷基为  $C_1\sim C_3$  烷基;

和/或, 当  $R^{1-9}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基时, 所述的  $C_1\sim C_7$  烷基为  $C_1\sim C_3$  烷基;

和/或, 当  $R^2$  为任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{2-2}$  取代的  $C_2\sim C_7$  烷基时, 所述的  $C_2\sim C_7$  烷基为  $C_2\sim C_4$  烷基;

和/或, 当  $R^2$  为任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{2-2}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  螺环杂环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  稠环杂环烷基或  $C_3\sim C_{14}$  桥环杂环烷基;

和/或, 当  $R^2$  为任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{2-2}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基时, 除  $R^{2-2}$  外, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基的杂原子上无取代;

和/或, 当  $R^2$  为任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{2-2}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基中的亚甲基不被替代;

和/或, 所述的如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物中的各异构体的比例均等;

和/或, 所述的如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体中的原子均以其天然丰度的形式存在。

4. 如权利要求 3 所述的如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体, 其特征在于, 当 A 为被 1 个或 2 个  $R^1$  取代的  $C_3\sim C_{20}$  环烷基、所述的  $C_3\sim C_{20}$  环烷基为  $C_3\sim C_{20}$  单环环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{20}$  单环环烷基为  $C_3\sim C_6$  单环环烷基;

和/或, 当 A 为被 1 个或 2 个  $R^1$  取代的  $C_3\sim C_{20}$  环烷基、 $C_3\sim C_{20}$  环烷基为  $C_3\sim C_{20}$  桥环环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{20}$  桥环环烷基为  $C_5\sim C_8$  桥环环烷基;

和/或, 当  $R^1$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基为“杂原子数为 1 个或 2 个, 杂原子选自 N、O 和 S 中的一种或两种的  $C_3\sim C_9$  单环杂环烷基”;

和/或, 当  $R^1$  独立地为被 1 个  $R^{1-8}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基为“杂原子数为 1 个或 2 个, 杂原子选自 N、O 和 S 中的一种或两种的  $C_3\sim C_9$  单环杂环烷基”;

和/或, 当  $R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基时, 所述的  $C_1\sim C_7$  烷基为甲基、乙基、正丙基或异丙基;

和/或, 当  $R^{1-3-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基时, 所述的  $C_1\sim C_7$  烷基为甲基、乙基、正丙基或异丙基;

和/或, 当  $R^{1-3-2}$  为  $C_3\sim C_{14}$  环烷基、所述的  $C_3\sim C_{14}$  环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  单环环烷基为  $C_3\sim C_6$  单环环烷基;

和/或, 当  $R^{1-5}$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基为“杂原子数为 1 个或 2 个, 杂原子选自 N、O 和 S 中的一种或两种的  $C_3\sim C_9$  单环杂环烷基”;

和/或, 当  $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基时, 所述的  $C_1\sim C_7$  烷基为甲基、乙基、正丙基或异丙基;

和/或, 当  $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  环烷基、所述的  $C_3\sim C_{14}$  环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  单环环烷基为  $C_3\sim C_6$  单环环烷基;

和/或, 当  $R^{1-5-3}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基时, 所述的  $C_1\sim C_7$  烷基为甲基、乙基、正丙基或异丙基;

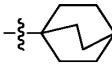
和/或, 当  $R^2$  为任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{2-2}$  取代的  $C_2\sim C_7$  烷基时, 所述的  $C_2\sim C_7$  烷基为乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基或叔丁基;

和/或, 当  $R^2$  为任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{2-2}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基为“杂原子数为 1 个或 2 个, 杂原子选自 N、O 和 S 中的一种或两种的  $C_3\sim C_9$  单环杂环烷基”;

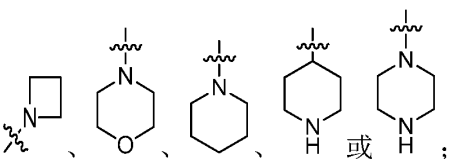
和/或, 所述的如式 I 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物中的各异构体的比例均等;

和/或, 所述的如式 I 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体中的原子均以其天然丰度的形式存在。

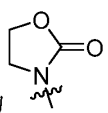
5. 如权利要求 4 所述的如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体, 其特征在于, 当 A 为被 1 个或 2 个  $R^1$  取代的  $C_3\sim C_{20}$  环烷基、所述的  $C_3\sim C_{20}$  环烷基为  $C_3\sim C_{20}$  单环环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{20}$  单环环烷基为环丙基、环丁基、环戊基或环己基;

和/或, 当 A 为被 1 个或 2 个  $R^1$  取代的  $C_3\sim C_{20}$  环烷基、 $C_3\sim C_{20}$  环烷基为  $C_3\sim C_{20}$  桥环环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{20}$  桥环环烷基为  或 ;

和/或, 当  $R^1$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环

烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基为  ;

和/或, 当  $R^1$  独立地为被 1 个  $R^{1-8}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基时, 所述的被 1 个  $R^{1-8}$  取

代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基为  ;

和/或, 当  $R^{1-3-2}$  为  $C_3\sim C_{14}$  环烷基、所述的  $C_3\sim C_{14}$  环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  单环环烷基为环丙基、环丁基、环戊基或环己基;

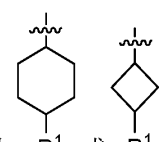
和/或, 当  $R^{1-5}$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环杂

环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基为  ;

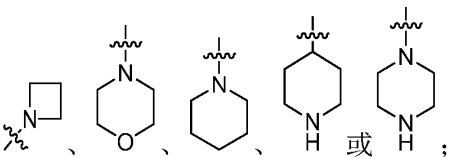
和/或, 当  $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  环烷基、所述的  $C_3\sim C_{14}$  环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  单环环烷基为环丙基、环丁基、环戊基或环己基;

和/或, 当  $R^2$  为任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{2-2}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基为氧杂环丁-3-基。

6. 如权利要求 1 或 2 所述的如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体, 其特

征在于, 当 A 为被 1 个  $R^1$  取代的  $C_3\sim C_{20}$  环烷基时, 所述的 A 为   $R^1$  或  $R^1$  ;

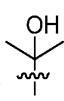
和/或, 当  $R^1$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环

烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基为  ;

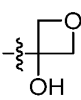
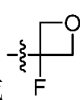
和/或, 当  $R^{1-5}$  独立地为  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基为  $C_3\sim C_{14}$  单环杂

环烷基时, 所述的  $C_3\sim C_{14}$  单环杂环烷基为  ;

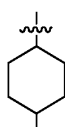
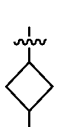
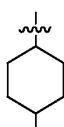
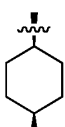
和/或, 当  $R^2$  为被 1 个  $R^{2-2}$  取代的  $C_2\sim C_7$  烷基、 $R^{2-2}$  为羟基时, 所述的被 1 个  $R^{2-2}$  取

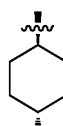
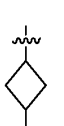
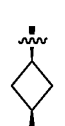
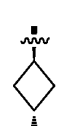
代的 C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烷基为  ;

和/或, 当 R<sup>2-2</sup> 为被 1 个 R<sup>2-2</sup> 取代的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、R<sup>2-2</sup> 为卤素或羟基时, 所述的被

1 个 R<sup>2-2</sup> 取代的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基为  或  。

7. 如权利要求 6 所述的如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体, 其特征在于,

当 A 为被 1 个 R<sup>1</sup> 取代的 C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub> 环烷基时, 所述的 A 为  或  , 所述的  为  R<sup>1</sup>

和/或  R<sup>1</sup> , 所述的  R<sup>1</sup> 为  R<sup>1</sup> 和/或  R<sup>1</sup> 。

8. 如权利要求 1 或 2 所述的如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体, 其特征在于, A 为被 1 个 R<sup>1</sup> 取代的 C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub> 环烷基;

和/或, X 为 N;

和/或, R<sup>1</sup> 独立地为氰基、卤素、-NR<sup>1-3</sup>R<sup>1-4</sup>、-C(=O)R<sup>1-5</sup>、-C(=NR<sup>1-6</sup>)R<sup>1-7</sup>、=N-O-R<sup>1-9</sup>、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基或任选被 1 个 R<sup>1-8</sup> 取代的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基;

和/或, R<sup>1-3</sup> 和 R<sup>1-4</sup> 独立地为氢、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>1-3-1</sup>、-C(=O)R<sup>1-3-2</sup>、-C(=NR<sup>1-3-3</sup>)NR<sup>1-3-5</sup>R<sup>1-3-6</sup>、或 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基; R<sup>1-3-1</sup> 和 R<sup>1-3-2</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、或、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基; R<sup>1-3-3</sup> 为氢; R<sup>1-3-5</sup> 和 R<sup>1-3-6</sup> 为氢;

和/或, R<sup>1-5</sup> 独立地为-NR<sup>1-5-1</sup>R<sup>1-5-2</sup>、-OR<sup>1-5-3</sup> 或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基; R<sup>1-5-1</sup> 和 R<sup>1-5-2</sup> 独立地为氢、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基; R<sup>1-5-3</sup> 独立地为氢或 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基;

和/或, R<sup>1-8</sup> 独立地为氧代;

和/或, R<sup>2</sup> 为任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>2-2</sup> 取代的: C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基; R<sup>2-2</sup> 独立地为卤素或羟基。

9. 如权利要求 1 或 2 所述的如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体, 其特

征在于, A 为被 1 个  $R^1$  取代的  $C_3$ - $C_{20}$  环烷基;

和/或,  $R^1$  独立地为氰基、卤素、 $-NR^{1-3}R^{1-4}$ 、 $-C(=O)R^{1-5}$ 、 $-C(=NR^{1-6})R^{1-7}$ 、 $C_1$ - $C_7$  杂芳基或  $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基;

和/或,  $R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、 $-S(=O)_2R^{1-3-1}$  或  $C_1$ - $C_7$  烷基;  $R^{1-3-1}$  独立地为  $C_1$ - $C_7$  烷基;

和/或,  $R^{1-5}$  独立地为  $-NR^{1-5-1}R^{1-5-2}$ 、 $-OR^{1-5-3}$  或  $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基;  $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为氢、 $C_1$ - $C_7$  烷基或  $C_3$ - $C_{14}$  环烷基;  $R^{1-5-3}$  独立地为氢或  $C_1$ - $C_7$  烷基;

和/或,  $R^2$  为任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{2-2}$  取代的:  $C_2$ - $C_7$  烷基、 $C_3$ - $C_{14}$  环烷基或  $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基;  $R^{2-2}$  独立地为卤素或羟基。

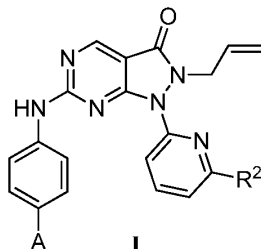
10. 如权利要求 9 所述的如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体, 其特征在于,  $R^1$  独立地为  $-NR^{1-3}R^{1-4}$ 、 $-C(=O)R^{1-5}$  或  $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基;

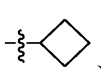
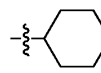
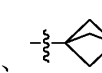
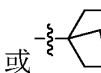
和/或,  $R^{1-5}$  独立地为  $-NR^{1-5-1}R^{1-5-2}$ 、 $-OR^{1-5-3}$  或  $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基;  $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为氢、 $C_1$ - $C_7$  烷基或  $C_3$ - $C_{14}$  环烷基;  $R^{1-5-3}$  为氢;

和/或,  $R^2$  为被 1 个  $R^{2-2}$  取代的:  $C_2$ - $C_7$  烷基或  $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基;  $R^{2-2}$  为卤素或羟基。

11. 如权利要求 1 或 2 所述的如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体, 其特征在于, 所述的如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物的定义为如下任一方案:

方案 (1):



A 为被 1 个或 2 个  $R^1$  取代的 、、 或 ;

$R^1$  独立地为卤素、 $-CN$ 、 $-NR^{1-3}R^{1-4}$ 、 $-C(=O)R^{1-5}$ 、 $-C(=NR^{1-6})R^{1-7}$ 、或、任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-8}$  取代的:  $C_3$ - $C_{14}$  环烷基、 $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基、 $C_6$ - $C_{10}$  芳基或  $C_1$ - $C_7$  杂芳基;

$R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、 $-S(=O)_2R^{1-3-1}$ 、 $-C(=O)R^{1-3-2}$ 、 $-C(=NR^{1-3-3})NR^{1-3-5}R^{1-3-6}$ 、 $-S(=O)_2NR^{1-3-7}R^{1-3-8}$ 、 $-C(=O)NR^{1-3-9}R^{1-3-10}$ 、或、任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-3-11}$  取代的:  $C_1$ - $C_7$  烷基、 $C_3$ - $C_{14}$  环烷基、 $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基、 $C_6$ - $C_{10}$  芳基、或、 $C_1$ - $C_7$  杂芳基;

$R^{1-3-1}$  和  $R^{1-3-2}$  独立地为任选被 1 个或 2 个  $R^{1-3-1-1}$  取代的:  $C_1$ - $C_7$  烷基、 $C_3$ - $C_{14}$  环烷基、

C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基或 C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基；R<sup>1-3-1-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基；

R<sup>1-3-3</sup> 独立地为氢；

R<sup>1-3-5</sup>、R<sup>1-3-6</sup>、R<sup>1-3-7</sup>、R<sup>1-3-8</sup>、R<sup>1-3-9</sup> 和 R<sup>1-3-10</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-3-11</sup> 独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷氧基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷硫基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基、或、被 1 个或 2 个 R<sup>1-3-11-1</sup> 取代的氨基；R<sup>1-3-11-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-5</sup> 独立地为氢、-NR<sup>1-5-1</sup>R<sup>1-5-2</sup>、-OR<sup>1-5-3</sup>、或、任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>1-5-4</sup> 取代的：C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基或、或、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基；

R<sup>1-5-1</sup> 和 R<sup>1-5-2</sup> 独立地为氢、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-5-3</sup> 独立地为氢、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基或 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基；

R<sup>1-5-4</sup> 独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷氧基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷硫基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基、或、被 1 个或 2 个 R<sup>1-5-4-1</sup> 取代的氨基；R<sup>1-5-4-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>1-6</sup> 独立地为氢、-CN、-OH；

R<sup>1-7</sup> 独立地为氢、-NR<sup>1-7-2</sup>R<sup>1-7-3</sup>；

R<sup>1-7-2</sup> 和 R<sup>1-7-3</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

或者，R<sup>1-7-2</sup>、R<sup>1-7-3</sup> 以及与其相连的氮原子共同形成任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>1-7-2-1</sup> 取代的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基；所述的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基中的 1 个或 2 个以上的亚甲基任选地、独立地被氧原子、硫原子替换；R<sup>1-7-2-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

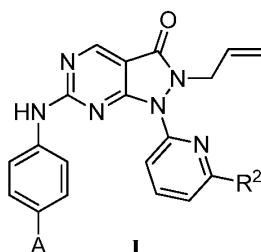
R<sup>1-8</sup> 独立地为卤素、-OH、氨基、巯基、氰基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷氧基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷硫基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub> 芳基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基、或、被 1 个或 2 个 R<sup>1-8-1</sup> 取代的氨基；R<sup>1-8-1</sup> 独立地为 C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基；

R<sup>2</sup> 为任选被 1 个、2 个或 3 个 R<sup>2-2</sup> 取代的：C<sub>2</sub>~C<sub>7</sub> 烷基、C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 环烷基或 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基；

R<sup>2-2</sup> 独立地为卤素或羟基；

以上任一种情况下，所述的 C<sub>3</sub>~C<sub>14</sub> 杂环烷基、C<sub>1</sub>~C<sub>7</sub> 杂芳基中的杂原子独立地选自硼、硅、氧、硫、硒、氮和磷中的一种或多种；杂原子数独立地为 1 个、2 个、3 个或 4 个；

方案 (2)：



A 为被 1 个或 2 个  $R^1$  取代的  $C_3$ - $C_{20}$  环烷基；

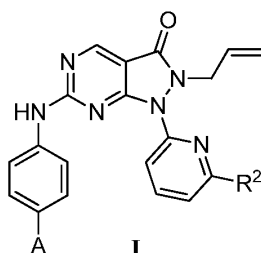
$R^1$  独立地为氰基、卤素、 $-NR^{1-3}R^{1-4}$ 、 $-C(=O)R^{1-5}$ 、 $-C(=NR^{1-6})R^{1-7}$ 、 $C_1$ - $C_7$  杂芳基或  $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基；

$R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、 $-S(=O)_2R^{1-3-1}$  或  $C_1$ - $C_7$  烷基； $R^{1-3-1}$  独立地为  $C_1$ - $C_7$  烷基；

$R^{1-5}$  独立地为  $-NR^{1-5-1}R^{1-5-2}$ 、 $-OR^{1-5-3}$  或  $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基； $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为氢、 $C_1$ - $C_7$  烷基或  $C_3$ - $C_{14}$  环烷基； $R^{1-5-3}$  独立地为氢或  $C_1$ - $C_7$  烷基；

$R^2$  为被 1 个  $R^{2-2}$  取代的： $C_2$ - $C_7$  烷基或  $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基； $R^{2-2}$  为卤素或羟基；

方案 (3)：



A 为被 1 个  $R^1$  取代的  $C_3$ - $C_{20}$  环烷基；

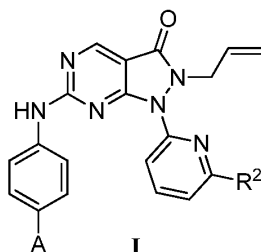
$R^1$  为  $-NR^{1-3}R^{1-4}$ 、 $-C(=O)R^{1-5}$  或  $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基；

$R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、 $-S(=O)_2R^{1-3-1}$  或  $C_1$ - $C_7$  烷基； $R^{1-3-1}$  独立地为  $C_1$ - $C_7$  烷基；

$R^{1-5}$  为  $-NR^{1-5-1}R^{1-5-2}$ 、 $-OR^{1-5-3}$  或  $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基； $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为氢、 $C_1$ - $C_7$  烷基或  $C_3$ - $C_{14}$  环烷基； $R^{1-5-3}$  为氢或  $C_1$ - $C_7$  烷基；

$R^2$  为被 1 个  $R^{2-2}$  取代的： $C_2$ - $C_7$  烷基或  $C_3$ - $C_{14}$  杂环烷基； $R^{2-2}$  为羟基；

方案 (4)：



A 为被 1 个  $R^1$  取代的  $C_3$ - $C_{20}$  环烷基；

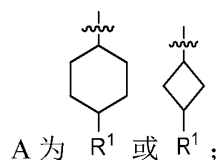
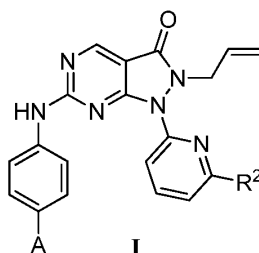
$R^1$  为  $-NR^{1-3}R^{1-4}$ 、 $-C(=O)R^{1-5}$  或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基；

$R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、 $-S(=O)_2R^{1-3-1}$  或  $C_1\sim C_7$  烷基； $R^{1-3-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基；

$R^{1-5}$  为  $-NR^{1-5-1}R^{1-5-2}$ 、 $-OR^{1-5-3}$  或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基； $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为氢、 $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基； $R^{1-5-3}$  为氢；

$R^2$  为被 1 个  $R^{2-2}$  取代的： $C_2\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基； $R^{2-2}$  为羟基；

方案 (5)：



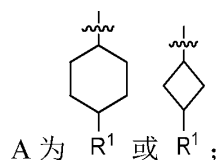
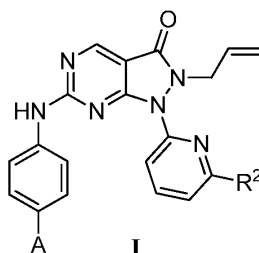
$R^1$  为  $-NR^{1-3}R^{1-4}$ 、 $-C(=O)R^{1-5}$  或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基；

$R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、 $-S(=O)_2R^{1-3-1}$  或  $C_1\sim C_7$  烷基； $R^{1-3-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基；

$R^{1-5}$  为  $-NR^{1-5-1}R^{1-5-2}$ 、 $-OR^{1-5-3}$  或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基； $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为氢、 $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基； $R^{1-5-3}$  为氢或  $C_1\sim C_7$  烷基；

$R^2$  为被 1 个  $R^{2-2}$  取代的： $C_2\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基； $R^{2-2}$  为羟基；

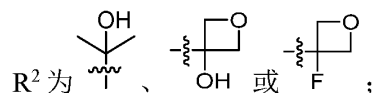
方案 (6)：



$R^1$  为  $-NR^{1-3}R^{1-4}$ 、 $-C(=O)R^{1-5}$  或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基；

$R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、 $-S(=O)_2R^{1-3-1}$  或  $C_1\sim C_7$  烷基； $R^{1-3-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基；

$R^{1-5}$  为  $-NR^{1-5-1}R^{1-5-2}$ 、 $-OR^{1-5-3}$  或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基； $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为氢、 $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基； $R^{1-5-3}$  为氢或  $C_1\sim C_7$  烷基；



方案 (7)：



X 为 CH 或 N；

$R^1$  独立地为卤素、 $-CN$ 、 $-NR^{1-3}R^{1-4}$ 、 $-C(=O)R^{1-5}$ 、 $-C(=NR^{1-6})R^{1-7}$ 、 $=N-O-R^{1-9}$ 、或、任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-8}$  取代的： $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基或  $C_1\sim C_7$  杂芳基；

$R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、 $-S(=O)_2R^{1-3-1}$ 、 $-C(=O)R^{1-3-2}$ 、 $-C(=NR^{1-3-3})NR^{1-3-5}R^{1-3-6}$ 、 $-S(=O)_2NR^{1-3-7}R^{1-3-8}$ 、 $-C(=O)NR^{1-3-9}R^{1-3-10}$ 、或、任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-3-11}$  取代的： $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基、或、 $C_1\sim C_7$  杂芳基；

$R^{1-3-1}$  和  $R^{1-3-2}$  独立地为任选被 1 个或 2 个  $R^{1-3-1-1}$  取代的： $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基或  $C_6\sim C_{10}$  芳基； $R^{1-3-1-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基；

$R^{1-3-3}$  独立地为氢；

$R^{1-3-5}$ 、 $R^{1-3-6}$ 、 $R^{1-3-7}$ 、 $R^{1-3-8}$ 、 $R^{1-3-9}$  和  $R^{1-3-10}$  独立地为氢、 $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-3-11}$  独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、 $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_1\sim C_7$  烷氧基、 $C_1\sim C_7$  烷硫基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基、 $C_1\sim C_7$  杂芳基、或、被 1 个或 2 个  $R^{1-3-11-1}$  取代的氨基； $R^{1-3-11-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-5}$  独立地为氢、 $-NR^{1-5-1}R^{1-5-2}$ 、 $-OR^{1-5-3}$ 、或、任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-5-4}$  取代的： $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基或、或、 $C_1\sim C_7$  杂芳基；

$R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为氢、 $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-5-3}$  独立地为氢、 $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基或  $C_1\sim C_7$  杂芳基；

$R^{1-5-4}$  独立地为卤素、羟基、氨基、巯基、氰基、 $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_1\sim C_7$  烷氧基、 $C_1\sim C_7$  烷硫基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基、 $C_1\sim C_7$  杂芳基、或、被 1 个或 2 个  $R^{1-5-4-1}$  取代的氨基； $R^{1-5-4-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-6}$  独立地为氢、 $-CN$ 、 $-OH$ ；

$R^{1-7}$  独立地为氢、 $-NR^{1-7-2}R^{1-7-3}$ ；

$R^{1-7-2}$  和  $R^{1-7-3}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基、或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

或者， $R^{1-7-2}$ 、 $R^{1-7-3}$  以及与其相连的氮原子共同形成任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{1-7-2-1}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基；所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基中的 1 个或 2 个以上的亚甲基任选地、独立地被氧原子、硫原子替换； $R^{1-7-2-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-8}$  独立地为氧代、卤素、-OH、氨基、巯基、氰基、 $C_1\sim C_7$  烷基、 $C_1\sim C_7$  烷氧基、 $C_1\sim C_7$  烷硫基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_6\sim C_{10}$  芳基、 $C_1\sim C_7$  杂芳基、或、被 1 个或 2 个  $R^{1-8-1}$  取代的氨基； $R^{1-8-1}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-9}$  独立地为氢或  $C_1\sim C_7$  烷基；

$R^2$  为任选被 1 个、2 个或 3 个  $R^{2-2}$  取代的： $C_2\sim C_7$  烷基、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基；

$R^{2-2}$  独立地为卤素或羟基；

以上任一种情况下，所述的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基、 $C_1\sim C_7$  杂芳基中的杂原子独立地选自硼、硅、氧、硫、硒、氮和磷中的一种或多种；杂原子数独立地为 1 个、2 个、3 个或 4 个；

方案 (8)：

A 为被 1 个或 2 个  $R^1$  取代的  $C_3\sim C_{20}$  环烷基；

X 为 CH 或 N；

$R^1$  独立地为氰基、卤素、-NR<sup>1-3</sup>R<sup>1-4</sup>、-C(=O)R<sup>1-5</sup>、-C(=NR<sup>1-6</sup>)R<sup>1-7</sup>、=N-O-R<sup>1-9</sup>、 $C_1\sim C_7$  杂芳基或任选被 1 个  $R^{1-8}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基；

$R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、-S(=O)<sub>2</sub>R<sup>1-3-1</sup>、-C(=O)R<sup>1-3-2</sup>、-C(=NR<sup>1-3-3</sup>)NR<sup>1-3-5</sup>R<sup>1-3-6</sup>、或  $C_1\sim C_7$  烷基；

$R^{1-3-1}$  和  $R^{1-3-2}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基、或、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基；

$R^{1-3-3}$  为氢；

$R^{1-3-5}$  和  $R^{1-3-6}$  为氢；

$R^{1-5}$  独立地为 -NR<sup>1-5-1</sup>R<sup>1-5-2</sup>、-OR<sup>1-5-3</sup> 或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基； $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为氢、 $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基； $R^{1-5-3}$  独立地为氢或  $C_1\sim C_7$  烷基；

$R^{1-8}$  独立地为氧代；

$R^{1-9}$  独立地为氢或  $C_1\sim C_7$  烷基；

$R^2$  为被 1 个  $R^{2-2}$  取代的： $C_2\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基； $R^{2-2}$  为卤素或羟基；

方案 (9)：

A 为被 1 个  $R^1$  取代的  $C_3\sim C_{20}$  环烷基；

X 为 CH 或 N;

$R^1$  为-CN、 $-NR^{1-3}R^{1-4}$ 、 $-C(=O)R^{1-5}$ 、 $=N-O-R^{1-9}$ 、或、任选被 1 个  $R^{1-8}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基;

$R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、 $-S(=O)_2R^{1-3-1}$ 、 $-C(=O)R^{1-3-2}$ 、 $-C(=NR^{1-3-3})NR^{1-3-5}R^{1-3-6}$ 、或  $C_1\sim C_7$  烷基;

$R^{1-3-1}$  和  $R^{1-3-2}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基、或、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基;

$R^{1-3-3}$  为氢;

$R^{1-3-5}$  和  $R^{1-3-6}$  为氢;

$R^{1-5}$  为 $-NR^{1-5-1}R^{1-5-2}$ 、 $-OR^{1-5-3}$  或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基;

$R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为氢、 $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基;

$R^{1-5-3}$  为氢或  $C_1\sim C_7$  烷基;

$R^{1-8}$  独立地为氧代;

$R^{1-9}$  独立地为氢或  $C_1\sim C_7$  烷基;

$R^2$  为被 1 个  $R^{2-2}$  取代的:  $C_2\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基;  $R^{2-2}$  为羟基;

方案 (10):

A 为被 1 个  $R^1$  取代的  $C_3\sim C_{20}$  环烷基;

X 为 CH 或 N;

$R^1$  为-CN、 $-NR^{1-3}R^{1-4}$ 、 $-C(=O)R^{1-5}$ 、 $=N-O-R^{1-9}$ 、或、任选被 1 个  $R^{1-8}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基;

$R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、 $-S(=O)_2R^{1-3-1}$ 、 $-C(=O)R^{1-3-2}$ 、 $-C(=NR^{1-3-3})NR^{1-3-5}R^{1-3-6}$ 、或  $C_1\sim C_7$  烷基;

$R^{1-3-1}$  和  $R^{1-3-2}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基、或、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基;

$R^{1-3-3}$  为氢;

$R^{1-3-5}$  和  $R^{1-3-6}$  为氢;

$R^{1-5}$  为 $-NR^{1-5-1}R^{1-5-2}$ 、 $-OR^{1-5-3}$  或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基;

$R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为氢、 $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基;

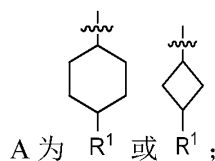
$R^{1-5-3}$  为氢;

$R^{1-8}$  独立地为氧代;

$R^{1-9}$  独立地为氢或  $C_1\sim C_7$  烷基;

$R^2$  为被 1 个  $R^{2-2}$  取代的:  $C_2\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基;  $R^{2-2}$  为羟基;

方案 (11):



X 为 CH 或 N;

$R^1$  为 -CN、 $-NR^{1-3}R^{1-4}$ 、 $-C(=O)R^{1-5}$ 、 $=N-O-R^{1-9}$ 、或、任选被 1 个  $R^{1-8}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基;

$R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、 $-S(=O)_2R^{1-3-1}$ 、 $-C(=O)R^{1-3-2}$ 、 $-C(=NR^{1-3-3})NR^{1-3-5}R^{1-3-6}$ 、或、 $C_1\sim C_7$  烷基;

$R^{1-3-1}$  和  $R^{1-3-2}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基、或、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基;

$R^{1-3-3}$  为氢;

$R^{1-3-5}$  和  $R^{1-3-6}$  为氢;

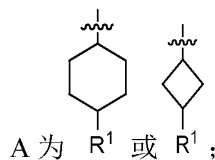
$R^{1-5}$  为  $-NR^{1-5-1}R^{1-5-2}$ 、 $-OR^{1-5-3}$  或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基;  $R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为氢、 $C_1\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  环烷基;  $R^{1-5-3}$  为氢或  $C_1\sim C_7$  烷基;

$R^{1-8}$  独立地为氧代;

$R^{1-9}$  独立地为氢或  $C_1\sim C_7$  烷基;

$R^2$  为被 1 个  $R^{2-2}$  取代的:  $C_2\sim C_7$  烷基或  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基;  $R^{2-2}$  为羟基;

方案 (12):



X 为 CH 或 N;

$R^1$  独立地为 -CN、 $-NR^{1-3}R^{1-4}$ 、 $-C(=O)R^{1-5}$ 、 $=N-O-R^{1-9}$ 、或、任选被 1 个  $R^{1-8}$  取代的  $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基;

$R^{1-3}$  和  $R^{1-4}$  独立地为氢、 $-S(=O)_2R^{1-3-1}$ 、 $-C(=O)R^{1-3-2}$ 、 $-C(=NR^{1-3-3})NR^{1-3-5}R^{1-3-6}$ 、或、 $C_1\sim C_7$  烷基;

$R^{1-3-1}$  和  $R^{1-3-2}$  独立地为  $C_1\sim C_7$  烷基、或、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基;

$R^{1-3-3}$  为氢;

$R^{1-3-5}$  和  $R^{1-3-6}$  为氢;

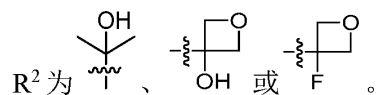
$R^{1-5}$  独立地为  $-NR^{1-5-1}R^{1-5-2}$ 、 $-OR^{1-5-3}$ 、或、 $C_3\sim C_{14}$  杂环烷基;

$R^{1-5-1}$  和  $R^{1-5-2}$  独立地为氢、 $C_1\sim C_7$  烷基、或、 $C_3\sim C_{14}$  环烷基;

$R^{1-5-3}$  独立地为氢或  $C_1\sim C_7$  烷基;

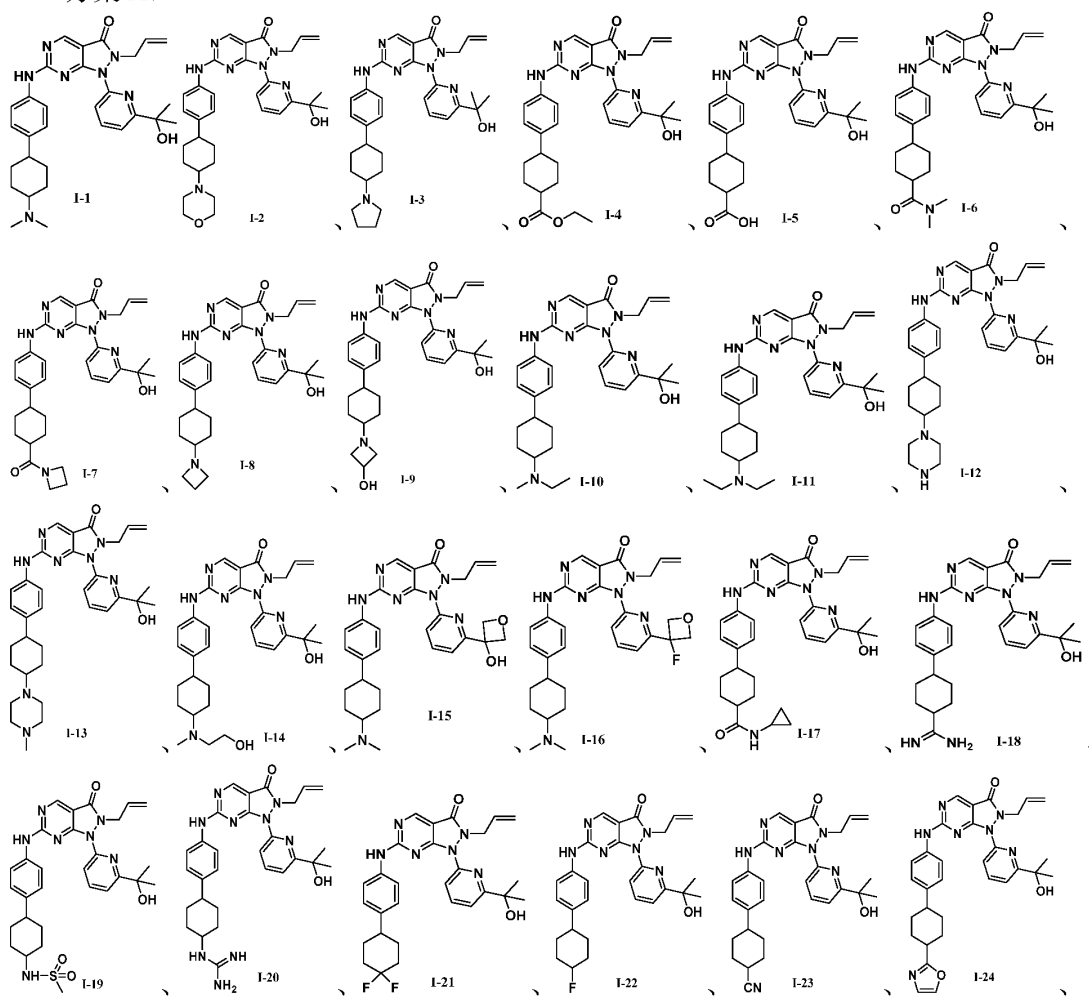
$R^{1-8}$  独立地为氧代;

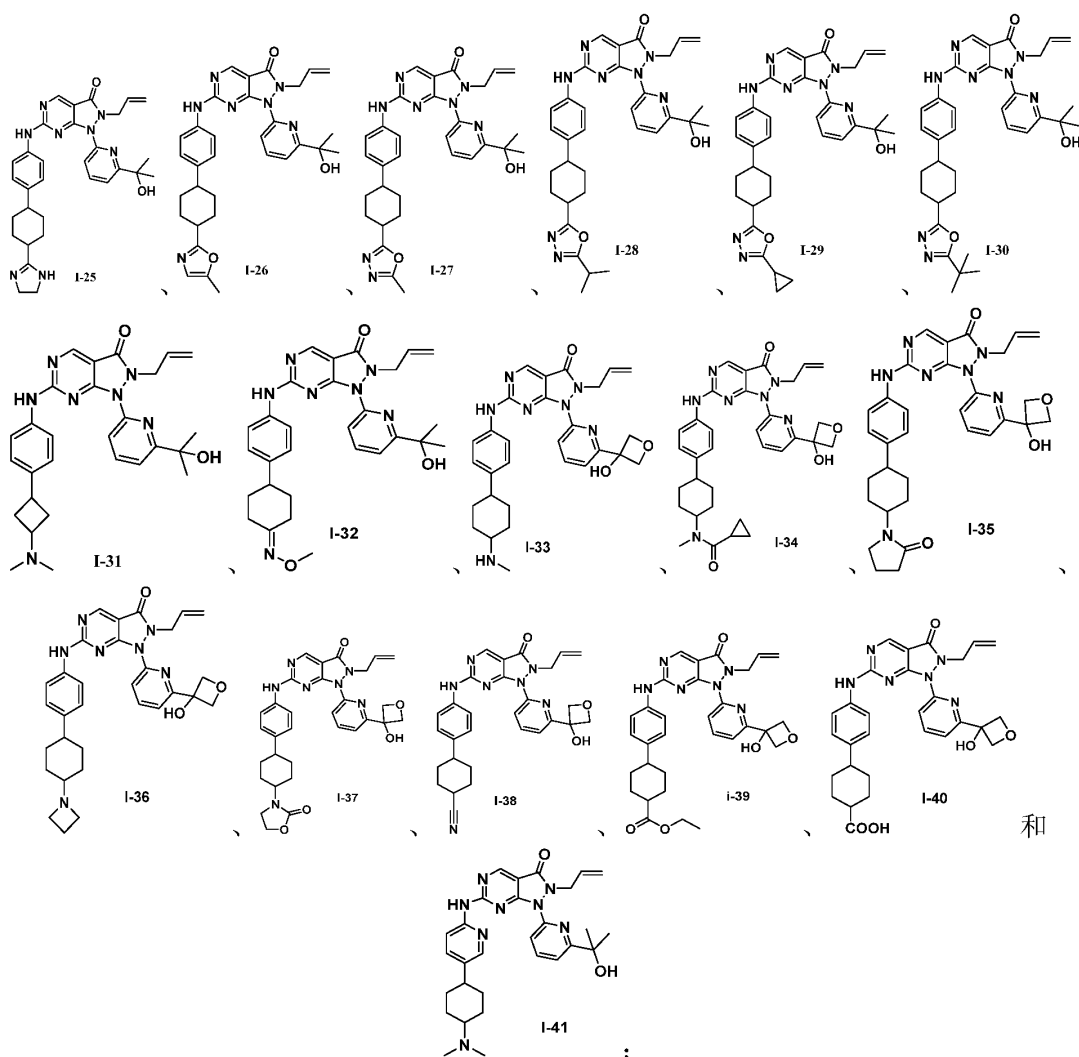
$R^{1-9}$  独立地为氢或  $C_1\sim C_7$  烷基;



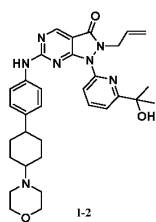
12. 如权利要求 1 或 2 所述的如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体, 其特征在于, 如式 II 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物为如下任一方案所述的任一化合物:

方案 A:



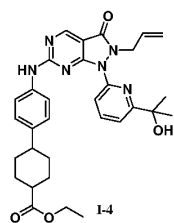


## 方案 B:

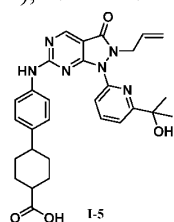


, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, MeOD) 为  $\delta$  8.85 (s, 1H), 8.00 (t,  $J = 7.9$  Hz, 1H),

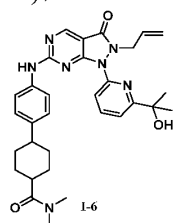
7.80 (d,  $J = 8.1$  Hz, 1H), 7.68 (d,  $J = 7.7$  Hz, 1H), 7.62 (d,  $J = 8.6$  Hz, 2H), 7.28 (d,  $J = 8.6$  Hz, 2H), 5.78 – 5.68 (m, 1H), 5.06 (d,  $J = 10.3$  Hz, 1H), 4.95 (s, 1H), 4.82 (s, 2H), 3.82 – 3.76 (m, 1H), 2.81 (s, 1H), 2.71 (s, 3H), 2.49 (s, 1H), 2.08 (d,  $J = 10.9$  Hz, 3H), 1.94 (d,  $J = 15.0$  Hz, 3H), 1.72 (s, 4H), 1.59 (d,  $J = 7.0$  Hz, 6H);



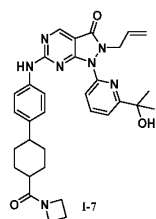
, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.87 (d,  $J = 2.1$  Hz, 1H), 7.91 (td,  $J = 7.9, 1.5$  Hz, 1H), 7.78 (d,  $J = 8.0$  Hz, 1H), 7.54 (t,  $J = 7.9$  Hz, 2H), 7.39 (d,  $J = 7.7$  Hz, 1H), 7.21 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 5.72 (ddt,  $J = 16.4, 10.2, 6.2$  Hz, 1H), 5.07 (dd,  $J = 10.2, 1.1$  Hz, 1H), 4.96 (dd,  $J = 17.1, 1.2$  Hz, 1H), 4.77 (d,  $J = 6.2$  Hz, 2H), 4.25 – 4.10 (m, 2H), 3.95 (s, 1H), 2.73 (s, 1H), 2.56 (dt,  $J = 15.5, 10.8$  Hz, 1H), 2.28 (d,  $J = 7.9$  Hz, 1H), 2.14 (d,  $J = 10.6$  Hz, 1H), 2.05 – 1.97 (m, 1H), 1.78 (dd,  $J = 19.0, 8.5$  Hz, 1H), 1.67 (dt,  $J = 10.1, 6.1$  Hz, 3H), 1.61 (s, 6H), 1.59 – 1.44 (m, 1H), 1.34 – 1.26 (m, 3H);



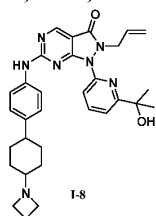
, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, MeOD) 为  $\delta$  8.84 (d,  $J = 1.4$  Hz, 1H), 8.00 (td,  $J = 7.9, 4.0$  Hz, 1H), 7.83 – 7.76 (m, 1H), 7.67 (dd,  $J = 7.7, 0.7$  Hz, 1H), 7.60 (dd,  $J = 8.4, 5.7$  Hz, 2H), 7.19 (dd,  $J = 13.2, 8.6$  Hz, 2H), 5.73 (ddd,  $J = 17.0, 6.1, 4.1$  Hz, 1H), 5.08 – 5.03 (m, 1H), 4.95 (d,  $J = 1.3$  Hz, 1H), 4.86 – 4.79 (m, 2H), 2.72 (s, 1H), 2.58 (s, 1H), 2.27 (d,  $J = 6.7$  Hz, 1H), 2.13 (d,  $J = 10.0$  Hz, 1H), 1.96 (d,  $J = 10.2$  Hz, 1H), 1.80 – 1.66 (m, 4H), 1.64 – 1.52 (m, 7H);



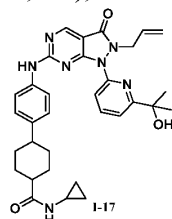
其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.86 (d,  $J = 4.2$  Hz, 1H), 7.97 – 7.88 (m, 1H), 7.79 (d,  $J = 8.0$  Hz, 1H), 7.53 (dd,  $J = 12.3, 8.5$  Hz, 2H), 7.39 (d,  $J = 7.6$  Hz, 1H), 7.28 – 7.15 (m, 2H), 5.80 – 5.65 (m, 1H), 5.06 (d,  $J = 10.0$  Hz, 1H), 4.95 (d,  $J = 17.1$  Hz, 1H), 4.77 (d,  $J = 6.0$  Hz, 2H), 3.10 (d,  $J = 12.1$  Hz, 3H), 2.98 (s, 3H), 2.67 – 2.57 (m, 1H), 2.14 (dd,  $J = 20.9, 10.3$  Hz, 1H), 2.06 – 1.97 (m, 2H), 1.92 (d,  $J = 14.0$  Hz, 1H), 1.78 – 1.66 (m, 4H), 1.61 (s, 6H), 1.49 (dd,  $J = 22.8, 12.2$  Hz, 1H);



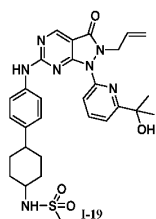
1-7, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.85 (d,  $J = 4.7$  Hz, 1H), 7.91 (dt,  $J = 10.7, 7.9$  Hz, 1H), 7.78 (d,  $J = 7.8$  Hz, 1H), 7.53 (dd,  $J = 12.0, 8.5$  Hz, 2H), 7.39 (dd,  $J = 7.6, 2.4$  Hz, 1H), 7.22 (dd,  $J = 19.5, 8.5$  Hz, 2H), 5.71 (ddt,  $J = 16.4, 10.2, 6.2$  Hz, 1H), 5.06 (d,  $J = 10.2$  Hz, 1H), 4.95 (d,  $J = 17.1$  Hz, 1H), 4.77 (d,  $J = 6.1$  Hz, 2H), 4.21 (dd,  $J = 16.4, 8.6$  Hz, 2H), 4.10 – 4.02 (m, 2H), 2.63 – 2.52 (m, 2H), 2.35 – 2.20 (m, 2H), 2.15 – 2.07 (m, 1H), 2.00 (dd,  $J = 13.4, 3.0$  Hz, 2H), 1.92 – 1.83 (m, 1H), 1.79 – 1.63 (m, 4H), 1.60 (s, 6H), 1.48 (ddd,  $J = 24.7, 12.5, 2.5$  Hz, 1H);



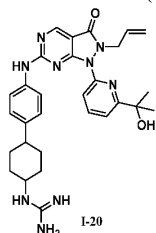
1-8, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.86 (s, 1H), 7.93 – 7.85 (m, 1H), 7.78 (d,  $J = 7.8$  Hz, 1H), 7.52 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 7.39 (dd,  $J = 7.6, 0.7$  Hz, 1H), 7.19 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 5.71 (ddt,  $J = 16.4, 10.2, 6.2$  Hz, 1H), 5.05 (dd,  $J = 10.2, 1.1$  Hz, 1H), 4.94 (dd,  $J = 17.1, 1.3$  Hz, 1H), 4.77 (d,  $J = 6.2$  Hz, 2H), 4.11 (d,  $J = 8.9$  Hz, 1H), 3.24 (t,  $J = 7.0$  Hz, 4H), 2.52 – 2.43 (m, 1H), 2.14 – 2.00 (m, 3H), 1.92 (d,  $J = 11.2$  Hz, 4H), 1.60 (s, 6H), 1.45 (dt,  $J = 14.9, 7.5$  Hz, 2H), 1.23 – 1.08 (m, 2H);



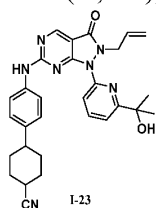
1-17, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.84 (d,  $J = 3.7$  Hz, 1H), 7.94 (dd,  $J = 14.8, 6.9$  Hz, 1H), 7.76 (d,  $J = 7.9$  Hz, 1H), 7.58 – 7.50 (m, 2H), 7.42 (dd,  $J = 7.5, 4.1$  Hz, 1H), 7.22 (dd,  $J = 15.8, 8.5$  Hz, 2H), 5.71 (dd,  $J = 11.5, 5.4$  Hz, 2H), 5.07 (d,  $J = 10.2$  Hz, 1H), 4.95 (d,  $J = 17.1$  Hz, 1H), 4.77 (d,  $J = 6.1$  Hz, 2H), 2.82 – 2.72 (m, 1H), 2.60 (s, 1H), 2.12 – 2.01 (m, 3H), 1.92 (d,  $J = 12.5$  Hz, 1H), 1.81 – 1.67 (m, 3H), 1.62 (s, 6H), 1.54 – 1.43 (m, 1H), 0.93 – 0.78 (m, 3H), 0.52 (s, 2H);



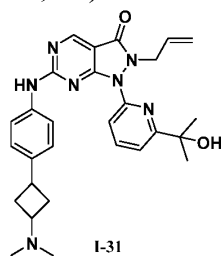
1-19, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.88 (s, 1H), 7.91 (t,  $J = 7.9$  Hz, 1H), 7.77 (d,  $J = 7.9$  Hz, 1H), 7.56 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 7.40 (d,  $J = 7.4$  Hz, 1H), 7.19 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 5.78 – 5.66 (m, 1H), 5.07 (dd,  $J = 10.2, 1.0$  Hz, 1H), 4.96 (dd,  $J = 17.1, 1.2$  Hz, 1H), 4.77 (d,  $J = 6.2$  Hz, 2H), 4.42 (d,  $J = 7.6$  Hz, 1H), 3.49 – 3.35 (m, 1H), 3.04 (s, 3H), 2.57 – 2.46 (m, 1H), 2.29 – 2.17 (m, 2H), 2.05 – 1.96 (m, 8H), 1.56–1.65 (m, 2H), 1.41–1.50 (m, 2H);



1-20, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, MeOD) 为  $\delta$  8.84 (s, 1H), 8.02 (m, 1H), 7.80 (m, 1H), 7.72–7.58 (m, 3H), 7.25 (m, 2H), 5.73 (ddt,  $J = 16.5, 10.3, 6.1$  Hz, 1H), 5.05 (dd,  $J = 10.2, 1.0$  Hz, 1H), 4.95 (d, 1H), 4.83 (d,  $J = 6.1$  Hz, 2H), 3.54–3.42 (m, 1H), 2.59 (m, 1H), 2.14 (m, 1H), 1.98 (m, 2H), 1.83 (m, 1H), 1.68 (m, 2H), 1.60 (s, 6H), 1.50 (m, 2H);

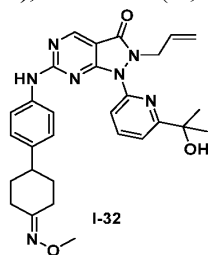


1-23, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO) 为  $\delta$  10.28 (s, 1H), 8.88 (d,  $J = 1.8$  Hz, 1H), 8.09 – 7.97 (m, 1H), 7.75 (d,  $J = 8.4$  Hz, 1H), 7.66 (dd,  $J = 20.6, 8.5$  Hz, 3H), 7.19 (dd,  $J = 11.1, 8.7$  Hz, 2H), 5.74 – 5.61 (m, 1H), 5.00 (d,  $J = 10.2$  Hz, 1H), 4.82 (d,  $J = 17.1$  Hz, 1H), 4.69 (d,  $J = 5.5$  Hz, 2H), 3.23 (s, 1H), 2.74 (t,  $J = 12.1$  Hz, 1H), 2.53 (s, 1H), 2.12 (d,  $J = 10.1$  Hz, 1H), 1.98 (d,  $J = 13.2$  Hz, 1H), 1.82 (d,  $J = 13.2$  Hz, 2H), 1.77–1.57 (m, 3H), 1.49 (d,  $J = 18.2$  Hz, 6H);

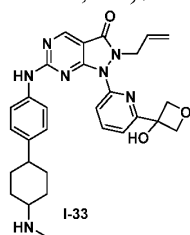


1-31, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO) 为  $\delta$  10.27 (s, 1H), 8.89 (s, 1H), 8.12 (s, 1H), 7.74 (dd,  $J = 22.6, 8.3$  Hz, 3H), 7.64 (d,  $J = 7.3$  Hz, 1H), 7.37 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H),

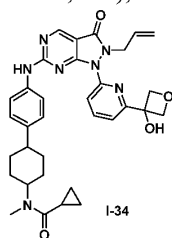
5.76-5.61 (m, 1H), 5.34 (s, 1H), 5.01 (dd, J = 10.3, 1.2 Hz, 1H), 4.84 (d, J = 17.1 Hz, 1H), 4.70 (d, J = 5.7 Hz, 2H), 3.62 (s, 1H), 3.12 (s, 1H), 2.71-2.58 (m, 8H), 2.38 (d, J = 9.2 Hz, 2H), 1.47 (s, 6H), 1.32-1.24 (m, 1H);



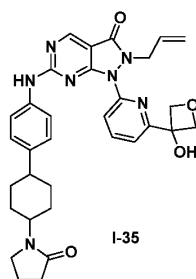
, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO) 为  $\delta$  10.26 (s, 1H), 8.88 (s, 1H), 8.07 (t, J = 7.8 Hz, 1H), 7.76 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.65 (dd, J = 14.5, 7.9 Hz, 2H), 7.22 (d, J = 8.5 Hz, 2H), 5.74 – 5.60 (m, 1H), 5.35 (s, 1H), 5.00 (d, J = 10.3 Hz, 1H), 4.83 (d, J = 17.1 Hz, 1H), 4.69 (d, J = 5.6 Hz, 2H), 3.74 (s, 3H), 3.24 – 3.15 (m, 1H), 2.77 (t, J = 12.0 Hz, 1H), 2.37 (d, J = 14.0 Hz, 1H), 2.25 (td, J = 13.4, 4.6 Hz, 1H), 1.99 – 1.84 (m, 3H), 1.67 – 1.50 (m, 2H), 1.49 (d, J = 14.0 Hz, 6H);



, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, MeOD) 为  $\delta$  8.86 (s, 0H), 8.11–8.01 (m, 1H), 7.94 (d, J = 7.9 Hz, 2H), 7.67 (d, J = 7.6 Hz, 2H), 7.62 (d, J = 8.6 Hz, 2H), 7.28 (d, J = 8.5 Hz, 2H), 5.83–5.74 (m, 1H), 5.09 (dd, J = 7.9, 4.4 Hz, 3H), 4.98 (dd, J = 17.1, 1.3 Hz, 2H), 4.85 (d, J = 6.7 Hz, 2H), 2.87 (s, 1H), 2.64 (s, 1H), 2.47 (s, 3H), 1.97 – 1.67 (m, 8H);

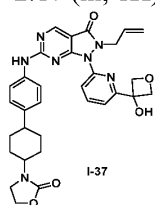


, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, MeOD) 为  $\delta$  8.87 (d, J = 6.6 Hz, 1H), 8.06 (t, J = 7.9 Hz, 1H), 7.95 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 7.68 (dd, J = 7.8, 5.4 Hz, 2H), 7.61 (d, J = 8.6 Hz, 1H), 7.41 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.24 (t, J = 8.7 Hz, 1H), 5.84 – 5.72 (m, 1H), 5.09 (d, J = 6.2 Hz, 2H), 5.07 (d, J = 1.3 Hz, 1H), 5.02 – 4.94 (m, 2H), 4.90 (s, 2H), 4.84 (d, J = 6.7 Hz, 2H), 3.15 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 3.08 (s, 1H), 2.95 (s, 1H), 2.71 (s, 1H), 2.43 (s, 1H), 1.93-2.03 (m, 3H), 1.76 (s, 2H), 1.51 (s, 1H), 1.31 (d, J = 4.3 Hz, 3H), 0.89 (dd, J = 20.1, 9.0 Hz, 4H);



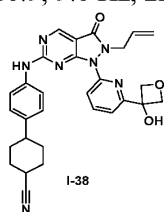
I-35

, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.87–8.79 (m, 1H), 8.14–8.07 (m, 1H), 8.04–7.96 (m, 1H), 7.89–7.80 (m, 1H), 7.61–7.50 (m, 2H), 7.38–7.32 (m, 1H), 7.25–7.19 (m, 1H), 7.01 (t,  $J = 3.4$  Hz, 1H), 5.72 (ddd,  $J = 16.6, 11.1, 8.6$  Hz, 1H), 5.17–5.09 (m, 2H), 5.04–4.98 (m, 1H), 4.98–4.92 (m, 1H), 4.87–4.77 (m, 2H), 4.73–4.64 (m, 2H), 4.20–4.06 (m, 1H), 3.47–3.38 (m, 1H), 3.38–3.29 (m, 1H), 3.05–2.98 (m, 1H), 2.49–2.35 (m, 2H), 2.27–2.17 (m, 1H), 2.07–1.86 (m, 4H), 1.75–1.60 (m, 3H);



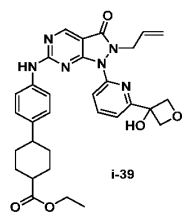
I-37

, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.77 (s, 1H), 8.16–8.07 (m, 1H), 8.03 (d,  $J = 7.6$  Hz, 1H), 7.83–7.75 (m, 1H), 7.56 (dd,  $J = 12.6, 6.1$  Hz, 2H), 7.33 (d,  $J = 8.5$  Hz, 1H), 7.21 (d,  $J = 8.5$  Hz, 1H), 5.72 (dd,  $J = 17.0, 10.3$  Hz, 1H), 5.13 (dd,  $J = 9.1, 6.1$  Hz, 2H), 4.96 (d,  $J = 17.0$  Hz, 2H), 4.81 (d,  $J = 7.2$  Hz, 2H), 4.69 (d,  $J = 6.2$  Hz, 2H), 4.41–4.28 (m, 2H), 3.86 (s, 1H), 3.77 (t,  $J = 6.6$  Hz, 1H), 3.63–3.50 (m, 2H), 2.98 (m, 1H), 2.15 (m, 1H), 1.97 (dd,  $J = 18.9, 9.6$  Hz, 2H), 1.78 (d,  $J = 5.0$  Hz, 2H), 1.65 (d,  $J = 8.7$  Hz, 2H);



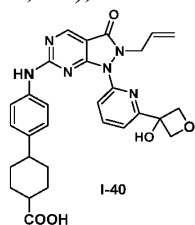
I-38

, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.69 (s, 1H), 8.18 (d,  $J = 8.0$  Hz, 1H), 8.10 (dd,  $J = 17.9, 7.6$  Hz, 1H), 7.81–7.72 (m, 1H), 7.63–7.49 (m, 2H), 7.25 (d,  $J = 8.4$  Hz, 1H), 7.19 (d,  $J = 8.3$  Hz, 1H), 5.70 (d,  $J = 6.8$  Hz, 1H), 5.15 (d,  $J = 10.1$  Hz, 1H), 5.14–5.07 (m, 1H), 4.95 (d,  $J = 16.6$  Hz, 1H), 4.83 (t,  $J = 6.7$  Hz, 2H), 4.71 (s, 2H), 2.54 (dd,  $J = 24.9, 12.6$  Hz, 2H), 2.30 (d,  $J = 11.2$  Hz, 1H), 2.18 (d,  $J = 13.5$  Hz, 1H), 2.02 (d,  $J = 12.9$  Hz, 1H), 1.96–1.80 (m, 2H), 1.78 (d,  $J = 16.1$  Hz, 1H), 1.49 (dd,  $J = 26.4, 11.2$  Hz, 2H);



I-39

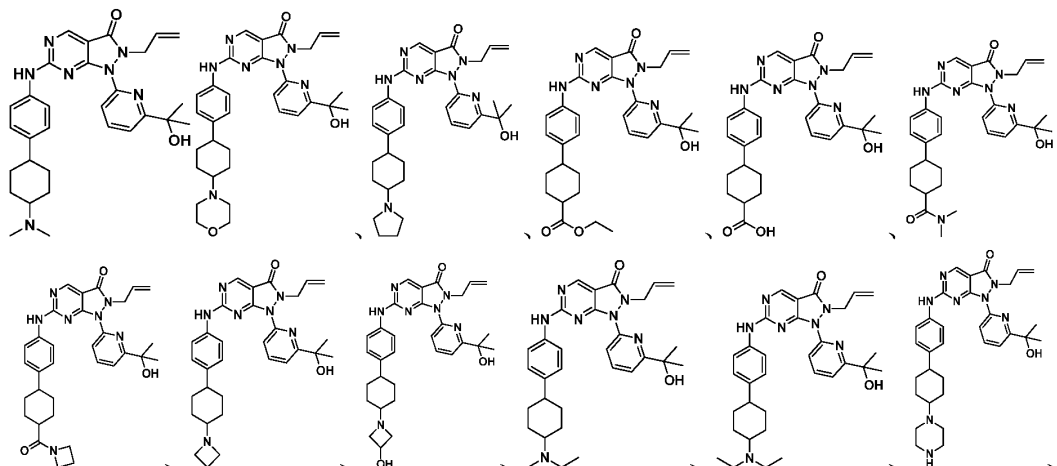
, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, Methanol- $d_4$ ) 为  $\delta$  8.85 (d,  $J = 1.1$  Hz, 1H), 8.05 (td,  $J = 7.9, 4.8$  Hz, 1H), 7.96 – 7.86 (m, 1H), 7.67 (d,  $J = 7.6$  Hz, 1H), 7.59 (ddd,  $J = 9.2, 4.6, 2.3$  Hz, 2H), 7.25 – 7.19 (m, 1H), 7.19 – 7.11 (m, 1H), 5.78 (ddt,  $J = 16.5, 10.1, 6.1$  Hz, 1H), 5.12 – 5.07 (m, 2H), 5.06 (t,  $J = 1.3$  Hz, 1H), 4.98 (dd,  $J = 17.0, 1.4$  Hz, 1H), 4.90 (d,  $J = 1.4$  Hz, 2H), 4.25 – 4.19 (m, 1H), 4.14 (dd,  $J = 14.1, 7.1$  Hz, 1H), 2.34 – 2.12 (m, 2H), 2.07 (dd,  $J = 17.0, 4.1$  Hz, 1H), 1.99 – 1.82 (m, 1H), 1.74 – 1.65 (m, 2H), 1.65 – 1.53 (m, 2H), 1.31 (d,  $J = 4.2$  Hz, 3H), 1.29 – 1.25 (m, 2H);

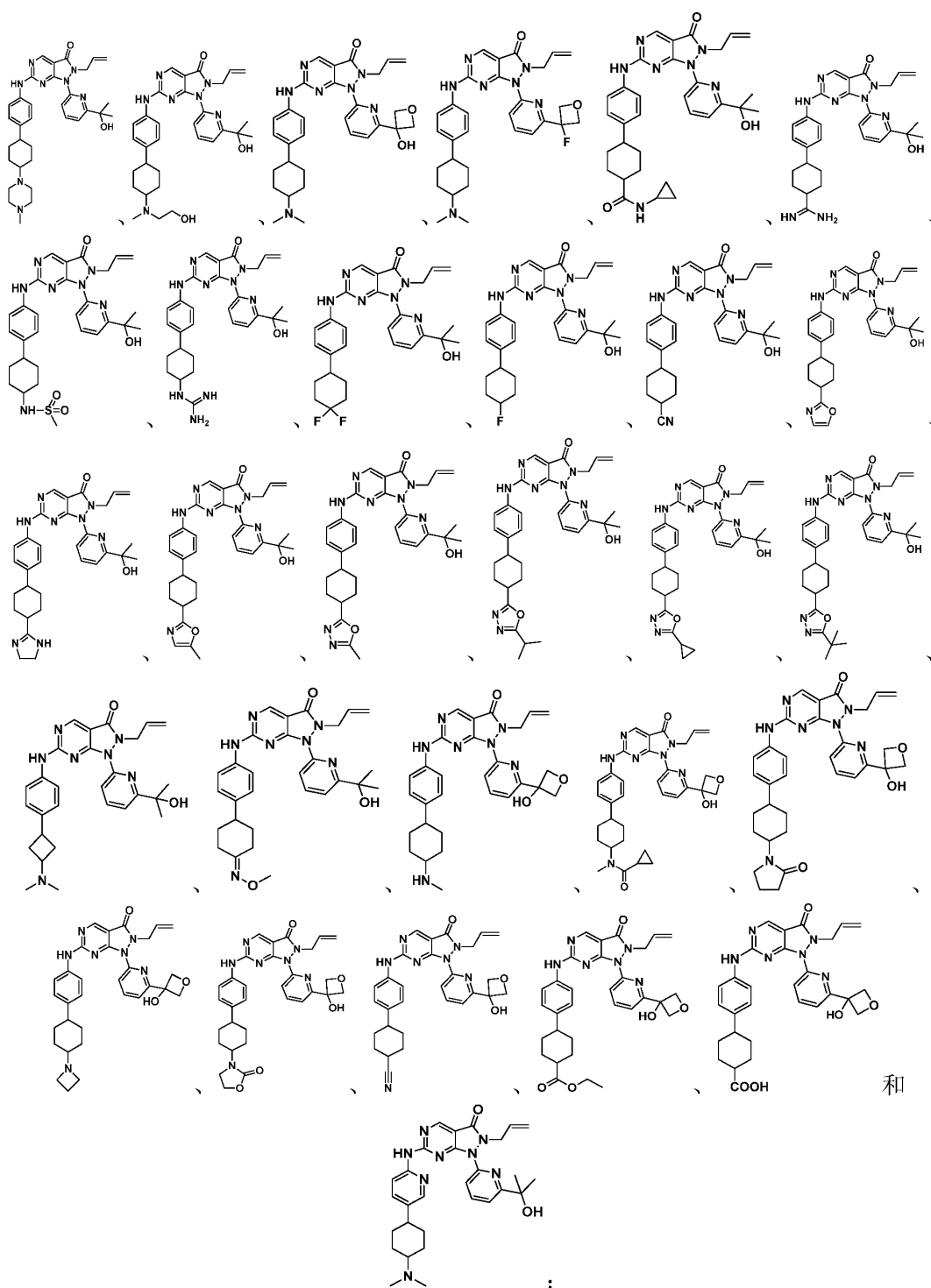


I-40

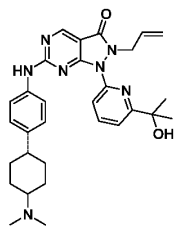
, 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, Methanol- $d_4$ ) 为  $\delta$  8.84 (s, 1H), 8.05 (t,  $J = 7.9$  Hz, 1H), 7.92 (d,  $J = 8.1$  Hz, 1H), 7.66 (dd,  $J = 7.6, 0.9$  Hz, 1H), 7.63 – 7.53 (m, 2H), 7.22 – 7.14 (m, 2H), 5.84 – 5.74 (m, 1H), 5.10 – 5.07 (m, 2H), 5.06 (q,  $J = 1.3$  Hz, 1H), 4.98 (dq,  $J = 17.0, 1.4$  Hz, 1H), 4.89 (dt,  $J = 6.1, 1.4$  Hz, 2H), 2.71 (d,  $J = 6.9$  Hz, 1H), 2.59 (s, 1H), 2.24 (dd,  $J = 16.4, 7.8$  Hz, 2H), 2.04 (d,  $J = 8.5$  Hz, 1H), 1.73 (td,  $J = 10.9, 6.8$  Hz, 6H);

### 方案 C:



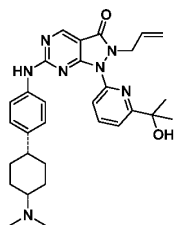


方案 D:



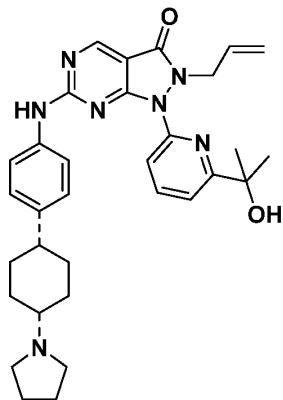
(I-1-1), 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, MeOD) 为  $\delta$  8.85 (s, 1H), 8.46 (s, 2H),

7.99 (t,  $J = 7.9$  Hz, 1H), 7.79 (d,  $J = 8.0$  Hz, 1H), 7.65 (dd,  $J = 16.6, 8.1$  Hz, 3H), 7.22 (d,  $J = 8.6$  Hz, 2H), 5.73 (ddt,  $J = 16.3, 10.2, 6.1$  Hz, 1H), 5.05 (dd,  $J = 10.3, 1.1$  Hz, 1H), 4.93 (dd,  $J = 17.1, 1.3$  Hz, 1H), 4.82 (d,  $J = 6.1$  Hz, 2H), 2.90 (s, 6H), 2.60 (d,  $J = 8.4$  Hz, 1H), 2.21 (s, 2H), 2.10 (d,  $J = 10.6$  Hz, 2H), 1.70 (d,  $J = 11.4$  Hz, 4H), 1.59 (s, 6H);



(I-1-2), 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.86 (s, 1H), 8.54 (s, 1H),

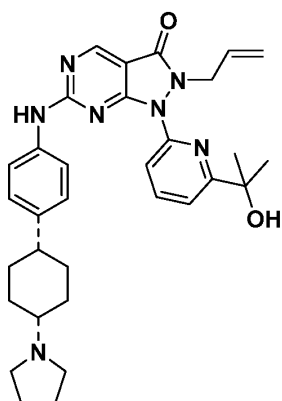
7.95 (t,  $J = 7.9$  Hz, 1H), 7.75 (d,  $J = 8.0$  Hz, 1H), 7.59 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 7.43 (d,  $J = 7.6$  Hz, 1H), 7.32 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 5.72 (ddt,  $J = 16.5, 10.3, 6.2$  Hz, 1H), 5.06 (d,  $J = 10.2$  Hz, 1H), 4.95 (dd,  $J = 17.1, 1.0$  Hz, 1H), 4.75 (d,  $J = 6.1$  Hz, 2H), 3.05 (m, 1H), 2.93 (m, 1H), 2.68 (s, 6H), 2.32 (m, 2H), 1.84 (m, 6H), 1.60 (s, 6H);



(I-3-1), 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.87 (s, 1H), 7.90

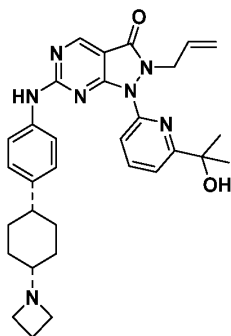
(t,  $J = 7.9$  Hz, 1H), 7.78 (d,  $J = 8.0$  Hz, 1H), 7.53 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 7.39 (dd,  $J = 7.6, 0.5$  Hz, 1H), 7.20 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 5.72 (ddt,  $J = 16.4, 10.2, 6.2$  Hz, 1H), 5.06 (dd,  $J = 10.2, 1.0$  Hz, 1H), 4.95 (dd,  $J = 17.1, 1.2$  Hz, 1H), 4.76 (d,  $J = 6.2$  Hz, 2H), 4.04 (s, 1H), 2.66 (m, 4H), 2.58 – 2.47 (m, 1H), 2.16 (m, 4H), 1.96 (m, 2H), 1.87 – 1.78 (m, 4H), 1.60 (s, 6H), 1.58 – 1.39 (m,

4H);



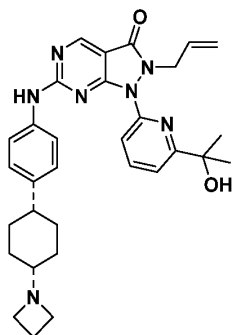
(I-3-2), 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.87 (s, 1H), 7.92

(t,  $J = 7.9$  Hz, 1H), 7.80 (d,  $J = 8.0$  Hz, 1H), 7.52 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 7.38 (d,  $J = 7.6$  Hz, 1H), 7.29 (t,  $J = 4.2$  Hz, 2H), 5.79 – 5.66 (m, 1H), 5.06 (dd,  $J = 10.2, 1.0$  Hz, 1H), 4.96 (dd,  $J = 17.1, 1.2$  Hz, 1H), 4.77 (d,  $J = 6.2$  Hz, 2H), 4.02 (s, 1H), 2.70 – 2.50 (m, 5H), 2.26 (s, 1H), 1.98 (m, 4H), 1.82 (s, 4H), 1.69 – 1.56 (m, 10H);

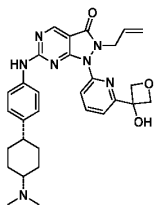


(I-8-1), 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.86 (s, 1H), 7.93 –

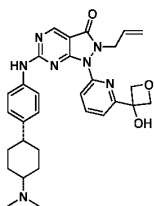
7.85 (m, 1H), 7.78 (d,  $J = 7.8$  Hz, 1H), 7.52 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 7.39 (dd,  $J = 7.6, 0.7$  Hz, 1H), 7.19 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 5.71 (ddt,  $J = 16.4, 10.2, 6.2$  Hz, 1H), 5.05 (dd,  $J = 10.2, 1.1$  Hz, 1H), 4.94 (dd,  $J = 17.1, 1.3$  Hz, 1H), 4.77 (d,  $J = 6.2$  Hz, 2H), 4.11 (d,  $J = 8.9$  Hz, 1H), 3.24 (t,  $J = 7.0$  Hz, 4H), 2.52 – 2.43 (m, 1H), 2.14 – 2.00 (m, 3H), 1.92 (d,  $J = 11.2$  Hz, 4H), 1.60 (s, 6H), 1.45 (dt,  $J = 14.9, 7.5$  Hz, 2H), 1.23 – 1.08 (m, 2H);



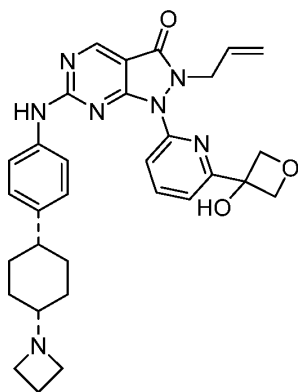
(I-8-2), 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.87 (s, 1H), 7.92 (d,  $J = 7.8$  Hz, 1H), 7.80 (d,  $J = 8.0$  Hz, 1H), 7.52 (d,  $J = 8.4$  Hz, 2H), 7.39 (d,  $J = 7.6$  Hz, 1H), 7.29 – 7.25 (m, 2H), 5.82 – 5.63 (m, 1H), 5.12 – 4.91 (m, 2H), 4.78 (d,  $J = 6.2$  Hz, 2H), 4.01 (s, 1H), 3.17 (s, 4H), 2.53 (s, 1H), 2.33 (s, 1H), 2.06 (d,  $J = 4.4$  Hz, 2H), 1.89 (d,  $J = 11.6$  Hz, 2H), 1.75 (d,  $J = 14.1$  Hz, 2H), 1.59 (d,  $J = 17.2$  Hz, 8H), 1.46 (t,  $J = 13.1$  Hz, 2H);



(I-15-1), 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, MeOD) 为  $\delta$  8.84 (s, 1H), 8.04 (t,  $J = 7.9$  Hz, 1H), 7.92 (d,  $J = 8.1$  Hz, 1H), 7.67 (d,  $J = 7.6$  Hz, 1H), 7.60 (d,  $J = 8.6$  Hz, 2H), 7.21 (d,  $J = 8.6$  Hz, 2H), 5.78 (ddt,  $J = 16.3, 10.3, 6.1$  Hz, 1H), 5.12 – 5.05 (m, 3H), 4.98 (dd,  $J = 17.1, 1.3$  Hz, 1H), 4.89 (d,  $J = 6.1$  Hz, 2H), 4.84 (s, 2H), 3.68 (s, 2H), 2.97 – 2.86 (m, 1H), 2.66 (s, 6H), 2.60 – 2.50 (m, 1H), 2.15 (d,  $J = 8.6$  Hz, 2H), 2.04 (d,  $J = 9.0$  Hz, 2H), 1.66 – 1.54 (m, 4H);

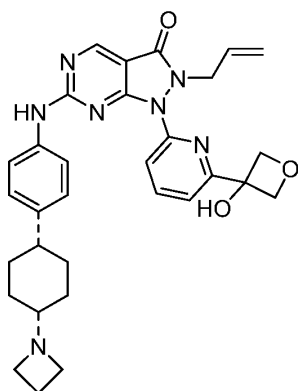


(I-15-2), 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, MeOD) 为  $\delta$  8.83 (s, 1H), 8.04 (t,  $J = 7.9$  Hz, 1H), 7.92 (d,  $J = 8.0$  Hz, 1H), 7.67 – 7.62 (m, 1H), 7.59 (d,  $J = 8.6$  Hz, 2H), 7.29 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 5.76 (ddt,  $J = 16.3, 10.2, 6.1$  Hz, 1H), 5.10 – 5.02 (m, 3H), 4.96 (dd,  $J = 17.1, 1.3$  Hz, 1H), 4.87 (d,  $J = 6.8$  Hz, 2H), 4.82 (d,  $J = 6.8$  Hz, 2H), 2.73 (d,  $J = 4.2$  Hz, 1H), 2.29 (d,  $J = 21.9$  Hz, 7H), 2.04 – 1.90 (m, 4H), 1.66 (dd,  $J = 15.6, 6.1$  Hz, 4H);



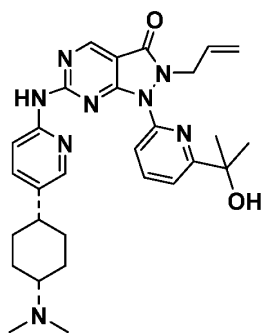
(I-36-1), 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 为  $\delta$  8.88 (d,  $J = 2.6$

Hz, 1H), 8.09 (dd,  $J = 15.0, 7.8$  Hz, 1H), 7.99–7.83 (m, 2H), 7.54 (t,  $J = 9.5$  Hz, 2H), 7.39 (d,  $J = 8.7$  Hz, 1H), 7.21 (d,  $J = 8.5$  Hz, 1H), 5.74 (dq,  $J = 10.5, 5.9$  Hz, 1H), 5.12 (t,  $J = 8.8$  Hz, 3H), 4.99 (d,  $J = 17.1$  Hz, 1H), 4.80 (d,  $J = 6.3$  Hz, 2H), 4.67 (d,  $J = 6.0$  Hz, 2H), 3.39–3.24 (m, 4H), 2.60–2.34 (m, 3H), 2.14 (dt,  $J = 14.0, 6.8$  Hz, 3H), 1.96 (d,  $J = 10.8$  Hz, 4H), 1.55–1.37 (m, 2H), 1.27–1.12 (m, 2H);

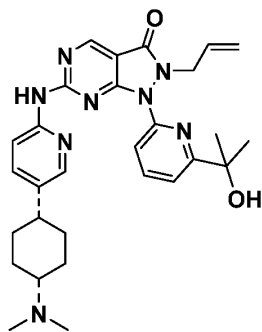


(I-36-2), 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, MeOD) 为  $\delta$  8.86 (s, 1H),

8.02 (dt,  $J = 24.0, 7.9$  Hz, 3H), 7.64 (dd,  $J = 27.1, 8.1$  Hz, 3H), 7.27 (t,  $J = 8.6$  Hz, 2H), 7.01–6.91 (m, 3H), 6.72–6.64 (m, 3H), 5.79 (ddd,  $J = 16.3, 11.2, 6.1$  Hz, 1H), 5.10–5.05 (m, 2H), 4.85 (d,  $J = 6.8$  Hz, 2H), 2.57 (d,  $J = 10.7$  Hz, 1H), 2.48–2.28 (m, 3H), 2.23–2.06 (m, 3H), 1.98–1.71 (m, 6H), 1.58 (dd,  $J = 23.2, 12.9$  Hz, 3H), 1.44 (ddd,  $J = 16.1, 13.2, 3.5$  Hz, 2H), 1.19–1.00 (m, 2H);



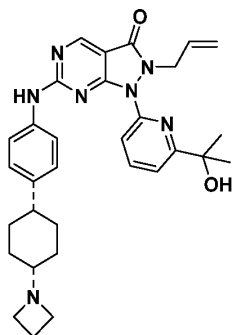
(I-41-1), 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, Chloroform-d) 为  $\delta$  9.00 (s, 1H), 8.30 (d,  $J = 8.6$  Hz, 1H), 8.22 (d,  $J = 2.4$  Hz, 1H), 7.96 (t,  $J = 7.9$  Hz, 1H), 7.73 (dd,  $J = 8.1, 0.8$  Hz, 1H), 7.55 (dd,  $J = 8.7, 2.4$  Hz, 1H), 7.44 (dd,  $J = 7.7, 0.8$  Hz, 1H), 5.77 – 5.66 (m, 1H), 5.12 – 5.05 (m, 1H), 4.97 (dq,  $J = 17.0, 1.4$  Hz, 1H), 4.76 (dt,  $J = 6.3, 1.3$  Hz, 2H), 2.70 (s, 1H), 2.56 (s, 6H), 2.23 (q,  $J = 9.5$  Hz, 4H), 2.11 – 2.01 (m, 4H), 1.58 (t,  $J = 10.3$  Hz, 6H);



(I-41-2), 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz, Chloroform-d) 为  $\delta$  8.99 (s, 1H), 8.54 (s, 1H), 8.32 (d,  $J = 8.7$  Hz, 1H), 8.26 (d,  $J = 2.4$  Hz, 1H), 8.10 (t,  $J = 7.7$  Hz, 1H), 7.92 (s, 1H), 7.78 (dd,  $J = 8.1, 0.8$  Hz, 1H), 7.47 – 7.41 (m, 1H), 5.79 – 5.71 (m, 1H), 5.08 (dq,  $J = 10.1, 1.2$  Hz, 1H), 4.97 (dq,  $J = 17.0, 1.3$  Hz, 1H), 4.77 (dt,  $J = 6.2, 1.4$  Hz, 2H), 3.99 (s, 1H), 2.75 (d,  $J = 11.0$  Hz, 1H), 2.52 (s, 6H), 2.32 – 2.18 (m, 1H), 2.09 (d,  $J = 14.4$  Hz, 4H), 1.31 (d,  $J = 22.8$  Hz, 4H) ;

其中,  是指顺反构型不定;

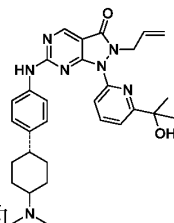
方案 E:



(I-8-1), 其  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 具有 1.23 – 1.08 的峰;

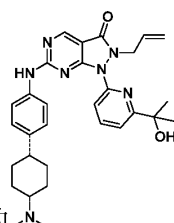
其中，是指顺反构型不定；

方案 F:



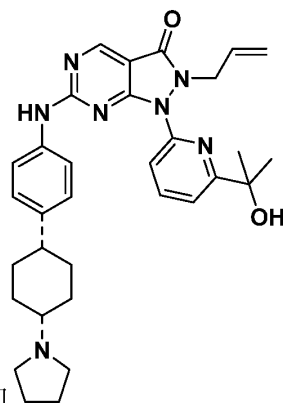
在下述条件下保留时间为 10.55min 的  (I-1-1): Agilent 1260 高效液相

色谱仪；流动相 A:水 (0.1%甲酸)，流动相 B:乙腈；柱时间: 15min；柱型: Waters 公司 Xselect, 5 $\mu$ m, 4.6 $\times$ 250mm；梯度洗脱,5%流动相 B $\rightarrow$ 50%流动相 B；



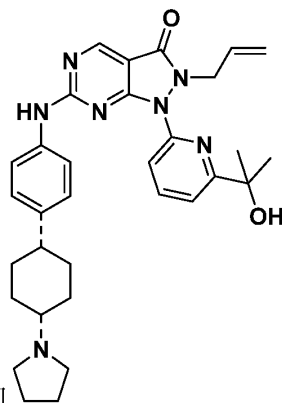
在下述条件下保留时间为 10.78min 的  (I-1-2): Agilent 1260 高效液相

色谱仪；流动相 A:水 (0.1%甲酸)，流动相 B:乙腈；柱时间: 15min；柱型: Waters 公司 Xselect, 5 $\mu$ m, 4.6 $\times$ 250mm；梯度洗脱,5%流动相 B $\rightarrow$ 50%流动相 B；



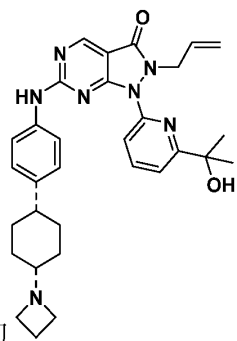
在下述条件下保留时间为 11.01min 的  (I-3-1): Agilent 1260

高效液相色谱仪；流动相 A:水 (0.1%甲酸)，流动相 B:乙腈；柱时间: 15min；柱型: Waters 公司 Xselect, 5 $\mu$ m, 4.6 $\times$ 250mm；梯度洗脱,5%流动相 B $\rightarrow$ 50%流动相 B；



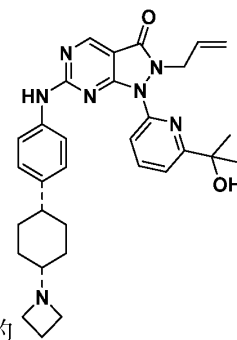
在下述条件下保留时间为 11.20min 的 (I-3-2): Agilent 1260

高效液相色谱仪; 流动相 A: 水 (0.1% 甲酸), 流动相 B: 乙腈; 柱时间: 15min; 柱型: Waters 公司 Xselect, 5 $\mu$ m, 4.6 $\times$ 250mm; 梯度洗脱, 5% 流动相 B $\rightarrow$ 50% 流动相 B;



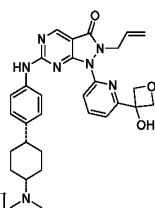
在下述条件下保留时间为 10.78min 的 (I-8-1): Agilent 1260 高效

液相色谱仪; 流动相 A: 水 (0.1% 甲酸), 流动相 B: 乙腈; 柱时间: 15min; 柱型: Waters 公司 Xselect, 5 $\mu$ m, 4.6 $\times$ 250mm; 梯度洗脱, 5% 流动相 B $\rightarrow$ 50% 流动相 B;

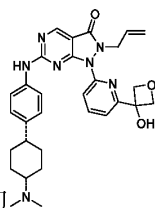


在下述条件下保留时间为 11.00 min 的 (I-8-2): Agilent 1260 高效

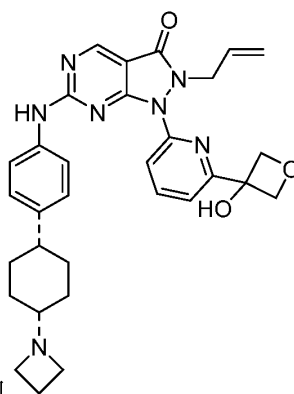
液相色谱仪; 流动相 A: 水 (0.1% 甲酸), 流动相 B: 乙腈; 柱时间: 15min; 柱型: Waters 公司 Xselect, 5 $\mu$ m, 4.6 $\times$ 250mm; 梯度洗脱, 5% 流动相 B $\rightarrow$ 50% 流动相 B;



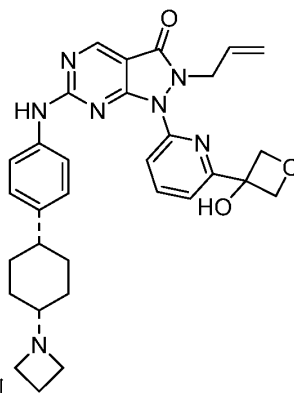
在下述条件下保留时间为 7.02min 的 (I-15-1): Agilent 1260 高效液相色谱仪; 流动相 A:水 (0.1%甲酸), 流动相 B:乙腈; 柱时间: 15min; 柱型: Waters 公司 Xselect, 5 $\mu$ m, 4.6 $\times$ 250mm; 梯度洗脱,5%流动相 B $\rightarrow$ 95%流动相 B;



在下述条件下保留时间为 7.16min 的 (I-15-2): Agilent 1260 高效液相色谱仪; 流动相 A:水 (0.1%甲酸), 流动相 B:乙腈; 柱时间: 15min; 柱型: Waters 公司 Xselect, 5 $\mu$ m, 4.6 $\times$ 250mm; 梯度洗脱,5%流动相 B $\rightarrow$ 95%流动相 B;

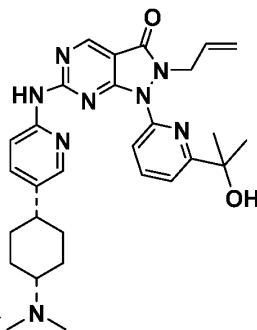


在下述条件下保留时间为 7.14min 的 (I-36-1): Agilent 1260 高效液相色谱仪; 流动相 A:水 (0.1%甲酸), 流动相 B:乙腈; 柱时间: 15min; 柱型: Waters 公司 Xselect, 5 $\mu$ m, 4.6 $\times$ 250mm; 梯度洗脱,5%流动相 B $\rightarrow$ 95%流动相 B;



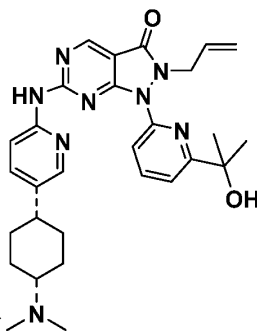
在下述条件下保留时间为 7.15min 的 (I-36-2): Agilent 1260

高效液相色谱仪；流动相 A:水 (0.1%甲酸)，流动相 B:乙腈；柱时间：15min；柱型：Waters 公司 Xselect, 5 $\mu$ m, 4.6 $\times$ 250mm；梯度洗脱,5%流动相 B $\rightarrow$ 95%流动相 B；



在下述条件下保留时间为 6.17min 的 (I-41-1): Agilent 1260 高

效液相色谱仪；流动相 A:水 (0.1%甲酸)，流动相 B:乙腈；柱时间：15min；柱型：Waters 公司 Xselect, 5 $\mu$ m, 4.6 $\times$ 250mm；梯度洗脱,5%流动相 B $\rightarrow$ 95%流动相 B；

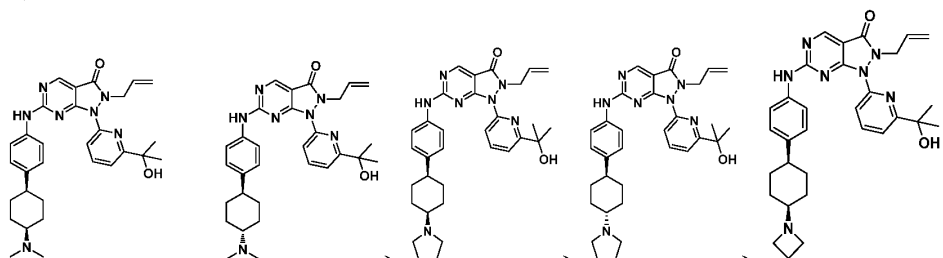


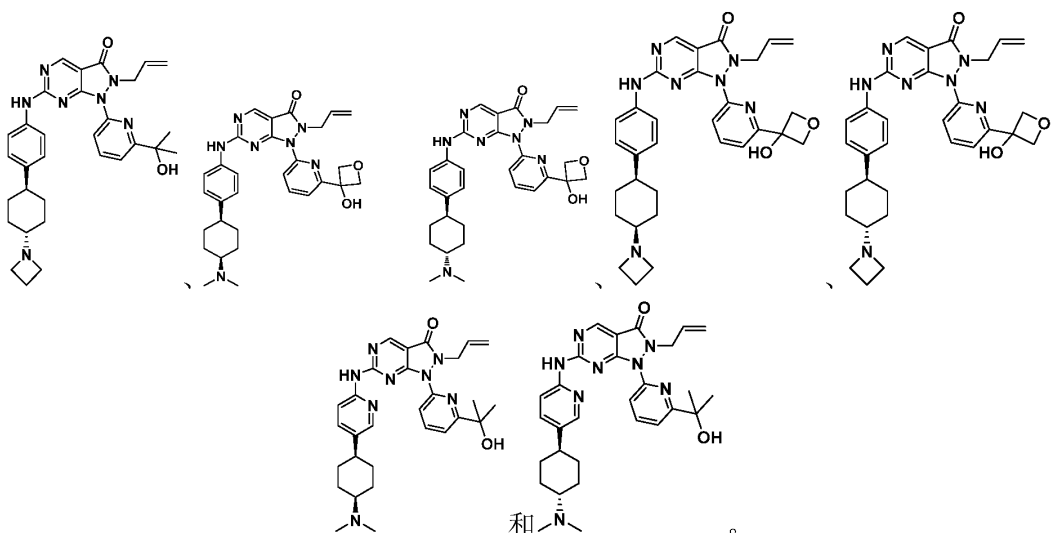
在下述条件下保留时间为 6.28min 的 (I-41-2): Agilent 1260 高

效液相色谱仪；流动相 A:水 (0.1%甲酸)，流动相 B:乙腈；柱时间：15min；柱型：Waters 公司 Xselect, 5 $\mu$ m, 4.6 $\times$ 250mm；梯度洗脱,5%流动相 B $\rightarrow$ 95%流动相 B；

其中， 是指顺反构型不定；

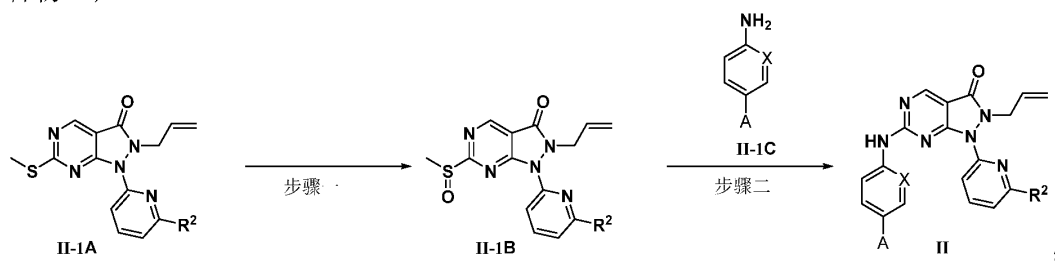
方案 G:



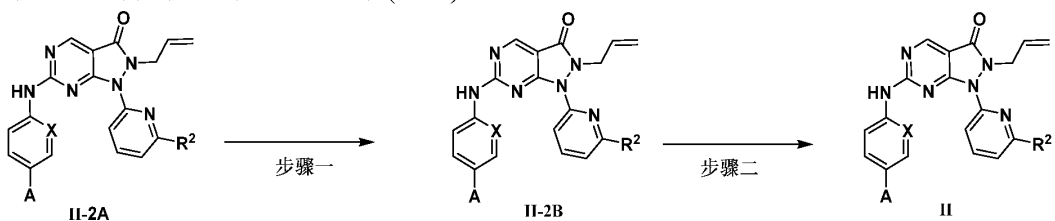


13. 一种如权利要求 1~12 中至少一项所述的如式 **II** 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物的制备方法，其为如下任一方法：

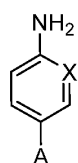
方法 1，其包括下述步骤：步骤一、化合物 **II-1A** 在有机溶剂中经氧化剂氧化得到化合物 **II-1B**；步骤二、化合物 **II-1B** 与化合物 **II-1C** 在有机溶剂和碱性条件下反应得到化合物 **II**；



方法 2，其包括下述步骤：步骤一、化合物 **II-2A** ( $R^1$  为  $-(C=O)-O-C_2H_5$ ) 经水解得到化合物 **II-2B** ( $R^1$  为  $-(C=O)-OH$ )；步骤二、化合物 **II-2B** 与胺基化合物在有机溶剂中经缩合反应得到化合物 **II** ( $R^1$  为  $-(C=O)-NR^{1-5-1}R^{1-5-2}$ )；



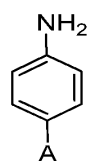
14. 一种如式 **II-1C** 所示的化合物：



II-1C

其中, X 为 CH 或 N, A 的定义如权利要求 1~12 中至少一项所述。

15. 如权利要求 14 所述的如式 II-1C 所示的化合物, 其特征在于, 其为如式 1C 所示的化合物:

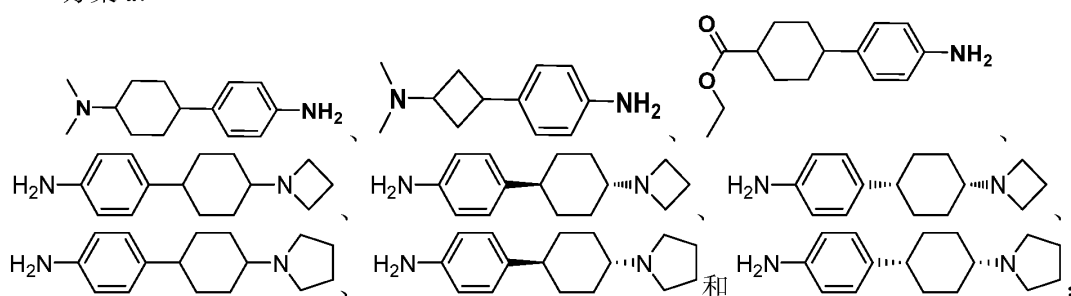


1C ;

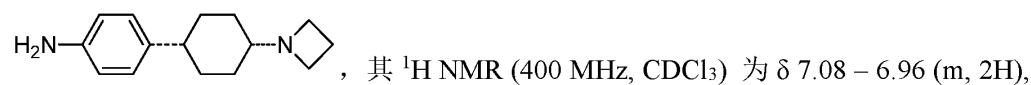
其中, A 为被一个  $R^1$  取代的  $C_3$ - $C_{20}$  环烷基,  $R^1$  为  $-NR^{1-3}R^{1-4}$  或  $-C(=O)R^{1-5}$ , 所述的  $R^{1-3}$ 、 $R^{1-4}$  和  $R^{1-5}$  的定义如权利要求 1~12 中至少一项所述。

16. 如权利要求 14 所述的如式 II-1C 所示的化合物, 其特征在于, 其为如下任一方案所述的任一化合物:

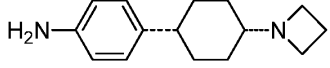
方案 a:



方案 b:



, 其  $^1H$  NMR (400 MHz,  $CDCl_3$ ) 为  $\delta$  7.08 – 6.96 (m, 2H), 6.70 – 6.60 (m, 2H), 3.57 (s, 2H), 3.22 (t,  $J$  = 7.0 Hz, 4H), 2.38 (tt,  $J$  = 12.1, 3.2 Hz, 1H), 2.15 – 1.95 (m, 5H), 1.95 – 1.81 (m, 4H), 1.51 – 1.30 (m, 2H), 1.21 – 1.04 (m, 2H);

或, , 其  $^1H$  NMR (400 MHz, MeOD) 为  $\delta$  7.10 – 6.97 (m, 2H), 6.74 – 6.63 (m, 2H), 4.22 – 4.08 (t,  $J$  = 8.0 Hz, 4H), 3.47 – 3.38 (m, 1H), 2.61 – 2.52 (m, 1H), 2.52 – 2.28 (m, 2H), 1.92 – 1.62 (m, 8H)。

17. 一种物质 X 在制备激酶抑制剂或药物中的应用; 所述的药物可用于治疗和/或预防

防、与 WEE1 激酶有关的疾病或癌症；

所述的物质 **X** 为如权利要求 1~12 中至少一项所述的如式 **II** 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体。

18. 一种药物组合物，其包含物质 **X** 和药用辅料；

所述的物质 **X** 为如权利要求 1~12 中至少一项所述的如式 **II** 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体。

19. 一种组合，其包含物质 **X** 和抗癌药物，

所述的物质 **X** 为如权利要求 1~12 中至少一项所述的如式 **II** 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体。

20. 一种如权利要求 19 所述的组合在制备用于预防和/或治疗癌症的药物中的应用。

21. 一种物质 **X** 在制备药物中的应用，所述的药物和抗癌药物联合用于预防和/或治疗癌症；

所述的物质 **X** 为如权利要求 1~12 中至少一项所述的如式 **II** 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体。

22. 一种抗癌药物在制备药物中的应用，所述的药物和物质 **X** 联合用于预防和/或治疗癌症；

所述的物质 **X** 为如权利要求 1~12 中至少一项所述的如式 **II** 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体。

23. 一种药物组合物，其包含如权利要求 19 所述的组合和药用辅料。

24. 一种组合药盒，其包含药物组合物 A 和药物组合物 B；

所述的药物组合物 A 包括物质 **X** 和药用辅料；

所述的药物组合物 B 包括抗癌药物和药用辅料；

所述的物质 **X** 为如权利要求 1~12 中至少一项所述的如式 **II** 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体。

25. 一种治疗和/或预防与 WEE1 激酶有关的疾病或癌症的方法，其包括向患者施用

治疗有效量的物质 **X**;

所述的物质 **X** 为如权利要求 1~12 中至少一项所述的如式 **II** 所示的吡唑酮并嘧啶类化合物、其药学上可接受的盐、其溶剂合物、其药学上可接受的盐的溶剂合物、其代谢产物或其药物前体。

26. 一种治疗和/或预防癌症的方法，其包括向患者施用治疗有效量的如权利要求 19 所述的组合。