202425999

(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公開本 (11)公開編號：TW 202425999 A

(43)公開日： 中華民國 113 (2024) 年 07 月 01 日

(21)申請案號：112140060 (22)申請日： 中華民國 112 (2023) 年 10 月 19 日

(51)Int. Cl.： *A61K31/551 (2006.01)* *A61K31/55 (2006.01)*
A61K31/41 (2006.01) *A61K31/40 (2006.01)*
A61K31/435 (2006.01) *A61P31/02 (2006.01)*

(30)優先權：2022/10/19 英國 2215462.9
2022/10/19 美國 63/380,153
2023/03/20 美國 63/453,385
2023/03/21 英國 2304110.6
2023/06/23 英國 2309514.4
2023/06/23 美國 63/510,007

(71)申請人：英商卡爾維斯塔製藥有限公司 (英國) KALVISTA PHARMACEUTICALS LIMITED (GB)
英國

(72)發明人：戴維 羅貝卡 路易斯 DAVIE, REBECCA LOUISE (GB)；伊凡斯 大衛 麥可 EVANS, DAVID MICHAEL (GB)；諾斯 卡爾 萊斯利 NORTH, CARL LESLIE (GB)；艾佛里 克雷格 艾力克斯 AVERY, CRAIG ALEX (GB)；弗里 馬洛夫爾 艾瑞克 FERRER MALLOFRE, ERIC (ES)；史密斯 尚恩 艾倫 SMITH, SEAN ALAN (GB)

(74)代理人：陳長文；朱淑尹；姚金梅

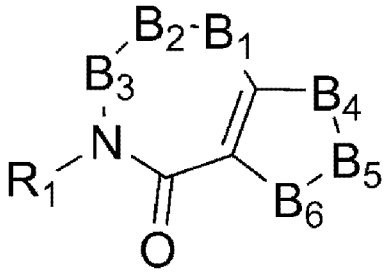
申請實體審查：無 申請專利範圍項數：26 項 圖式數：0 共 1345 頁

(54)名稱

酶抑制劑

(57)摘要

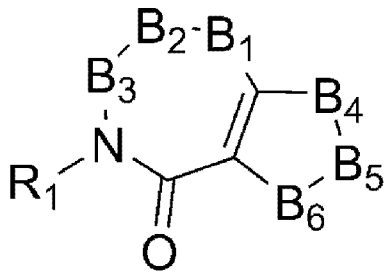
本發明提供式(I)化合物：



式(I)

包含此類化合物之組合物；此類化合物在藥物中之用途；以及用此類化合物治療患者之方法；其中 R_1、B_1、B_2、B_3、B_4、B_5 及 B_6 如本文所定義。

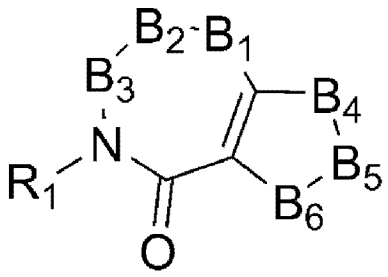
The present invention provides compounds of formula (I):



Formula (I)

compositions comprising such compounds; the use of such compounds in medicine; and methods of treating patients with such compounds; wherein R $_1$, B $_1$, B $_2$, B $_3$, B $_4$, B $_5$, and B $_6$are as defined herein.

特徵化學式：



式(I)

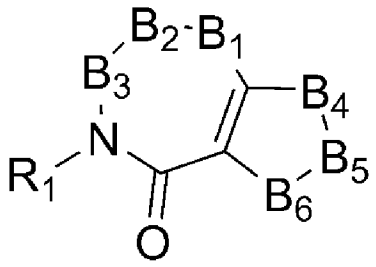
【發明摘要】

【中文發明名稱】酶抑制劑

【英文發明名稱】ENZYME INHIBITORS

【中文】

本發明提供式(I)化合物：

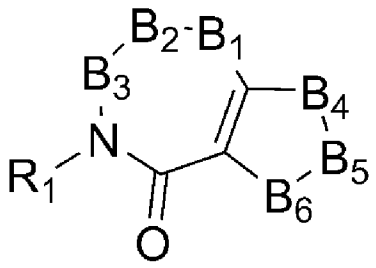


式(I)

包含此類化合物之組合物；此類化合物在藥物中之用途；以及用此類化合物治療患者之方法；其中R_1、B_1、B_2、B_3、B_4、B_5及B_6如本文所定義。

【英文】

The present invention provides compounds of formula (I):



Formula (I)

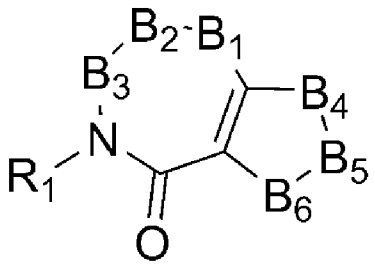
compositions comprising such compounds; the use of such compounds in medicine; and methods of treating patients with such compounds; wherein R_1, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, and B_6 are as defined herein.

【指定代表圖】無

【代表圖之符號簡單說明】

無

【特徵化學式】



式(I)

【發明說明書】

【中文發明名稱】酶抑制劑

【英文發明名稱】ENZYME INHIBITORS

【技術領域】

【0001】 本發明係關於作為因子XIIa (FXIIa)抑制劑之酶抑制劑，及包含此類抑制劑之醫藥組合物，以及此類抑制劑之用途。

【先前技術】

【0002】 本發明化合物為因子XIIa (FXIIa)抑制劑，且因此具有許多可能之治療應用，尤其用於治療牽涉因子XIIa抑制作用之疾病或疾患。

【0003】 FXIIa為一種絲胺酸蛋白酶(EC 3.4.21.38)，源自其酶原前驅體，即因子XII (FXII)，該前驅體由*F12*基因表現。單鏈FXII具有低水準之醯胺分解活性，該活性在與帶負電之表面相互作用後增加，且與其活化有關(參見Invanov等人, Blood. 2017年3月16日;129(11):1527-1537. doi: 10.1182/blood-2016-10-744110)。FXII蛋白水解裂解為FXIIa之重鏈及輕鏈會急劇增加催化活性。保留其完整重鏈之FXIIa為αFXIIa。保留其重鏈之小片段之FXIIa為βFXIIa。αFXIIa及βFXIIa之單獨催化活性有助於FXIIa之活化及生物化學功能。*F12*基因中之突變及多態性可改變FXII及FXIIa之裂解。

【0004】 FXIIa具有與許多其他絲胺酸蛋白酶不同之獨特且特定之結構。例如，FXIIa中之Tyr99指向活性位點，從而部分地阻斷S2袋且賦予其封閉特徵。含有Tyr99殘基之其他絲胺酸蛋白酶(例如，FXa、tPA及FIXa)具有更開放之S2袋。此外，在數種胰蛋白酶樣絲胺酸蛋白酶中，P4袋內襯有「芳族盒」，該「芳族盒」負責相應抑制劑之P4驅動之活性及選擇性。然而，FXIIa具有不完整「芳族

盒」，導致P4袋更加開放。參見例如「*Crystal structures of the recombinant β-factor XIIa protease with bound Thr-Arg and Pro-Arg substrate mimetics*」M. Pathak等人, Acta. Cryst.2019, D75, 1-14；「*Structures of human plasma β－factor XIIa cocrystallized with potent inhibitors*」A Dementiev等人, Blood Advances 2018, 2(5), 549-558；「*Design of Small-Molecule Active-Site Inhibitors of the S1A Family Proteases as Procoagulant and Anticoagulant Drugs*」P. M. Fischer, J. Med. Chem., 2018, 61(9), 3799-3822；「*Assessment of the protein interaction between coagulation factor XII and corn trypsin inhibitor by molecular docking and biochemical validation*」B. K. Hamad等人 Journal of Thrombosis and Haemostasis, 15: 1818－1828。

【0005】 FXIIa將血漿前激肽釋放酶(PK)轉化為血漿激肽釋放酶(PKa)，從而提供FXII至FXIIa之正回饋活化。FXII、PK及高分子量激肽原(HK)一起代表接觸系統。FXIIa介導之血漿前激肽釋放酶轉化為血漿激肽釋放酶可導致HK後續裂解生成緩激肽，緩激肽為一種有效發炎激素，亦可增加血管滲透性，與諸如遺傳性血管性水腫(HAE)之病症有關。接觸系統經由多種機制活化，包括與帶負電之表面、帶負電之分子、未折疊之蛋白質、人工表面、外來組織(例如生物移植物，包括生物假體心臟瓣膜及器官/組織移植物)、細菌以及介導接觸系統組件組裝之生物表面(包括內皮及細胞外基質)相互作用。此外，接觸系統由纖溶酶活化，且其他酶對FXII之裂解可促進其活化。

【0006】 接觸系統之活化會導致激肽釋放酶激肽系統(KKS)、補體系統及內在凝血途徑之活化(參見https://www.genome.jp/kegg-bin/show_pathway?map04610)。此外，FXIIa直接地或經由PKa間接地具有額外受質，包括蛋白酶活化受體(PAR)、纖維蛋白溶酶原及神經肽Y (NPY)，該等受質可有助於FXIIa之生物活性。FXIIa

抑制作用可能藉由治療與此等系統、途徑、受體及激素相關之疾病及疾患而提供臨床益處。

【0007】 PAR2之PKa活化介導神經發炎，且可能促進包括多發性硬化症在內之神經發炎性病症(參見Göbel等人, Proc Natl Acad Sci U S A. 2019年1月2日;116(1):271-276. doi: 10.1073/pnas.1810020116)。血管平滑肌細胞上PAR1及PAR2之PKa活化與血管肥大及動脈粥樣硬化有關(參見Abdallah等人, J Biol Chem. 2010年11月5日;285(45):35206-15. doi: 10.1074/jbc.M110.171769)。FXIIa將纖維蛋白溶酶原活化為纖溶酶，有助於纖維蛋白溶解(參見Konings等人, Thromb Res. 2015年8月;136(2):474-80. doi: 10.1016/j.thromres.2015.06.028)。PKa以蛋白水解方式裂解NPY且由此改變其與NPY受體之結合(Abid等人, J Biol Chem. 2009年9月11日;284(37):24715-24. doi: 10.1074/jbc.M109.035253)。FXIIa抑制作用可能藉由治療由PAR信號傳導、NPY代謝及纖維蛋白溶酶原活化引起之疾病及疾患而提供臨床益處。

【0008】 FXIIa介導之KKS活化導致產生緩激肽(BK)，其可介導例如血管性水腫、疼痛、發炎、血管滲透性過高及血管舒張(參見Kaplan等人, Adv Immunol. 2014;121:41-89. doi: 10.1016/B978-0-12-800100-4.00002-7；及Hopp等人, J Neuroinflammation. 2017年2月20日;14(1):39. doi: 10.1186/s12974-017-0815-8)。加達西單抗(CSL-312)為一種針對FXIIa之單株抗體抑制劑，最近完成了一項3期研究，其中已報告每月預防性皮下治療會減少患有I/II型遺傳性血管性水腫(HAE)之患者之發作，HAE會導致臉、手、喉嚨、胃腸道及生殖器之間歇性腫脹(參見https://www.clinicaltrials.gov/ct2/show/NCT04656418及Craig等人, The Lancet. 2023;401(10382):1079-1090. doi: 10.1016/S0140-6736(23)00350-1)。FXII中促進其活化為FXIIa之突變已經

鑑定為HAE之原因(參見Björkqvist等人, J Clin Invest. 2015年8月3日;125(8):3132-46. doi: 10.1172/JCI77139；及de Maat等人, J Allergy Clin Immunol. 2016年11月;138(5):1414-1423.e9. doi: 10.1016/j.jaci.2016.02.021)。由於FXIIa介導PK生成PKa，FXIIa抑制劑可能為所有形式之BK介導之血管性水腫提供保護作用，包括HAE及非遺傳性緩激肽介導之血管性水腫(BK-AEnH)。

【0009】「遺傳性血管性水腫」可定義為以緩激肽介導之血管性水腫(例如，嚴重腫脹)的反復發作為特徵且由遺傳性基因功能障礙/缺陷/突變引起之任何病症。目前已知三個類別之HAE：(i) 1型HAE、(ii) 2型HAE及(iii)正常C1抑制劑HAE (正常C1-Inh HAE)。然而，表徵HAE病因之工作正在進行中，因此預期未來可能定義更多類型之HAE。

【0010】不希望受理論束縛，據信1型HAE係由SERPING1基因突變引起的，該等突變導致血液中之C1抑制劑的水準降低。不希望受理論束縛，據信2型HAE係由SERPING1基因突變引起的，該等突變導致血液中之C1抑制劑的功能障礙。不希望受理論束縛，正常C1-Inh HAE之原因尚不明確，且潛在基因功能障礙/缺陷/突變有時仍未知。已知正常C1-Inh HAE之原因與C1抑制劑之水準降低或功能障礙無關(與1型及2型HAE相比)。正常C1-Inh HAE可藉由回顧家族史且注意到已自前一代遺傳血管性水腫(且因此，其為遺傳性血管性水腫)來診斷。正常C1-Inh HAE亦可藉由確定與C1抑制劑相關之彼等基因以外之基因存在功能障礙/缺陷/突變來進行診斷。例如，據報導，由纖維蛋白溶酶原引起之功能障礙/缺陷/突變可引起正常C1-Inh HAE (參見例如Veronez等人, Front Med (Lausanne). 2019年2月21日;6:28. doi: 10.3389/fmed.2019.00028；或Recke等人, Clin Transl Allergy. 2019年2月14日;9:9. doi: 10.1186/s13601-019-0247-x.)。另據報導，由因子XII引起之功能障礙/

缺陷/突變可引起正常C1-Inh HAE (參見例如Mansi等人 2014 The Association for the Publication of the Journal of Internal Medicine Journal of Internal Medicine, 2015, 277; 585 – 593；或Maat等人 J Thromb Haemost. 2019年1月;17(1):183-194. doi: 10.1111/jth.14325)。

【0011】 然而，血管性水腫未必為遺傳性的。實際上，另一類血管性水腫為緩激肽介導之非遺傳性血管性水腫(BK-AEnH)，其並非由遺傳性基因功能障礙/缺陷/突變引起的。BK-AEnH之潛在原因通常為未知及/或未定義的。然而，BK-AEnH之病徵及症狀與HAE之彼等病徵及症狀相似，不受理論束縛，據信係由於HAE與BK-AEnH之間共享緩激肽介導之途徑。特定言之，BK-AEnH之特徵在於反復急性發作，其中流體積聚於血管外部，從而阻斷血液或淋巴液之正常流動且導致諸如手、腳、四肢、臉、腸道、氣道或生殖器之組織快速腫脹。

【0012】 BK-AEnH之特定類型包括：由正常C1抑制劑(AE-nC1 Inh)引起之非遺傳性血管性水腫，其可為環境、激素或藥物誘導的；獲得性血管性水腫；過敏反應相關之血管性水腫；血管緊張素轉換酶(ACE)抑制劑誘導之血管性水腫；二肽基肽酶4抑制劑誘導之血管性水腫；及tPA誘導之血管性水腫(組織纖維蛋白溶酶原活化劑誘導之血管性水腫)。然而，此等因素及疾患僅在相對較小比例之個體中引起血管性水腫之原因尚不清楚。

【0013】 可誘導AE-nC1 Inh之環境因素包括空氣污染(Kedarisetty等人, Otolaryngol Head Neck Surg. 2019年4月30日:194599819846446. doi: 10.1177/0194599819846446)，及銀奈米顆粒，諸如用作健康照護、生物醫學及消費產品中之抗細菌組分之彼等(Long等人, Nanotoxicology. 2016;10(4):501-11. doi: 10.3109/17435390.2015.1088589)。

【0014】 各種出版物表明緩激肽及接觸系統途徑與BK-AEnH之間之關聯，以及潛在治療功效，參見例如：Bas等人 (N Engl J Med 2015; Leibfried and Kovary. J Pharm Pract 2017)；van den Elzen等人 (Clinic Rev Allerg Immunol 2018)；Han等人 (JCI 2002)。

【0015】 例如，BK介導之AE可能由血栓溶解療法引起。例如，各種出版物中論述了tPA誘導之血管性水腫，其為急性中風罹病者在血栓溶解療法後之潛在危及生命之併發症(參見例如Simão等人, Blood. 2017年4月20日;129(16):2280-2290. doi: 10.1182/blood-2016-09-740670；Fröhlich等人, Stroke. 2019年6月11日:STROKEAHA119025260. doi: 10.1161/STROKEAHA.119.025260；Rathbun, Oxf Med Case Reports. 2019年1月24日;2019(1):omy112. doi: 10.1093/omcr/omy112；Lekoubou等人, Neurol Res. 2014年7月;36(7):687-94. doi: 10.1179/1743132813Y.0000000302；Hill等人, Neurology. 2003年5月13日;60(9):1525-7)。

【0016】 Stone等人 (Immunol Allergy Clin North Am. 2017年8月;37(3):483-495.)報告稱，某些藥物可引起血管性水腫。

【0017】 Scott等人 (Curr Diabetes Rev. 2018;14(4):327-333. doi: 10.2174/1573399813666170214113856)報告二肽基肽酶-4抑制劑誘導之血管性水腫之病例。

【0018】 Hermanrud等人, (BMJ Case Rep. 2017年1月10日;2017. pii: bcr2016217802)報告了與二肽基肽酶IV之藥理學抑制作用相關的復發性血管性水腫，且亦論述了與血管緊張素轉換酶抑制劑(ACEI-AAE)相關之獲得性血管性水腫。Kim等人 (Basic Clin Pharmacol Toxicol. 2019年1月;124(1):115-122. doi: 10.1111/bcpt.13097)報告了血管緊張素II受體阻斷劑(ARB)相關之血管性水腫。Reichman等人, (Pharmacoepidemiol Drug Saf. 2017年10月;26(10):1190-1196. doi: 10.1002/pds.4260)亦報告了

服用ACE抑制劑、ARB抑制劑及β阻斷劑之患者存在血管性水腫風險。Diestro等人 (J Stroke Cerebrovasc Dis. 2019年5月;28(5):e44-e45. doi: 10.1016/j.jstrokecerebrovasdis.2019.01.030)亦報告了某些血管性水腫與ARB之間可能存在關聯。

【0019】 Giard等人 (Dermatology. 2012;225(1):62-9. doi: 10.1159/000340029)報告稱，雌激素避孕可加速緩激肽介導之血管性水腫，即所謂的「雌激素相關之血管性水腫」。

【0020】 接觸系統介導之KKS活化亦與視網膜水腫及糖尿病性視網膜病變有關(參見Liu等人, Biol Chem. 2013年3月;394(3):319-28. doi: 10.1515/hsz-2012-0316)。在來自患有晚期糖尿病性視網膜病變及糖尿病性黃斑水腫(DME)之患者的玻璃體液中，FXIIa濃度有所增加(參見Gao等人, Nat Med. 2007年2月;13(2):181-8. Epub 2007年1月28日及Gao等人, J Proteome Res. 2008年6月;7(6):2516-25. doi: 10.1021/pr800112g)。FXIIa參與介導血管內皮生長因子(VEGF)獨立性DME (參見Kita等人, Diabetes. 2015年10月;64(10):3588-99. doi: 10.2337/db15-0317)及VEGF介導之DME (參見Clermont等人, Invest Ophthalmol Vis Sci. 2016年5月1日;57(6):2390-9. doi: 10.1167/iovs.15-18272)。FXII缺乏可預防VEGF誘導之小鼠視網膜水腫(Clermont等人, ARVO talk 2019)。因此已提出，FXIIa抑制作用將為糖尿病性視網膜病變及由視網膜血管滲透性過高引起之視網膜水腫提供治療作用，包括DME、視網膜靜脈阻塞、年齡相關性黃斑退化(AMD)。

【0021】 如上所述，接觸系統可藉由與細菌相互作用而經活化，因此FXIIa參與敗血症及細菌性敗血症之治療(參見Morrison等人, J Exp Med. 1974年9月1日;140(3):797-811)。因此，FXIIa抑制劑可能在治療敗血症、細菌性敗血症及瀰漫性血管內凝血(DIC)方面提供治療益處。

【0022】 FXIIa介導之KKS活化及BK產生與神經退化性疾病有關，包括阿爾茲海默氏病、多發性硬化症、癲癇及偏頭痛(參見Zamolodchikov等人, Proc Natl Acad Sci U S A. 2015年3月31日;112(13):4068-73. doi: 10.1073/pnas.1423764112；Simões等人, J Neurochem. 2019年8月;150(3):296-311. doi: 10.1111/jnc.14793；Göbel等人, Nat Commun. 2016年5月18日;7:11626. doi: 10.1038/ncomms11626；及https://clinicaltrials.gov/ct2/show/NCT03108469)。因此，FXIIa抑制劑可能在減少此等神經退化性疾病之進展及臨床症狀方面提供治療益處。

【0023】 FXIIa亦與過敏反應有關(參見Bender等人, Front Immunol. 2017年9月15日;8:1115. doi: 10.3389/fimmu.2017.01115；及Sala-Cunill等人, J Allergy Clin Immunol. 2015年4月;135(4):1031-43.e6. doi: 10.1016/j.jaci.2014.07.057)。因此，FXIIa抑制劑可能在降低過敏反應之臨床嚴重程度及發生率方面提供治療益處。

【0024】 FXIIa在凝血中之作用在50多年前已得到鑑定，且已在使用生物化學、藥理學、遺傳及分子研究之出版物中得到廣泛記錄(參見Davie等人, Science. 1964年9月18日;145(3638):1310-2)。FXIIa介導之因子XI (FXI)活化會觸發內在凝血途徑。此外，FXIIa可以FXI獨立性方式增加凝血(參見Radcliffe等人, Blood. 1977年10月;50(4):611-7；及Puy等人, J Thromb Haemost. 2013年7月;11(7):1341-52. doi: 10.1111/jth.12295)。對人類及實驗動物模型之研究表明，FXII缺乏會延長活化部分凝血酶原時間(APTT)，而不會對止血產生不利影響(參見Renné等人, J Exp Med. 2005年7月18日;202(2):271-81；及Simão等人, Front Med (Lausanne). 2017年7月31日;4:121. doi: 10.3389/fmed.2017.00121)。FXIIa之藥理學抑制作用亦會延長APTT，而不會增加出血(參見Worm等人, Ann Transl Med. 2015年10月;3(17):247. doi: 10.3978/j.issn.2305-5839.2015.09.07)。此等資料表明，FXIIa抑制作用可能提供抗血

栓形成之治療作用，而不會抑制出血。因此，FXIIa抑制劑可能用於治療一系列促血栓形成疾患，包括靜脈血栓栓塞(VTE)；癌症相關之血栓形成；由機械及生物假體心臟瓣膜、導管、體外膜氧合(ECMO)、左心室輔助器件(LVAD)、透析、心肺分流(CPB)引起之併發症；鐮狀細胞疾病、關節置換術、由tPA誘導之血栓形成、Paget-Schroetter症候群及Budd-Chari症候群。FXIIa抑制劑可能用於治療及/或預防與此等疾患相關之血栓形成、水腫及發炎。

【0025】 與血液接觸之醫學器件表面可引起血栓形成。FXIIa抑制劑亦可藉由降低與血液接觸之器件凝結血液之傾向而用於治療或預防血栓栓塞。與血液接觸之器件的實例包括血管移植物、支架、留置導管、外部導管、矯形假體、心臟假體及體外循環系統。

【0026】 臨床前研究已顯示，FXIIa已顯示出促進中風及其在缺血性中風及出血性事件兩者後之併發症(參見Barbieri等人, J Pharmacol Exp Ther. 2017年3月;360(3):466-475. doi: 10.1124/jpet.116.238493；Krupka等人, PLoS One. 2016年1月27日;11(1):e0146783. doi: 10.1371/journal.pone.0146783；Leung等人, Transl Stroke Res. 2012年9月;3(3):381-9. doi: 10.1007/s12975-012-0186-5；Simão等人, Blood. 2017年4月20日;129(16):2280-2290. doi: 10.1182/blood-2016-09-740670；及Liu等人, Nat Med. 2011年2月;17(2):206-10. doi: 10.1038/nm.2295)。因此，FXIIa抑制作用可改良中風患者之治療之臨床神經學結果。

【0027】 FXII缺乏已顯示出減少*Apoe*$^{-/-}$小鼠之動脈粥樣硬化病變的形成(Didiasova等人, Cell Signal. 2018年11月;51:257-265. doi: 10.1016/j.cellsig.2018.08.006)。因此，FXIIa抑制劑可能用於治療動脈粥樣硬化。

【0028】 FXIIa已顯示出直接地或經由PKa間接地活化補體系統(Ghebrehiwet等人, Immunol Rev. 2016年11月;274(1):281-289. doi: 10.1111/imr.12469)。BK增加視網膜中之補體C3，且玻璃體內補體C3之增加導致DME (Murugesan等人, Exp Eye Res. 2019年7月24日;186:107744. doi: 10.1016/j.exer.2019.107744)。FXIIa及PKa均活化補體系統(參見Irmscher等人, J Innate Immun. 2018;10(2):94-105. doi: 10.1159/000484257；及Ghebrehiwet等人, J Exp Med. 1981年3月1日;153(3):665-76)。

【0029】 一項評估FXIIa抑制劑CSL312 (加達西單抗)在COVID-19治療中之安全性及功效的2期研究已經指派clinicaltrials.gov識別符NCT04409509。Shatzel等人 (Res Pract Thromb Haemost, 2020年5月15日;4(4):500-505. doi: 10.1002/rth2.12349)亦關於調查接觸系統在COVID-19中之作用。

【0030】 Wygrecka等人 (「Coagulation factor XII regulates inflammatory responses in human lungs」, European Respiratory Journal 2017 50: PA339; DOI: 10.1183/1393003.congress-2017.PA339)係關於FXII積聚在急性呼吸窘迫症候群(ARDS)肺中之作用。

【0031】 Wong等人 (「CSL312, a Novel Anti-FXII Antibody, Blocks FXII-Induced IL-6 Production from Primary Non-Diseased and Idiopathic Pulmonary Fibrosis Fibroblasts」, American Journal of Respiratory and Critical Care Medicine 2020;201:A6363)報告稱，經活化FXII可藉由直接刺激纖維母細胞產生促纖維化細胞介素IL-6而促進肺纖維化(例如，特發性肺纖維化)。

【0032】 McKenzie等人 (「A phase I, first-in-human, randomized dose-escalation study of anti-activated factor XII monoclonal antibody garadacimab」, *Clin Transl Sci.* 2022;15:626-637. doi:10.1111/cts.13180)報告了FXIIa抑制劑加達西單抗(CSL312)之1

期研究，且指示加達西單抗有可能阻斷緩激肽產生且因此預防HAE之水腫發作。此外，所報告之結果符合臨床前研究(Larsson M, Rayzman V, Nolte MW等人 A factor XIIa inhibitory antibody provides thromboprotection in extracorporeal circulation without increasing bleeding risk.*Sci Transl Med.* 2014;6(222):222ra17)，其中抗FXIIa抗體有效抑制小鼠及兔血栓形成模型中的FXIIa介導之凝血及血栓形成，而不會增加出血事件之風險。

【0033】 Göbel等人 (The Coagulation Factors Fibrinogen, Thrombin, and Factor XII in Inflammatory Disorders—A Systematic Review, Front. Immunol., 26 July 2018| https://doi.org/10.3389/fimmu.2018.01731)係關於FXII在類風濕性關節炎(RA)中之作用。

【0034】 Scheffel等人 (Cold-induced urticarial autoinflammatory syndrome related to factor XII activation, Nature Communications第11卷, 文章編號：179 (2020))報告稱，接觸系統活化與細胞介素介導之發炎(諸如冷誘導之蕁麻疹自體發炎症候群)之間存在關聯。

【0035】 Peyrou等人 (The kallikrein－kinin pathway as a mechanism for auto-control of brown adipose tissue activity, NATURE COMMUNICATIONS, (2020) 11:2132, https://doi.org/10.1038/s41467-020-16009-x)報告了用於控制由激肽釋放酶-激肽系統介導之棕色脂肪組織(BAT)生熱活性之途徑，該途徑可能有助於擴大針對肥胖及相關疾病之治療策略的潛在藥理學候選物範圍，該等治療策略經設計以藉由活化BAT來改良能量消耗且移除過量血液代謝物。BAT活性受損導致肥胖及胰島素抗性。

【0036】 Wygrecka等人 (「Use of a FXIIa-Inhibitor in the treatment of renal fibrosis and/or kidney disease」 WO2019/113642)係關於因子XII之抑制劑，該抑制劑用於治療或預防腎病、腎纖維化、腎小球硬化、腎疤痕、原生或移植腎臟之缺血/再灌注損傷及/或急性腎損傷。

【0037】 Nicoletti等人 (「Primary Role for Kinin B_1 and B_2 Receptors in Glioma Proliferation」, Mol Neurobiol (2017) 54:7869 – 7882; DOI 10.1007/s12035-016-0265-9)報告稱，腦神經膠質母細胞瘤生長及惡性腫瘤以及包括水腫及認知功能在內之其併發症可能受到B1及B2激肽受體調節之有益影響，該等B1及B2激肽受體為激肽釋放酶-激肽系統之一部分，由緩激肽活化。

【0038】 Gamboa等人 (「Bradykinin B_2 receptor blockade and intradialytic hypotension」, BMC Nephrology (2023) 24:134, https://doi.org/10.1186/s12882-023-03192-4)報告稱，阻斷緩激肽之作用或抑制激肽釋放酶-激肽系統之活化對於治療及預防透析中低血壓(IDH)之發生具有治療作用。

【0039】 據說為FXIIa抑制劑之化合物已由以下描述：Rao等人 (「Factor XIIa Inhibitors」 WO2018/093695)、Hicks等人 (「Factor XIIa Inhibitors」 WO2018/093716)、Breslow等人 (「Aminotriazole immunomodulators for treating autoimmune diseases」 WO2017/123518)及Ponda等人 (「Aminacylindazole immunomodulators for treatment of autoimmune diseases」 WO2017/205296及「Pyranopyrazole and pyrazolopyridine immunomodulators for treatment of autoimmune diseases」WO2019/108565)。FXII/FXIIa抑制劑據說已由Nolte等人 (「Factor XII inhibitors for the administration with medical procedures comprising contact with artificial surfaces」 WO2012/120128)描述。

【0040】 據說為FXIIa調節劑之化合物已由Philippou等人 (「Factor XIIa Inhibitors」 WO 2019/211585及WO 2019/186164)描述。據說為FXIIa抑制劑之大環肽已由Wilbs等人 (Nat Commun 11, 3890 (2020). Doi: 10.1038/s41467-020-17648-w)描述。

【0041】 迄今為止，尚無FXIIa抑制劑獲批用於醫學用途，且亦無小分子FXIIa抑制劑處於臨床開發中。儘管某些已知化合物據說為FXIIa之調節劑或抑制劑，此等化合物可能受到限制，諸如作為不可逆或共價結合劑、與其他相關酶相比對FXIIa之選擇性不良或者未顯示出適合經口療法之藥物動力學特性。例如，具有醯化反應性之化合物(例如，醯化胺基三唑)通常為不可逆共價結合劑，且有時由於亦可能其固有反應性而在水及/或血漿中不穩定。與其他絲胺酸蛋白酶(諸如凝血酶、FXa、FXIa、KLK1、纖溶酶、胰蛋白酶)相比，對FXIIa之選擇性不良，會增加脫靶效應之風險。非所需脫靶效應之實例為出血。若抑制劑為共價結合劑，則脫靶效應可能變得更糟(亦即，選擇性不良及脫靶效應之可能性通常更高)。因此，仍需要開發對FXIIa具有高度選擇性之新FXIIa抑制劑，以便例如減輕非選擇性及細胞毒性之風險。亦仍需要開發非共價抑制劑之新FXIIa抑制劑，以減輕非選擇性及細胞毒性之風險。尤其需要開發小分子FXIIa抑制劑，尤其作為經口療法。

【0042】 鑒於上述，亦仍需要開發新FXIIa抑制劑，該等抑制劑將可用於治療多種病症，尤其血管性水腫；HAE，包括：(i) 1型HAE、(ii) 2型HAE及(iii)正常C1抑制劑HAE (正常C1-Inh HAE)；BK-AEnH，包括AE-nC1 Inh、ACE及tPA誘導之血管性水腫；血管滲透性過高；中風，包括缺血性中風及出血性事件；視網膜水腫；糖尿病性視網膜病變；DME；視網膜靜脈阻塞；AMD；神經發炎；神經

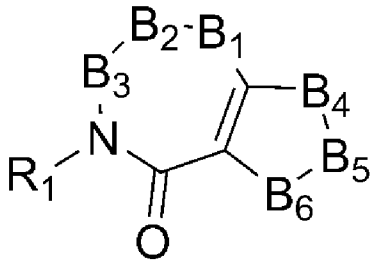
發炎/神經退化性病症，諸如MS (多發性硬化症)；其他神經退化性疾病，諸如阿爾茲海默氏病、癲癇及偏頭痛；敗血症；細菌性敗血症；發炎；過敏反應；血栓形成；因與血液接觸之醫學器件凝結血液之傾向增加而導致血栓栓塞；促血栓形成疾患，包括瀰漫性血管內凝血(DIC)、靜脈血栓栓塞(VTE)、癌症相關之血栓形成、由機械及生物假體心臟瓣膜引起之併發症、由導管引起之併發症、由ECMO引起之併發症、由LVAD引起之併發症、由透析引起之併發症、由CPB引起之併發症、鐮狀細胞疾病、關節置換術、由tPA誘導之血栓形成、Paget-Schroetter症候群及Budd-Chari症候群；動脈粥樣硬化；COVID-19；與SARS-CoV-2感染相關之COVID-19；急性呼吸窘迫症候群(ARDS)；特發性肺纖維化(IPF)；類風濕性關節炎(RA)；冷誘導之蕁麻疹自體發炎症候群；肥胖；糖尿病；腎病；腎纖維化；腎小球硬化；腎疤痕；原生或移植腎臟之缺血/再灌注損傷；急性腎損傷；腦神經膠質母細胞瘤生長及惡性腫瘤以及包括水腫及認知功能在內之其併發症；及透析中低血壓(IDH)。詳言之，仍需要開發新FXIIa抑制劑。

【發明內容】

【實施方式】

【0043】 本發明係關於一系列因子XIIa (FXIIa)抑制劑。本發明化合物潛在地可用於治療牽涉因子XIIa抑制作用之疾病或疾患。本發明進一步關於該等抑制劑之醫藥組合物、該等組合物作為治療劑之用途以及使用此等組合物之治療方法。

【0044】 特定言之，本發明提供式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵與B_2連接；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為N(R_2)，B_5為N，且B_6為C(R_3)，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為C(R_2)，B_5為N，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

(iii) B_4為C(R_2)，B_5為C(H)，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或

R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OR_{33}、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-N(R_{36})(R_{37})、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OR_{38}、-(C(H)(烷基))-(C=O)-N(R_{39})(R_{40})、-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-N(R_{41})(R_{42})；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_{28}、R_{33} R_{36}、R_{37}、R_{38}、R_{39}、R_{40}、R_{41}及R_{42}各自獨立地選自H及小烷基；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

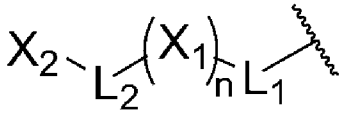
R_{16}選自H、烷基、環烷基、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

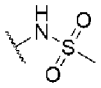
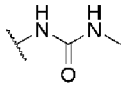
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

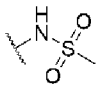
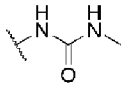
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

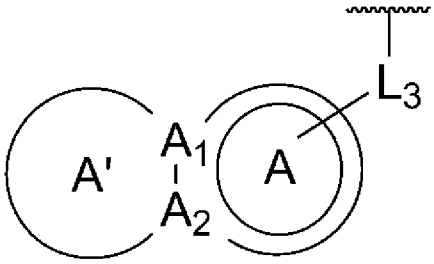
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

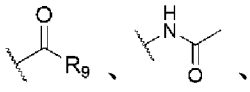
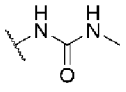
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A’可

視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1、2或3個獨立地選自小烷基^b、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

小烷基^{b}為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、OMe、OEt、O^{i}Pr、O^{n}Pr、O(環丙基)、OCF_3、$OCHF_2$、CN、CF_3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、O(環丙基)、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、O(環丙基)、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{12}R_{13}$、$OCF_3$及$CF_3$之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基[a]為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

環烷基[b]為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、NH_2、NH(小烷基)、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

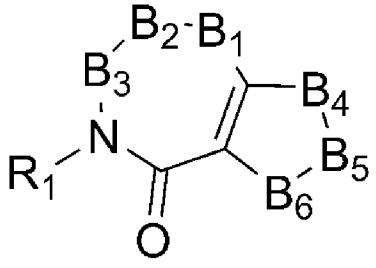
雜芳基^{a}為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基^{a}可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

本發明進一步提供式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

(iii) B_4為$C(R_2)$，B_5為C(H)，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或

R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OR_{33}、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-N(R_{36})(R_{37})、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OR_{38}、-(C(H)(烷基))-(C=O)-N(R_{39})(R_{40})、-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-N(R_{41})(R_{42})；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_{28}、R_{33} R_{36}、R_{37}、R_{38}、R_{39}、R_{40}、R_{41}及R_{42}各自獨立地選自H及小烷基；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

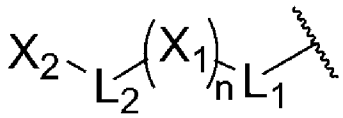
R_{16}選自H、烷基、環烷基、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

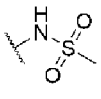
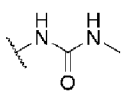
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

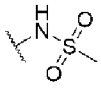
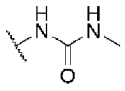
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

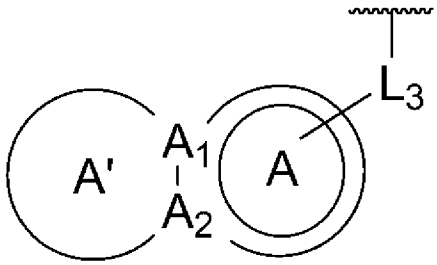
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

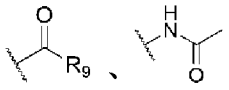
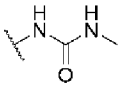
L_3為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基[a]為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

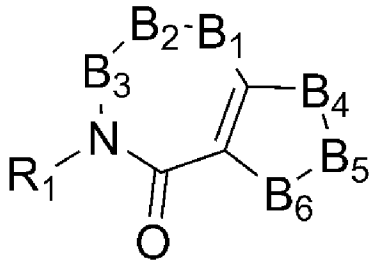
雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

本發明進一步提供式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為N(R_2)，B_5為N，且B_6為C(R_3)，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為C(R_2)，B_5為N，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

(iii) B_4為C(R_2)，B_5為C(H)，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或

R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

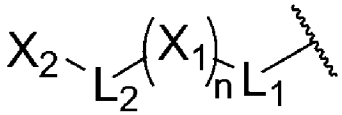
R_{16}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

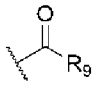
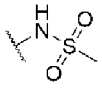
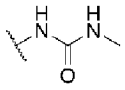
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

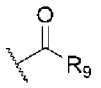
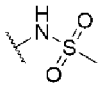
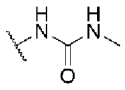
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

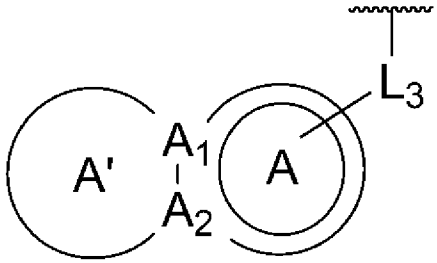
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

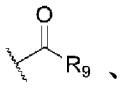
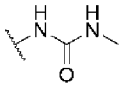
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

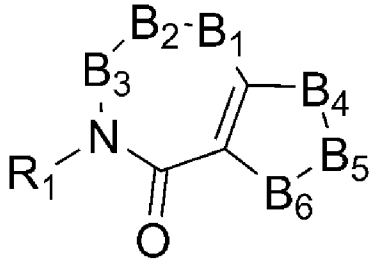
雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、$(C_1$-$C_6)$烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

本發明亦提供式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

(iii) B_4為$C(R_2)$，B_5為C(H)，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或

R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

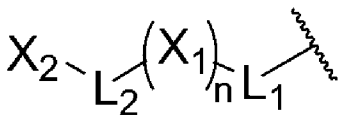
R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{16}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

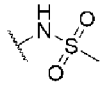
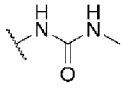
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

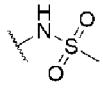
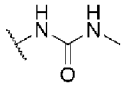
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

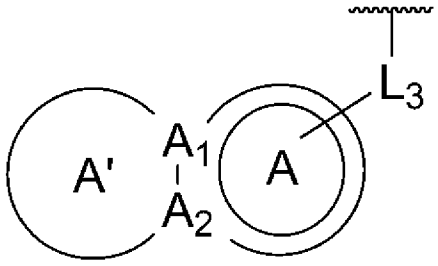
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}

在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

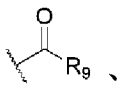
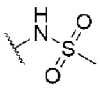
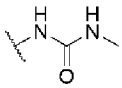
L_3為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

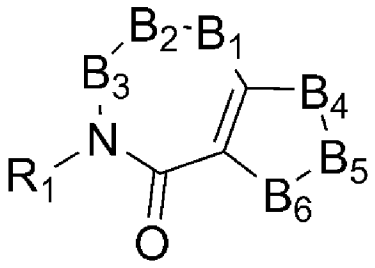
雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0045】 本發明亦提供式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

(iii) B_4為$C(R_2)$，B_5為C(H)，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或

R_2選自H、$-(CH_2)_{0-3}-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{14}-C(=O)R_{15}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、$-CH_2-O-R_{16}$及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

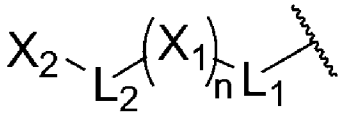
R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{16}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

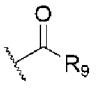
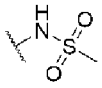
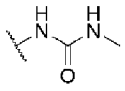
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

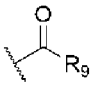
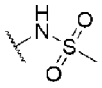
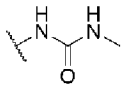
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

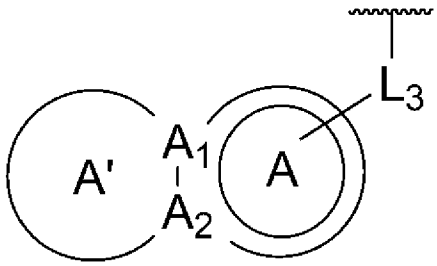
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

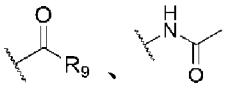
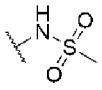
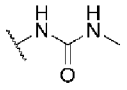
L_3為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、、  、  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

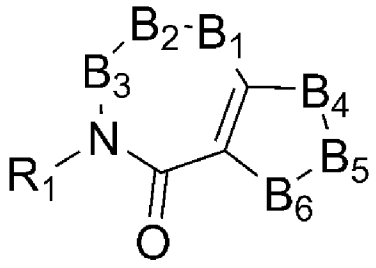
雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0046】 本發明尤其提供式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為$C(R_2)$，B_5為C(H)，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、$-(CH_2)_{0-3}-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{14}-C(=O)R_{15}$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{34}-S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、$-CF_3$、鹵基、芳基、雜芳基、$-CH_2-O-R_{16}$及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、$-OH$、$-S(=O)_2-$(小烷基)、$-(CH_2)_{1-3}-(C=O)-OR_{33}$、$-(CH_2)_{1-3}-(C=O)-N(R_{36})(R_{37})$、$-(CH_2)_{0-3}-$環烷基[b]、$-(CH_2)_{0-3}-$雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-$(C=O)-OR_{38}$、-(C(H)(烷基))-$(C=O)-N(R_{39})(R_{40})$、-(C(H)(雜芳基))-$(C=O)-OR_{28}$及-(C(H)(雜芳基))-$(C=O)-N(R_{41})(R_{42})$；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_{28}、R_{33} R_{36}、R_{37}、R_{38}、R_{39}、R_{40}、R_{41}及R_{42}各自獨立地選自H及小烷基；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

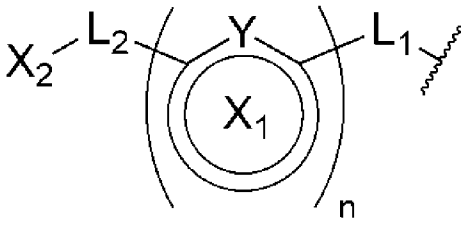
R_{16}選自H、烷基、環烷基、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，其中式(II)由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

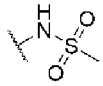
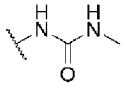
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

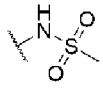
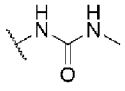
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

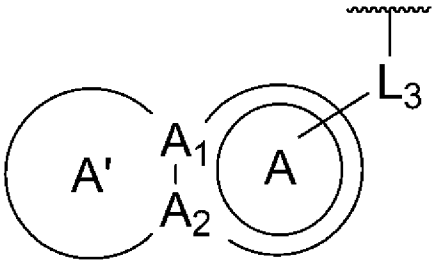
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳

環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

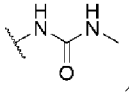
L_3為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  及  ；

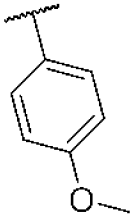
其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1、2或3個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；其中R_3不為  ；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

小烷基[b]為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、OMe、OEt、O^{i}Pr、O^{n}Pr、O(環丙基)、OCF_3、$OCHF_2$、CN、CF_3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、O(環丙基)、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、O(環丙基)、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基[a]為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

環烷基[b]為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、NH_2、NH(小烷基)、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

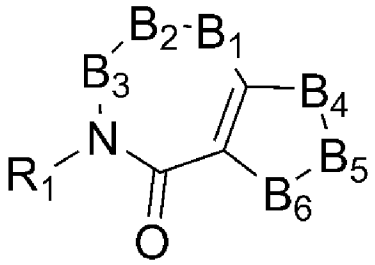
雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0047】 本發明尤其亦提供式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為N(R_2)，B_5為N，且B_6為C(R_3)，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為C(R_2)，B_5為N，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為C(R_2)，B_5為C(H)，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

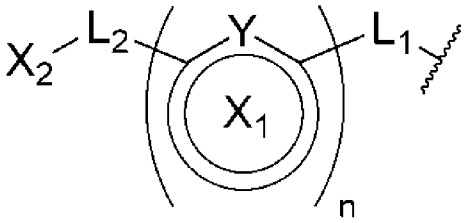
R_{16}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，其中式(II)由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

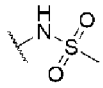
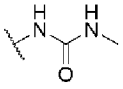
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

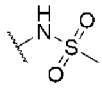
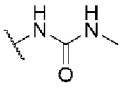
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

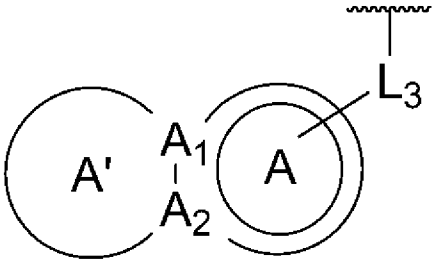
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

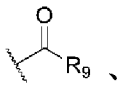
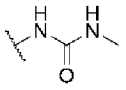
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

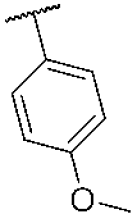
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、

-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；其中R_3不為  ；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

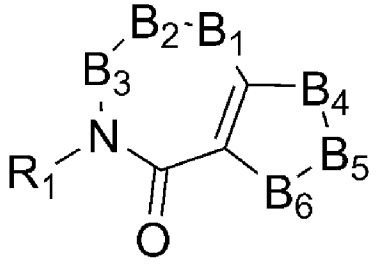
雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0048】 本發明尤其亦提供式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為C(R_2)，B_5為C(H)，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OR_{33}、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-N(R_{36})(R_{37})、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OR_{38}、-(C(H)(烷基))-(C=O)-N(R_{39})(R_{40})、-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-N(R_{41})(R_{42})；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_{28}、R_{33} R_{36}、R_{37}、R_{38}、R_{39}、R_{40}、R_{41}及R_{42}各自獨立地選自H及小烷基；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

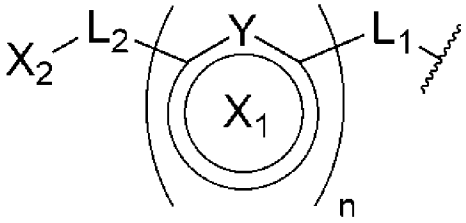
R_{16}選自H、烷基、環烷基、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，其中式(II)由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

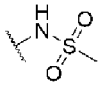
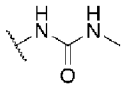
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

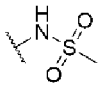
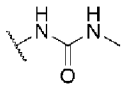
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

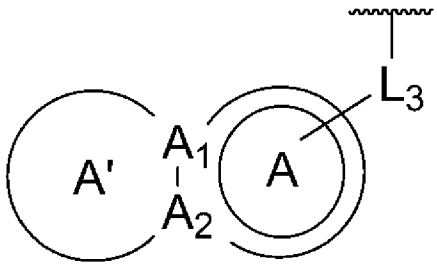
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

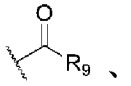
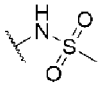
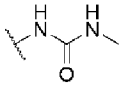
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  及  ；

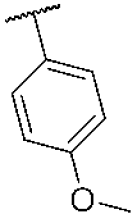
其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、

-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；其中R_3不為  ；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基[a]為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0049】 式(I)化合物已經開發為FXIIa抑制劑，如上所述，其具有獨特且特異性結合位點，且需要小分子FXIIa抑制劑。此外，本發明化合物經過精心開發，

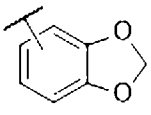
與其他絲胺酸蛋白酶之其他抑制作用相比，顯示出對FXIIa抑制作用之選擇性，從而降低脫靶效應及細胞毒性之風險。詳言之，本發明之一目的係提供與FXa抑制作用相比顯示出對FXIIa抑制作用之選擇性(諸如表8中所示之選擇性)的化合物。本發明之另一目的係提供具有可被視為適合經口遞送之特徵(例如合適之經口藥物動力學型態，諸如下表10中所示之資料)的化合物。本發明化合物亦可避免包括與共價結合特性相關之基團，例如具有醯化反應性之基團，諸如醯化胺基三唑，且因此可提供作為可逆抑制劑之化合物，以進一步降低脫靶效應及細胞毒性之風險。

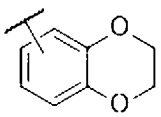
【0050】 本發明亦提供如本文所定義之化合物之前藥，或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

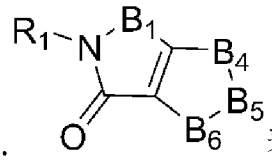
【0051】 本發明亦提供如本文所定義之化合物之N-氧化物，或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

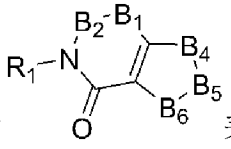
【0052】 應理解，「亞甲基二氧基」僅指-O-CH_2-O-，其中「亞甲基二氧基」不能經取代。

【0053】 應理解，「伸乙基二氧基」僅指-O-CH_2-CH_2-O-，其中「伸乙基二氧基」不能經取代。

【0054】 應理解，「經亞甲基二氧基取代之芳基」係指如上文所定義之芳基，其中芳基經-O-CH_2-O-取代。例如，  。

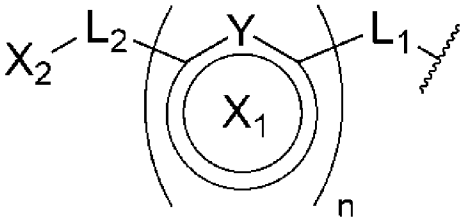
【0055】 應理解，「經伸乙基二氧基取代之芳基」係指如上文所定義之芳基，其中芳基經-O-CH_2-CH_2-O-取代。例如，  。

【0056】 應理解，當B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵時，式(I)可由.  表示。

【0057】 應理解，B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，式(I)可由  表示。

【0058】 應理解，「碳中心」及「氮中心」分別指碳及氮原子環成員，其可如上所述經取代。當存在自由價時，應理解此等自由價將連接至氫以生成穩定化合物。

【0059】 應理解，式(IIb)：



將單一環原子Y固定於X_1上，直接位於L_1及L_2所連接之位置之間。或者，L_1及L_2基團可被視為在X1上經「1,3-取代」，其中環上之2位係發現環原子Y之位置。

【0060】 應理解，各式中之連接線表示鍵。例如，B_3與R_1所連接之氮原子之間之連接線意謂B_3當存在時與此氮鍵結。

【0061】 應理解，當一些環成員選自N、O及S時，其餘環成員為碳。

【0062】 應理解，$-(CH_2)_0-$表示單鍵。

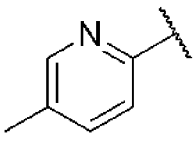
【0063】 應理解，當n＝0時，L_1直接鍵結至L_2。

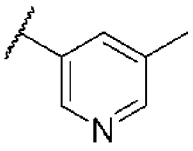
【0064】 應理解，當n＝0且L_1為單鍵時，L_2直接鍵結至分子之剩餘部分。

【0065】 應理解，當n＝0且L_2為單鍵時，L_1直接鍵結至X_2。

【0066】 應理解，當n＝0且L_1及L_2均為單鍵時，X_2直接鍵結至分子之剩餘部分。

【0067】 應理解，L_3可鍵結至A之任何環成員，不包括A_1及A_2。應理解，當L_3為單鍵時，分子之剩餘部分直接連接至A之任何環成員，不包括A_1及A_2。

【0068】 應理解，當R_3為經取代之6員環時，與B_6連接之*對*位意謂與分子之其餘部分連接之碳相對的環成員。當R_3為經取代之苯基時，此為4位。例如，當R_3為  時，其在與B_6連接之*對*位具有甲基。

【0069】 應理解，當R_3為經取代之6員環時，與B_6連接之*間*位意謂藉由一個其他環成員與分子之其餘部分連接之碳隔開的環成員。當R_3為經取代之苯基時，此為3位。例如，當R_3為  時，其在與B_6連接之*間*位具有甲基。

【0070】 術語「O-連接」(諸如在「O-連接之烴」中)意謂烴*經由*氧原子與分子之剩餘部分接合。

【0071】 在諸如-$(CH_2)_{0-6}$-A之基團中，「-」表示取代基與分子之剩餘部分之連接點。

【0072】 應理解，「多環烷基」可為具有以下結構之金剛烷基：  。金剛烷基可視情況經取代，如上文對於多環烷基所定義。

【0073】 應理解，當A不含N及S環成員兩者時，只要不存在S環成員，A就可含有N環成員，且只要不存在N環成員，A就可含有S環成員。

【0074】 應理解，R_3始終具有至少一個如上文所定義之取代基，且可具有兩個如上文所定義之取代基，但不可為未取代的。

【0075】 應理解，當R_3未經4-甲氧基取代時，R_3可如上文所定義以其他方式經取代，但相對於R_3與分子之剩餘部分之連接點，在4-位處不存在「$O\text{-}CH_3$」取代基。

【0076】 應理解，當R_3未經4-烷氧基取代時，R_3可如上文所定義以其他方式經取代，但相對於R_3與分子之剩餘部分之連接點，在4-位處不存在烷氧基取代基。

【0077】 應理解，當任何變數(例如，烷基)出現不止一次時，其在每次出現時之定義獨立於每次其他出現。

【0078】 應理解，「其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物」意謂「其醫藥學上可接受之鹽」、「其醫藥學上可接受之溶劑合物」及「其鹽之醫藥學上可接受之溶劑合物」。

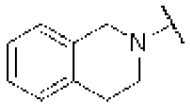
【0079】 本發明化合物可作為超過一種立體異構物之混合物提供。當作為立體異構物之混合物提供時，一種立體異構物可以相對於剩餘立體異構物>90%之純度存在。更特定言之，當作為立體異構物之混合物提供時，一種立體異構物可以相對於剩餘立體異構物>95%之純度存在。

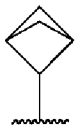
【0080】 應理解，取代基可以其游離未鍵結結構(例如，哌啶)或其鍵結結構(例如，哌啶基)命名。無意有任何差異。

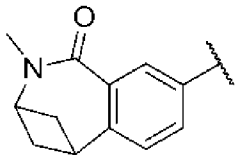
【0081】 應理解，本發明化合物包含數個取代基。除非另有說明，否則當本文更特定地定義此等取代基中之任一者時，上述此等基團之取代基/視情況選用之取代基亦適用。例如，R_5可為雜芳基^a，其更特定言之可為異喹啉基。在此情況下，異喹啉基可以與「雜芳基^a」相同之方式視情況經取代。

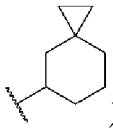
【0082】 應理解，術語「在可能之情況下」意謂若化學上可能，例如不超過化學穩定化合物之化合價，則可存在所論述之基團、原子或取代基。例如，B_1可在可能之情況下經2個取代基取代，但僅在B_1為碳中心且不與B_2雙鍵鍵結之情況下。此係因為，在B_1為氮中心之情況下，它已經為二價且僅具有一個備用價位來鍵結至取代基或與B_2形成雙鍵。同樣，在B_1為碳中心且與B_2雙鍵鍵結之情況下，它已經為三價且僅具有一個備用價位來鍵結至取代基。

【0083】 應理解，除非另有說明，否則雙環(bi-cyclic/bicyclic)環系統可為稠合、橋接或螺環系統。

【0084】 應理解，稠環系統係指其中環系統中之兩個環共享兩個相鄰原子(亦即，一個公共共價鍵)之環系統。例如，  為稠環系統(特定言之，稠合雙環系統)，其可被視為苯環及哌啶環共享公共鍵。

【0085】 應理解，橋接環系統係指具有共享三個或三個以上原子之兩個環之環系統。例如，  為橋接環系統(特定言之，橋接雙環系統)，其可被視為環丁烷環及第二環丁烷環在橋上接合且共享三個共同原子。

【0086】 應理解，當兩個不同碳環成員藉由橋接-CH_2-基團連接時，形成橋接環系統作為單環A'之一部分。例如，  含有橋接環系統，其中兩個不同碳環成員藉由橋接-CH_2-基團連接。

【0087】 應理解，螺環系統係指其中環系統中之兩個環共享一個共同原子之環系統。例如，  為螺環系統(特定言之，螺雙環系統)，其可被視為環丙烷環及環己烷環共享共同碳原子。

【0088】 應理解，當任何變數(例如，烷基)出現不止一次時，其在每次出現時之定義獨立於每次其他出現。

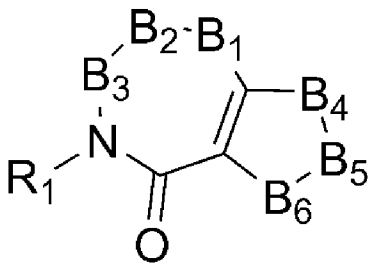
【0089】 應理解，僅當取代基及變數之組合產生穩定化合物時，此類組合才為允許的。

【0090】 如本文所用，術語「緩激肽介導之血管性水腫」意謂遺傳性血管性水腫，及任何非遺傳性緩激肽介導之血管性水腫。例如，「緩激肽介導之血管性水腫」涵蓋遺傳性血管性水腫及來源不明之急性緩激肽介導之血管性水腫。

【0091】 如本文所用，術語「遺傳性血管性水腫」意謂由遺傳性基因功能障礙、缺陷或突變引起之任何緩激肽介導之血管性水腫。結果，術語「HAE」至少包括1型HAE、2型HAE及正常C1抑制劑HAE (正常C1-Inh HAE)。

【0092】 如由上文定義顯而易見，且為了避免疑慮，應理解「B_x」(例如B_1)在上文中定義且不涵蓋硼。

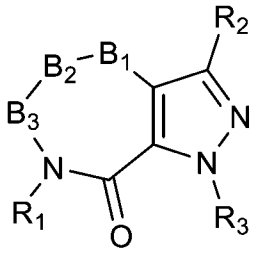
【0093】 如上所述，本發明提供式(I)化合物，



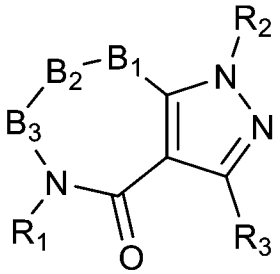
式(I)，

或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0094】 式(I)化合物可為式(Ia)或(Ie)化合物，



式(Ia)，



式(Ie)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，或

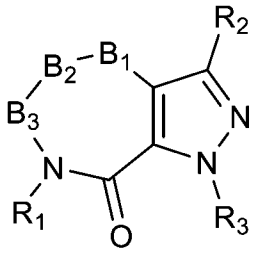
(iii) B_2及B_3均為碳中心

其中，當B_2為碳中心時，B_1經由單鍵或雙鍵與B_2連接；且

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接，

或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0095】 式(I)化合物可為式(Ia)化合物，



式(Ia)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，或

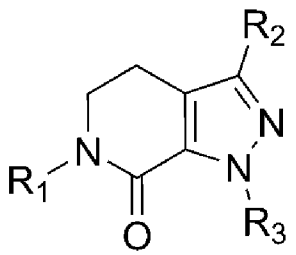
(iii) B_2及B_3均為碳中心

其中，當B_2為碳中心時，B_1經由單鍵或雙鍵與B_2連接；且

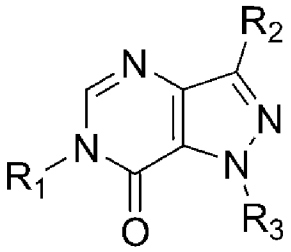
其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接，

或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

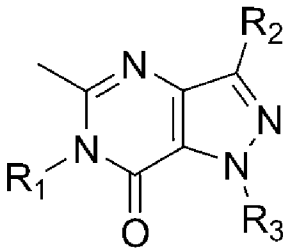
【0096】 式(I)化合物可為式(Ib)、式(Ic)或式(Id)化合物，



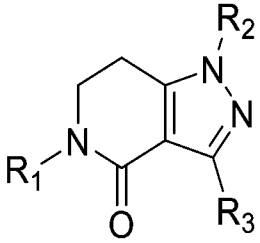
式(Ib)，



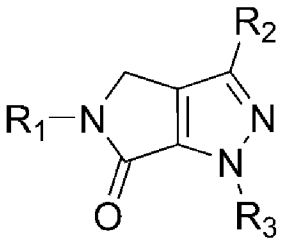
式(Ic)，



式(Id)，



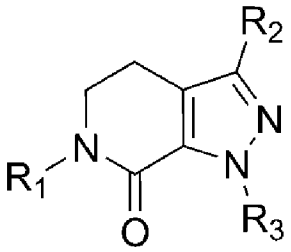
式(If)，



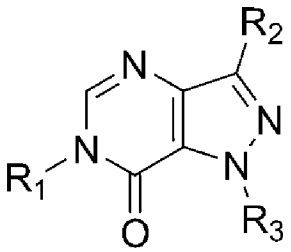
式(Ig)，

或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

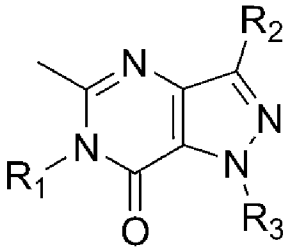
【0097】 式(I)化合物可為式(Ib)、式(Ic)或式(Id)化合物，



式(Ib)，



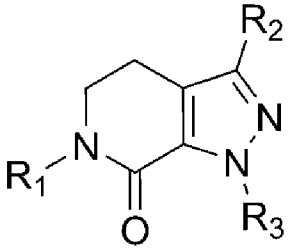
式(Ic)，



式(Id)，

或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

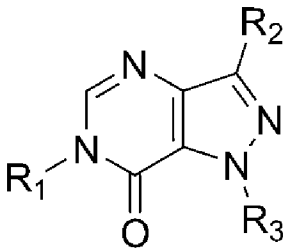
【0098】 式(I)化合物較佳地為式(Ib)化合物，



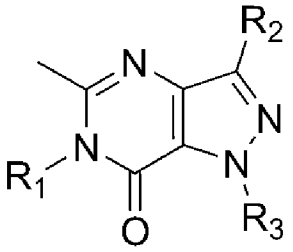
式(Ib)，

或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0099】 式(I)化合物可為式(Ic)或式(Id)化合物，



式(Ic)，

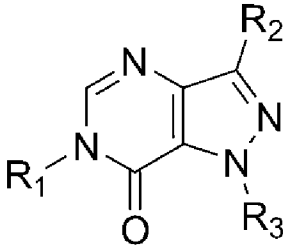


式(Id)，

或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0100】 當該化合物為式(Ic)或式(Id)化合物時，R_2可為-CN。

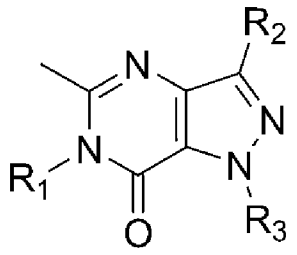
【0101】 式(I)化合物可為式(Ic)化合物，



式(Ic)，

或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

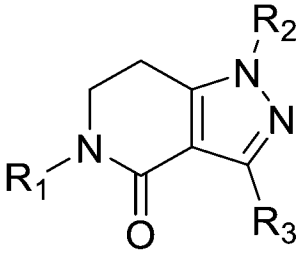
【0102】 式(I)化合物可為式(Id)化合物，



式(Id)，

或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

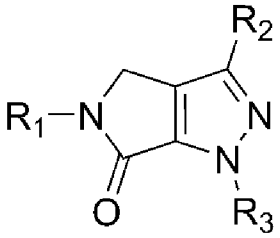
【0103】 式(I)化合物可為式(If)化合物，



式(If)，

或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0104】 式(I)化合物可為式(Ig)化合物，



式(Ig)，

或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0105】 較佳地，式(I)化合物為式(Ib)或(Id)化合物。

【0106】 如上所述，B_1為碳中心或氮中心；且；

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接。

【0107】 B_1可為氮中心。較佳地，B_1為碳中心。

【0108】 B_1可為碳中心或氮中心且B_2及B_3可一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵。

【0109】 B_1可為碳中心且B_2及B_3可一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵。

【0110】 B_1可為碳中心或氮中心且B_2可為碳中心或氮中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵。

【0111】 B_1可為碳中心或氮中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵。

【0112】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵。

【0113】 B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵。

【0114】 B_1可為碳中心或氮中心且B_2可為碳中心或氮中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接。

【0115】 B_1可為碳中心或氮中心且B_2可為碳中心或氮中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由雙鍵與B_2連接。

【0116】 B_1可為碳中心或氮中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接。

【0117】 B_1可為碳中心或氮中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由雙鍵與B_2連接。

【0118】 B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由雙鍵與B_2連接。

【0119】 B_2及B_3可一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，或B_2可為碳中心或氮中心，且B_3可為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵。

【0120】 其可為：

(i) B_1為碳中心，且B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_1為碳中心且B_2為碳中心，且B_1經由單鍵與B_2連接，或者

(iii) B_1為氮中心且B_2為碳中心，且B_1經由雙鍵與B_2連接。

【0121】 較佳地，B_1為碳中心且B_2為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1為氮中心且B_2為碳中心，且B_1經由雙鍵與B_2連接。

【0122】 較佳地，B_1為碳中心且B_2為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接。

【0123】 B_1為碳中心或氮中心；且其可為：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，或

(iii) B_2及B_3均為碳中心

其中，當B_2為碳中心時，B_1經由單鍵或雙鍵與B_2連接；且

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接。

【0124】 B_1可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代。

【0125】 當B_2為碳中心時，B_2可視情況經1個取代基取代，其中取代基為小烷基，視情況其中取代基為甲基。

【0126】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；其中B_1視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代。

【0127】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，且其中B_1視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代。

【0128】 B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由雙鍵與B_2連接，且其中B_2為視情況經1個取代基取代，其中該取代基為小烷基，視情況其中該取代基為甲基。

【0129】 如上所述：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為$C(R_2)$，B_5為C(H)，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接。

【0130】 較佳地，B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接。

【0131】 較佳地，B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接。

【0132】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接。

【0133】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，且B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接。

【0134】 如上所述，R_2選自H、$-(CH_2)_{0-3}-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{14}-C(=O)R_{15}$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{34}-S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、$-CH_2-O-R_{16}$及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、$-OH$、$-S(=O)_2-$(小烷基)、$-(CH_2)_{1-3}-(C=O)-OR_{33}$、$-(CH_2)_{1-3}-(C=O)-N(R_{36})(R_{37})$、$-(CH_2)_{0-3}-$環烷基[b]、$-(CH_2)_{0-3}-$雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-$(C=O)-OR_{38}$、-(C(H)(烷基))-$(C=O)-N(R_{39})(R_{40})$、-(C(H)(雜芳基))-$(C=O)-OR_{28}$及-(C(H)(雜芳基))-$(C=O)-N(R_{41})(R_{42})$；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_{28}、R_{33} R_{36}、R_{37}、R_{38}、R_{39}、R_{40}、R_{41}及R_{42}各自獨立地選自H及小烷基；

R_6選自H、烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{16}選自H、烷基、環烷基、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-$S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OR_{33}、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-N(R_{36})(R_{37})、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OR_{38}、-(C(H)(烷基))-(C=O)-N(R_{39})(R_{40})、-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-N(R_{41})(R_{42})；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_{28}、R_{33} R_{36}、R_{37}、R_{38}、R_{39}、R_{40}、R_{41}及R_{42}各自獨立地選自H及小烷基；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{16}選自H、烷基、環烷基、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-$S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；且

R_{16}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；且

R_{16}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基。

【0135】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

【0136】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

【0137】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

【0138】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

【0139】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

【0140】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

【0141】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

【0142】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

【0143】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

【0144】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

【0145】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

【0146】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

【0147】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

【0148】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

【0149】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

【0150】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

【0151】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

【0152】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

【0153】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

【0154】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

【0155】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

【0156】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

【0157】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

【0158】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

【0159】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

【0160】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

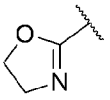
【0161】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

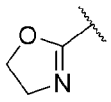
【0162】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

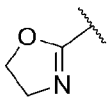
【0163】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

【0164】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

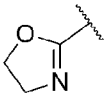
【0165】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

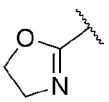
【0166】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

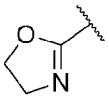
【0167】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及 

【0168】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O- R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

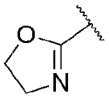
【0169】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN。

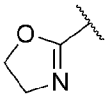
【0170】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-OH、-CH_2-O-R_{16}及  。

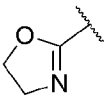
【0171】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-OH、-CH_2-O-R_{16}及  。

【0172】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-OH、-CH_2-O-R_{16}及  。

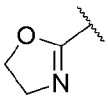
【0173】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-OH、及-CH_2-O-CH_3。

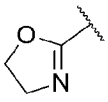
【0174】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

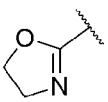
【0175】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

【0176】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

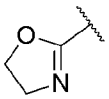
【0177】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN。

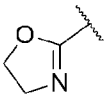
【0178】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  。

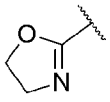
【0179】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  。

【0180】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{163}、-CH_2-OH及  。

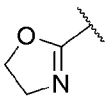
【0181】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3及-CH_2-OH。

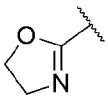
【0182】 R_2可選自H、-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

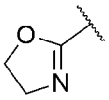
【0183】 較佳地，R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

【0184】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

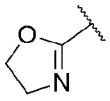
【0185】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN。

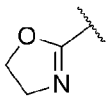
【0186】 R_2可選自H、-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  。

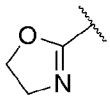
【0187】 R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  。

【0188】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  。

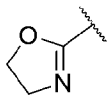
【0189】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3及-CH_2-OH。

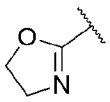
【0190】 R_2可選自H、-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

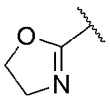
【0191】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

【0192】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

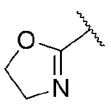
【0193】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN。

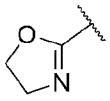
【0194】 R_2可選自H、-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-OH、-CH_2-O-R_{16}及  。

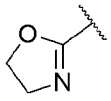
【0195】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-OH、-CH_2-O-R_{16}及  。

【0196】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-OH、-CH_2-O-CH_3及  。

【0197】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-OH及-CH_2-O-CH_3。

【0198】 R_2可選自H、-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-OH及  。

【0199】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-OH及  。

【0200】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-OH及  。

【0201】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)及-CH_2-OH。

【0202】 R_2可選自-(CH_2)$_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN。

【0203】 R_2可選自-(CH_2)$_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN。

【0204】 R_2可選自-(CH_2)$_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-C(=O)-O-R_6及-CH_2-O-CH_3。

【0205】 R_2可選自-(CH_2)$_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6及-CH_2-O-CH_3。

【0206】 R_2可選自-(CH_2)$_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-O-CH_3及-CN。

【0207】 R_2可選自-(CH_2)$_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)及-CH_2-O-CH_3。

【0208】 較佳地，R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN。

【0209】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN。

【0210】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6及-CH_2-O-CH_3。

【0211】 R_2可選自 -C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-O-CH_3及-CN。

【0212】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)及-CH_2-O-CH_3。

【0213】 更佳地，R_2為-C(=O)-N(R_4)(R_5)。

【0214】 較佳地，R_4為H或小烷基。

【0215】 R_4可為H或CH_3。

【0216】 R_4可為H。

【0217】 R_5可選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-2}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}。

【0218】 R_5可選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-2}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}。

【0219】 R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0220】 R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0221】 R_5可選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-2}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}。

【0222】 R_5可選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-2}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環

烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}。

【0223】 R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0224】 R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0225】 較佳地，R_5選自烷基、-OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-2}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-苯基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}。

【0226】 R_5可選自烷基、-OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-2}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-苯基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}。

【0227】 R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-苯基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0228】 R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-苯基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0229】 R_5可選自-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH$_2$)$_{1-2}$-(C=O)-OH、-(CH$_2$)$_{0-2}$-環烷基[a]、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH$_2$)$_{0-2}$雜芳基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR$_{28}$。

【0230】 R_5可選自-(CH$_2$)$_{0-2}$-環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基及-(CH$_2$)$_{0-2}$雜芳基。

【0231】 R_5可選自-(CH$_2$)$_{0-2}$-環烷基[b]、-(C(H)(苯基))-烷基及-(CH$_2$)$_{0-2}$雜芳基。

【0232】 R_5可選自-(CH$_2$)$_{0-2}$-環烷基[a]、-(C(H)(苯基))-烷基及-(CH$_2$)$_{0-2}$雜芳基。

【0233】 R_5可選自-(CH$_2$)$_{0-2}$-環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基及-(CH$_2$)$_{0-2}$雜芳基。

【0234】 R_5可為-(CH$_2$)$_{0-2}$雜芳基。

【0235】 R_5可選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH$_2$)$_{1-3}$-(C=O)-OR$_{33}$、-(CH$_2$)$_{1-3}$-(C=O)-N(R$_{36}$)(R$_{37}$)、-(CH$_2$)$_{0-3}$-環烷基[b]、-(CH$_2$)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH$_2$)$_{0-3}$-多環烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OR$_{38}$、及-(C(H)(烷基))-(C=O)-N(R$_{39}$)(R$_{40}$)。

【0236】 R_5可選自烷基、-(CH$_2$)$_{0-3}$-環烷基[b]、-(CH$_2$)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基及-(CH$_2$)$_{0-3}$-多環烷基。

【0237】 R_5可選自烷基、-(CH$_2$)$_{0-3}$-環丙基、-(CH$_2$)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基及-(CH$_2$)$_{0-3}$-多環烷基。

【0238】 R_5可選自烷基、-(CH$_2$)$_{0-3}$-環丙基及-(CH$_2$)$_{0-3}$-雜環烷基。

【0239】 R_5可選自烷基及-(CH$_2$)$_{0-3}$-雜環烷基。

【0240】 R_5可選自烷基及雜環烷基。

【0241】 較佳地，R_5選自小烷基、吡咯啶、哌啶及四氫呋喃，其中吡咯啶、哌啶及四氫呋喃可視情況經1或2個獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代。

【0242】 R_6可選自H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0243】 R_{14}可選自H及小烷基。

【0244】 R_{15}可選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0245】 R_{15}可選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0246】 R_{15}可選自H及小烷基。

【0247】 R_{15}可為甲基。

【0248】 R_{16}可選自H、小烷基、環烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基。

【0249】 R_{16}可選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基。

【0250】 R_{34}可選自H及小烷基。

【0251】 R_{34}可選自H及CH_3。

【0252】 R_{35}可選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-苯基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0253】 R_{35}可選自H、烷基及環烷基。

【0254】 R_{35}可選自H、小烷基及環丙基。

【0255】 R_4可為H或小烷基，且

R_5可選自烷基、-OH、$-S(=O)_2-$(小烷基)、$-(CH_2)_{1-3}-(C=O)-OH$、$-(CH_2)_{0-3}-$環烷基[b]、$-(CH_2)_{0-3}-$雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時選自H、烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基及 -(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0256】 R_4可為H或小烷基，且

R_5可選自烷基、-OH、$-S(=O)_2-$(小烷基)、$-(CH_2)_{1-3}-(C=O)-OH$、$-(CH_2)_{0-3}-$環烷基[a]、$-(CH_2)_{0-3}-$雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時選自H、烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基及 -(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0257】 R_4可為H或小烷基，且

R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及 -(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0258】 R_4可為H或小烷基，且

R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時可選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0259】 R_4可為H或小烷基，且

R_5可選自烷基、-OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、

-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時可選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0260】 R_4可為H或小烷基，且

R_5可選自烷基、-OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時可選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0261】 R_4可為H或小烷基，且

R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時可選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0262】 R_4可為H或小烷基，且

R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時可選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

【0263】 R_4可為H或小烷基，且

R_5可選自烷基、-OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、

-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時可為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0264】 R_4可為H或小烷基，且

R_5可選自烷基、-OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時可為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0265】 R_4可為H或小烷基，且

R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時可為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0266】 R_4可為H或小烷基，且

R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時可為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0267】 R_4可為H或CH_3，且

R_5可選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時可為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0268】 R_4可為H或CH_3，且

R_5可選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時可為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0269】 R_4可為H或CH_3，且

R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時可為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0270】 R_4可為H或CH_3，且

R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時可為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0271】 R_4可為H或CH_3，且

R_5可選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基；且

R_6當存在時可為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0272】 R_4可為H或CH_3，且

R_5選自小烷基、吡咯啶、哌啶及四氫呋喃，其中吡咯啶、哌啶及四氫呋喃可視情況經1或2個獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；且

R_6當存在時可為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0273】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN，其中：

【0274】 R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{14}選自H及小烷基；

R_{15}選自H及小烷基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；

R_{34}選自H及小烷基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0275】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-$S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0276】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-$S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN，其中：

【0277】 R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0278】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-$S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{14}選自H及小烷基；

R_{15}選自H及小烷基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；

R_{34}選自H及小烷基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0279】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0280】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0281】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0282】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{14}選自H及小烷基；

R_{15}選自H及小烷基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；

R_{34}選自H及小烷基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0283】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0284】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0285】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0286】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-$S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{14}選自H及小烷基；

R_{15}選自H及小烷基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；

R_{34}選自H及小烷基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0287】R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0288】R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0289】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0290】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-$S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{14}選自H及小烷基；

R_{15}選自H及小烷基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；

R_{34}選自H及小烷基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0291】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-$S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0292】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0293】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0294】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{14}選自H及小烷基；

R_{15}選自H及小烷基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；

R_{34}選自H及小烷基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0295】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0296】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-$S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0297】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0298】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{14}選自H及小烷基；

R_{15}選自H及小烷基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；

R_{34}選自H及小烷基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0299】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

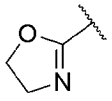
【0300】 R_2可選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0301】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、

-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

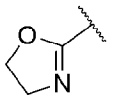
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0302】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0303】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0304】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

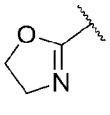
R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0305】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、

-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

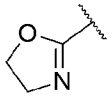
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0306】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0307】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3及-CH_2-OH，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

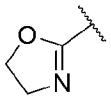
【0308】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6及-CH_2-O-CH_3，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0309】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、

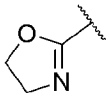
-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0310】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

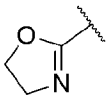
【0311】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0312】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、

-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

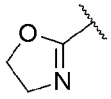
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0313】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0314】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3及-CH_2-OH，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

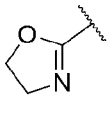
或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0315】 R_2可選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)及-CH_2-O-CH_3，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0316】 較佳地，R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

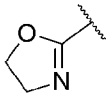
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0317】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0318】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

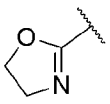
【0319】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0320】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、

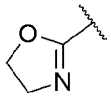
-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0321】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0322】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3及-CH_2-OH，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

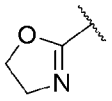
【0323】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6及-CH_2-O-CH_3，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0324】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、

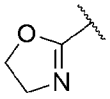
-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0325】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0326】 R_2可選自 -C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

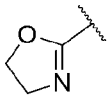
或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0327】 R_2可選自 -C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0328】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

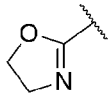
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基^b、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0329】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0330】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3及-CH_2-OH，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

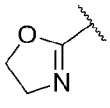
或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0331】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)及-CH_2-O-CH_3，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0332】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-OH及  ，其中：

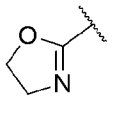
R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基^b、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6選自H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0333】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-OH及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[a]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0334】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)及-CH_2-OH，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

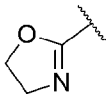
或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0335】 R_2可為-C(=O)-N(R_4)(R_5)，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代。

【0336】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基；且

R_6選自H及小烷基；且

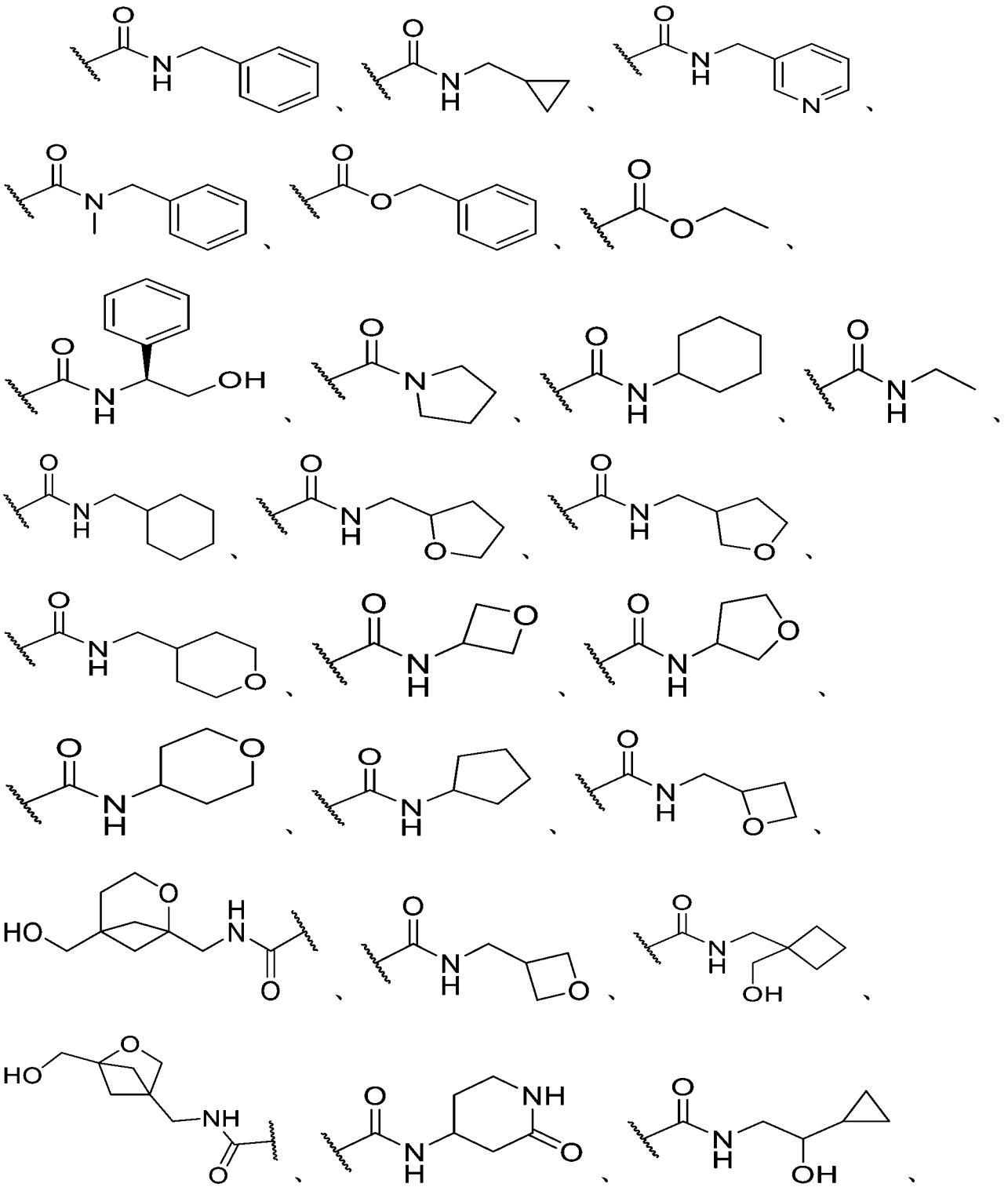
R_{16}選自H、小烷基及雜環烷基。

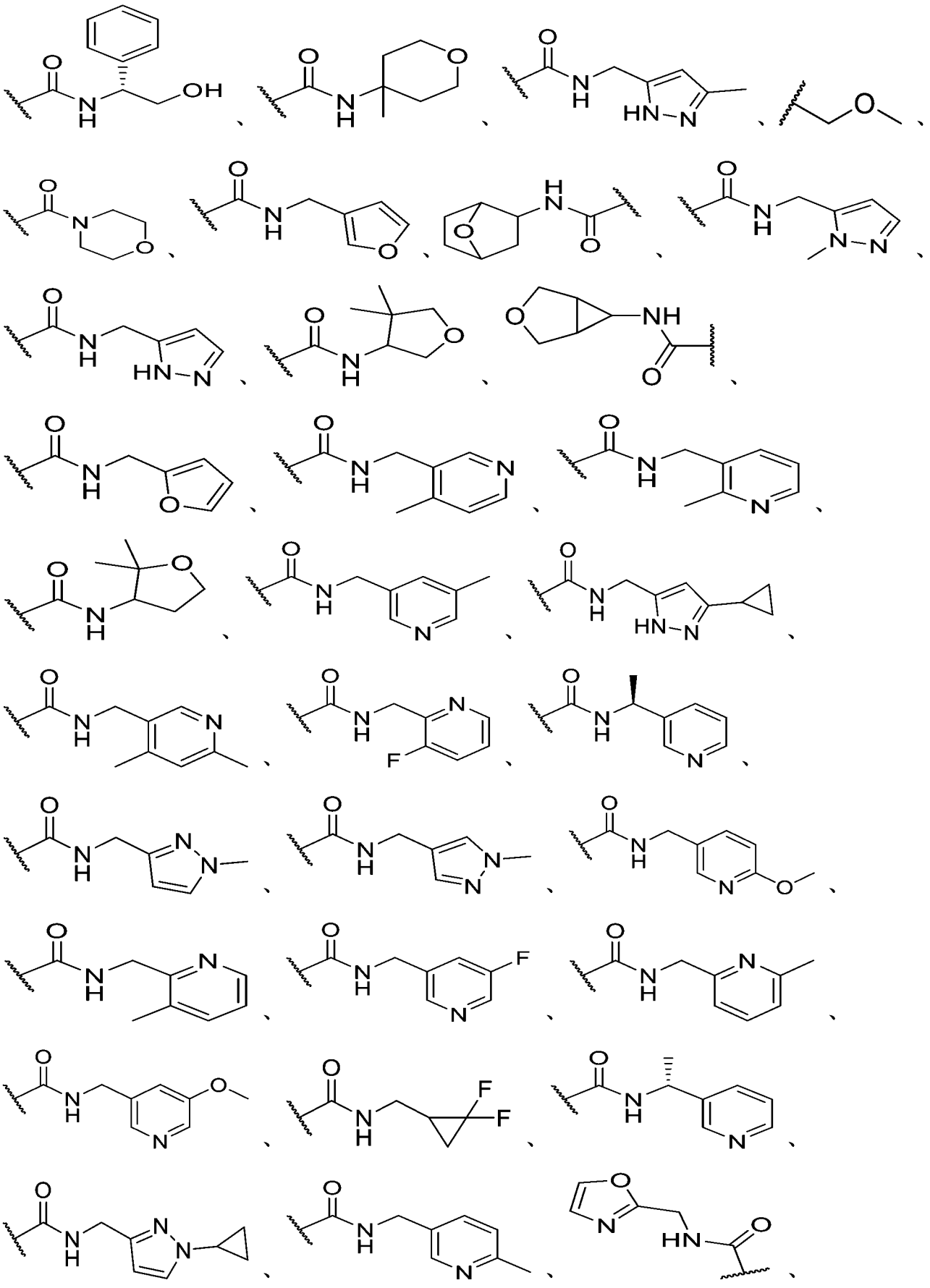
【0337】 R_2可為-C(=O)-N(R_4)(R_5)，其中：

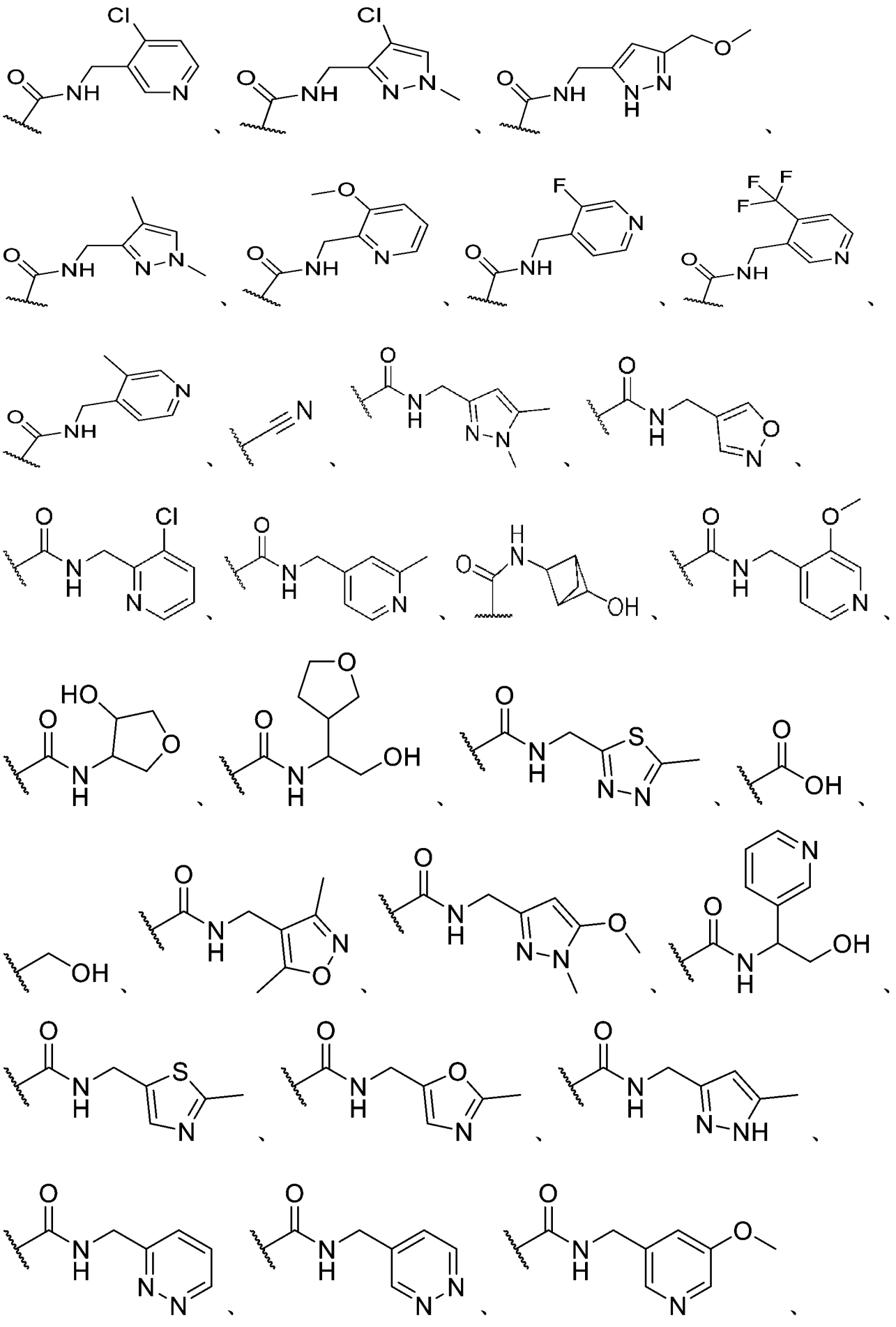
R_4為H或小烷基，且

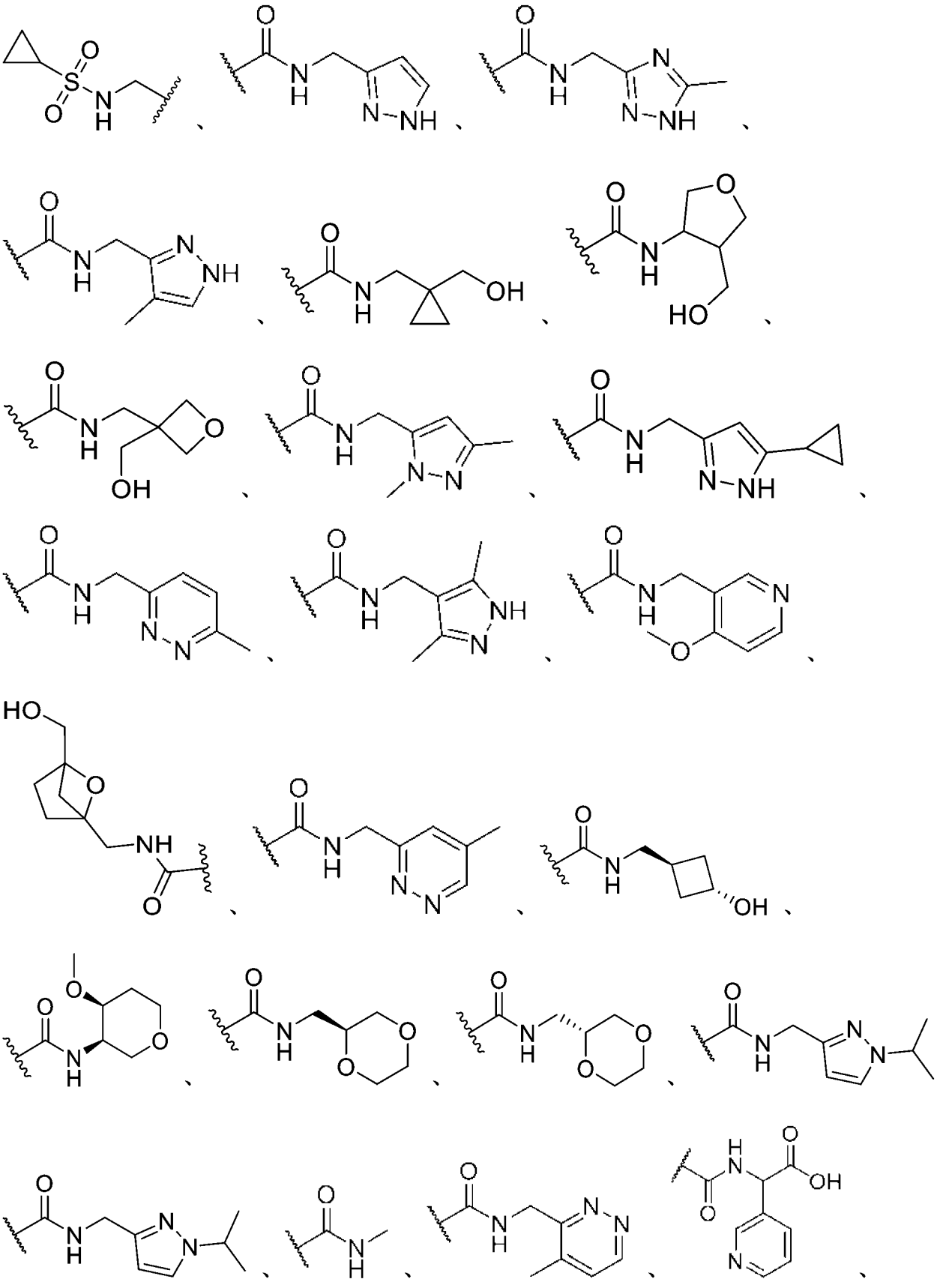
R_5選自小烷基、吡咯啶、哌啶及四氫呋喃，其中吡咯啶、哌啶及四氫呋喃可視情況經1或2個獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代。

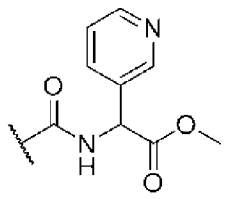
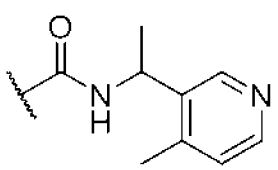
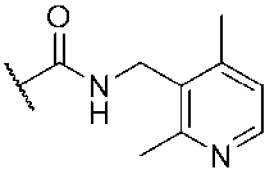
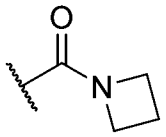
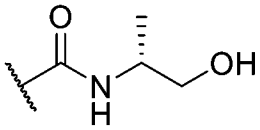
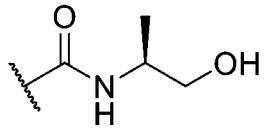
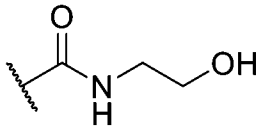
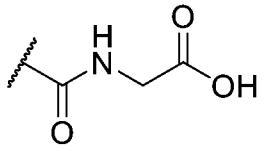
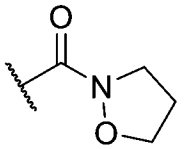
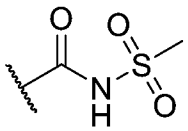
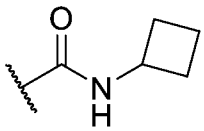
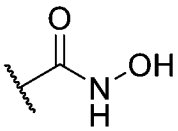
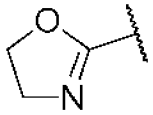
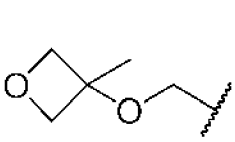
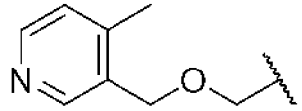
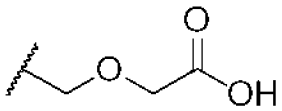
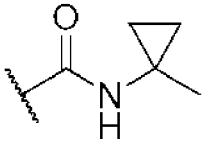
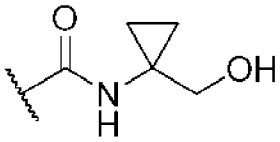
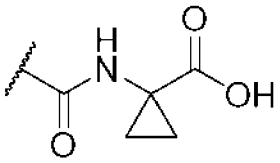
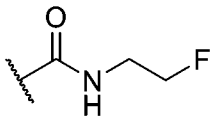
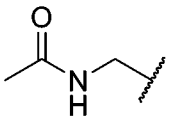
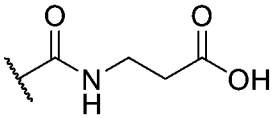
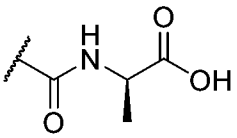
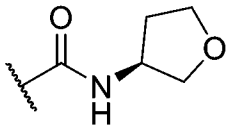
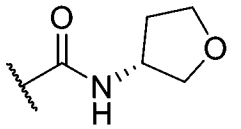
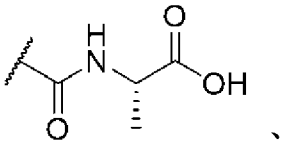
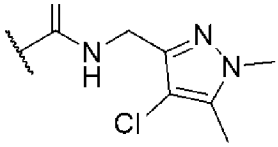
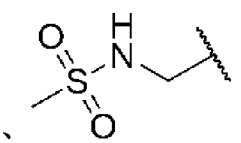
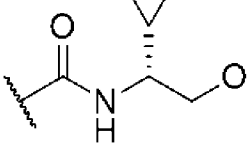
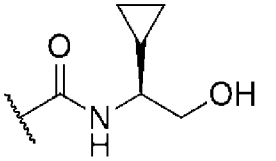
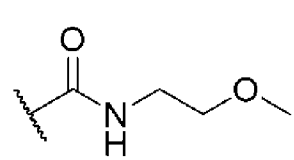
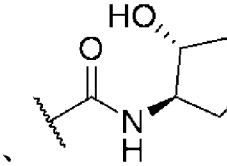
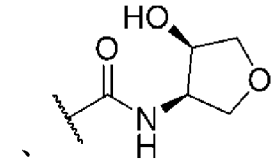
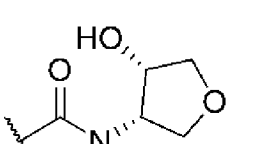
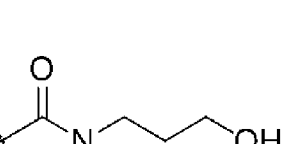
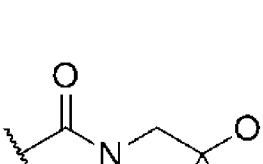
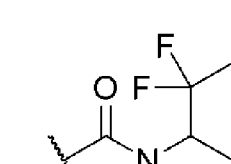
【0338】R_2可選自：









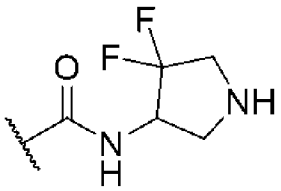
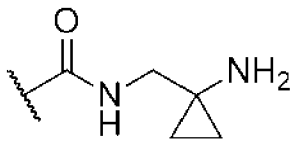
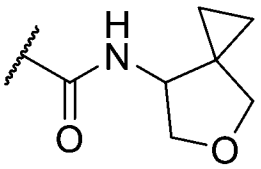
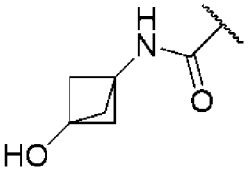

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

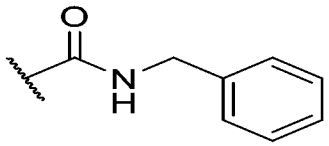
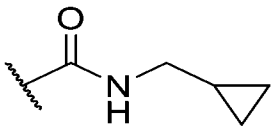
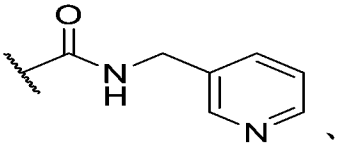
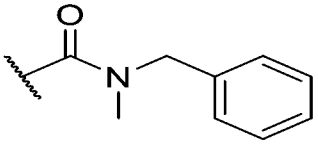
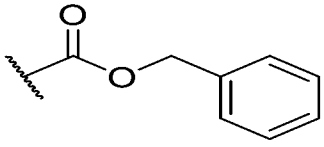
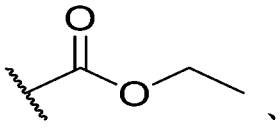
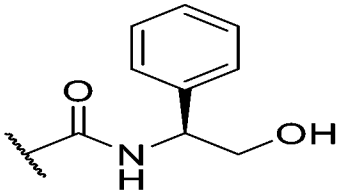
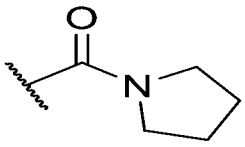
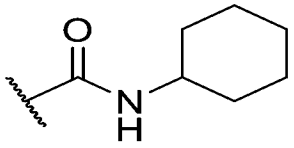
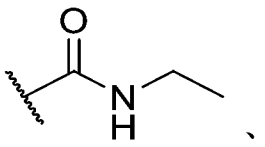
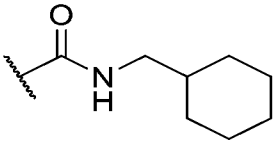
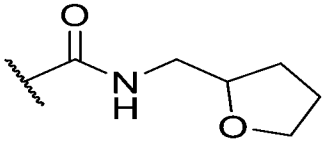
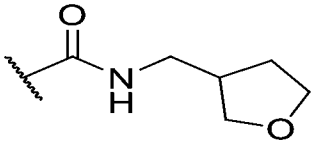
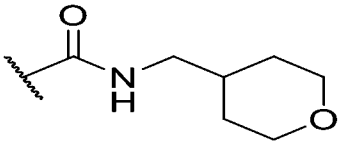
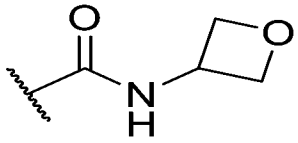
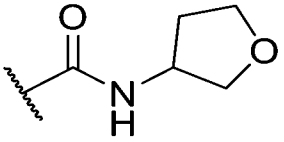
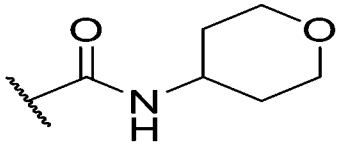
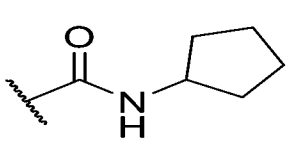
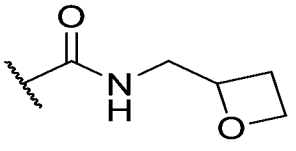
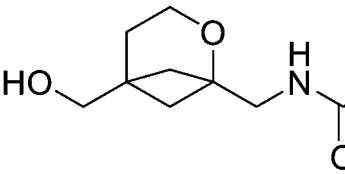
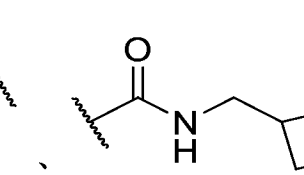
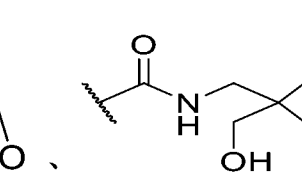
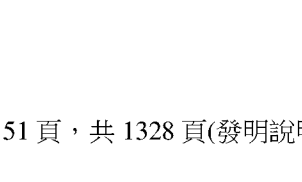
、

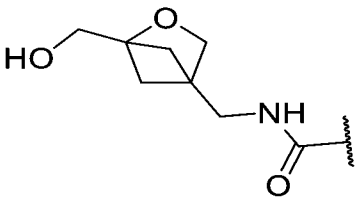
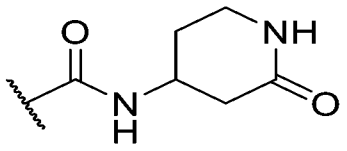
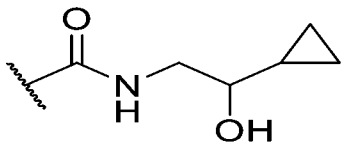
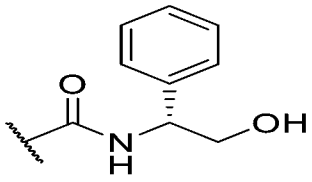
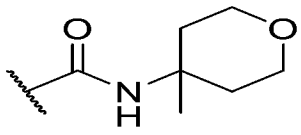
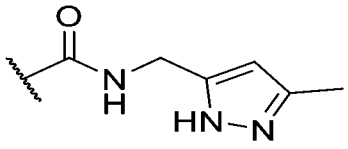
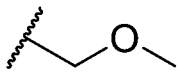
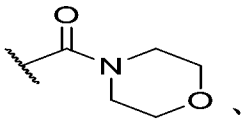
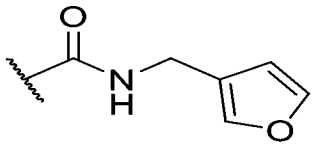
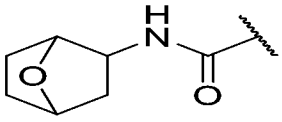
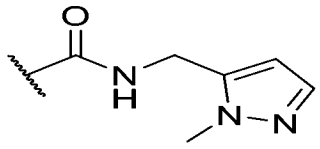
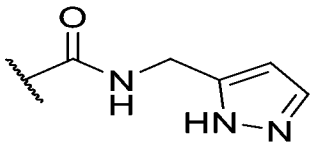
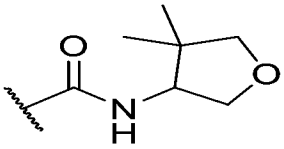
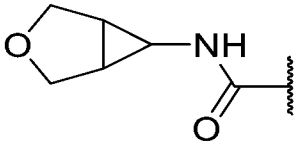
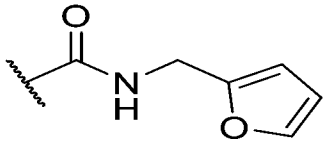
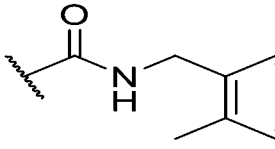
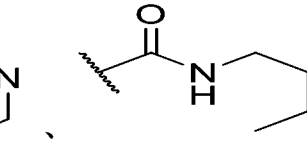
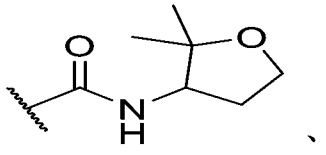
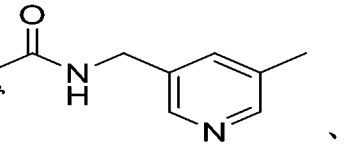
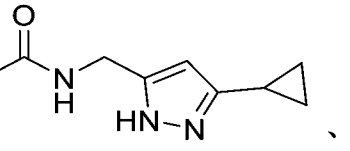
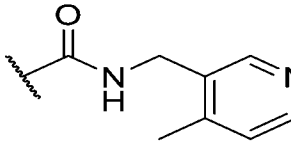
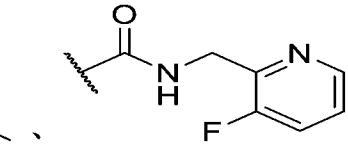
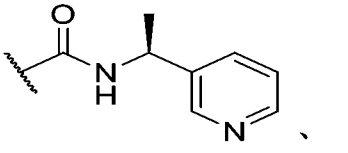
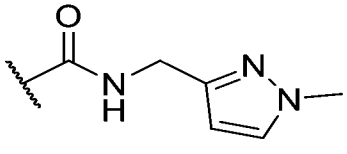
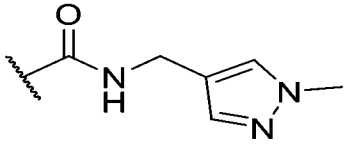
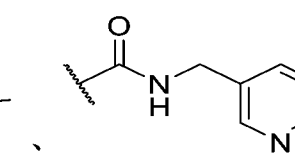
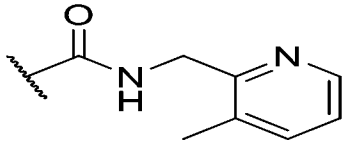
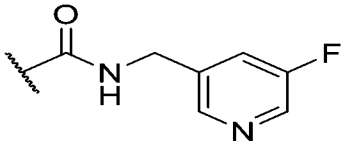
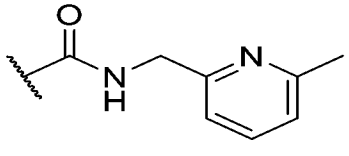
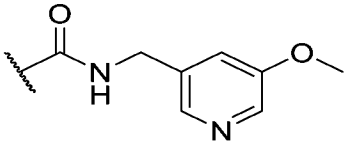
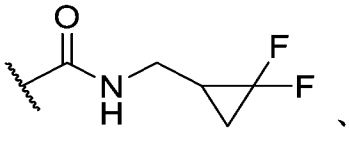
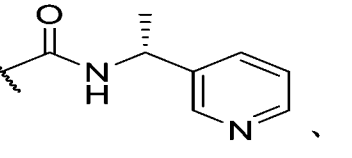
、

、


、 
、 
、 
、及 
。

【0339】R_2可選自：

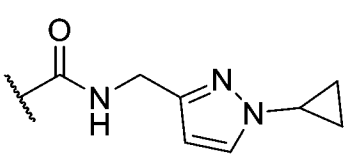
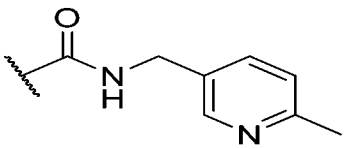
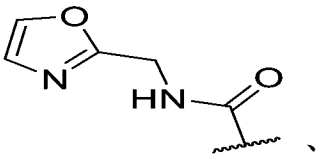
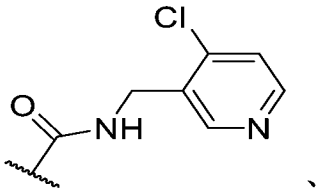
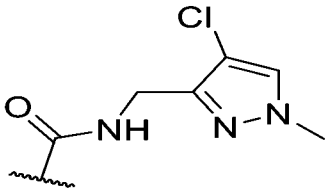
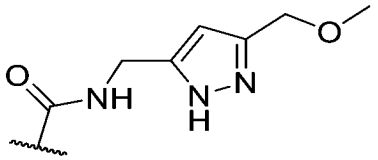
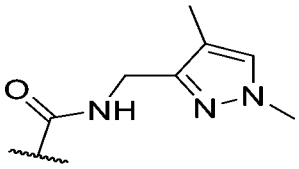
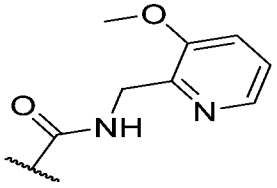
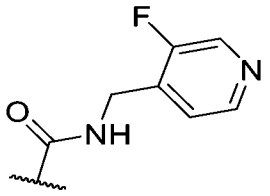
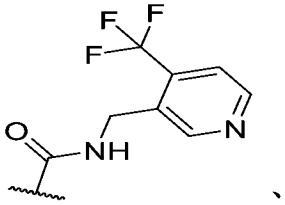
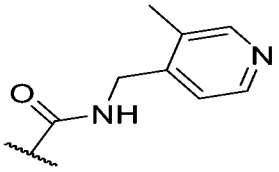

、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、
、 
、
、

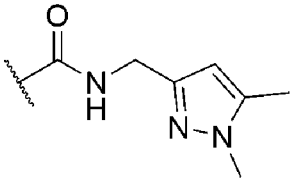
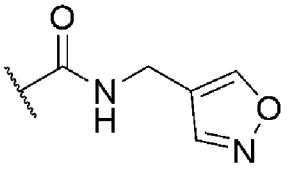
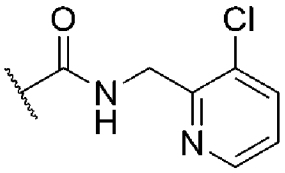
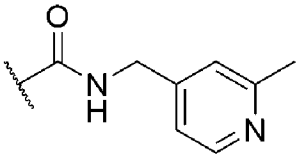
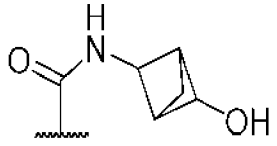
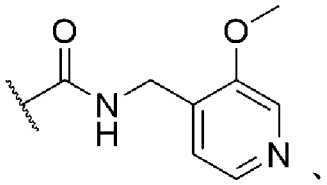
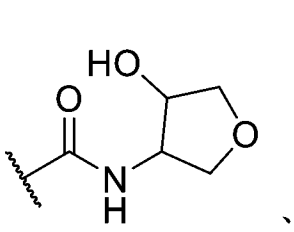
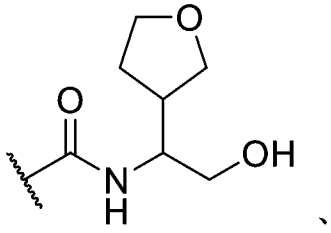
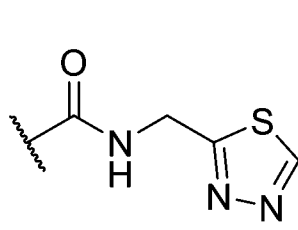
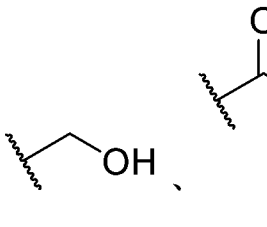

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

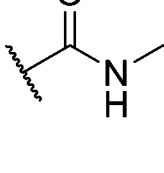
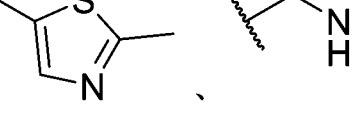
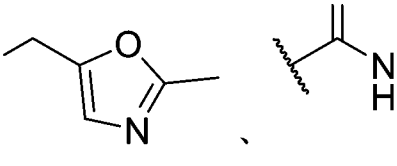
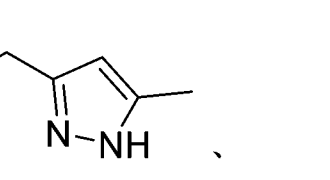
、

、


、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

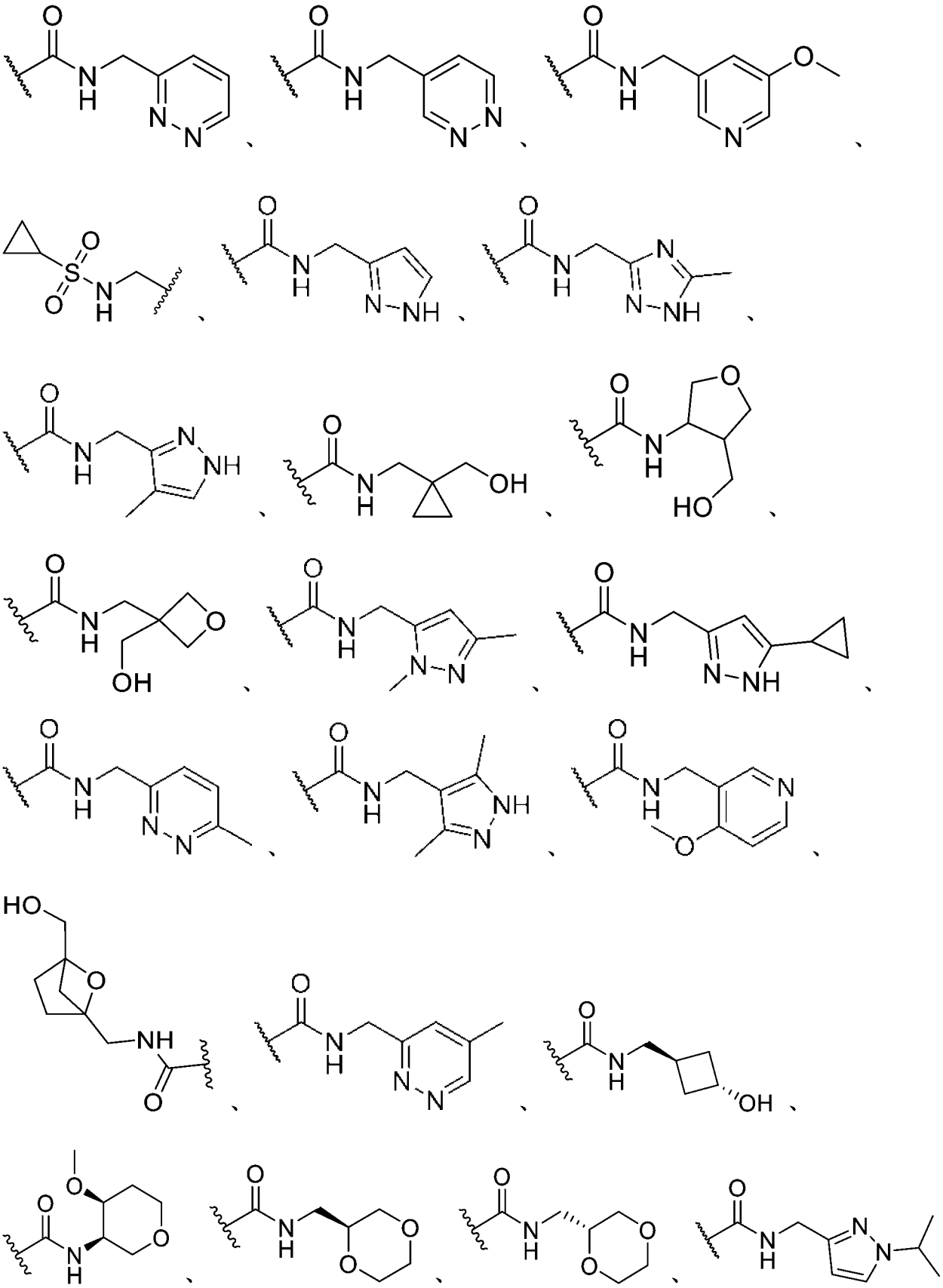
、

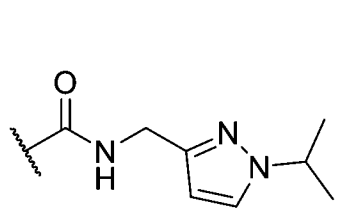
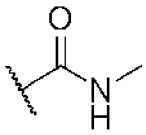
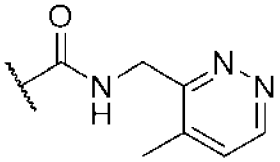
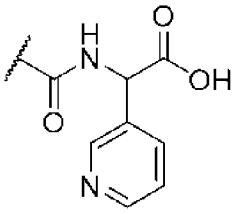
、

、

、

、

、

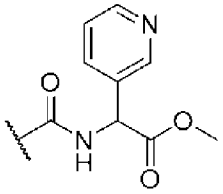
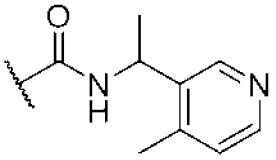
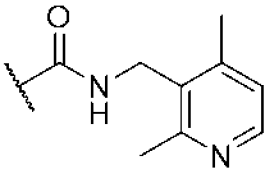
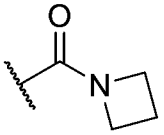
、

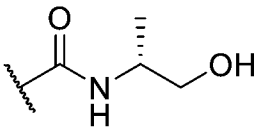
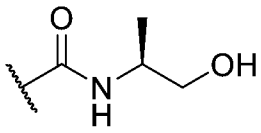
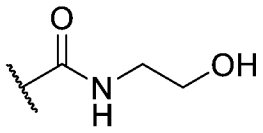
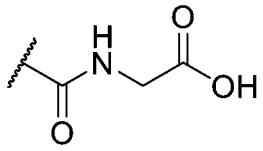
、

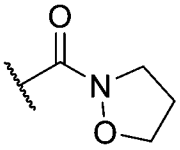
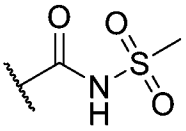
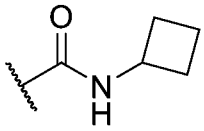
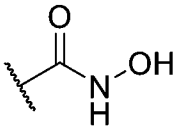
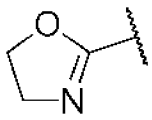
、

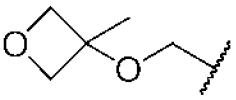
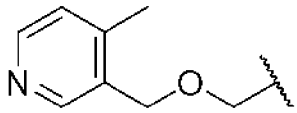
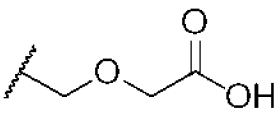
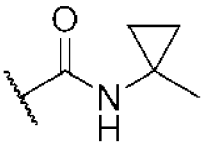


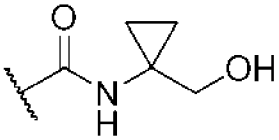
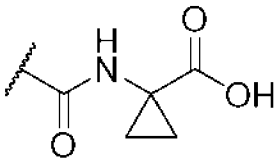
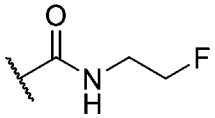
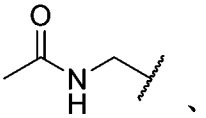
 、  、  、  、

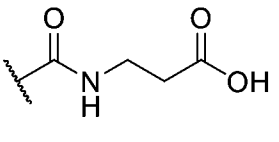
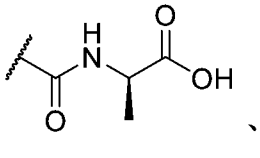
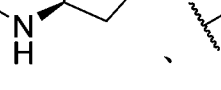
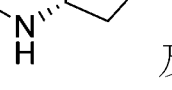
 、  、  、  、

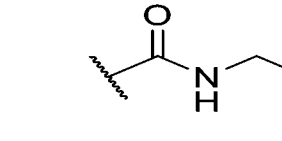
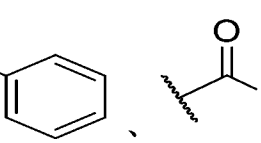
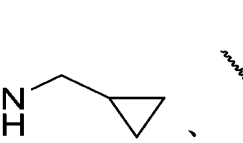
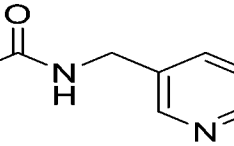
 、  、  、  、

 、  、  、  、  、

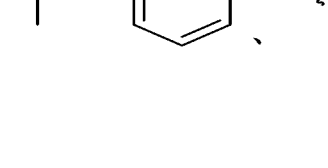
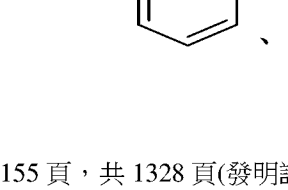
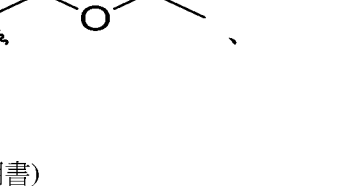
 、  、  、  、

 、  、  、  、

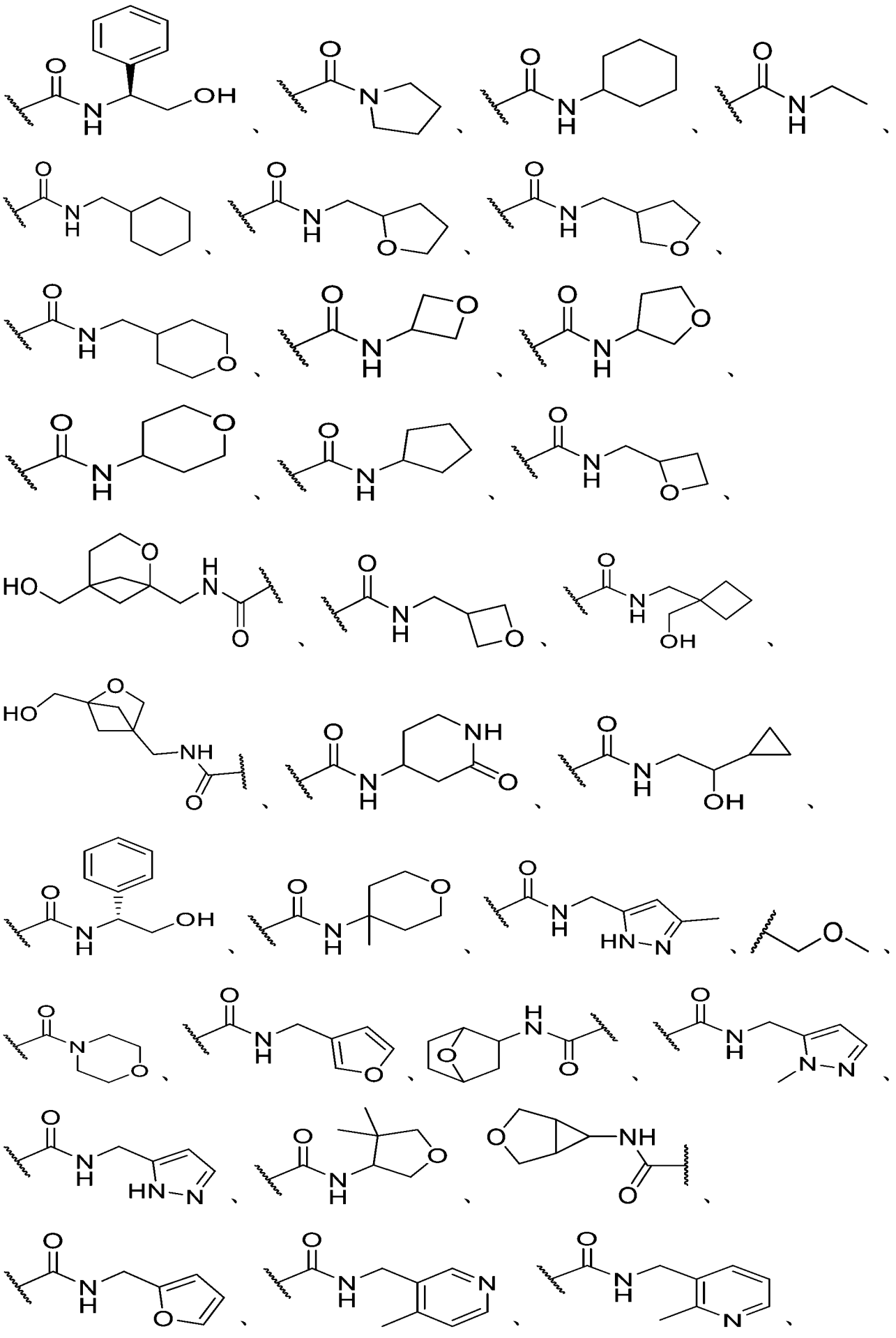
 、  、  、  、

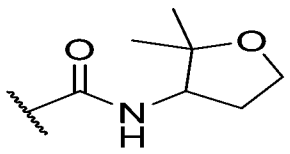
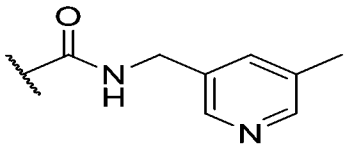
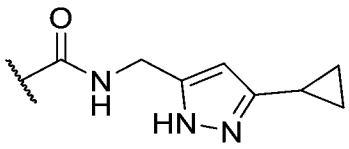
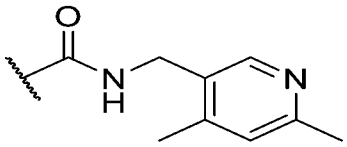
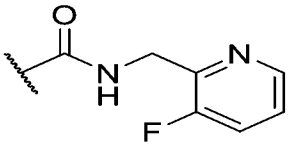
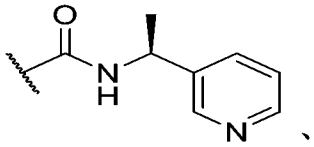
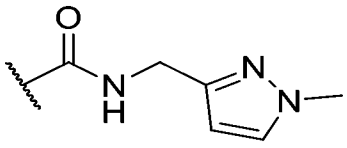
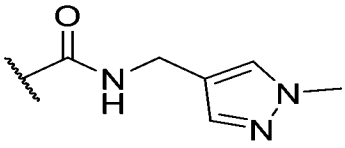
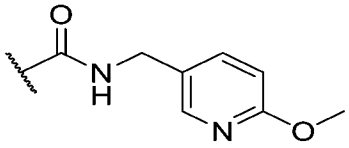
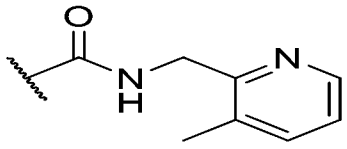
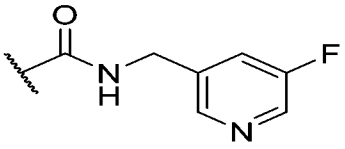
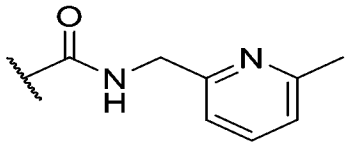
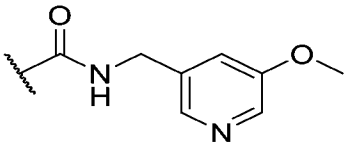
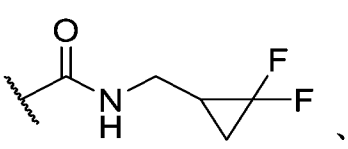
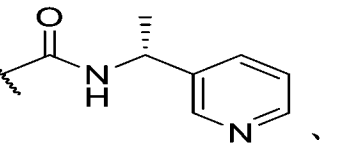
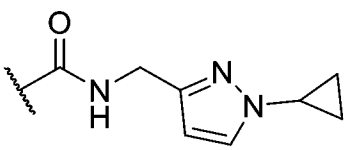
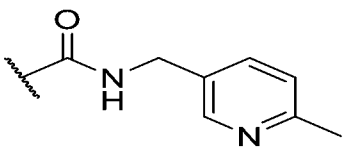
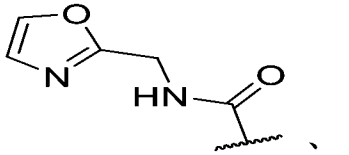
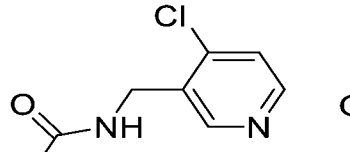
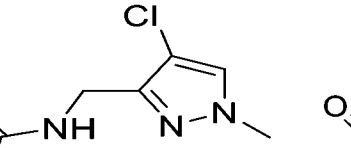
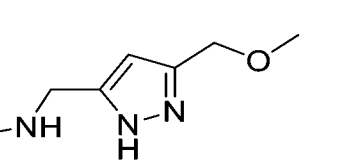
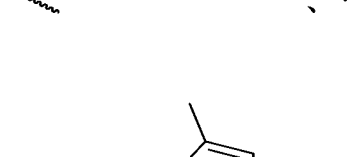
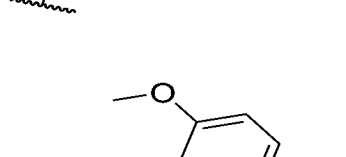
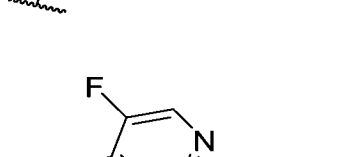
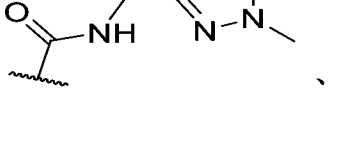
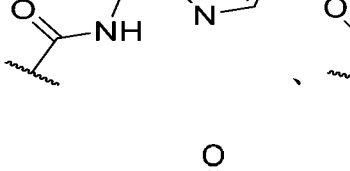
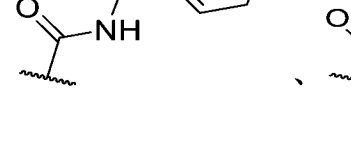
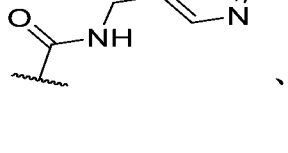
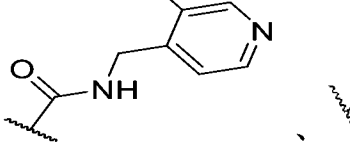
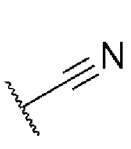
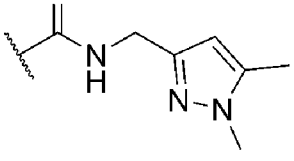
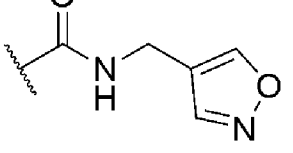
 、  、  、  及。

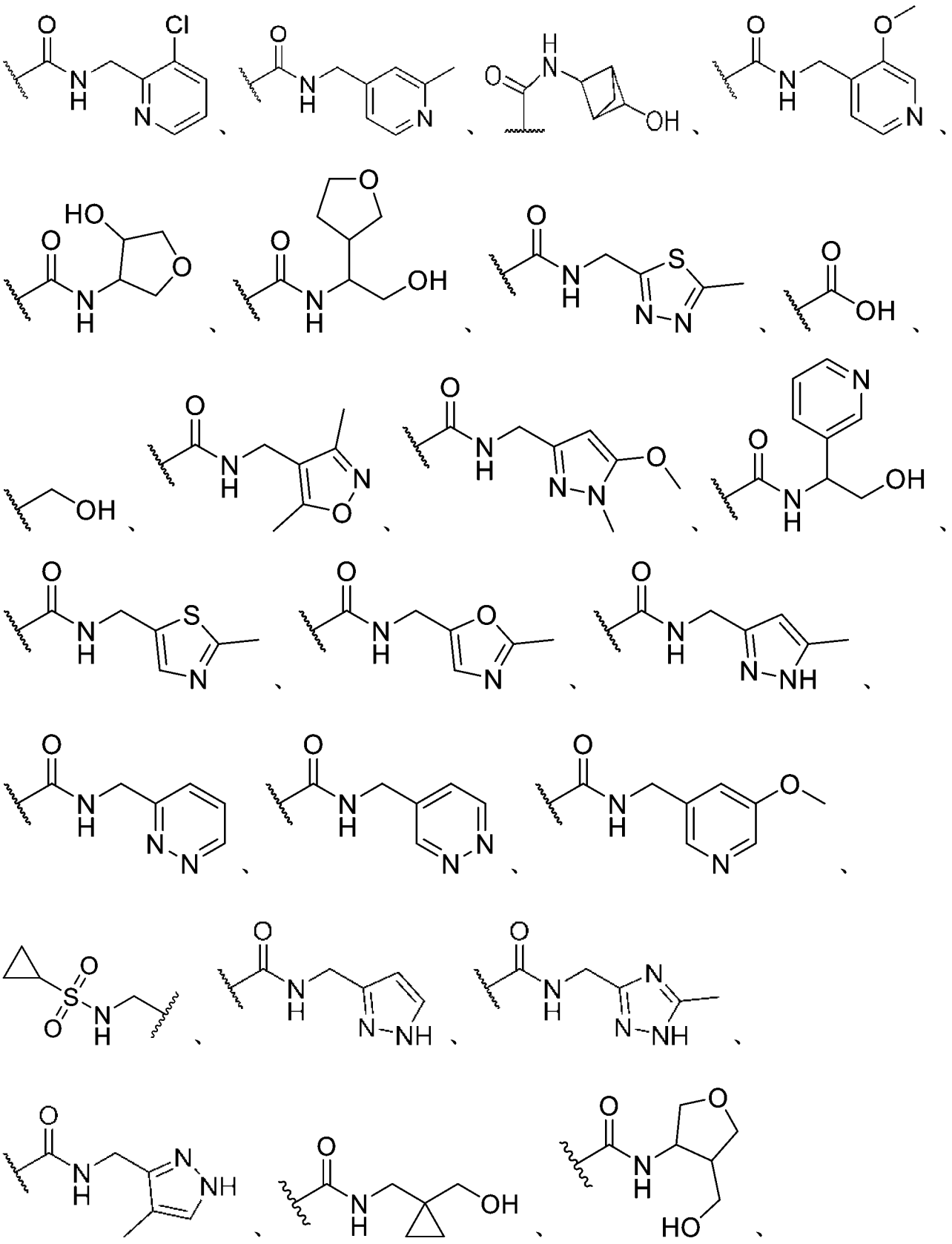
【0340】R_2可選自：

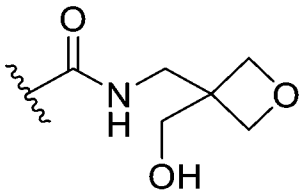
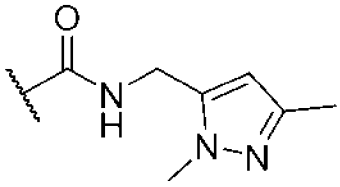
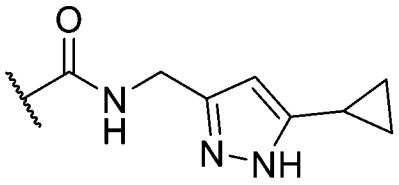
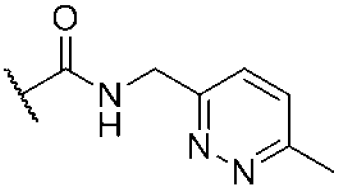
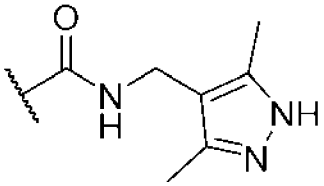
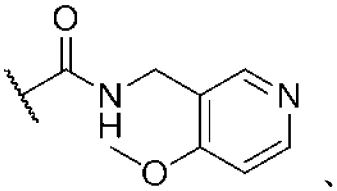
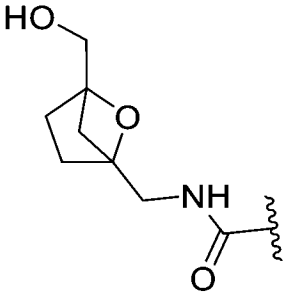
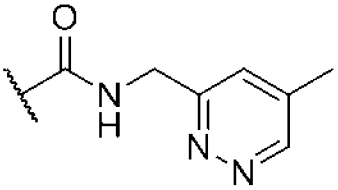
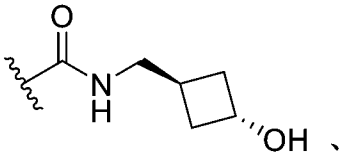
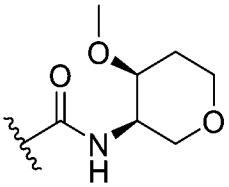
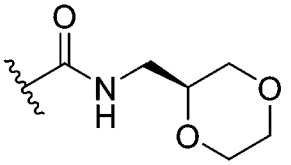
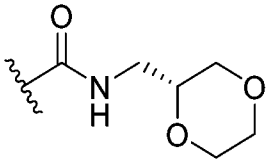
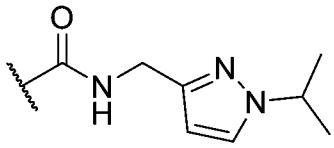
 、  、  、

 、  、、

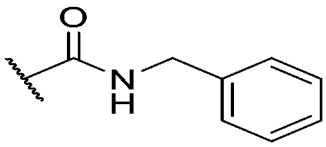
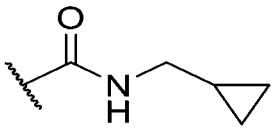
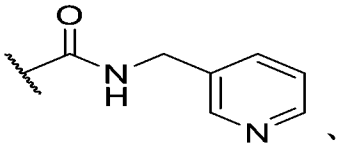
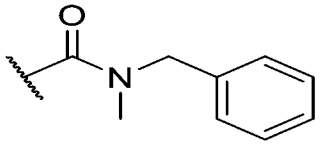
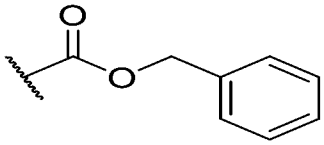
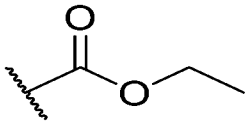
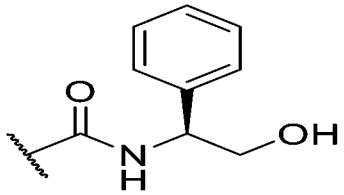
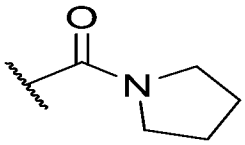
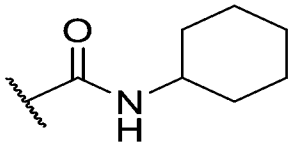
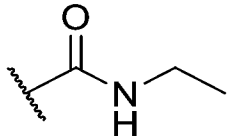
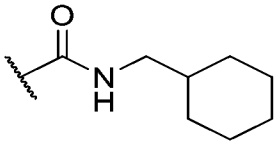
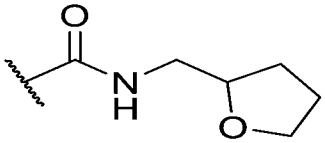
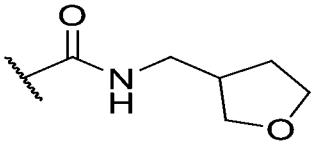


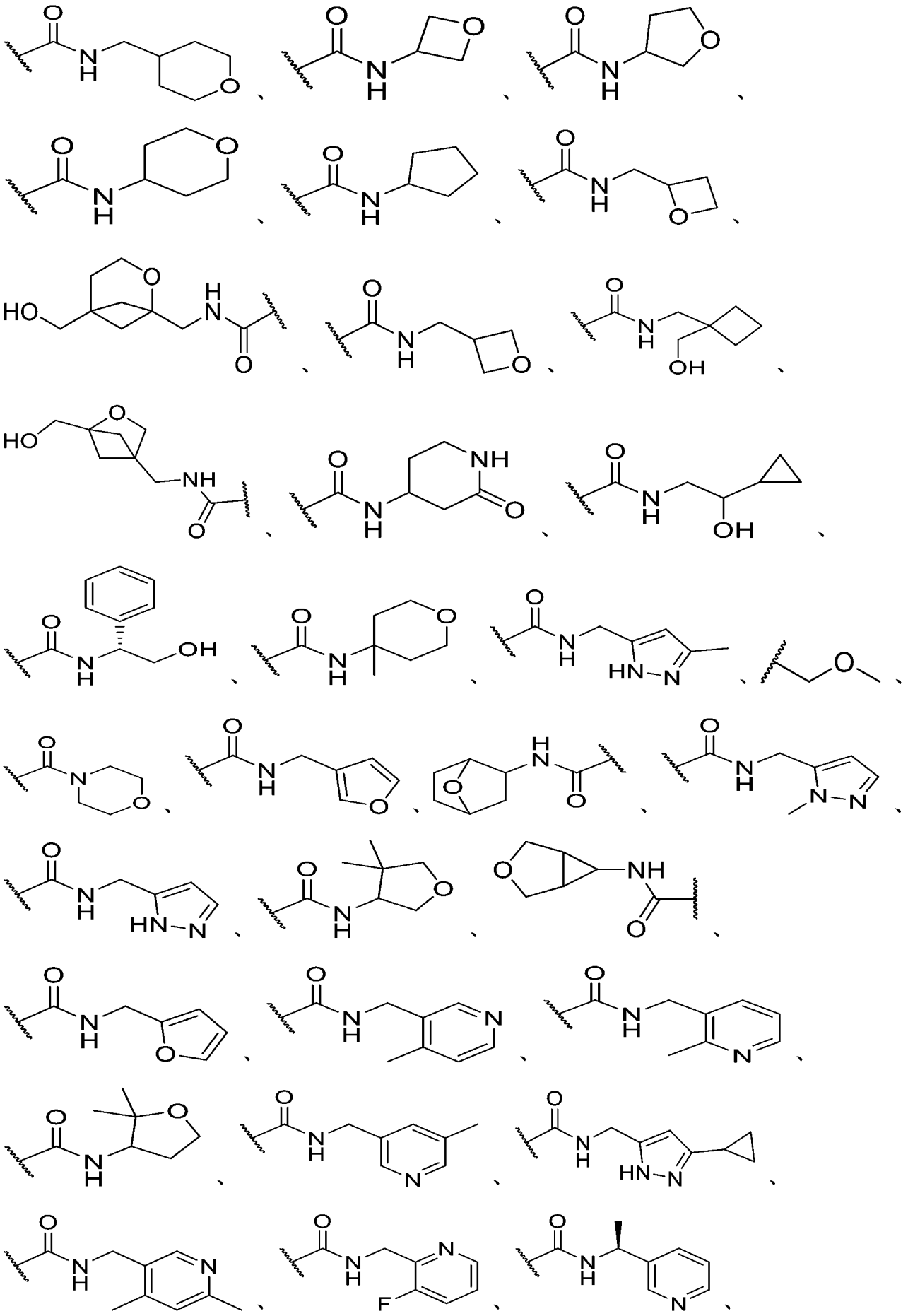

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

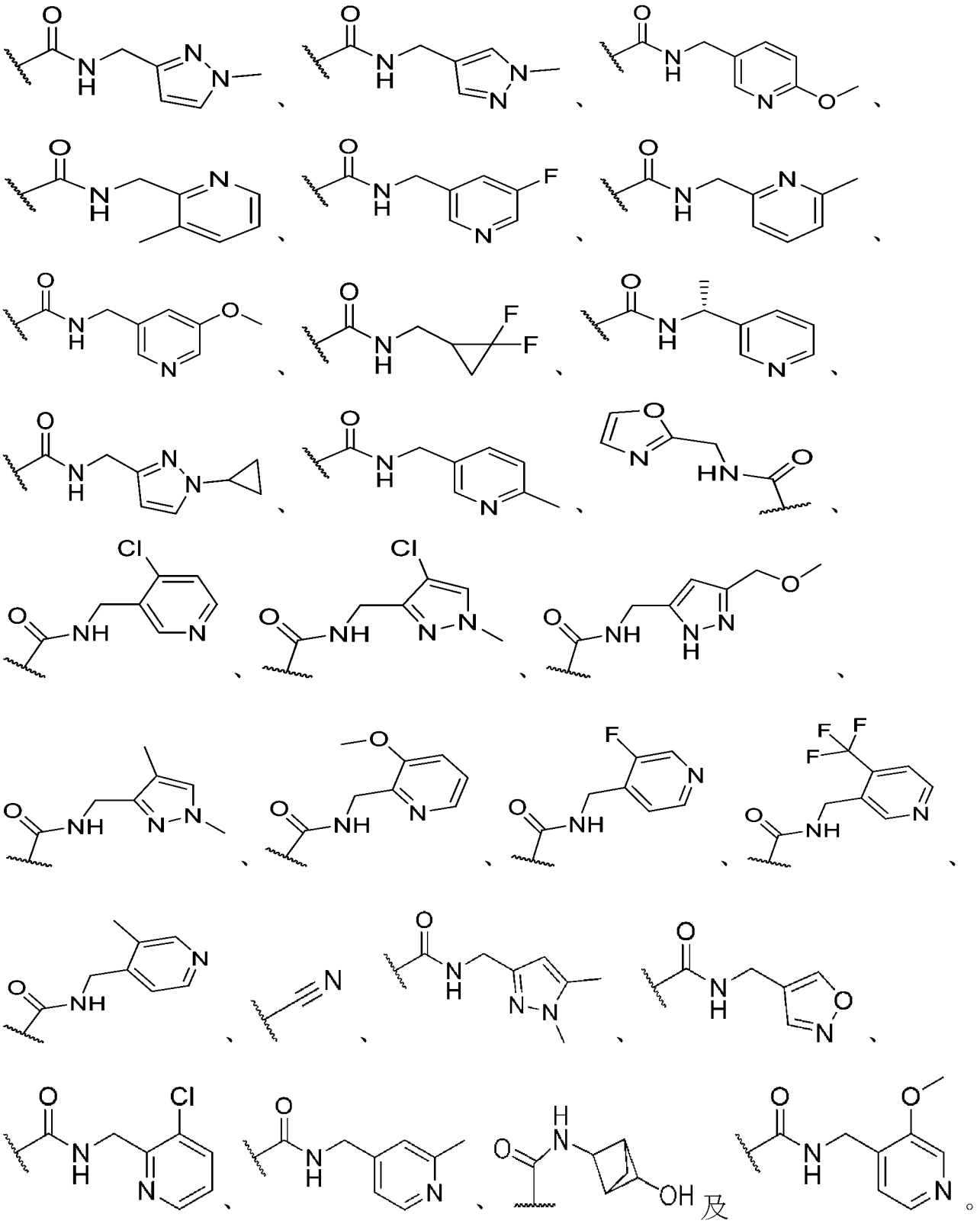



、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
及 
。

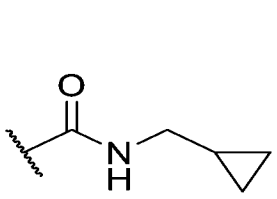
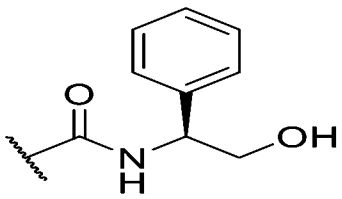
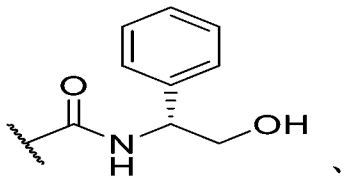
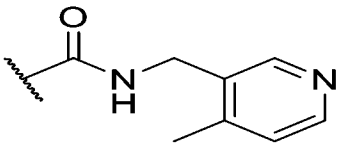
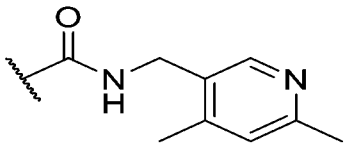
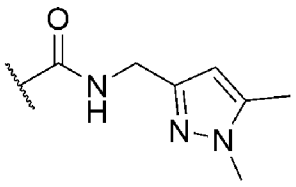
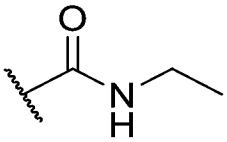
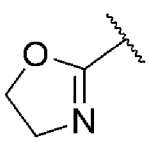
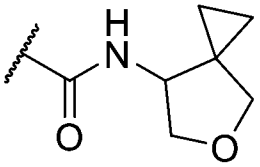
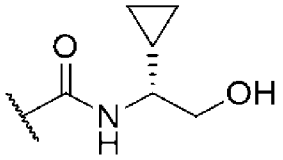
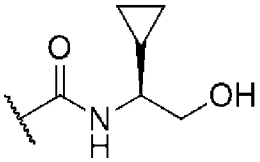
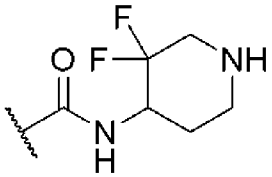
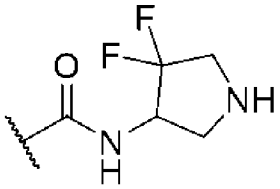
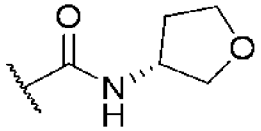
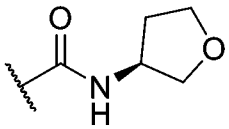
【0341】R_2可選自：


、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、

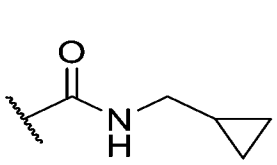
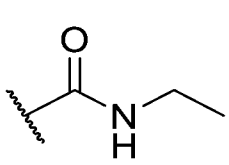
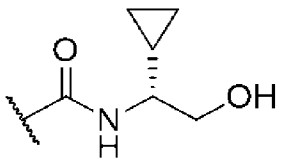
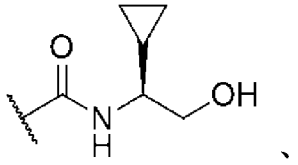
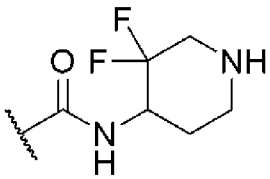
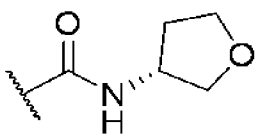
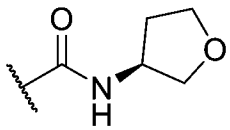




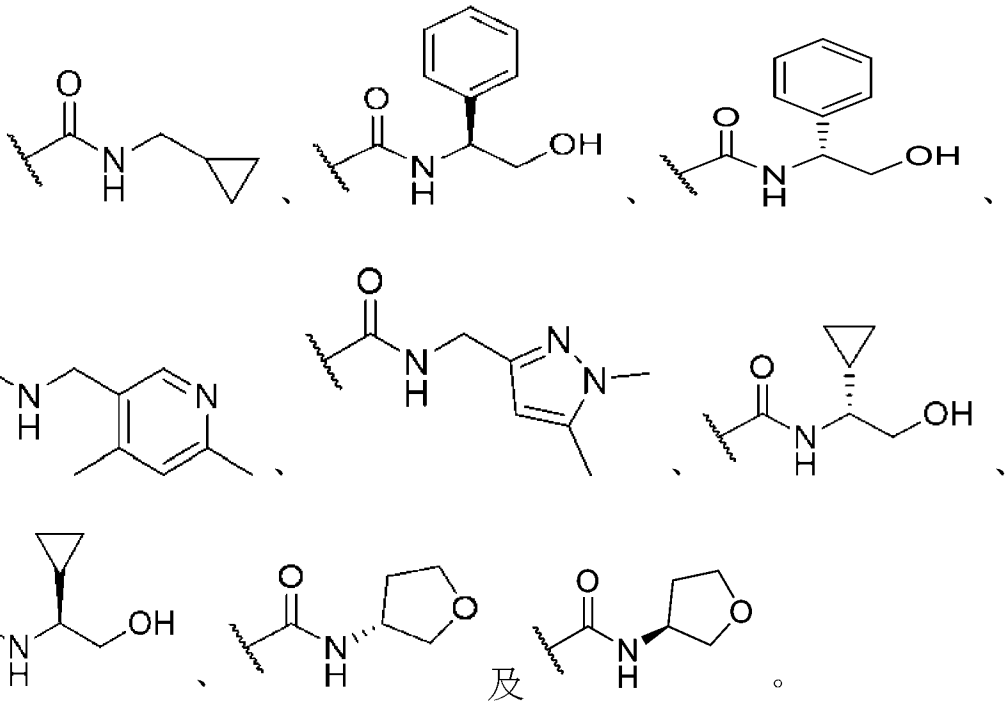
【0342】較佳地，R_2可選自：

 、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  及  。

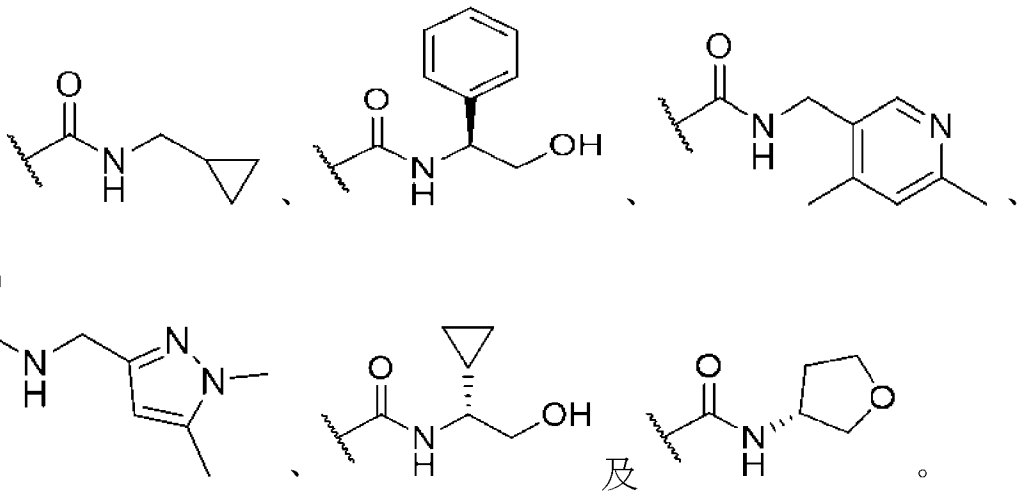
【0343】更佳地，R_2選自：

 、  、  、  、  、  及  。

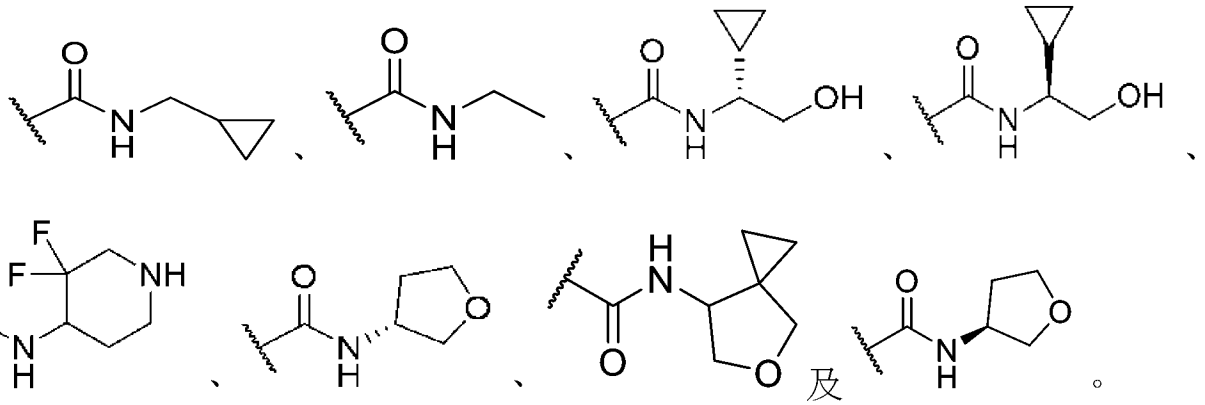
【0344】R_2可選自：



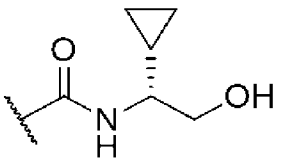
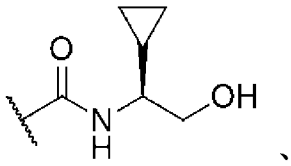
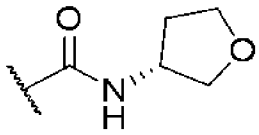
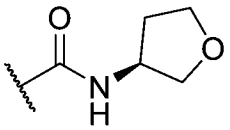
【0345】 R_2可選自：

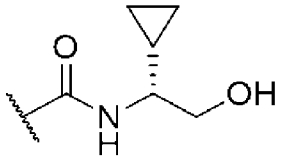
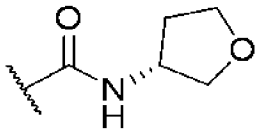


【0346】 R_2可選自：

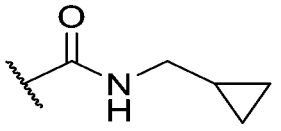
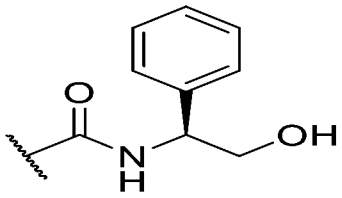
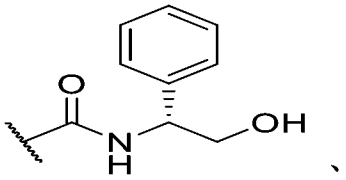


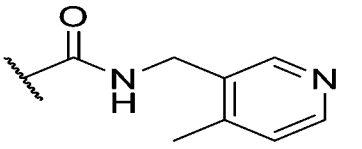
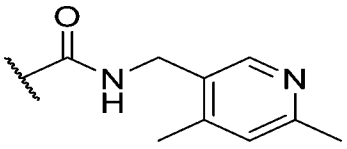
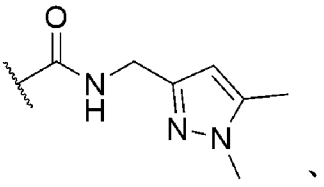
【0347】甚至更佳地，R_2選自：

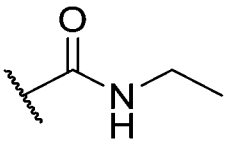
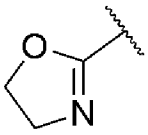
 、  、  及  。

【0348】最佳地，R_2選自：  及  。

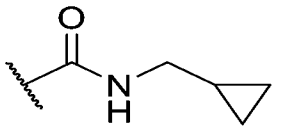
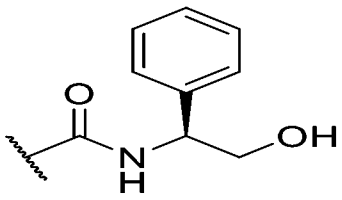
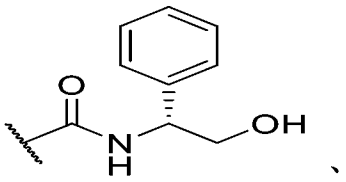
【0349】R_2可選自：

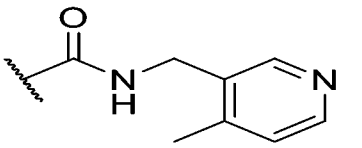
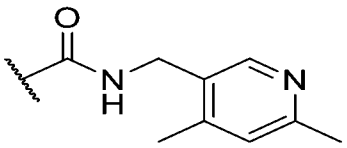
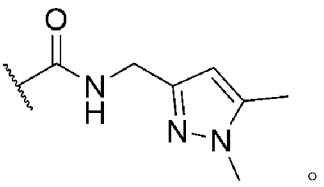
 、  、  、

 、  、  、

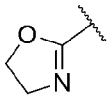
 及  。

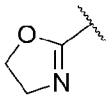
【0350】R_2可選自：

 、  、  、

 、  、  及。

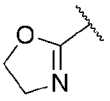
【0351】B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由

雙鍵與B_2連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

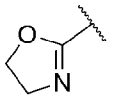
【0352】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

【0353】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN。

【0354】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN。

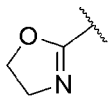
【0355】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

【0356】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由

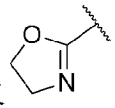
雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

【0357】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN。

【0358】 B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接，且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN。

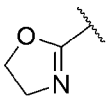
【0359】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-NH-C(=O)$CH_3$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  。

【0360】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、

-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

【0361】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN。

【0362】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN。

【0363】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

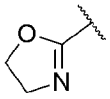
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[b]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0364】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0365】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由

雙鍵與B_2連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0366】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中:

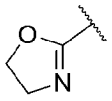
R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0367】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由

雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

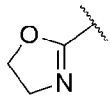
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[b]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0368】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0369】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

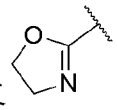
【0370】 B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接，且R_2可選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-O-CH_3$及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及$-(CH_2)$-苯基。

【0371】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_2可選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-NH-C(=O)CH_3$、$-CH_2-NH-S(=O)_2R_{35}$、$-CH_2-O-R_{16}$、$-CH_2-OH$、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、$-S(=O)_2$-(小烷基)、$-(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、$-(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、$-(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-芳基、

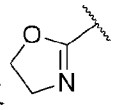
-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【0372】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0373】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0374】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

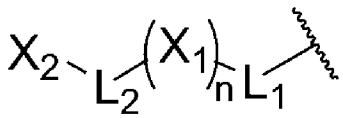
R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

【0375】 如上所述，R_1為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

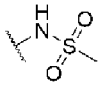
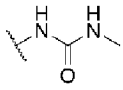
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

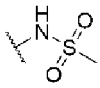
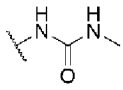
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

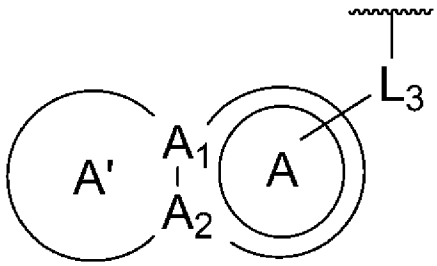
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

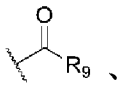
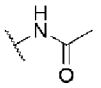
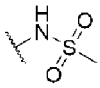
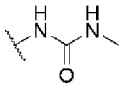
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

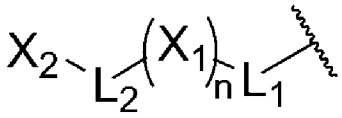
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0376】R_1可為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

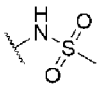
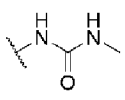
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

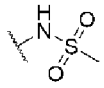
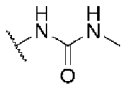
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

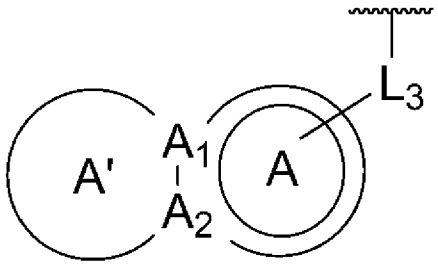
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

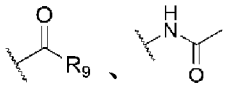
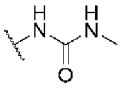
L_3為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

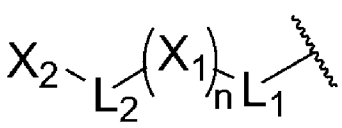
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0377】 R_1可為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

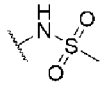
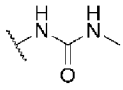
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

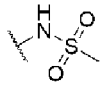
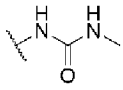
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

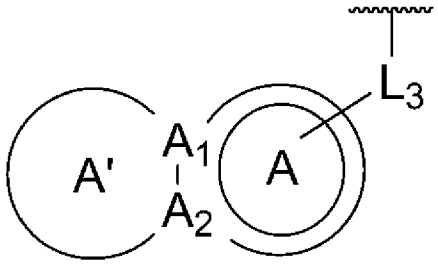
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}

在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

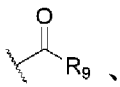
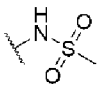
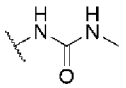
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

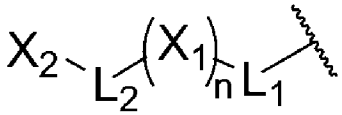
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0378】 R_1可為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

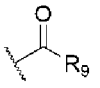
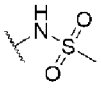
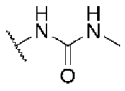
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

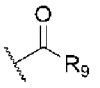
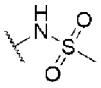
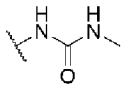
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及$-SO_2-$之連接基；且

X_2為：(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

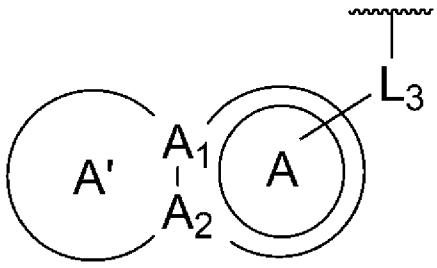
其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

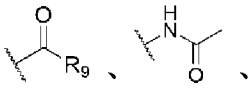
L_3為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

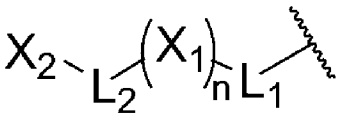
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0379】 R_1可為式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

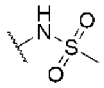
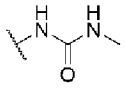
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

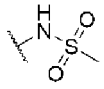
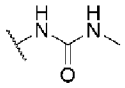
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

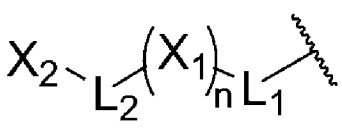
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0380】 R_1可為式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

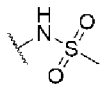
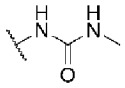
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

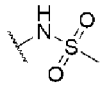
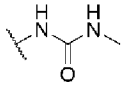
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及$-SO_2-$之連接基；且

X_2為：(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

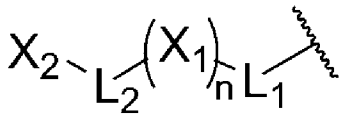
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}

在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0381】 R_1可為式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

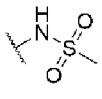
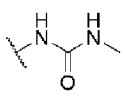
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

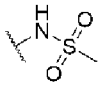
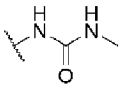
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及$-SO_2-$之連接基；且

X_2為：(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

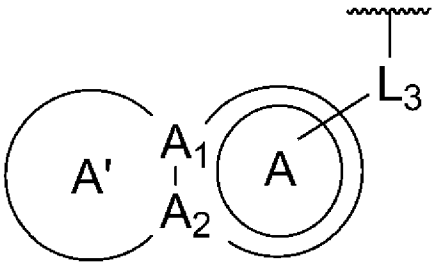
其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0382】 R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

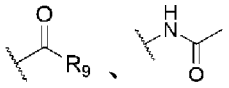
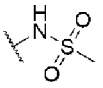
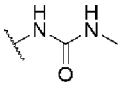
L_3為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

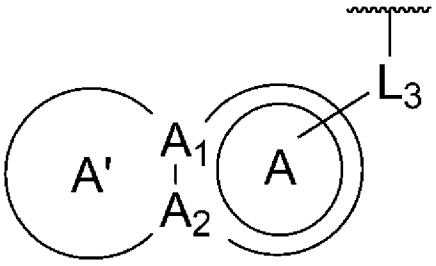
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0383】 R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

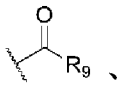
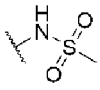
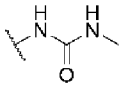
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

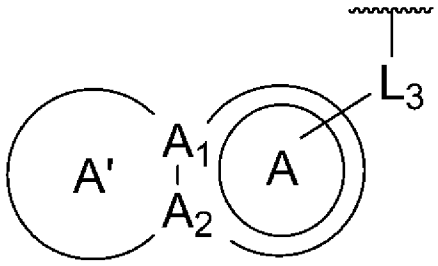
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視

情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0384】 R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

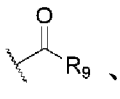
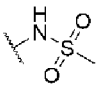
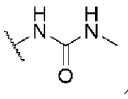
L_3為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

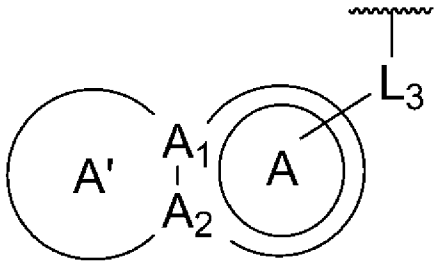
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0385】 R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

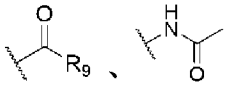
L_3為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0386】較佳地，n為1。

【0387】L_1可為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基。

【0388】L_1可為單鍵。

【0389】L_2可為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-及-SO_2-之連接基。

【0390】L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基。

【0391】L_2可為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基。

【0392】L_1可為單鍵。

【0393】L_1及L_2可各自獨立地為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基。

【0394】L_1及L_2可同時為單鍵。

【0395】X_1可選自噻吩、苯基及吡啶基。

【0396】X_1可選自苯基及吡啶基。

【0397】X_1可為苯基。

【0398】 X_1可視情況經1或2個獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代。

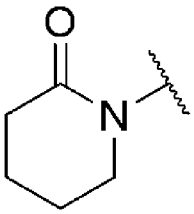
【0399】 X_1可選自噻吩、苯基及吡啶基，其可視情況經1或2個獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代。

【0400】 X_1可選自苯基及吡啶基，其可視情況經1或2個獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代。

【0401】 當X_2為$-NR_{20}R_{21}$時，L_2可為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-及$-SO_2-$之連接基。

【0402】 當X_2為$-NR_{20}R_{21}$時，L_2可為選自單鍵或$-CH_2-$之連接基。

【0403】 當X_2為$-NR_{20}R_{21}$時，X_1可為苯基或吡啶基。

【0404】 在一些實施例中，X_2不為  。

【0405】 在一些實施例中，X_2不為環醯胺。

【0406】 X_2可為2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0407】 X_2可為2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0408】 X_2可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員為N。

【0409】 X_2可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員為N，且其中，當X_2為雙環系統時，該雙環系統為稠合的。

【0410】 X_2可為含有5或6個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員為N。

【0411】 X_2可為含有5或6個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員為N，且其中，當X_2為雙環系統時，該雙環系統為稠合的。

【0412】 X_2可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中一個環成員為N。

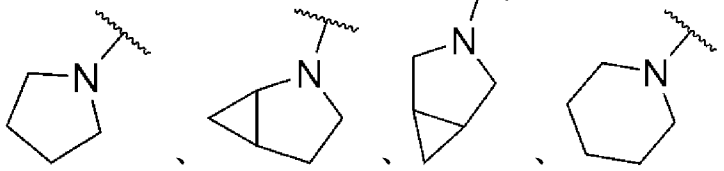
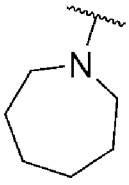
【0413】 X_2可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中一個環成員為N，且其中，當X_2為雙環系統時，該雙環系統為稠合的。

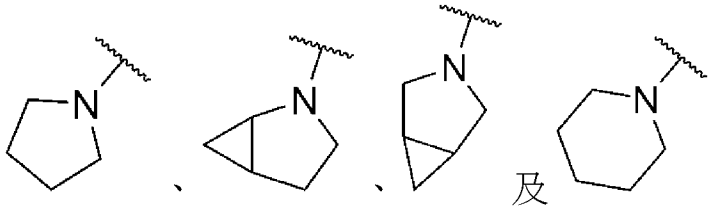
【0414】 X_2可為含有5或6個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中一個環成員為N。

【0415】 X_2可為含有5或6個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中一個環成員為N，且其中，當X_2為雙環系統時，該雙環系統為稠合的。

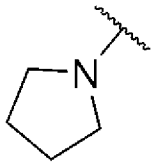
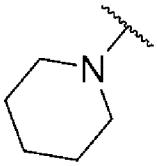
【0416】 X_2可經由X_2之N環成員連接至分子之剩餘部分。

【0417】 X_2可為含有5或6個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員為N，且其中X_2經由X_2之N環成員接至分子之剩餘部分。

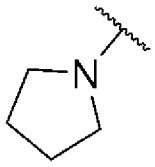
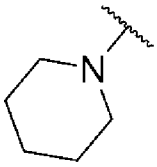
【0418】 X_2可選自結構  及  ，其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

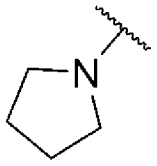
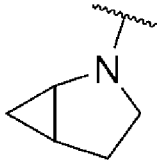
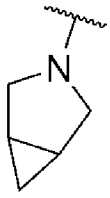
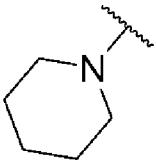
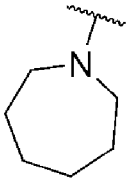
【0419】 X_2可選自結構  ，其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0420】 X_2可為含有5或6個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員為N；當X_2為雙環系統時，該雙環系統為稠合的；且X_2經由X_2之N環成員連接至分子之剩餘部分。

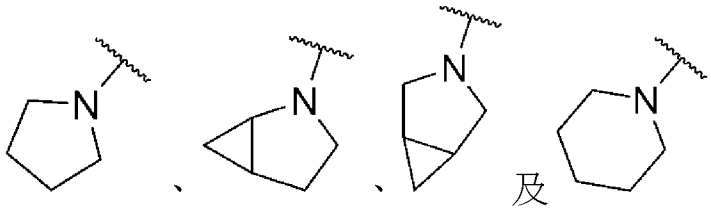
【0421】 X_2可選自結構  及  ，其中X_2可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、$(C_1$-$C_6)$烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代。

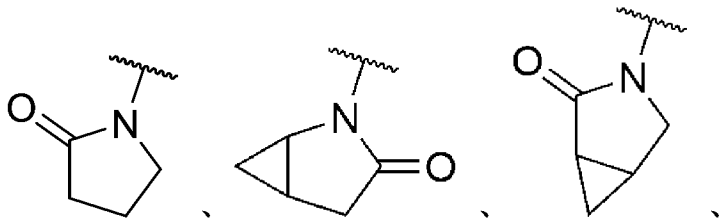
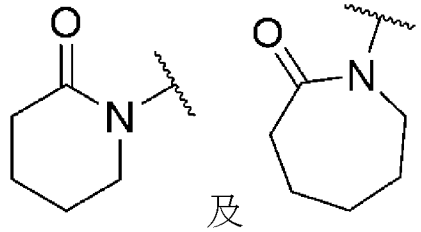
【0422】 X_2可為含有5或6個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員為N；當X_2為雙環系統時，該雙環系統為稠合的；且X_2經由X_2之N環成員連接至分子之剩餘部分。

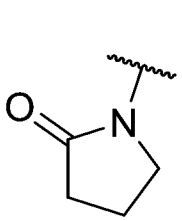
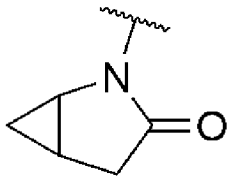
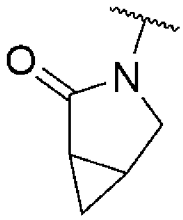
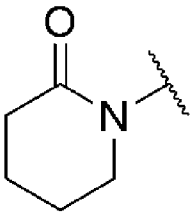
【0423】 X_2可選自結構  及  ，其中X_2可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、$(C_1$-$C_6)$烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代。

【0424】 X_2可選自結構  、  、  、  及  ，其中X_2經側氧基取代基取代，且X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一

步視情況經R_{30}取代，其中R_{30}選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0425】 X_2可選自結構  ，其中X_2經側氧基取代基取代，且X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經R_{30}取代，其中R_{30}選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0426】 X_2可選自結構  、  及，其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經R_{30}取代，其中R_{30}選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0427】 X_2可選自結構  、  、  及  ，其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

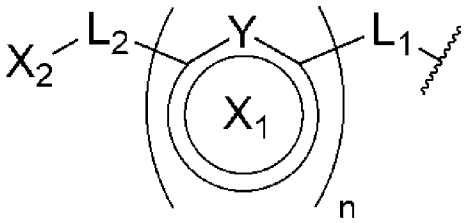
【0428】 X_2可為環醯胺。

【0429】 R_{18}及R_{19}可獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基。

【0430】 R_{20}可選自H及小烷基。

【0431】 R_{21}可選自烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$。

【0432】 較佳地，式(II)由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

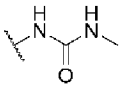
X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員芳族環；其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

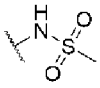
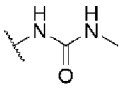
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

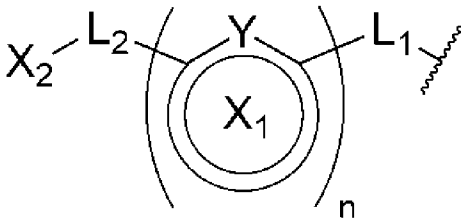
其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳

環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0433】 式(II)可由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

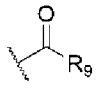
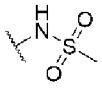
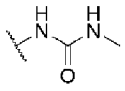
X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員芳族環；其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

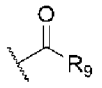
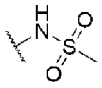
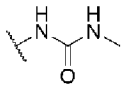
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及$-SO_2-$之連接基；且

X_2為：(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

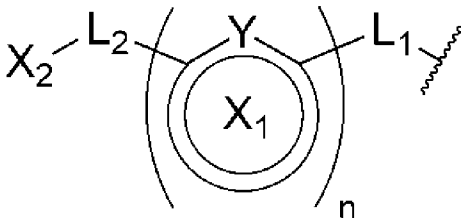
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0434】 式(II)可由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

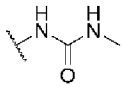
X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員芳族環；其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

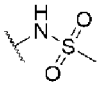
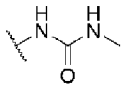
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}

在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0435】 L_3可為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基。

【0436】 L_3可為單鍵。

【0437】 在一些實施例中，A不含N及S環成員兩者。

【0438】 A可為苯基或含有1、2或3個選自N及O之環成員的5員或6員含碳芳族環。

【0439】 A可為苯基或含有1、2或3個氮環成員之6員含碳芳族環。

【0440】 A可為苯基、吡啶基或嘧啶基。A可為苯基或吡啶基。A可為苯基。A可為吡啶基。

【0441】 A可視情況經單一取代基取代，其中該取代基為鹵基取代基。

【0442】 A可視情況經單一取代基取代，其中該取代基為F。

【0443】 A可經單一取代基取代，其中該取代基為鹵基取代基。

【0444】 A可經單一取代基取代，其中該取代基為F。

【0445】 在一些實施例中，A未經任何視情況選用之取代基取代。

【0446】 A可為苯基、吡啶基或嘧啶基，其中A未進一步經任何視情況選用之取代基取代。

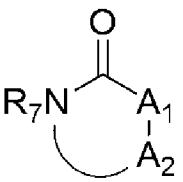
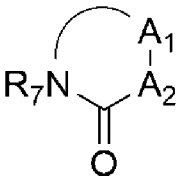
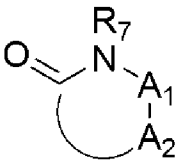
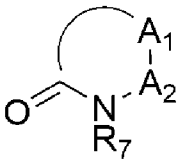
【0447】 A可為苯基或吡啶基，其中A未進一步經任何視情況選用之取代基取代。

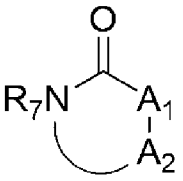
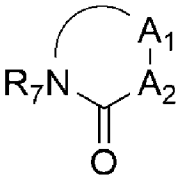
【0448】 A可為苯基或吡啶基，其中A視情況經單一取代基取代，其中該取代基為鹵基。

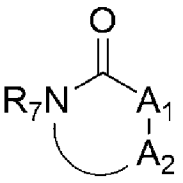
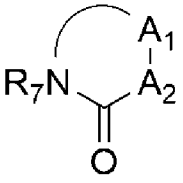
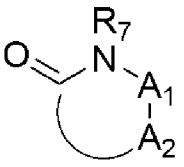
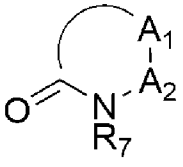
【0449】 A可為苯基或吡啶基，其中A經單一取代基取代，其中該取代基為鹵基。

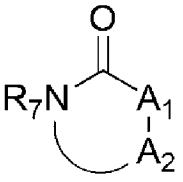
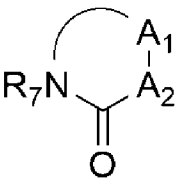
【0450】 A可為苯基或吡啶基，其中A視情況經單一取代基取代，其中該取代基為F。

【0451】 A可為苯基或吡啶基，其中A經單一取代基取代，其中該取代基為F。

【0452】 當A'為環醯胺時，A'可選自  、  、  及  。

【0453】 當A'為環醯胺時，A'可選自  及  。

【0454】 A'可為環醯胺，且A'可選自  、  、  及  。

【0455】 A'為環醯胺，且A'可選自  及  。

【0456】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N。

【0457】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N。

【0458】 A'可為含有7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N。

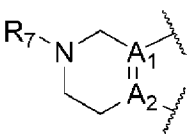
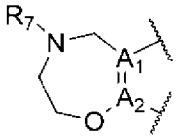
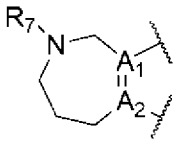
【0459】 A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N。

【0460】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N。

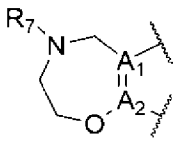
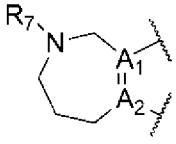
【0461】 A'可為含有7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N或其中一個環成員為N且第二環成員為O。

【0462】 A'可為含有7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N。

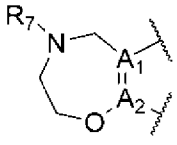
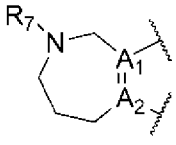
【0463】 A'可為含有7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N且第二環成員為O。

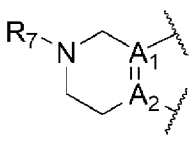
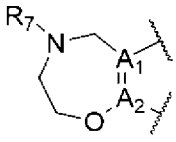
【0464】 A'可選自  、  及  ，且其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及

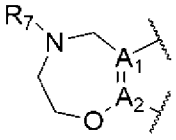
O，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

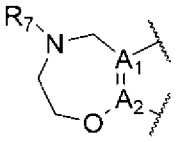
【0465】 A'可選自  及  ，且其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

【0466】 A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N。

【0467】 A'可選自  及  ，其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10} R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

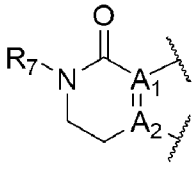
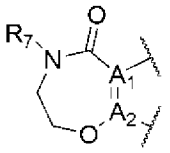
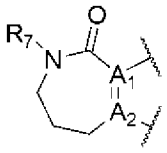
【0468】 A'可選自  及  ，且其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

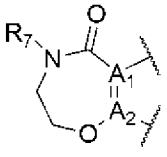
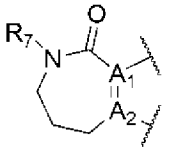
【0469】 A'可為  ，且其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

【0470】 A’ 可為  ，其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、

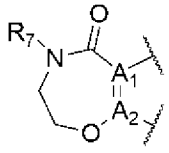
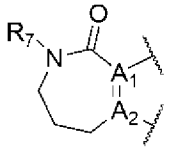
側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

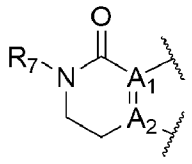
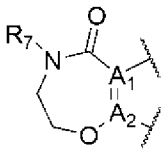
【0471】 A'可進一步經側氧基取代基取代。

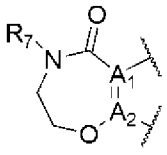
【0472】 A'可選自  、  及  ，且其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

【0473】 A'可選自  及  ，且其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、

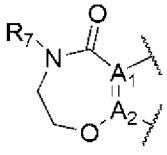
烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

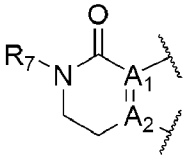
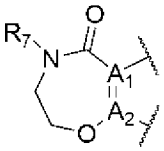
【0474】 A'可選自  已  ，其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

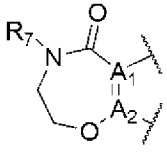
【0475】 A'可選自  及  ，且其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

【0476】 A'可為  ，且其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵

基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

【0477】 A'可為  ，其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0478】 A'可選自  及  ，且其中A'不具有其他取代基。

【0479】 A'可為  且不具有其他取代基。

【0480】 在一些實施例中，R_7並非視情況選用的。R_7可存在。

【0481】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7當存在時經由N環成員鍵結至A'。

【0482】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7當存在時經由N環成員鍵結至A'。

【0483】 A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7當存在時經由N環成員鍵結至A'。

【0484】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7當存在時經由N環成員鍵結至A'。

【0485】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7當存在時經由N環成員鍵結至A'。

【0486】 A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7當存在時經由N環成員鍵結至A'。

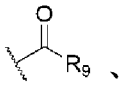
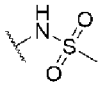
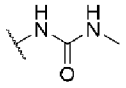
【0487】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7存在且經由N環成員鍵結至A'。

【0488】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7存在且經由N環成員鍵結至A'。

【0489】 A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7存在且經由N環成員鍵結至A'。

【0490】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7存在且經由N環成員鍵結至A'。

【0491】 A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7存在且經由N環成員鍵結至A'。

【0492】 R_8可選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  。

【0493】 R_7可為烷基。R_7可為$(C_1\text{-}C_3)$烷基。R_7可為$(C_1\text{-}C_2)$烷基。R_7可為(C_2)烷基。R_7可為(C_2)烷基，其中(C_2)烷基為未經取代的或經OH或鹵基取代基取代。R_7可選自$-CH_3$、$-CH_2-CH_3$、$-CH_2-CH_2-OH$、CH_2-CHF_2、CH_2-CF_3、$CH_2-CH_2-CH_2-OH$、$-CH(CH_3)_2$及$-CH_2-(C=O)-NH_2$。R_7可選自$-CH_3$、$-CH_2-CH_3$、CH_2-CH_2-OH、CH_2-CHF_2、CH_2-CF_3、$CH_2-CH_2-CH_2-OH$及$-CH(CH_3)_2$。R_7可選自$-CH_3$、$-CH_2-CH_3$及CH_2-CH_2-OH。R_7可選自$-CH_2-CH_3$及CH_2-CH_2-OH、CH_2-CHF_2、CH_2-CF_3、$CH_2-CH_2-CH_2-OH$及$-CH(CH_3)_2$。R_7可選自$-CH_2-CH_3$及CH_2-CH_2-OH。R_7可選自$-CH_3$及CH_2-CH_2-OH。R_7可為CH_2-CH_2-OH。R_7可為$-CH_3$。

【0494】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7為$(C_1\text{-}C_3)$烷基且經由N環成員鍵結至A'。

【0495】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7為$(C_1\text{-}C_2)$烷基且經由N環成員鍵結至A'。

【0496】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7為$(C_1\text{-}C_3)$烷基且經由N環成員鍵結至A'。

【0497】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7為$(C_1\text{-}C_2)$烷基且經由N環成員鍵結至A'。

【0498】 A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7為$(C_1\text{-}C_2)$烷基且經由N環成員鍵結至A'。

【0499】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7為(C_1-C_3)烷基且經由N環成員鍵結至A'。

【0500】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7為(C_1-C_2)烷基且經由N環成員鍵結至A'。

【0501】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7為(C_1-C_3)烷基且經由N環成員鍵結至A'。

【0502】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7為(C_1-C_2)烷基且經由N環成員鍵結至A'。

【0503】 A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7為(C_1-C_2)烷基且經由N環成員鍵結至A'。

【0504】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7選自-CH_3、-CH_2-CH_3、CH_2-CH_2-OH、CH_2-CHF_2、CH_2-CF_3、CH_2-CH_2-CH_2-OH、-$CH(CH_3)_2$及-CH_2-(C=O)-NH_2，且其中R_7經由N環成員鍵結至A'。

【0505】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7選自-CH_3、-CH_2-CH_3、CH_2-CH_2-OH、CH_2-CHF_2、CH_2-CF_3、CH_2-CH_2-CH_2-OH及-$CH(CH_3)_2$，且其中R_7經由N環成員鍵結至A'。

【0506】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7選自-CH_3、-CH_2-CH_3及CH_2-CH_2-OH，且其中R_7經由N環成員鍵結至A'。

【0507】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7選自-CH_3、-CH_2-CH_3、CH_2-CH_2-OH、CH_2-CHF_2、CH_2-CF_3、CH_2-CH_2-CH_2-OH、-$CH(CH_3)_2$及-CH_2-(C=O)-NH_2，且其中R_7經由N環成員鍵結至A'。

【0508】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7選自-CH_3、-CH_2-CH_3、CH_2-CH_2-OH、CH_2-CHF_2、CH_2-CF_3、CH_2-CH_2-CH_2-OH及-$CH(CH_3)_2$，且其中R_7經由N環成員鍵結至A'。

【0509】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7選自-CH_3、-CH_2-CH_3及CH_2-CH_2-OH，且其中R_7經由N環成員鍵結至A'。

【0510】 A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N，其中R_7選自-CH_3、-CH_2-CH_3及CH_2-CH_2-OH，且其中R_7經由N環成員鍵結至A'。

【0511】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7選自-CH_3、-CH_2-CH_3、CH_2-CH_2-OH、CH_2-CHF_2、CH_2-CF_3、CH_2-CH_2-CH_2-OH、-$CH(CH_3)_2$及-CH_2-(C=O)-NH_2，且其中R_7經由N環成員鍵結至A'。

【0512】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7選自-CH_3、-CH_2-CH_3、CH_2-CH_2-OH、CH_2-CHF_2、CH_2-CF_3、CH_2-CH_2-CH_2-OH及-$CH(CH_3)_2$，且其中R_7經由N環成員鍵結至A'。

【0513】 A'可為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7選自-CH_3、-CH_2-CH_3及CH_2-CH_2-OH，且其中R_7經由N環成員鍵結至A'。

【0514】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7選自-CH_3、-CH_2-CH_3、CH_2-CH_2-OH、CH_2-CHF_2、CH_2-CF_3、CH_2-CH_2-CH_2-OH、-$CH(CH_3)_2$及-CH_2-(C=O)-NH_2，且其中R_7經由N環成員鍵結至A'。

【0515】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7選自-CH_3、-CH_2-CH_3、CH_2-CH_2-OH、CH_2-CHF_2、CH_2-CF_3、CH_2-CH_2-CH_2-OH及-$CH(CH_3)_2$，且其中R_7經由N環成員鍵結至A'。

【0516】 A'可為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7選自-CH_3、-CH_2-CH_3及CH_2-CH_2-OH，且其中R_7經由N環成員鍵結至A'。

【0517】 A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N，其中R_7選自-CH_3、-CH_2-CH_3及CH_2-CH_2-OH，且其中R_7經由N環成員鍵結至A'。

【0518】 R_{10}、R_{11}及R_{17}可不存在。

【0519】 R_{10}及R_{11}可不存在。

【0520】 R_{24}、R_{25}、R_{26}及R_{27}可不存在。

【0521】 R_{24}、R_{25}及R_{26}可不存在。

【0522】 R_{10}、R_{11}、R_{17}、R_{24}、R_{25}及R_{26}以及R_{27}可不存在。

【0523】 R_{10}、R_{11}、R_{24}、R_{25}及R_{26}可不存在。

【0524】 R_{43}及R_{44}可不存在。

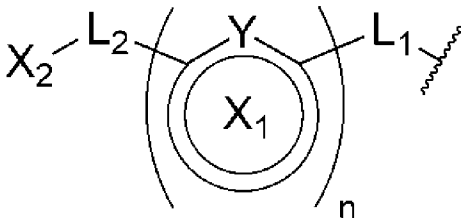
【0525】 A'可進一步經至少一個側氧基取代基取代。

【0526】 A'可進一步經一個側氧基取代基取代。

【0527】 在一些實施例中，A'未經除R_7以外之其他取代基取代。

【0528】 R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

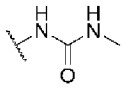
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

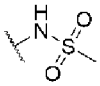
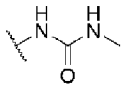
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

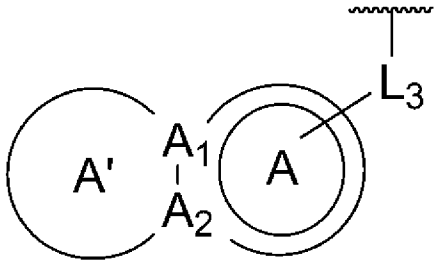
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2

個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

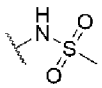
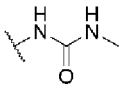
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

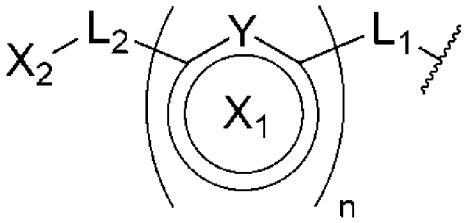
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0529】R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

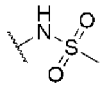
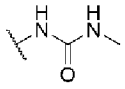
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

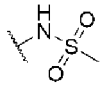
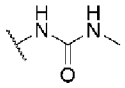
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

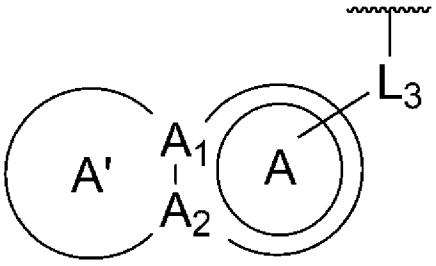
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

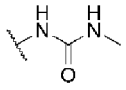
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

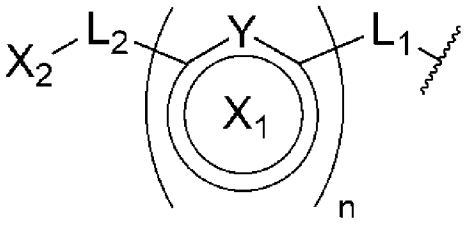
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及

R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0530】 R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

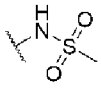
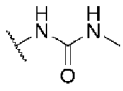
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

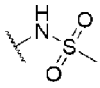
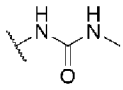
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及$-SO_2-$之連接基；且

X_2為：(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

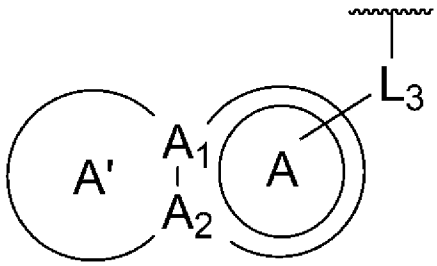
其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

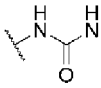
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

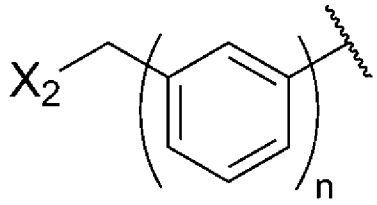
其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0531】 R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

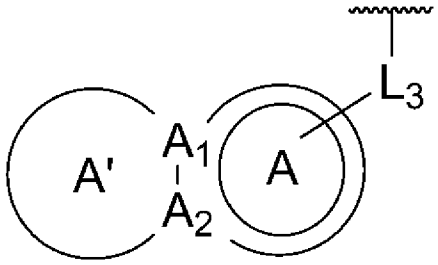
其中：

n為0或1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

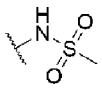
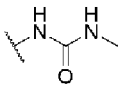
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

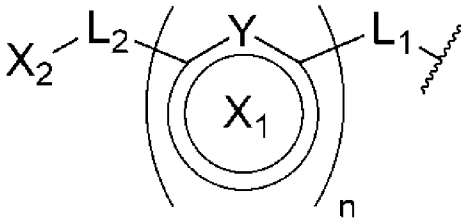
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

較佳地，R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

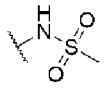
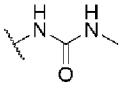
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

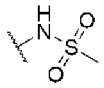
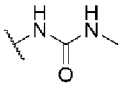
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

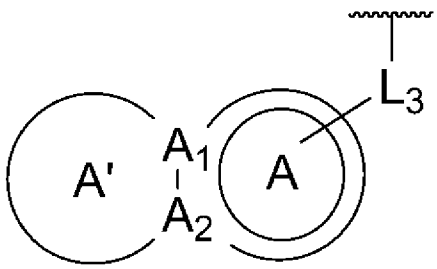
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

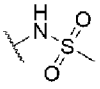
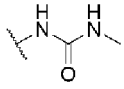
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

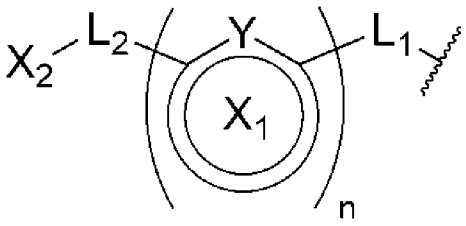
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0532】R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

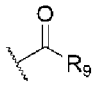
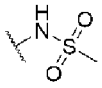
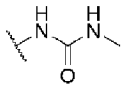
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

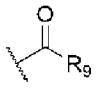
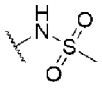
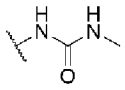
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

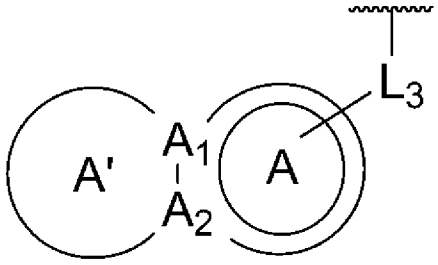
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

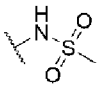
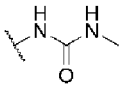
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

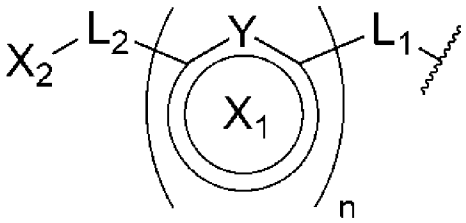
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0533】 R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

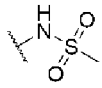
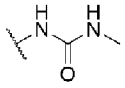
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

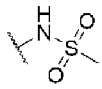
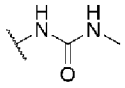
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

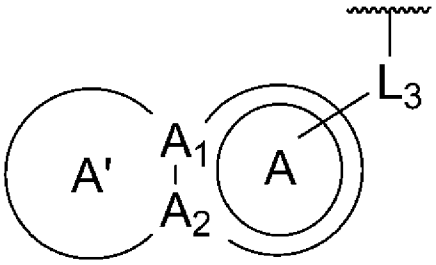
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

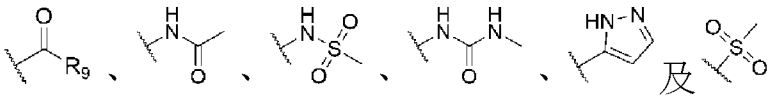
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  及；

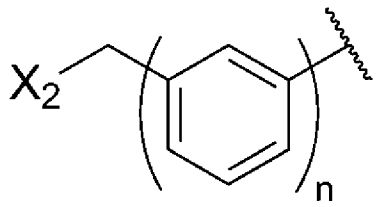
其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0534】 R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

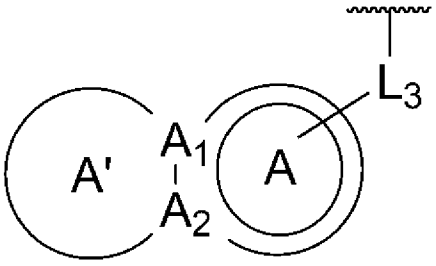
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

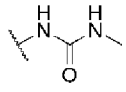
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

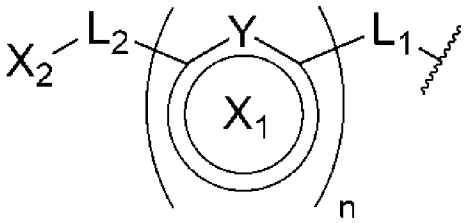
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0535】 式(II)可由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

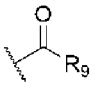
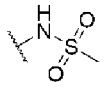
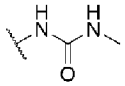
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

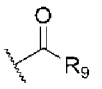
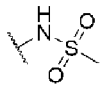
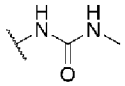
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

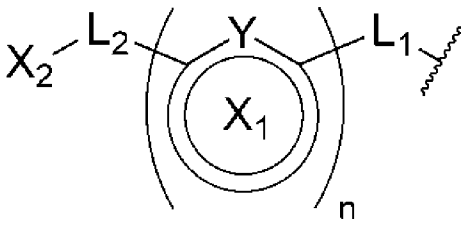
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0536】 式(II)可由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

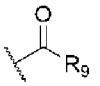
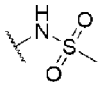
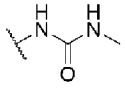
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

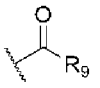
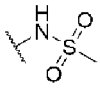
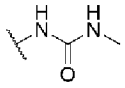
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及$-SO_2-$之連接基；且

X_2為：(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

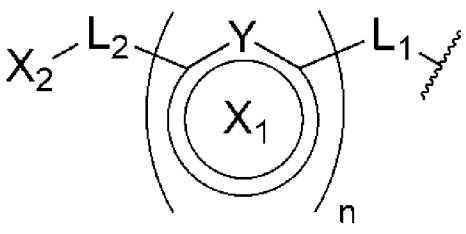
其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0537】 式(II)可由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

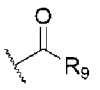
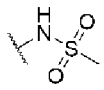
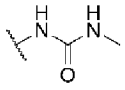
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

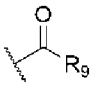
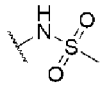
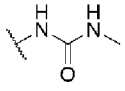
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

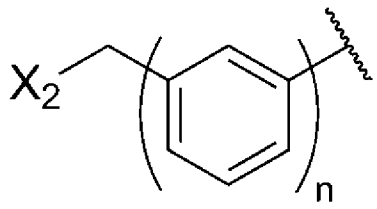
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}

在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0538】 式(II)可由式(IIa)表示，



式(IIa)，

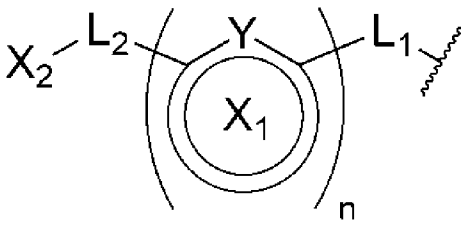
其中：

n為0或1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0539】 式(II)可由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

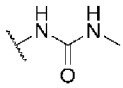
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

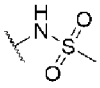
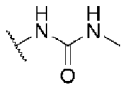
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

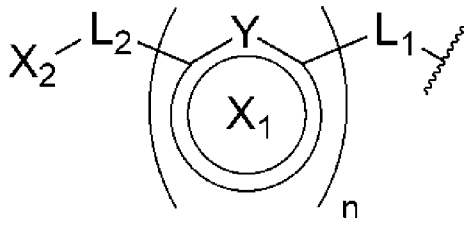
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2

個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0540】 式(II)可由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

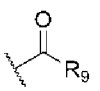
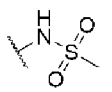
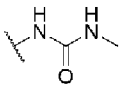
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

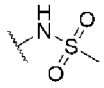
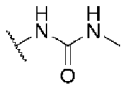
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

X_2為：(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

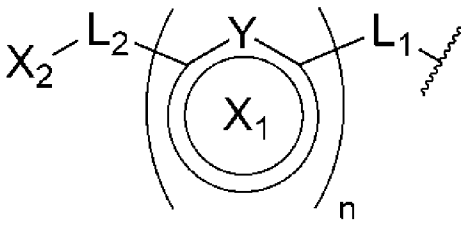
其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0541】 式(II)可由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

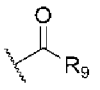
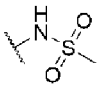
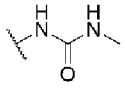
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

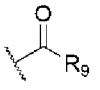
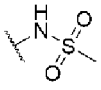
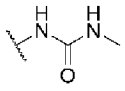
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

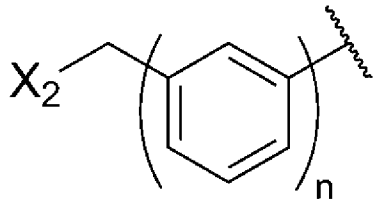
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0542】 式(II)可由式(IIa)表示，



式(IIa)，

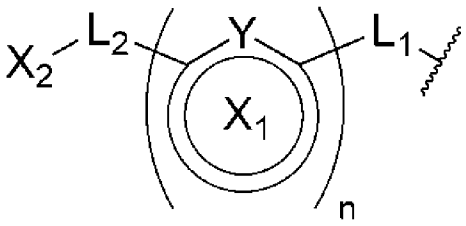
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0543】 R_1可為式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

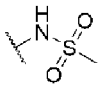
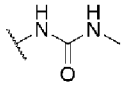
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

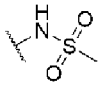
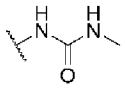
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

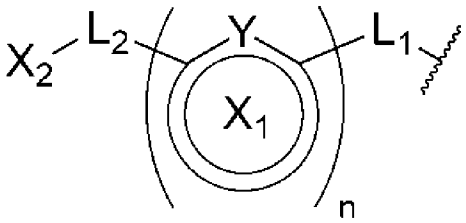
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0544】 R_1可為式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

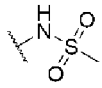
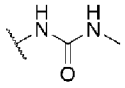
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

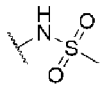
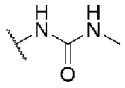
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

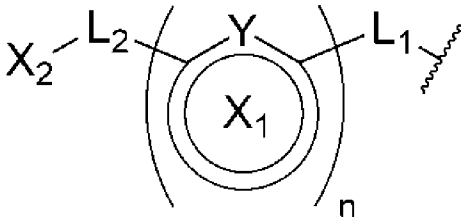
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0545】 R_1可為式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

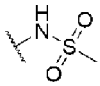
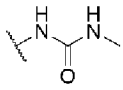
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

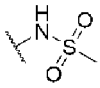
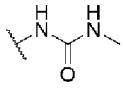
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

X_2為：(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

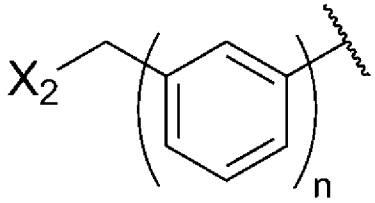
其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0546】 R_1可為式(IIa)，



式(IIa)，

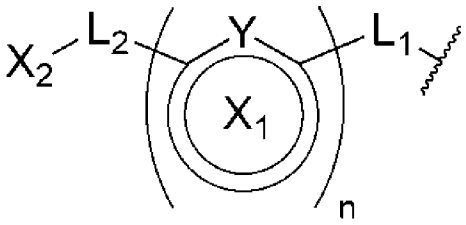
其中：

n為0或1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

R_1可為式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

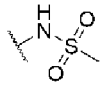
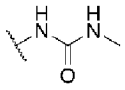
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

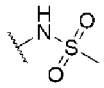
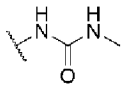
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

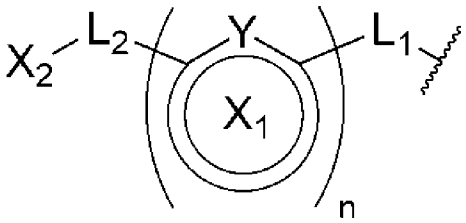
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0547】 R_1可為式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

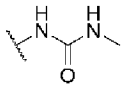
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

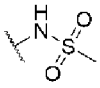
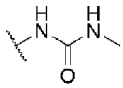
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

X_2為：(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

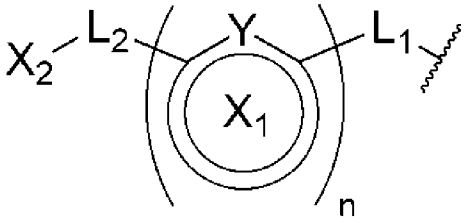
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2

個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【0548】 R_1可為式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

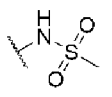
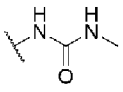
其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

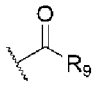
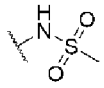
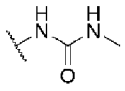
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

X_2為：(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

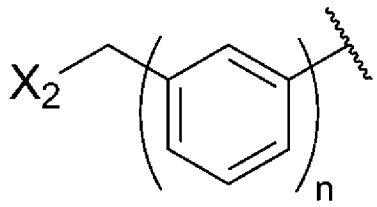
其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0549】 R_1可為式(IIa)，



式(IIa)，

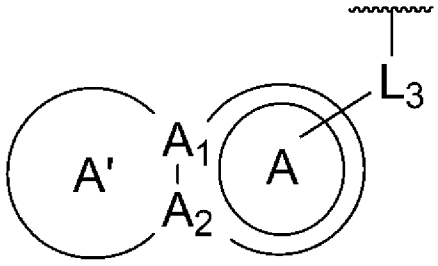
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0550】 式(III)可包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

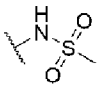
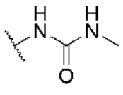
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

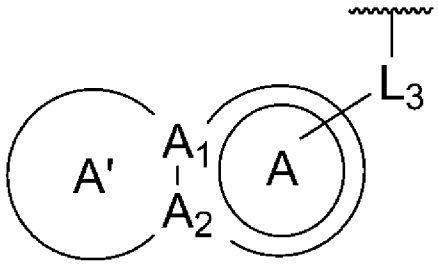
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0551】 式(III)可包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

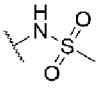
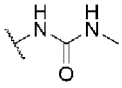
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

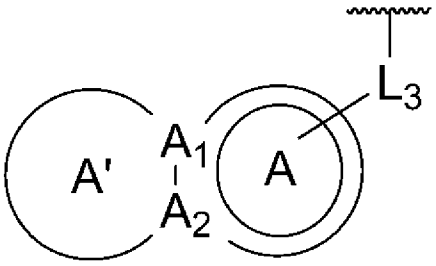
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0552】 式(III)可包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

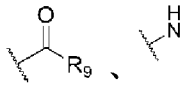
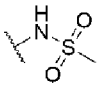
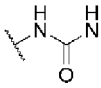
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

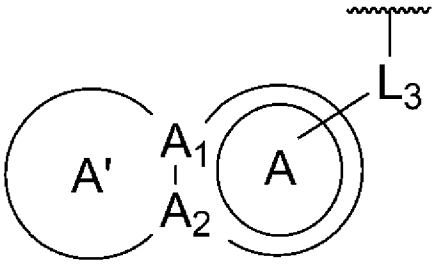
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0553】 式(III)可包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

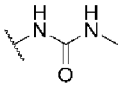
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

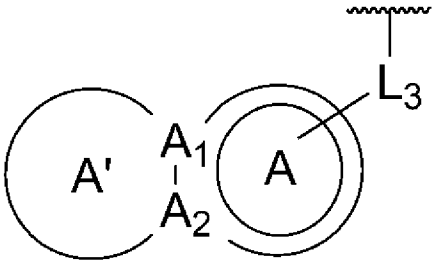
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0554】 R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

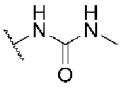
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

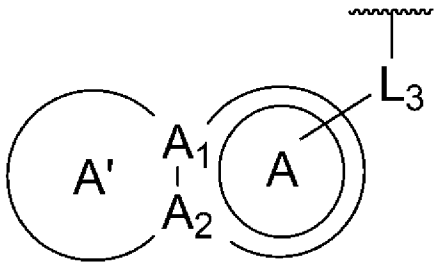
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0555】 R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

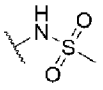
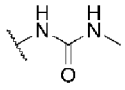
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

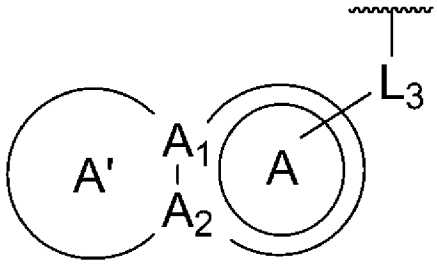
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及

R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0556】R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

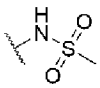
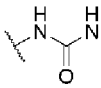
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

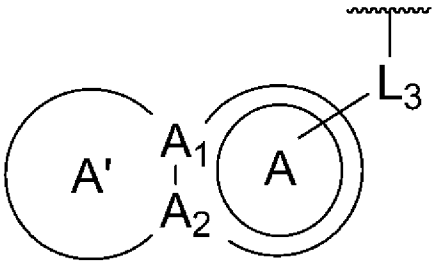
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0557】 R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

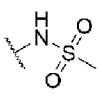
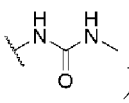
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

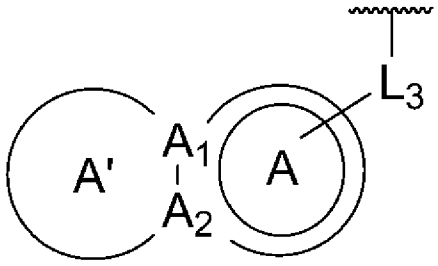
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0558】 式(III)可包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

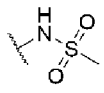
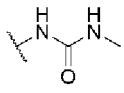
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個氮環成員之6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N或其中一個環成員為N且第二環成員為O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

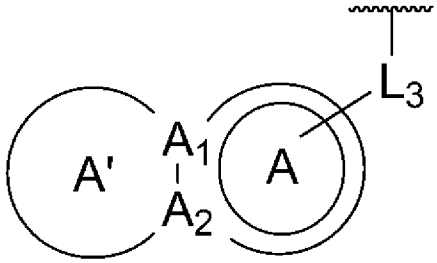
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0559】 式(III)可包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

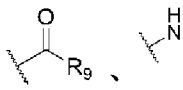
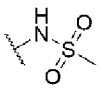
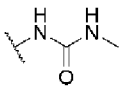
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個氮環成員之6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

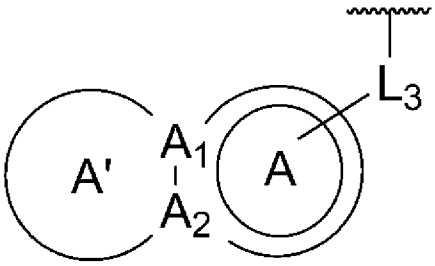
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0560】 式(III)可包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

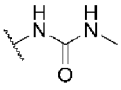
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個氮環成員之6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N；

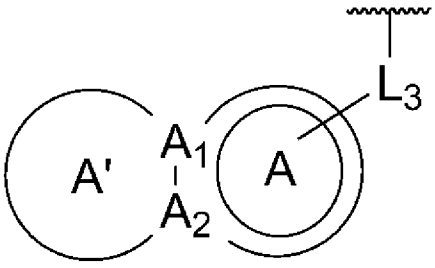
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0561】 式(III)可包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

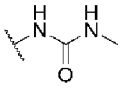
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個氮環成員之6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

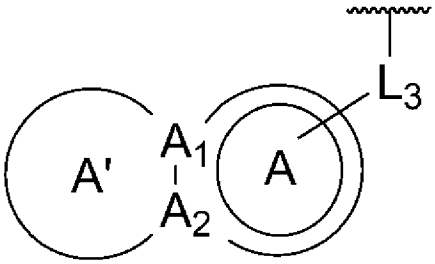
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0562】 R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

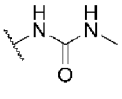
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個氮環成員之6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N或其中一個環成員為N且第二環成員為O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

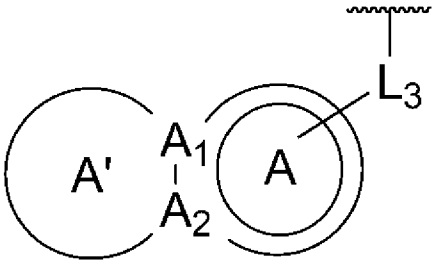
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0563】 R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

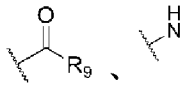
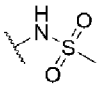
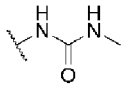
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個氮環成員之6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

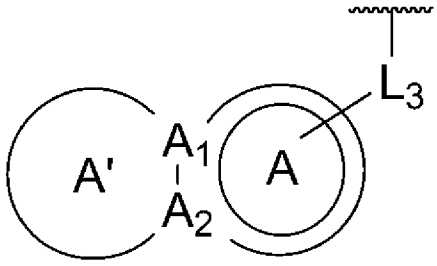
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及

R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0564】 R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

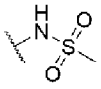
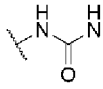
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個氮環成員之6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

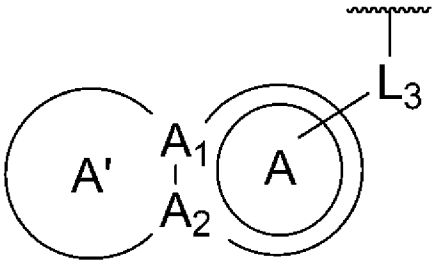
其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及

R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0565】 R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

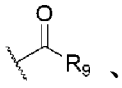
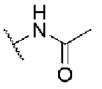
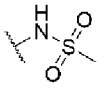
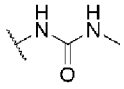
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個氮環成員之6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N；

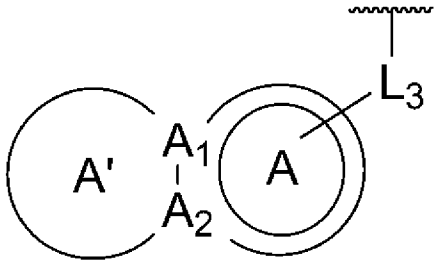
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其

他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0566】 式(III)可包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

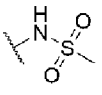
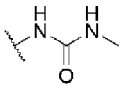
其中：

L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或吡啶基；

A'為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N或其中一個環成員為N且第二環成員為O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

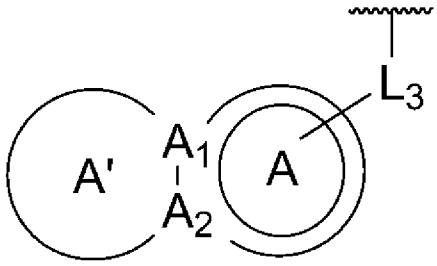
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0567】 式(III)可包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

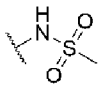
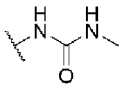
其中：

L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或吡啶基；

A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

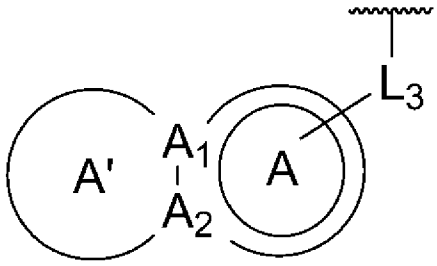
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0568】 式(III)可包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

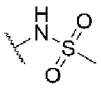
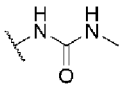
其中：

L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或吡啶基；

A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N；

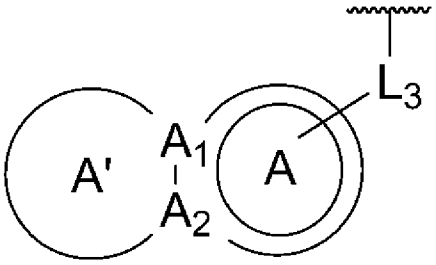
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0569】 式(III)可包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

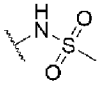
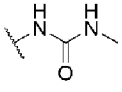
其中：

L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或吡啶基；

A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

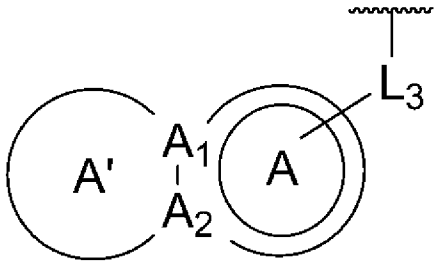
其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選

自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

其中R_7當存在時經由N環成員鍵結至A'。

【0570】 R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

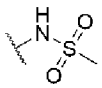
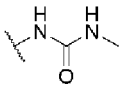
其中：

L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或吡啶基；

A'為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N或其中一個環成員為N且第二環成員為O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

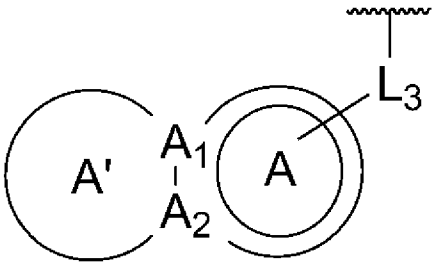
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0571】R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

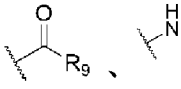
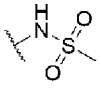
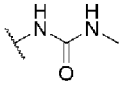
其中：

L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或吡啶基；

A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

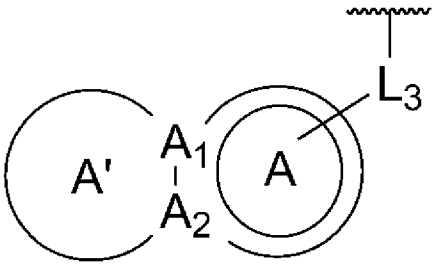
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0572】 R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

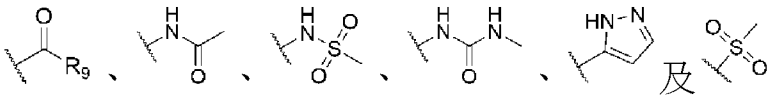
其中：

L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或吡啶基；

A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N；

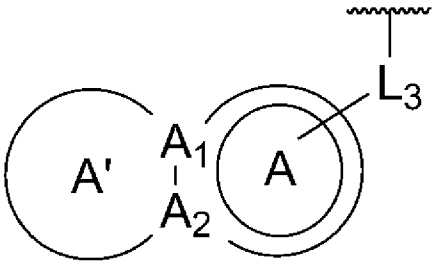
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  及；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0573】 R_1可為式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

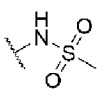
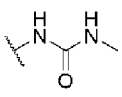
其中：

L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或吡啶基；

A'可為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N；

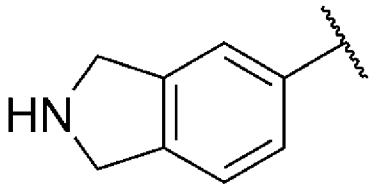
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

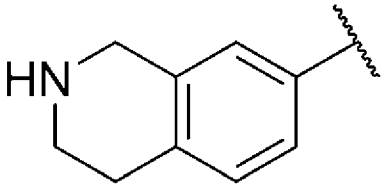
其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

其中R_7當存在時經由N環成員鍵結至A'。

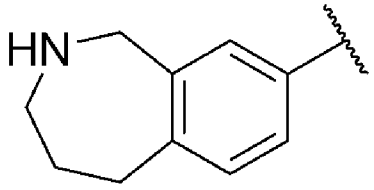
【0574】 式(III)可由式(IIIa)、式(IIIb)、式(IIIc)及式(IIId)表示，



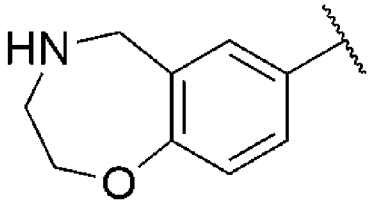
式(IIIa)，



式(IIIb)，



式(IIIc)，



式(IIId)，

其中：

A為苯基或吡啶基環且A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為稠合吡咯啶、哌啶、氮雜環庚烷或氧雜氮雜環庚烷環；

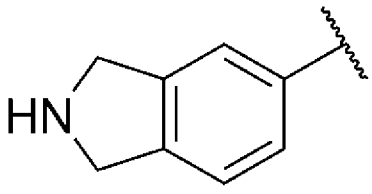
R_7當存在時經由式(IIIa)、式(IIIb)、式(IIIc)或式(IIId)之N環成員鍵結至A'，從而置換H；

A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

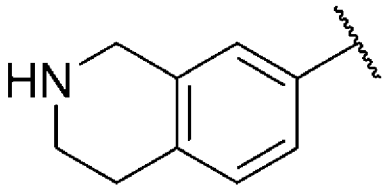
或A'可視情況經1或2個獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

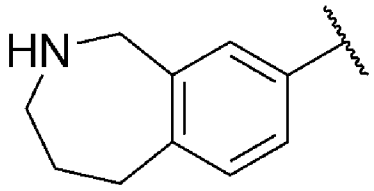
【0575】 式(III)可由式(IIIa)、式(IIIb)及式(IIIc)表示，



式(IIIa)，



式(IIIb)，



式(IIIc)，

其中：

A為苯基環且A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

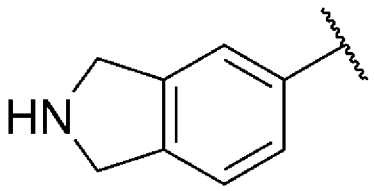
A'為稠合吡咯啶、哌啶或氮雜環庚烷環；

R_7當存在時經由式(IIIa)、式(IIIb)或式(IIIc)之N環成員鍵結至A'，從而置換H；

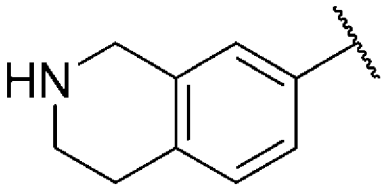
A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或A'可視情況經1或2個獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

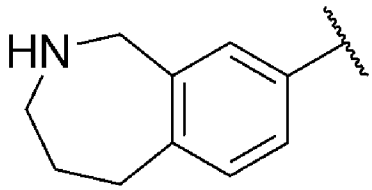
【0576】 式(III)可由式(IIIa)、式(IIIb)及式(IIIc)表示，



式(IIIa)，



式(IIIb)，



式(IIIc)，

其中：

A為苯基環且A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為稠合吡咯啶、哌啶或氮雜環庚烷環；

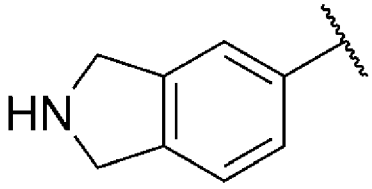
R_7當存在時經由式(IIIa)、式(IIIb)或式(IIIc)之N環成員鍵結至A'，從而置換H；

A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

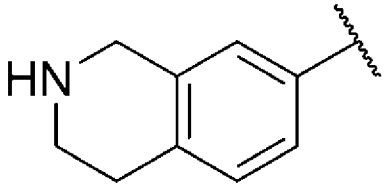
或A'可視情況經1個選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0577】 式(III)可由式(IIIb)表示。

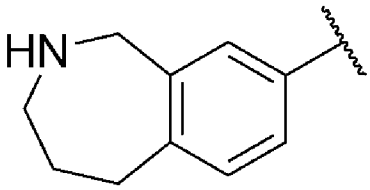
【0578】 R_1可為式(IIIa)、式(IIIb)及式(IIIc)，



式(IIIa)，



式(IIIb)，



式(IIIc)，

其中：

A為苯基環且A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

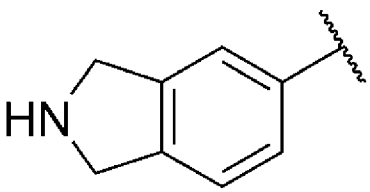
A'為稠合吡咯啶、哌啶或氮雜環庚烷環；

R_7當存在時經由式(IIIa)、式(IIIb)或式(IIIc)之N環成員鍵結至A'，從而置換H；

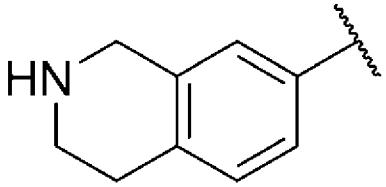
A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

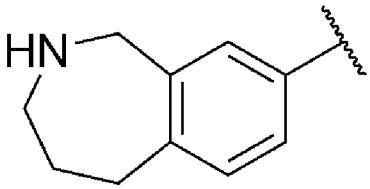
【0579】 R_1可為式(IIIa)、式(IIIb)、式(IIIc)及式(IIId)，



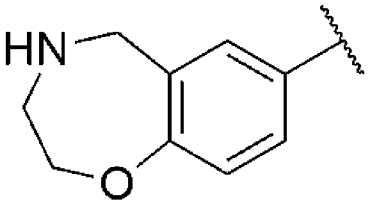
式(IIIa)，



式(IIIb)，



式(IIIc)，



式(IIId)，

其中：

A為苯基或吡啶基環且A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為稠合吡咯啶、哌啶、氮雜環庚烷或氧雜氮雜環庚烷環；

R_7當存在時經由式(IIIa)、式(IIIb)、式(IIIc)或式(IIId)之N環成員鍵結至A'，從而置換H；

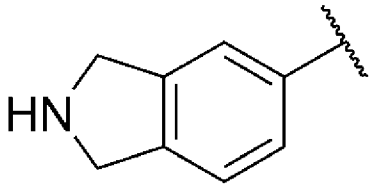
A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或A'可視情況經1或2個獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及

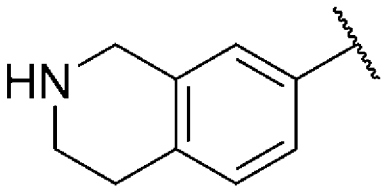
R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

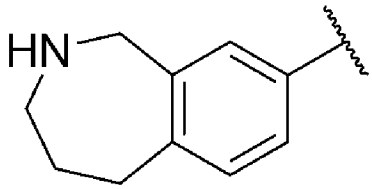
【0580】 R_1可為式(IIIa)、式(IIIb)及式(IIIc)，



式(IIIa)，



式(IIIb)，



式(IIIc)，

其中：

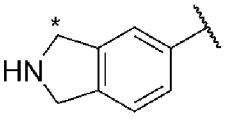
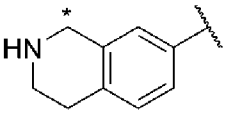
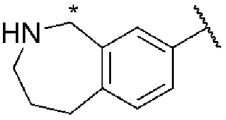
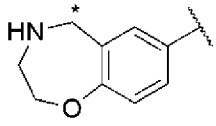
A為苯基環且A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

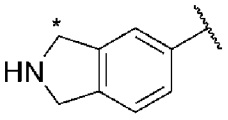
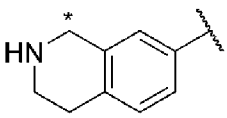
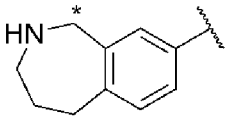
A'為稠合吡咯啶、哌啶或氮雜環庚烷環；

R_7當存在時經由式(IIIa)、式(IIIb)或式(IIIc)之N環成員鍵結至A'，從而置換H；

A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或A'可視情況經1個選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0581】 當式(III)為式(IIIa)、式(IIIb)、式(IIIc)及式(IIId)且A'係經側氧基取代時，側氧基可處於標有(*)之位置處：  、  、  及  。

【0582】 當式(III)為式(IIIa)、式(IIIb)及式(IIIc)且A'係經側氧基取代時，側氧基可處於標有(*)之位置處：  、  及  。

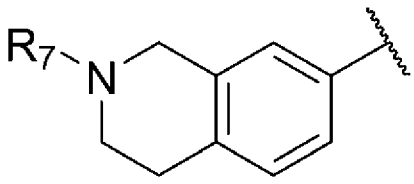
【0583】 R_1可為式(IIIb)、式(IIIc)或式(IIId)。

【0584】 R_1可為式(IIIb)或式(IIIc)。

【0585】 R_1可為式(IIIb)或式(IIId)。

【0586】 R_1可為式(IIIb)。

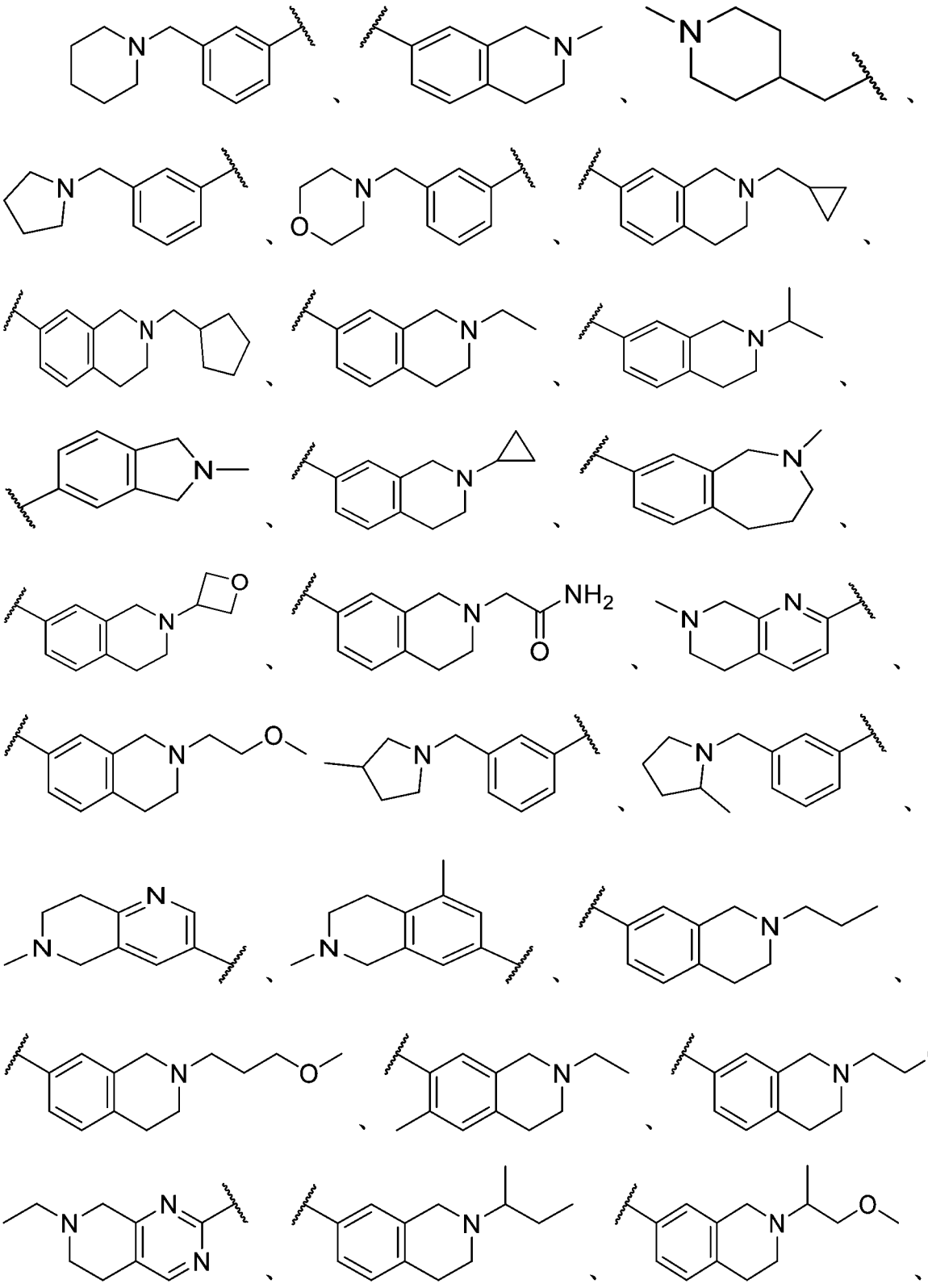
【0587】 式(III)可由式(IIIe)表示，

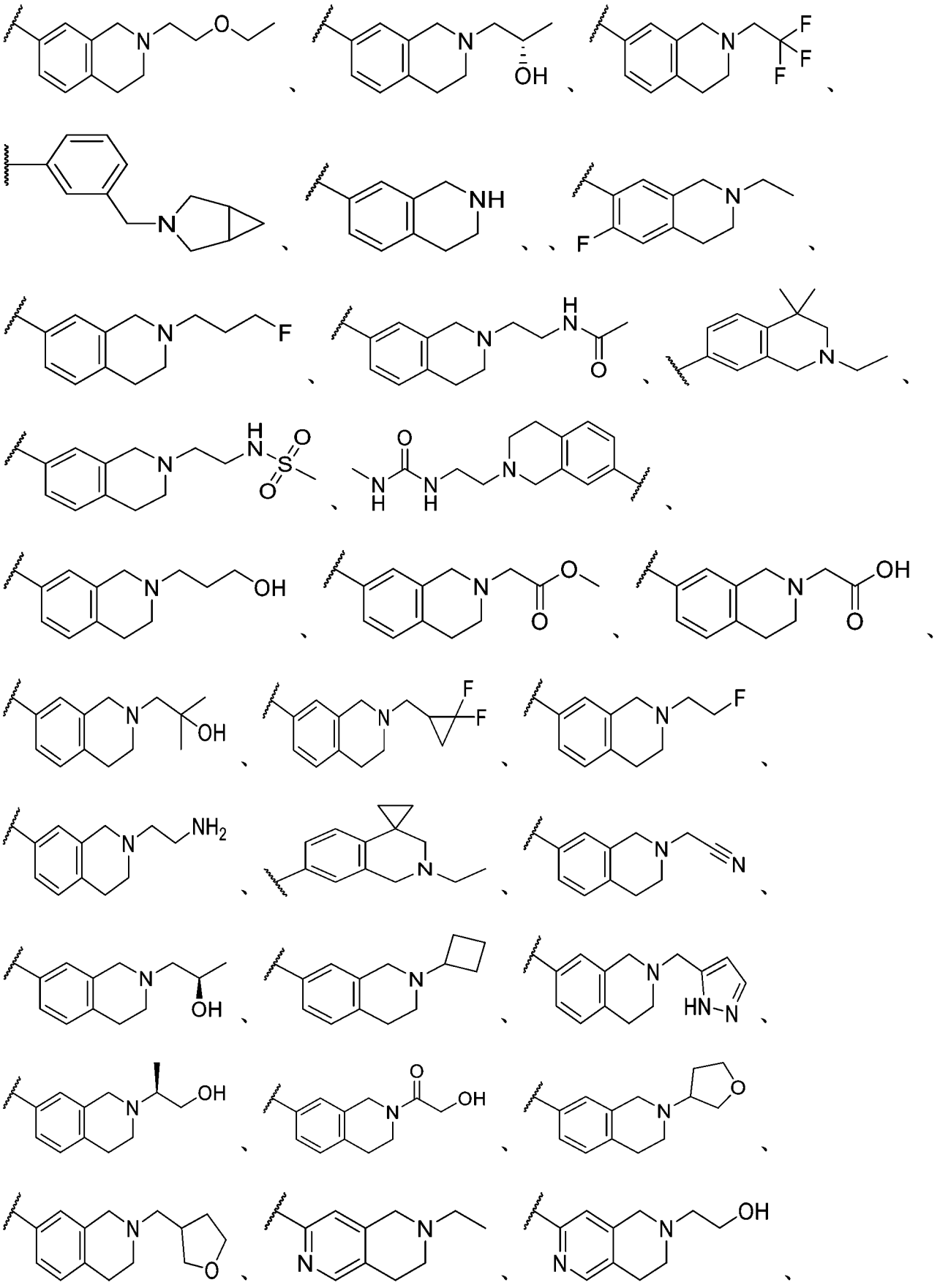


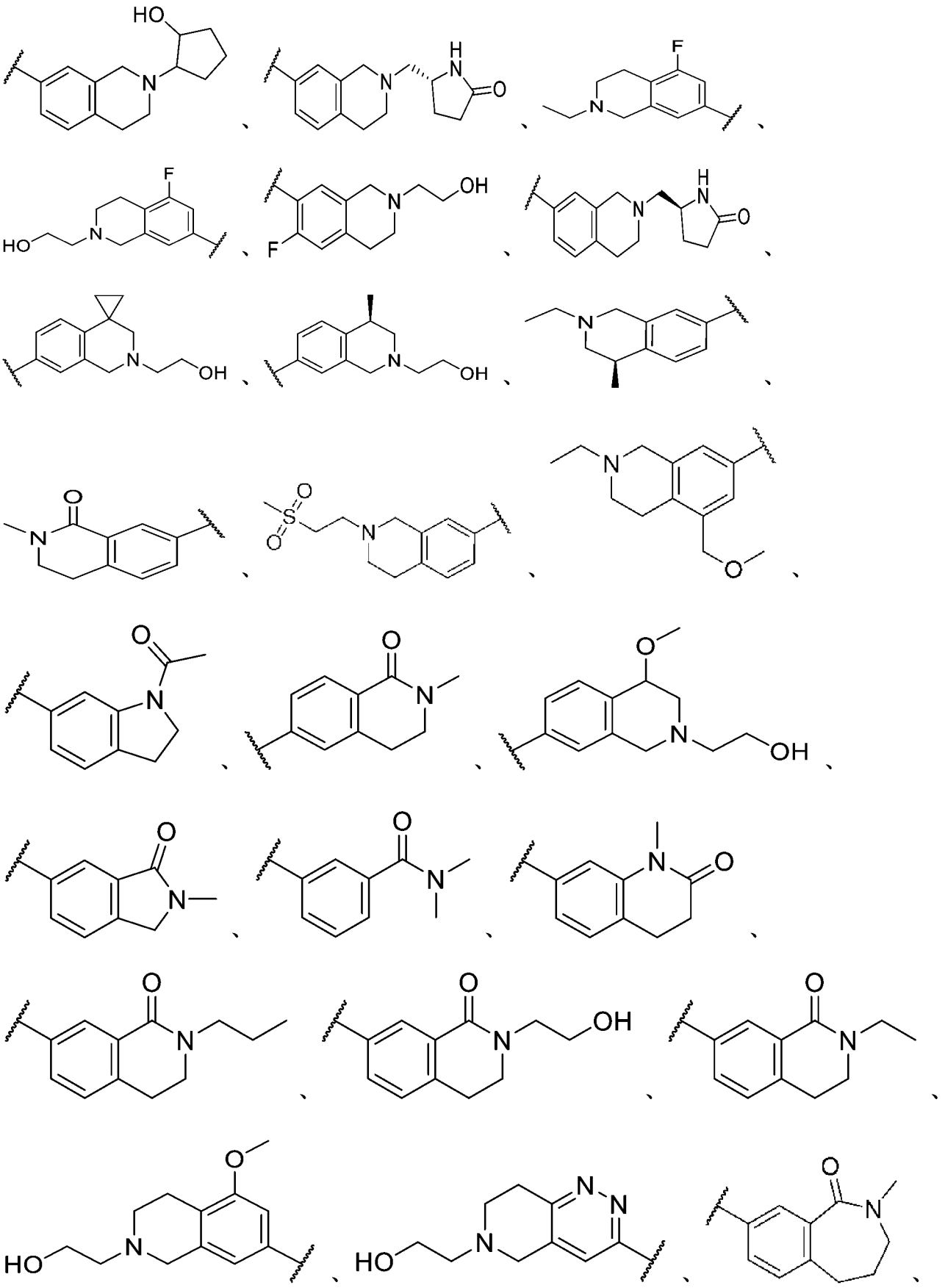
式(IIIe)。

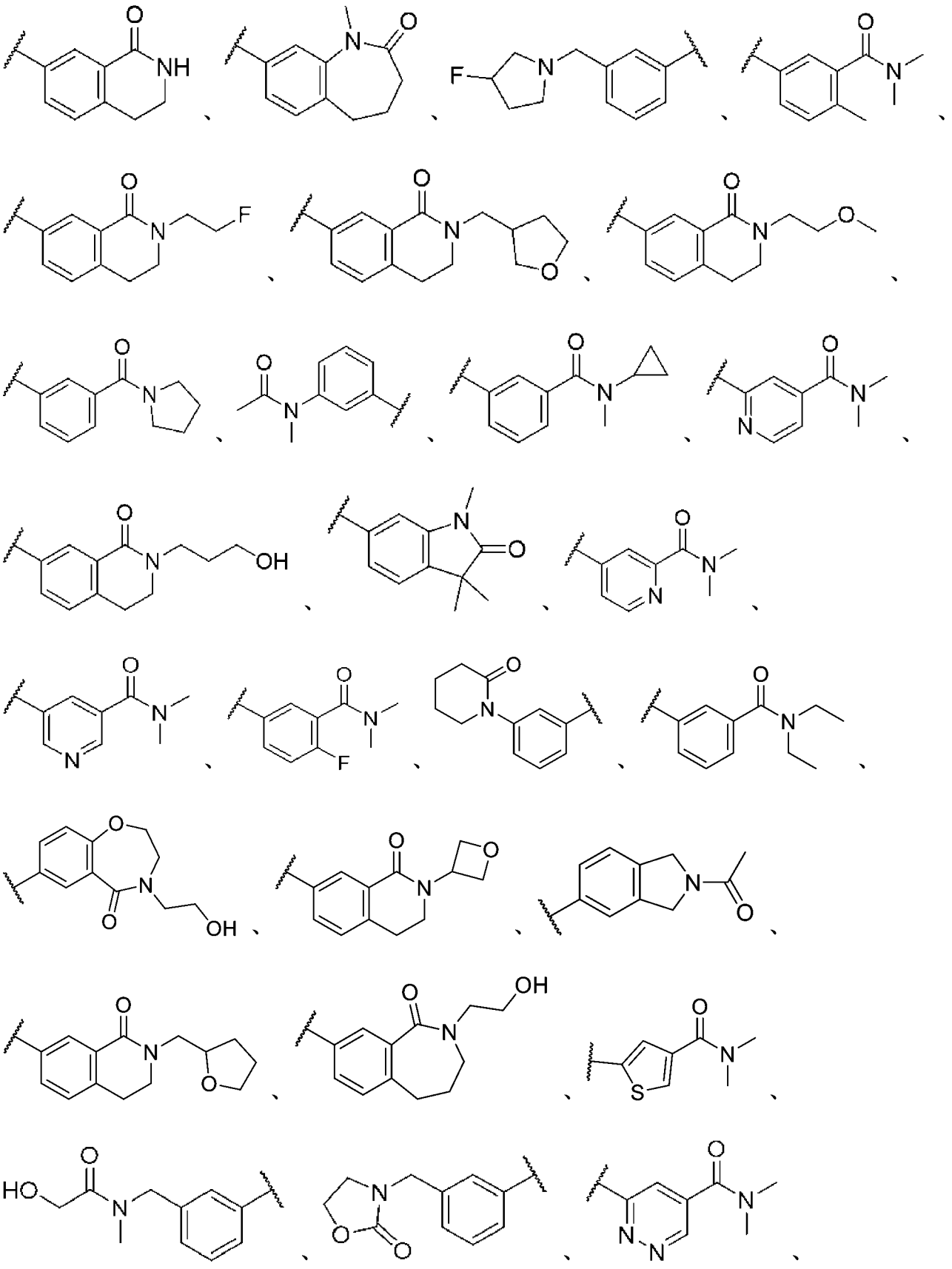
【0588】 R_1可為式(IIIe)。

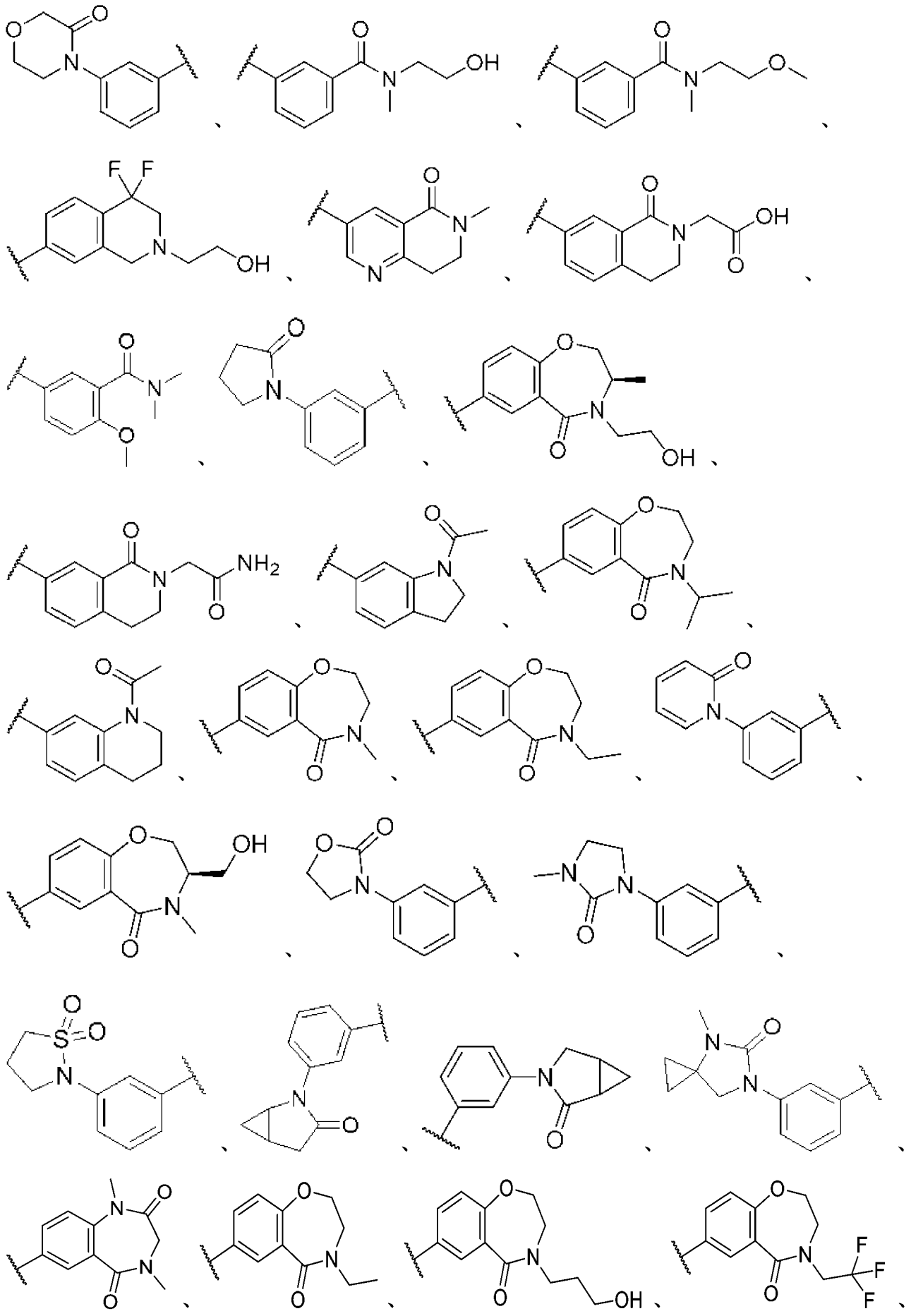
【0589】 R_1可選自：

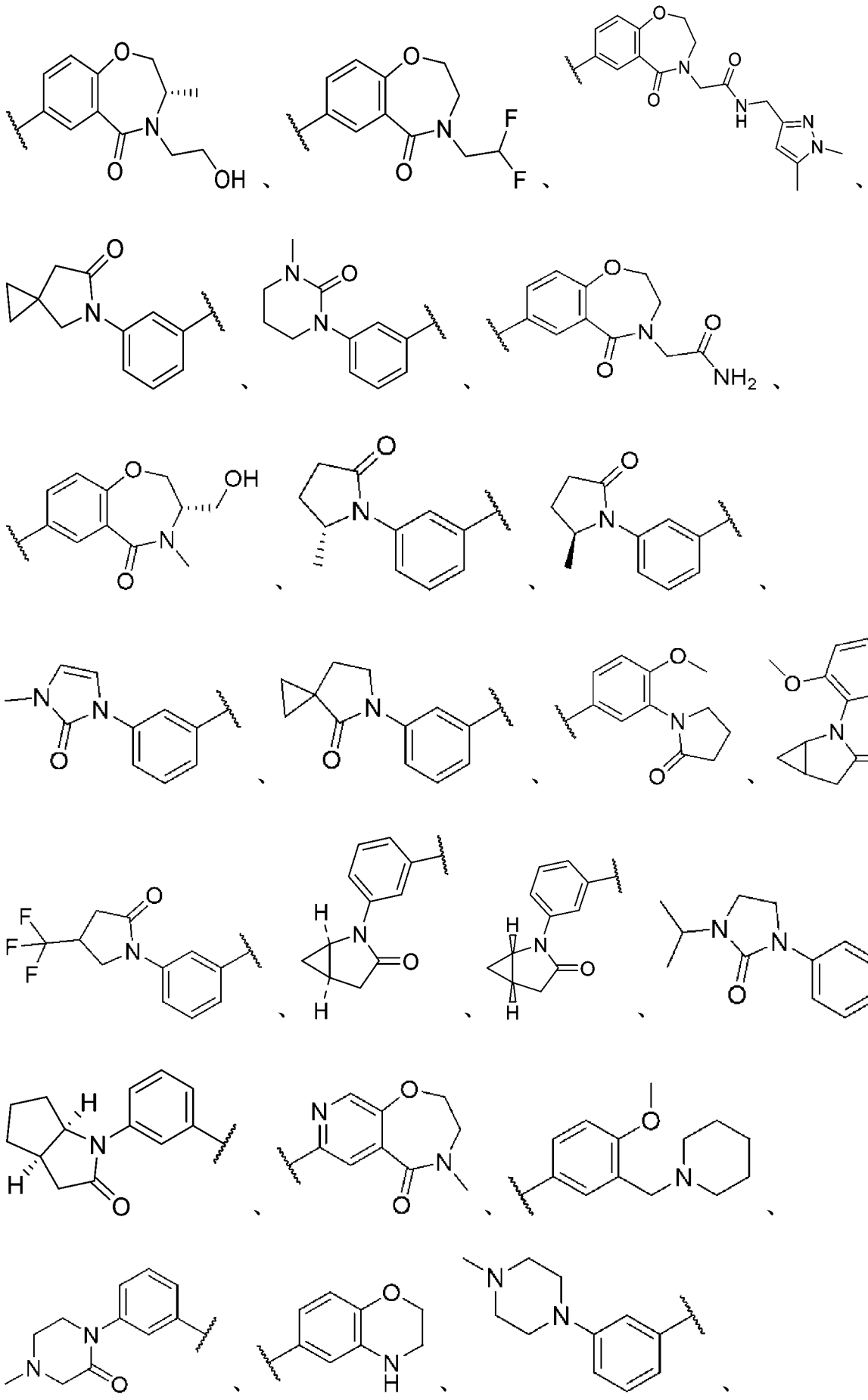


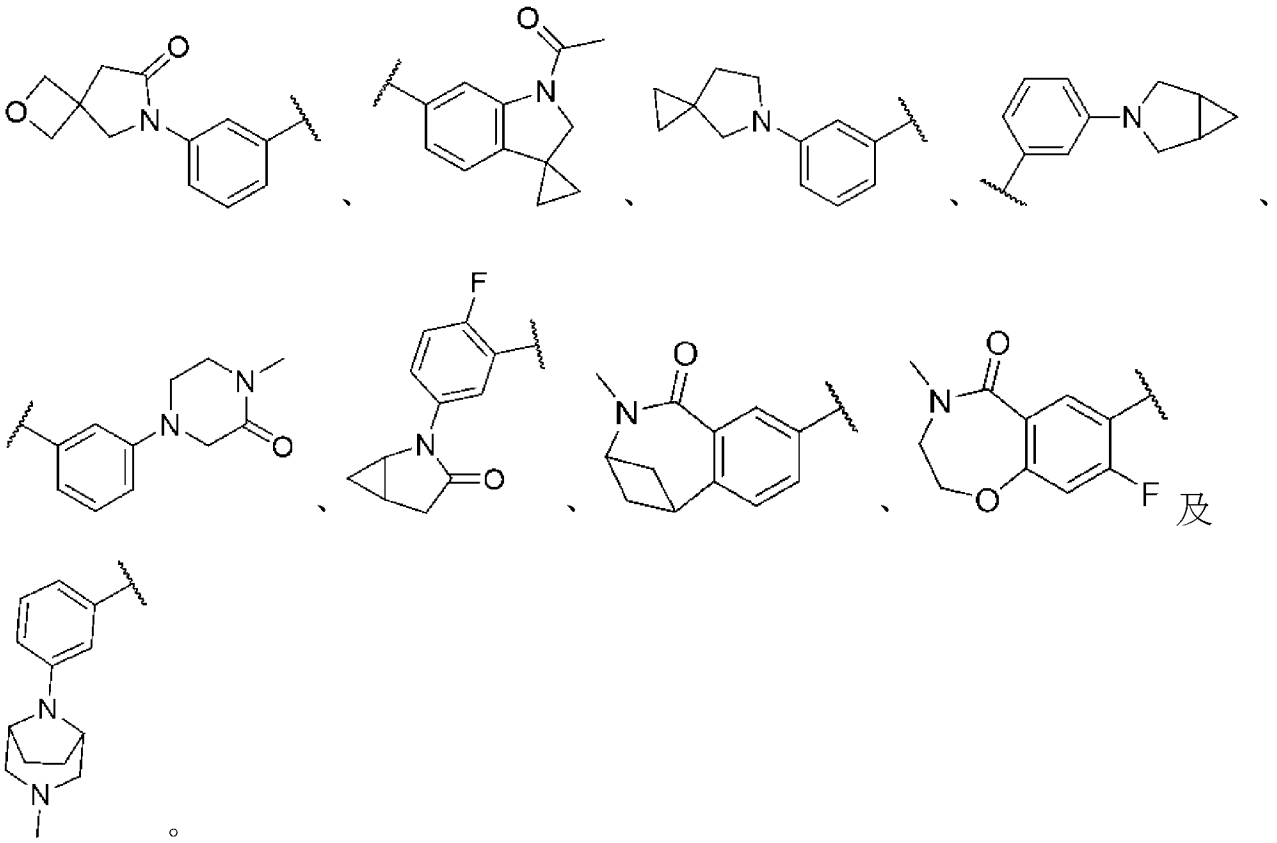




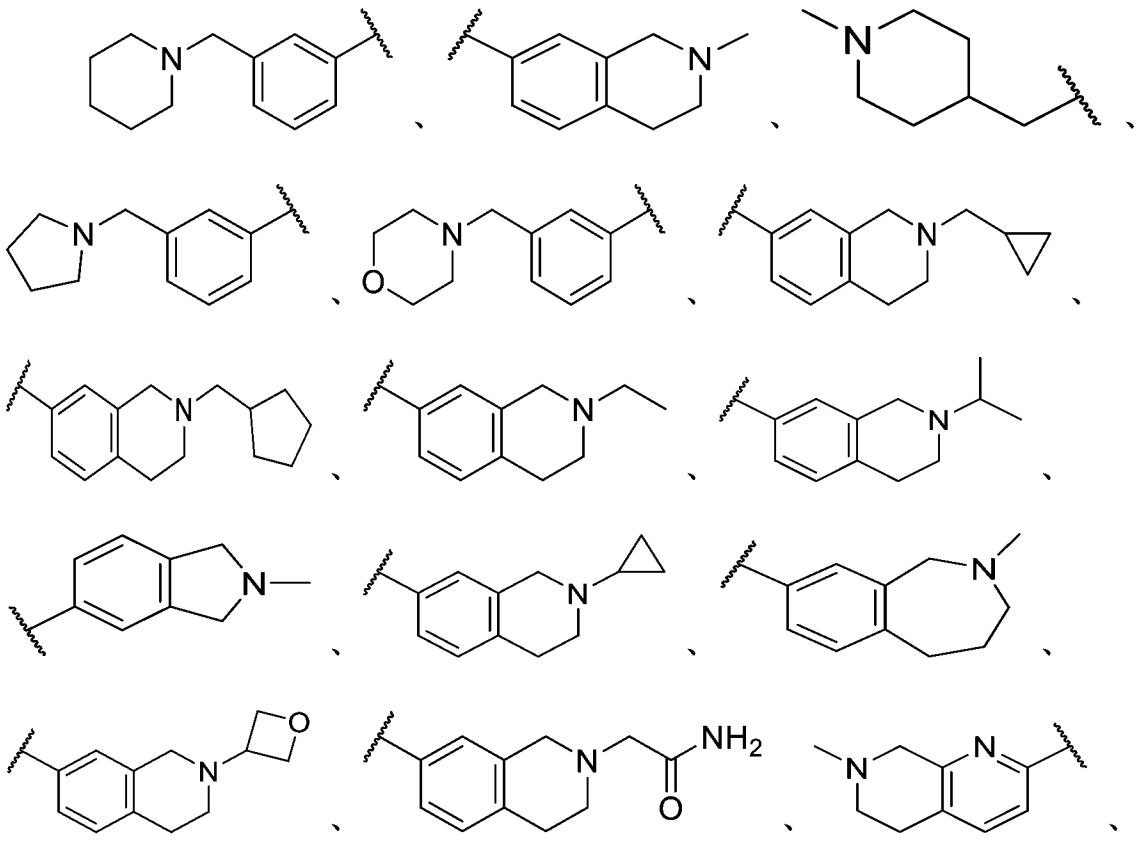


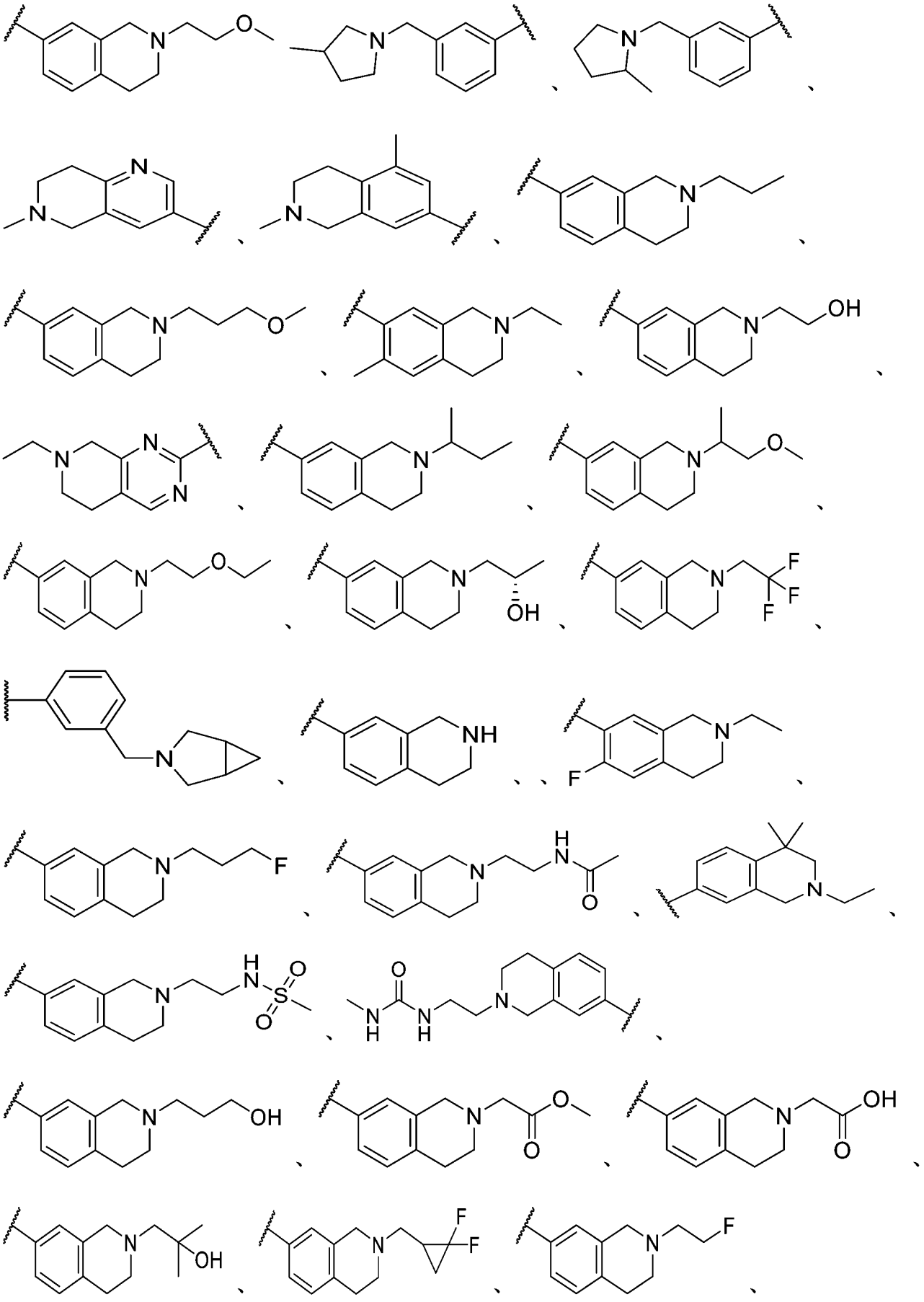


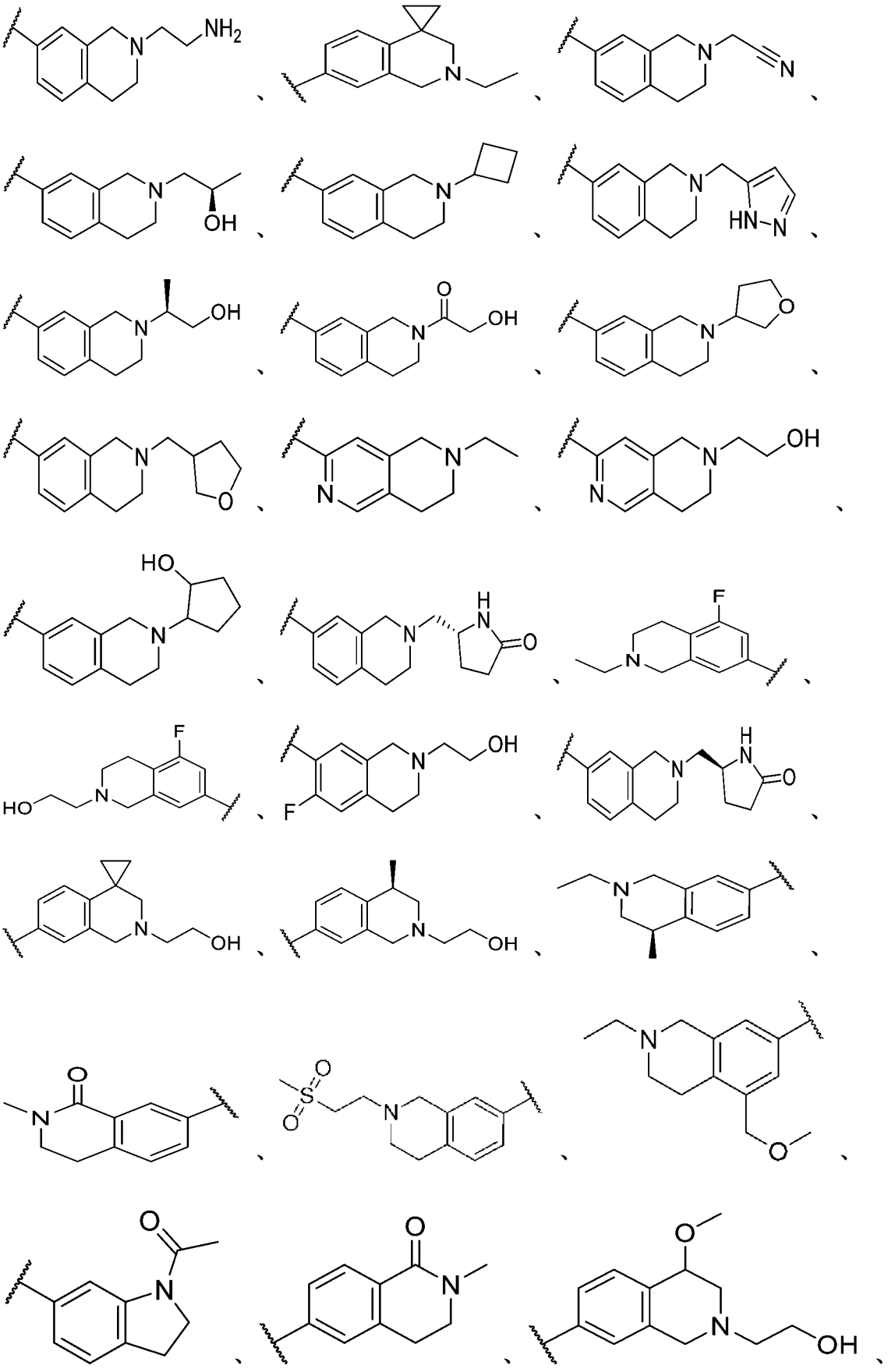


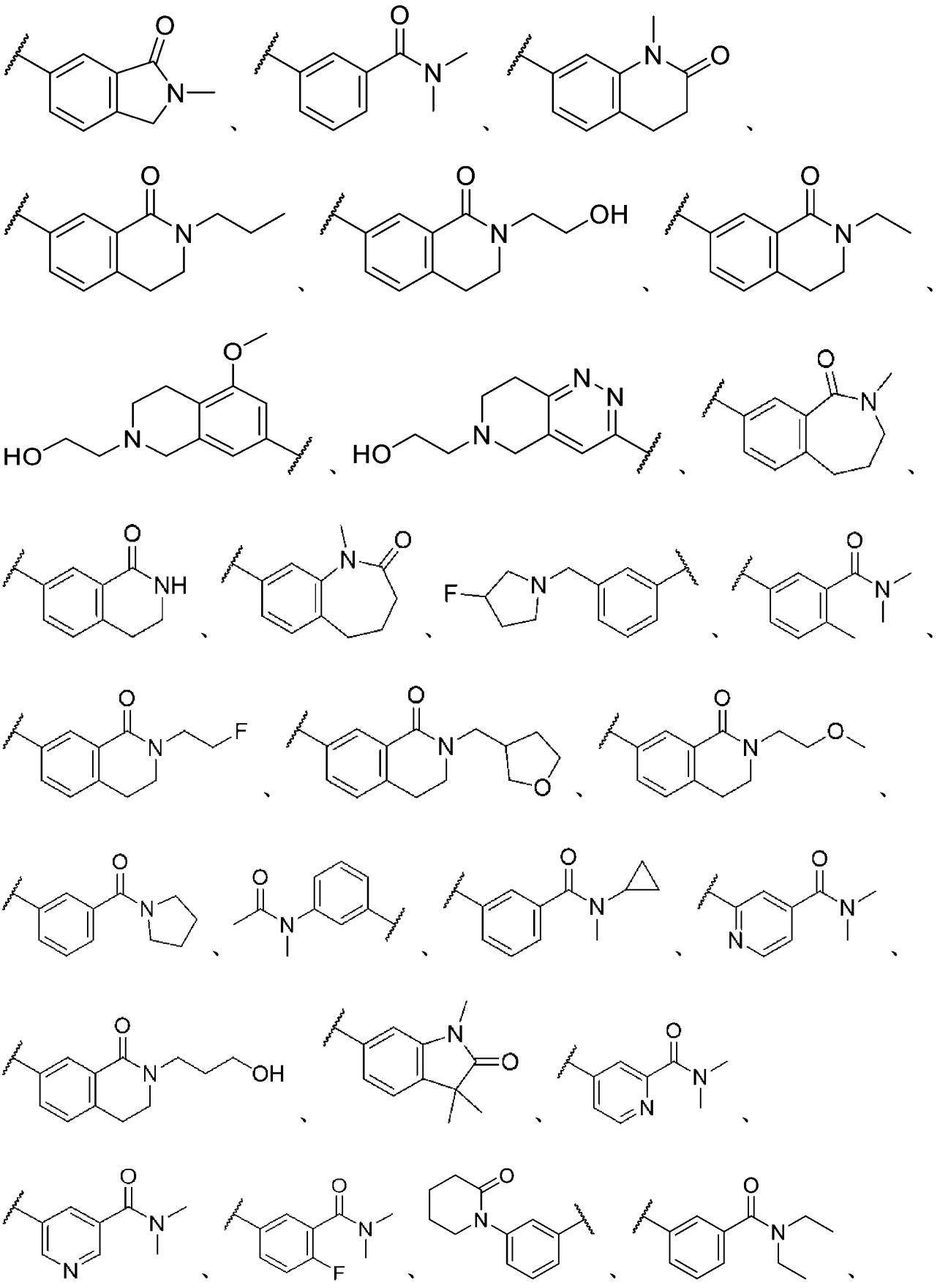


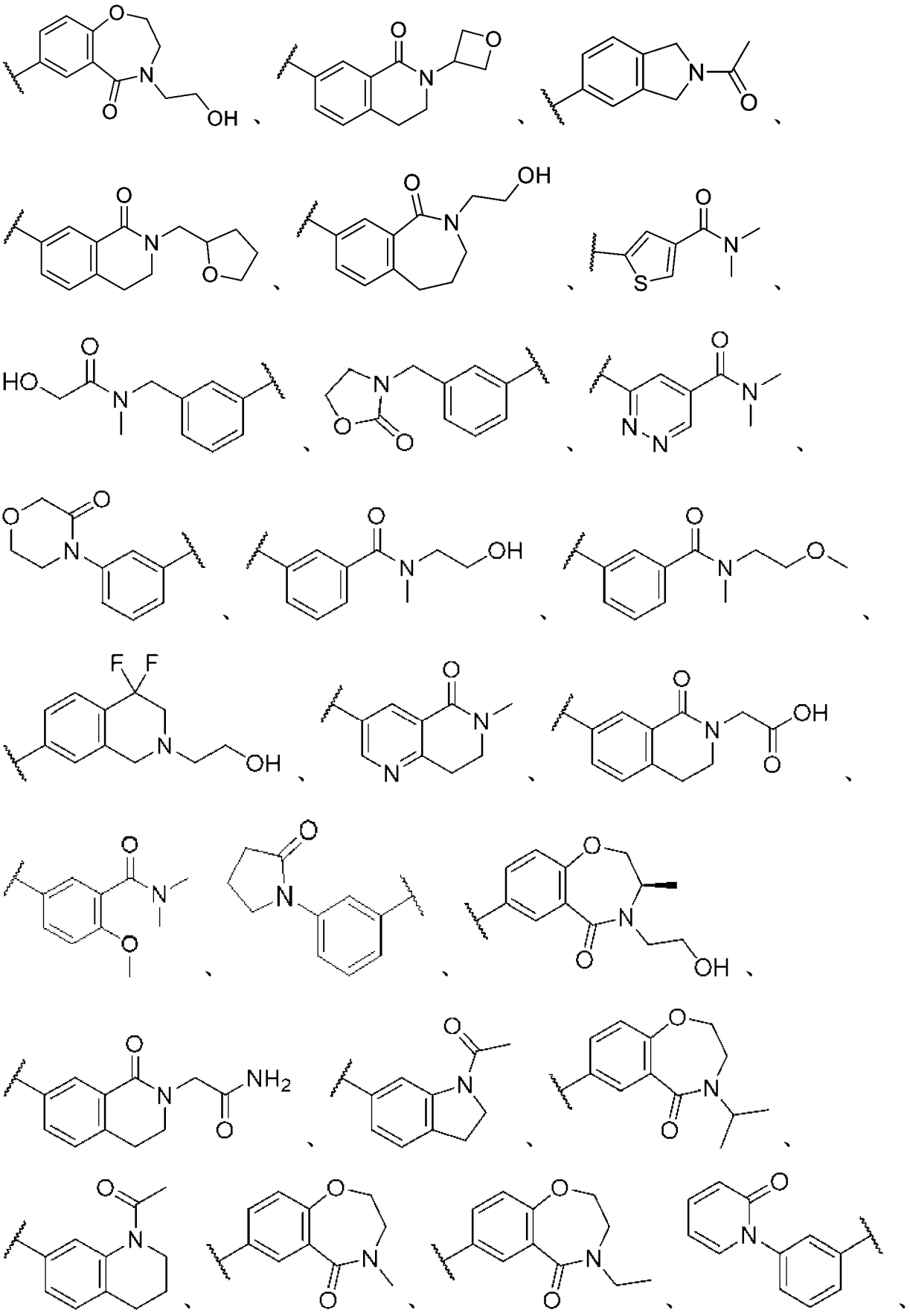
【0590】 R_1可選自：

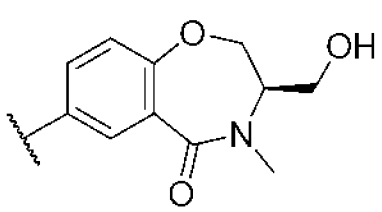
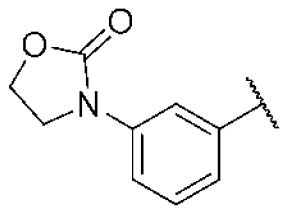
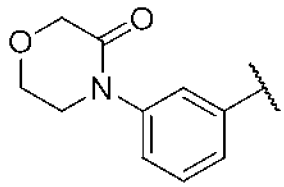
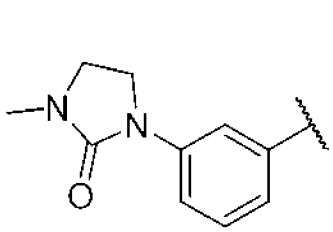
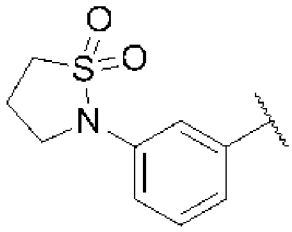
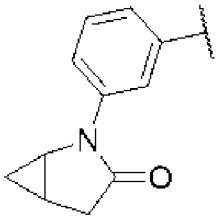
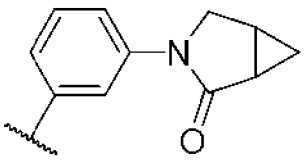
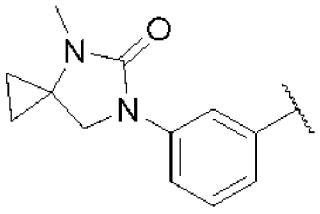
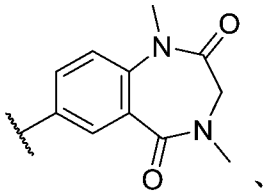
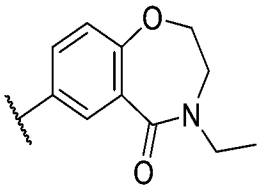
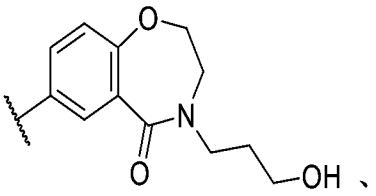
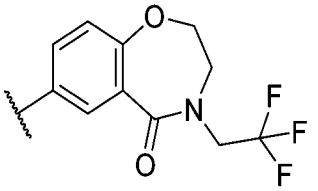
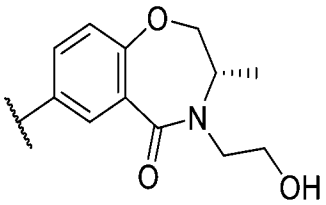
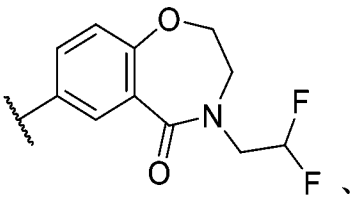
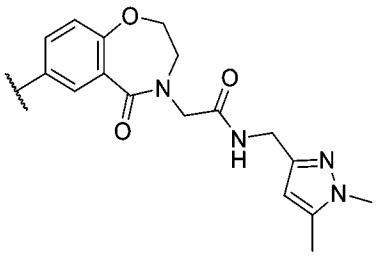
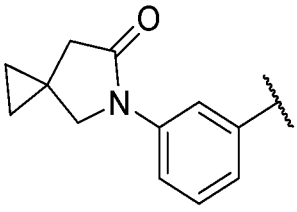
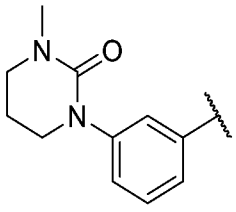




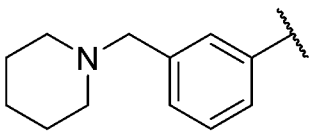
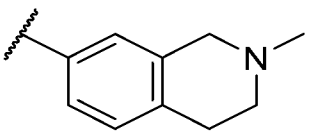
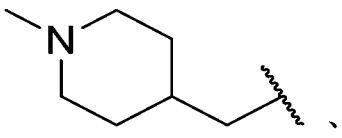
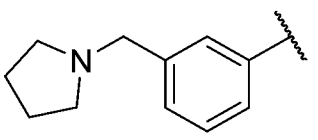
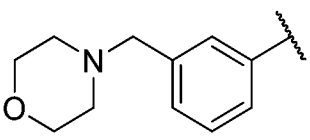
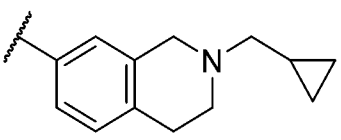


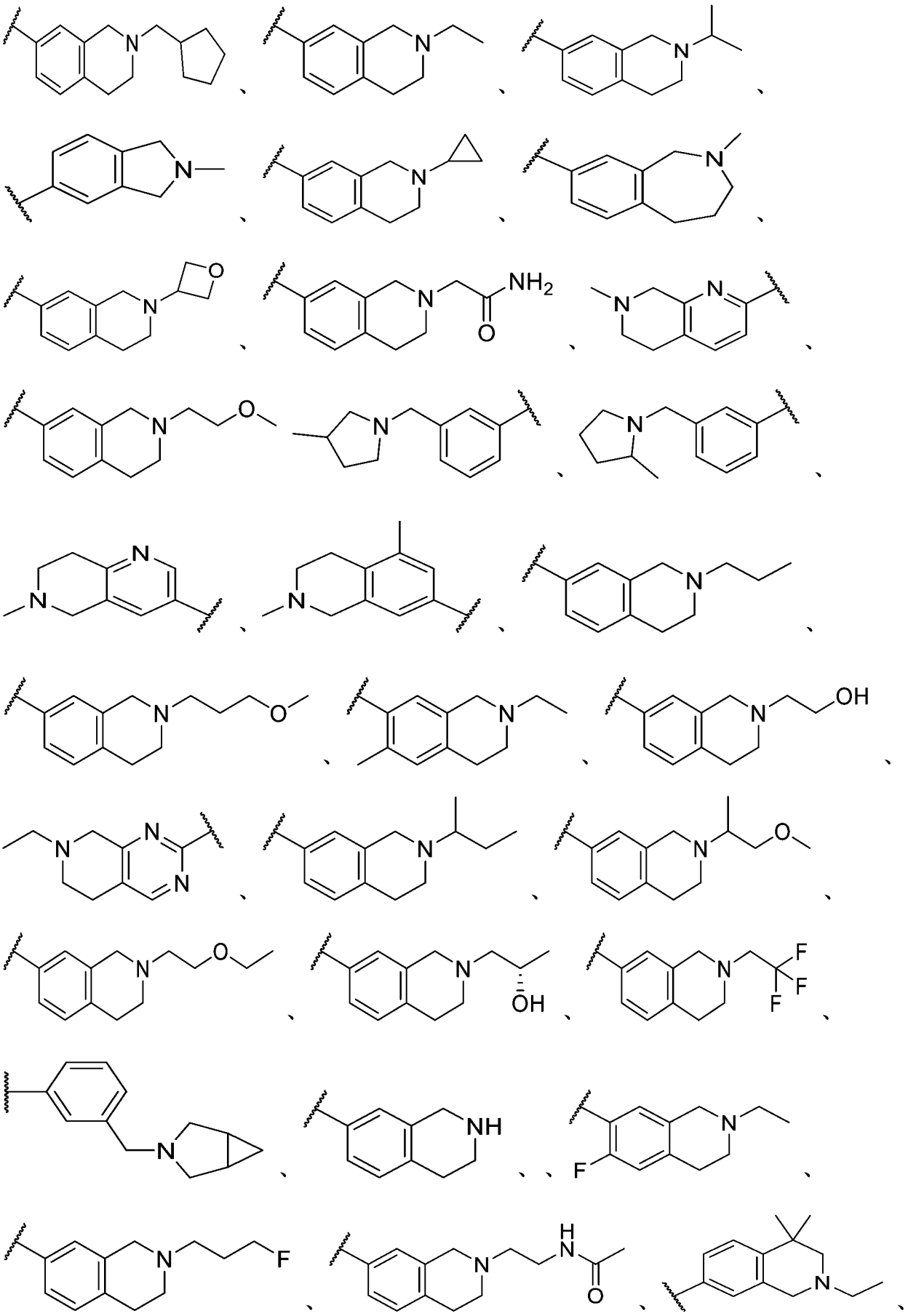


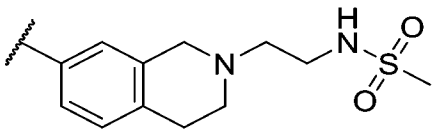
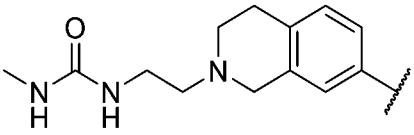
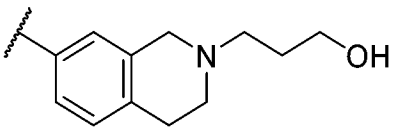
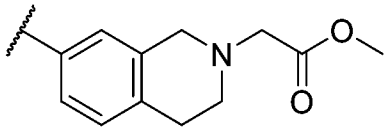
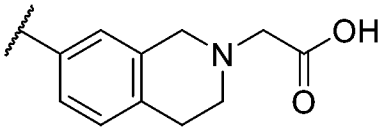
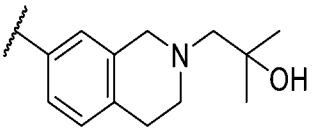
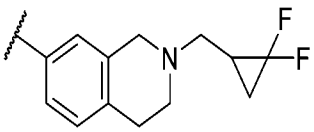
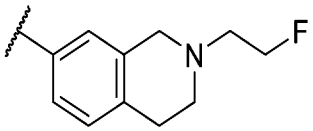
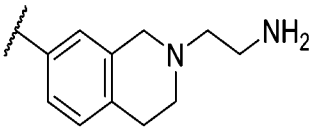
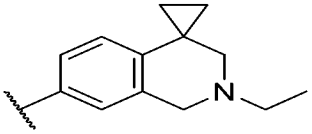
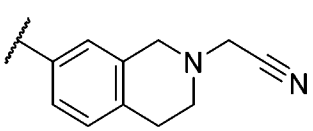
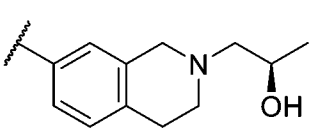
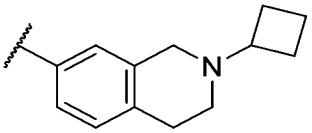
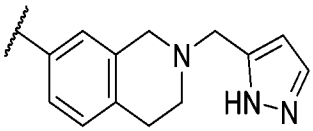
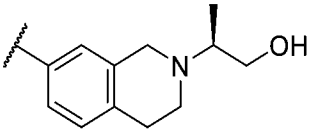
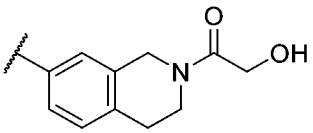
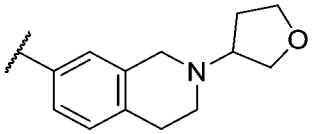
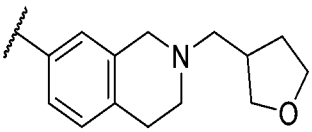
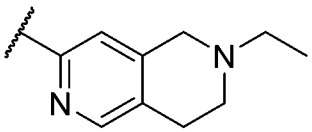
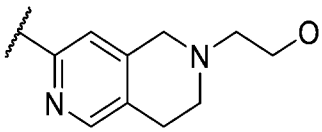
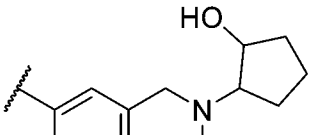
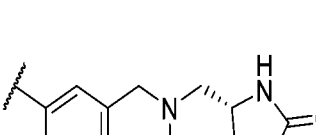
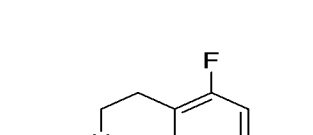
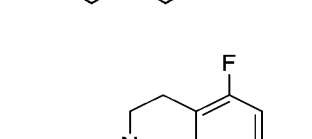
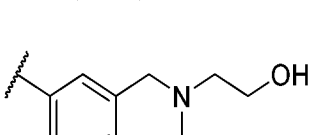
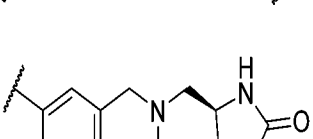
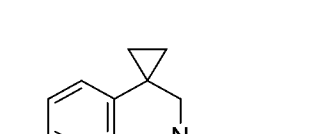
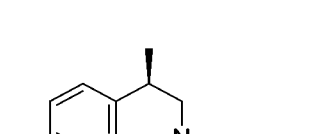
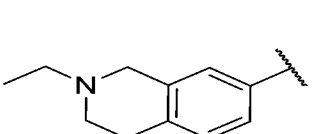



、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
及 
。

【0591】 R_1可選自：


、 
、 
、 
、 
、 
、

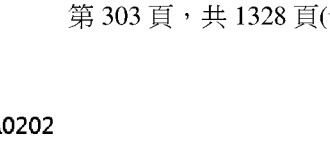
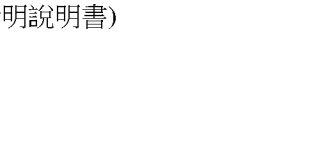


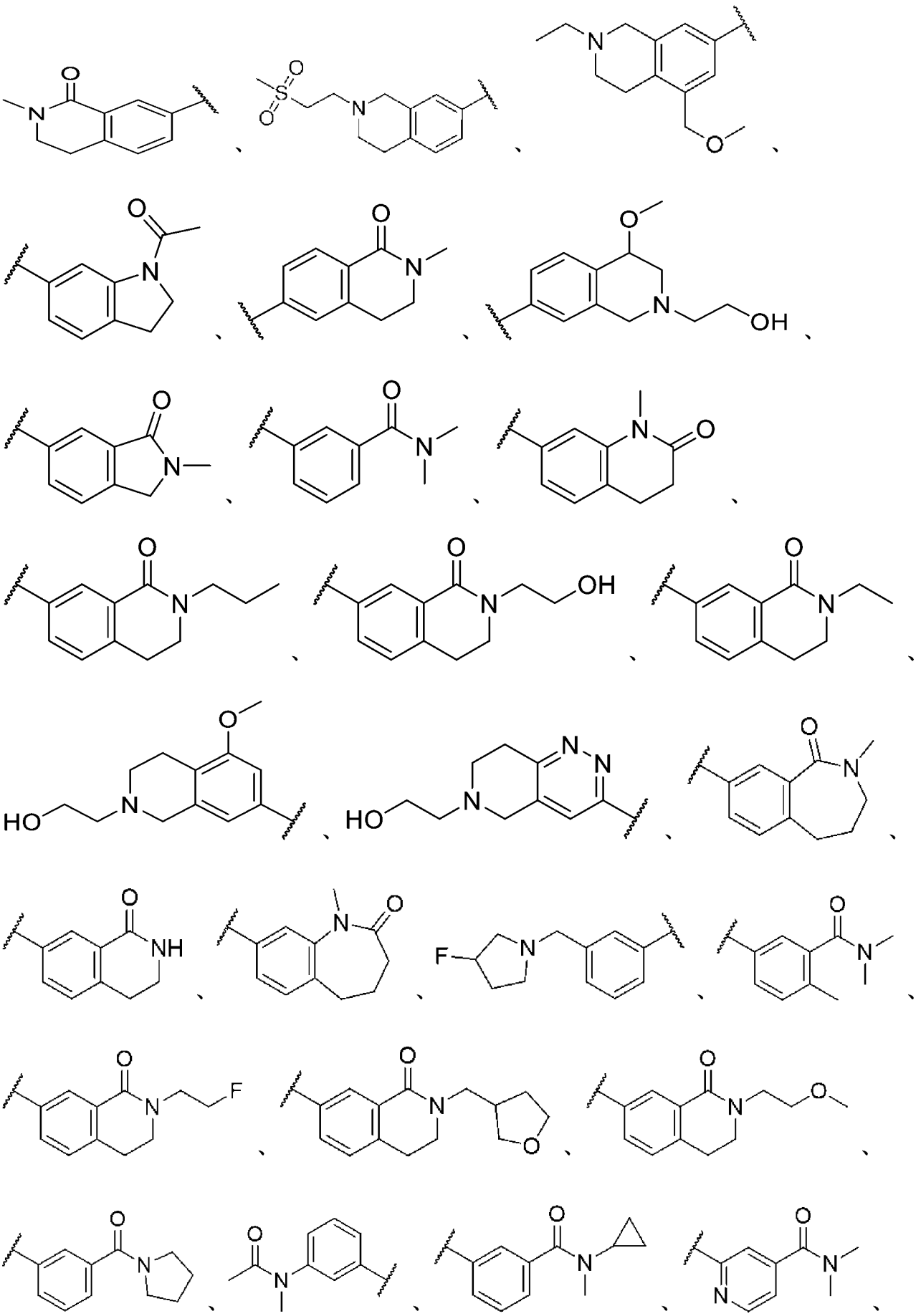

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

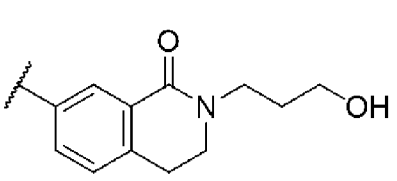
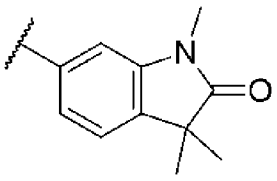
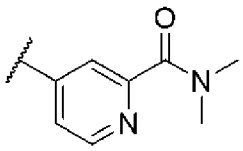
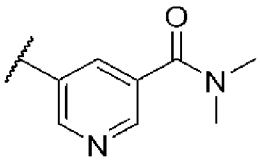
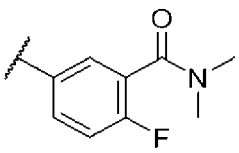
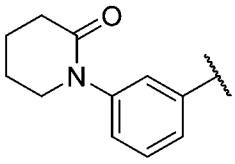
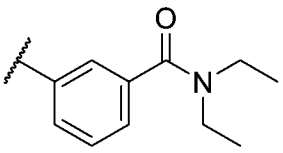
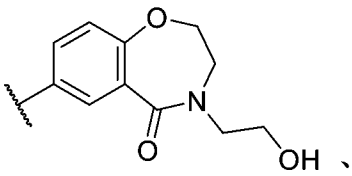
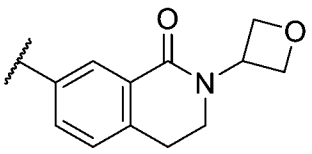
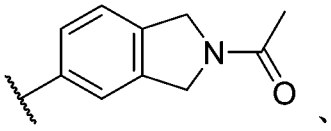
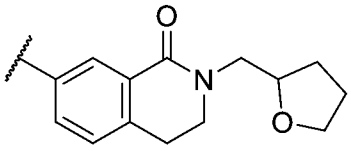
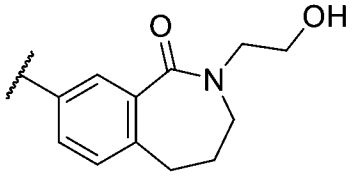
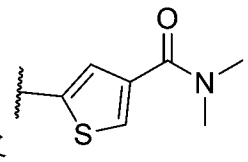
、

、

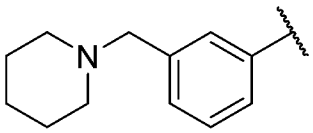
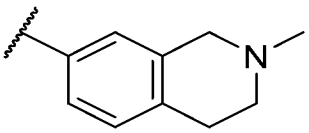
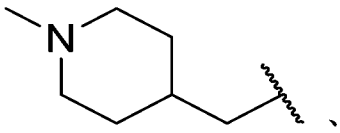
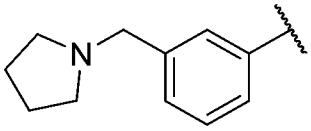
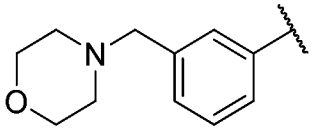
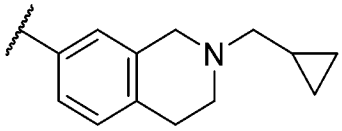
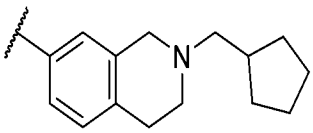
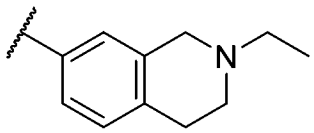
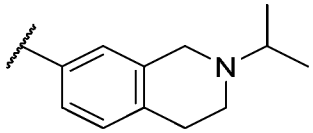
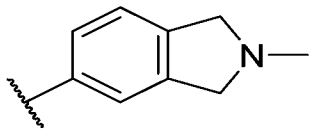
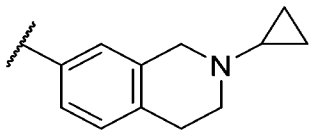
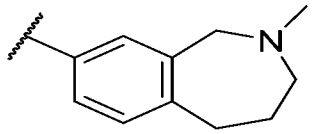
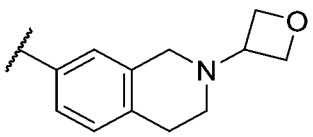
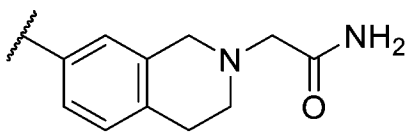
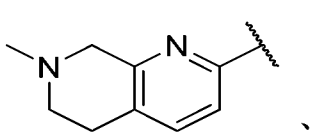
、

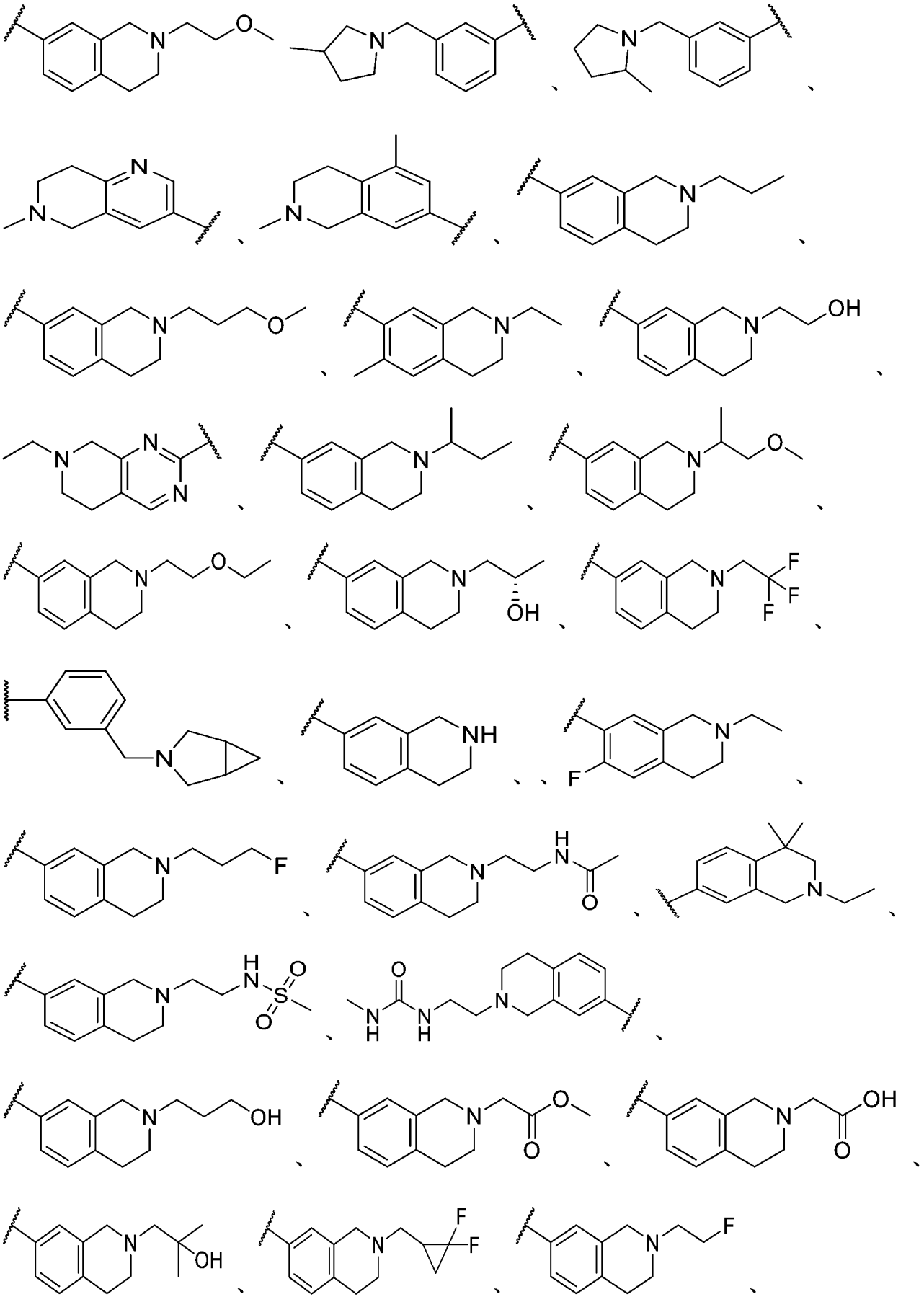
、

、

、

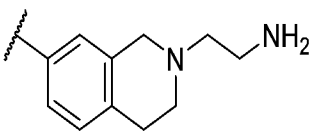
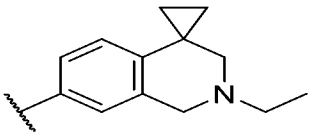
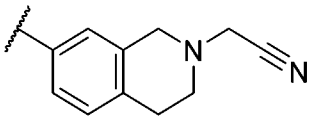
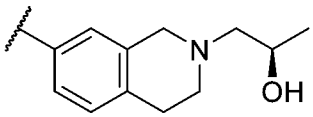
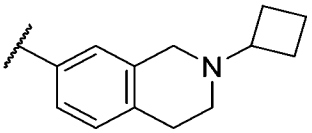
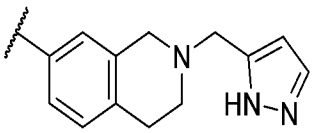
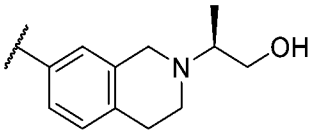
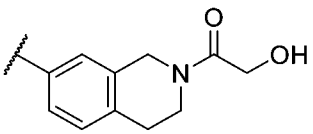
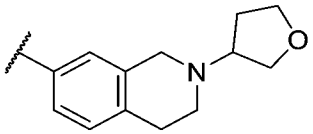
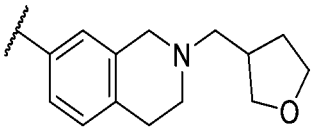
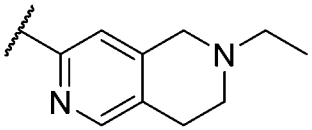
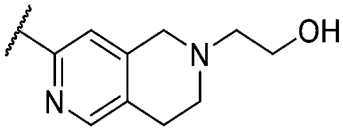
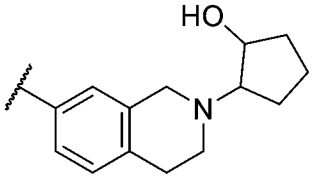
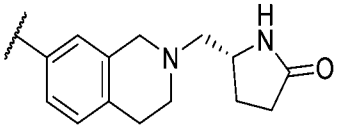
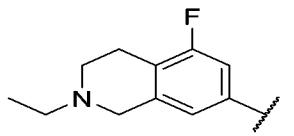
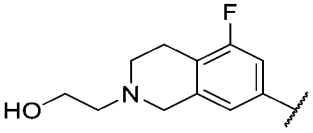
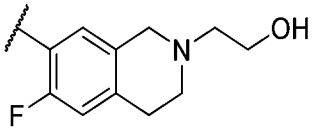
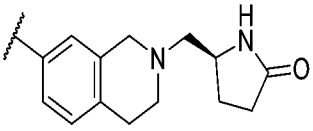
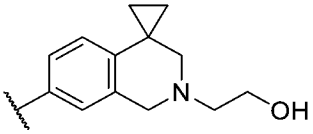
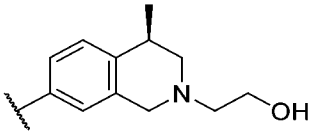
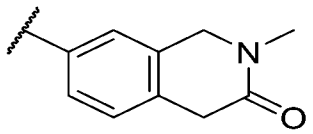
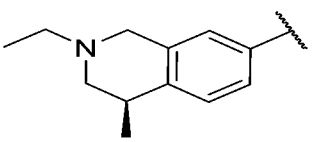
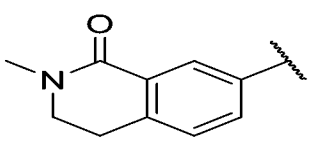
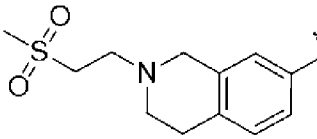
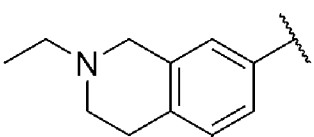
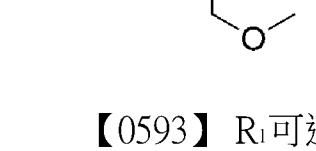



、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
及 
。

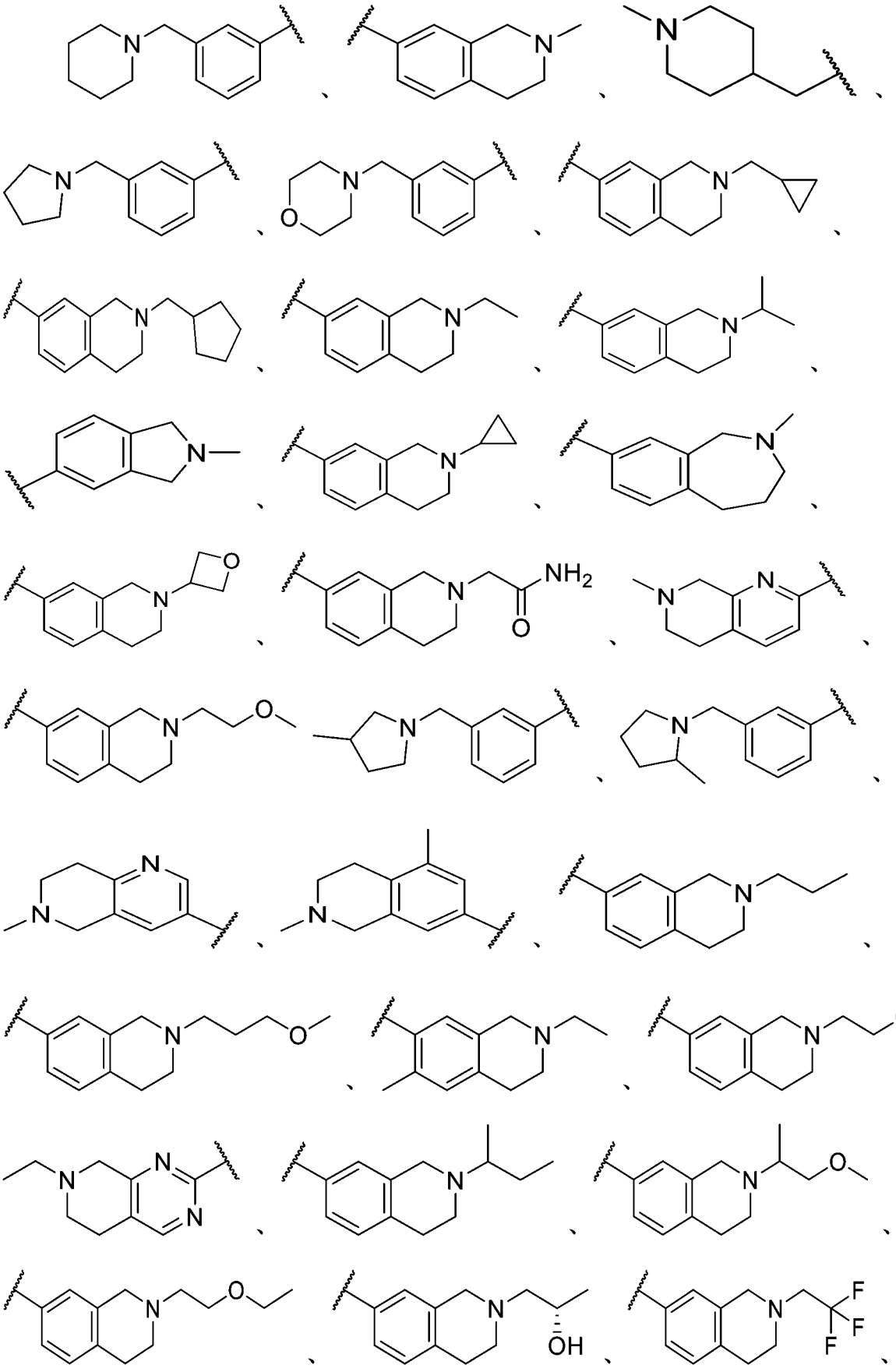
【0592】 R_1可選自：

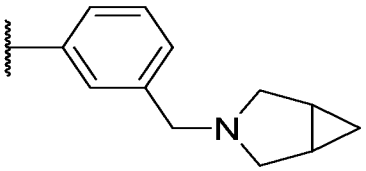
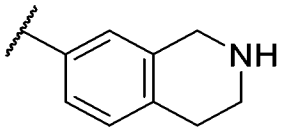
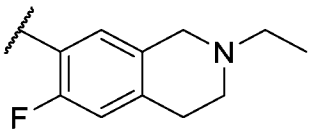
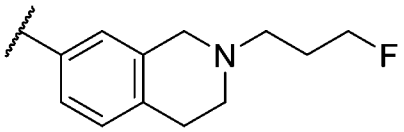
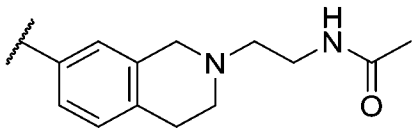
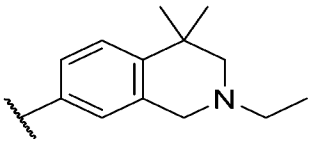
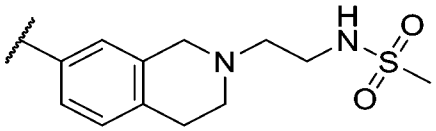
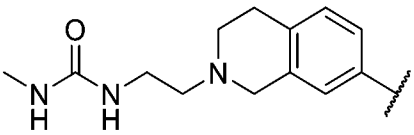
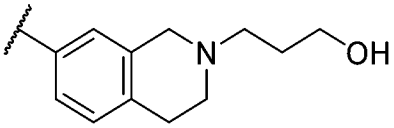
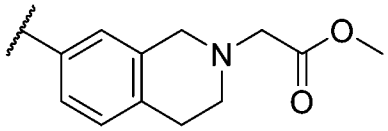
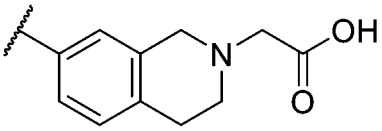
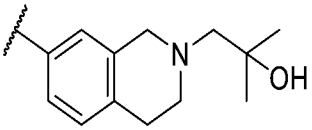
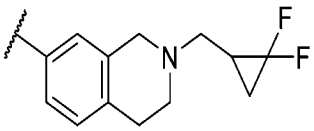
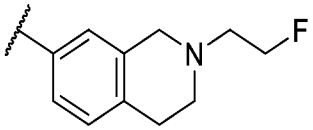
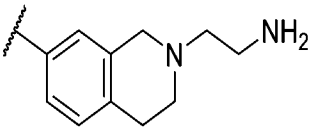
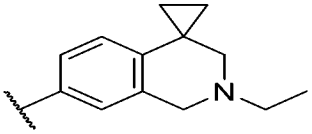
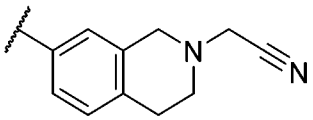
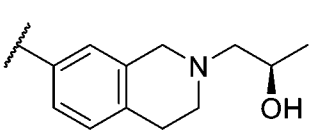
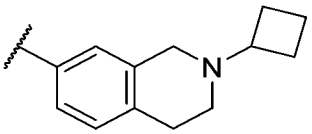
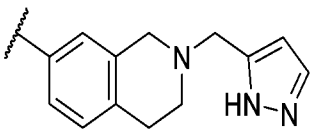
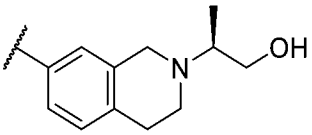
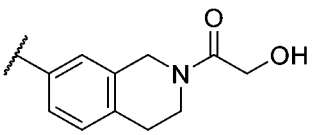
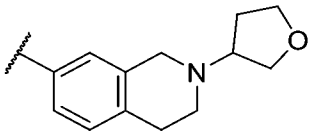
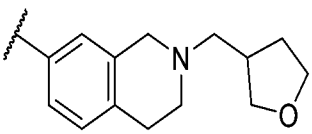
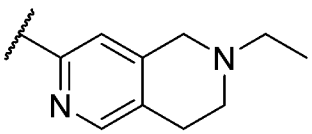
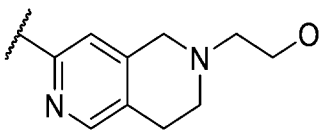
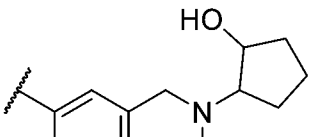
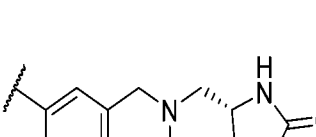
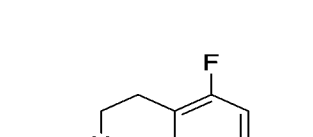
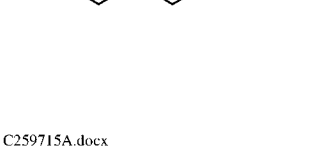

、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、



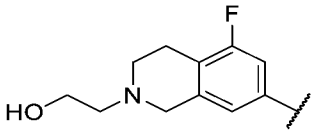
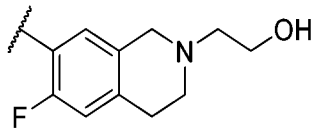
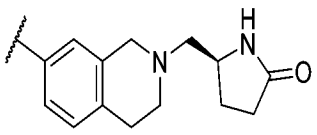
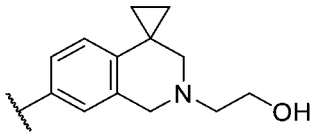
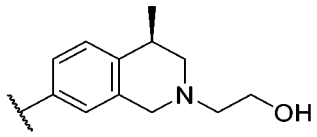
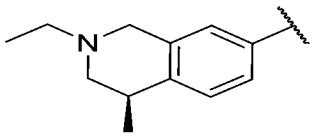
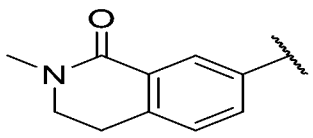
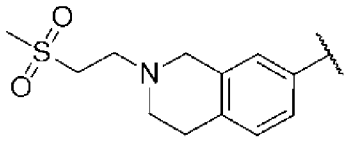
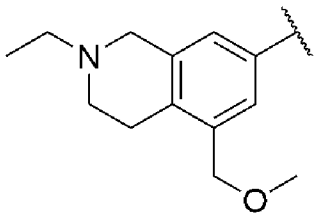

、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、
、
及 
。

【0593】 R_1可選自：

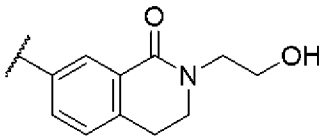
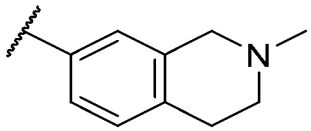
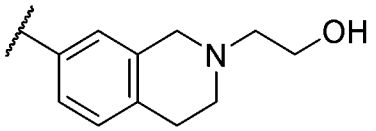
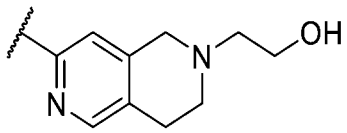
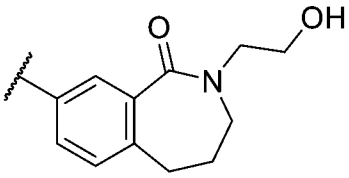
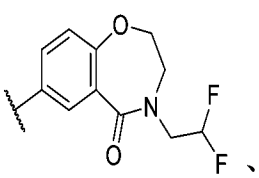
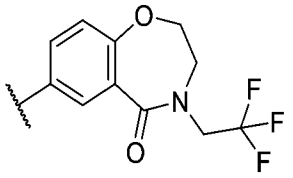
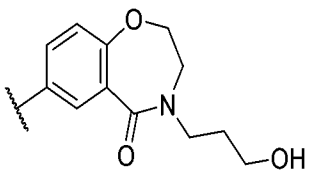
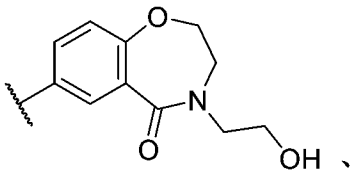
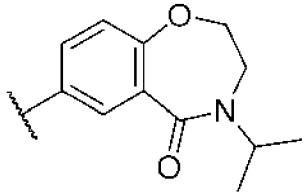
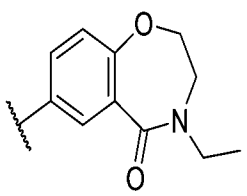
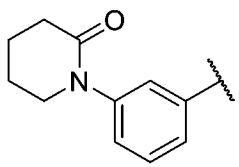
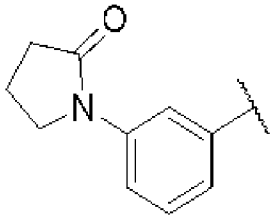
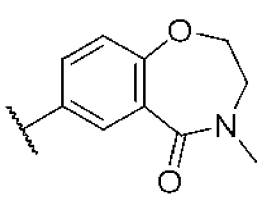
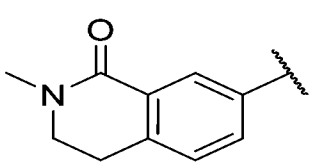
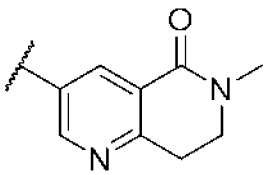
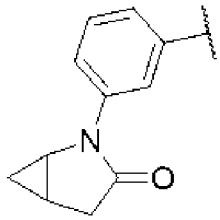


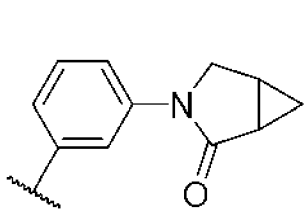
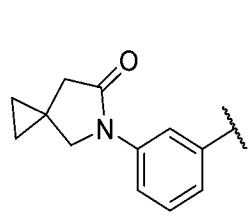
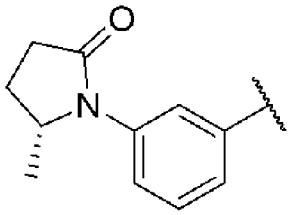
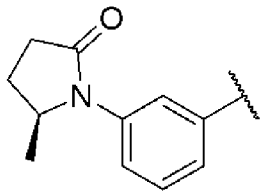
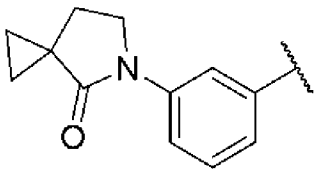
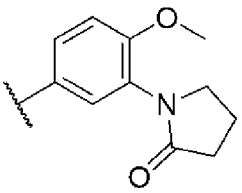
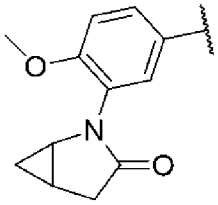
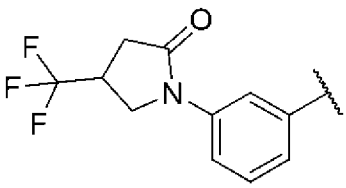
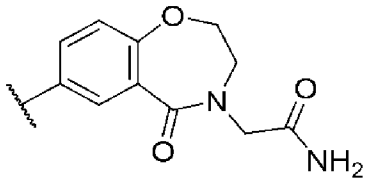
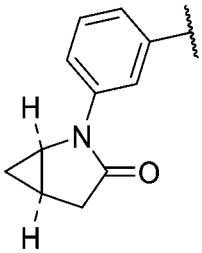
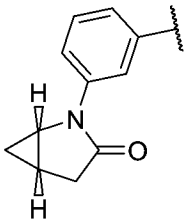
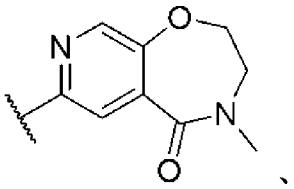
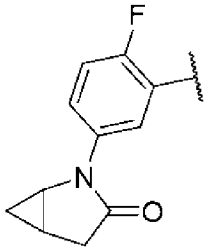
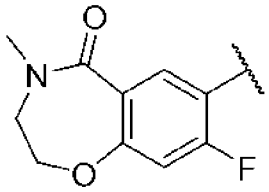
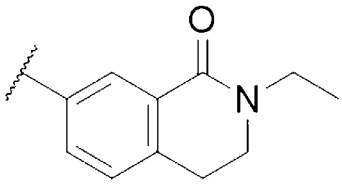
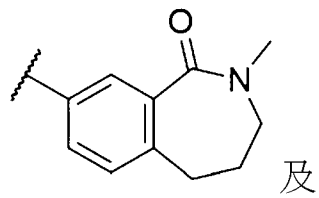
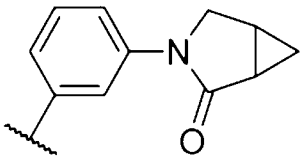

































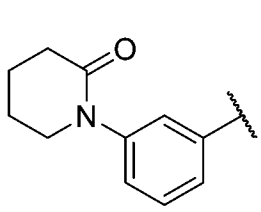
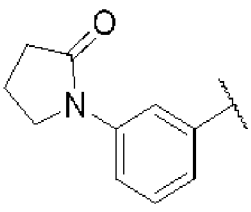
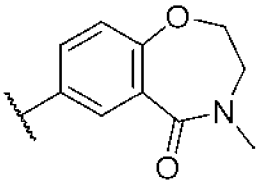
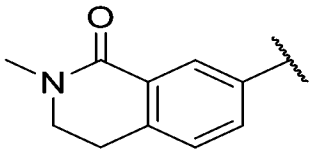
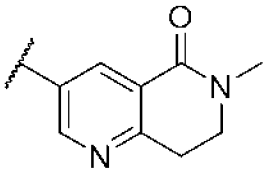
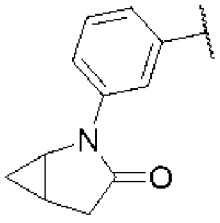
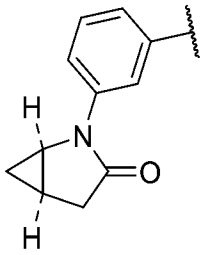
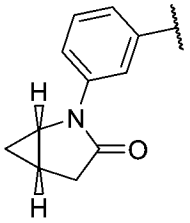
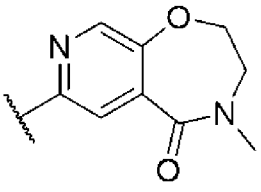
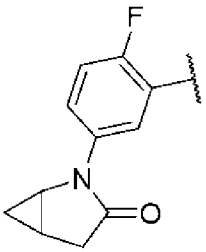
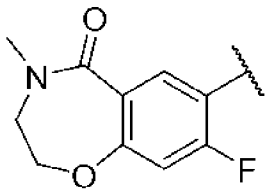
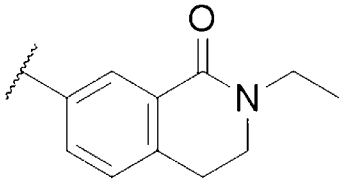
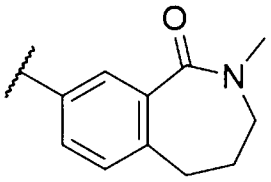
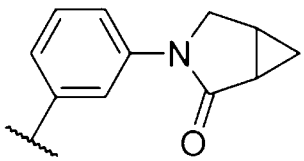

、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
及 
。

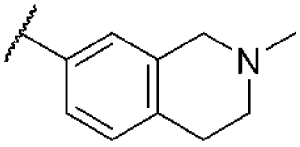
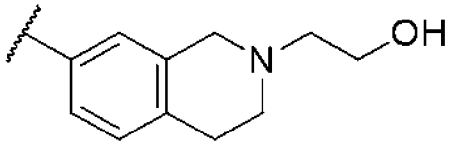
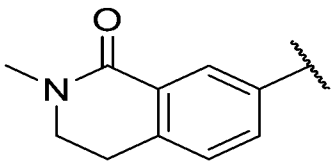
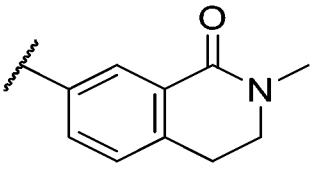
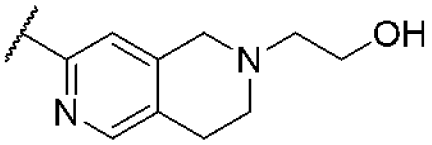
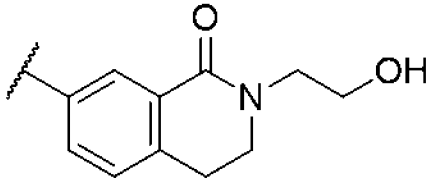
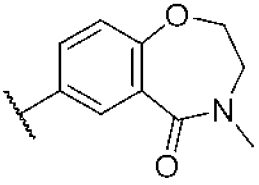
【0594】較佳地，R_1可選自：

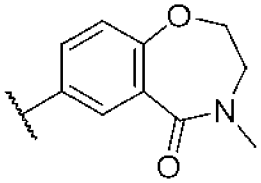
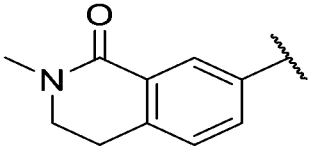

、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、

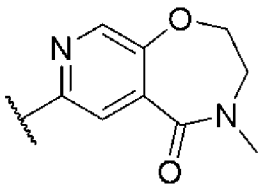
 、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  及  。

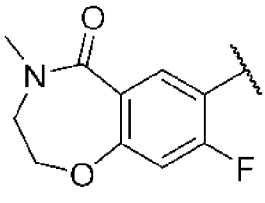
【0595】 更佳地，R_1可選自：

 、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  及  。

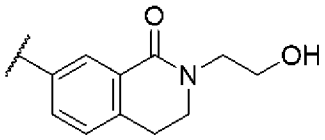
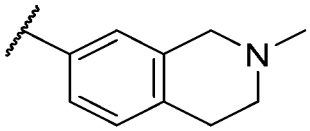
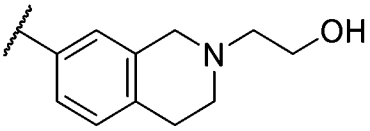
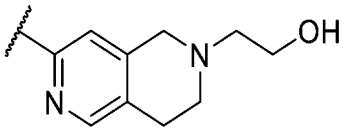
【0596】 R_1可選自  、  、  、  、  、  及  。

【0597】 最佳地，R_1可選自  及  。

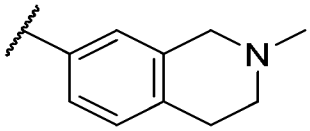
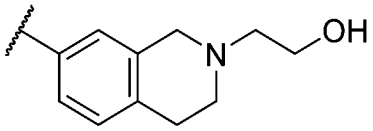
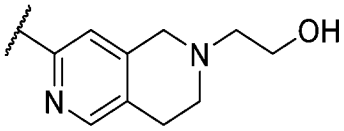
【0598】 R_1可為  。

【0599】 R_1可為  。

【0600】 R_1可選自：

 、  、  及  。

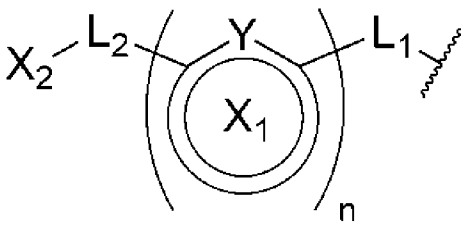
【0601】 R_1可選自：

 、  及  。

【0602】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

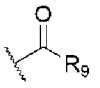
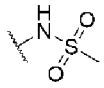
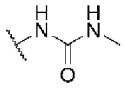
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

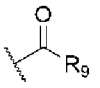
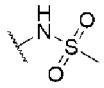
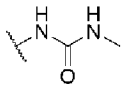
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

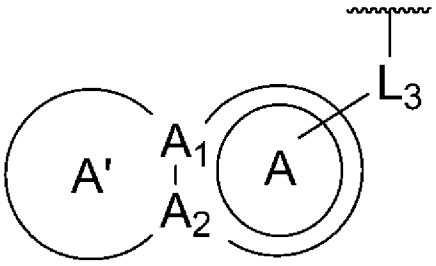
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

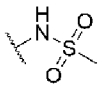
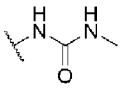
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

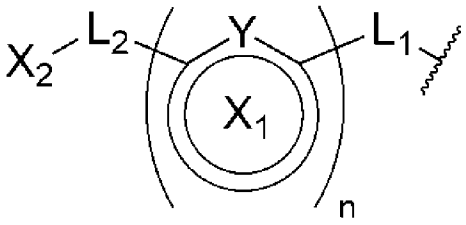
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0603】 B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

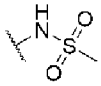
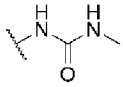
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

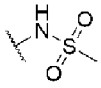
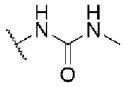
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

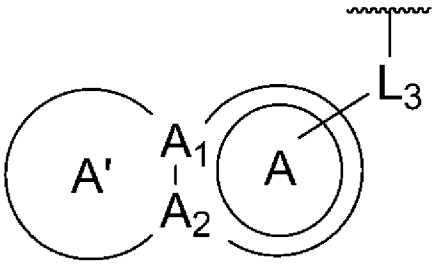
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

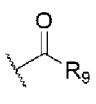
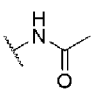
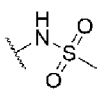
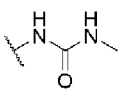
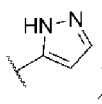
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

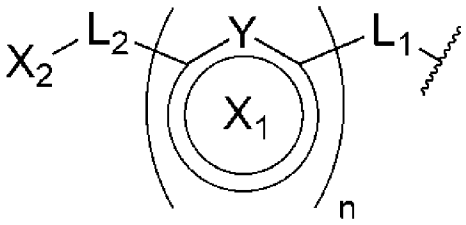
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0604】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

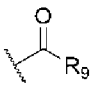
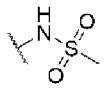
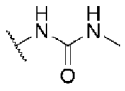
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

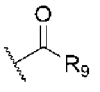
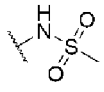
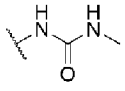
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

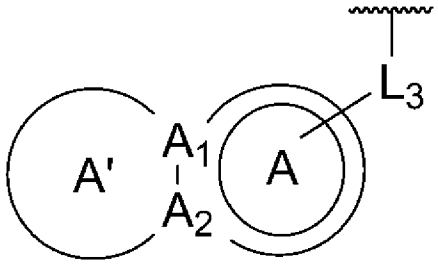
其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽

和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

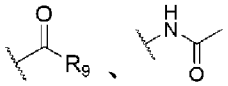
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

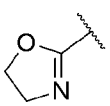
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

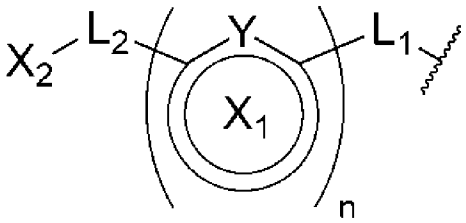
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0605】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_2可選自-C(=O)-$N(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-$S(=O)_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

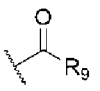
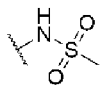
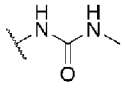
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

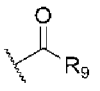
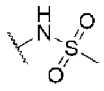
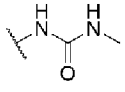
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

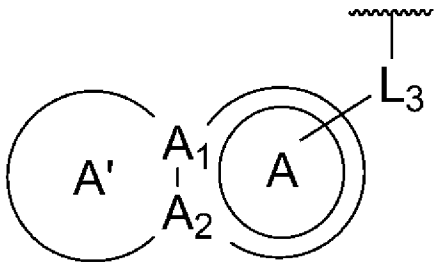
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

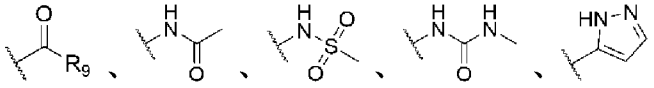
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

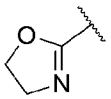
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

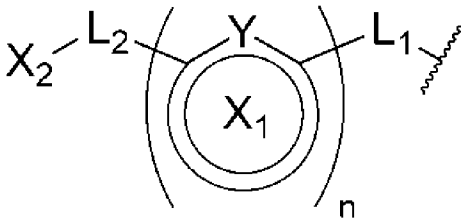
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0606】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  ；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

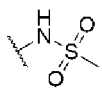
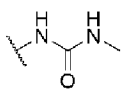
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

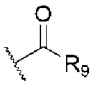
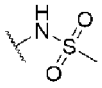
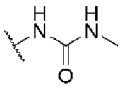
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

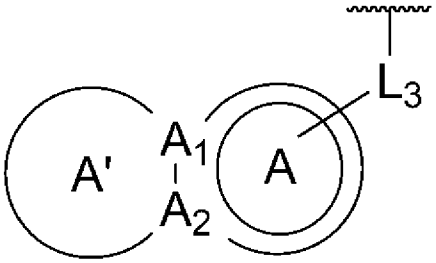
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

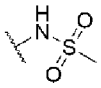
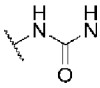
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

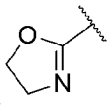
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

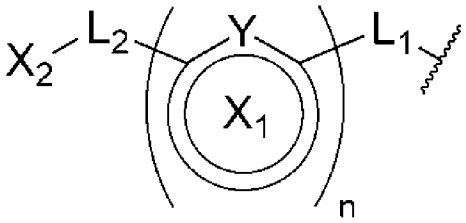
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0607】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由

雙鍵與B_2連接；B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-NH-S(=O)_2R_{35}$、$-CH_2-NH-C(=O)CH_3$、$-CH_2-O-R_{16}$、$-CH_2-OH$、-CN及  ；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及$-(CH_2)_{1-3}-$之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

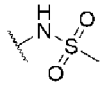
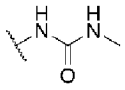
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$及$-C(=O)-$之連接基；且

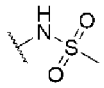
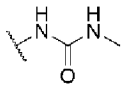
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

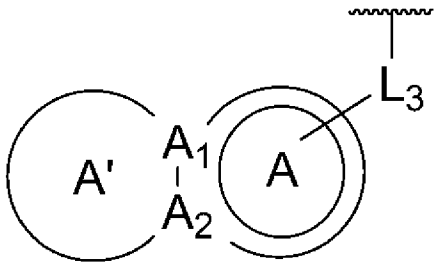
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

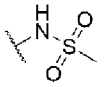
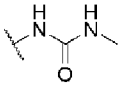
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

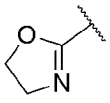
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

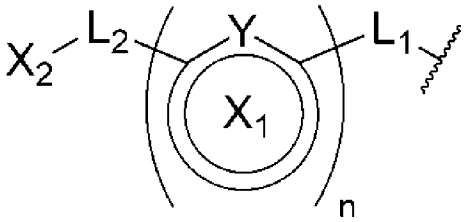
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0608】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

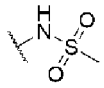
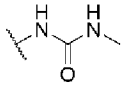
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

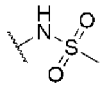
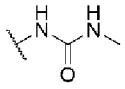
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

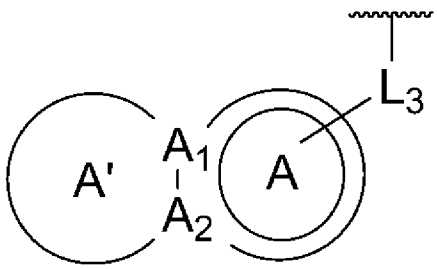
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

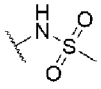
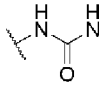
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

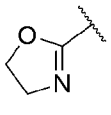
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0609】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[b]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

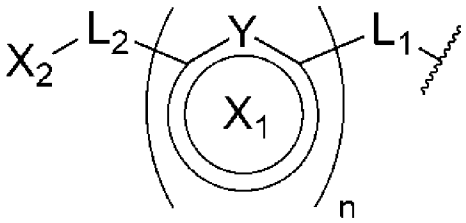
R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

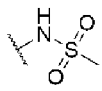
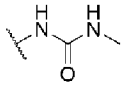
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

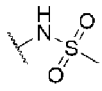
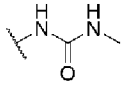
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

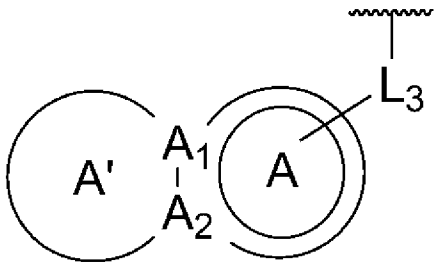
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

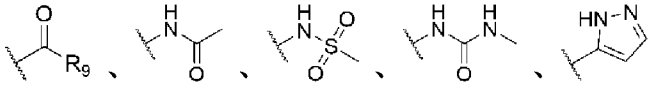
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

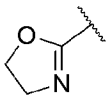
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0610】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

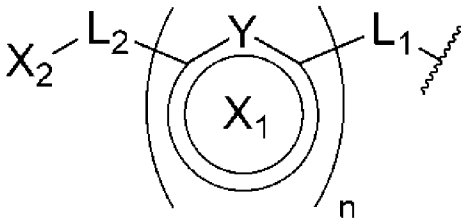
R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

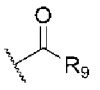
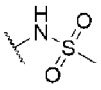
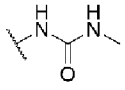
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$及-C(=O)-之連接基；且

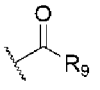
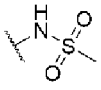
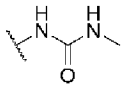
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

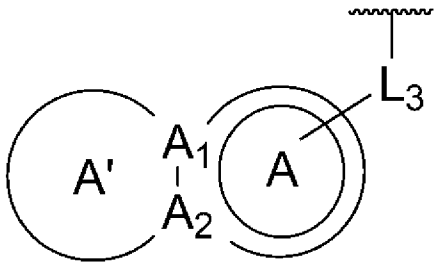
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

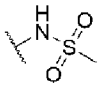
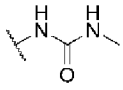
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

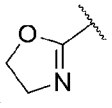
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0611】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-NH-C(=O)$CH_3$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[b]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

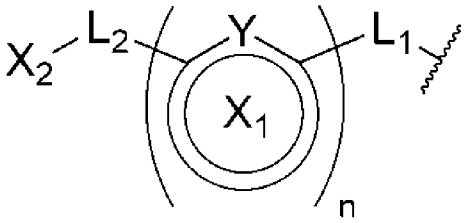
R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

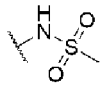
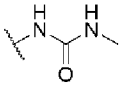
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

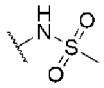
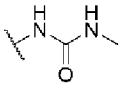
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

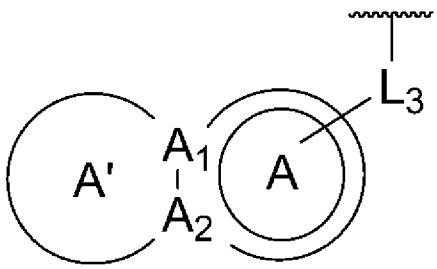
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

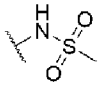
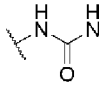
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

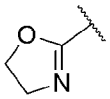
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0612】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-NH-C(=O)$CH_3$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[b]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

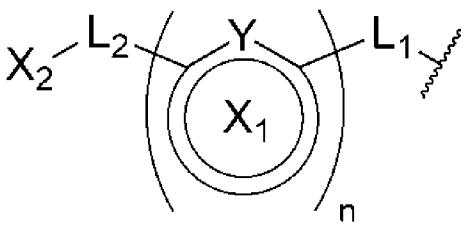
R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

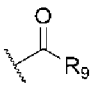
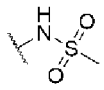
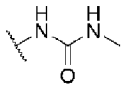
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

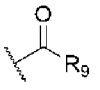
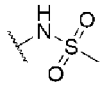
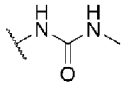
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

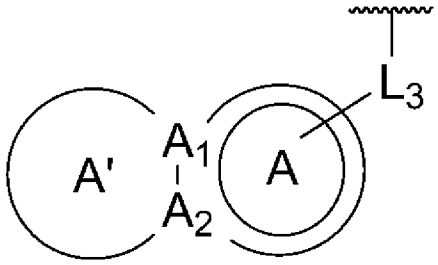
其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽

和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

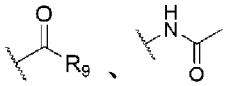
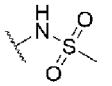
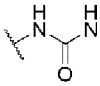
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

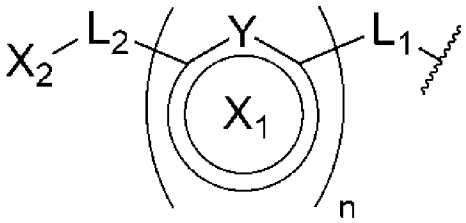
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接。

【0613】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

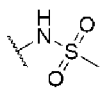
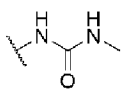
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

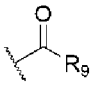
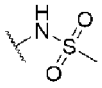
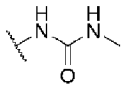
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

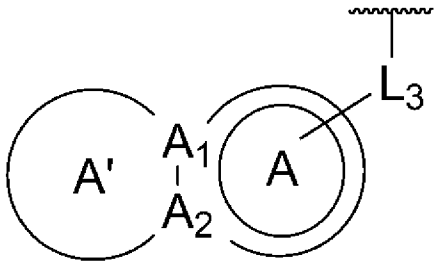
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

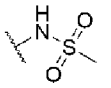
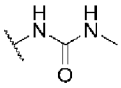
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

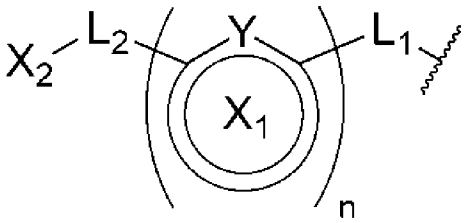
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0614】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

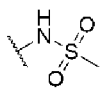
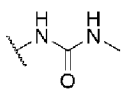
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

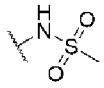
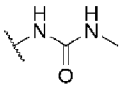
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

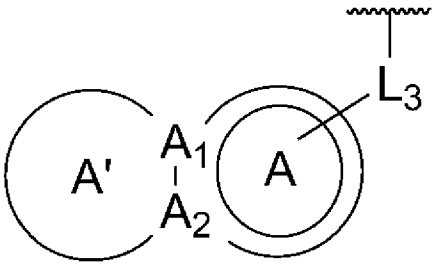
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

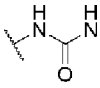
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

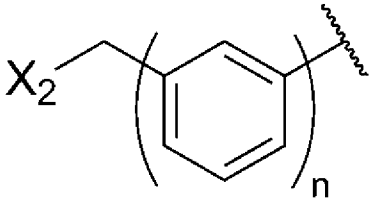
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0615】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；且

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

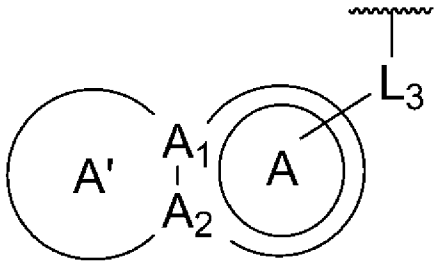
n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

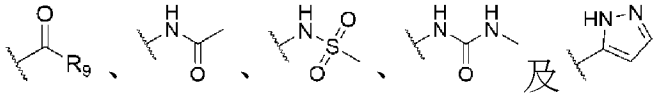
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

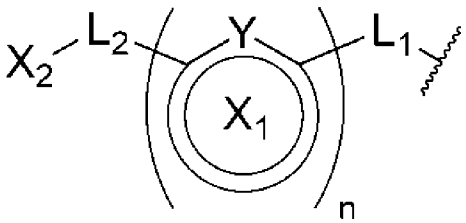
其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0616】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

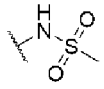
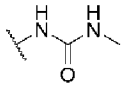
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及$-SO_2-$之連接基；且

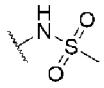
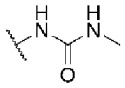
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

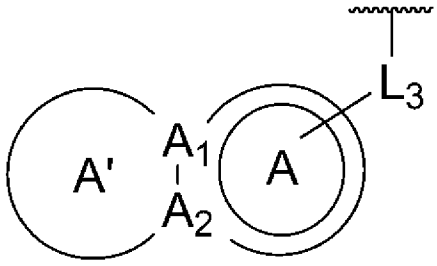
其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一

步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

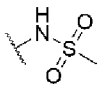
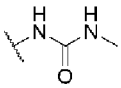
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

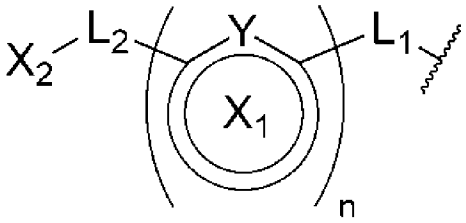
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0617】 B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

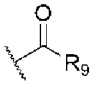
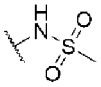
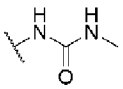
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

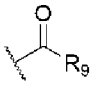
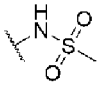
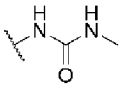
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

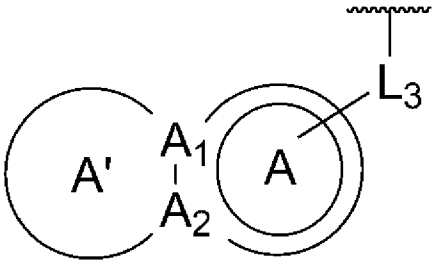
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

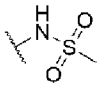
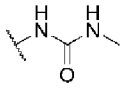
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

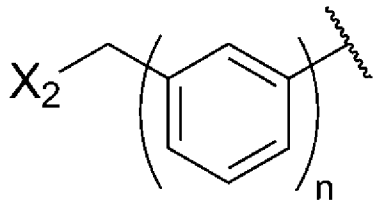
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及

R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0618】 B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

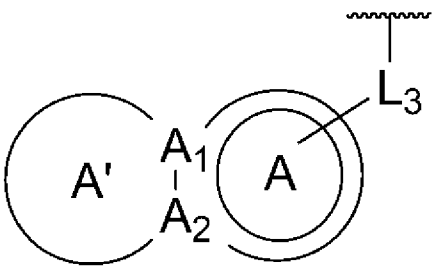
n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

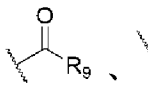
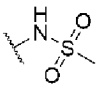
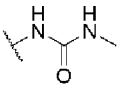
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

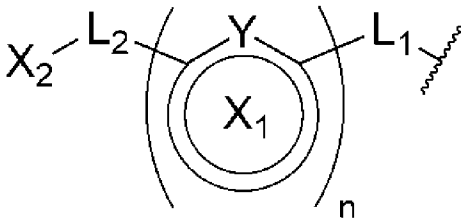
或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0619】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5

連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

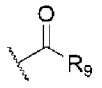
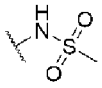
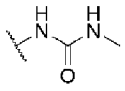
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及$-SO_2-$之連接基；且

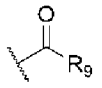
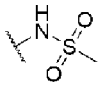
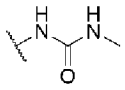
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

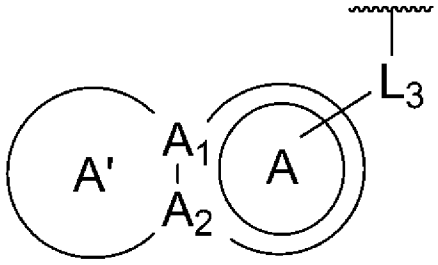
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

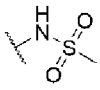
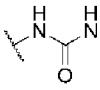
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

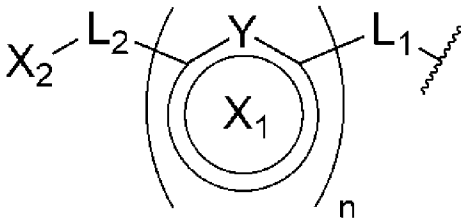
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0620】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5

連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

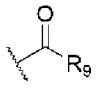
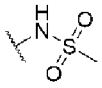
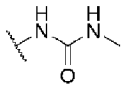
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及$-SO_2-$之連接基；且

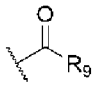
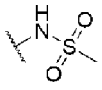
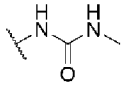
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

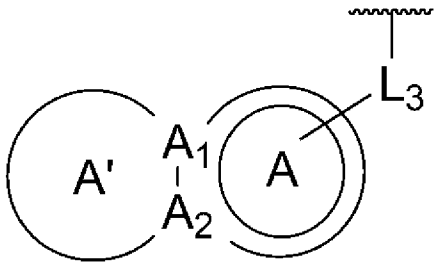
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

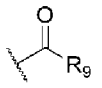
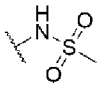
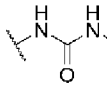
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

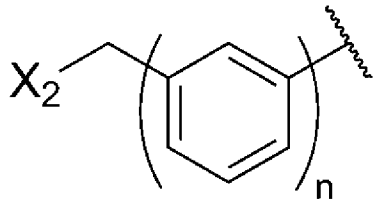
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0621】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，且B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

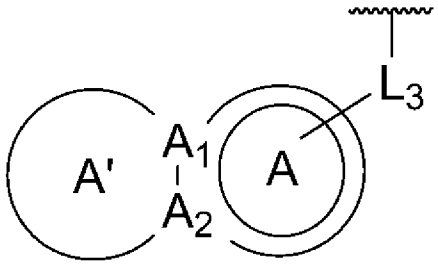
n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

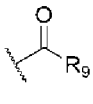
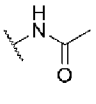
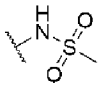
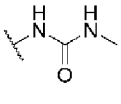
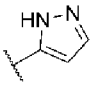
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

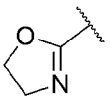
其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

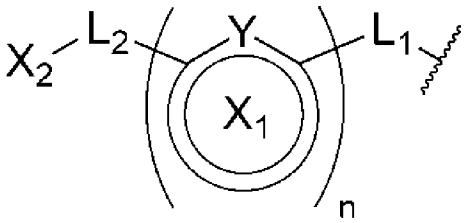
或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0622】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、

-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O- R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

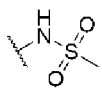
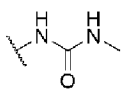
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

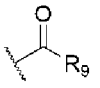
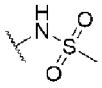
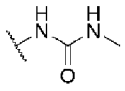
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

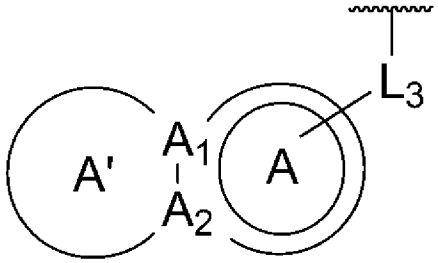
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

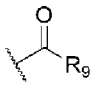
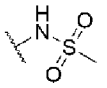
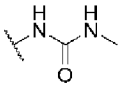
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

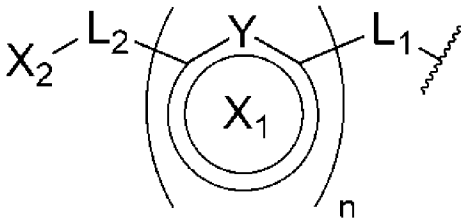
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0623】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

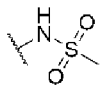
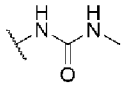
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

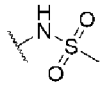
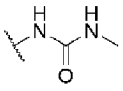
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

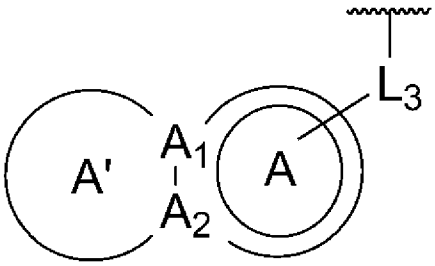
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

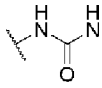
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

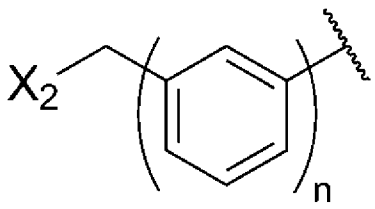
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0624】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；且

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

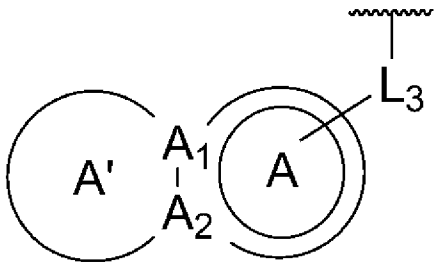
n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

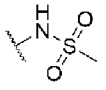
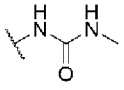
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

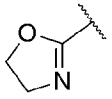
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

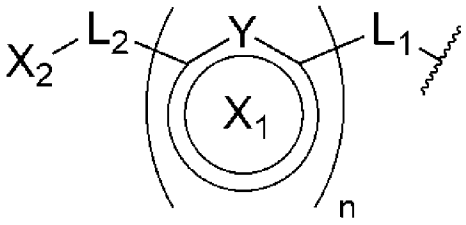
其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0625】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

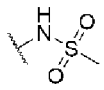
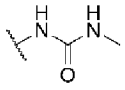
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

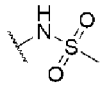
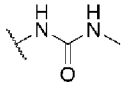
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

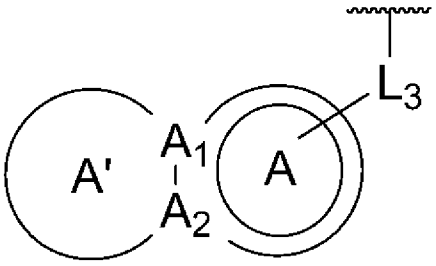
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

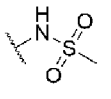
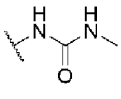
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

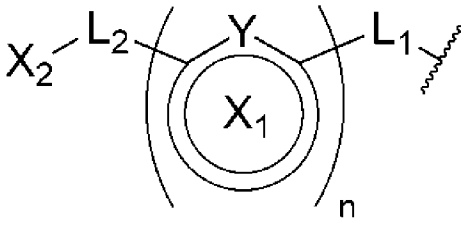
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0626】 B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-$N(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-$S(=O)_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

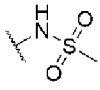
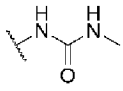
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

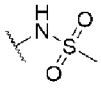
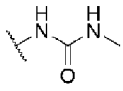
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

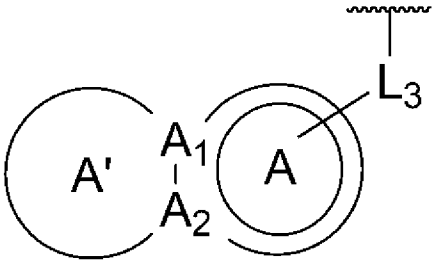
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

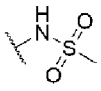
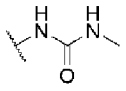
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

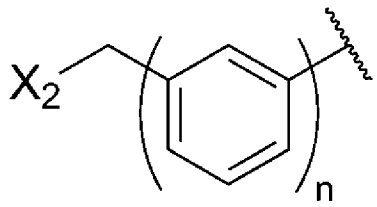
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0627】 B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-O-CH_3$及-CN；且

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

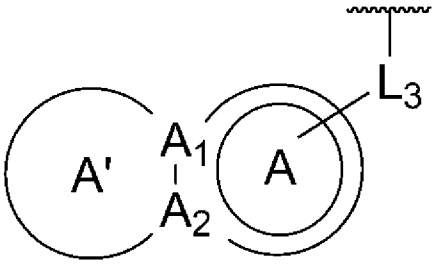
n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

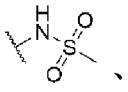
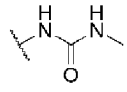
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

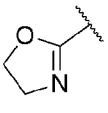
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

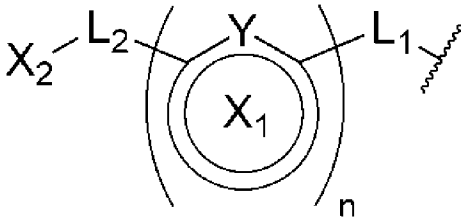
其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0628】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

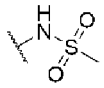
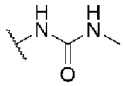
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

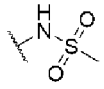
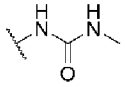
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

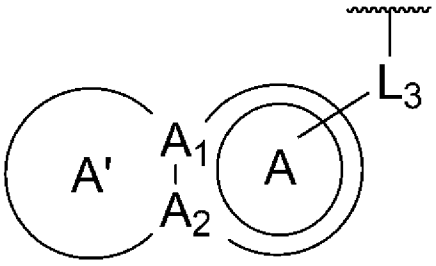
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

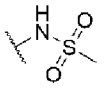
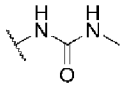
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

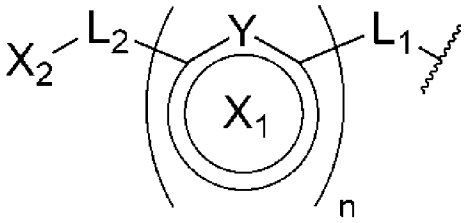
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0629】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-(CH_2)$_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

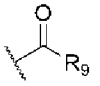
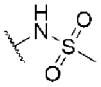
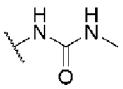
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

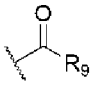
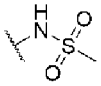
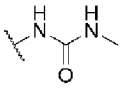
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

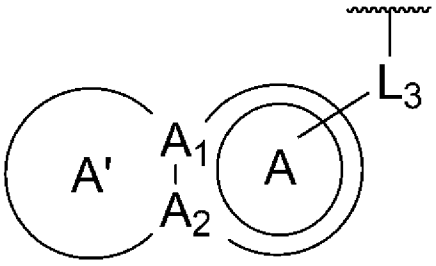
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

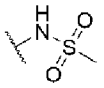
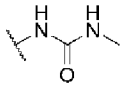
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

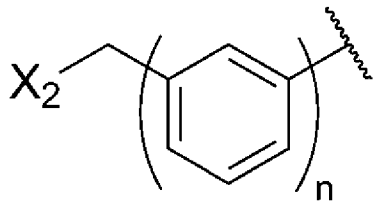
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及

R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0630】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；且

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

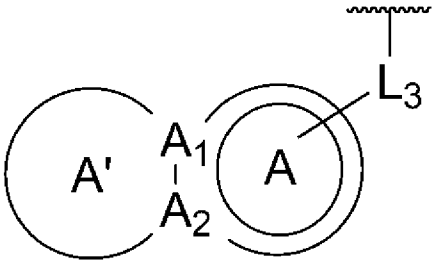
n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

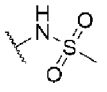
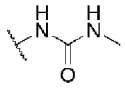
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

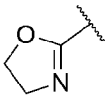
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

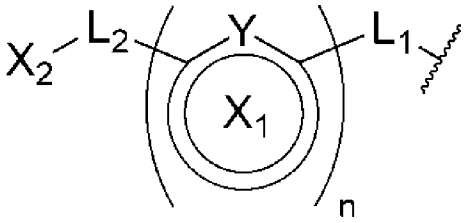
其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0631】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-(CH_2)$_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

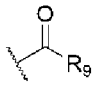
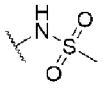
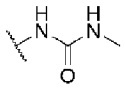
L_2為選自單鍵、-(CH_2)$_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

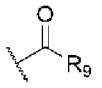
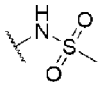
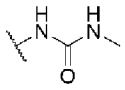
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-(CH_2)$_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-(CH_2)$_{0-3}$-R_{23}；

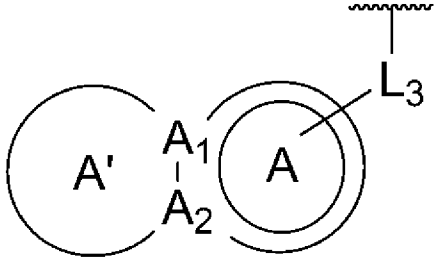
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

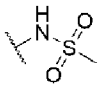
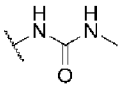
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

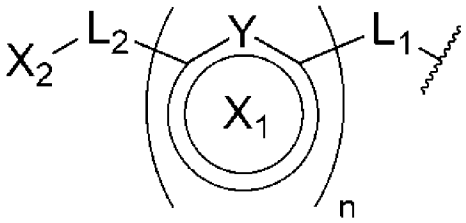
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0632】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

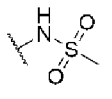
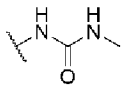
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

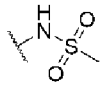
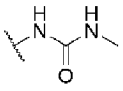
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

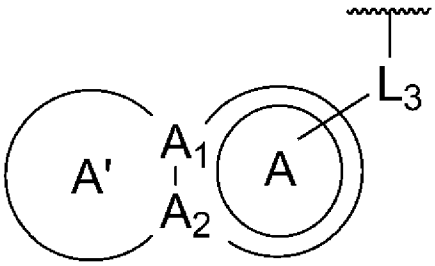
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

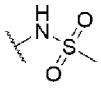
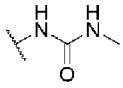
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

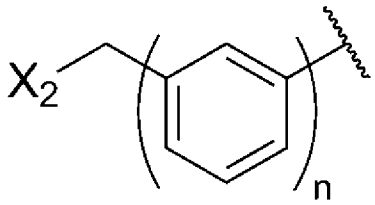
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；且

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

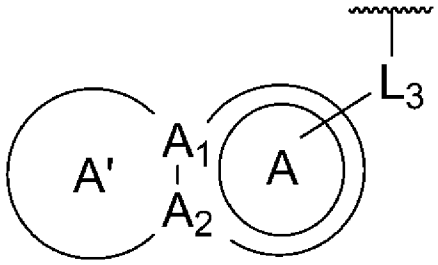
n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

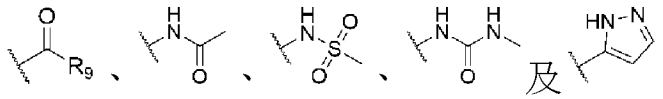
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

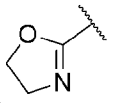
其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  及；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0633】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

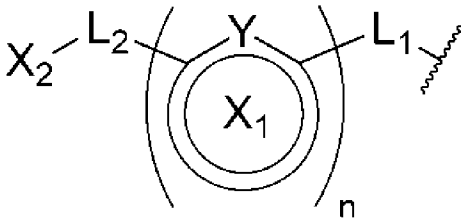
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[a]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

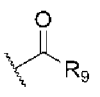
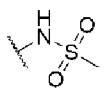
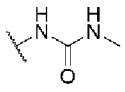
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

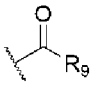
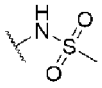
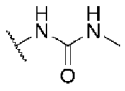
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

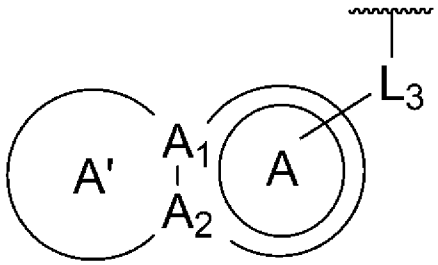
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

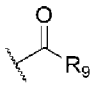
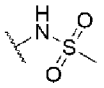
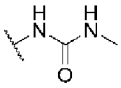
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0634】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

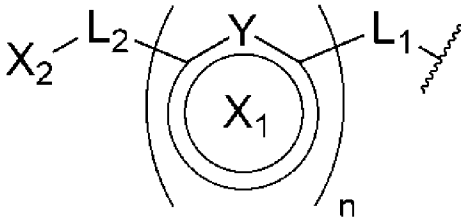
R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

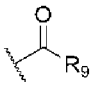
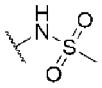
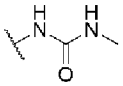
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

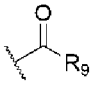
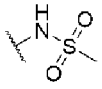
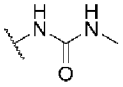
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

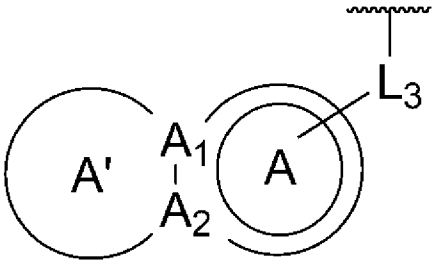
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

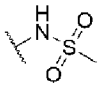
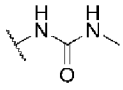
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及

R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0635】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

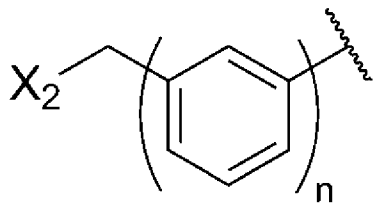
R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

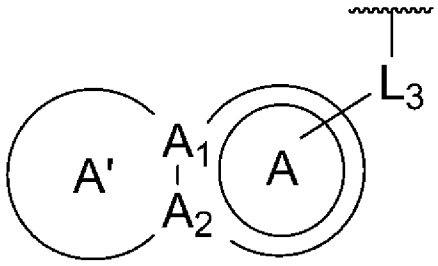
n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

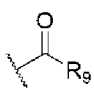
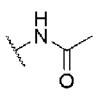
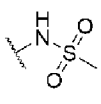
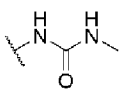
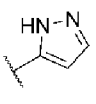
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

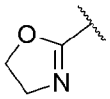
其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0636】 B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、

-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

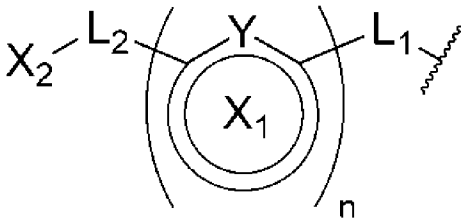
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

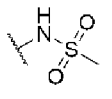
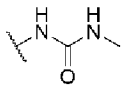
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

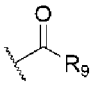
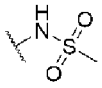
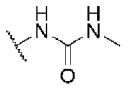
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

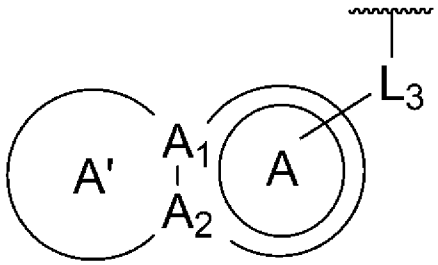
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

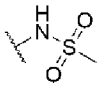
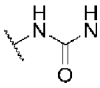
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0637】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

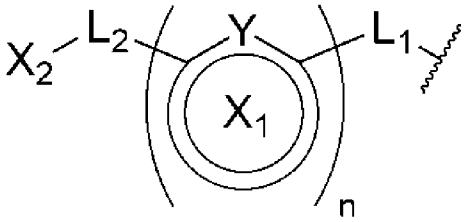
R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

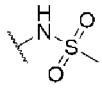
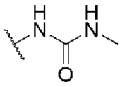
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

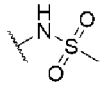
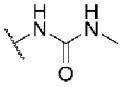
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

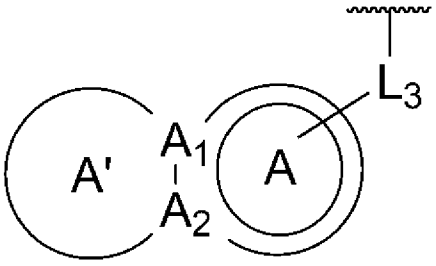
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

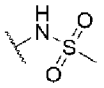
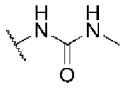
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及

R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0638】 B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2可選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-O-CH_3$及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

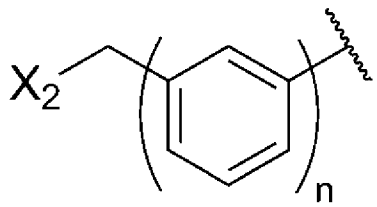
R_5選自烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及$-(CH_2)$-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

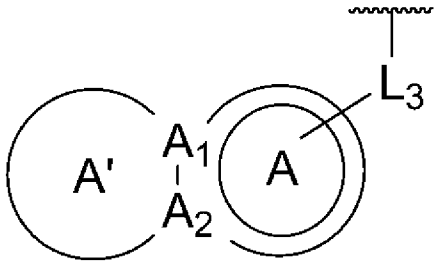
n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

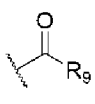
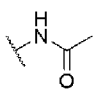
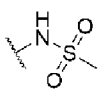
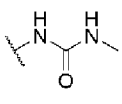
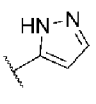
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

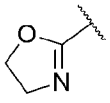
其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0639】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

R_2可選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-NH-C(=O)CH_3$、

$-CH_2-NH-S(=O)_2$(環丙基)、$-CH_2-O-R_{16}$、$-CH_2-OH$及-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

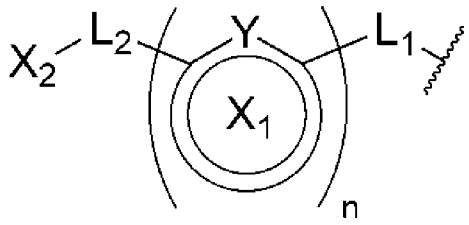
R_5選自烷基、OH、$-S(=O)_2$-(小烷基)、$-(CH_2)_{1-3}-(C=O)-OH$、$-(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、$-(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及$-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}$；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-(CH_2)$_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

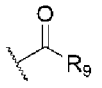
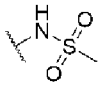
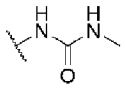
L_2為選自單鍵、-(CH_2)$_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

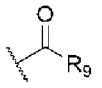
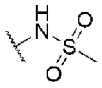
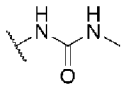
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-(CH_2)$_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-(CH_2)$_{0-3}$-R_{23}；

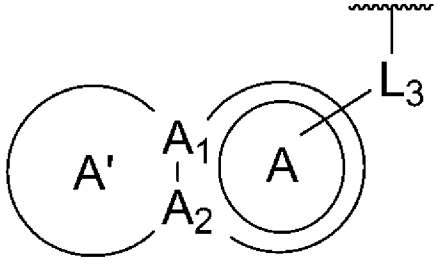
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

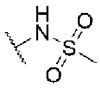
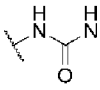
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0640】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連

接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

R_2可選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-NH-S(=O)_2$(環丙基)、$-CH_2-O-CH_3$、$-CH_2-OH$及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

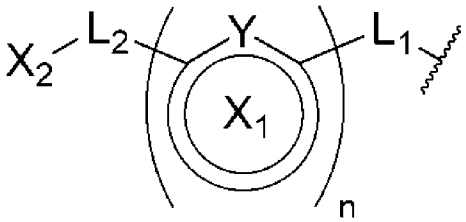
R_5選自烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及$-(CH_2)$-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

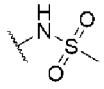
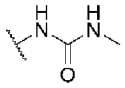
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

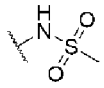
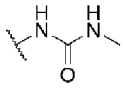
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

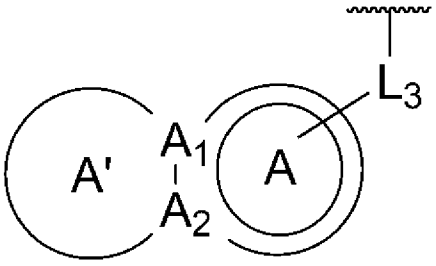
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

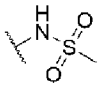
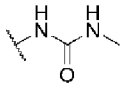
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及

R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0641】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2可選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-O-CH_3$及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

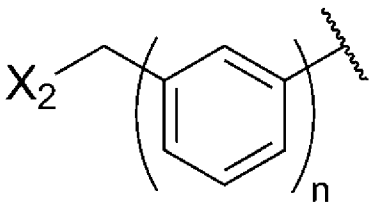
R_5選自烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及$-(CH_2)$-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

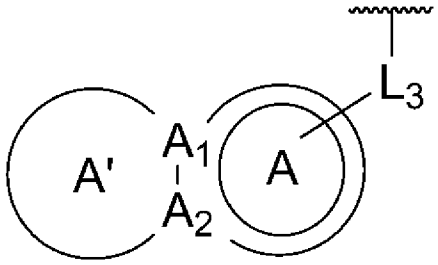
n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

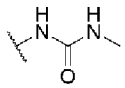
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

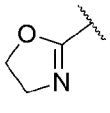
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0642】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

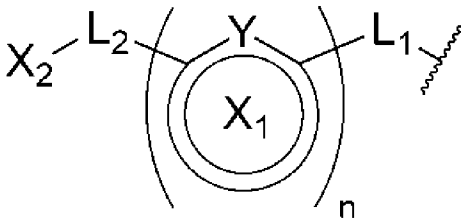
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[a]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

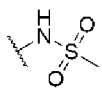
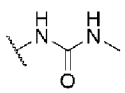
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

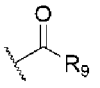
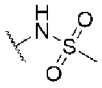
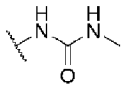
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

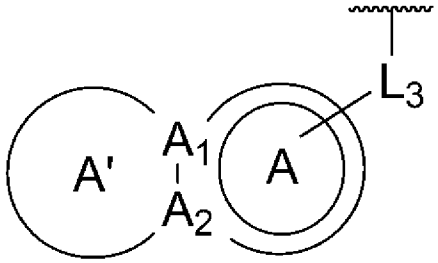
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

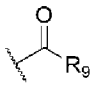
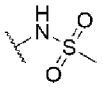
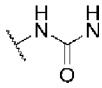
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0643】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、

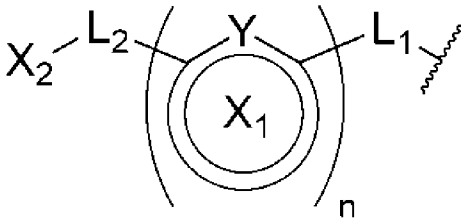
-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

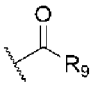
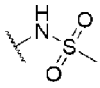
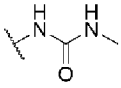
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

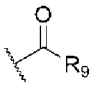
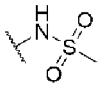
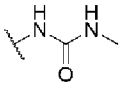
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

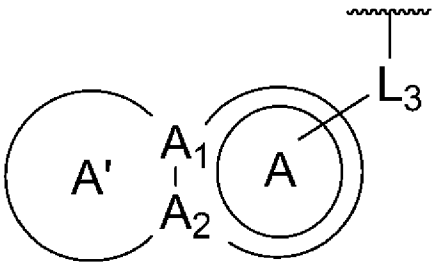
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

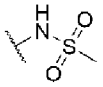
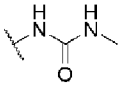
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0644】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

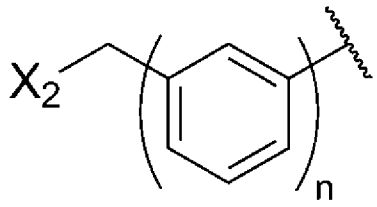
R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

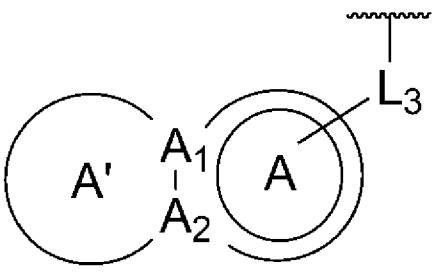
n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

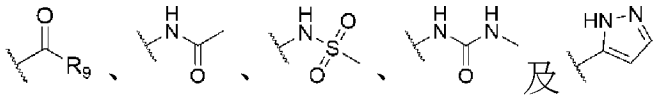
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【0645】 如上所述，R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1、2或3個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙

基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代。

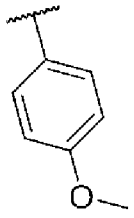
【0646】 R_3可為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代。

【0647】 R_3可為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代。

【0648】 R_3可選自經取代之苯基、經取代之吡啶基及經取代之噻吩。

【0649】 R_3可為經取代之苯基或經取代之吡啶基。

【0650】 R_3可為經取代之苯基。

【0651】 在一些實施例中，R_3不為  。在一些實施例中，當R_3僅經一個取代基取代時，R_3不經4-甲氧基取代。在一些實施例中，R_3不經4-甲氧基取代。在一些實施例中，當R_3為經取代之6員環時，R_3在與B_6連接之*對*位處不經甲氧基取代。在一些實施例中，R_3不經4-烷氧基取代。在一些實施例中，當R_3為經取代之6員環時，R_3在與B_6連接之*對*位處不經烷氧基取代。在一些實施例中，R_3不經任何甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0652】 當R_3經三個取代基取代時，至少一個取代基可為鹵基。較佳地，當R_3經三個取代基取代時，至少一個取代基可為F或Cl。

【0653】 R_3可經1、2或3個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中R_3不經任何甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0654】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中R_3不經任何甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0655】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中R_3不經任何甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0656】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中R_3不經任何甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0657】 R_3可經1、2或3個獨立地選自小烷基[c]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中R_3不經任何甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0658】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[c]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中R_3不經任何甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0659】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[c]、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中R_3不經任何甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0660】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[a]、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中R_3不經任何甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0661】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)及CN之取代基取代。

【0662】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)及CN之取代基取代。

【0663】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)及CN之取代基取代。

【0664】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[c]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)及CN之取代基取代。

【0665】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[c]、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)及CN之取代基取代。

【0666】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[a]、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)及CN之取代基取代。

【0667】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代。

【0668】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代。

【0669】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代。

【0670】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[c]、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代。

【0671】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[c]、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代。

【0672】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[a]、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代。

【0673】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0674】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0675】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0676】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[c]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0677】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[c]、小烷氧基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0678】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[a]、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0679】 較佳地，R_3為苯基或吡啶基，經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0680】 R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0681】 R_3可為苯基或吡啶基，經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0682】 R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0683】 R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0684】 R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基[c]、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0685】 R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基[c]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0686】 R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基[a]、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0687】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、CF_3、OH、NH_2、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代，其中R_3不經4-甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0688】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代，其中R_3不經4-甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0689】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代，其中R_3不經4-甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0690】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[c]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代，其中R_3不經4-甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0691】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基^c、小烷氧基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代，其中R_3不經4-甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0692】 R_3可經1或2個獨立地選自小烷基^a、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代，其中R_3不經4-甲氧基(-OCH_3)基團取代。

【0693】 R_3可經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-NH_2、-CH_2-O-CH_3、-OCH_3、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0694】 R_3可經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-NH_2、-CH_2-O-CH_3、-OCH_3、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0695】 R_3可經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-NH_2、-OCH_3、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0696】 R_3可經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-O-CH_3、-OCH_3、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0697】 R_3可經1或2個獨立地選自-CH_3、-OCH_3、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0698】 R_3可經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-NH_2、-CH_2-O-CH_3、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0699】 R_3可經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0700】 R_3可經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-O-CH_3、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0701】 R_3可經1或2個獨立地選自-CH_3、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0702】 當R_3經兩個取代基取代時，R_3可經3-氯基取代。當R_3為經兩個取代基取代之6員環時，R_3可在與B_6連接之*間*位經氯取代基取代。

【0703】 當R_3為經三個取代基取代之6員環時，R_3可在與B_6連接之*間*位處經氯取代基取代。

【0704】 R_3可經1或2個獨立地選自$-CH_3$、$-CH_2-OH$、$-CH_2-NH_2$、$-CH_2-O-CH_3$、OH、CF_3、鹵基及CN之取代基取代。

【0705】 R_3可經1或2個獨立地選自$-CH_3$、$-CH_2-NH_2$、CF_3、鹵基及CN之取代基取代。

【0706】 R_3可經1或2個獨立地選自$-CH_3$、$-CH_2-OH$、$-CH_2-O-CH_3$、OH、CF_3、鹵基及CN之取代基取代。

【0707】 R_3可經1或2個獨立地選自$-CH_3$、CF_3、鹵基及CN之取代基取代。

【0708】 R_3可經小烷基[b]及視情況選用之其他取代基取代，該其他取代基選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、$-C(=O)-NH_2$、$-C(=O)-N(H)$(小烷基)、$-C(=O)-N$(小烷基)(小烷基)及CN。

【0709】 R_3可經小烷基及視情況選用之其他取代基取代，該其他取代基選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、$-C(=O)-NH_2$、$-C(=O)-N(H)$(小烷基)、$-C(=O)-N$(小烷基)(小烷基)及CN。

【0710】 R_3可經由NH_2取代之(C_1-C_3)烷基取代，且其中R_3視情況經選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、$-C(=O)-NH_2$、$-C(=O)-N(H)$(小烷基)、$-C(=O)-N$(小烷基)(小烷基)及CN之其他取代基取代。

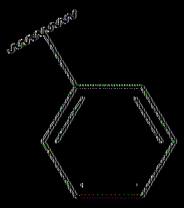
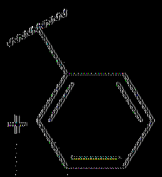
〔0711〕 R_3可經1個NH_2取代之(C_1-C_3)烷基取代，且其中R_3視情況經選自小烷基、小烷氧基、環內基、OH、CF_3、鹵基、C(=O)NH_2、C(=O)N(H)(小烷基)、C(=O)N(小烷基)(小烷基)及CN之其他取代基取代。

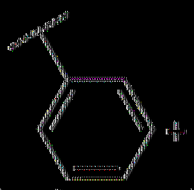
〔0712〕 R_3可經CH_2NH_2及視情況選用之其他取代基取代，該其他取代基選自小烷基、小烷氧基、環內基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、C(=O)NH_2、C(=O)N(H)(小烷基)、C(=O)N(小烷基)(小烷基)及CN。

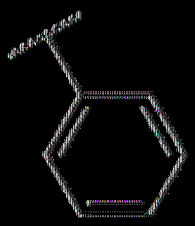
〔0713〕 R_3可經CH_2NH_2及視情況選用之其他取代基取代，該其他取代基選自小烷基、小烷氧基、環內基、OH、CF_3、鹵基、C(=O)NH_2、C(=O)N(H)(小烷基)、C(=O)N(小烷基)(小烷基)及CN。

〔0714〕 R_3可經兩個取代基取代，其中該等取代基之一為CH_2NH_2。

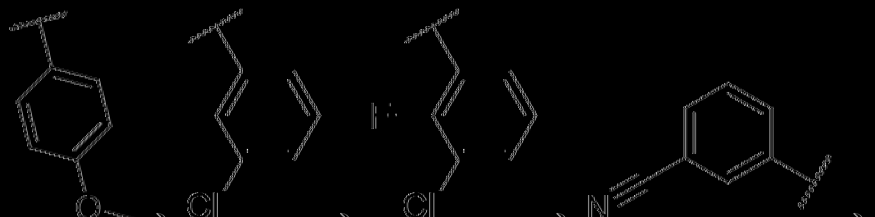
〔0715〕 R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基或吡啶基。R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。R_3可為經1或2個選自F及Cl之取代基取代之苯基或吡啶基。R_3可為經1或2個選自F及Cl之取代基取代之苯基。

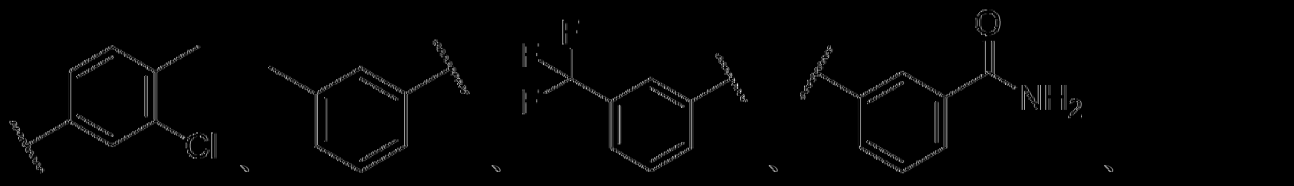
〔0716〕 R_3可在用(*)  標記之*位經1個取代基取代。R_3可在用(*)  標記之*位經1個取代基取代，且在用(+) 標記之+位經1個取代基取

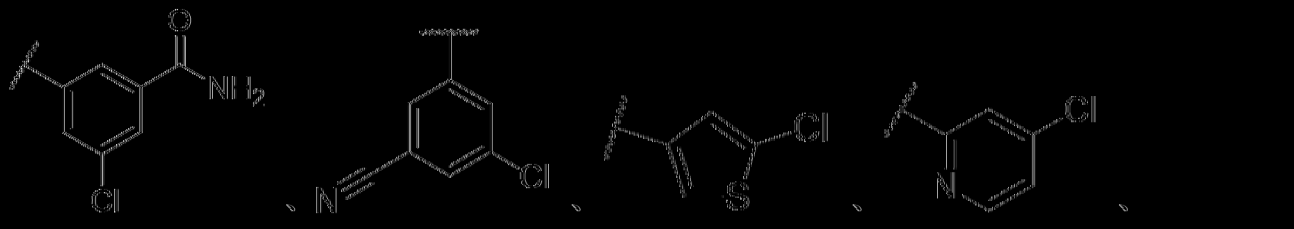
代。R_3可在用(*)標記之*///*似經1個取代其取代，且在用(t)  標記之*///*似

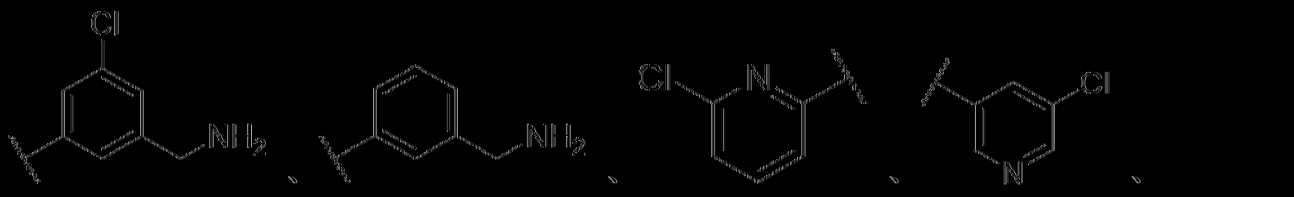


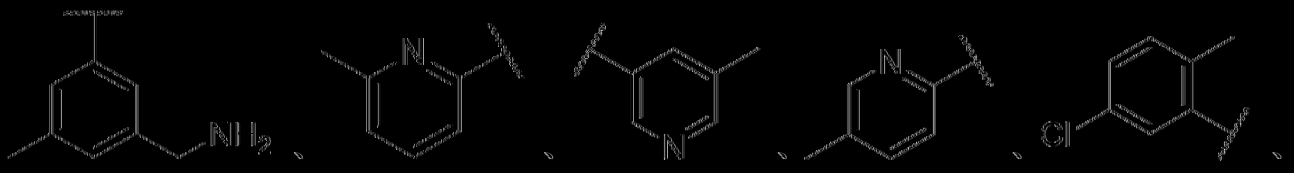
經1個取代其取代。R_3可在用(~) ~ 標記之*///*似未經取代。

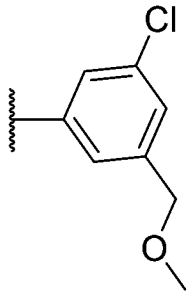
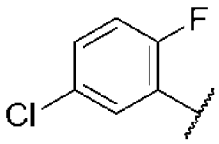
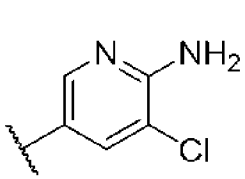
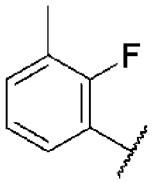
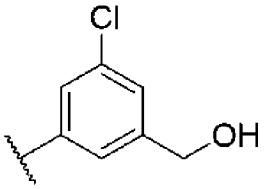
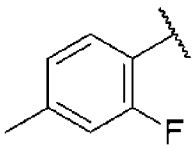
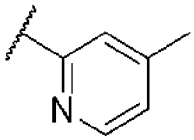
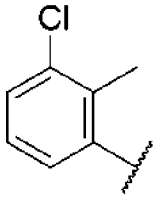
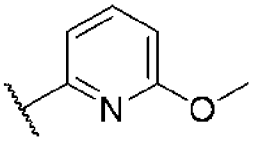
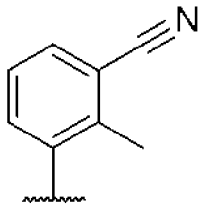
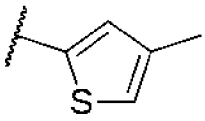
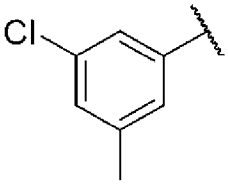
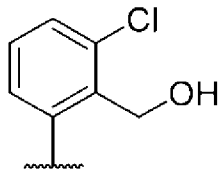
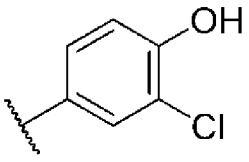
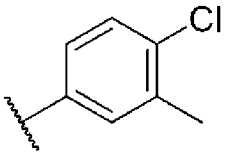
[0717] R_3可選[1]： 

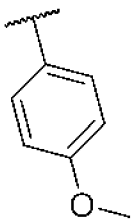
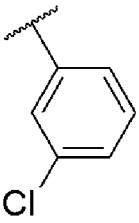
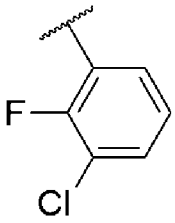
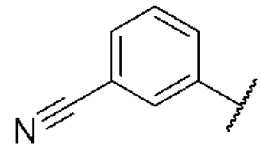
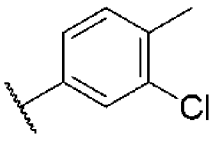
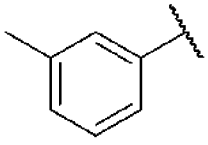
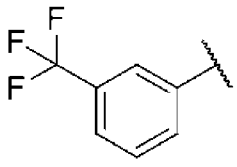
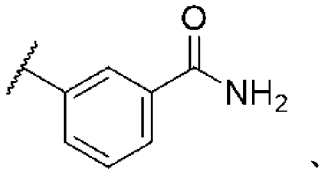
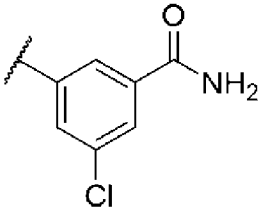
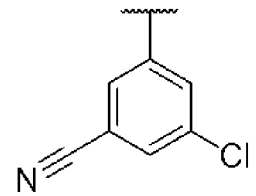
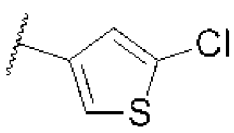
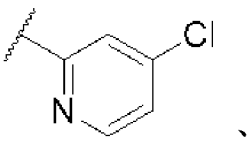


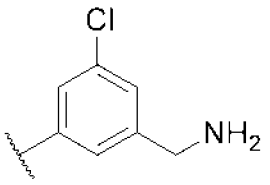
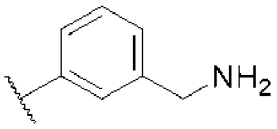
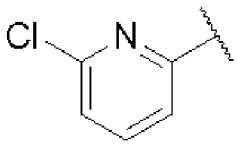
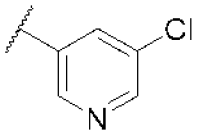
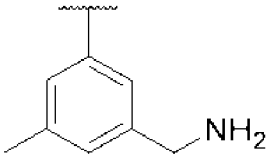
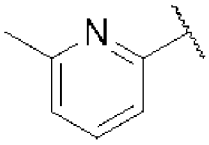


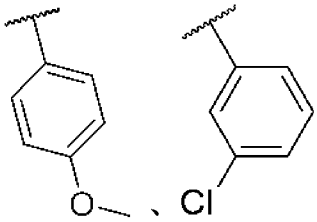
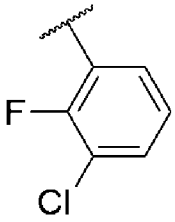
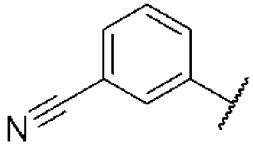
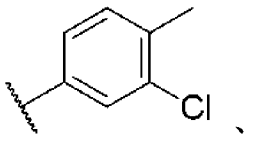
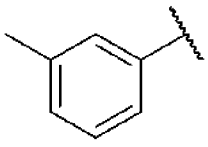
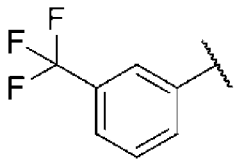
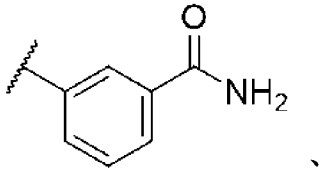
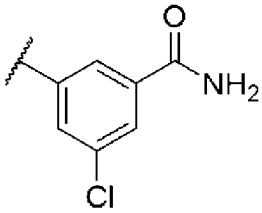
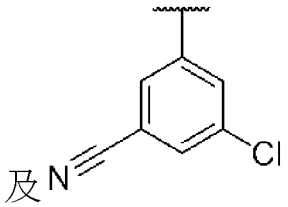


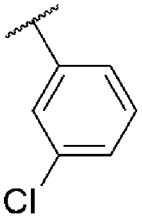
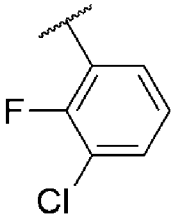
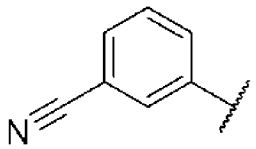
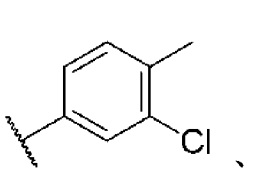
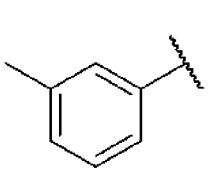
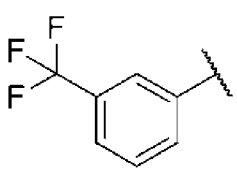
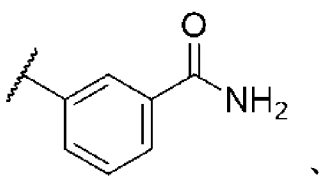
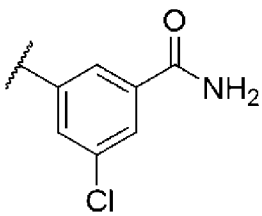
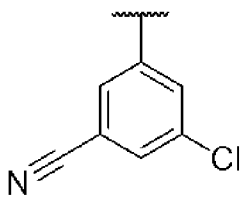
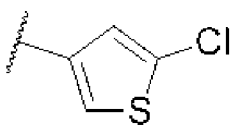
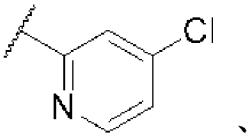


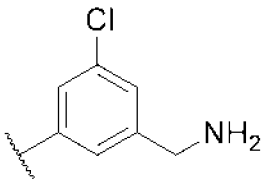
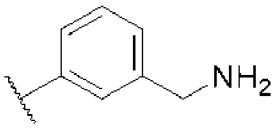
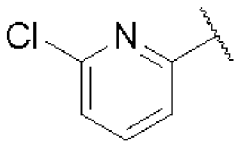
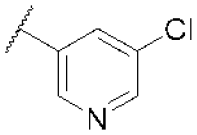
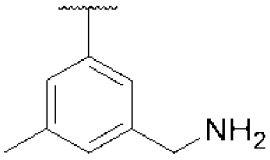
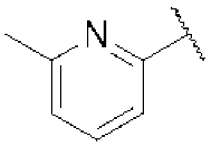
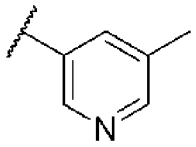
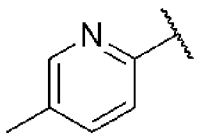
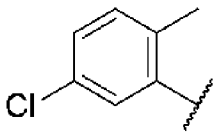
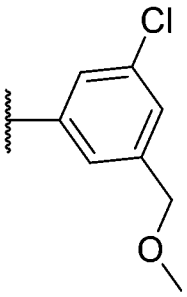
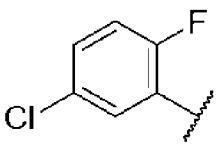
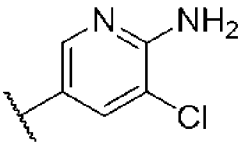
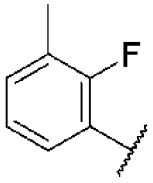
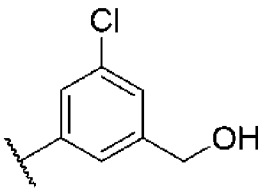
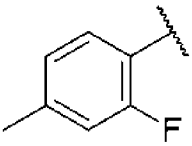
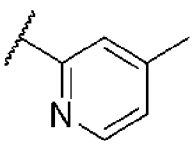
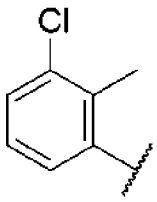
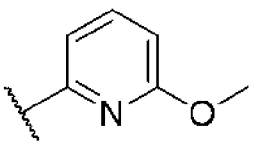
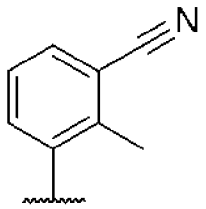
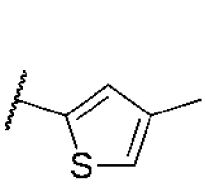
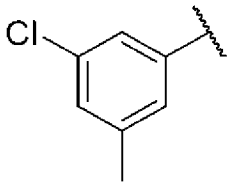
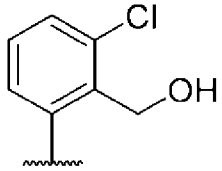
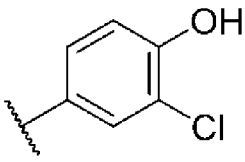
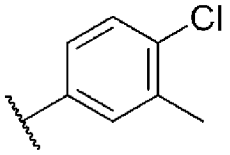

、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
及 
。

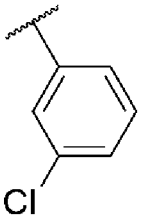
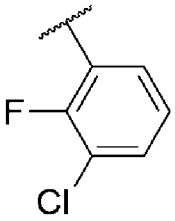
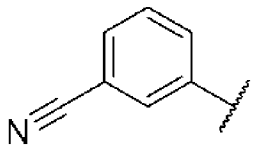
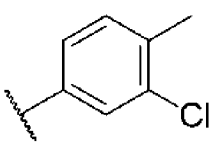
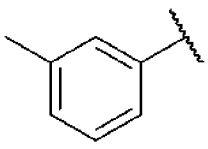
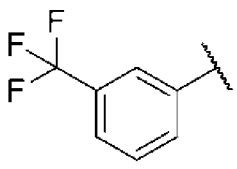
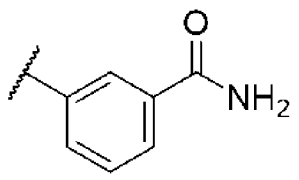
【0718】R_3可選自： 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、

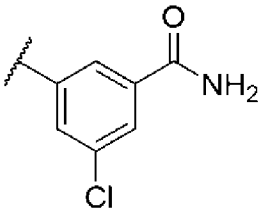
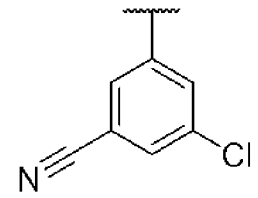
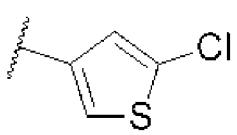
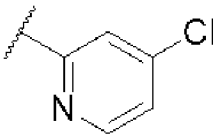
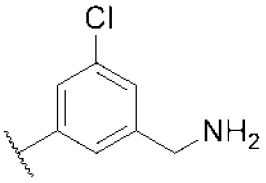
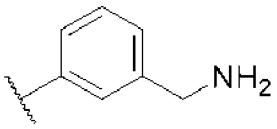
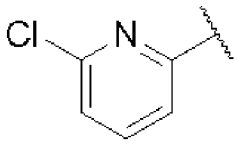
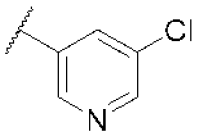
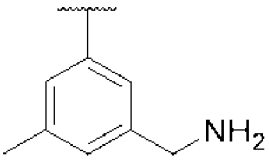
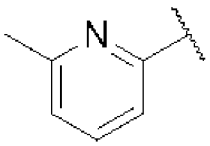

、 
、 
、 
、 
及 
。

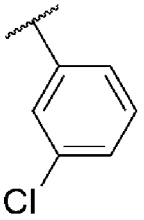
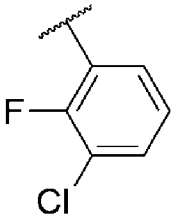
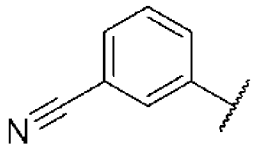
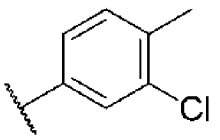
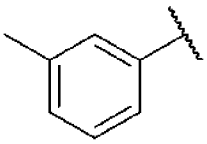
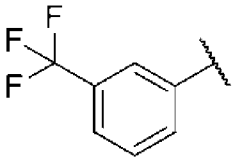
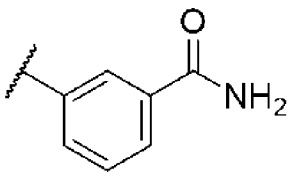
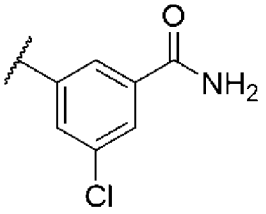
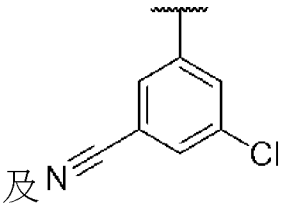
【0719】R_3可選自： 
、
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
及 
。

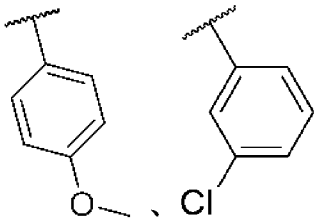
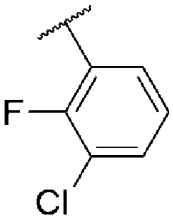
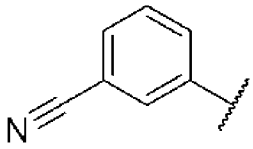
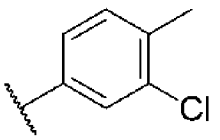
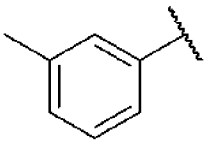
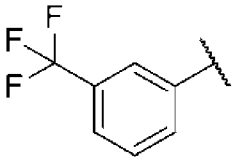
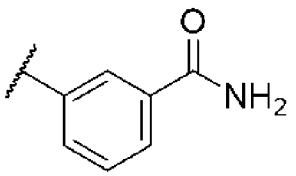
【0720】R_3可選自： 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、

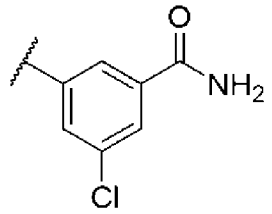
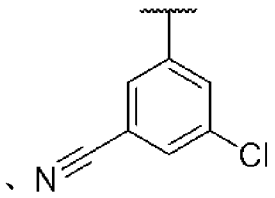
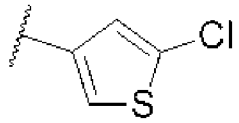
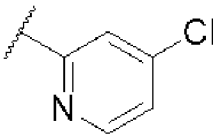
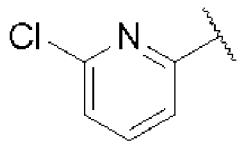
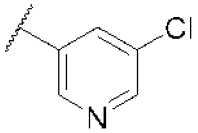
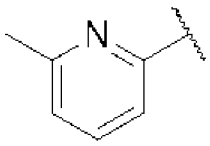
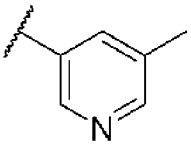
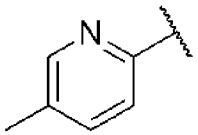
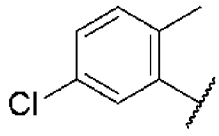
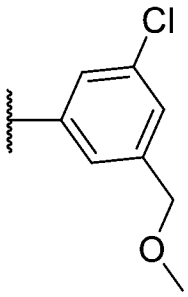
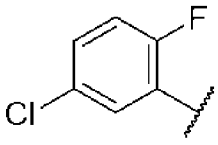
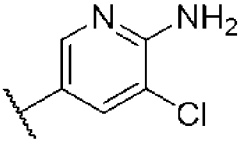
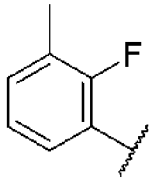
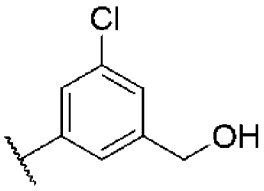
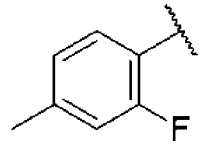
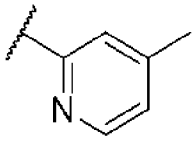
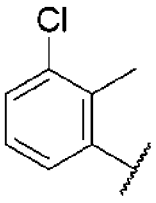
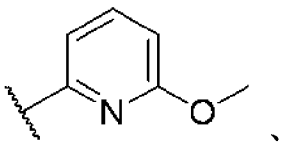
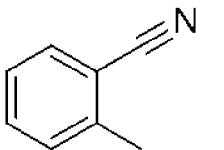
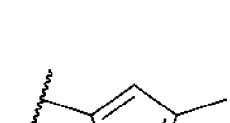
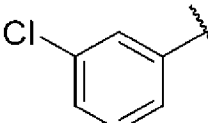
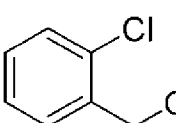
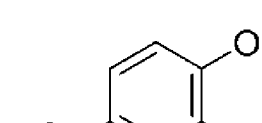
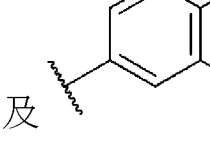

、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
及 
。

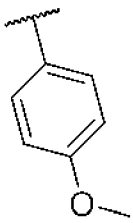
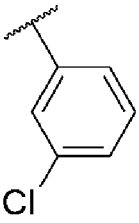
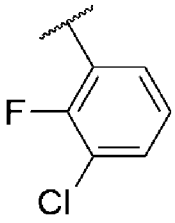
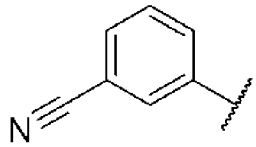
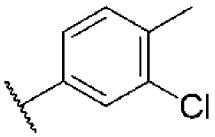
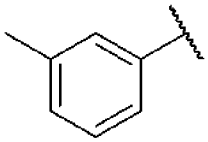
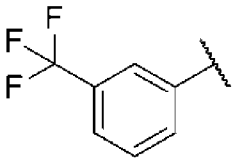
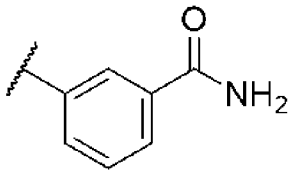
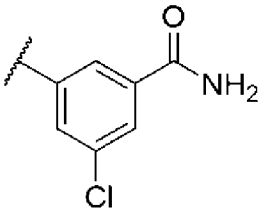
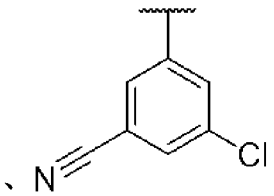
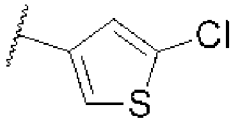
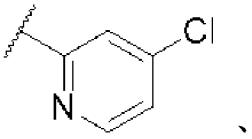
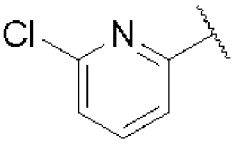
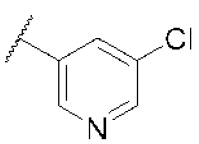
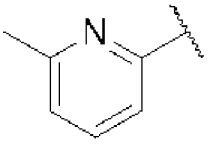
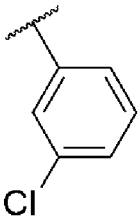
【0721】R_3可選自： 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、

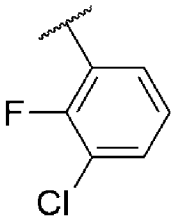
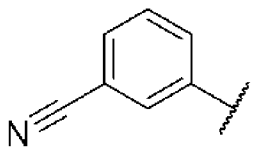
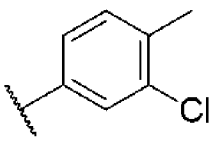
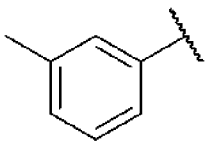
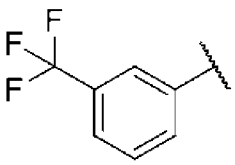
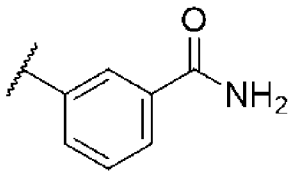
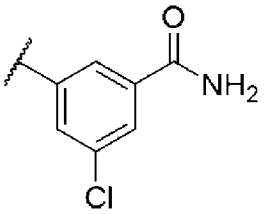
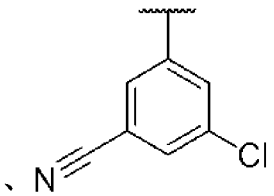
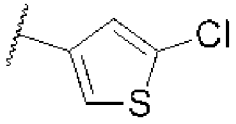
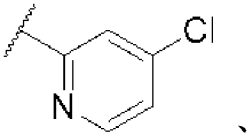
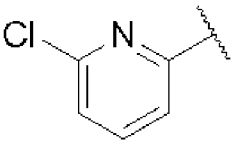
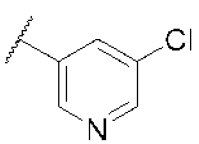
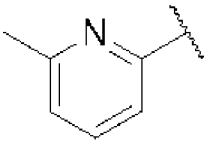
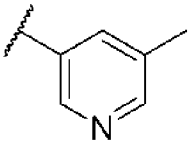
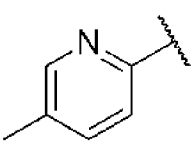

、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
及 
。

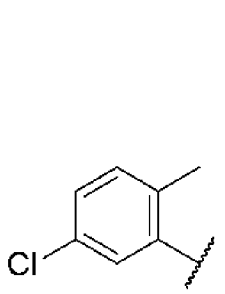
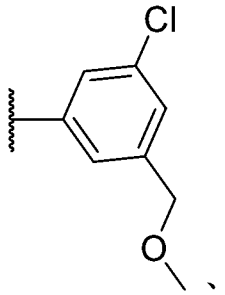
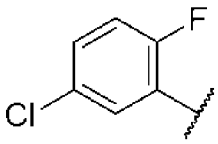
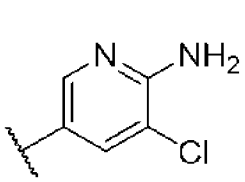
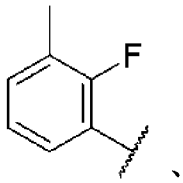
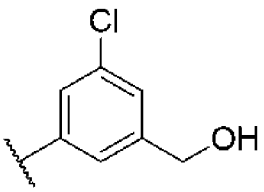
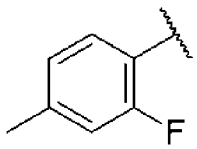
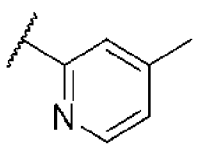
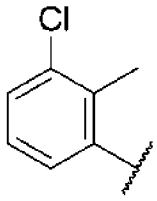
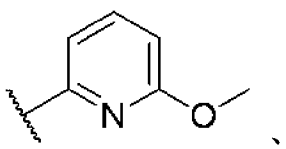
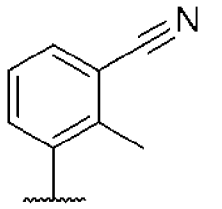
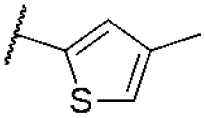
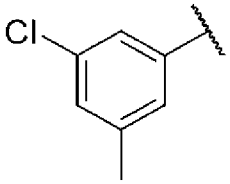
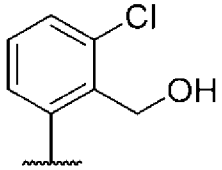
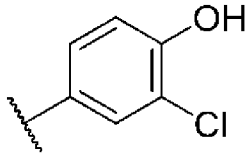
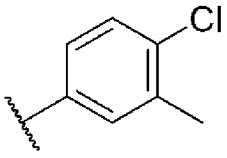
【0722】R3可選自： 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
及 
。

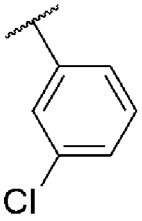
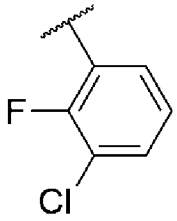
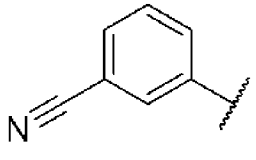
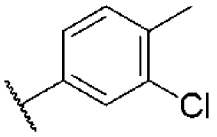
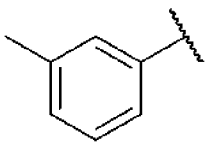
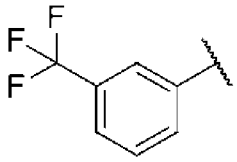
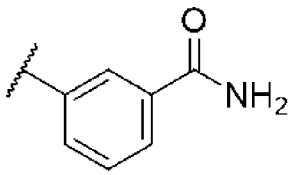
【0723】R3可選自： 
、 
、
、 
、 
、 
、 
、 
、

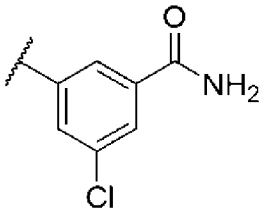
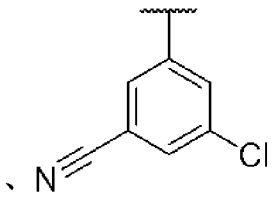
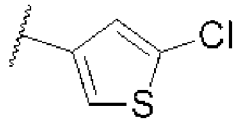
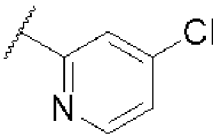
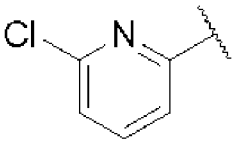
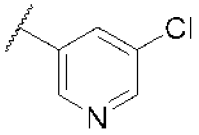
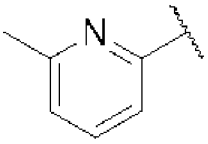

、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、
、
、
、
、及
。

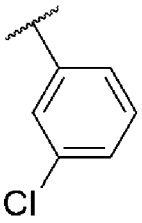
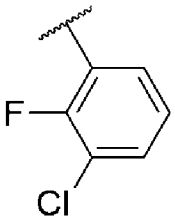
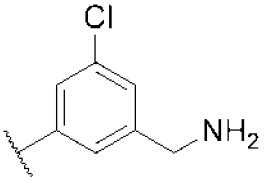
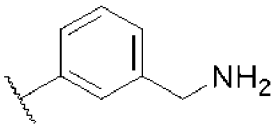
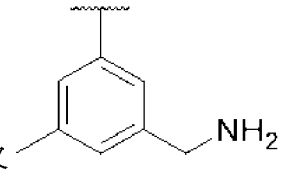
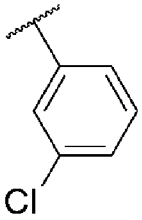
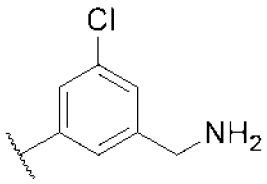
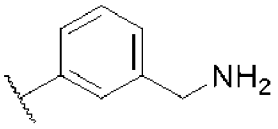
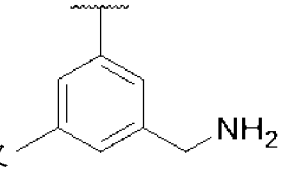
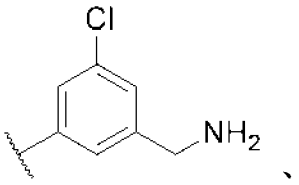
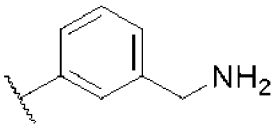
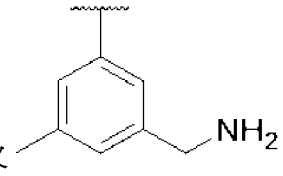
【0724】 R_3可選自：  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  及  。

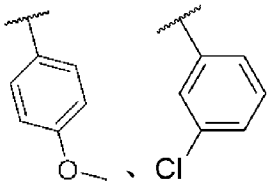
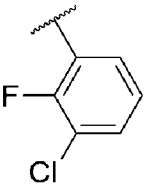
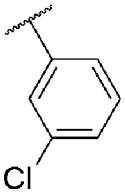
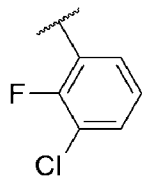
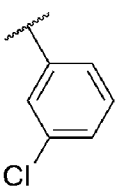
【0725】 R_3可選自：、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、


、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
及 
。

【0726】R_3可選自： 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、


、 
、 
、 
、 
、 
及 
。

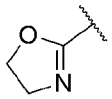
【0727】R_3可選自： 
、 
、 
、 
及 
。R_3可選自： 
、 
、 
及 
。R_3可選自： 
、 
及 
。

【0728】R_3可選自： 
及 
。較佳地，R_3可 選自： 
及 
。R_3可為 
。

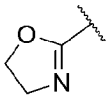
【0729】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

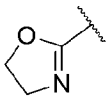
【0730】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6 連接；且R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

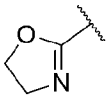
【0731】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

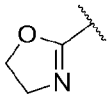
【0732】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0733】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由

雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0734】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0735】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0736】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

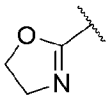
或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0737】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、

-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

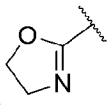
或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0738】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、

-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

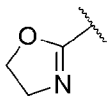
或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0739】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

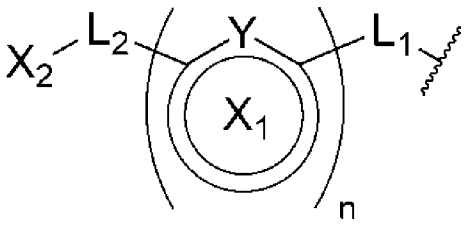
R_{35}選自H、小烷基及環丙基；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0740】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-(CH_2)$_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

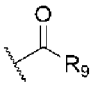
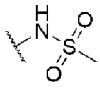
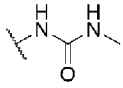
L_2為選自單鍵、-(CH_2)$_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

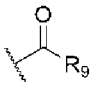
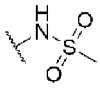
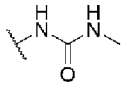
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

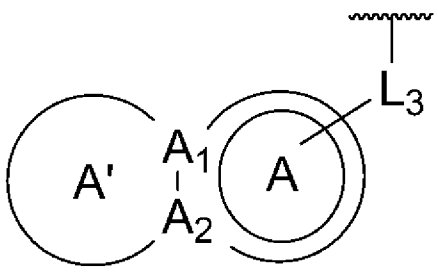
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

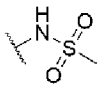
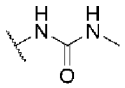
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

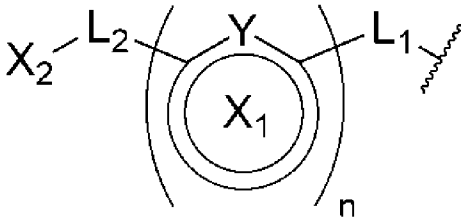
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0741】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

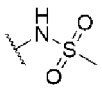
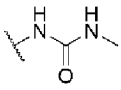
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

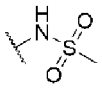
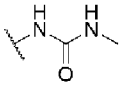
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

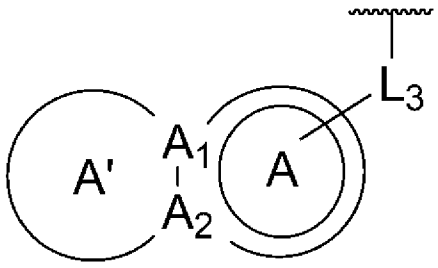
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

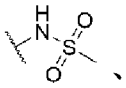
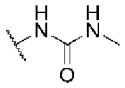
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

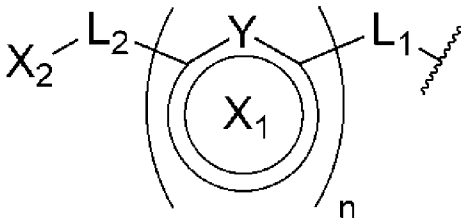
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0742】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

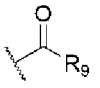
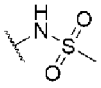
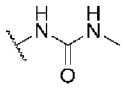
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

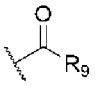
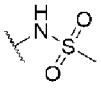
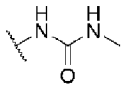
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

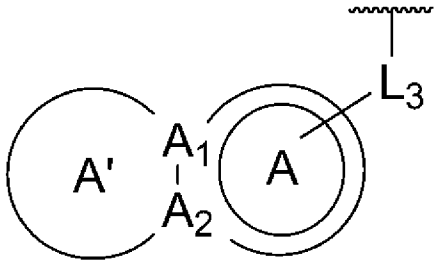
其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一

步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

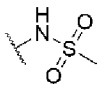
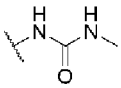
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

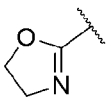
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

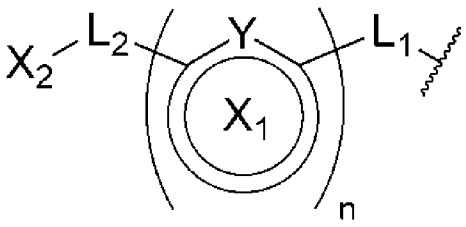
R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0743】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及 

；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

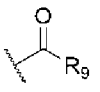
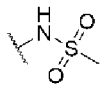
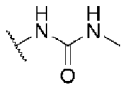
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

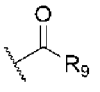
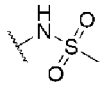
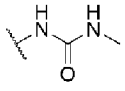
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

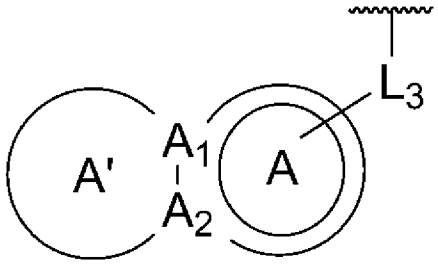
其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽

和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

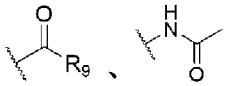
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

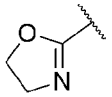
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

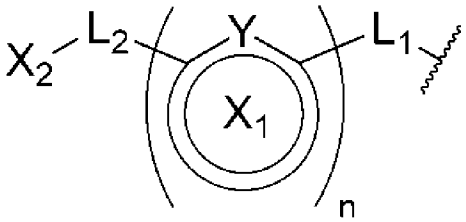
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接$-CH_2-$基團連接；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、$-C(=O)-NH_2$及CN之取代基取代。

【0744】 B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-NH-C(=O)CH_3$、$-CH_2-NH-S(=O)_2R_{35}$、$-CH_2-O-R_{16}$、$-CH_2-OH$、-CN及  ；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

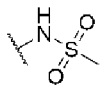
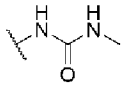
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

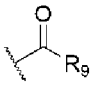
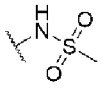
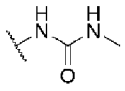
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

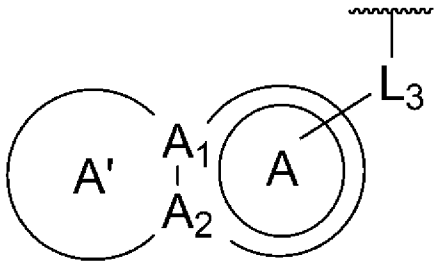
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

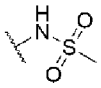
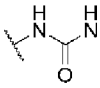
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

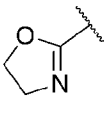
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

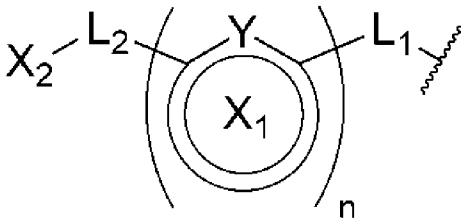
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0745】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-NH-C(=O)$CH_3$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  ；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

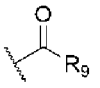
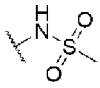
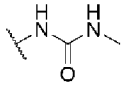
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

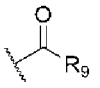
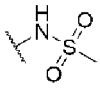
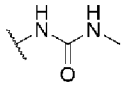
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

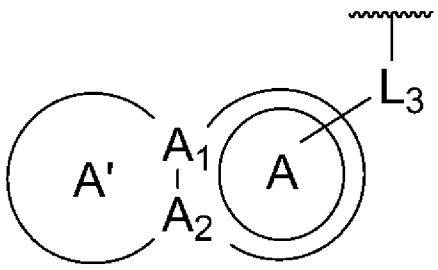
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

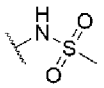
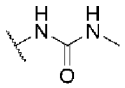
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

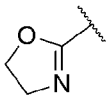
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

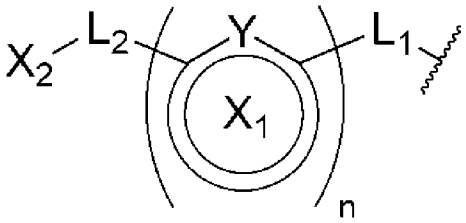
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接$-CH_2-$基團連接；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、$-C(=O)-NH_2$及CN之取代基取代。

【0746】 R_2可選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-NH-S(=O)_2R_{35}$、$-CH_2-NH-C(=O)CH_3$、$-CH_2-O-R_{16}$、$-CH_2-OH$、-CN及  ；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及$-(CH_2)_{1-3}-$之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

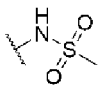
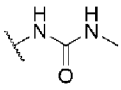
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$及$-C(=O)-$之連接基；且

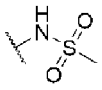
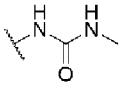
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

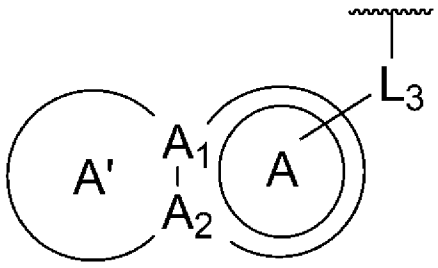
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

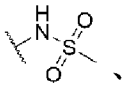
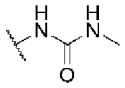
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

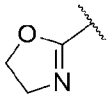
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0747】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[b]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

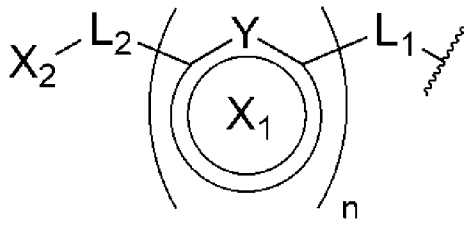
R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-(CH_2)$_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

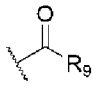
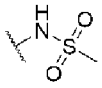
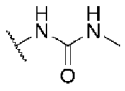
L_2為選自單鍵、-(CH_2)$_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

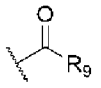
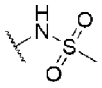
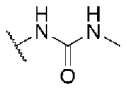
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-(CH_2)$_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-(CH_2)$_{0-3}$-R_{23}；

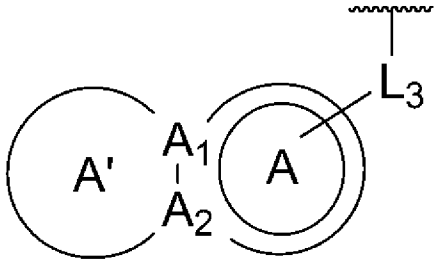
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

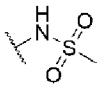
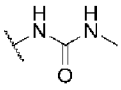
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

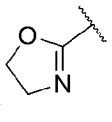
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0748】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

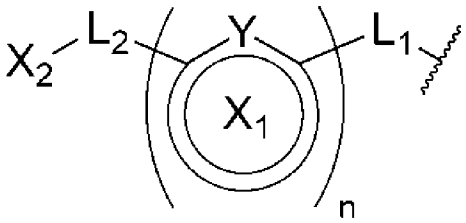
R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

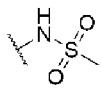
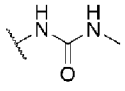
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

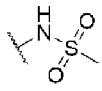
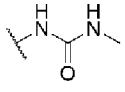
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

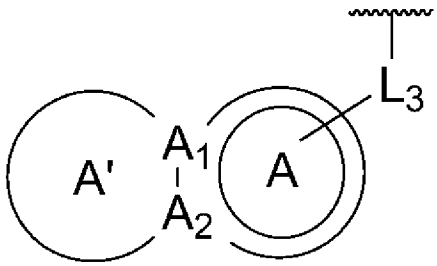
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

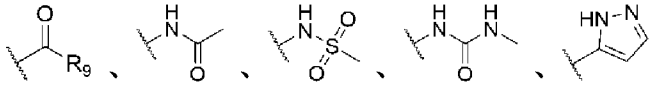
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

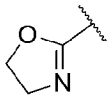
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0749】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經

由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-NH-C(=O)$CH_3$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[b]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

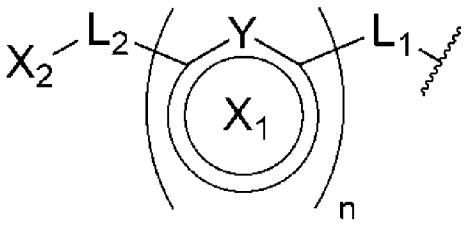
R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

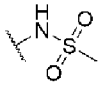
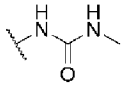
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

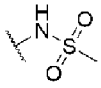
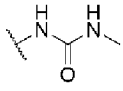
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

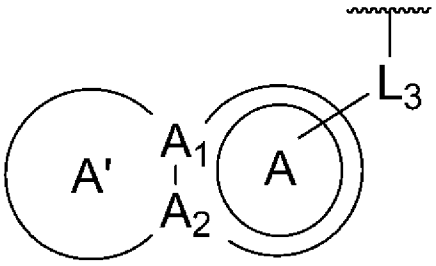
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

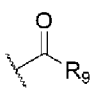
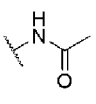
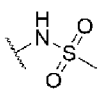
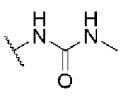
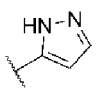
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

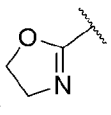
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接$-CH_2-$基團連接；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、$-C(=O)-NH_2$及CN之取代基取代。

【0750】 R_2可選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-NH-S(=O)_2R_{35}$、$-CH_2-NH-C(=O)CH_3$、$-CH_2-O-R_{16}$、$-CH_2-OH$、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、$-S(=O)_2-$(小烷基)、$-(CH_2)_{1-3}-(C=O)-OH$、$-(CH_2)_{0-3}-$環烷基[b]、$-(CH_2)_{0-3}-$雜環烷基、$-(CH(烷基))-$雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$芳基、$-(C(H)(苯基))-$烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基、$-(C(H)(雜芳基))-$烷基、$-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH$及$-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}$；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

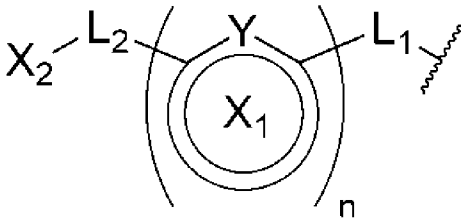
R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

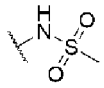
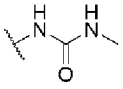
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

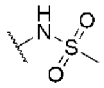
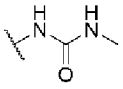
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

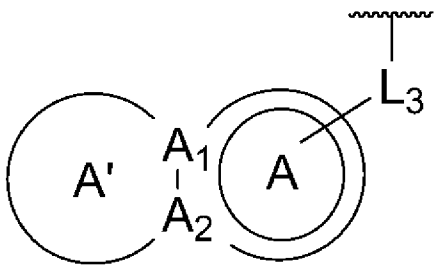
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

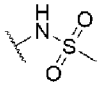
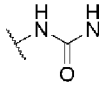
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

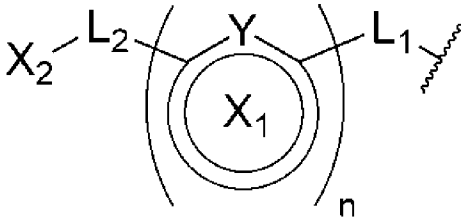
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接$-CH_2-$基團連接；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、$-C(=O)-NH_2$及CN之取代基取代。

【0751】R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及$-(CH_2)_{1-3}-$之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

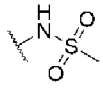
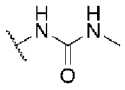
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$及$-C(=O)-$之連接基；且

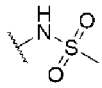
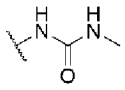
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

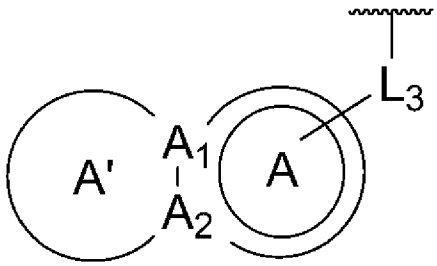
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

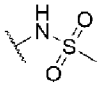
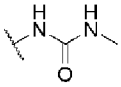
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

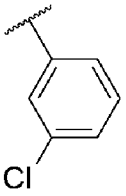
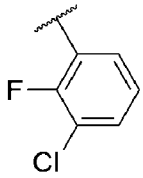
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

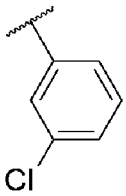
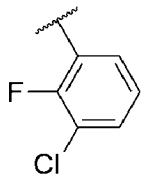
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

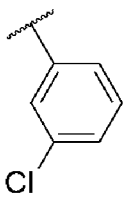
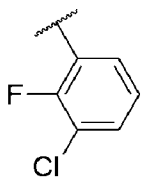
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

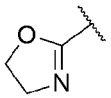
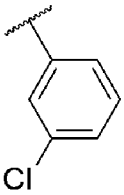
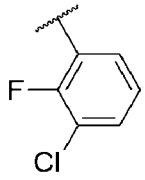
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接$-CH_2-$基團連接；且

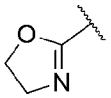
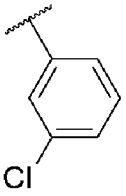
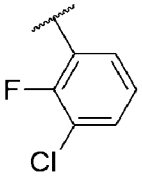
R_3可經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、$-C(=O)-NH_2$及CN之取代基取代。

【0752】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_3可選自  及  。

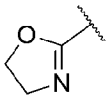
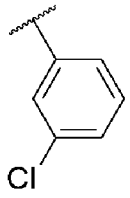
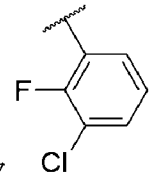
【0753】 B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_3可 選自  及  。

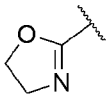
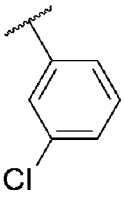
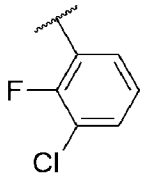
【0754】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；且R_3可 選自  及  。

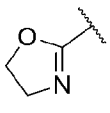
【0755】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且R_3可 選自  及  。

【0756】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且R_3可 選自  及  。

【0757】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、

-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-NH-C(=O)$CH_3$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  ；且R_3可選自  及  。

【0758】R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  ；且R_3可選自  及  。

【0759】B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

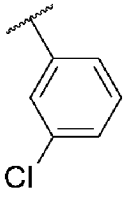
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

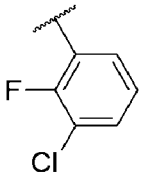
或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

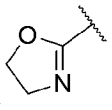
R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；且

R_3可 選自 

及 

。

【0760】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及 

，其中：

R_4為H或小烷基，且

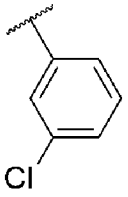
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

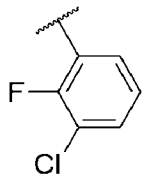
或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

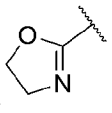
R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；且

R_3可 選自 

及 

。

【0761】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-NH-C(=O)$CH_3$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及 

，其中：

R_4為H或小烷基，且

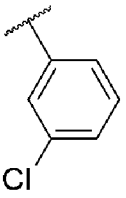
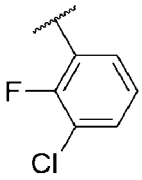
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[b]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

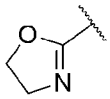
或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；且

R_3可 選自  及  。

【0762】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

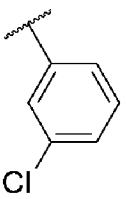
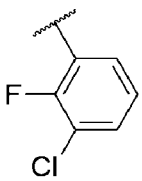
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

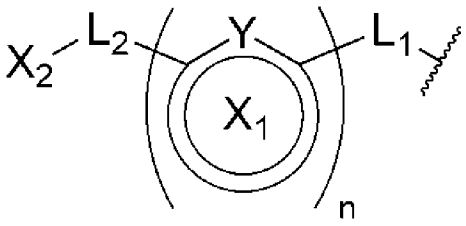
R_{35}選自H、小烷基及環丙基；且

R_3可 選自  及  。

【0763】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

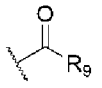
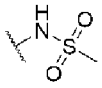
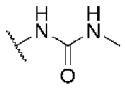
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

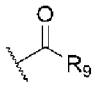
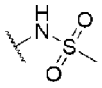
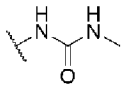
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

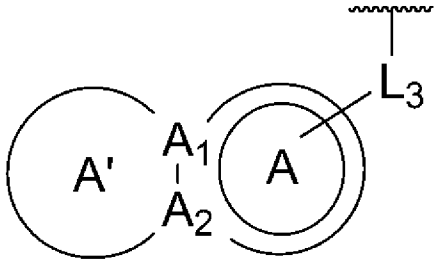
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

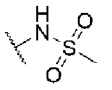
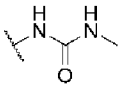
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

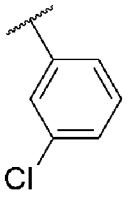
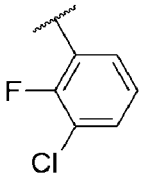
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

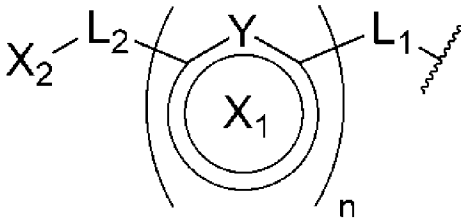
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可選自  及  。

【0764】B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

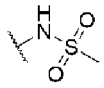
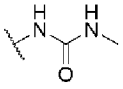
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

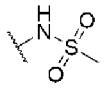
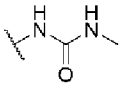
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

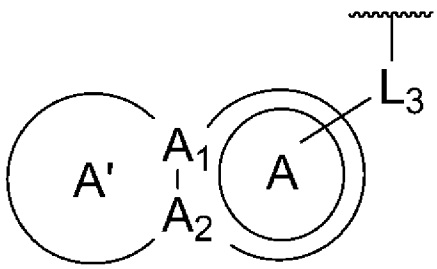
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

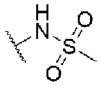
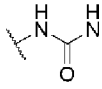
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

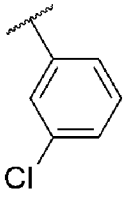
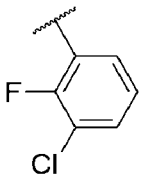
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

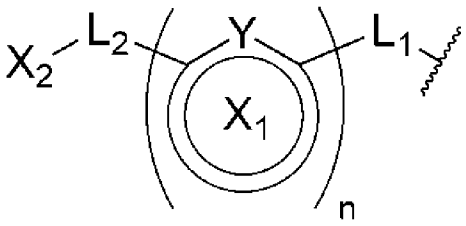
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可 選自  及  。

【0765】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-(CH_2)$_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

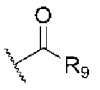
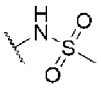
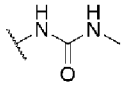
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$及-C(=O)-之連接基；且

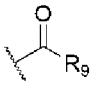
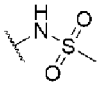
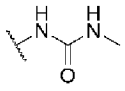
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

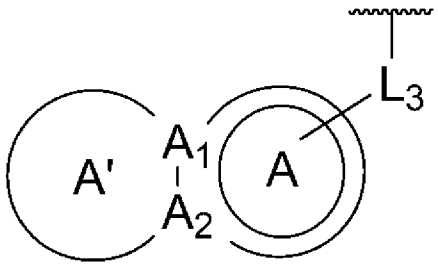
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

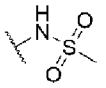
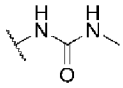
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

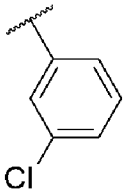
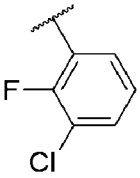
其中R_{31}為H或小烷基；

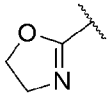
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

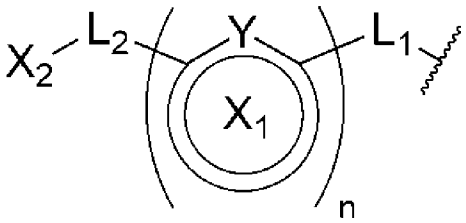
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可 選自  及  。

【0766】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  ；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

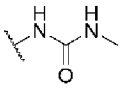
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

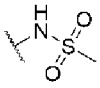
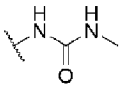
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

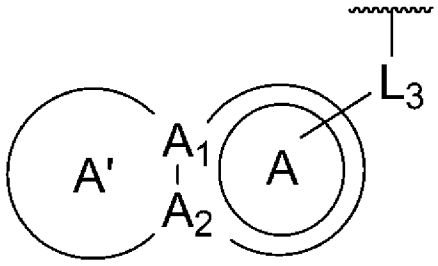
其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一

步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

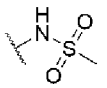
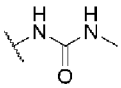
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

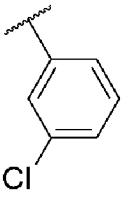
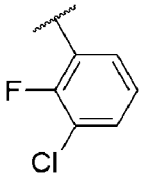
其中R_{31}為H或小烷基；

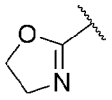
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

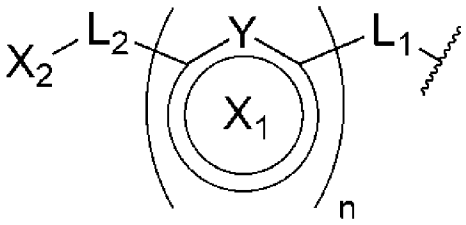
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可 選自  及  。

【0767】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

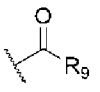
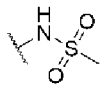
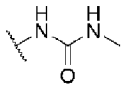
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

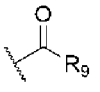
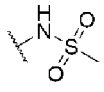
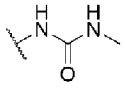
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

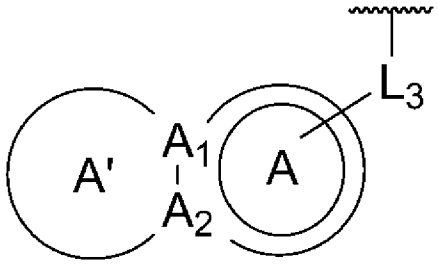
其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽

和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

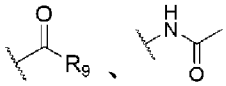
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

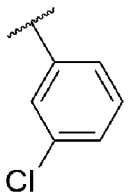
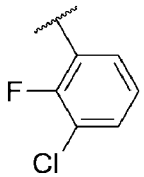
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

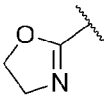
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

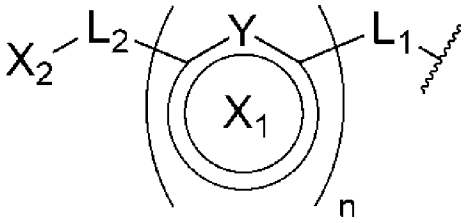
R_3可選自  及  。

【0768】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經

由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-NH-C(=O)$CH_3$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  ；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-(CH_2)$_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

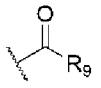
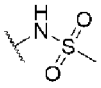
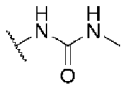
L_2為選自單鍵、-(CH_2)$_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

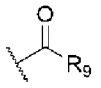
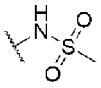
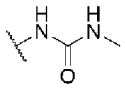
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-(CH_2)$_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-(CH_2)$_{0-3}$-R_{23}；

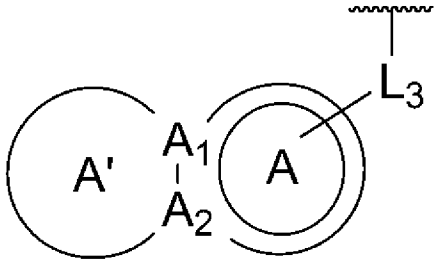
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

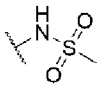
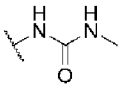
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

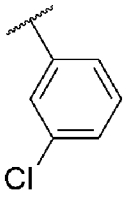
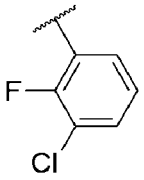
其中R_{31}為H或小烷基；

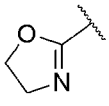
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

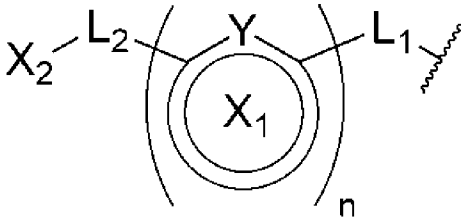
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可 選自  及  。

【0769】R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-(CH_2)$_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

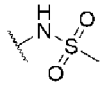
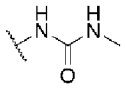
L_2為選自單鍵、-(CH_2)$_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

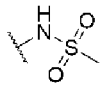
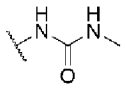
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-(CH_2)$_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

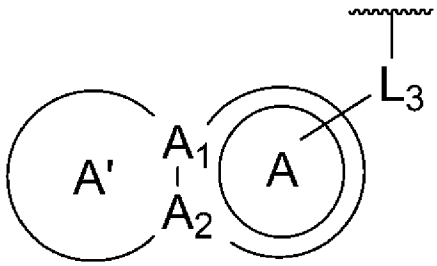
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

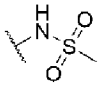
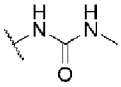
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

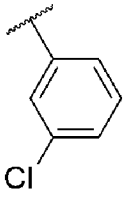
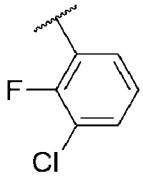
其中R_{31}為H或小烷基；

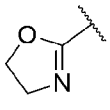
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可 選自  及  。

【0770】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-O-$R_{16}$、-$CH_2$-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[b]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

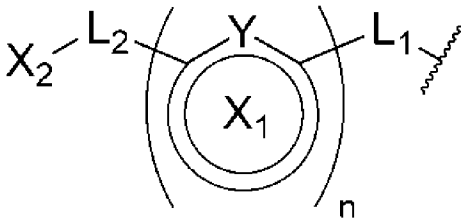
R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

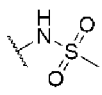
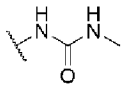
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

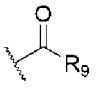
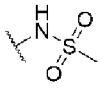
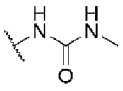
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

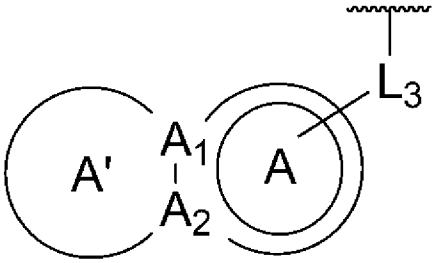
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

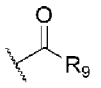
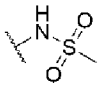
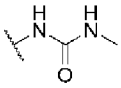
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

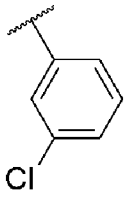
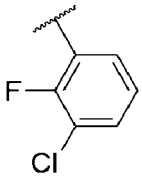
其中R_{31}為H或小烷基；

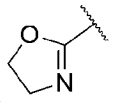
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可選自  及  。

【0771】B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

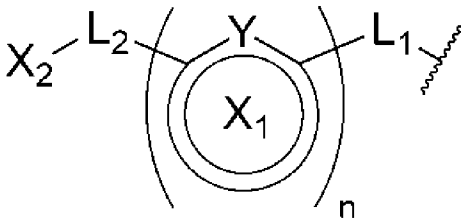
R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

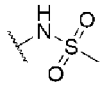
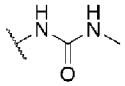
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

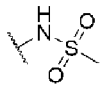
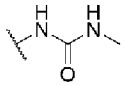
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

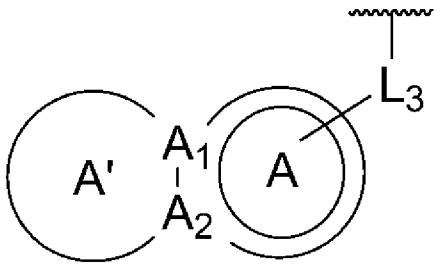
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

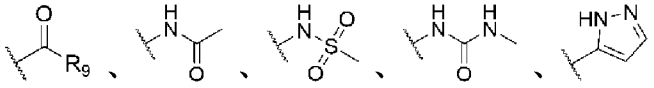
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

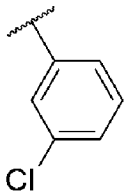
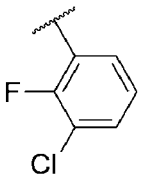
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

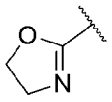
其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可選自  及  。

【0772】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連

接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-$S(=O)_2R_{35}$、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、$-S(=O)_2$-(小烷基)、$-(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、$-(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、$-(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

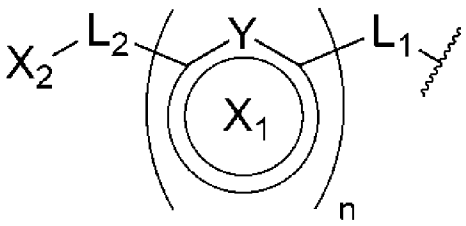
R_6為H、小烷基及$-(CH_2)$-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、$-(CH_2)$-(C=O)-OH、雜環烷基及$-(CH_2)$-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

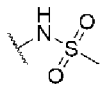
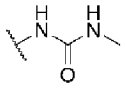
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

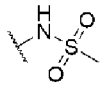
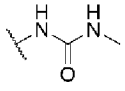
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

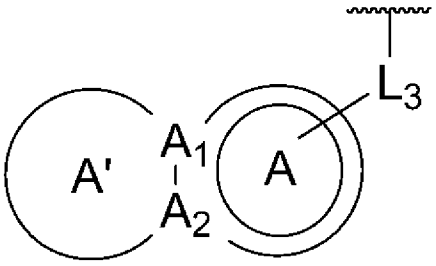
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

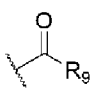
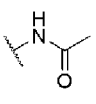
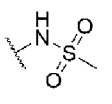
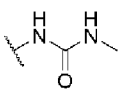
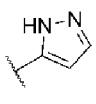
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

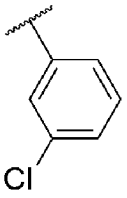
其中R_{31}為H或小烷基；

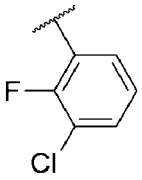
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

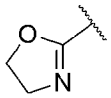
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可選自 

及 

。

【0773】 R_2可選自-C(=O)-$N(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-$S(=O)_2R_{35}$、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及 

，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

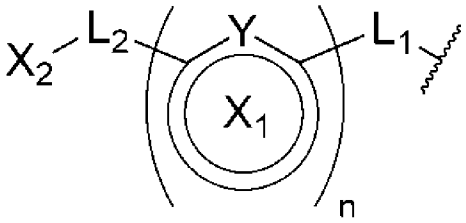
R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

R_{35}選自H、小烷基及環丙基；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

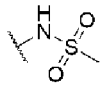
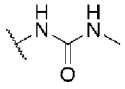
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

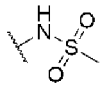
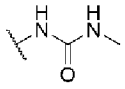
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

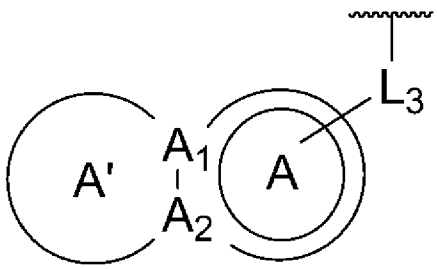
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

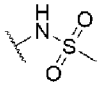
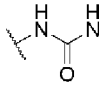
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

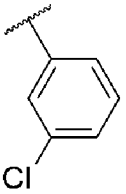
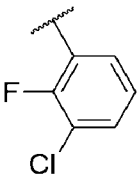
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

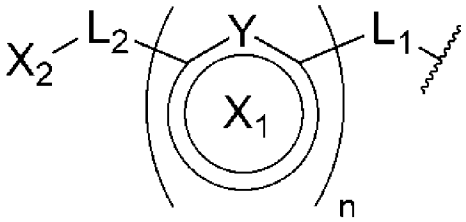
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可 選自  及  。

【0774】R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

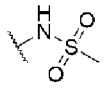
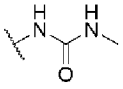
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-及-C(=O)-之連接基；且

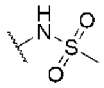
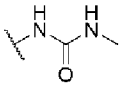
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

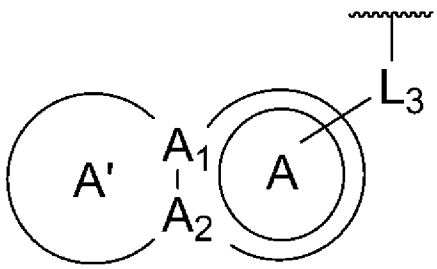
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

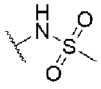
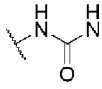
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

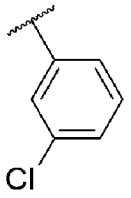
其中R_{31}為H或小烷基；

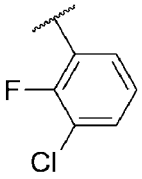
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3可選自 

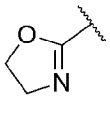
及 

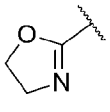
。

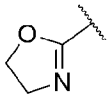
【0775】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

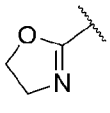
【0776】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6 連接；且R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0777】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

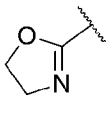
【0778】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0779】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0780】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；且R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0781】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；

且R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0782】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

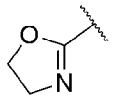
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[a]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0783】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、

-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，

其中：

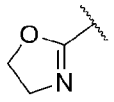
R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0784】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，

其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

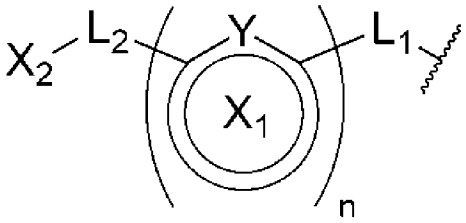
或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0785】 R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

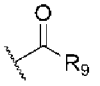
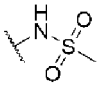
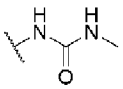
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

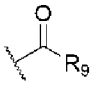
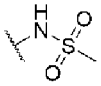
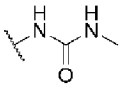
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

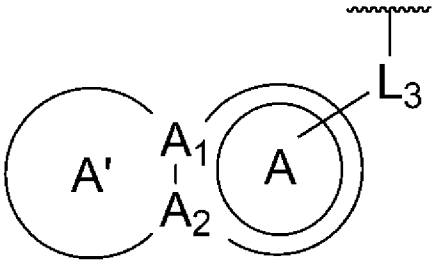
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

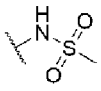
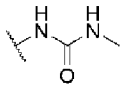
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

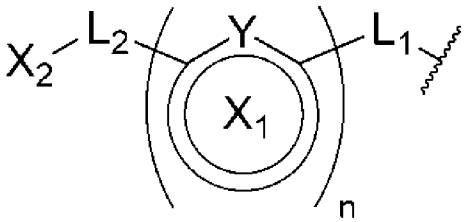
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0786】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

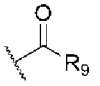
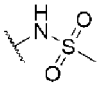
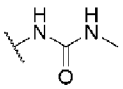
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

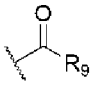
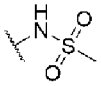
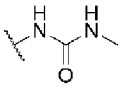
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

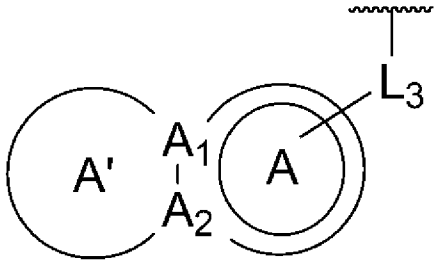
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

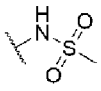
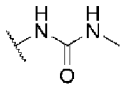
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

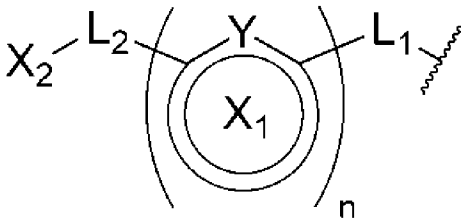
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0787】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

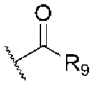
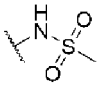
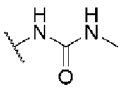
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

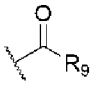
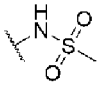
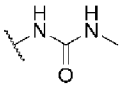
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

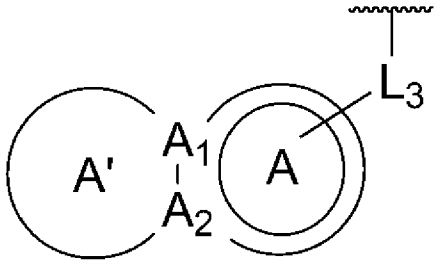
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

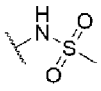
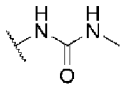
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

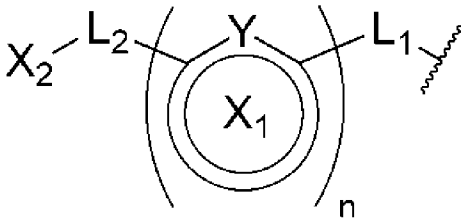
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0788】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

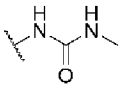
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

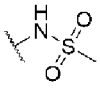
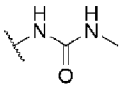
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

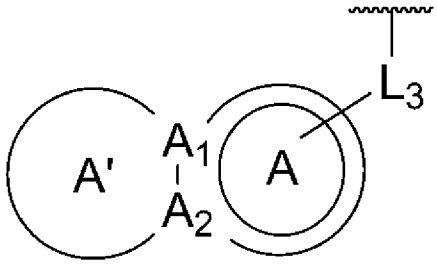
其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一

步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

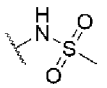
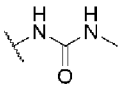
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

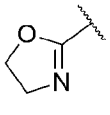
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

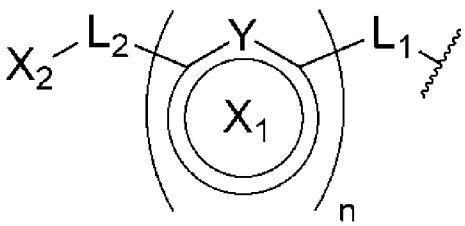
R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0789】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及 

；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

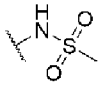
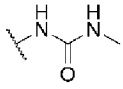
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

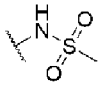
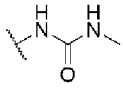
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

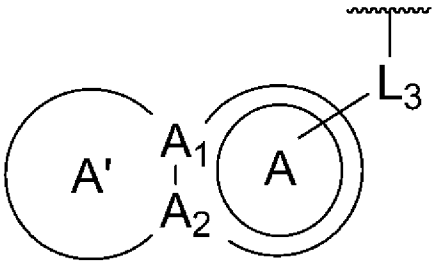
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

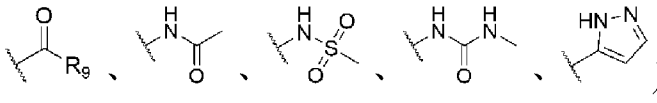
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

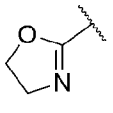
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

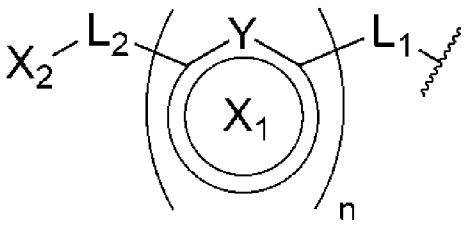
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0790】 B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-$N(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

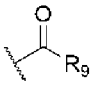
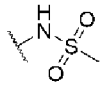
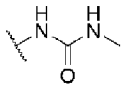
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

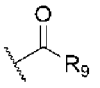
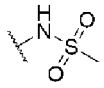
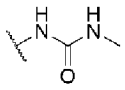
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

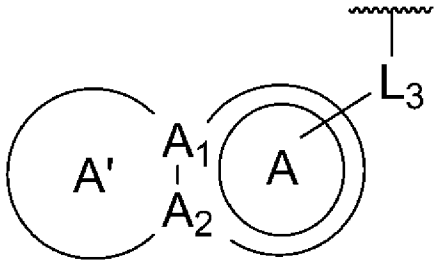
其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽

和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

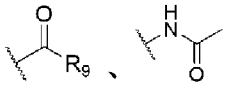
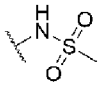
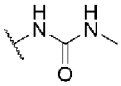
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

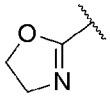
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

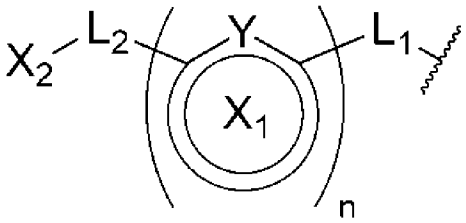
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0791】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-$N(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O- R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

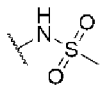
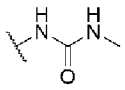
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

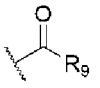
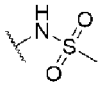
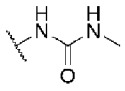
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

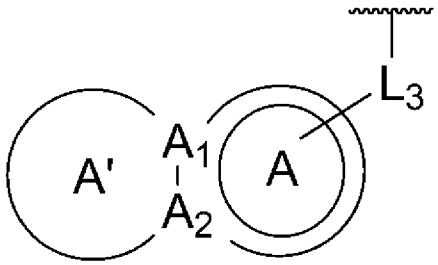
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

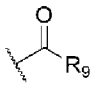
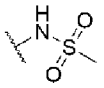
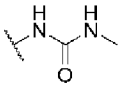
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

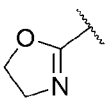
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

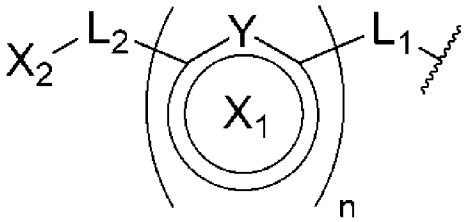
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0792】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O- R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

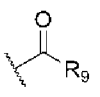
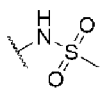
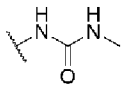
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

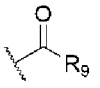
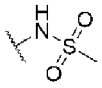
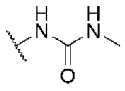
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

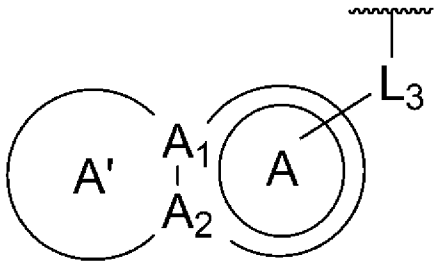
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

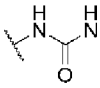
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

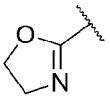
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0793】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由

雙鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O- R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

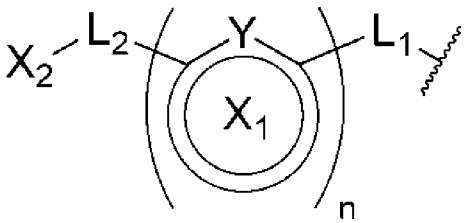
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

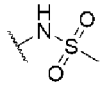
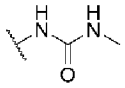
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

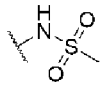
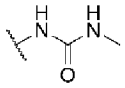
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

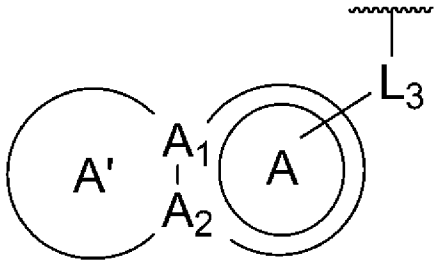
其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一

步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

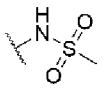
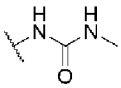
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

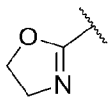
其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0794】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O- R_{16}、-CH_2-OH、-CN及



，其中：

R_4為H或小烷基，且

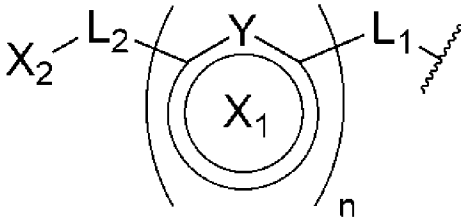
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

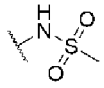
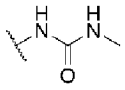
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

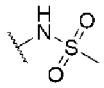
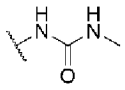
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

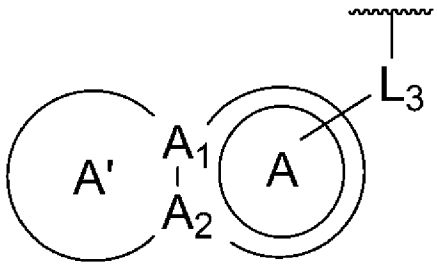
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

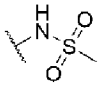
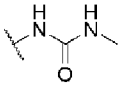
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

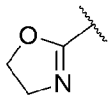
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0795】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O- R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

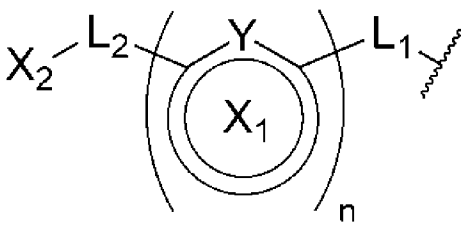
R_5選自烷基、OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

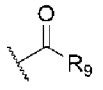
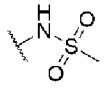
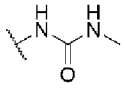
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

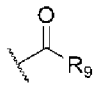
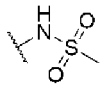
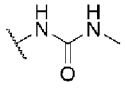
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

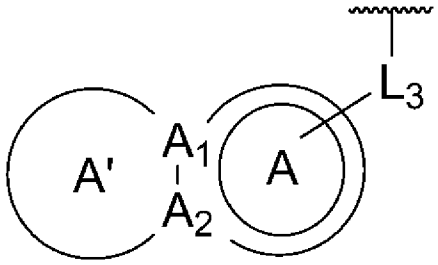
其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽

和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

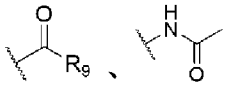
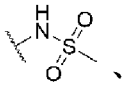
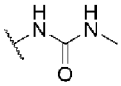
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

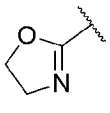
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0796】R_2可選自-C(=O)-$N(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-$S(=O)_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  ，其中：

R_4為H或小烷基，且

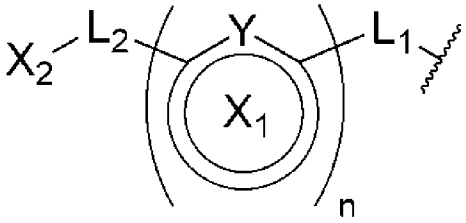
R_5選自烷基、OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

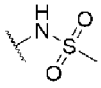
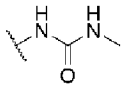
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

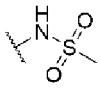
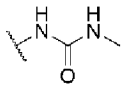
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

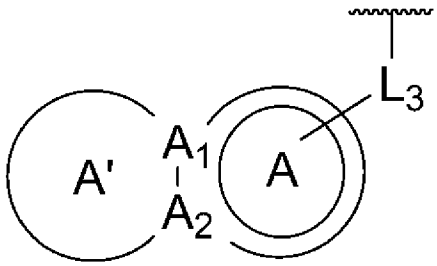
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

L_3為單鍵；

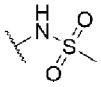
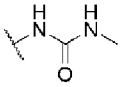
A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，

其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0797】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0798】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6 連接；且R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0799】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0800】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN；且R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0801】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN；且R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0802】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN；且R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0803】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN；且R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0804】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0805】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自 -C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0806】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由

雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

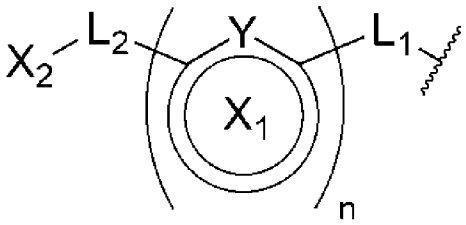
或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0807】 R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

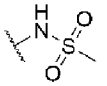
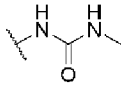
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及 -SO2-之連接基；且

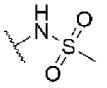
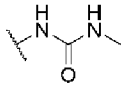
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

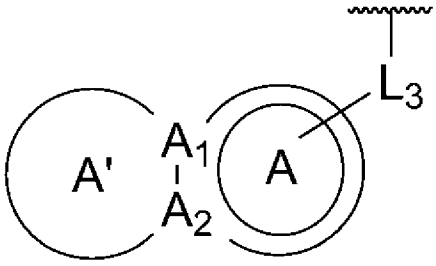
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}

在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

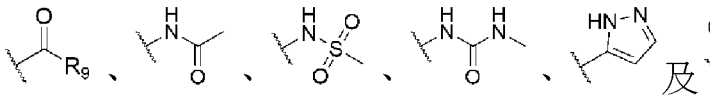
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

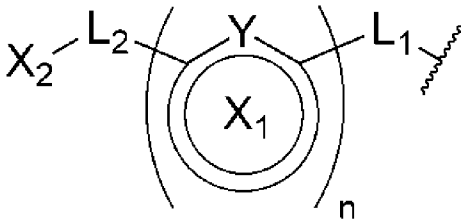
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0808】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

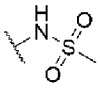
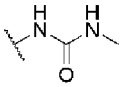
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

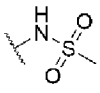
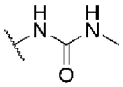
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

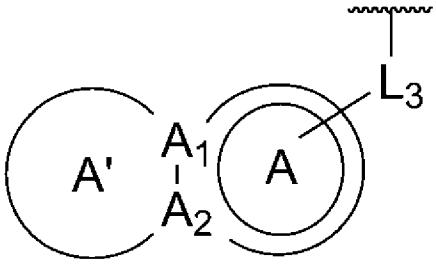
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

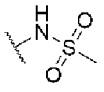
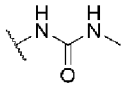
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

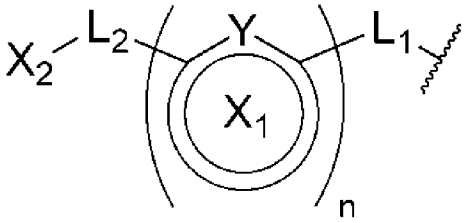
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0809】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-(CH_2)$_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

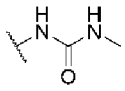
L_2為選自單鍵、-(CH_2)$_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及 -SO2-之連接基；且

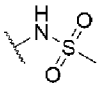
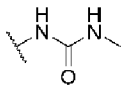
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

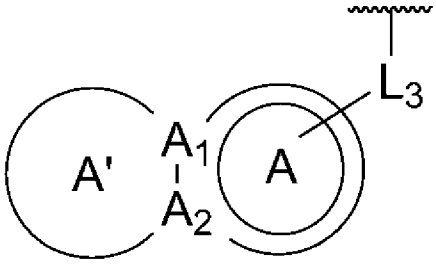
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

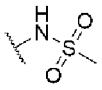
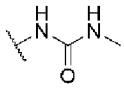
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

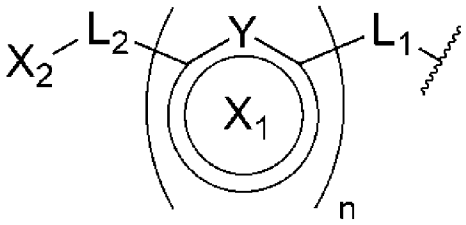
R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0810】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；且B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5

連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

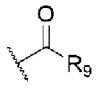
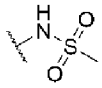
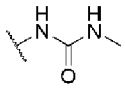
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及 -SO2-之連接基；且

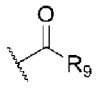
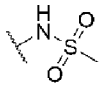
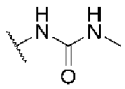
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

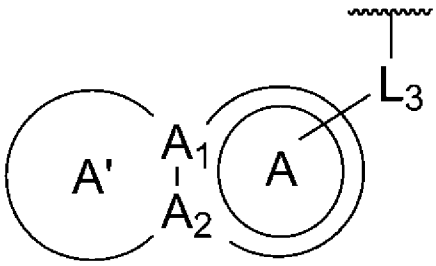
其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

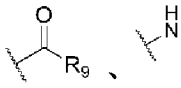
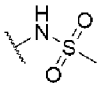
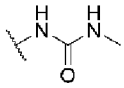
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

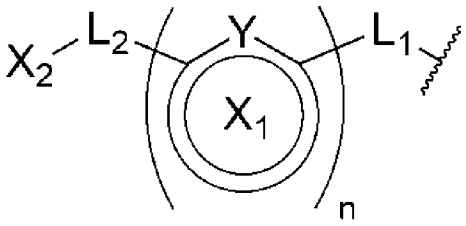
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0811】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

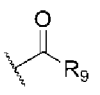
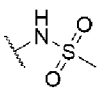
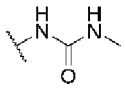
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及 -SO2-之連接基；且

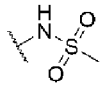
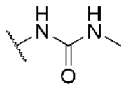
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

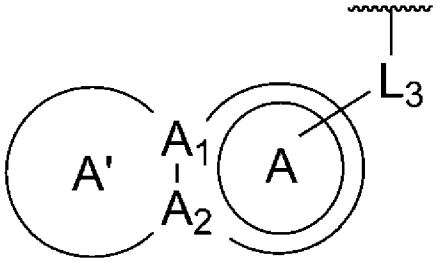
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

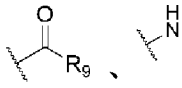
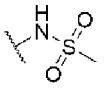
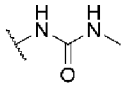
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

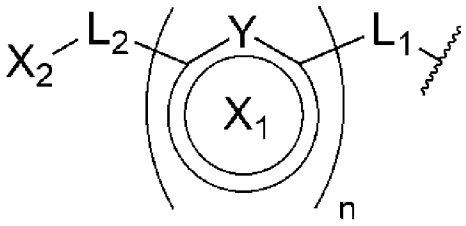
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0812】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自 -C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

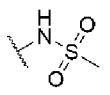
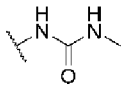
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及 -SO2-之連接基；且

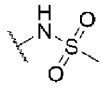
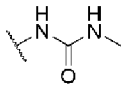
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

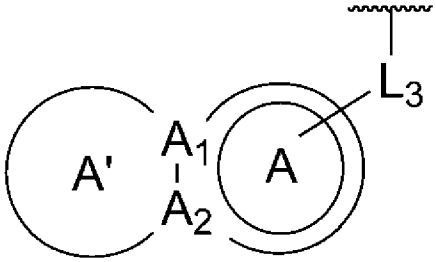
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

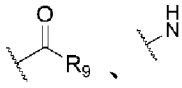
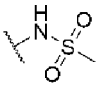
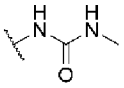
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

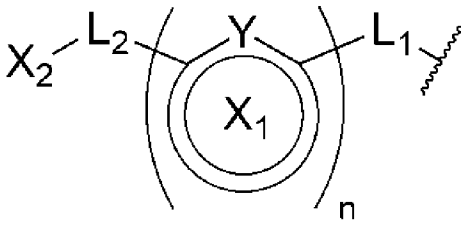
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0813】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

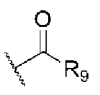
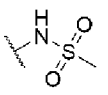
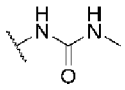
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

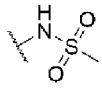
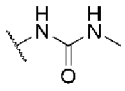
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

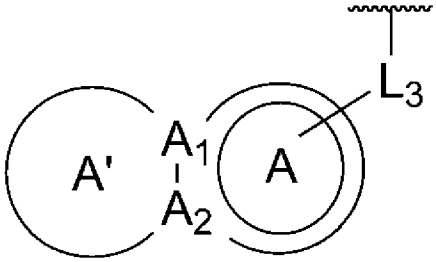
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

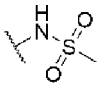
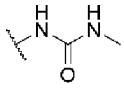
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

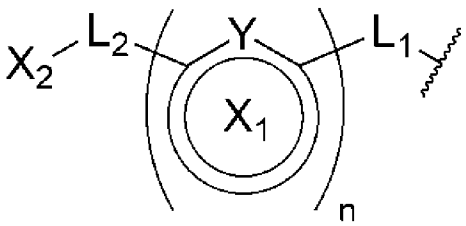
或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

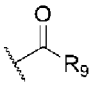
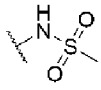
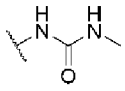
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及 -SO2-之連接基；且

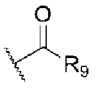
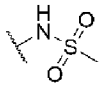
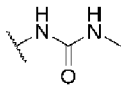
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

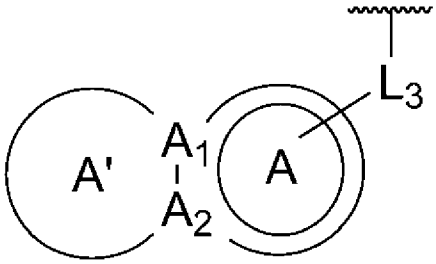
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}

獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

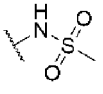
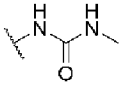
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由雙鍵與B_2連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

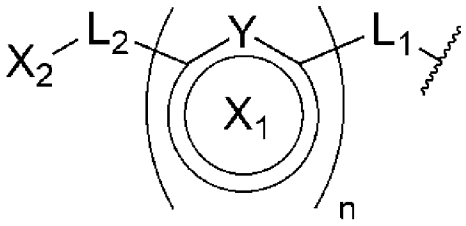
R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

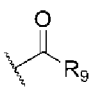
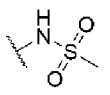
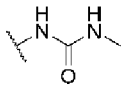
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及 -SO2-之連接基；且

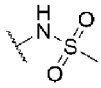
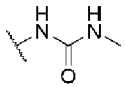
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

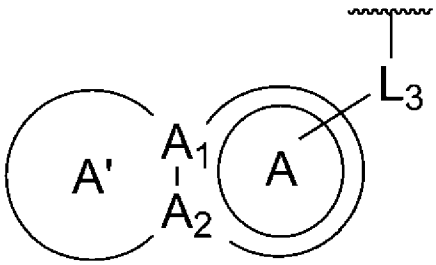
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

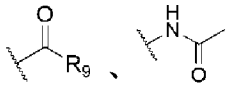
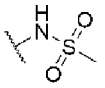
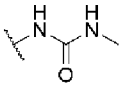
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0814】 B_4可為N(R_2)，B_5可為N，且B_6可為C(R_3)，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

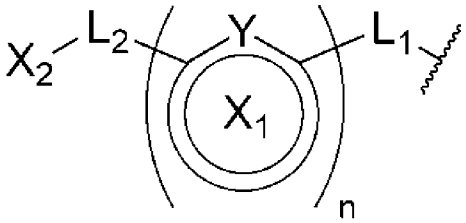
R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

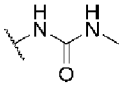
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及 -SO2-之連接基；且

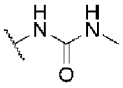
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

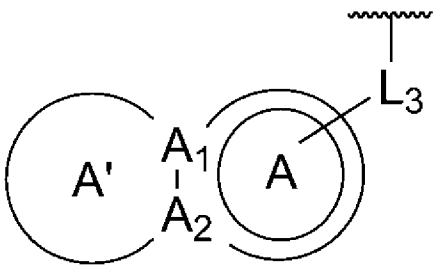
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

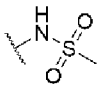
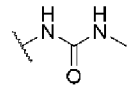
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0815】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，或B_1可為氮中心且B_2可為碳中心，其中B_1經由

雙鍵與B_2連接；B_4可為$N(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$C(R_3)$，其中B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接，或B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

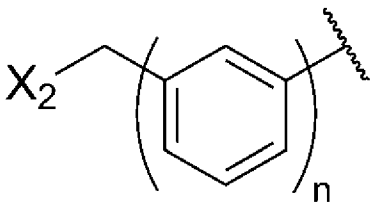
R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-(CH_2)$_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

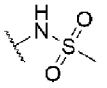
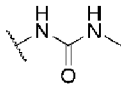
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及 -SO2-之連接基；且

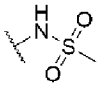
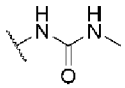
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

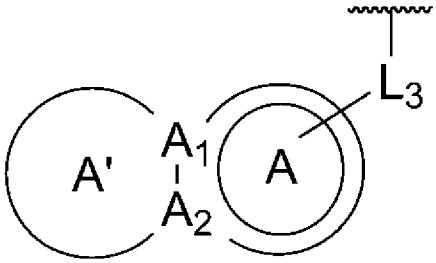
其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

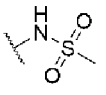
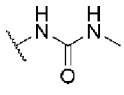
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及

R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0816】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

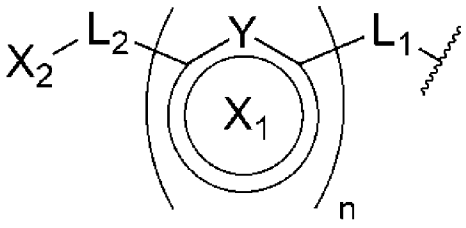
R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIb)，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

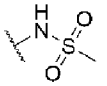
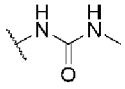
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

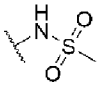
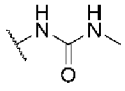
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

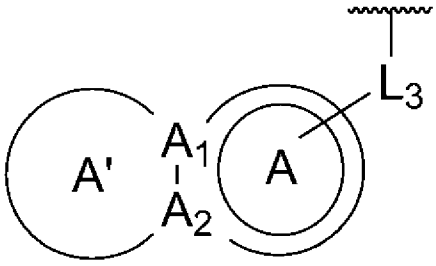
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}

在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

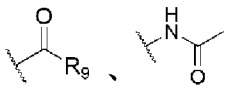
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【0817】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，且R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0818】 B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接，且R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0819】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0820】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；且R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0821】 B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；且R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0822】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中

B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；且R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0823】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0824】 B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0825】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

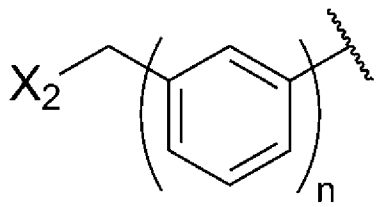
R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0826】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

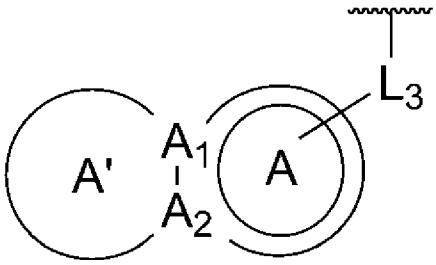
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

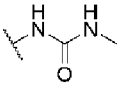
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

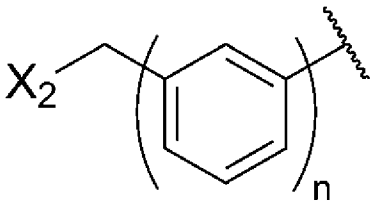
其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0827】 B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

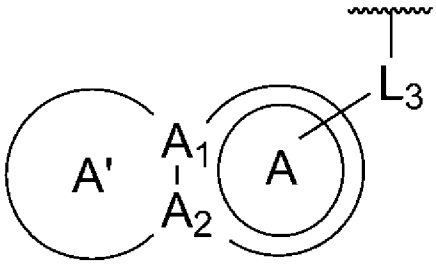
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

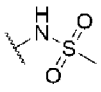
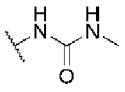
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

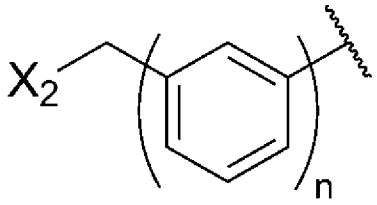
其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0828】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，且B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

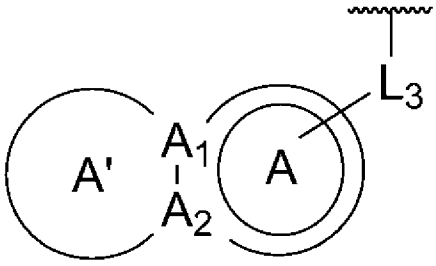
n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況

下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

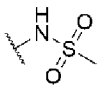
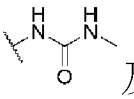
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其

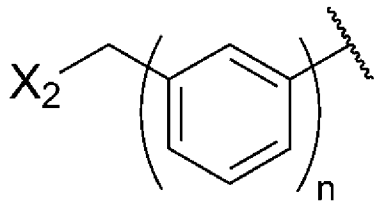
他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0829】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

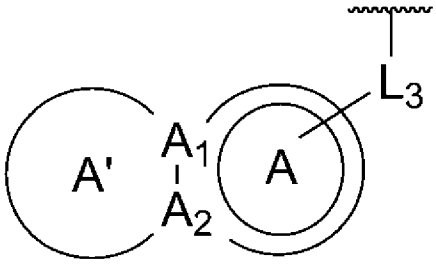
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

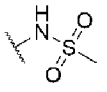
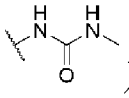
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

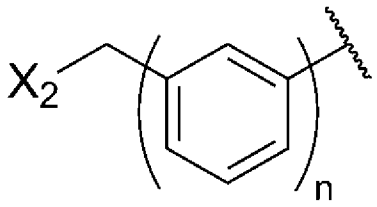
其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0830】 B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

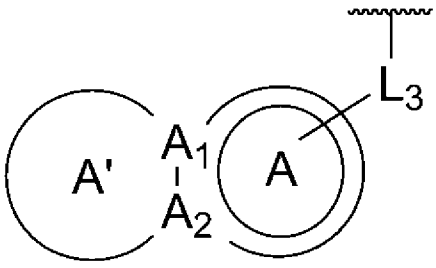
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

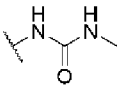
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

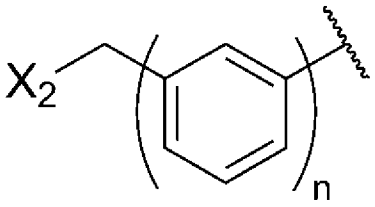
R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0831】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2可選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-O-CH_3$及-CN；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

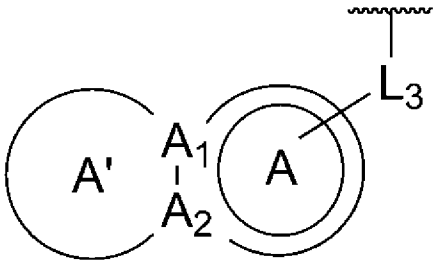
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

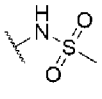
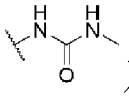
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0832】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

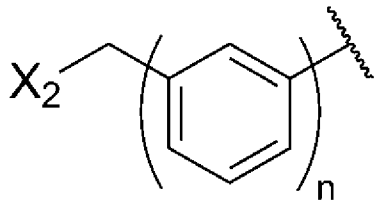
R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

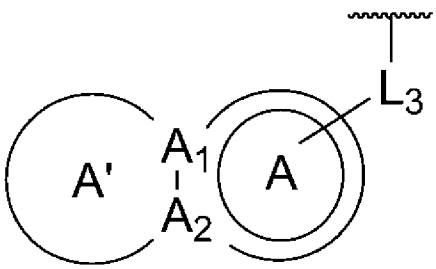
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

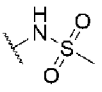
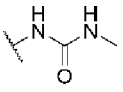
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0833】 B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

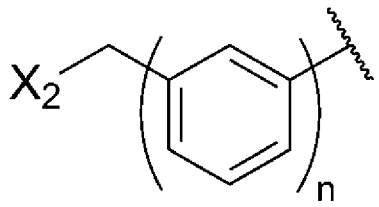
R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

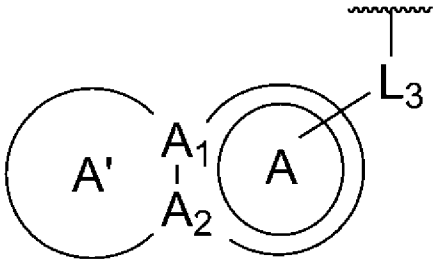
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

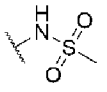
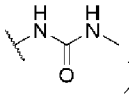
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2可選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-O-CH_3$及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

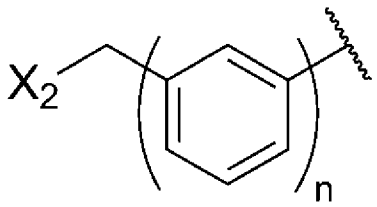
R_5選自烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及$-(CH_2)$-苯基；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

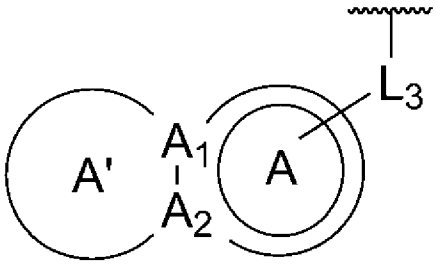
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

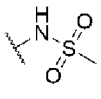
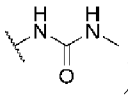
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0834】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；且R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0835】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

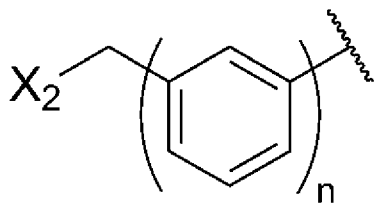
或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0836】 R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

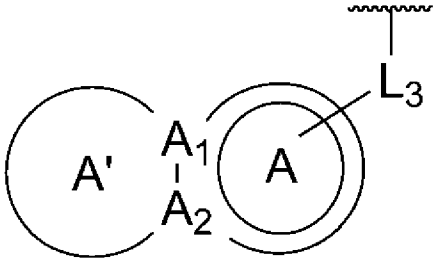
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

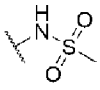
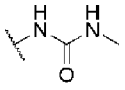
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

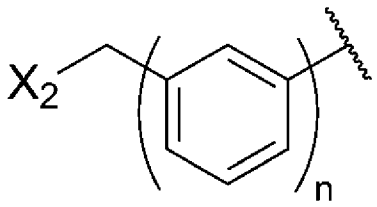
其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0837】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

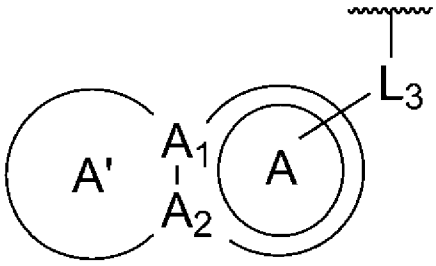
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

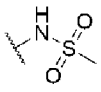
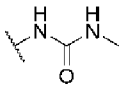
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

【0838】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

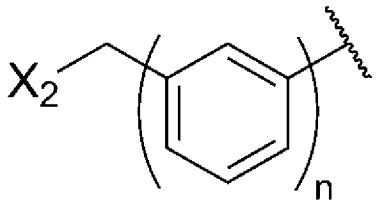
R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

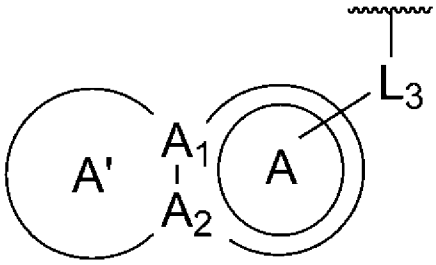
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

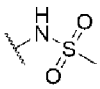
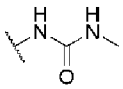
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

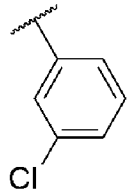
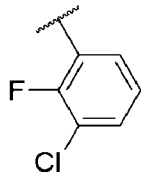
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

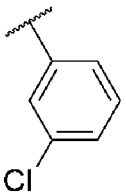
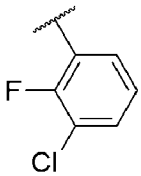
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

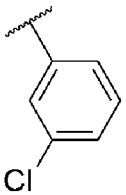
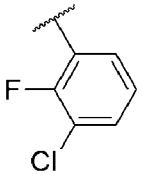
其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

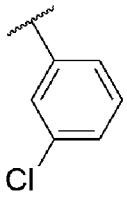
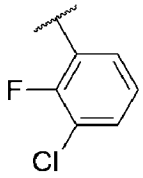
其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

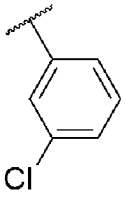
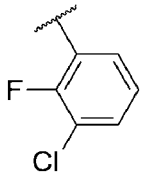
R_3可為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

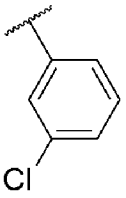
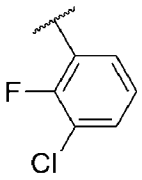
【0839】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，且R_3可選自：  及  。

【0840】 B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接，且R_3可選自：  及  。

【0841】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；且R_3可選自：  及  。

【0842】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；且R_3可選自：  及  。

【0843】 B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；且R_3可選自：  及  。

【0844】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；R_3可選自：  及  。

【0845】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；

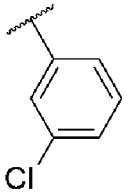
R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

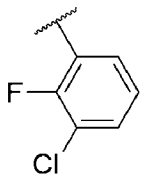
R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_3可選自： 

及 

。

B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

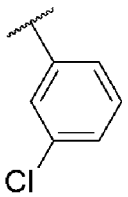
R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

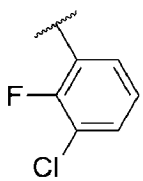
R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_3可選自： 

及 

。

【0846】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

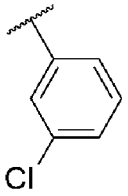
R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

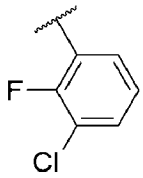
R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_3可選自： 

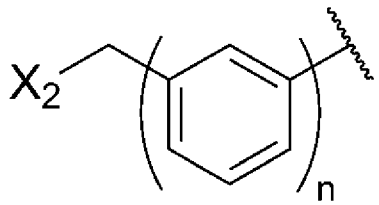
及 

。

B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

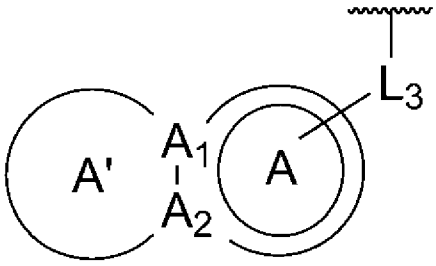
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

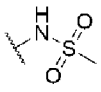
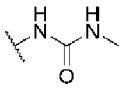
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

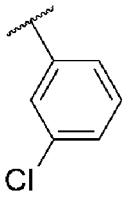
其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

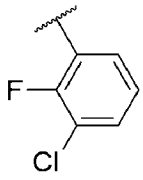
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可選自： 

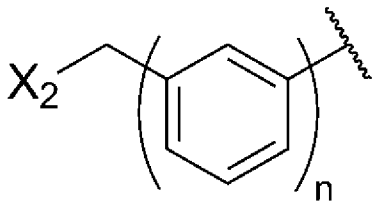
及 

。

【0847】 B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

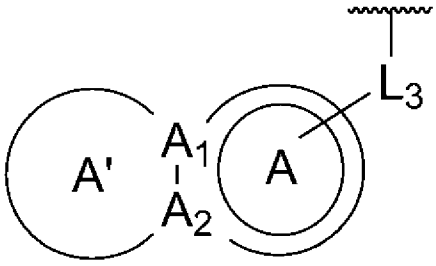
n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況

下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

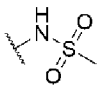
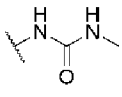
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

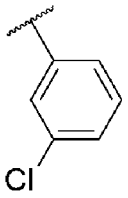
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

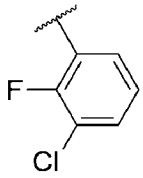
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其

他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可選自： 

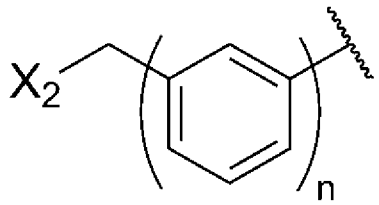
及 

。

【0848】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接，且B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

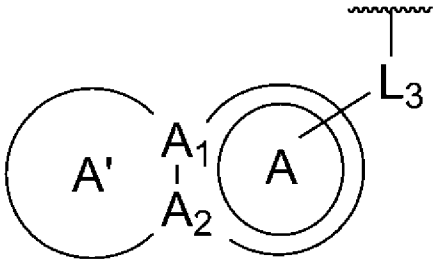
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

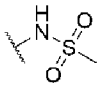
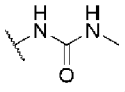
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

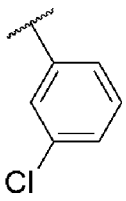
其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

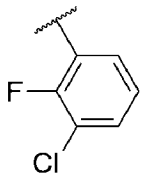
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可選自： 

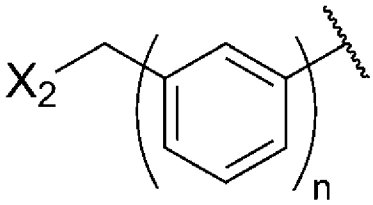
及 

。

B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

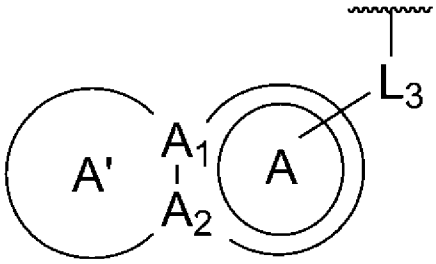
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

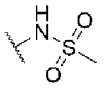
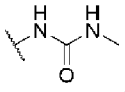
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

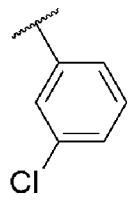
其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

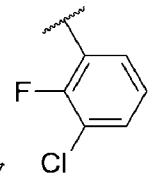
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可選自： 

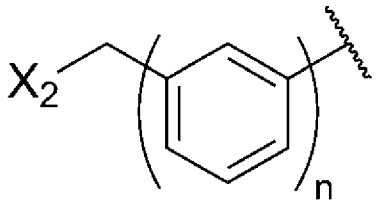
及 

。

B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

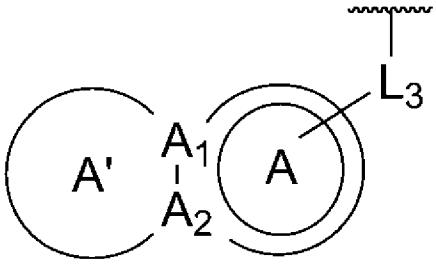
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

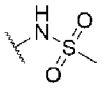
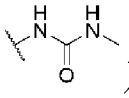
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

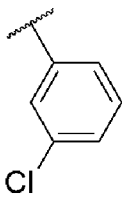
其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

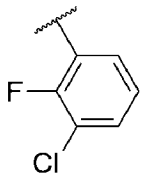
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可選自： 

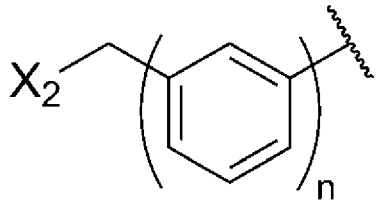
及 

。

【0849】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；B_4可為$C(R_2)$，B_5可為N，且B_6可為$N(R_3)$，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

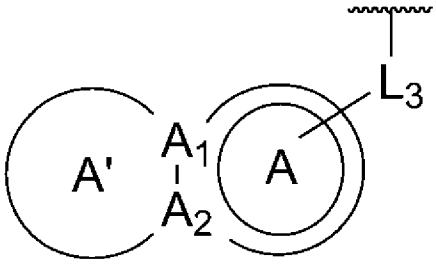
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

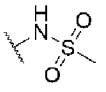
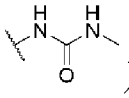
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

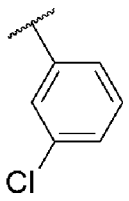
其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

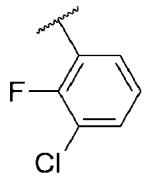
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可選自： 

及 

。

【0850】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

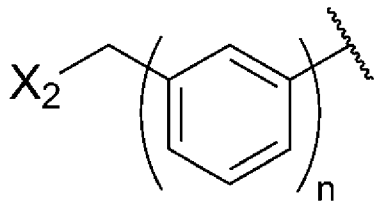
R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

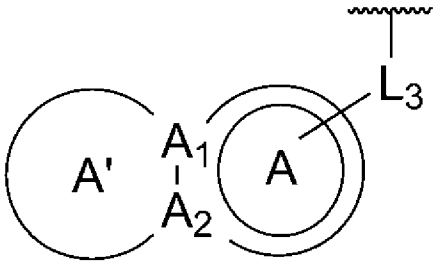
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

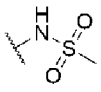
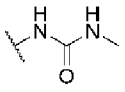
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

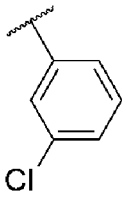
其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

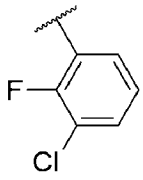
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可選自： 

及 

。

【0851】 B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

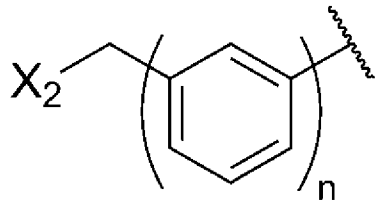
R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

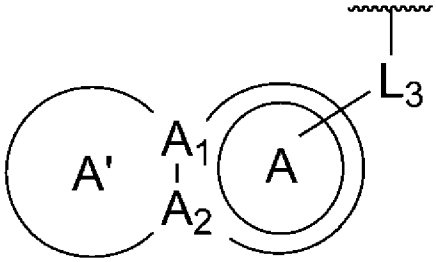
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

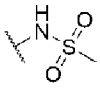
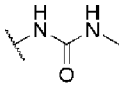
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

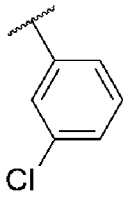
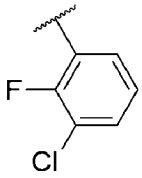
其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可選自：  及  。

【0852】 B_1可為碳中心且B_2可為碳中心，其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵且B_1經由單鍵與B_2連接；B_4可為C(R_2)，B_5可為N，且B_6可為N(R_3)，其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

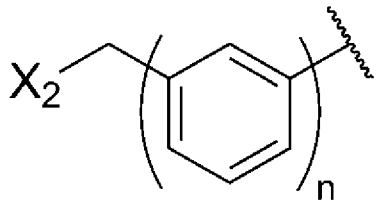
R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

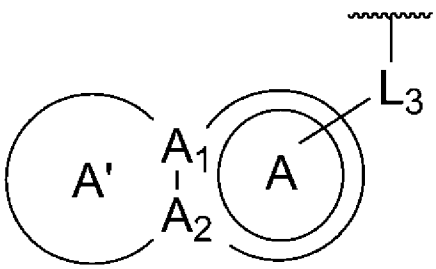
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

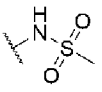
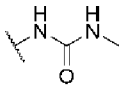
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

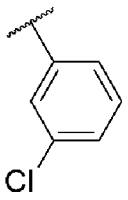
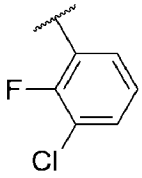
其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

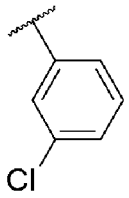
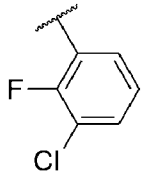
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可選自：  及  。

【0853】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；且R_3可選自：  及  。

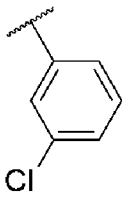
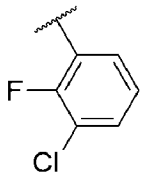
【0854】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

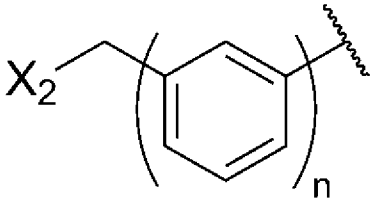
或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；且

R_3可選自：  及  。

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

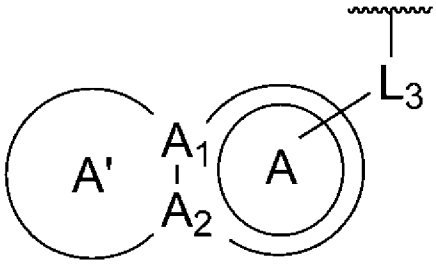
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

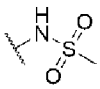
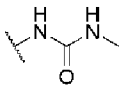
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

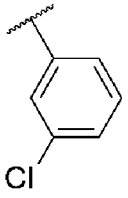
其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

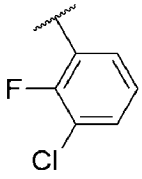
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可選自： 

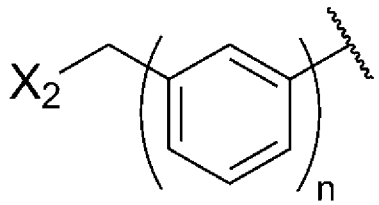
及 

。

【0855】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

其中：

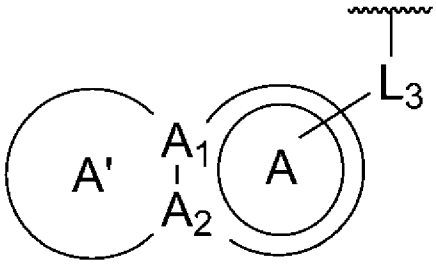
n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況

下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

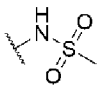
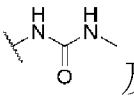
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

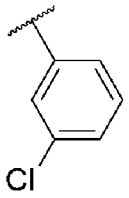
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

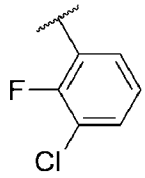
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其

他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可選自： 

及 

。

【0856】 R_2可選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN，其中：

R_4為H或小烷基，且

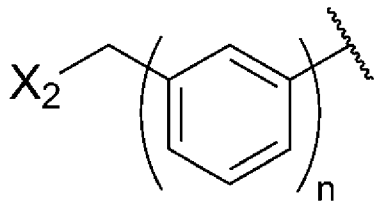
R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或R_4及R_5與其所連接之氮原子一起可形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6為H、小烷基及-(CH_2)-苯基；

R_1可為：

(i) 式(IIa)，



式(IIa)，

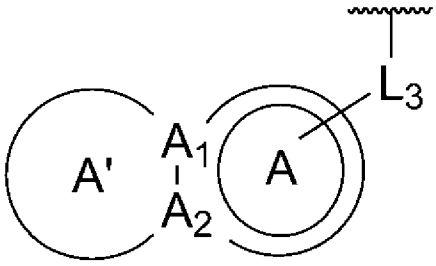
其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

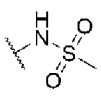
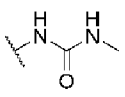
L_3為單鍵；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

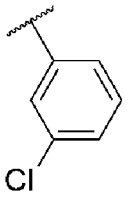
其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

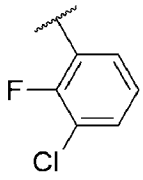
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3可選自： 

及 

。

【0857】該化合物或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物可抑制FXIIa。

【0858】FXIIa抑制作用可藉由下文所闡述之分析來確定(「生物學方法」章節中之「確定FXIIa抑制作用」，亦即，使用基於標準文獻方法之IC_{50}分析(參見例如Baeriswyl等人, ACS Chem. Biol., 2015, 10 (8) 1861；Bouckaert當然, European Journal of Medicinal Chemistry 110 (2016) 181))，諸如表7中所提供之資料。藉由確定IC_{50} (nM)來量測FXIIa抑制作用。

【0859】該化合物或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物可以<40,000 nM之IC50值抑制FXIIa。

【0860】該化合物或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物可以<10,000 nM之IC50值抑制FXIIa。

【0861】該化合物或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物可以<3,000 nM之IC50值抑制FXIIa。

【0862】該化合物或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物可以<1,000 nM之IC50值抑制FXIIa。

【0863】該化合物或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物可以<300 nM之IC50值抑制FXIIa。

【0864】該化合物或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物可以<100 nM之IC50值抑制FXIIa。

【0865】與任何其他絲胺酸蛋白酶之抑制作用相比，該化合物或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物可選擇性地抑制FXIIa。

【0866】應理解，與其他絲胺酸蛋白酶之抑制作用相比，選擇性地抑制FXIIa意謂FXIIa抑制作用之IC50低於任何其他絲胺酸蛋白酶之抑制作用之IC50。

【0867】與PKal、KLK1、纖溶酶、FXa、FXIa或凝血酶中任一者之抑制作用相比，該化合物或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物可選擇性地抑制FXIIa。

【0868】 應理解，與PKal、KLK1、纖溶酶、FXa、FXIa或凝血酶中任一者之抑制作用相比，選擇性地抑制FXIIa意謂FXIIa抑制作用之IC50低於PKal、KLK1、纖溶酶、FXa、FXIa或凝血酶中任一者之抑制作用之IC50。

【0869】 PKal、KLK1、纖溶酶、FXa、FXIa或凝血酶中任一者之抑制作用可藉由下文所闡述之分析來確定(「生物學方法」章節中之「確定相關蛋白酶抑制作用」，亦即，使用基於標準文獻方法之IC_{50}分析(參見例如Shori等人, Biochem. Pharmacol., 1992,43, 1209；Bouckaert等人, European Journal of Medicinal Chemistry 110 (2016) 181))，諸如表8中所提供之資料。藉由確定IC_{50} (nM)來量測PKal、KLK1、纖溶酶、FXa、FXIa或凝血酶中任一者之抑制作用。

【0870】 與FXa抑制作用相比，該化合物或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物可選擇性地抑制FXIIa。

【0871】 與FXa抑制作用相比，該化合物或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物對FXIIa抑制作用之選擇性可為至少10倍。

【0872】 與FXa抑制作用相比，該化合物或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物對FXIIa抑制作用之選擇性可為至少100倍。

【0873】 與FXa抑制作用相比，該化合物或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類

似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物對FXIIa抑制作用之選擇性可為至少1,000倍。

【0874】 與FXa抑制作用相比，該化合物或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物對FXIIa抑制作用之選擇性可為至少10,000倍。

【0875】 更特定言之，本發明提供選自表1a、表1b、表1c、表1d、表2a、表2b、表2c、表2d、表3a、表3b、表3c、表3d及表4之式(I)化合物，或其醫藥學上可接受之鹽、溶劑合物或鹽之溶劑合物。

【0876】 本發明提供選自表1a、表1b、表1c、表2a、表2b、表2c、表3a、表3b、表3c及表4之式(I)化合物，或其醫藥學上可接受之鹽、溶劑合物或鹽之溶劑合物。

【0877】 本發明亦提供選自表1a、表1b、表2a、表2b、表3a、表3b及表4之式(I)化合物，或其醫藥學上可接受之鹽、溶劑合物或鹽之溶劑合物。

【0878】 本發明亦提供選自表1a、表2a及表3a之式(I)化合物，或其醫藥學上可接受之鹽、溶劑合物或鹽之溶劑合物。

【0879】 對於下表1a、表1b、表1c、表2a、表2b、表3a、表3b、表3c及表4中所提供之化合物，當指明立體化學時，該化合物意欲涵蓋其所有可能之立體異構物。

【0880】 因此，本發明提供下表1a中之化合物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。因此，本發明亦提供下表1a中之化合物的立體異構物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0881】因此，本發明提供下表1b中之化合物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。因此，本發明亦提供下表1b中之化合物的立體異構物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0882】因此，本發明提供下表1c中之化合物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。因此，本發明亦提供下表1c中之化合物的立體異構物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0883】因此，本發明提供下表1d中之化合物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。因此，本發明亦提供下表1d中之化合物的立體異構物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0884】因此，本發明提供下表2a中之化合物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。因此，本發明亦提供下表2a中之化合物的立體異構物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0885】因此，本發明提供下表2b中之化合物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。因此，本發明亦提供下表2b中之化合物的立體異構物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0886】因此，本發明提供下表2c中之化合物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。因此，本發明亦提供下表2c中之化合物的立體異構物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0887】因此，本發明提供下表2d中之化合物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。因此，本發明亦提供下表2d中之化合物的立體異構物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0888】因此，本發明提供下表3a中之化合物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。因此，本發明亦提供下表3a中之化合物的立體異構物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

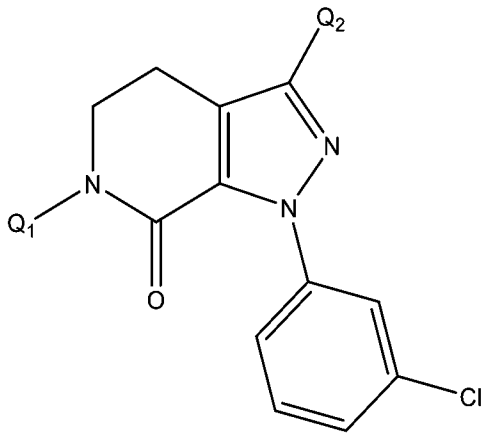
【0889】因此，本發明提供下表3b中之化合物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。因此，本發明亦提供下表3b中之化合物的立體異構物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

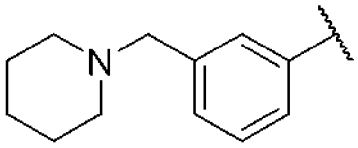
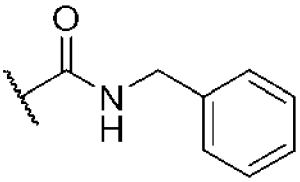
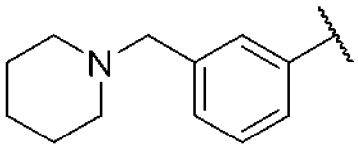
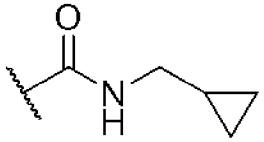
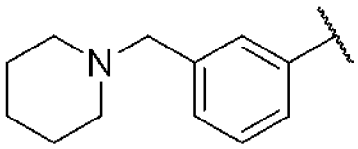
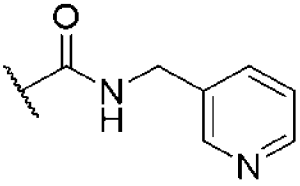
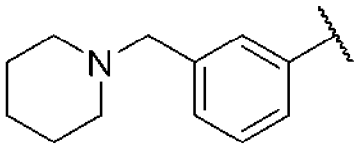
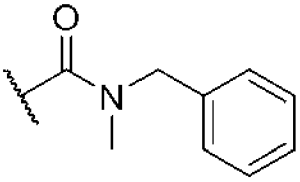
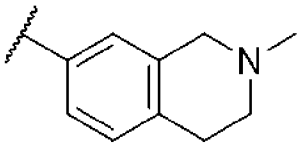
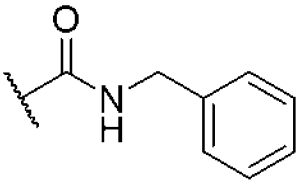
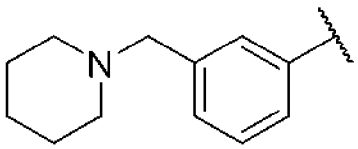
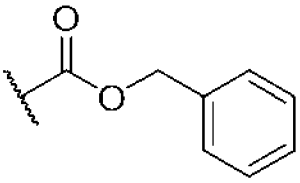
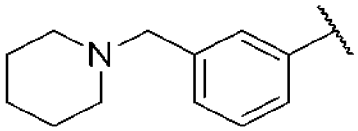
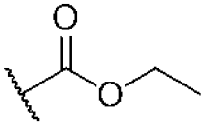
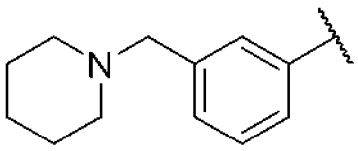
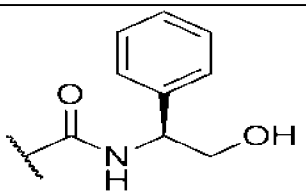
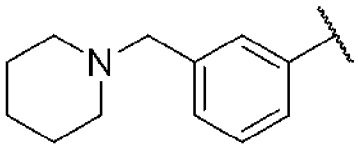
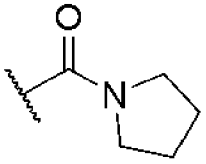
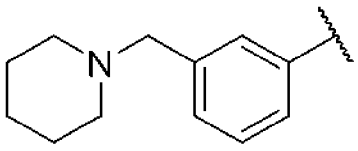
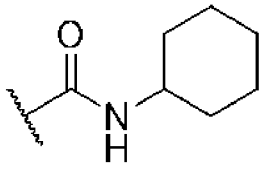
【0890】因此，本發明提供下表3c中之化合物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。因此，本發明亦提供下表3c中之化合物的立體異構物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

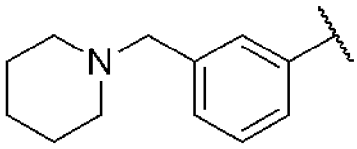
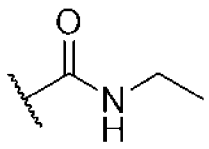
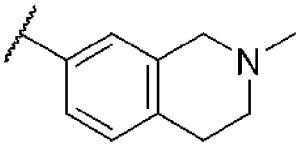
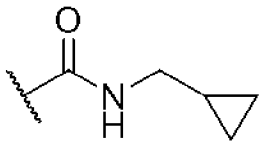
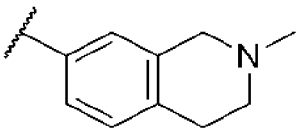
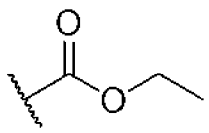
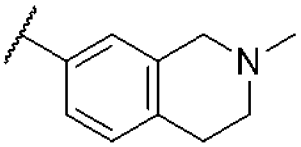
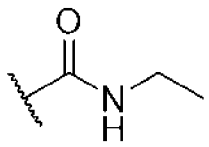
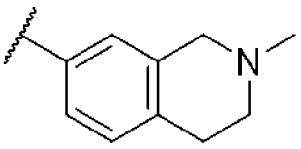
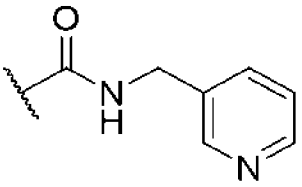
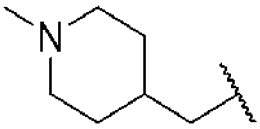
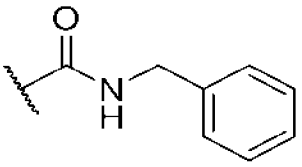
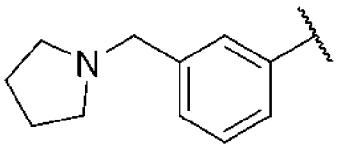
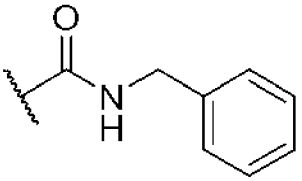
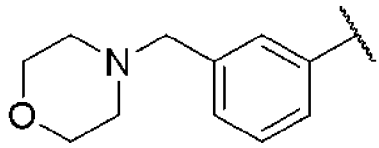
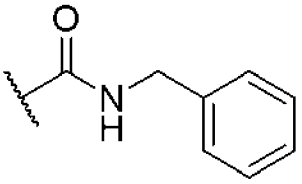
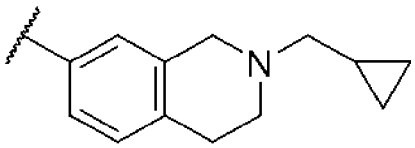
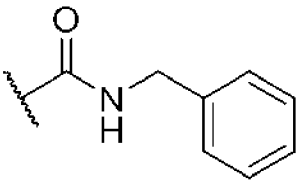
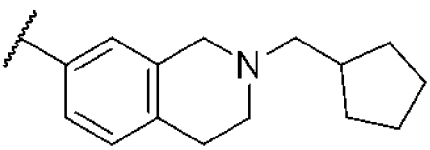
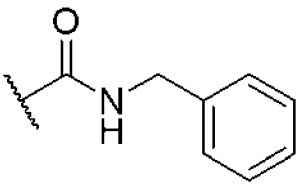
【0891】因此，本發明提供下表3d中之化合物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。因此，本發明亦提供下表3d中之化合物的立體異構物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

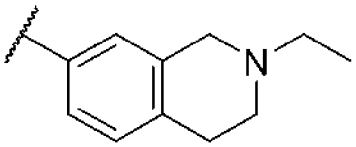
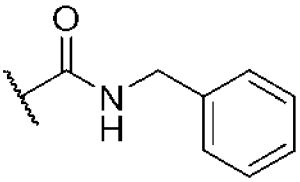
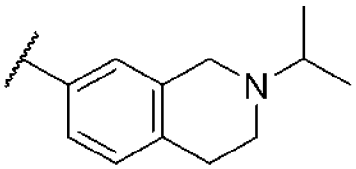
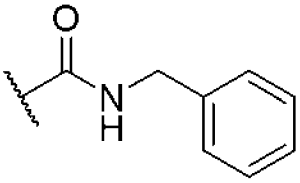
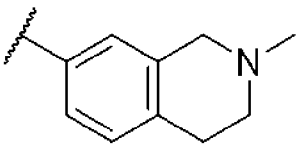
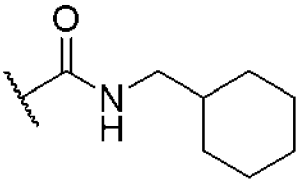
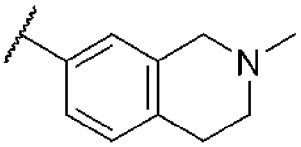
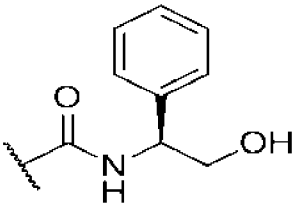
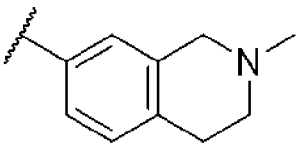
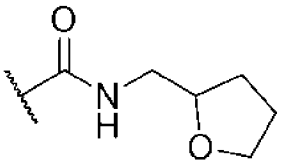
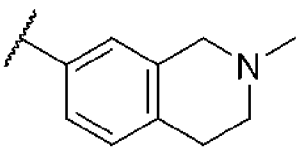
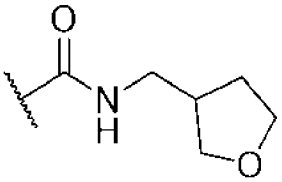
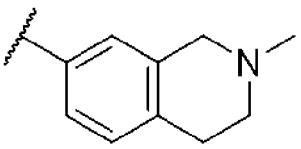
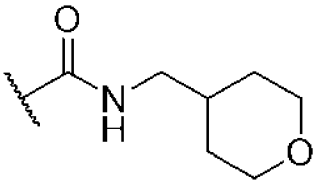
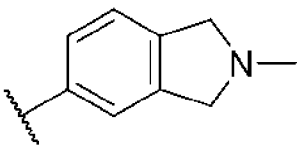
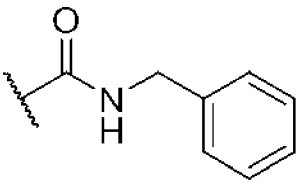
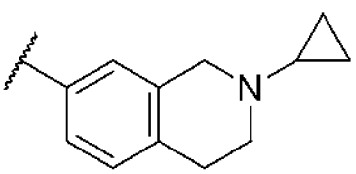
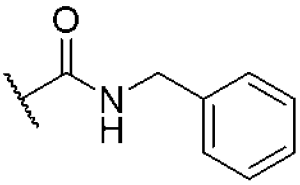
【0892】因此，本發明提供下表4中之化合物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。因此，本發明亦提供下表4中之化合物的立體異構物及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

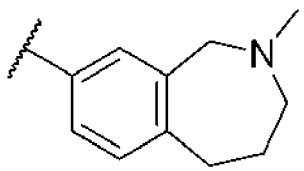
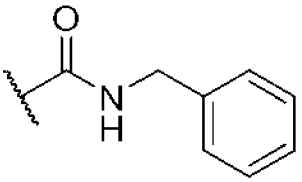
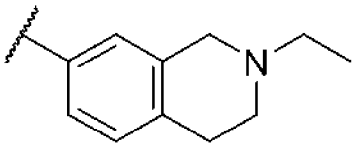
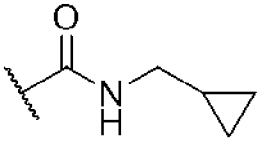
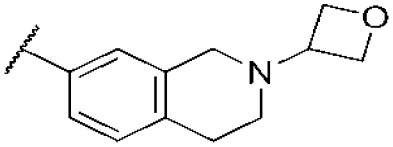
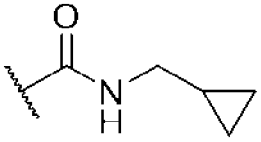
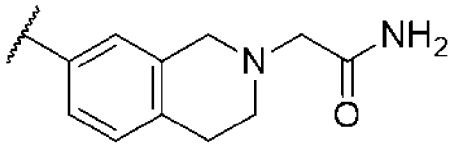
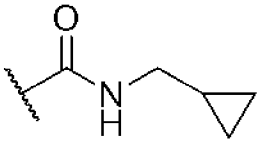
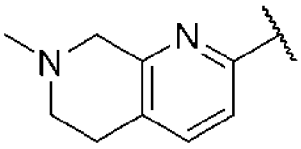
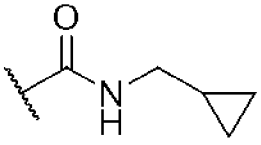
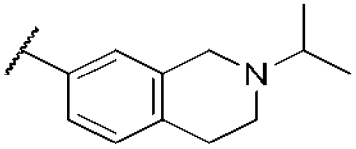
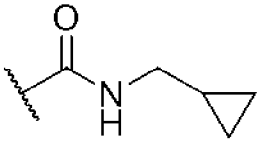
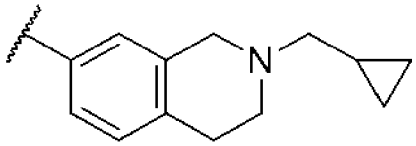
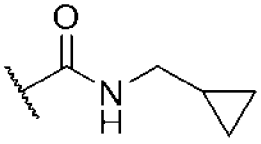
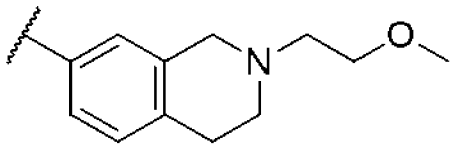
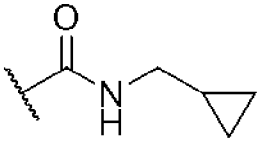
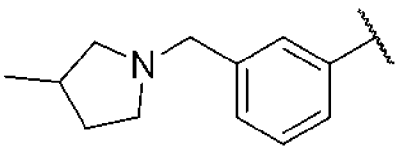
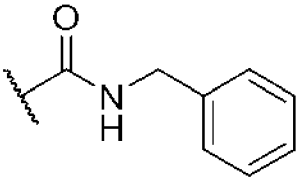
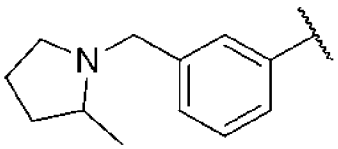
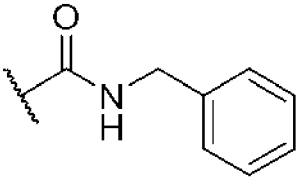
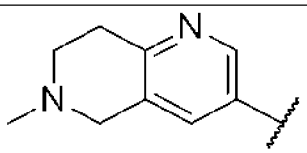
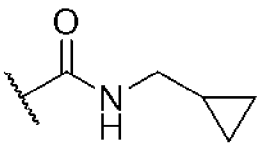
表1a

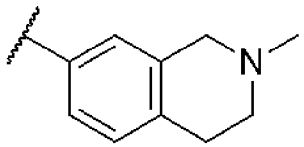
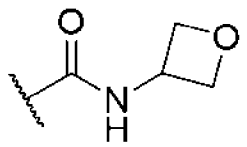
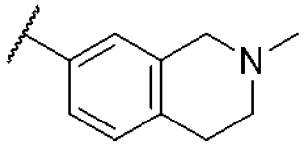
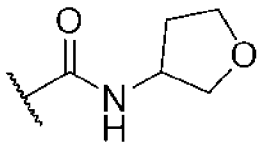
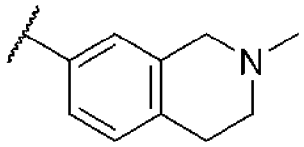
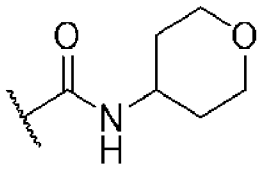
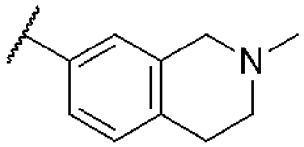
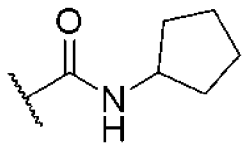
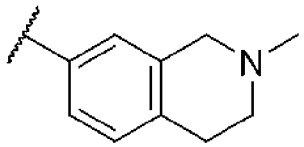
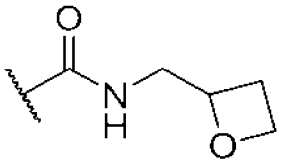
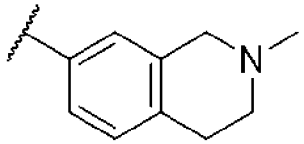
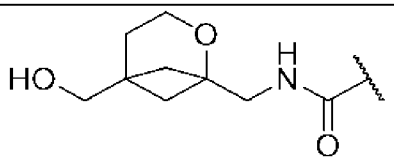
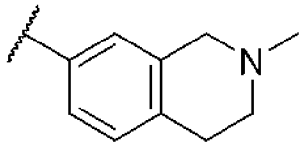
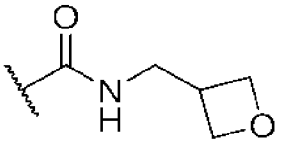
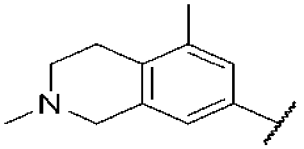
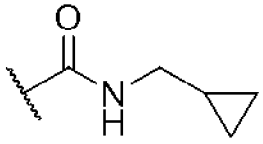
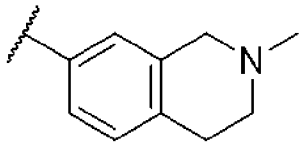
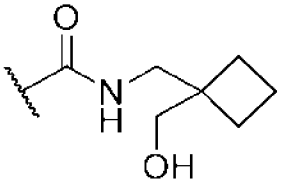
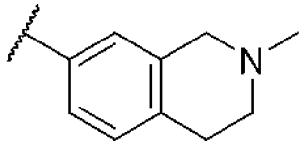
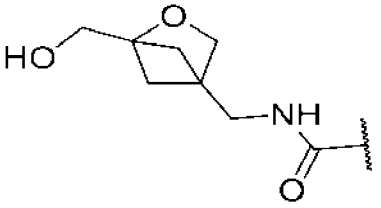
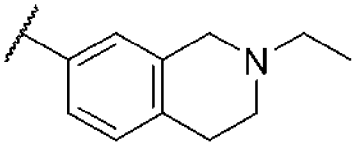
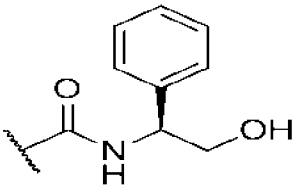


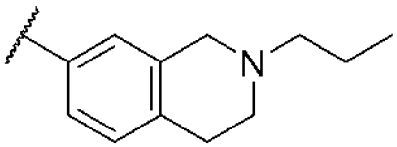
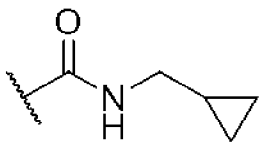
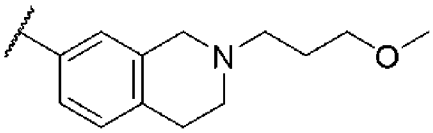
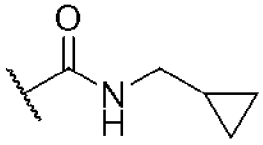
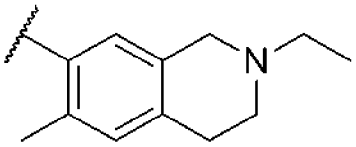
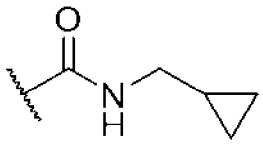
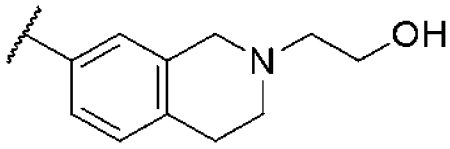
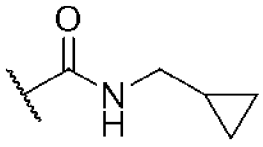
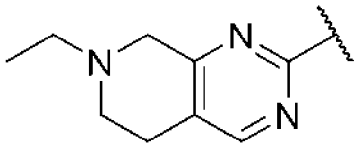
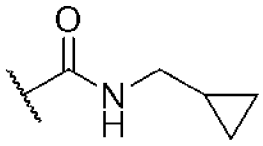
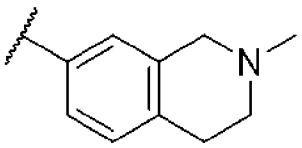
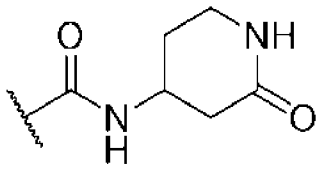
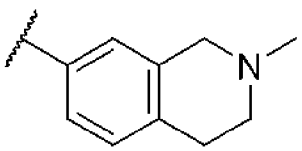
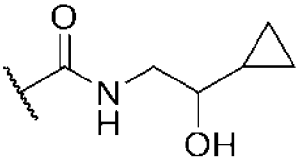
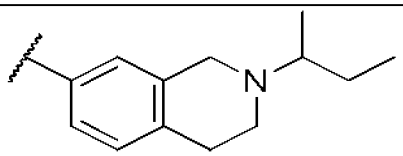
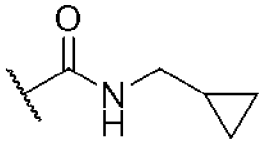
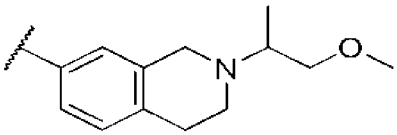
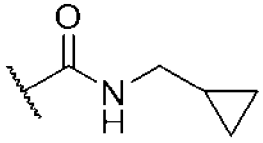
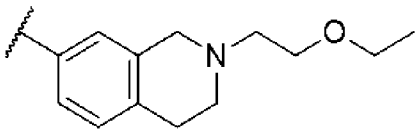
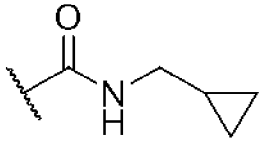
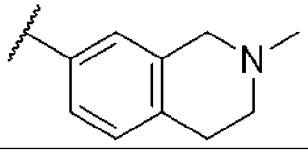
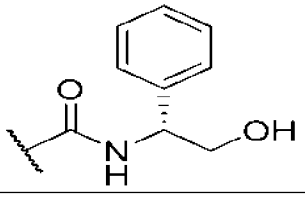
實例編號	Q1	Q2
1001		
1002		
1003		
1004		
1005		
1006		
1007		
1008		
1009		
1010		

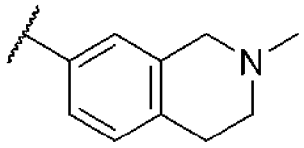
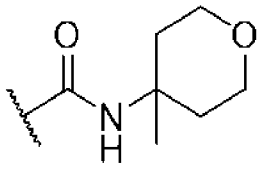
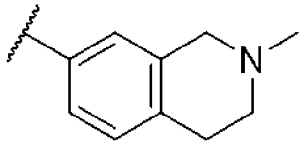
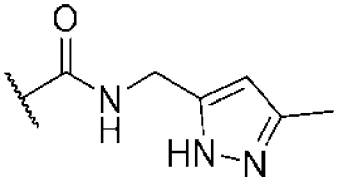
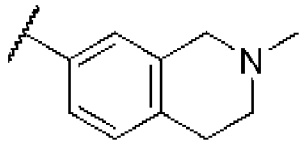
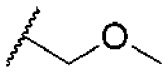
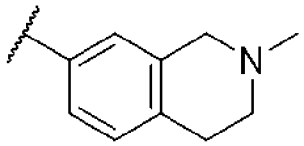
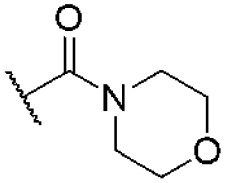
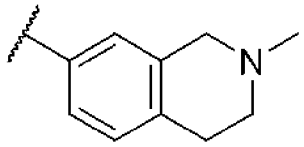
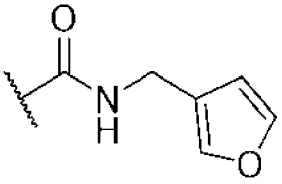
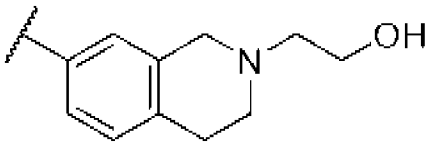
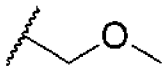
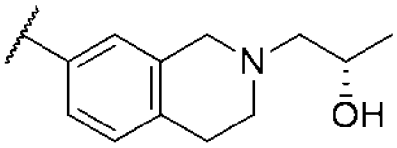
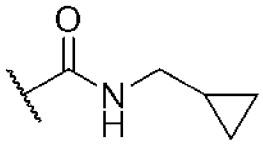
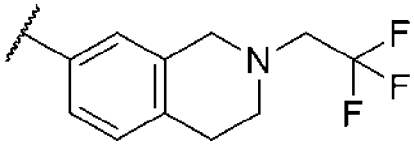
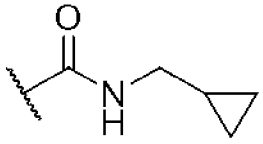
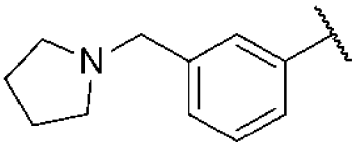
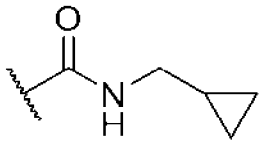
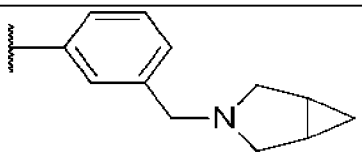
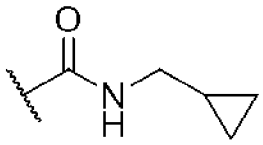
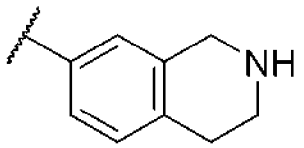
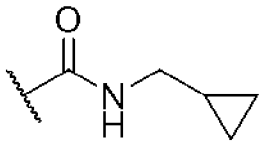
1011		
1012		
1013		
1014		
1015		
1016		
1017		
1018		
1019		
1020		

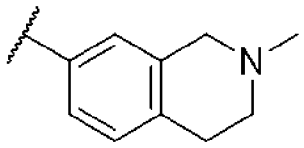
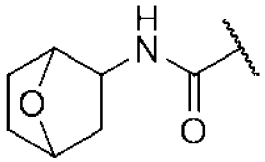
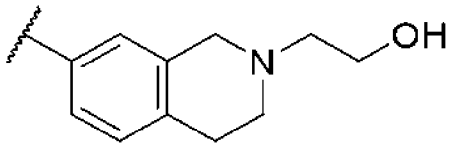
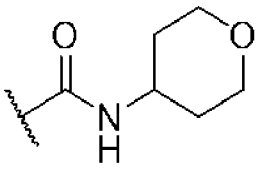
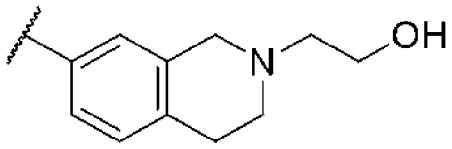
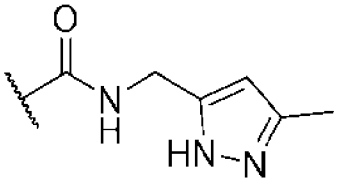
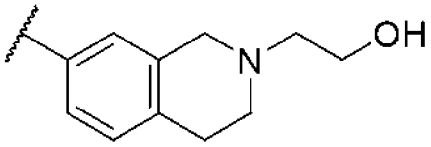
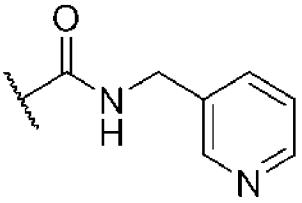
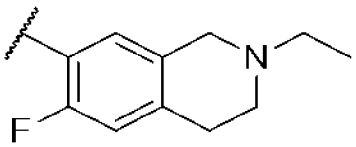
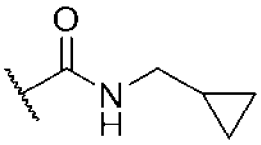
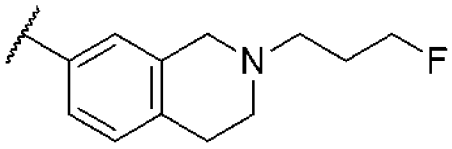
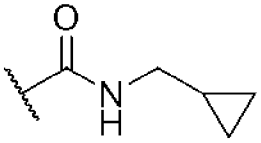
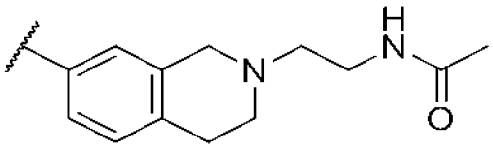
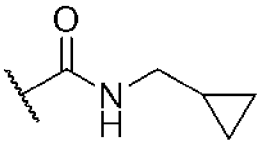
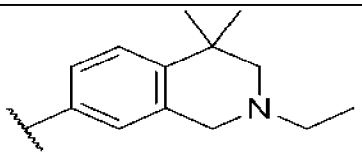
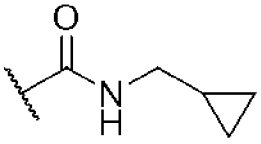
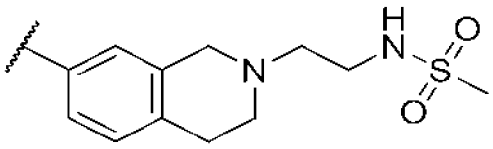
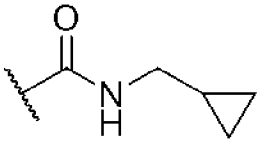
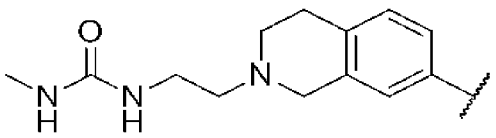
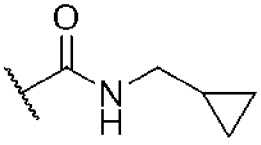
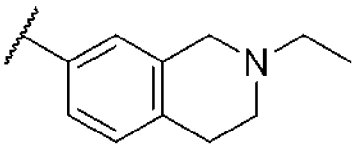
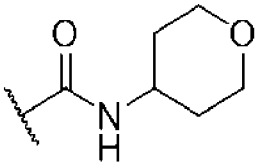
1021		
1022		
1023		
1024		
1025		
1026		
1027		
1028		
1029		

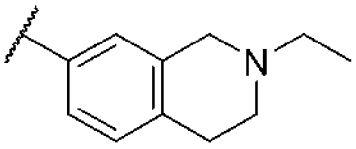
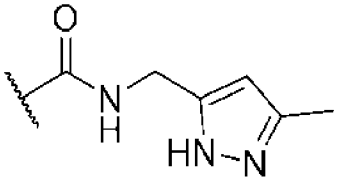
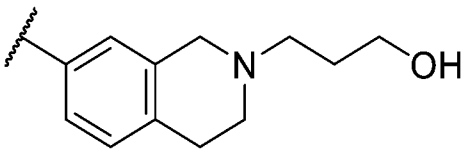
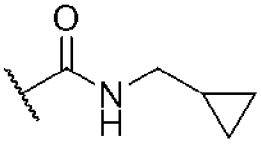
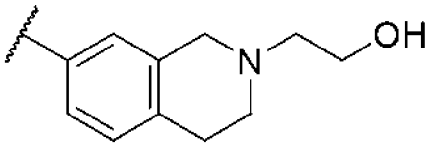
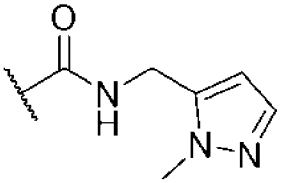
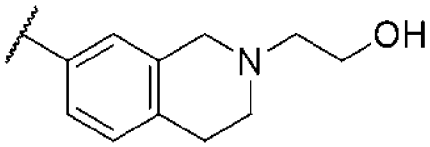
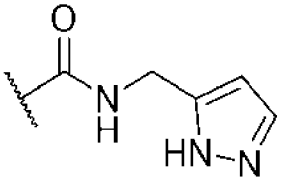
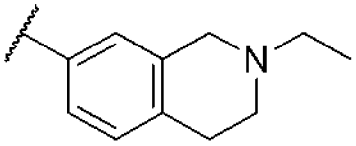
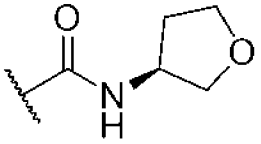
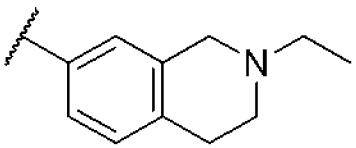
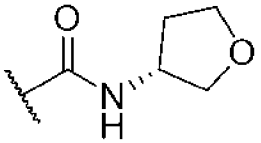
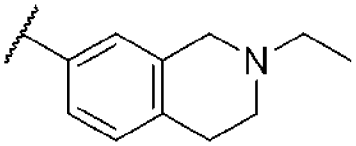
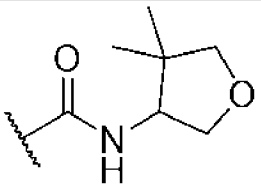
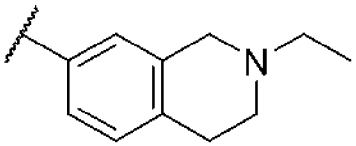
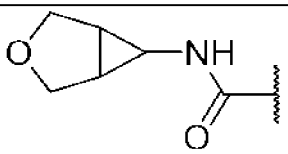
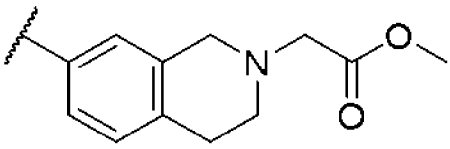
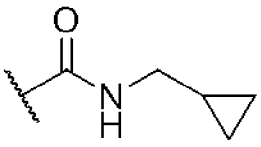
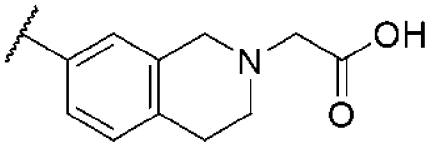
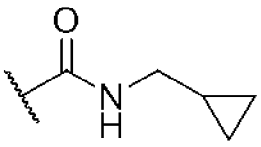
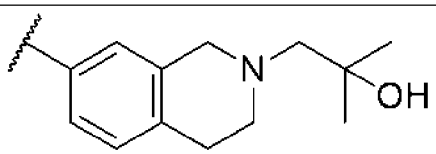
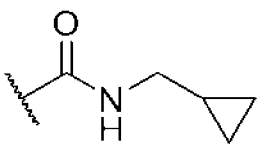
1030		
1031		
1032		
1033		
1034		
1035		
1036		
1037		
1038		
1039		
1040		

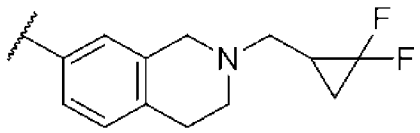
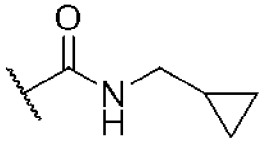
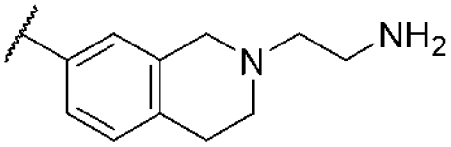
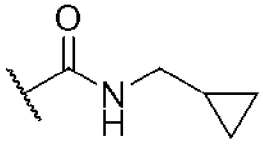
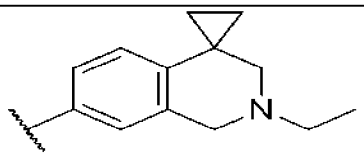
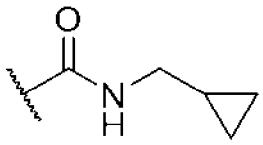
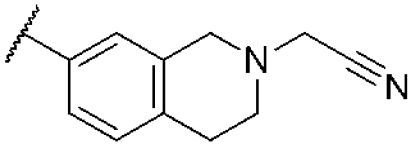
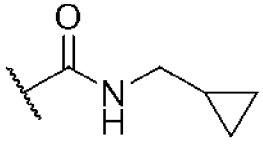
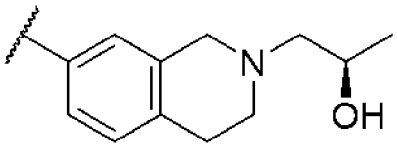
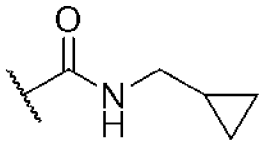
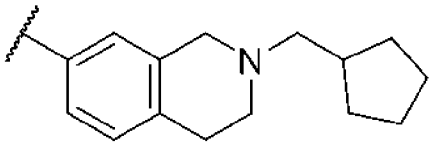
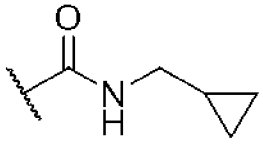
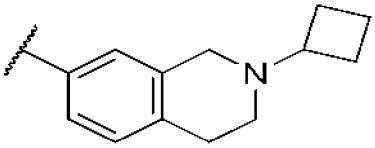
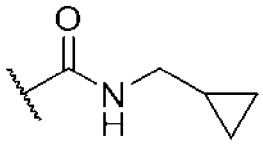
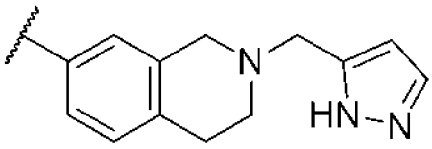
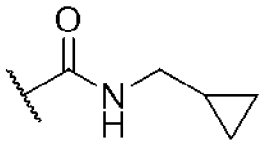
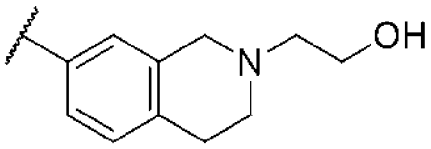
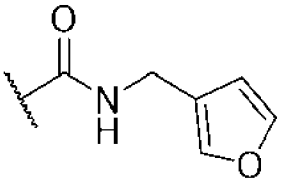
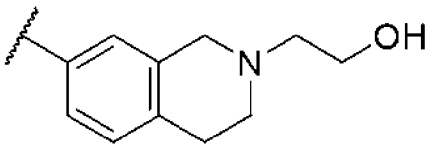
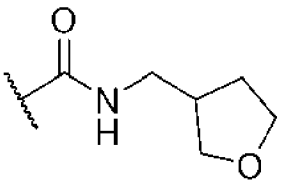
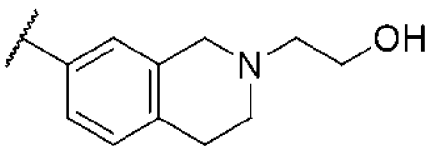
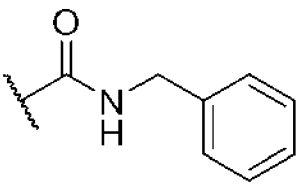
1041		
1042		
1043		
1044		
1045		
1046		
1047		
1048		
1049		
1050		
1051		

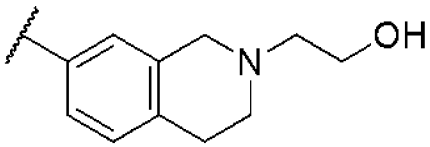
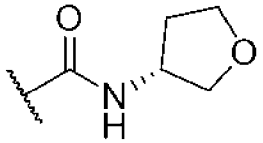
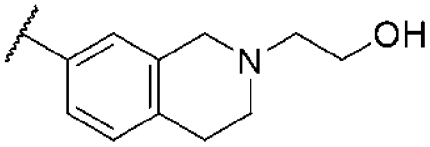
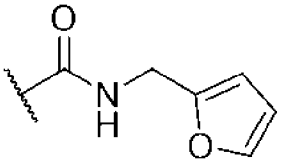
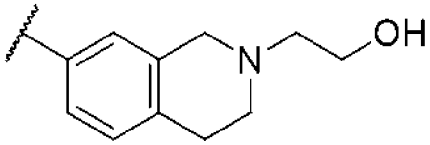
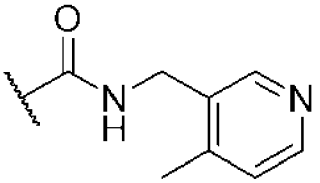
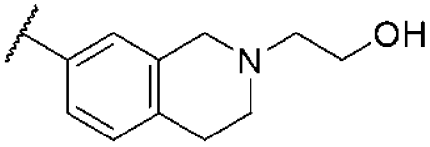
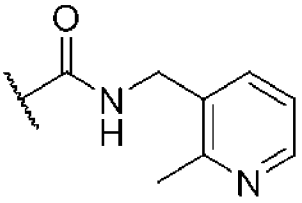
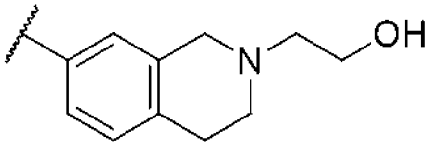
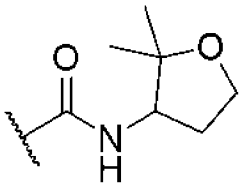
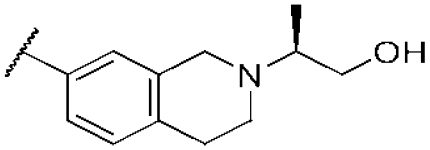
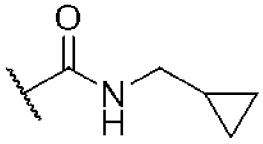
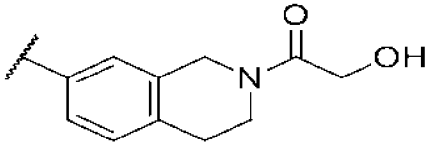
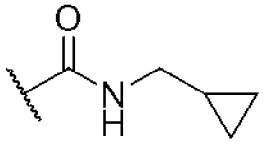
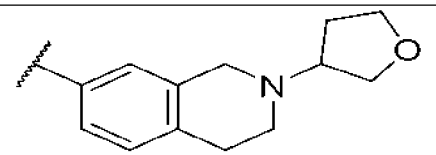
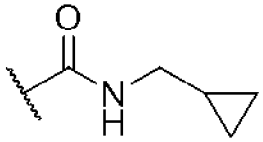
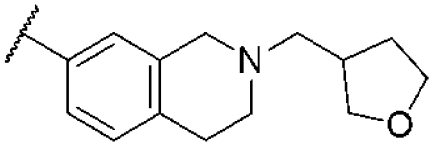
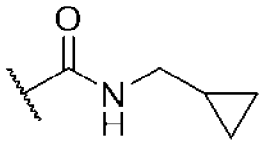
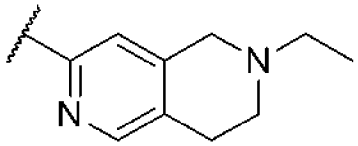
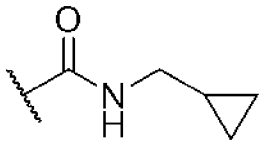
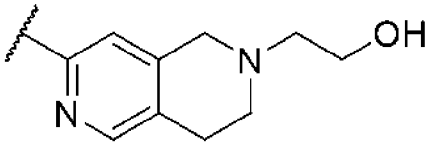
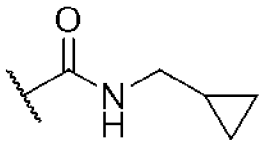
1052		
1053		
1054		
1055		
1056		
1057		
1058		
1059		
1060		
1061		
1063		

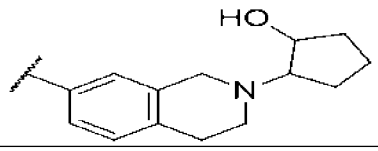
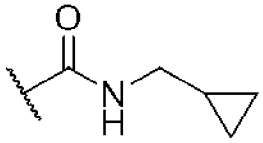
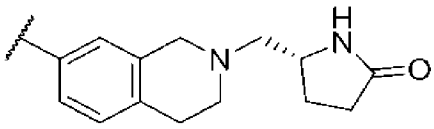
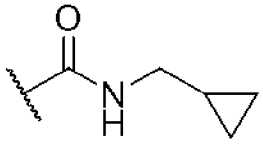
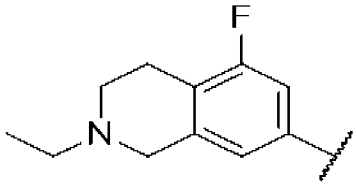
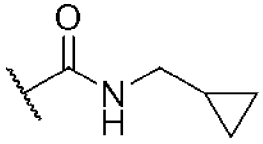
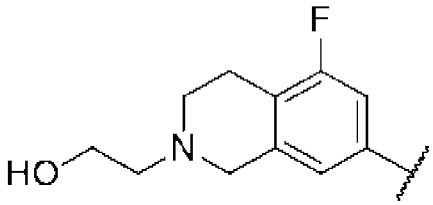
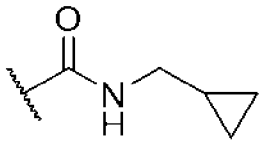
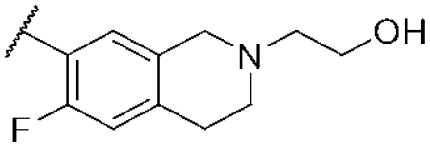
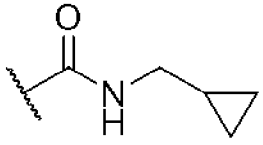
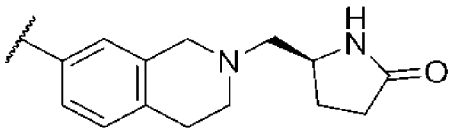
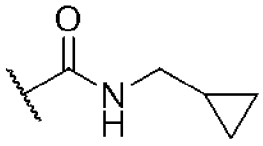
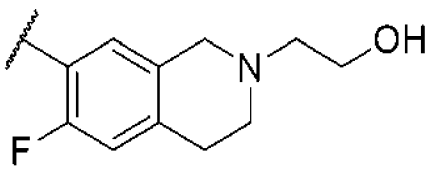
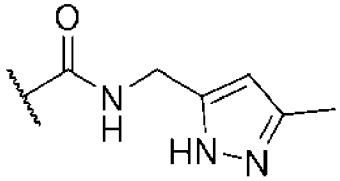
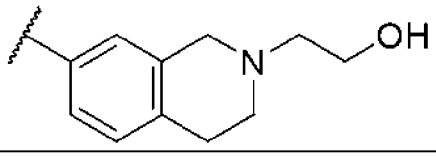
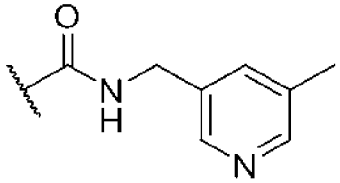
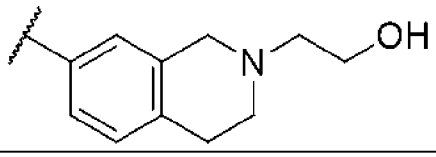
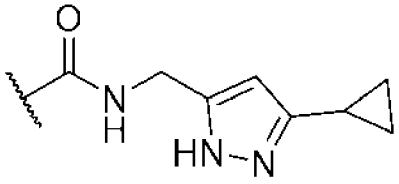
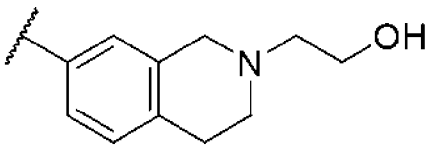
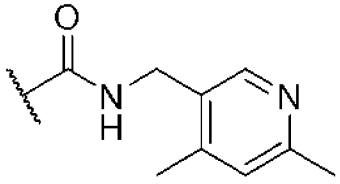
1064		
1065		
1066		
1067		
1068		
1069		
1070		
1071		
1072		
1073		
1074		

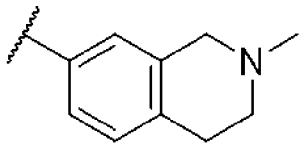
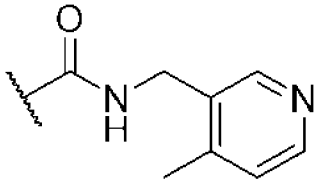
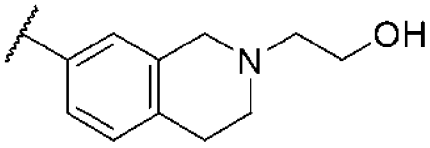
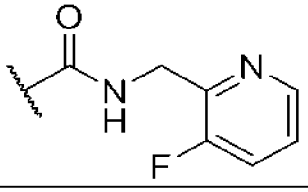
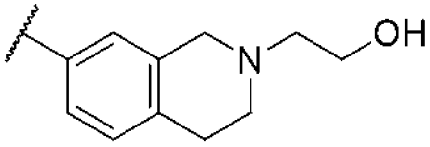
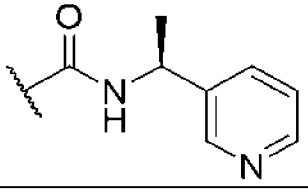
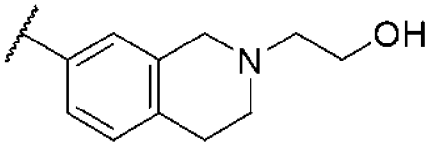
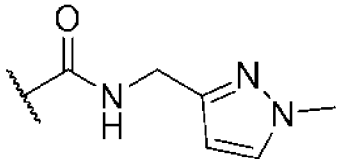
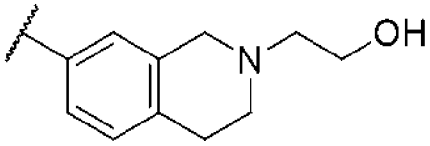
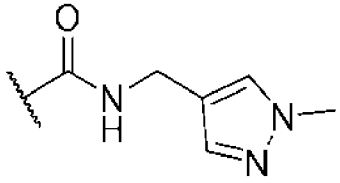
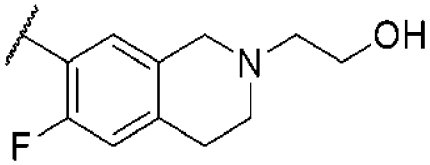
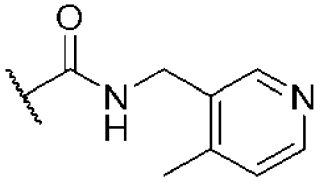
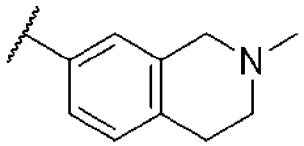
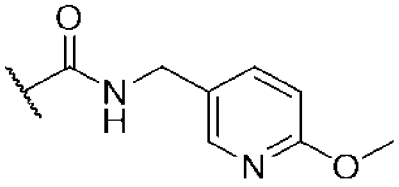
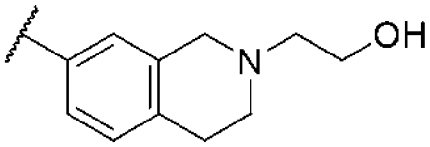
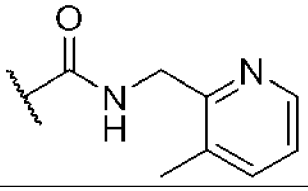
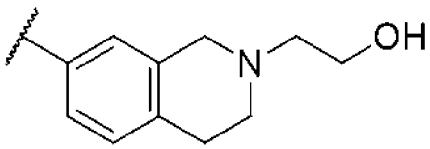
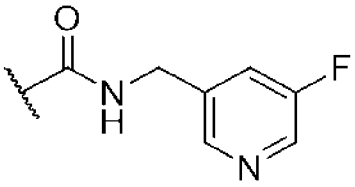
1075		
1076		
1077		
1078		
1079		
1080		
1081		
1082		
1083		
1084		
1085		

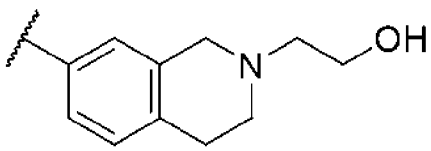
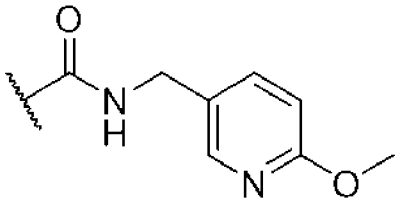
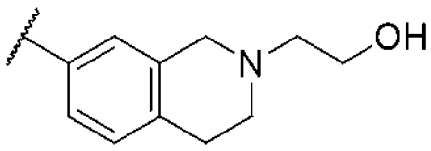
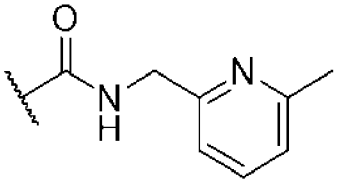
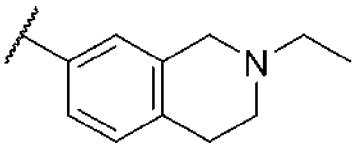
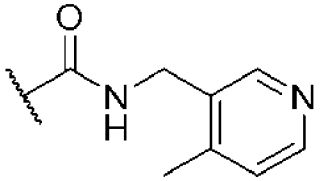
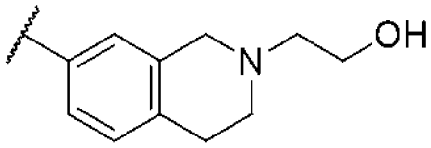
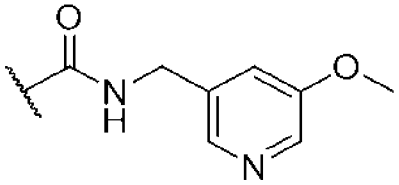
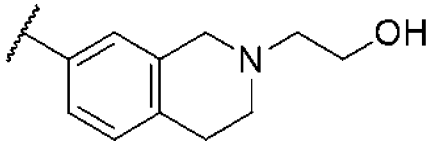
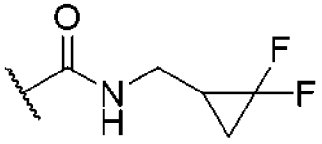
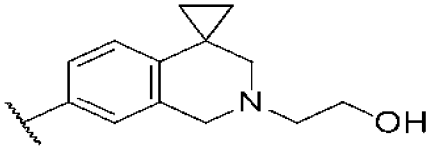
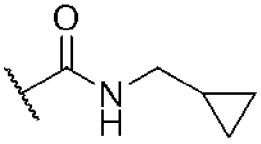
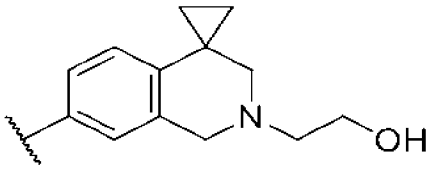
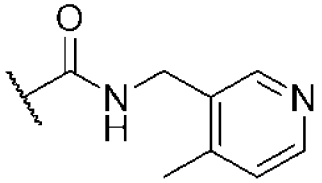
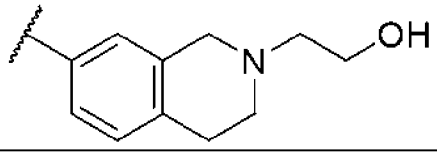
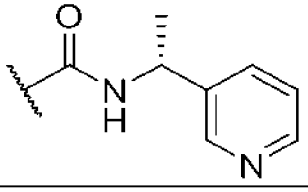
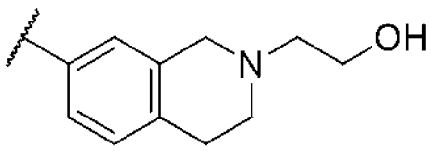
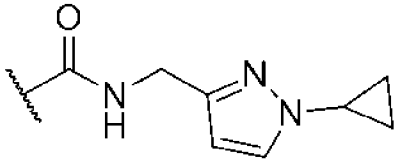
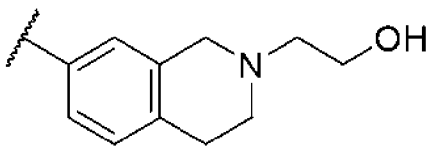
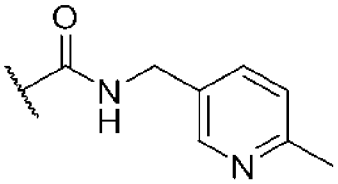
1086		
1087		
1088		
1089		
1090		
1091		
1092		
1093		
1094		
1095		
1096		

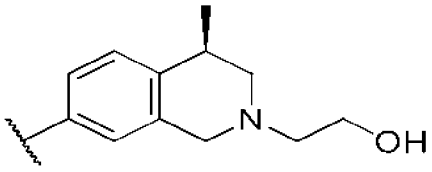
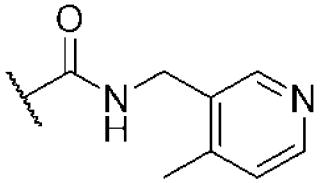
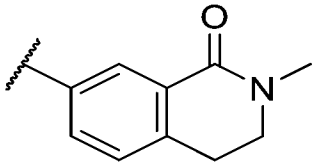
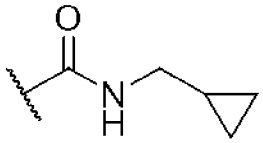
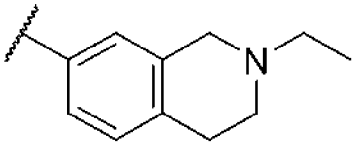
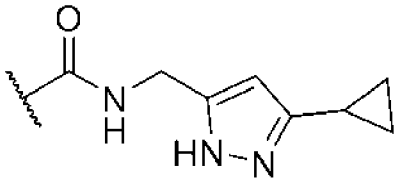
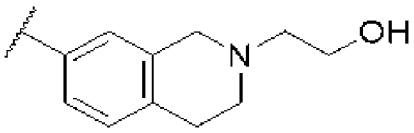
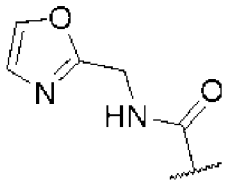
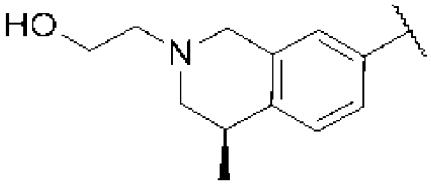
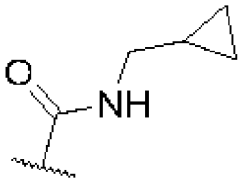
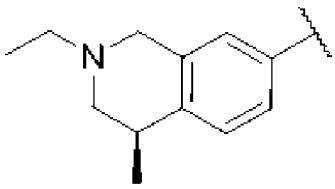
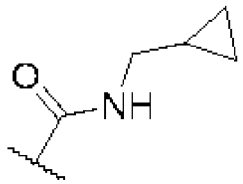
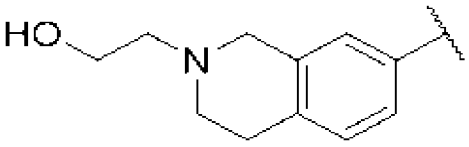
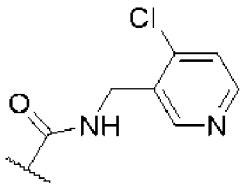
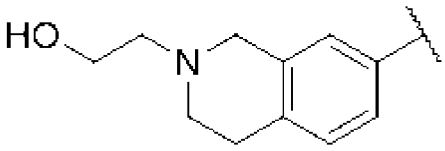
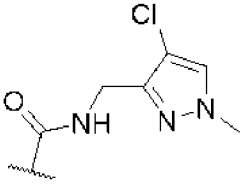
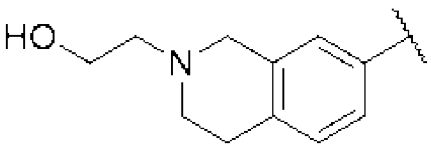
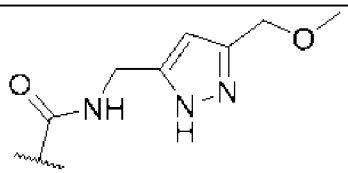
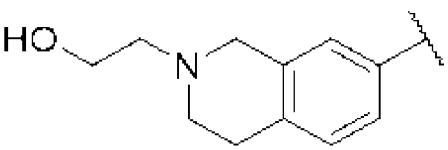
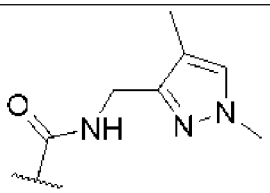
1097		
1098		
1099		
1100		
1101		
1102		
1103		
1104		
1105		
1106		
1107		

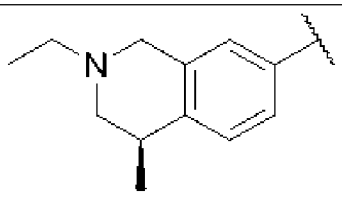
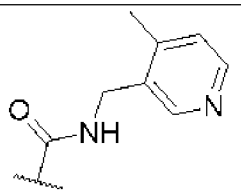
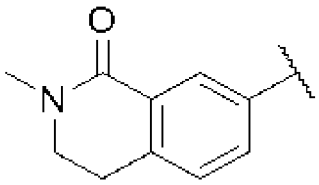
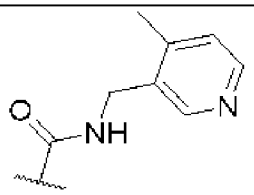
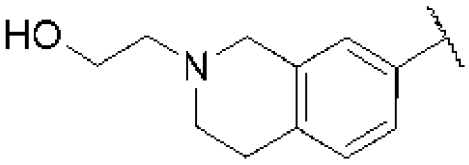
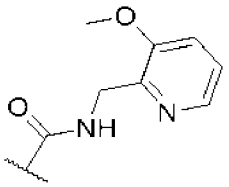
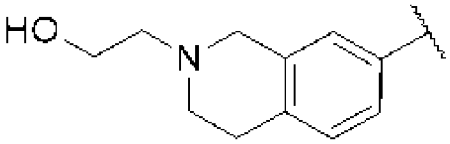
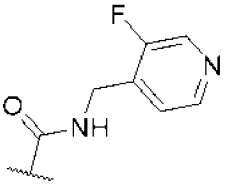
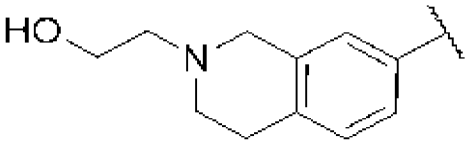
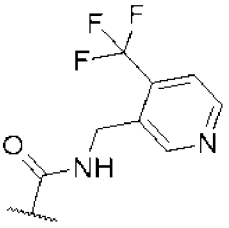
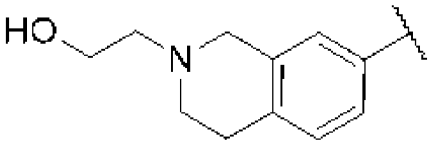
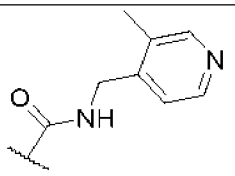
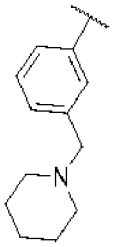
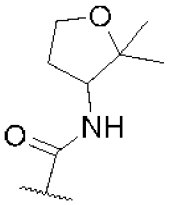
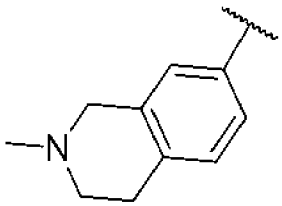
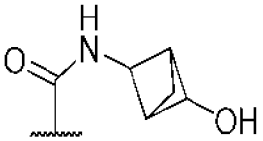
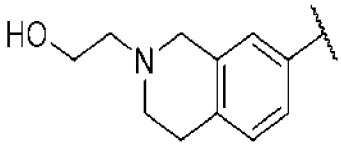
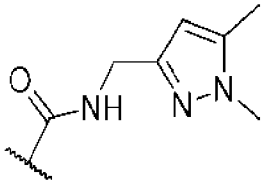
1108		
1109		
1110		
1111		
1112		
1113		
1114		
1115		
1116		
1117		
1118		

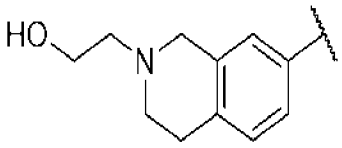
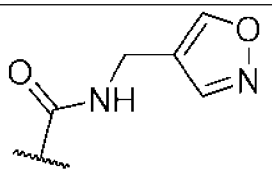
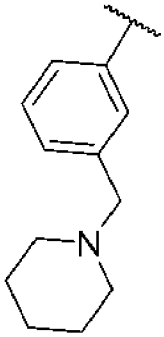
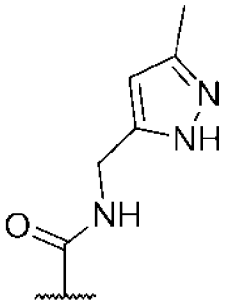
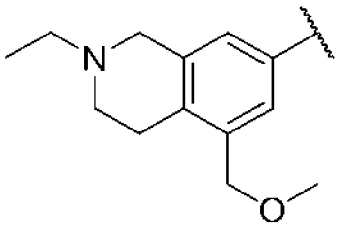
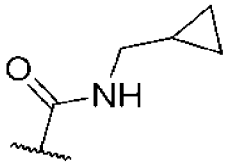
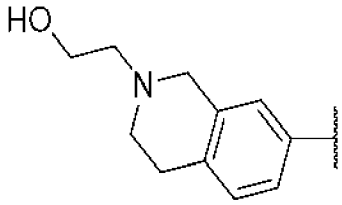
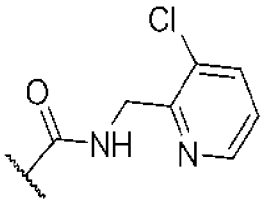
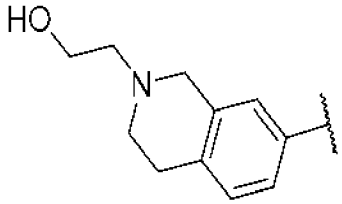
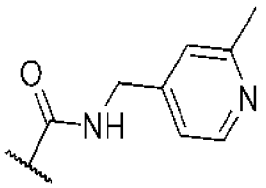
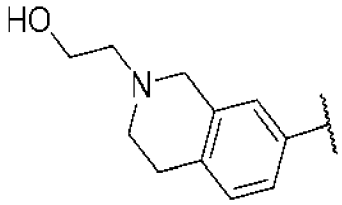
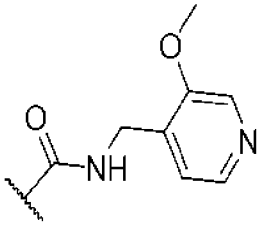
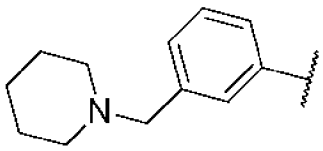
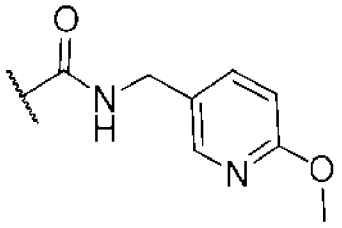
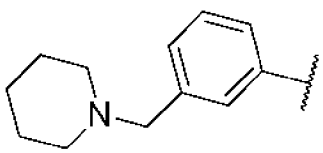
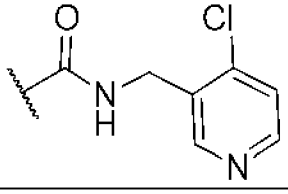
1119		
1120		
1121		
1122		
1123		
1124		
1125		
1126		
1127		
1128		

1129		
1130		
1131		
1132		
1133		
1134		
1135		
1136		
1137		

1138		
1139		
1140		
1141		
1142		
1143		
1144		
1145		
1146		
1147		

1148		
1149		
1150		
1151		
1152		
1153		
1154		
1155		
1156		
1157		

1158		
1159		
1160		
1161		
1162		
1163		
1164		
1165		
1166		

1167		
1168		
1169		
1170		
1171		
1172		
1173		
1174		

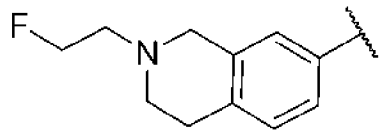
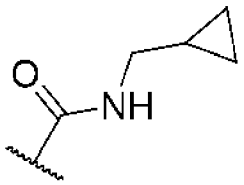
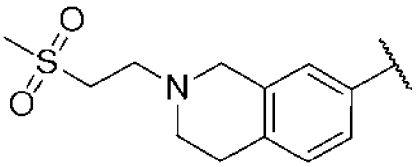
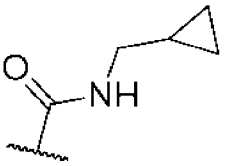
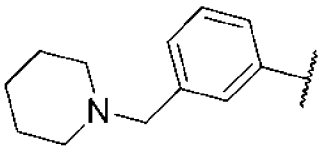
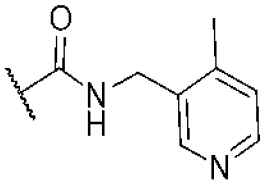
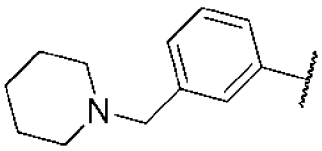
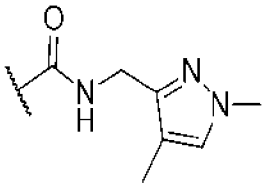
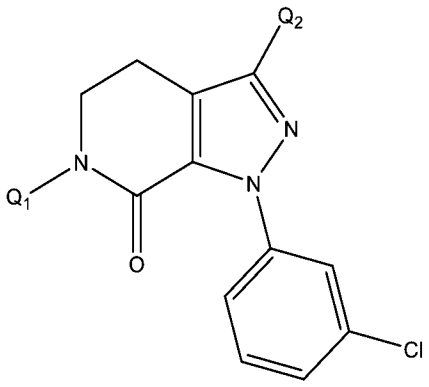
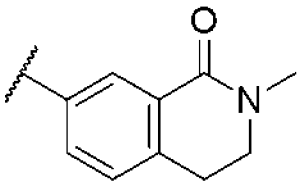
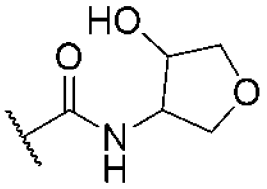
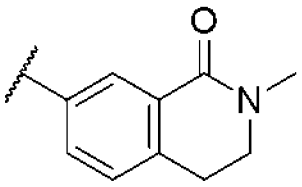
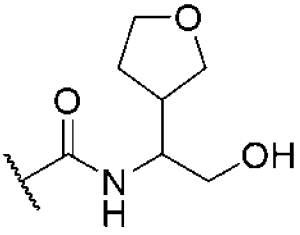
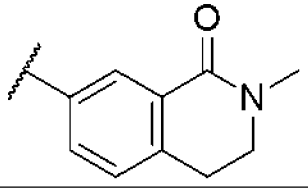
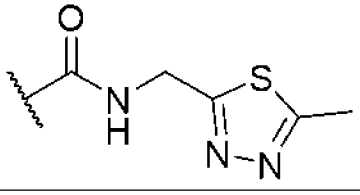
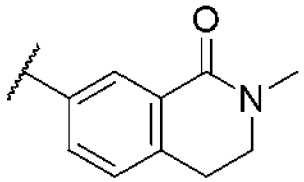
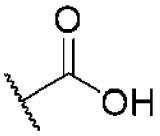
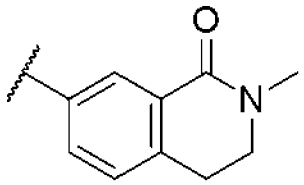
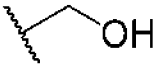
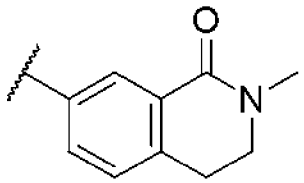
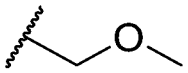
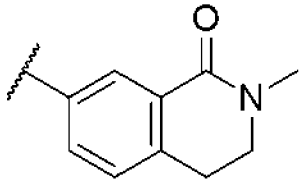
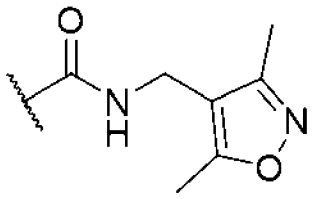
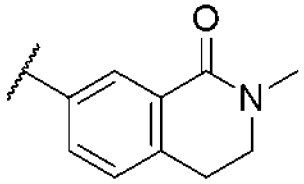
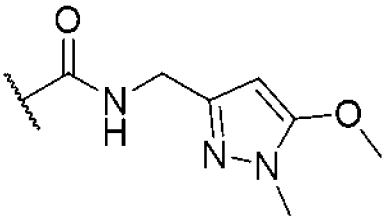
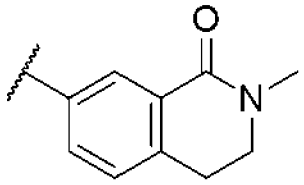
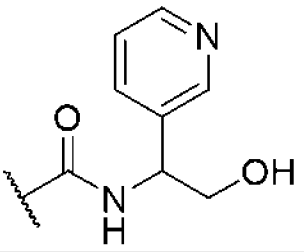
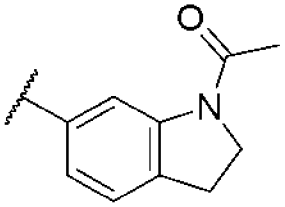
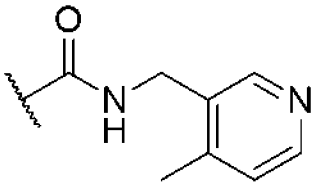
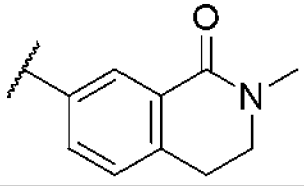
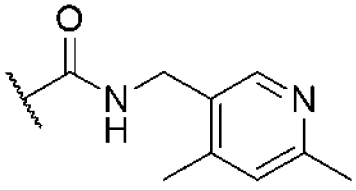
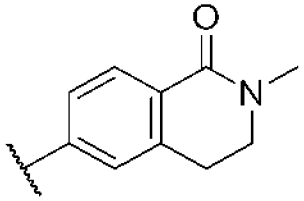
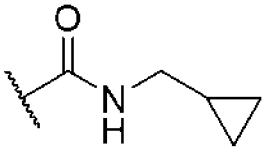
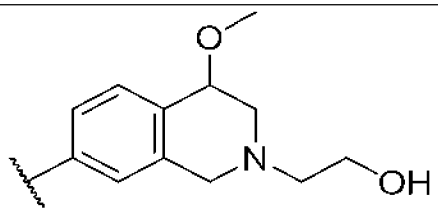
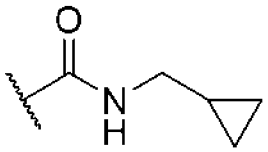
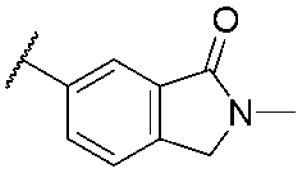
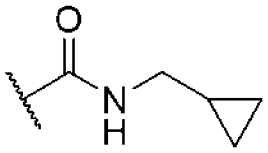
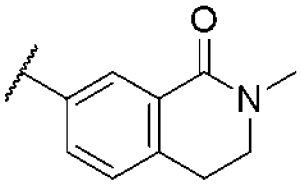
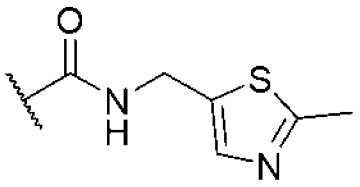
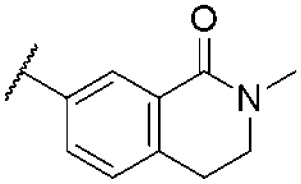
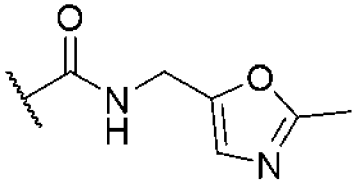
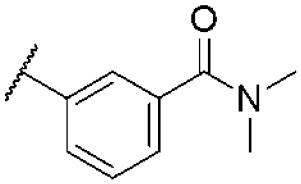
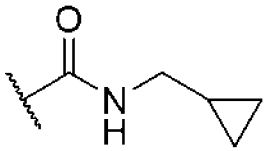
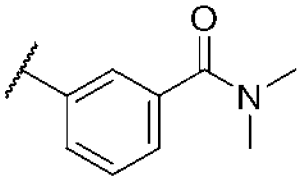
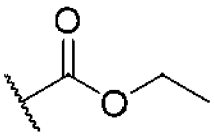
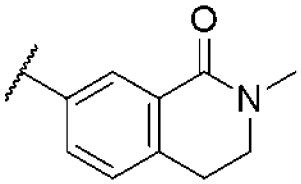
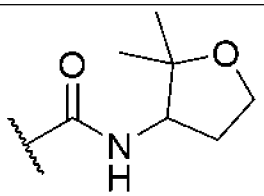
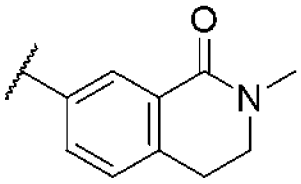
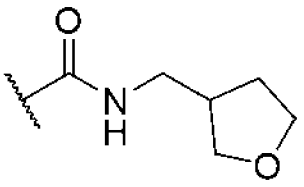
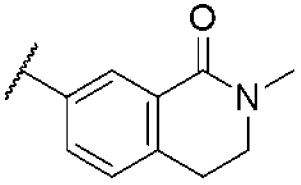
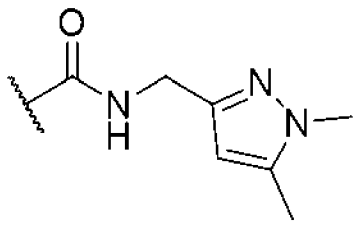
1175		
1176		
1177		
1178		

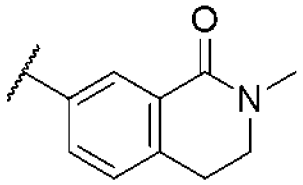
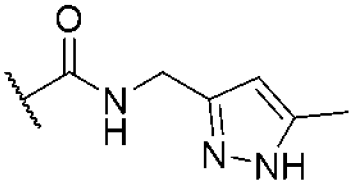
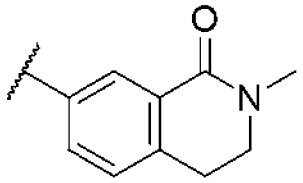
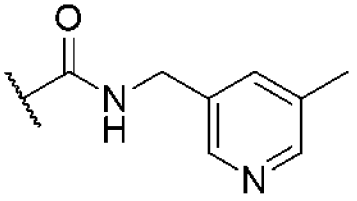
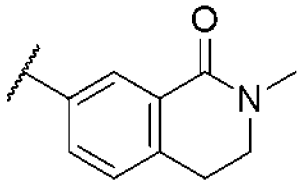
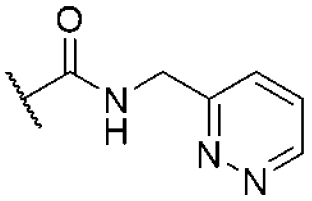
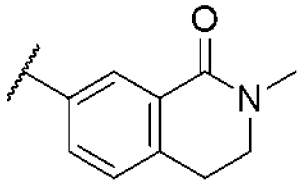
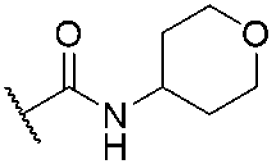
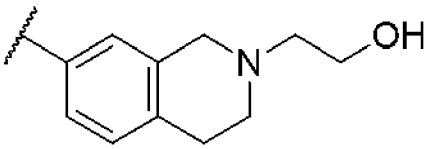
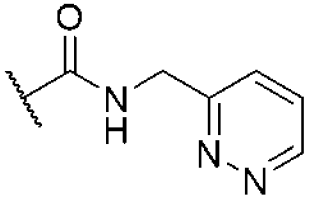
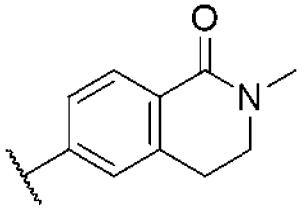
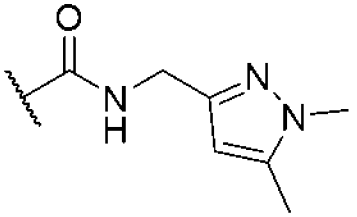
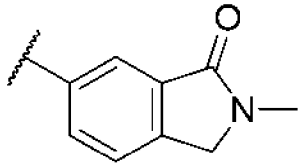
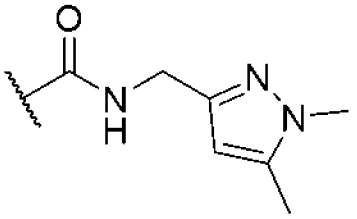
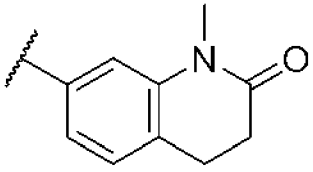
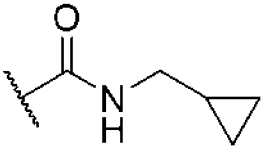
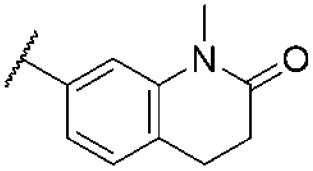
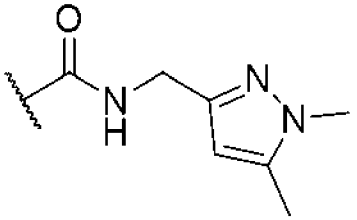
表1b

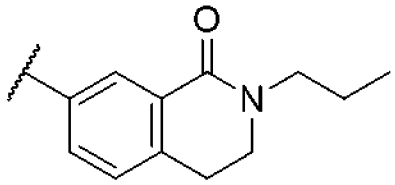
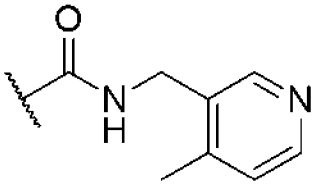
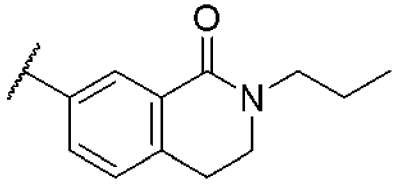
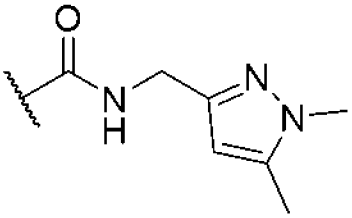
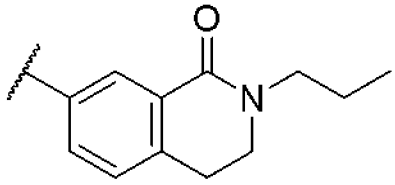
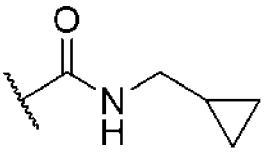
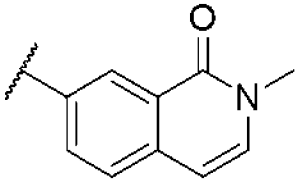
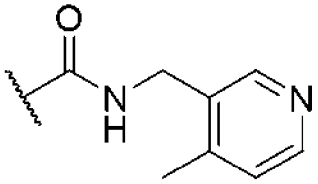
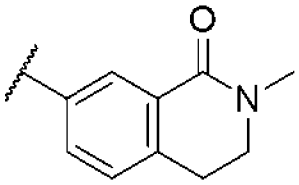
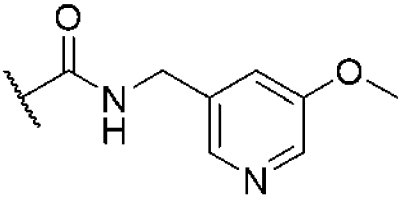
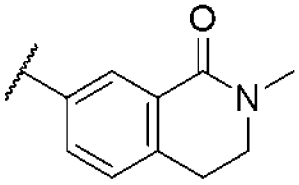
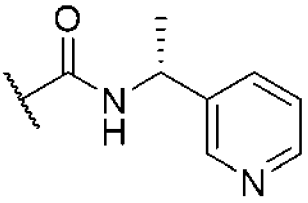
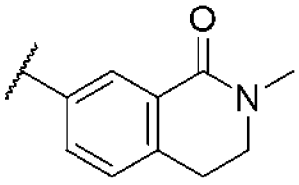
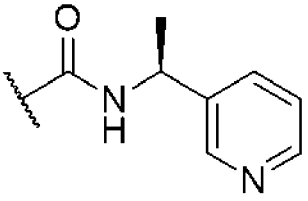
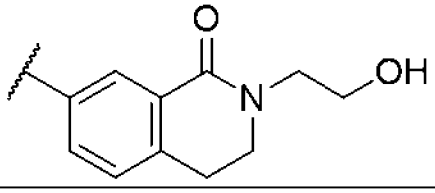
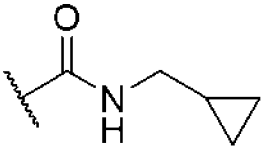
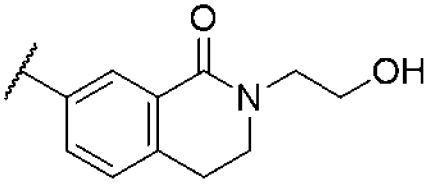
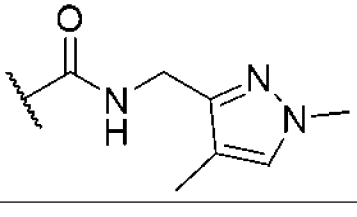


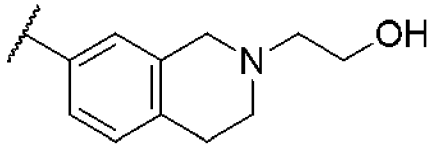
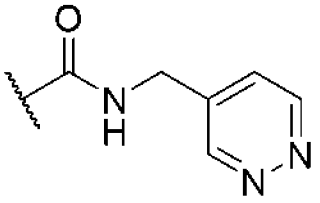
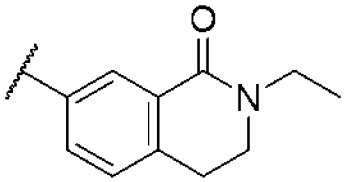
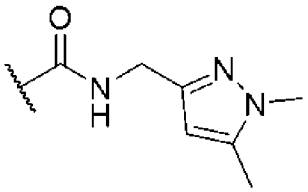
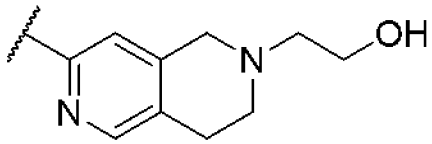
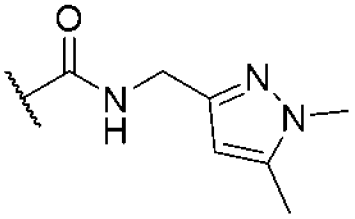
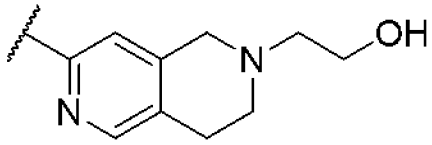
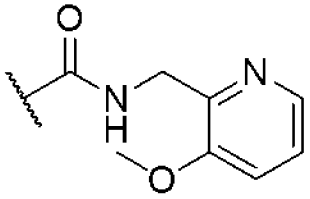
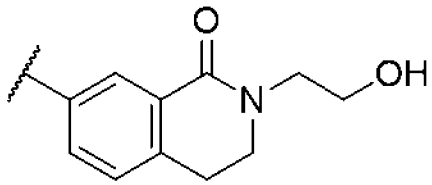
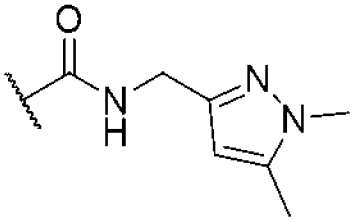
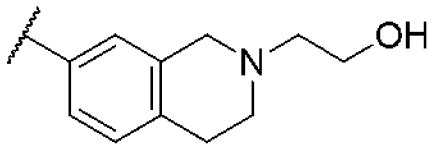
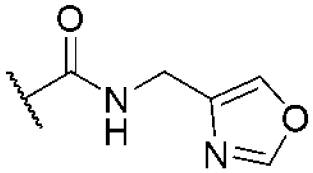
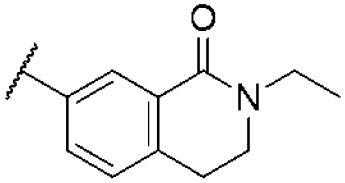
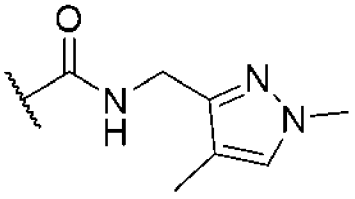
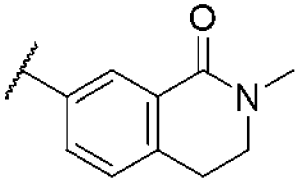
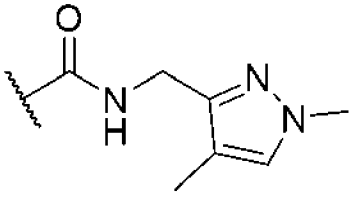
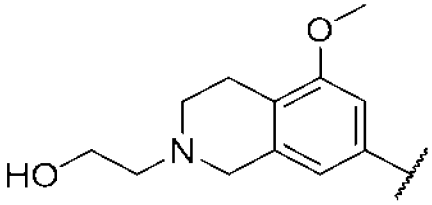
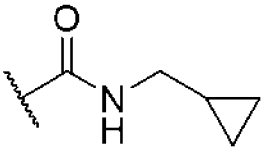
實例編號	Q1	Q2
1179		
1180		
1181		

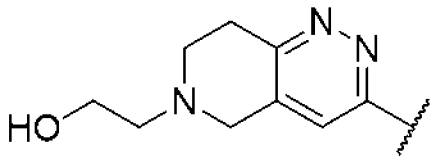
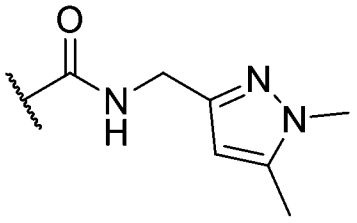
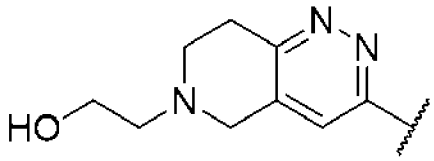
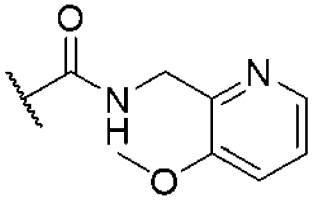
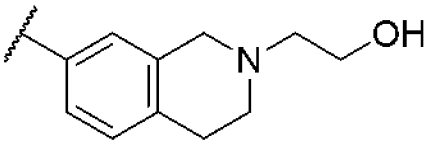
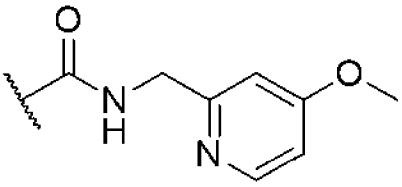
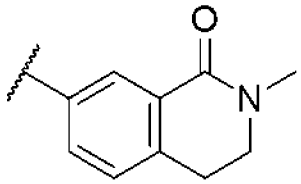
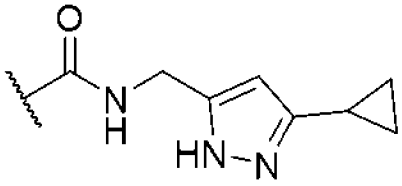
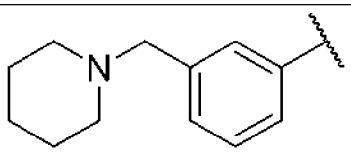
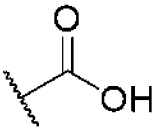
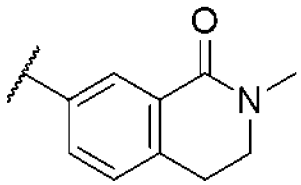
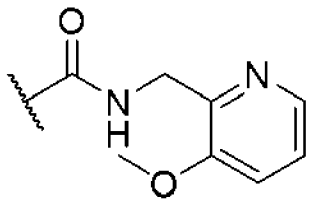
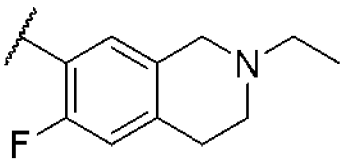
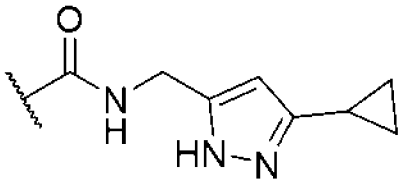
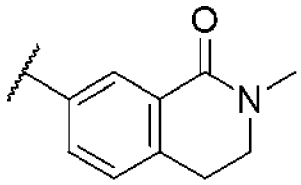
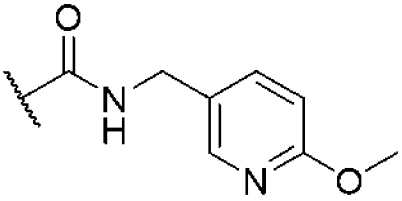
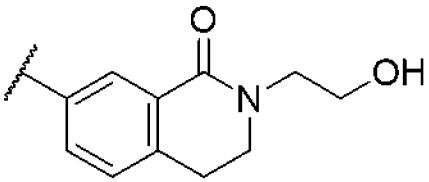
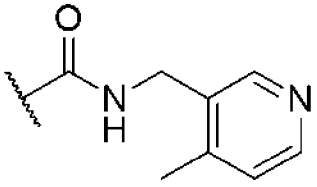
1182		
1183		
1184		
1185		
1186		
1187		
1188		
1189		
1190		

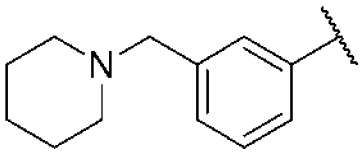
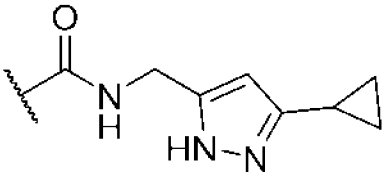
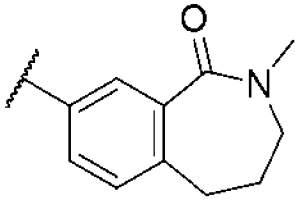
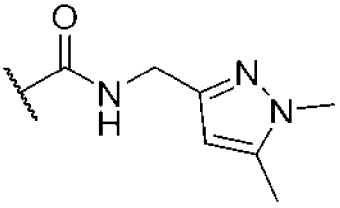
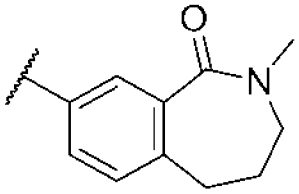
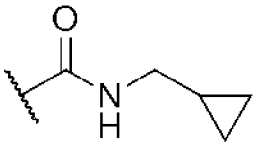
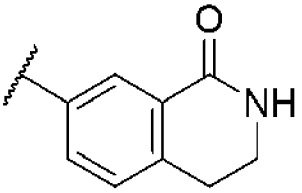
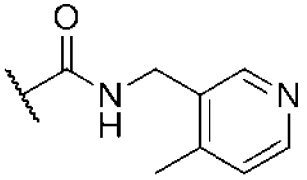
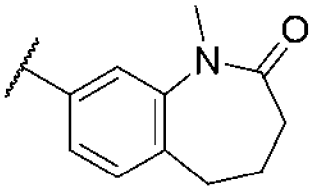
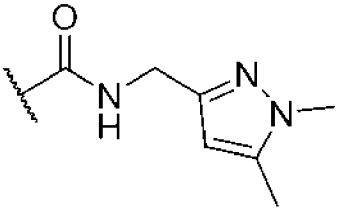
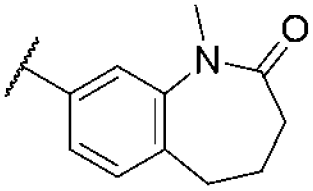
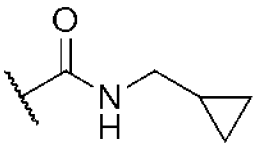
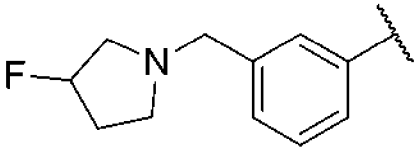
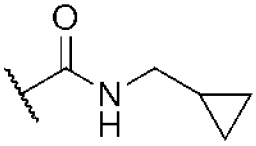
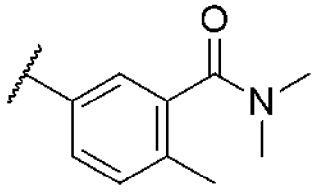
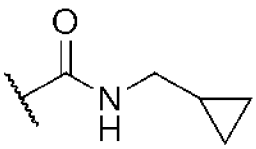
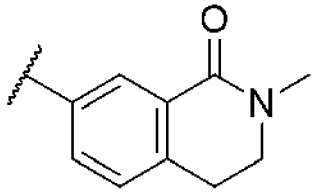
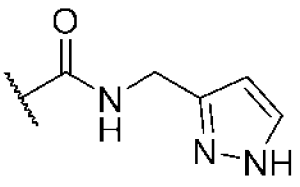
1191		
1192		
1193		
1194		
1195		
1196		
1197		
1198		
1199		

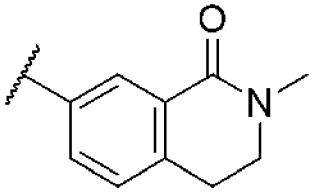
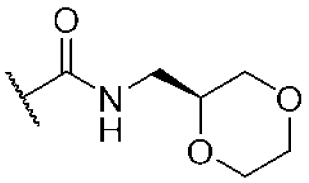
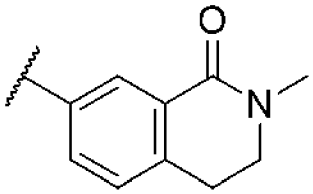
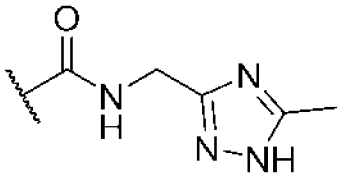
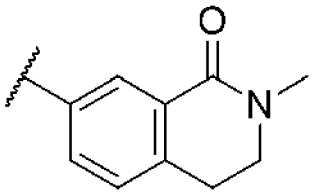
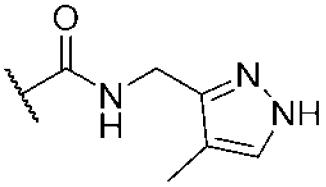
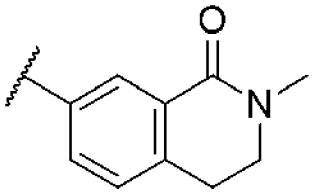
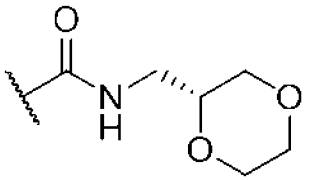
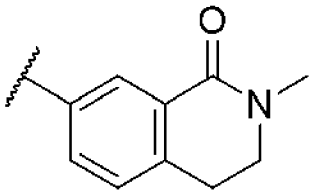
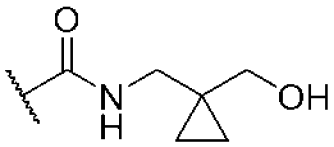
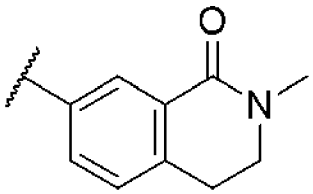
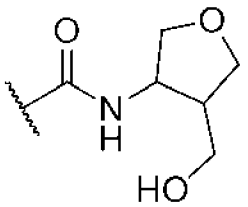
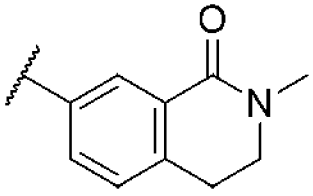
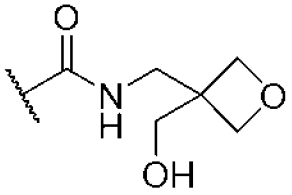
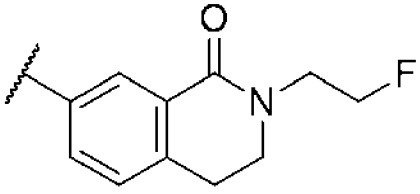
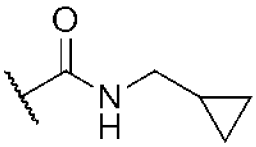
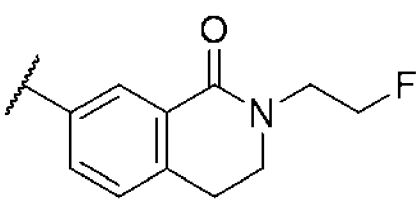
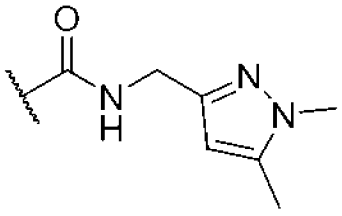
1200		
1201		
1202		
1203		
1204		
1205		
1206		
1207		
1208		

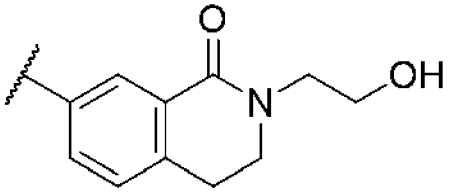
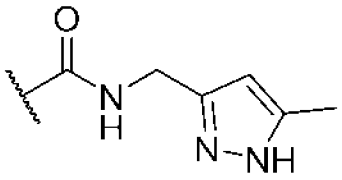
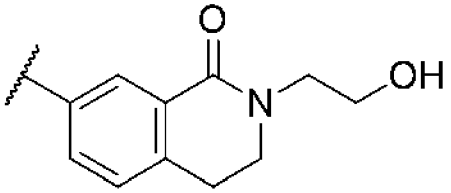
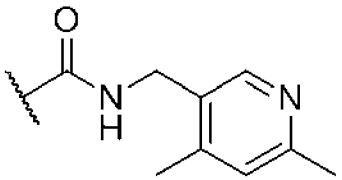
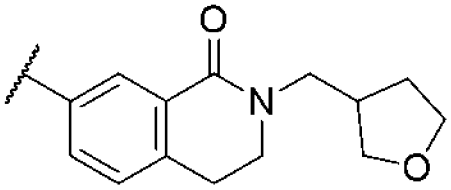
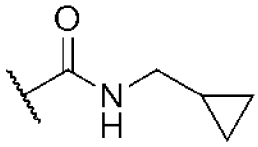
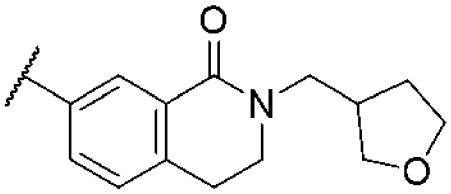
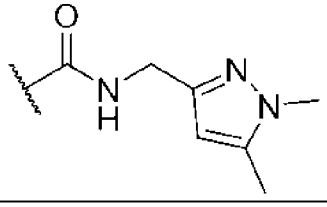
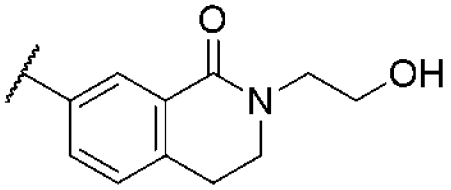
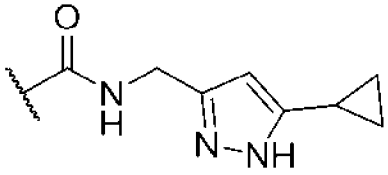
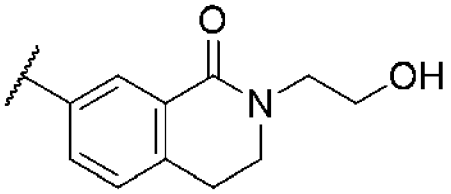
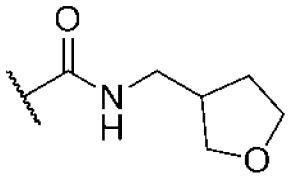
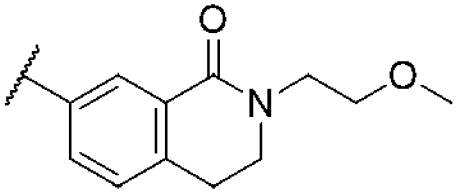
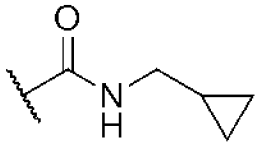
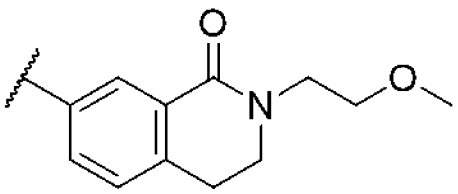
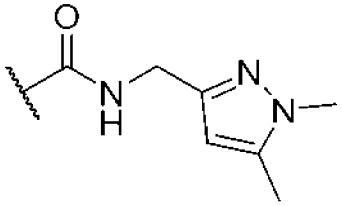
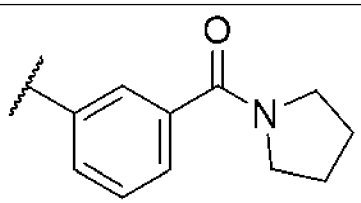
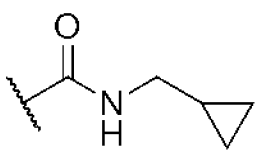
1209		
1210		
1211		
1212		
1213		
1214		
1215		
1216		
1217		

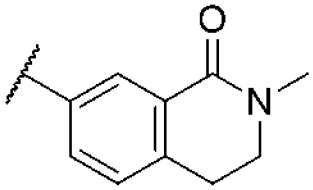
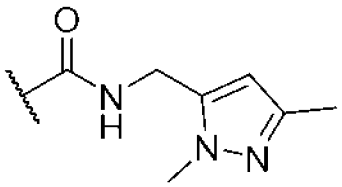
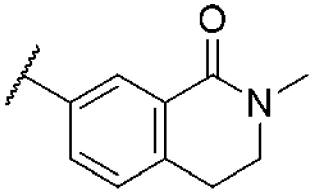
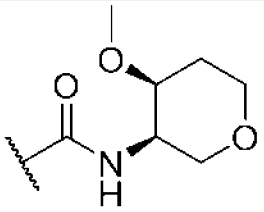
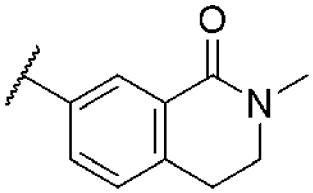
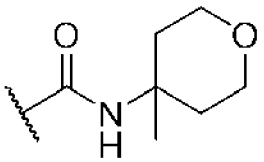
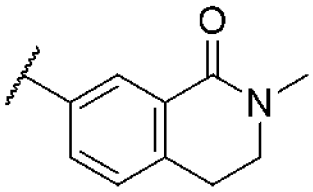
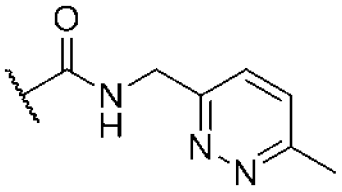
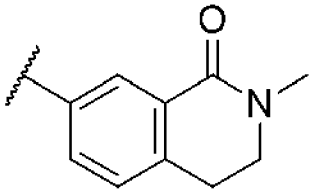
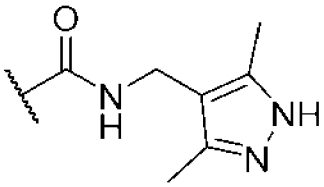
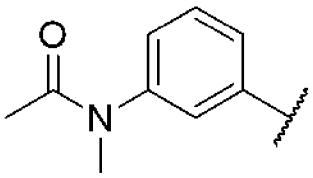
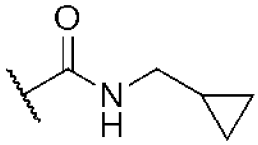
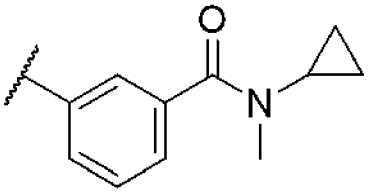
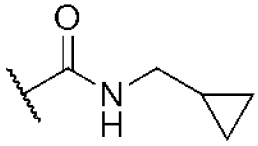
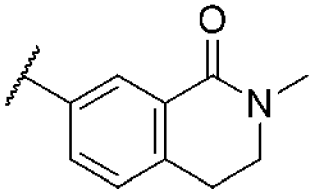
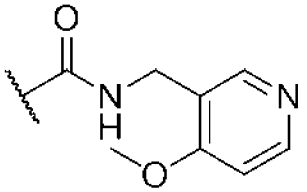
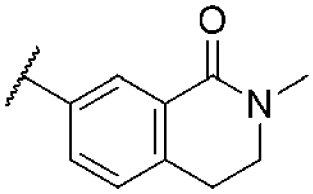
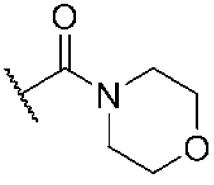
1218		
1219		
1220		
1221		
1222		
1223		
1224		
1225		
1226		

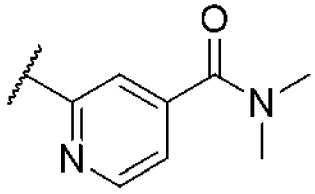
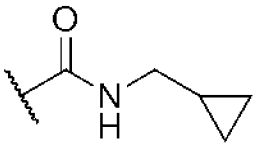
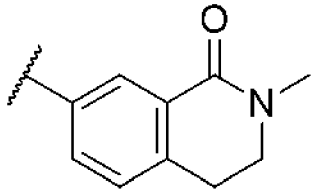
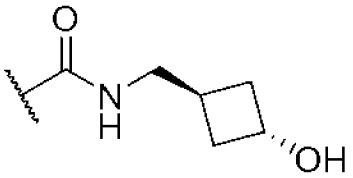
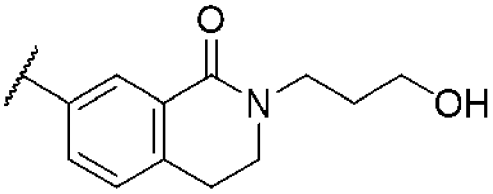
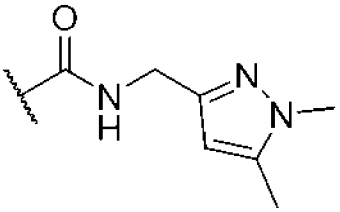
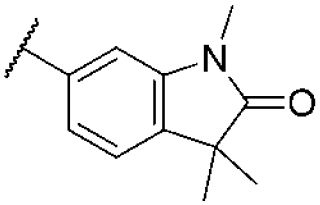
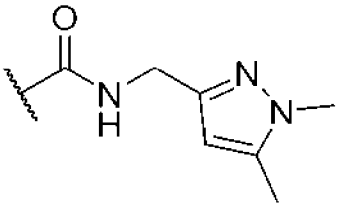
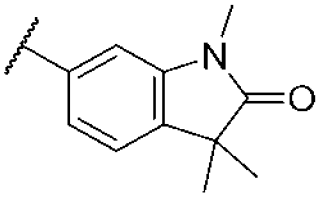
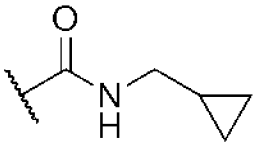
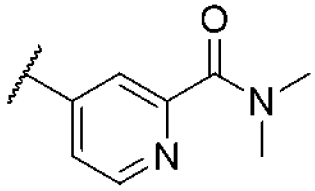
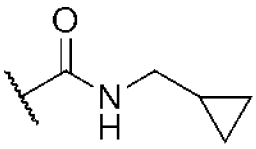
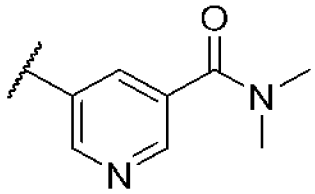
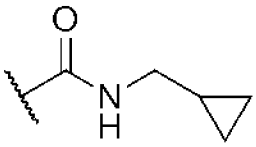
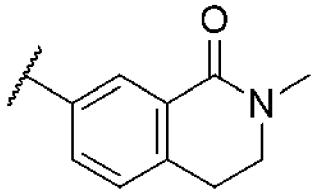
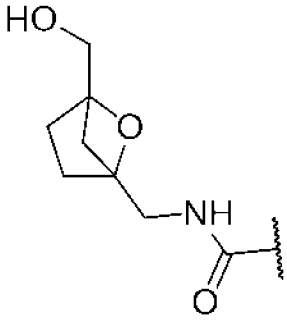
1227		
1229		
1230		
1231		
1232		
1233		
1234		
1235		
1236		

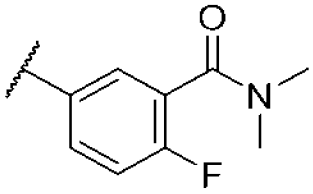
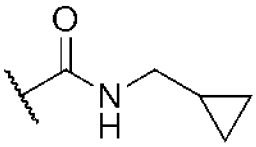
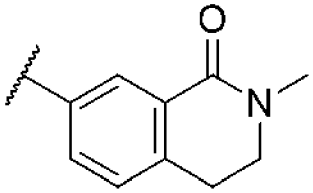
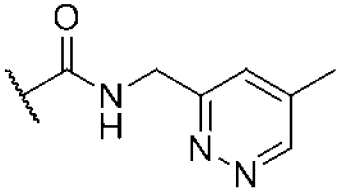
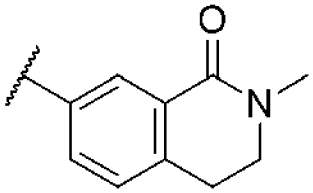
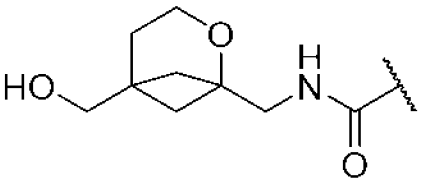
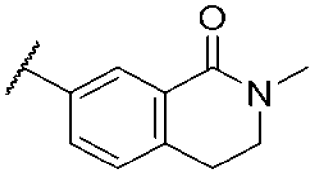
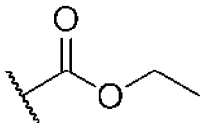
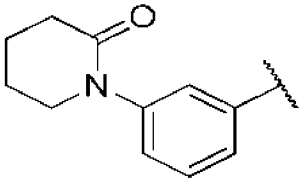
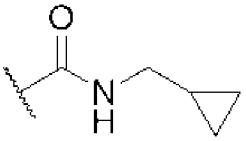
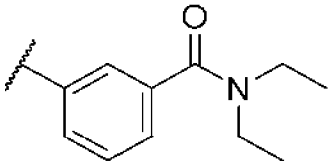
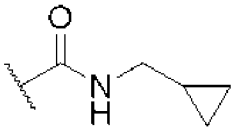
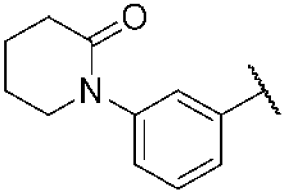
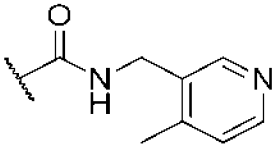
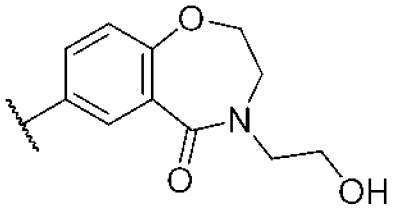
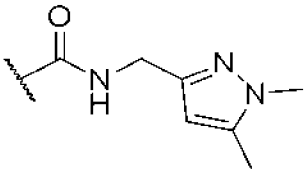
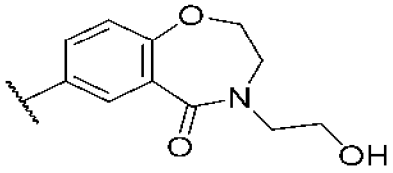
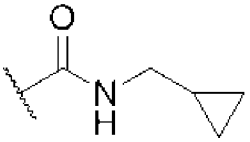
1237		
1238		
1239		
1240		
1241		
1242		
1243		
1244		
1245		

1246		
1247		
1248		
1249		
1250		
1251		
1252		
1253		
1254		

1255		
1256		
1257		
1258		
1259		
1260		
1261		
1262		
1263		

1264		
1265		
1266		
1267		
1268		
1269		
1270		
1271		
1272		

1273		
1274		
1275		
1276		
1277		
1278		
1279		
1280		

1281		
1282		
1283		
1284		
1285		
1286		
1287		
1288		
1289		

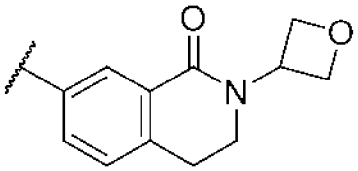
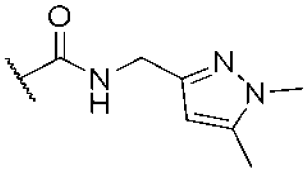
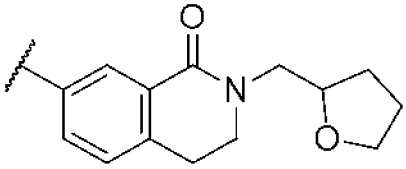
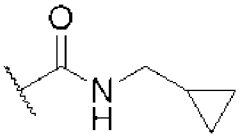
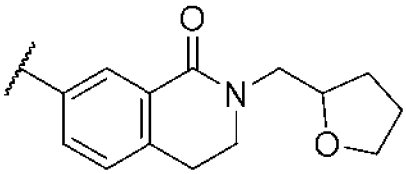
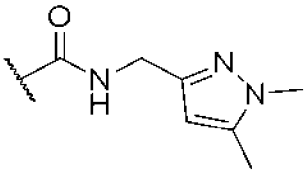
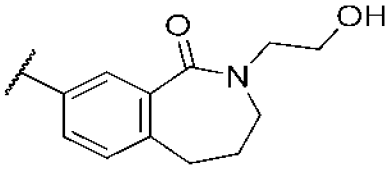
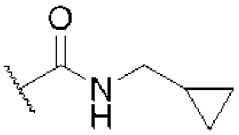
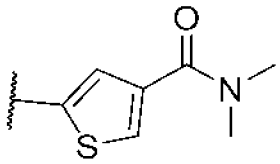
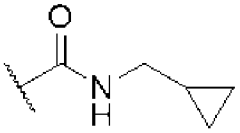
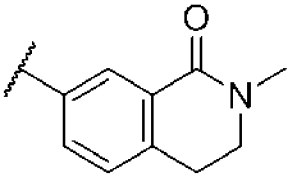
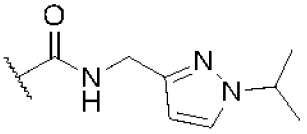
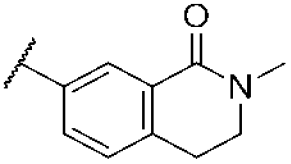
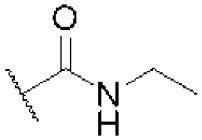
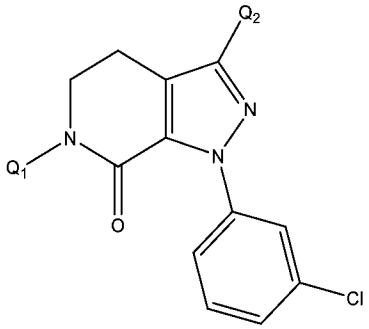
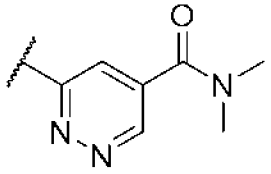
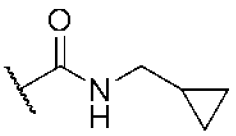
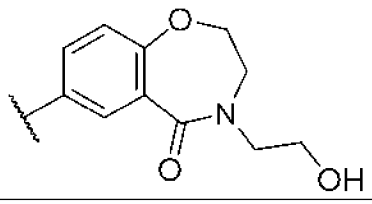
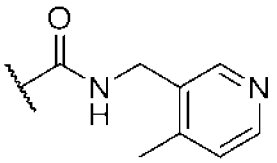
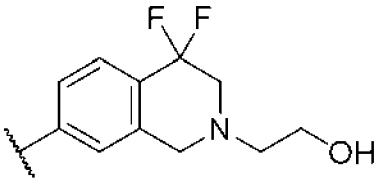
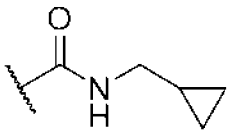
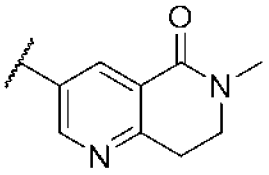
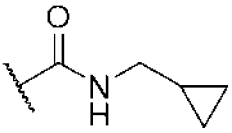
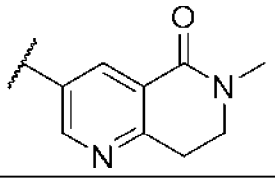
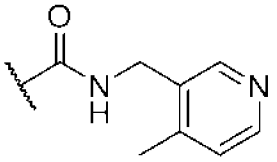
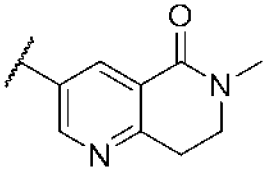
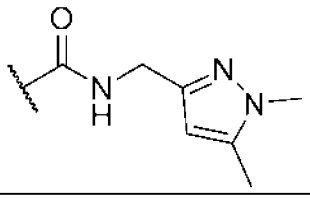
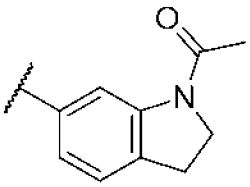
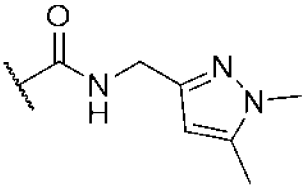
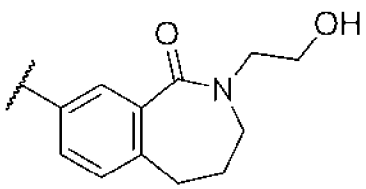
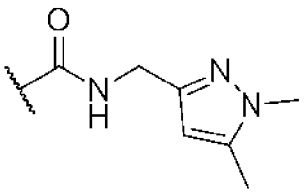
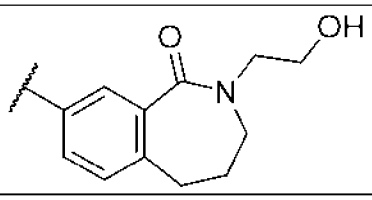
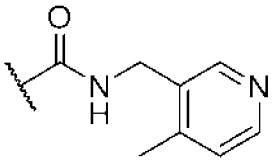
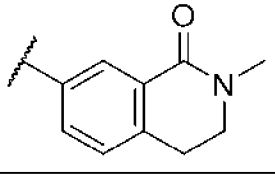
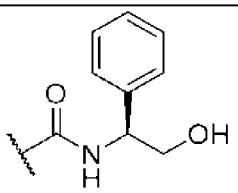
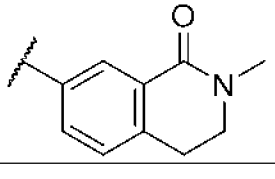
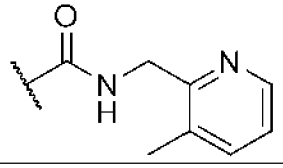
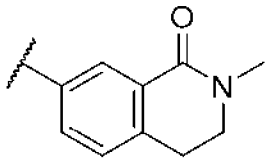
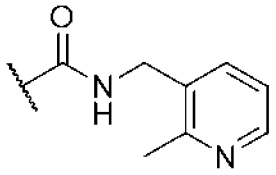
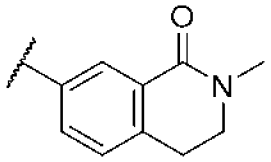
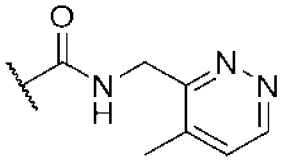
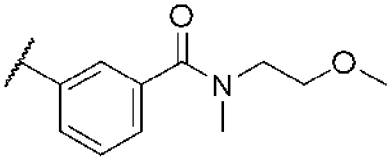
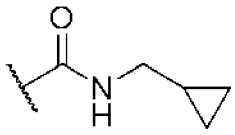
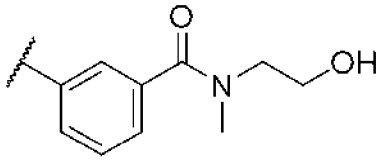
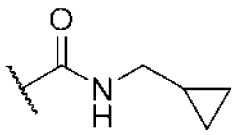
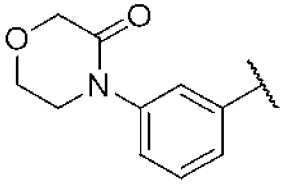
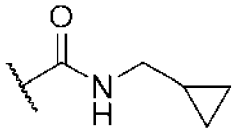
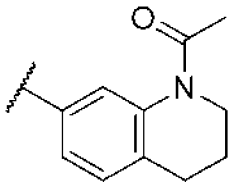
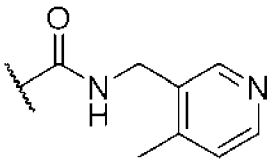
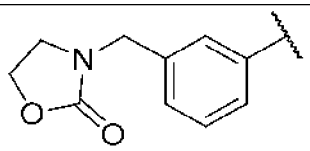
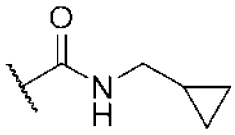
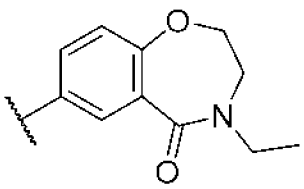
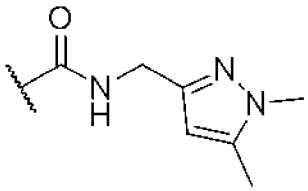
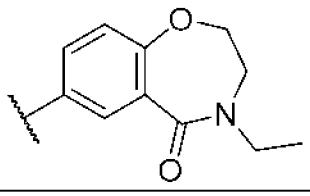
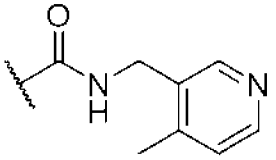
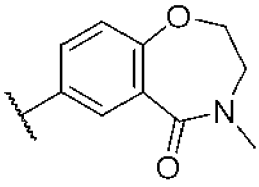
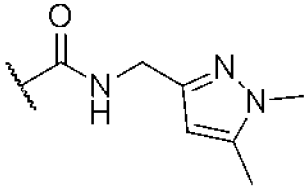
1290		
1292		
1293		
1294		
1295		
1296		
1297		

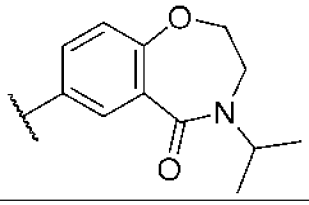
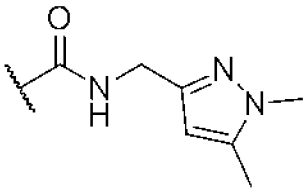
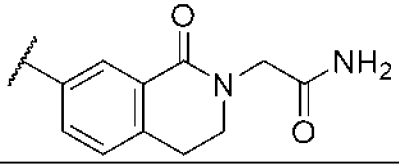
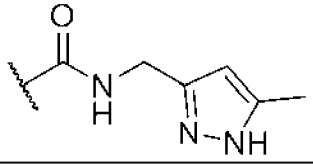
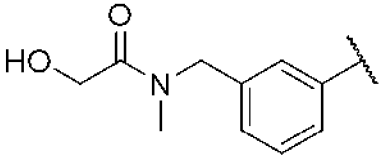
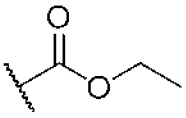
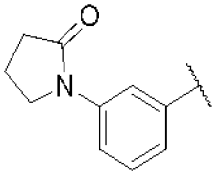
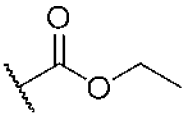
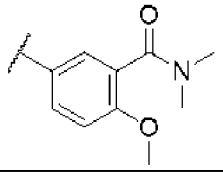
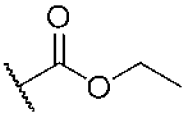
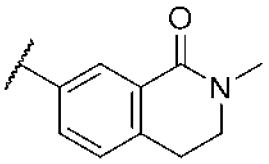
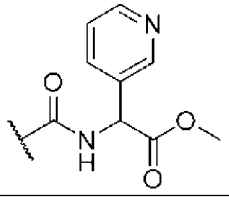
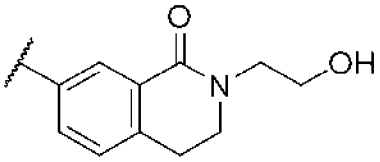
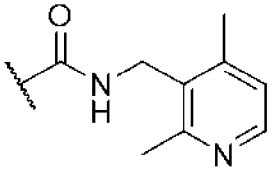
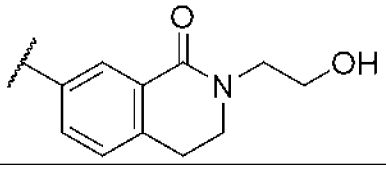
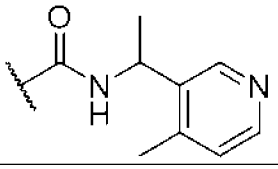
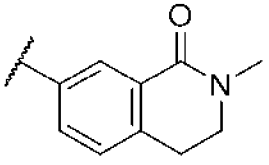
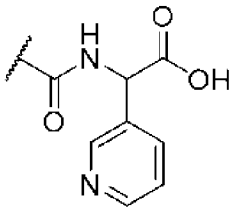
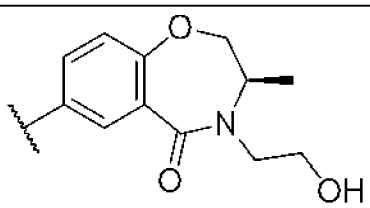
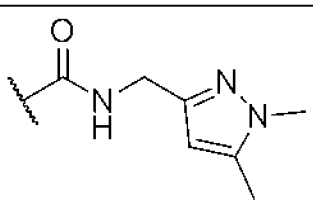
表1c

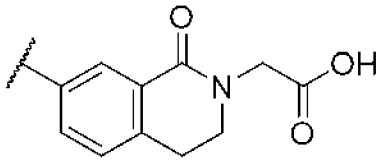
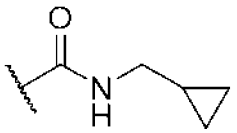
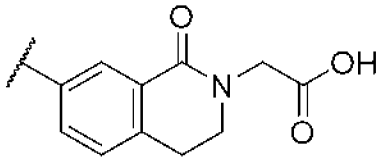
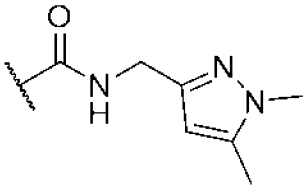
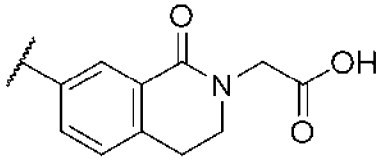
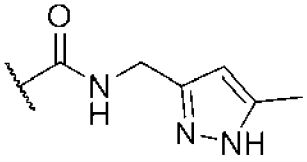
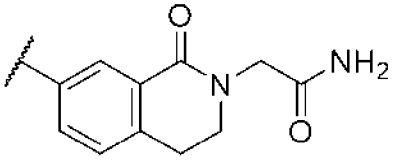
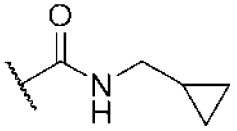
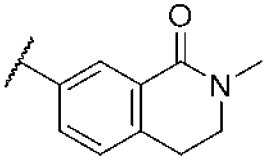
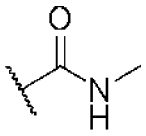
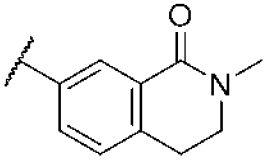
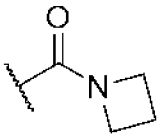
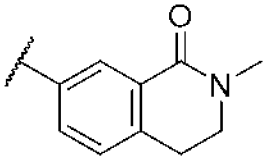
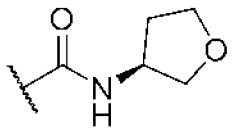
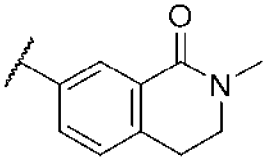
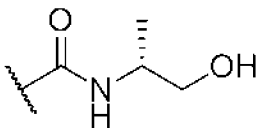
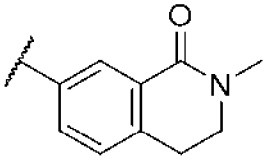
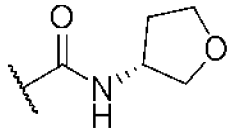
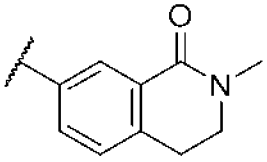
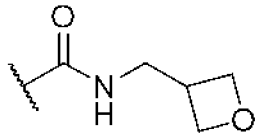
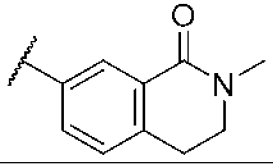
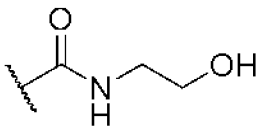


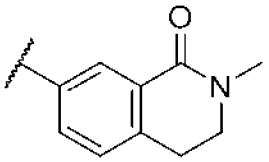
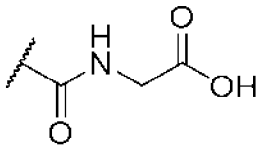
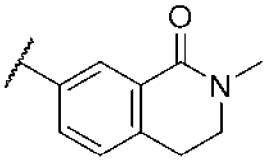
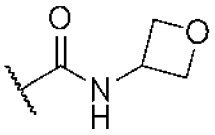
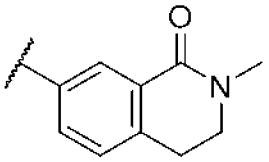
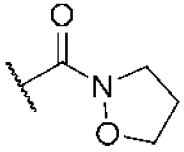
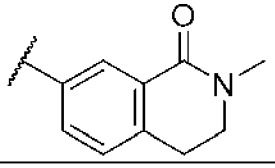
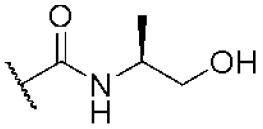
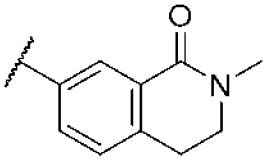
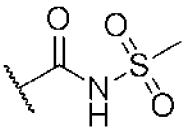
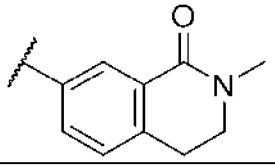
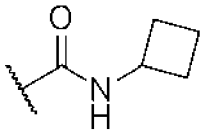
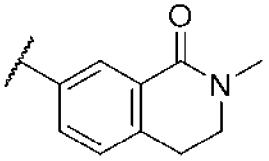
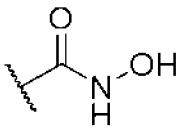
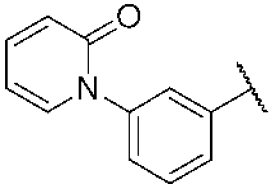
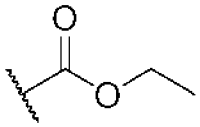
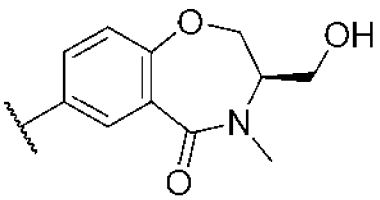
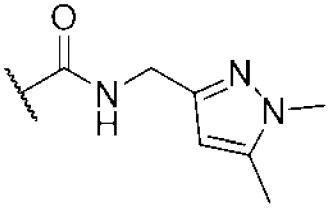
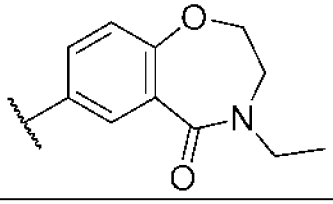
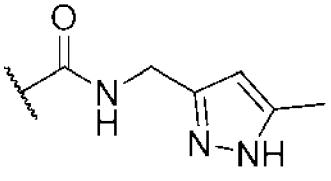
實例編號	Q1	Q2
1298		

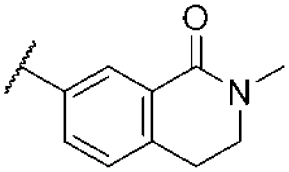
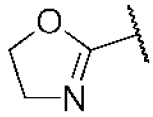
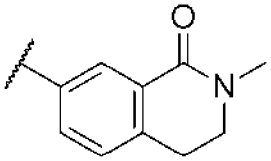
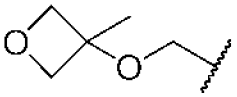
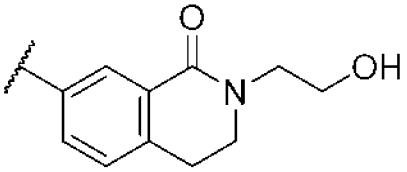
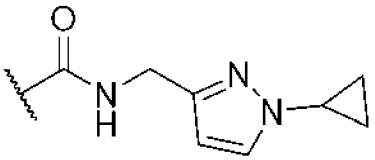
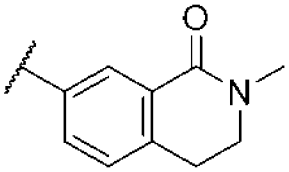
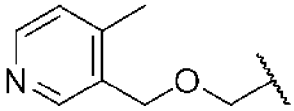
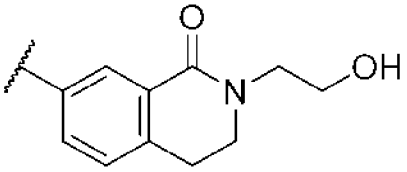
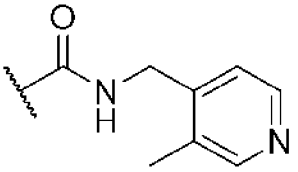
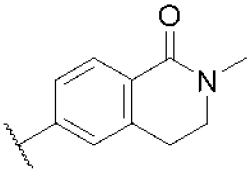
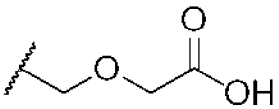
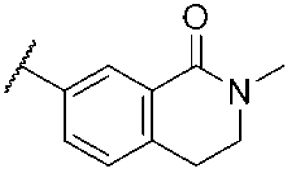
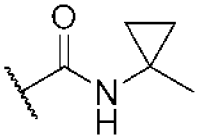
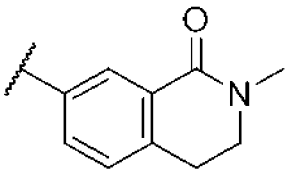
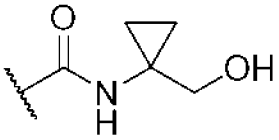
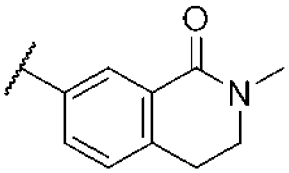
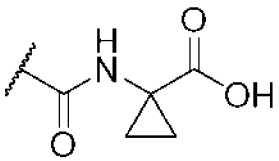
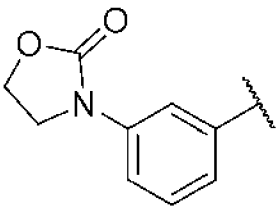
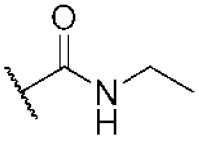
1299		
1300		
1301		
1302		
1303		
1304		
1305		
1306		
1307		
1308		

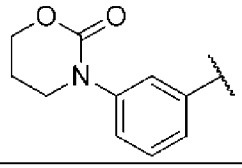
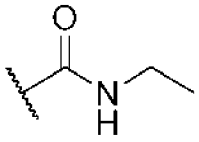
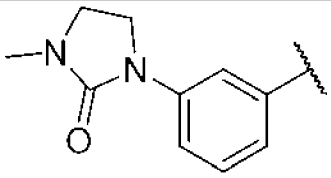
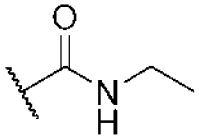
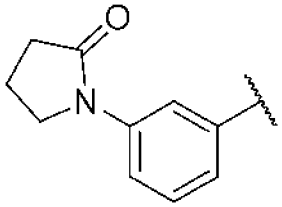
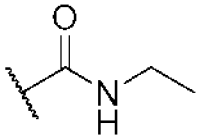
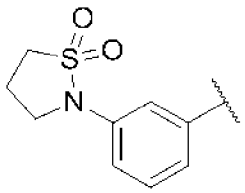
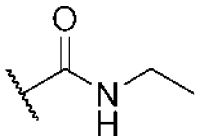
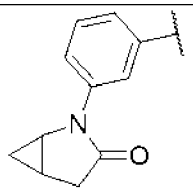
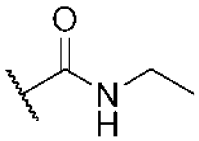
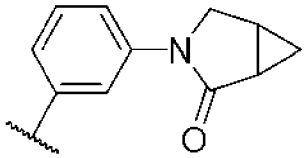
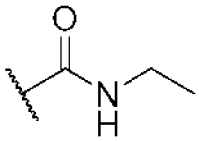
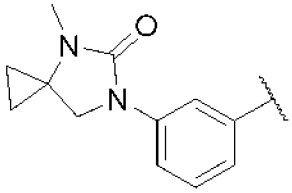
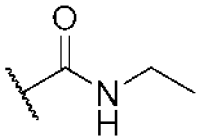
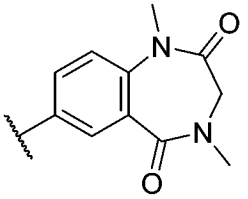
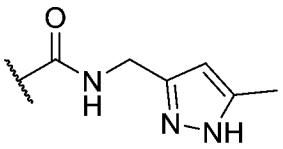
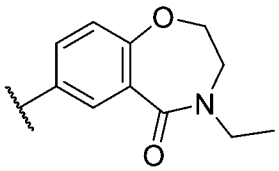
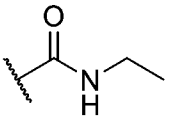
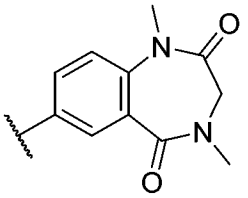
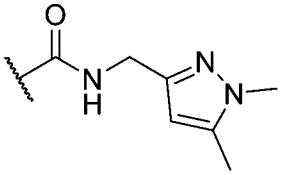
1309		
1310		
1311		
1312		
1313		
1314		
1316		
1317		
1318		
1319		

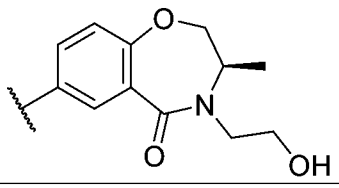
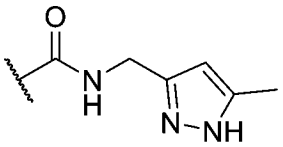
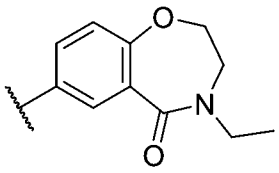
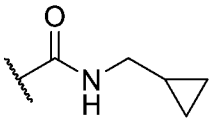
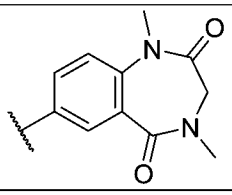
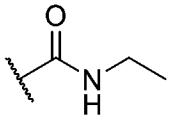
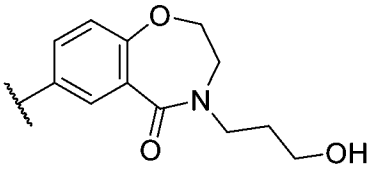
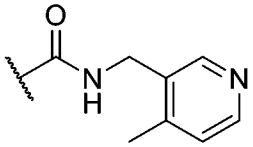
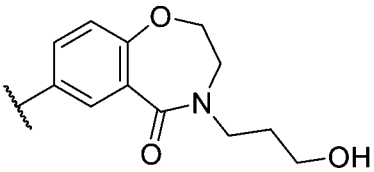
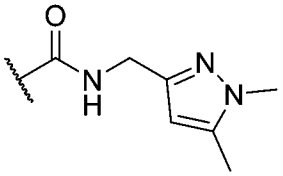
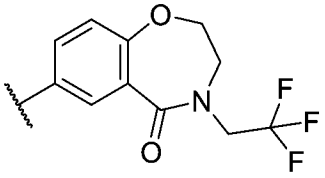
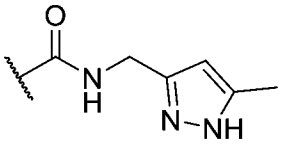
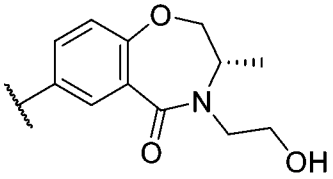
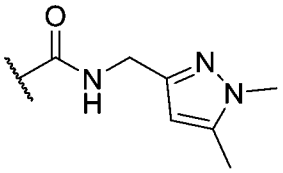
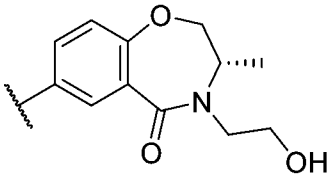
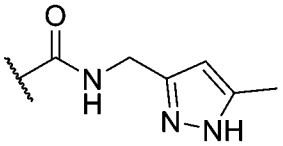
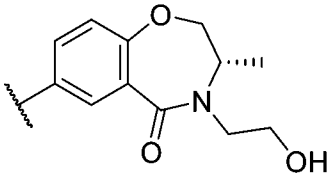
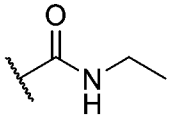
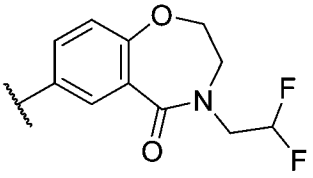
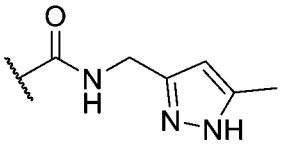
1320		
1321		
1322		
1323		
1324		
1325		
1326		
1327		
1328		
1329		

1330		
1331		
1332		
1333		
1334		
1335		
1336		
1337		
1338		
1339		
1340		

1341		
1342		
1343		
1344		
1345		
1346		
1347		
1350		
1351		
1352		

1353		
1354		
1355		
1356		
1357		
1358		
1359		
1360		
1361		
1362		

1363		
1364		
1365		
1366		
1367		
1368		
1369		
1370		
1371		
1372		

1373		
1374		
1375		
1376		
1377		
1378		
1379		
1380		
1381		
1382		

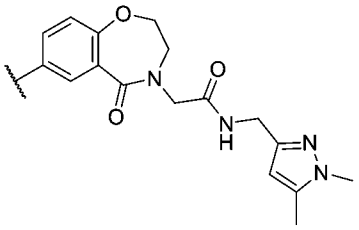
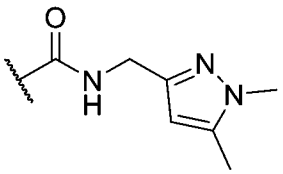
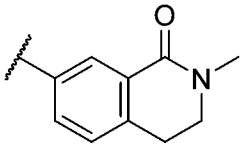
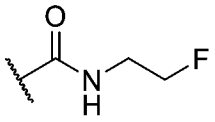
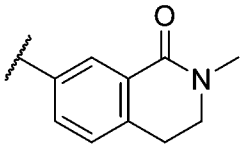
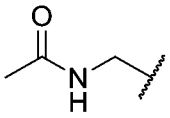
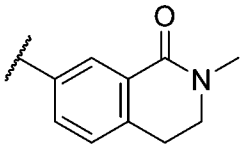
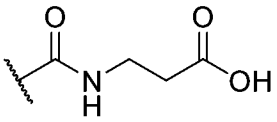
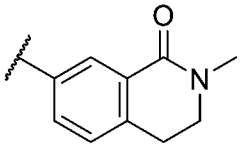
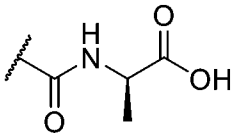
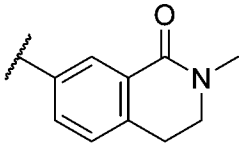
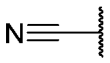
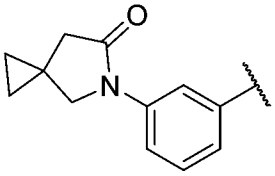
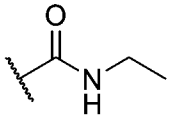
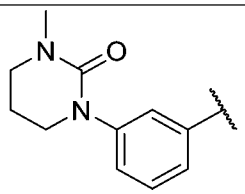
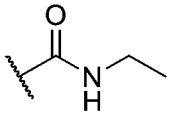
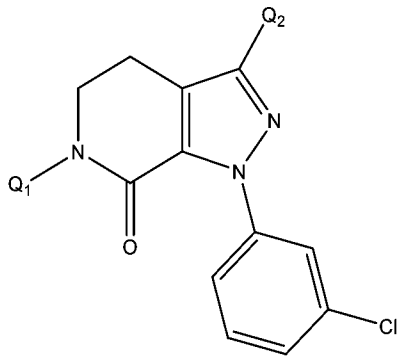
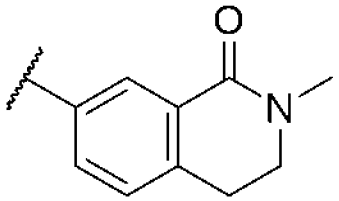
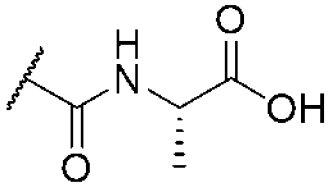
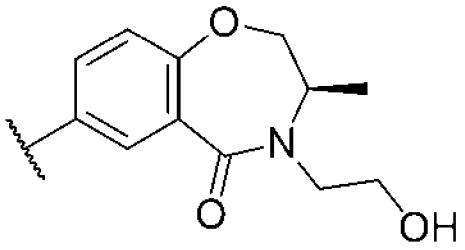
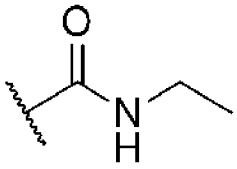
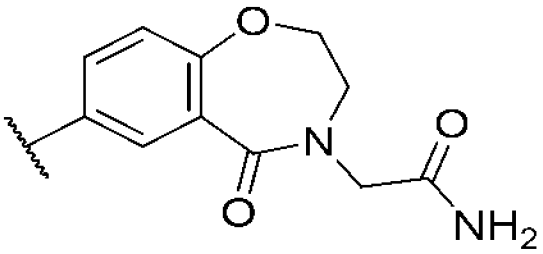
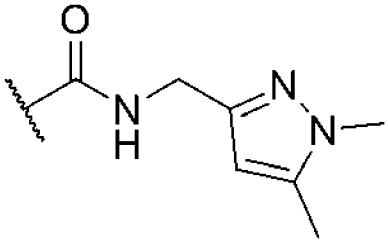
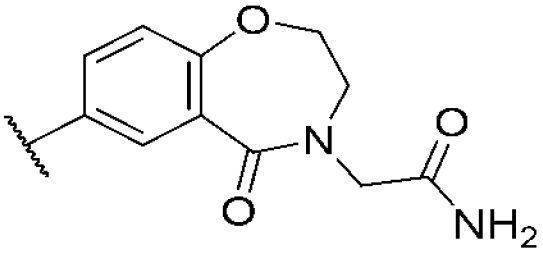
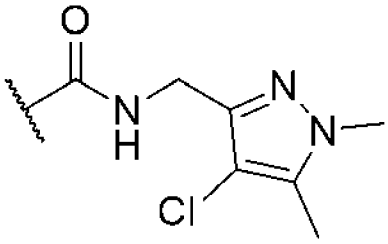
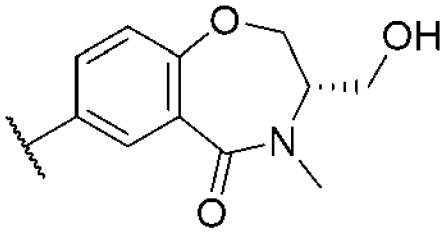
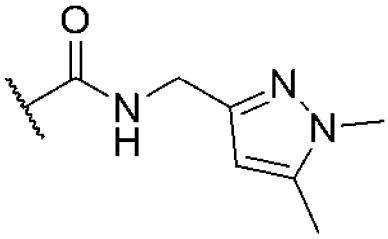
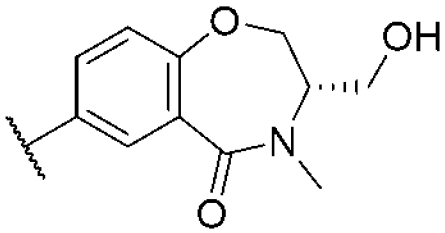
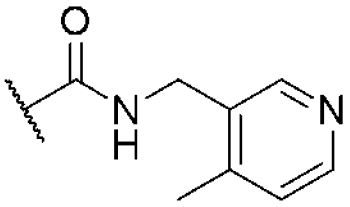
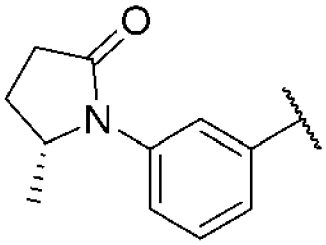
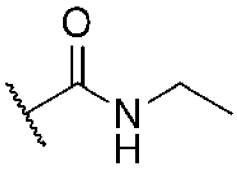
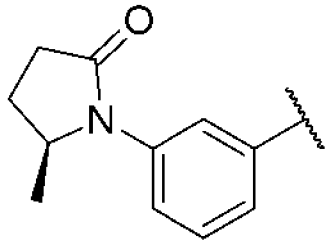
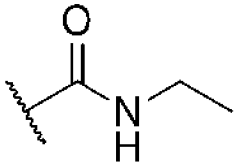
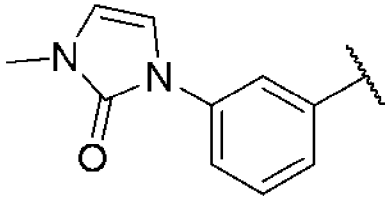
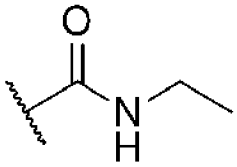
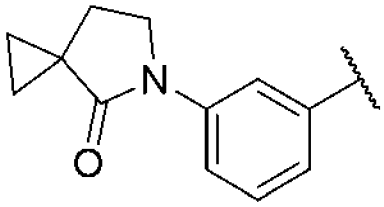
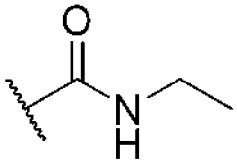
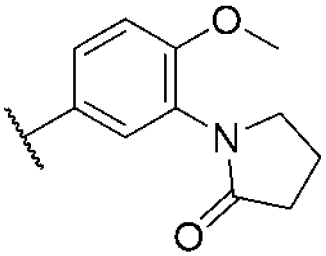
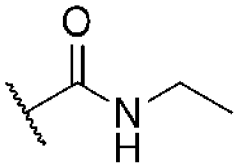
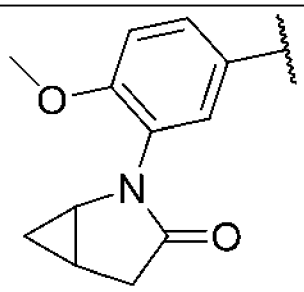
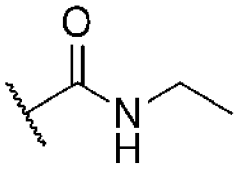
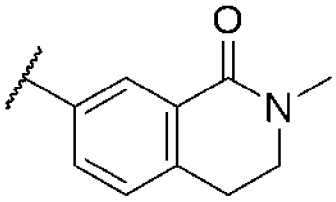
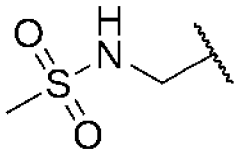
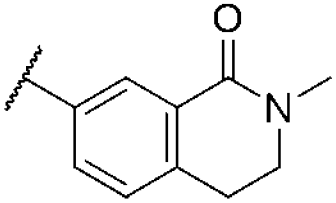
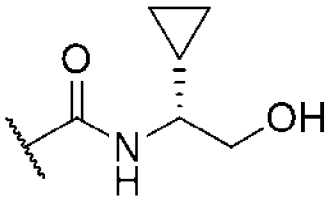
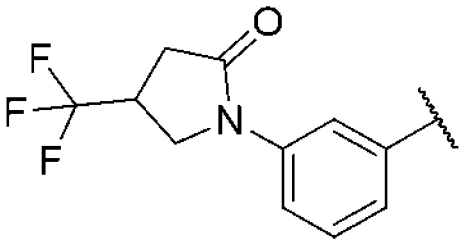
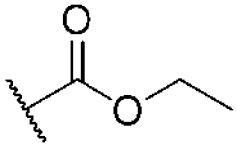
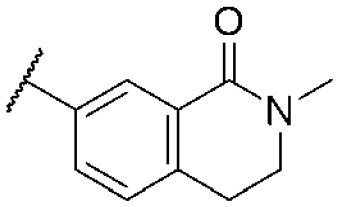
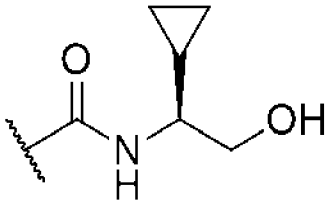
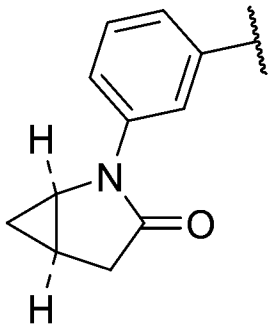
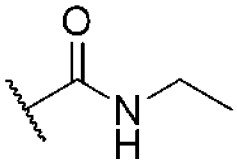
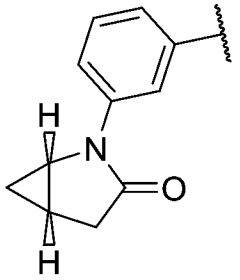
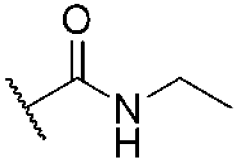
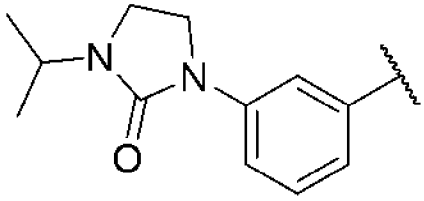
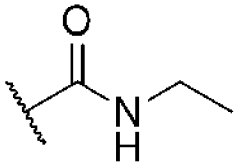
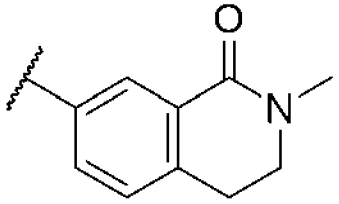
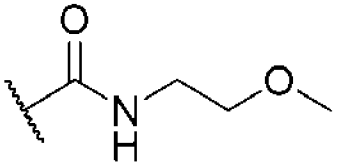
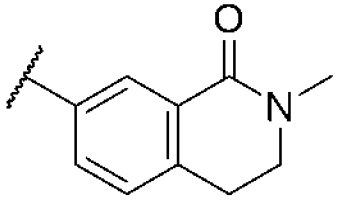
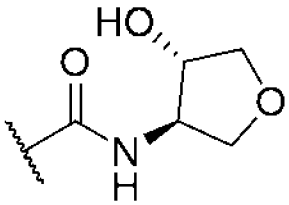
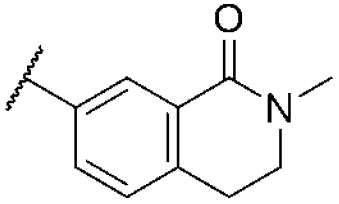
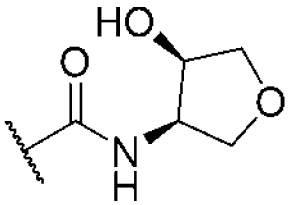
1383		
1384		
1385		
1386		
1387		
1388		
1389		
1390		

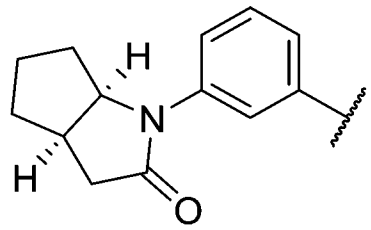
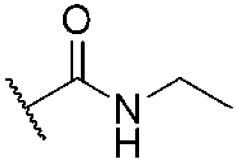
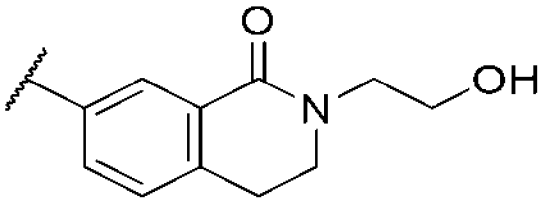
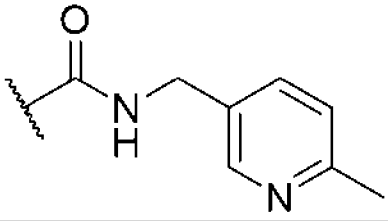
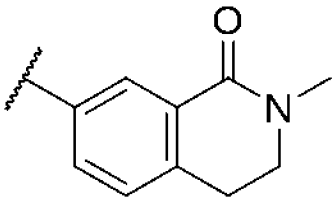
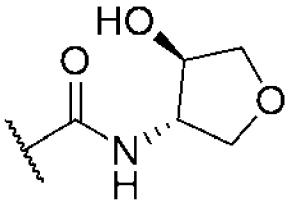
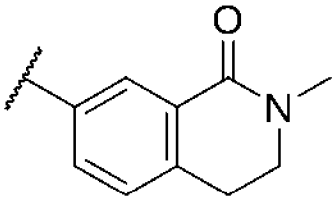
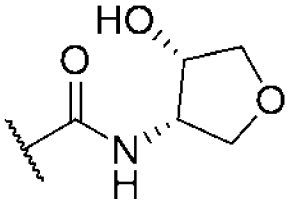
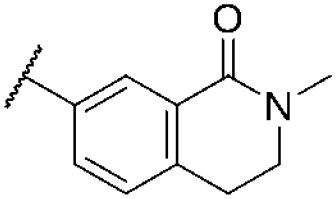
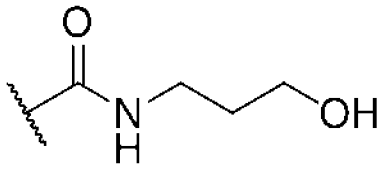
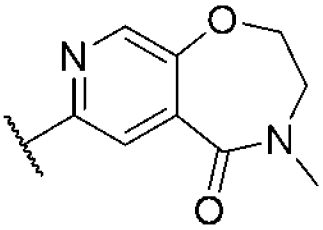
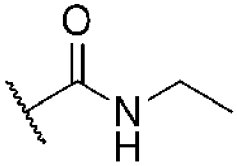
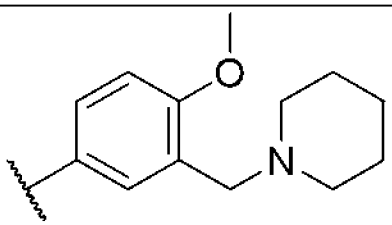
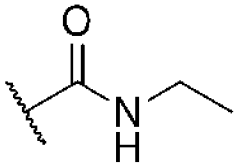
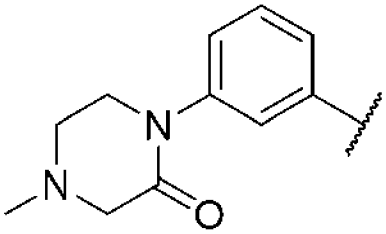
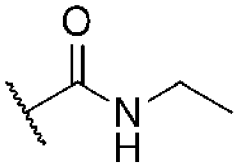
表1d

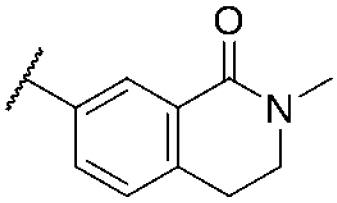
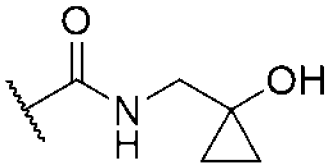
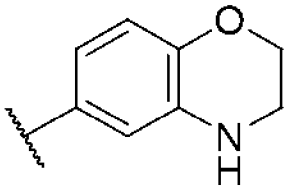
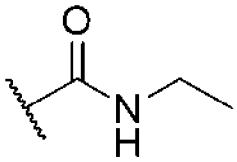
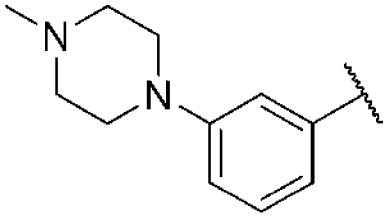
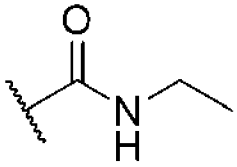
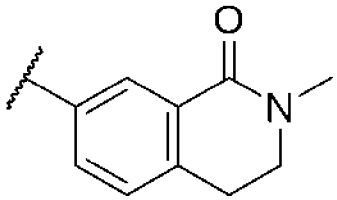
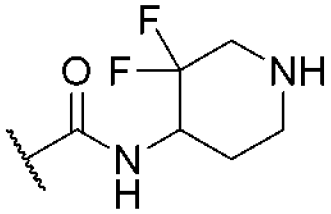
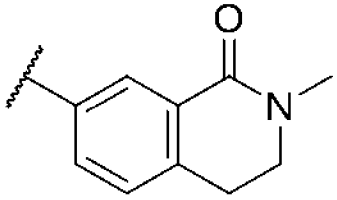
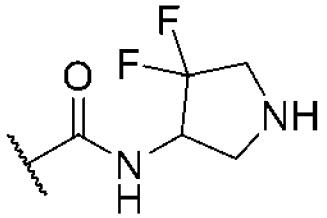
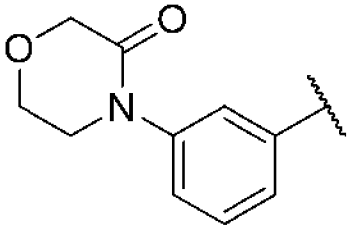
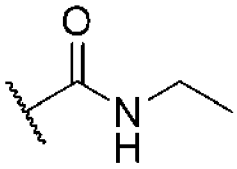
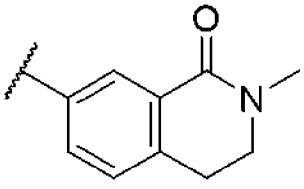
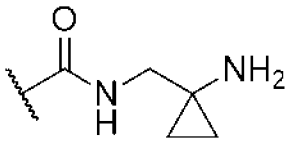
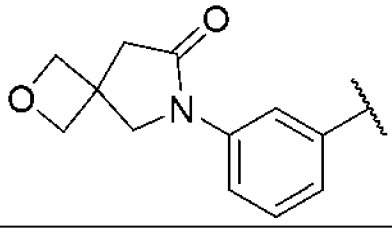
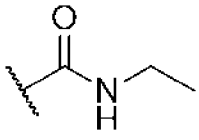


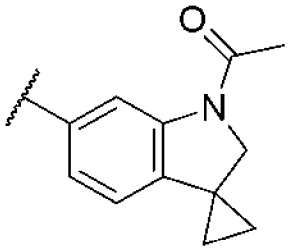
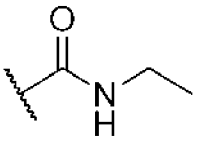
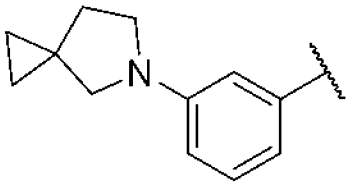
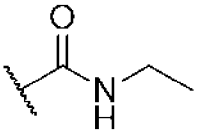
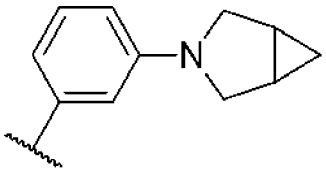
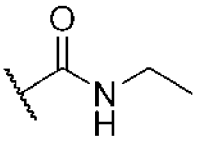
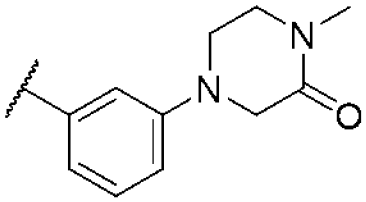
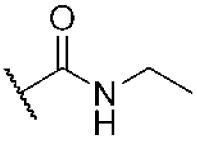
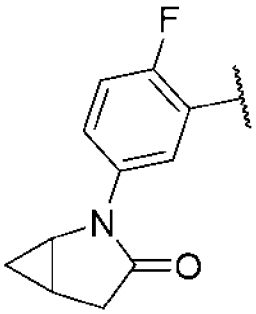
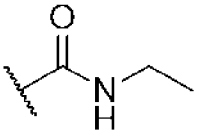
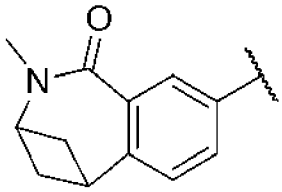
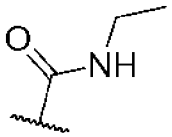
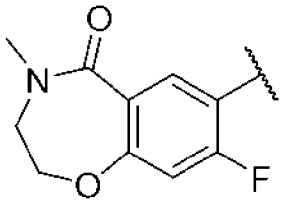
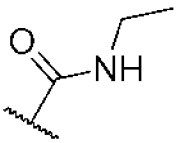
實例編號	Q1	Q2
1391		
1392		
1393		
1394		
1395		
1396		
1397		

1398		
1399		
1400		
1401		
1402		
1403		
1404		
1405		

1406		
1407		
1408		
1409		
1410		
1411		
1412		

1413		
1414		
1415		
1416		
1417		
1418		
1419		
1420		

1421		
1422		
1423		
1424		
1425		
1426		
1427		
1428		

1429		
1430		
1431		
1432		
1433		
1434		
1435		

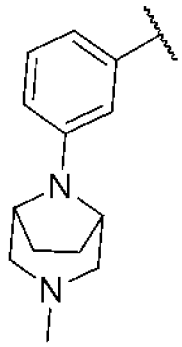
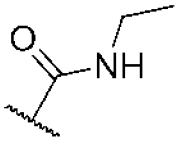
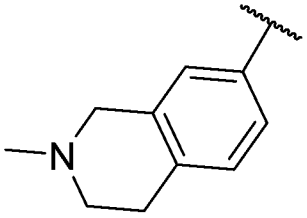
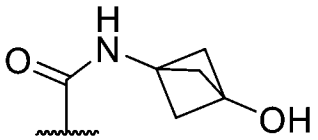
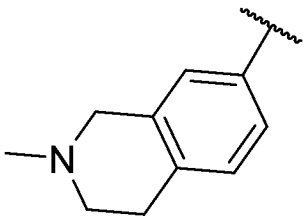
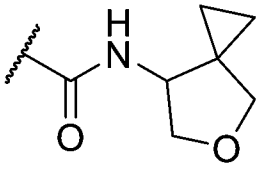
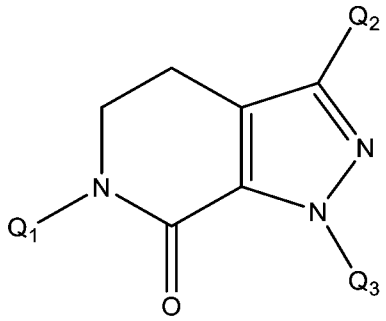
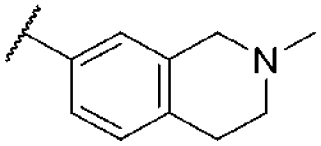
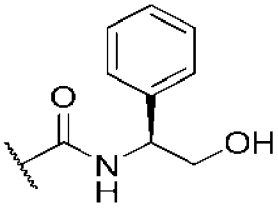
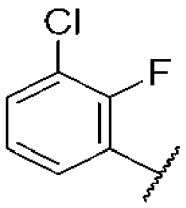
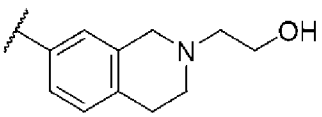
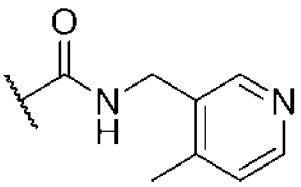
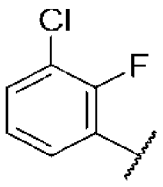
1436		
1437		
1438		

表2a



實例編號	Q1	Q2	Q3
2001			
2002			

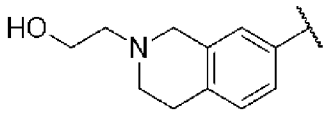
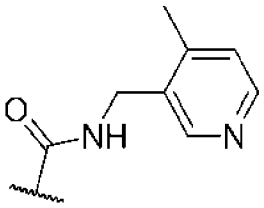
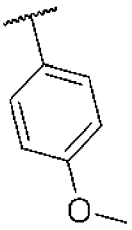
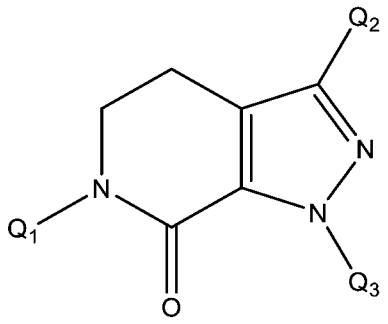
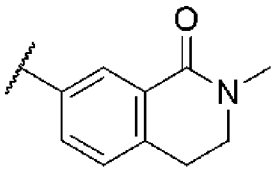
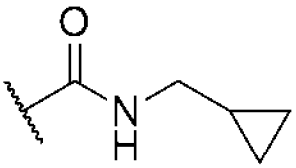
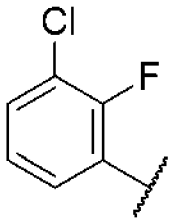
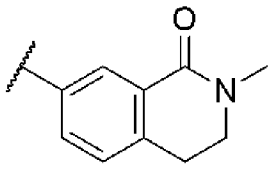
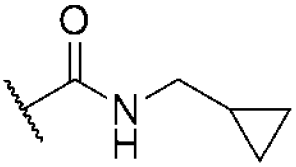
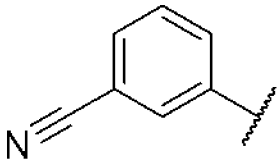
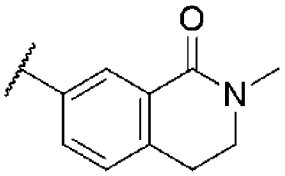
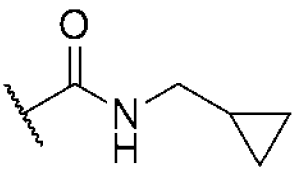
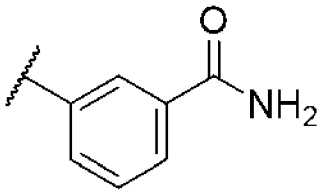
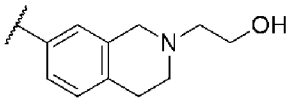
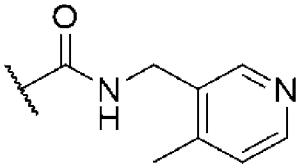
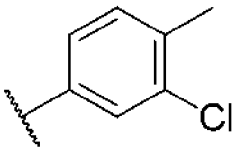
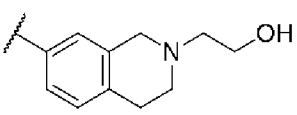
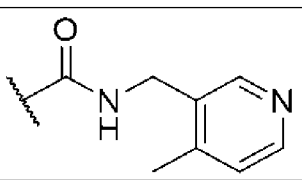
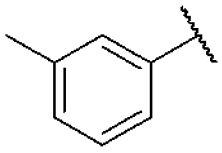
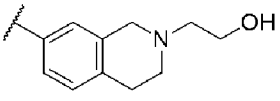
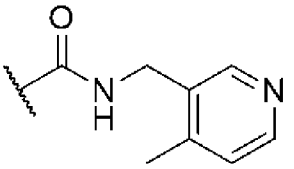
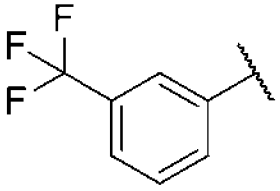
2003			

表2b



實例編號	Q1	Q2	Q3
2004			
2005			
2006			
2007			
2008			
2009			

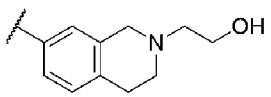
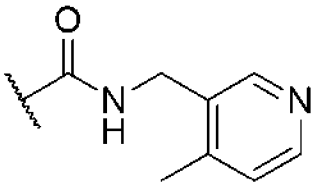
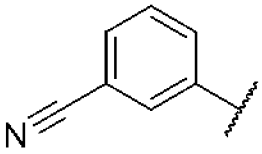
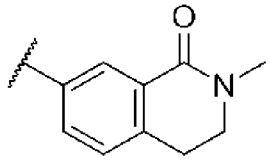
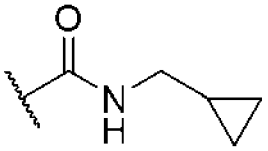
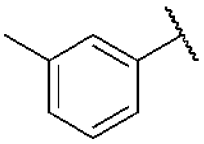
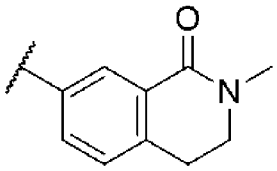
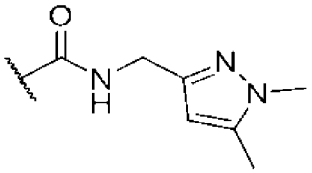
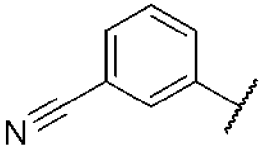
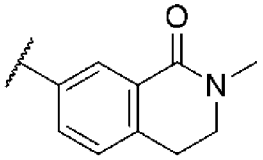
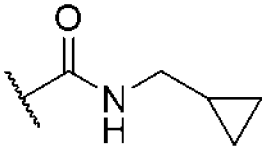
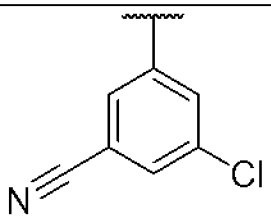
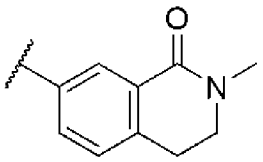
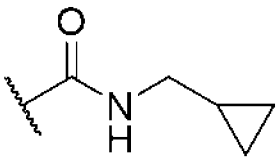
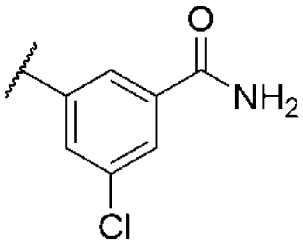
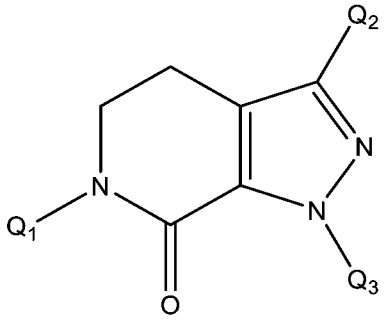
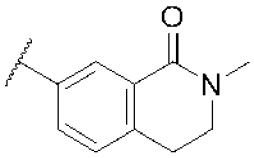
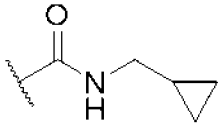
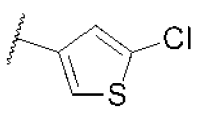
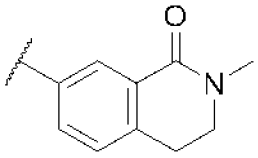
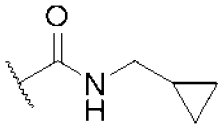
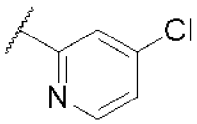
2010			
2011			
2012			
2013			
2014			

表2c



實例編號	Q1	Q2	Q3
2015			
2016			

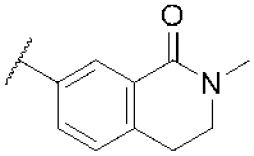
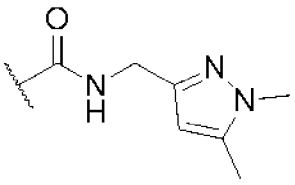
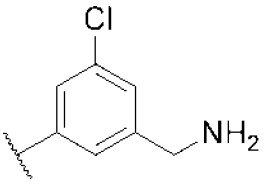
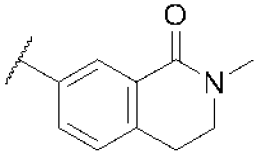
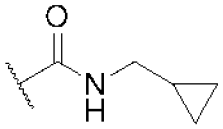
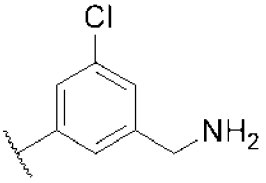
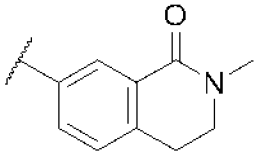
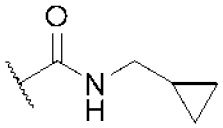
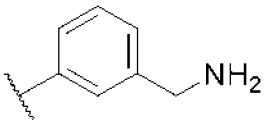
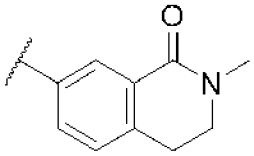
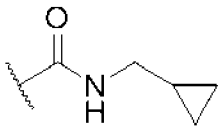
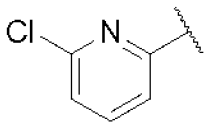
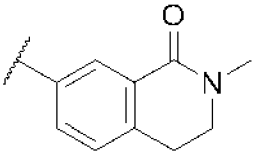
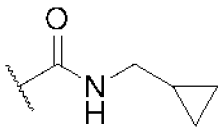
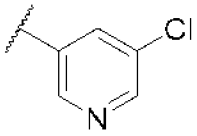
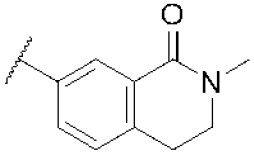
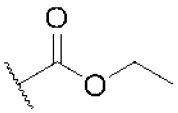
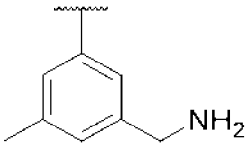
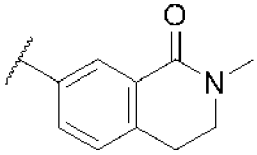
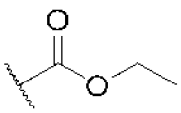
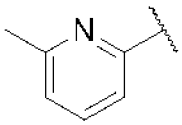
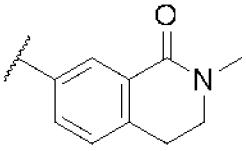
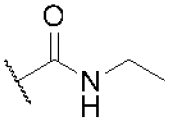
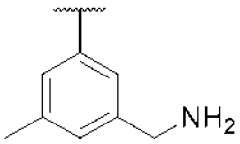
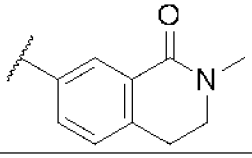
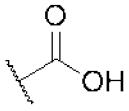
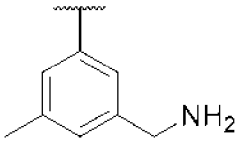
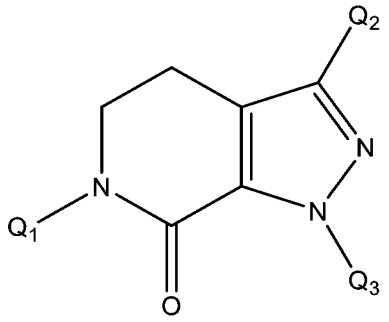
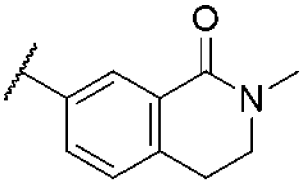
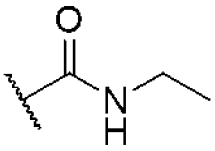
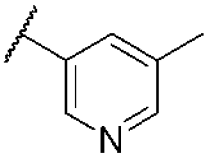
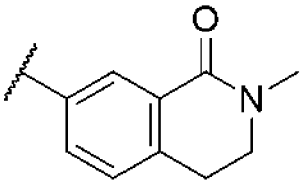
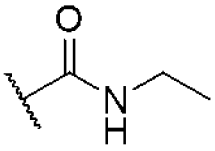
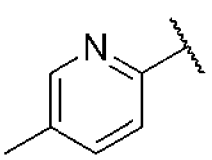
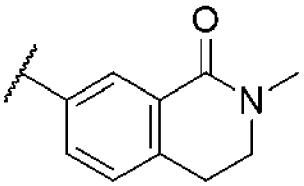
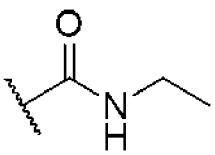
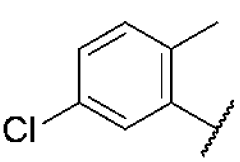
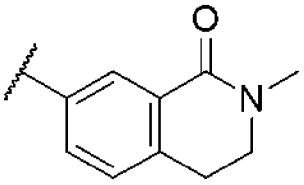
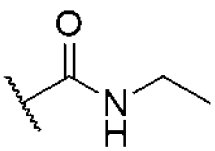
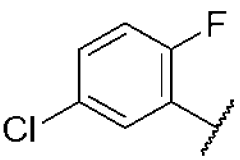
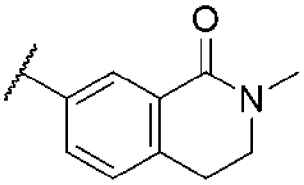
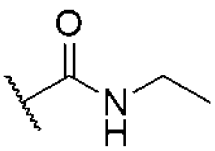
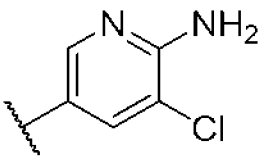
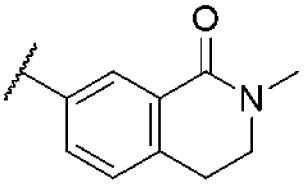
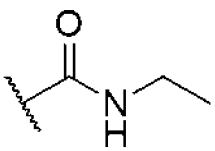
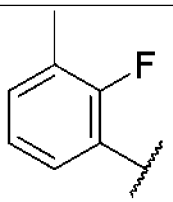
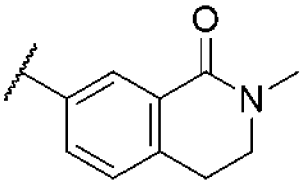
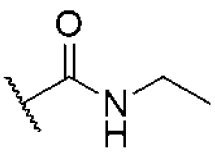
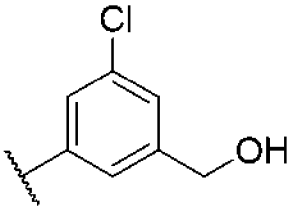
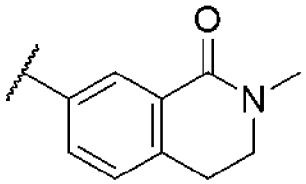
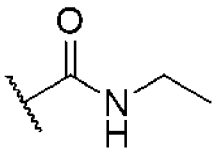
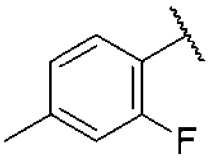
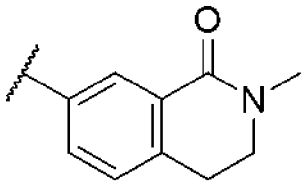
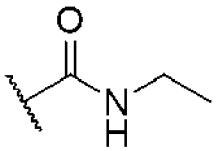
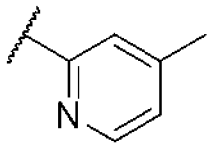
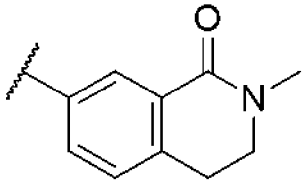
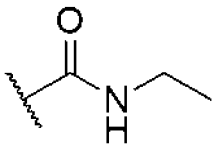
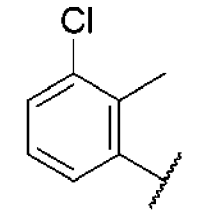
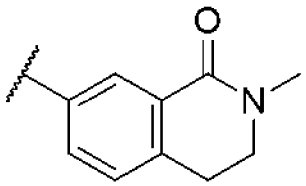
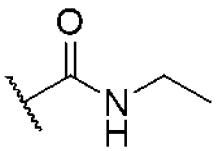
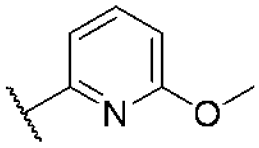
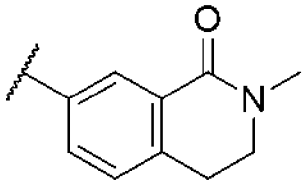
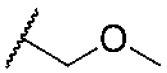
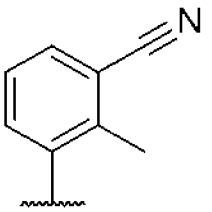
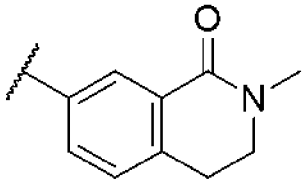
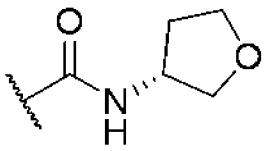
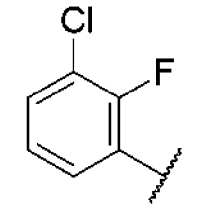
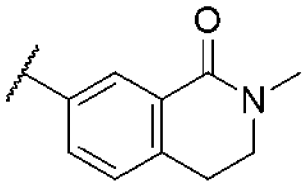
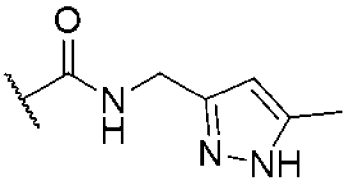
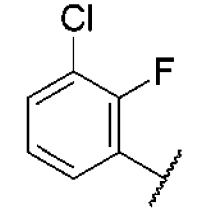
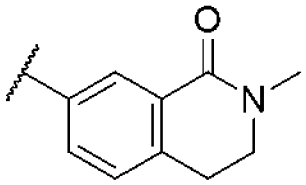
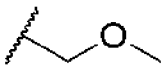
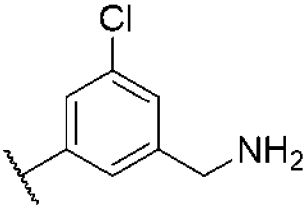
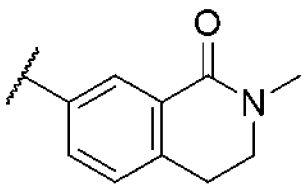
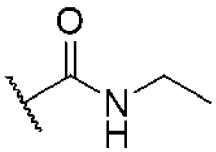
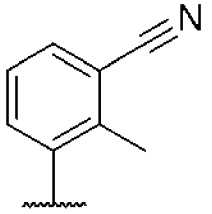
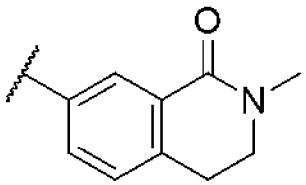
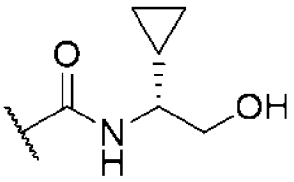
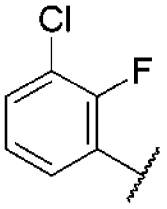
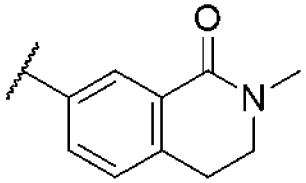
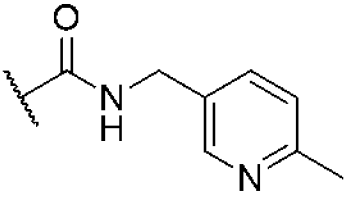
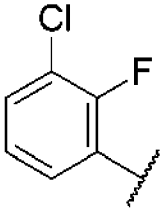
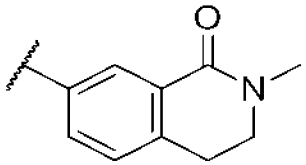
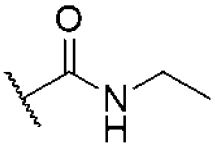
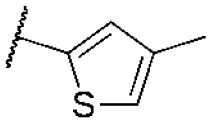
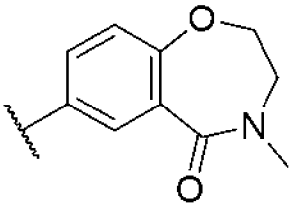
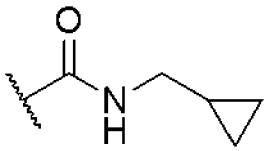
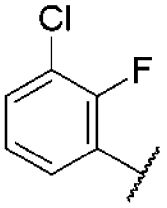
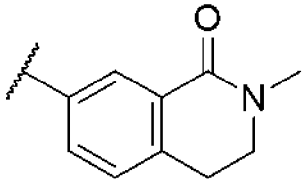
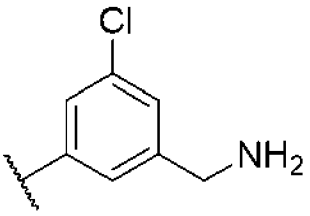
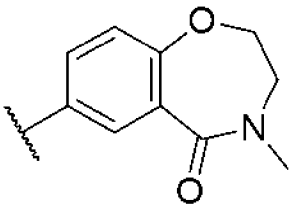
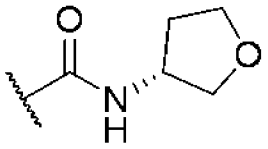
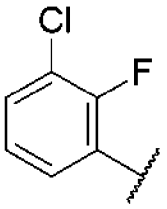
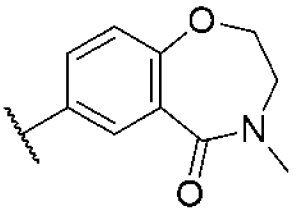
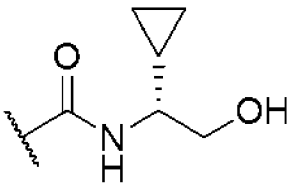
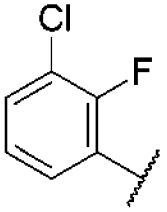
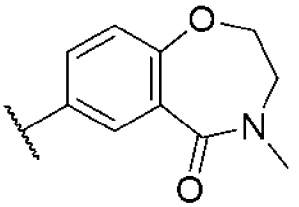
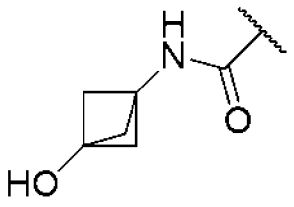
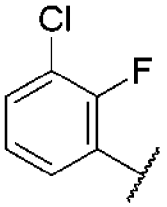
2017			
2018			
2019			
2020			
2021			
2022			
2023			
2024			
2025			

表2d



實例編號	Q1	Q2	Q3
2027			
2028			
2029			
2030			
2031			
2032			
2033			

2034			
2035			
2036			
2037			
2038			
2039			
2040			
2041			
2042			

2043			
2044			
2045			
2046			
2047			
2048			
2049			
2050			

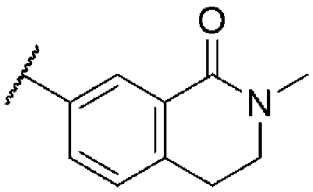
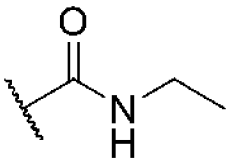
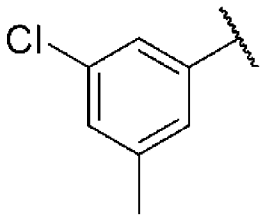
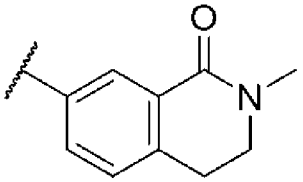
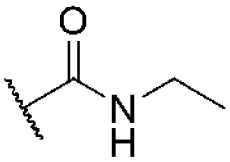
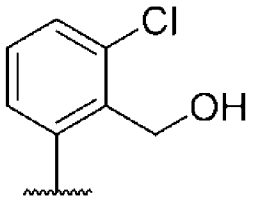
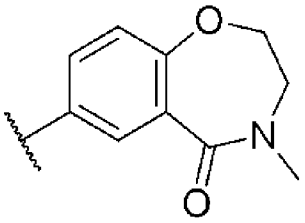
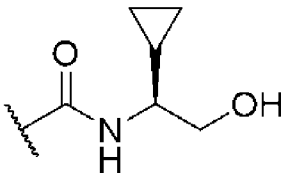
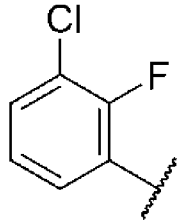
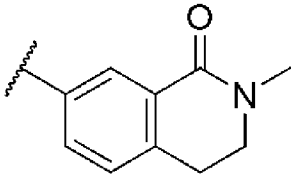
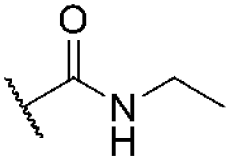
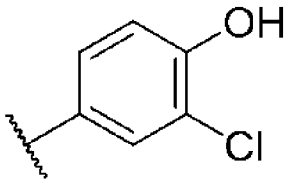
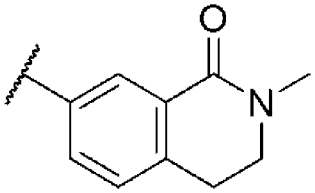
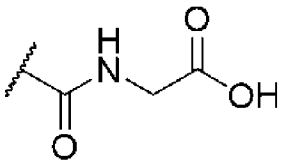
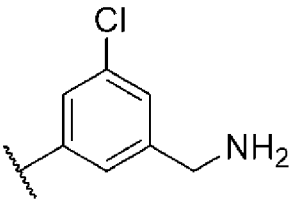
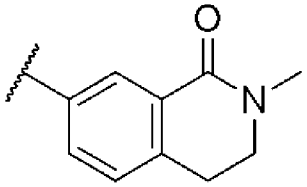
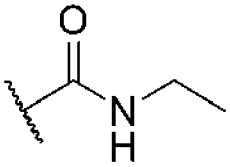
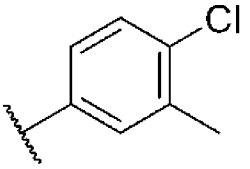
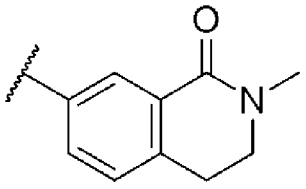
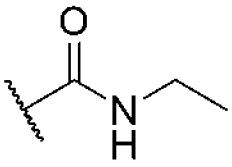
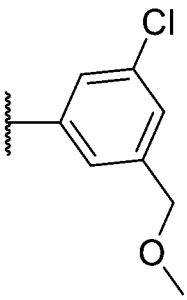
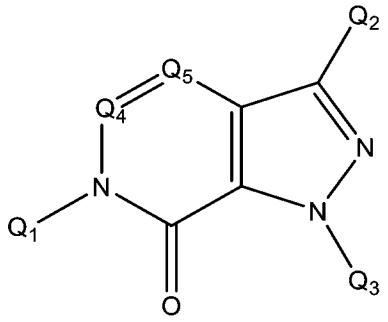
2051			
2052			
2053			
2054			
2056			
2057			
2058			

表3a



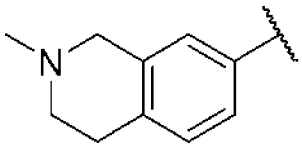
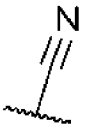
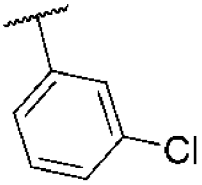
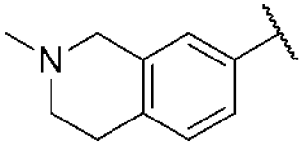
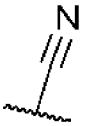
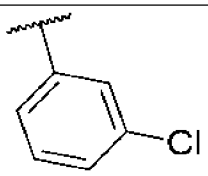
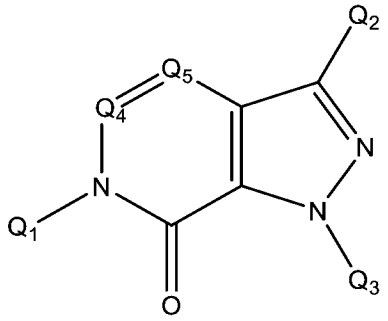
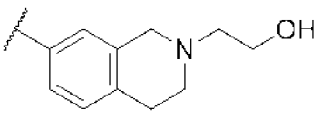
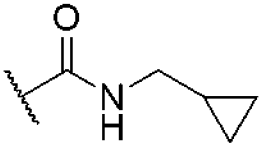
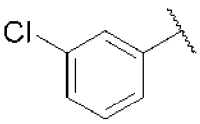
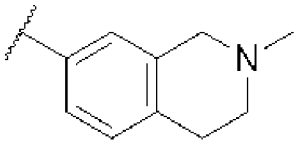
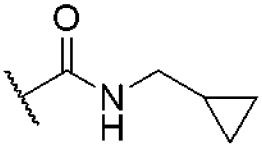
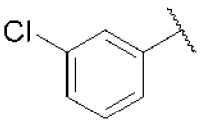
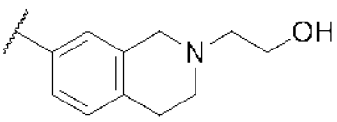
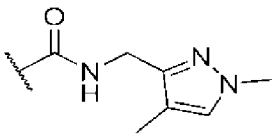
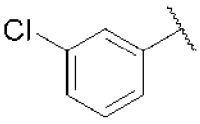
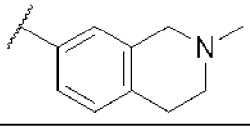
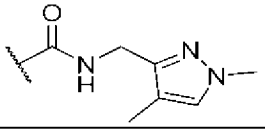
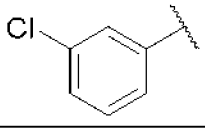
實例編號	Q1	Q2	Q3	Q4	Q5
3001				CH	N
3002				CCH_3	N

表3b



實例編號	Q1	Q2	Q3	Q4	Q5
3003				CCH_3	N
3004				CCH_3	N
3005				CCH_3	N
3006				CCH_3	N

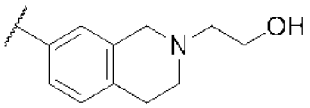
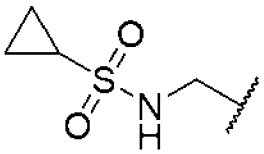
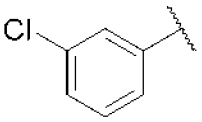
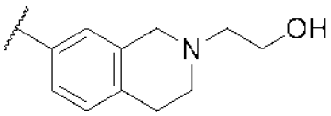
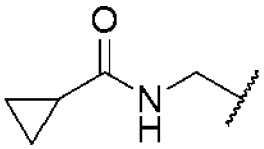
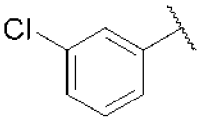
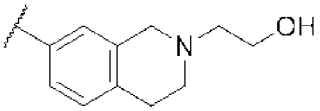
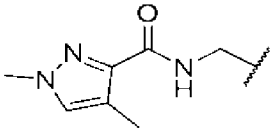
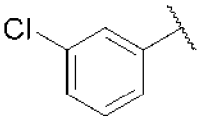
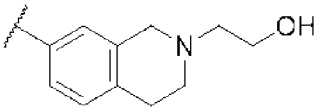
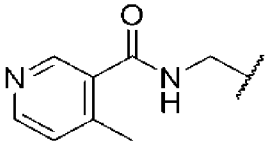
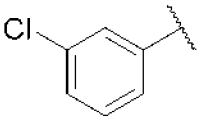
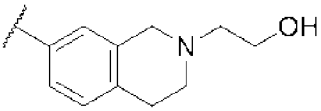
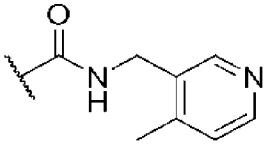
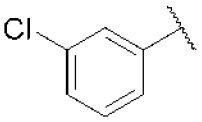
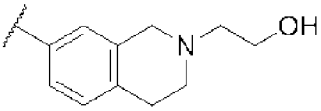
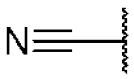
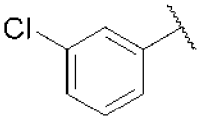
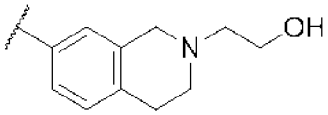
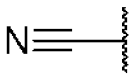
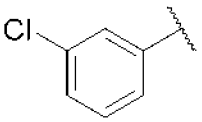
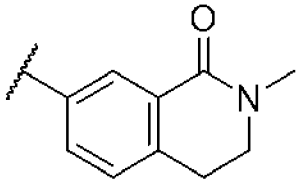
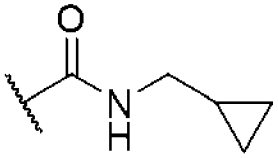
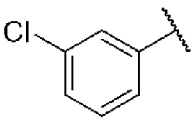
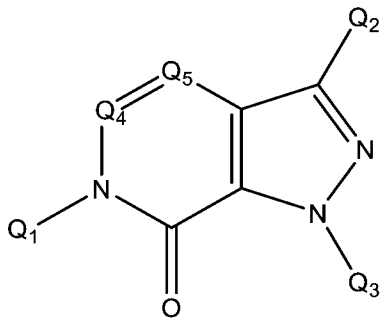
3007				CCH_3	N
3008				CCH_3	N
3009				CCH_3	N
3010				CCH_3	N
3011				CCH_3	N
3012				CCH_3	N
3013				CH	N
3014				CCH_3	N

表3c



實例編號	Q1	Q2	Q3	Q4	Q5

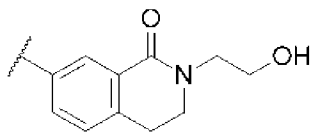
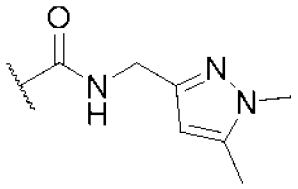
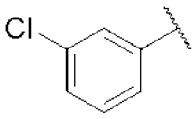
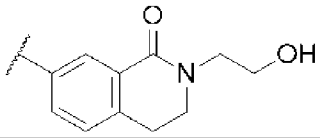
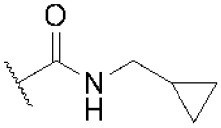
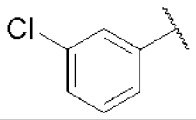
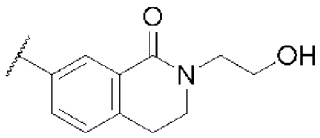
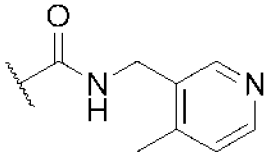
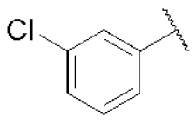
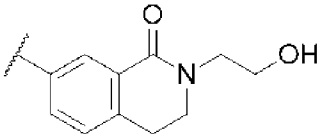
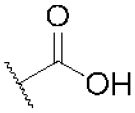
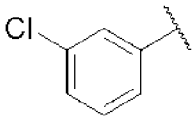
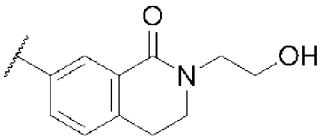
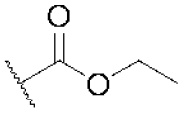
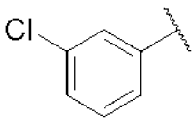
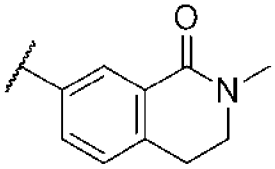
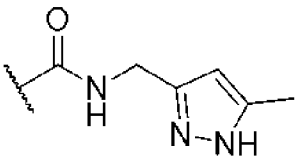
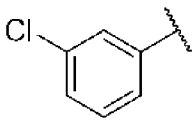
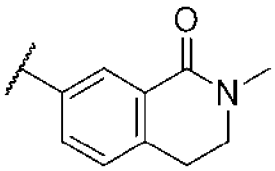
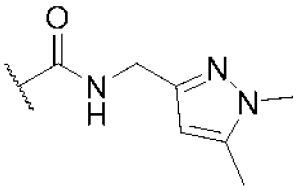
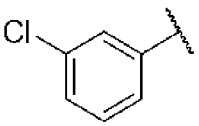
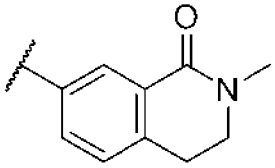
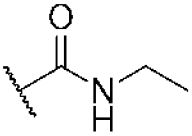
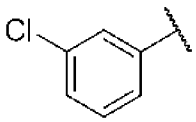
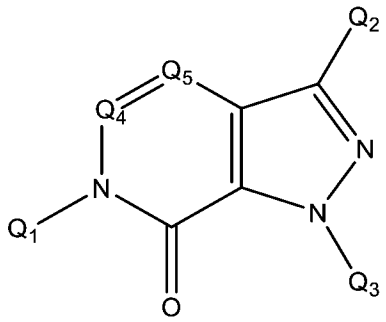
3015				CCH_3	N
3016				CCH_3	N
3017				CCH_3	N
3018				CCH_3	N
3019				CCH_3	N
3020				CCH_3	N
3021				CCH_3	N
3022				CCH_3	N

表3d



實例編號	Q1	Q2	Q3	Q4	Q5

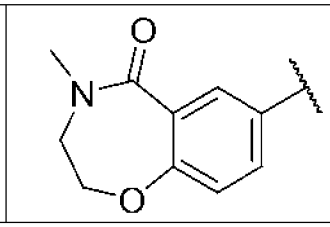
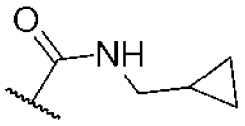
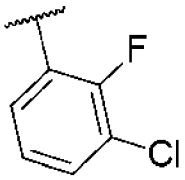
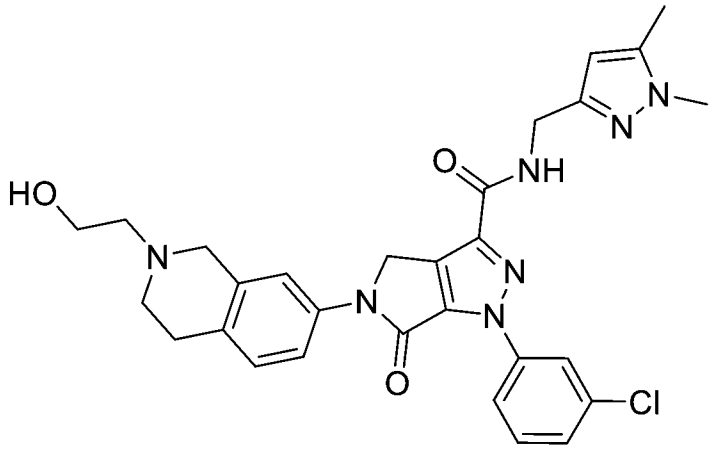
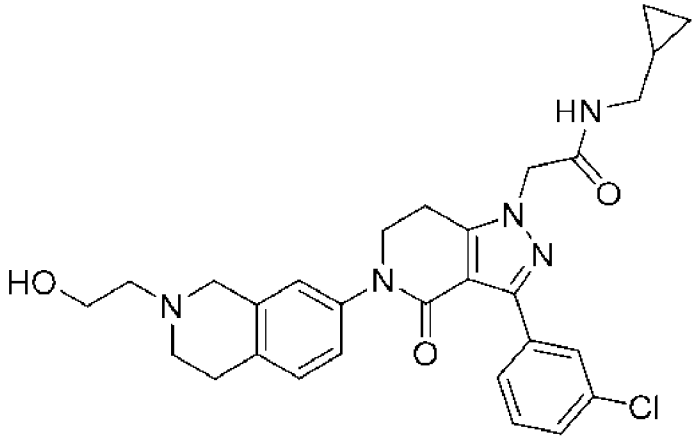
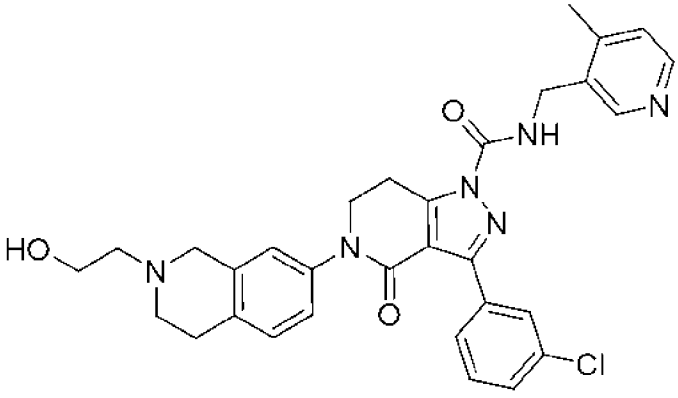
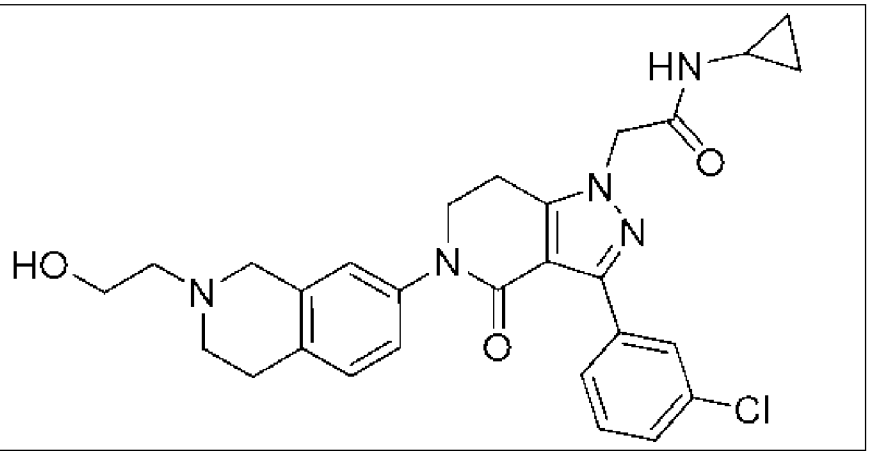
3023				CCH_3	N

表4

實例編號	結構
4001	
4002	
4003	

4004	

【0893】較佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：2017、1001、1002、1003、1005、1006、1007、1008、1010、1012、1013、1014、1015、1017、1019、1020、1021、1022、1023、1024、1025、1026、1027、1028、1029、1030、1031、1032、1034、1035、1036、1037、1038、1039、1041、1042、1043、1044、1045、1046、1047、1048、1049、1050、1051、1052、1053、1054、1055、1056、1057、1058、1059、1060、1061、1063、1064、1065、1068、1069、1070、1075、1076、1077、1078、1079、1080、1081、1082、1083、1084、1085、1086、1087、1088、1089、1090、1091、1092、1093、1096、1098、1099、1101、1102、1103、1104、1105、1106、1107、1108、1109、1110、1111、1112、1113、1115、1116、1117、1118、1119、1120、1121、1122、1123、1124、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1131、1132、1133、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1142、1143、1144、1145、1146、1147、1148、1149、1150、1151、1152、1153、1154、1155、1156、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1164、1166、1167、1168、1169、1170、1171、1172、1173、1174、1175、1176、1177、1178、1179、1180、1181、1185、1186、1187、1188、1189、1191、1193、1194、1197、1198、1199、1200、1201、1202、1203、1204、1209、1210、1211、1213、1214、1215、1216、1217、1218、1219、1220、1221、1222、1223、1224、1225、1226、

1227、1229、1230、1231、1233、1234、1235、1236、1237、1238、1239、1240、1245、1246、1247、1248、1249、1250、1251、1252、1253、1254、1255、1256、1257、1258、1259、1260、1261、1262、1264、1265、1266、1267、1268、1271、1274、1275、1280、1282、1283、1284、1287、1288、1289、1290、1292、1293、1294、1296、1297、1299、1302、1303、1304、1305、1306、1307、1308、1309、1310、1314、1317、1318、1319、1320、1321、1325、1326、1327、1328、1329、1331、1332、1333、1334、1336、1337、1338、1339、1340、1341、1342、1344、1346、1347、1352、1353、1355、1357、1359、1360、1367、1370、1371、1372、1373、1374、1376、1377、1378、1379、1380、1382、1383、1384、1388、1391、1393、1394、1396、1404、1406、1408、1410、1411、1412、1414、1415、1416、1417、1418、1421、1424、1425、1427、1429、1433、1435、1437、1438、2001、2002、2003、2004、2005、2007、2008、2009、2010、2011、2012、2014、2018、2019、2020、2022、2023、2024、2025、2032、2033、2039、2040、2041、2043、2044、2046、2048、2049、2050、2051、2053、2056、3001、3002、3003、3004、3005、3006、3007、3008、3009、3010、3011、3012、3013、3014、3015、3016、3017、3019、3020、3021、3022、3023或4003，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0894】較佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：2017、1005、1021、1022、1037、1051、1055、1065、1077、1078、1079、1089、1099、1107、1109、1110、1111、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1132、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1144、1146、1147、1150、1154、1155、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1166、1168、1170、1171、1172、1177、

1189、1217、1219、1220、1221、1222、1230、1234、1236、1254、1256、1275、1288、1299、1305、1306、1317、1318、1319、1321、1352、1376、1377、1378、1382、1383、2001、2002、2008、2018、2022、2024、2025、3005、3006、3011、3015、3017、1001、1007、1013、1015、1019、1023、1024、1030、1031、1035、1044、1049、1052、1053、1054、1059、1060、1061、1063、1068、1070、1075、1076、1080、1083、1084、1085、1086、1087、1088、1090、1091、1092、1093、1098、1103、1105、1106、1108、1112、1117、1118、1121、1122、1123、1131、1133、1142、1143、1145、1148、1151、1156、1165、1167、1169、1173、1174、1175、1178、1186、1188、1193、1199、1200、1201、1203、1204、1209、1210、1213、1215、1216、1218、1223、1224、1225、1226、1227、1229、1231、1233、1235、1237、1238、1239、1245、1247、1248、1253、1255、1258、1259、1262、1271、1289、1290、1293、1294、1296、1307、1309、1314、1320、1325、1326、1327、1355、1371、1374、2004、2007、2009、2010、2019、2020、3002、3003、3004、3012、3013、3014、3016、3019、3020、3021、4003、1002、1003、1006、1008、1010、1012、1014、1017、1020、1025、1026、1027、1028、1029、1032、1034、1036、1038、1039、1041、1042、1043、1045、1046、1047、1048、1050、1056、1057、1058、1064、1069、1081、1082、1096、1101、1102、1104、1113、1115、1116、1119、1120、1124、1149、1152、1153、1164、1176、1179、1180、1181、1185、1187、1191、1194、1197、1198、1202、1211、1214、1240、1246、1249、1250、1251、1252、1257、1260、1261、1264、1265、1266、1267、1268、1274、1280、1282、1283、1284、1287、1292、1297、1302、1303、1304、1308、1310、1328、1329、1331、1332、1333、1334、1336、1337、1338、1339、1340、

1341、1342、1344、1346、1347、1353、1357、1359、1360、1367、1370、1372、1373、1379、1380、1384、1388、2003、2005、2011、2012、2014、2023、3001、3007、3008、3009、3010或3022，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0895】較佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1005、1021、1022、1037、1051、1055、1065、1077、1078、1079、1089、1099、1107、1109、1110、1111、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1132、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1144、1146、1147、1150、1154、1155、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1166、1168、1170、1171、1172、1177、1189、1217、1219、1220、1221、1222、1230、1234、1236、1254、1256、1275、1288、2001、2002、2008、3005、3006、3011、1001、1007、1013、1015、1019、1023、1024、1030、1031、1035、1044、1049、1052、1053、1054、1059、1060、1061、1063、1068、1070、1075、1076、1080、1083、1084、1085、1086、1087、1088、1090、1091、1092、1093、1098、1103、1105、1106、1108、1112、1117、1118、1121、1122、1123、1131、1133、1142、1143、1145、1148、1151、1156、1165、1167、1169、1173、1174、1175、1178、1186、1188、1193、1199、1200、1201、1203、1204、1209、1210、1213、1215、1216、1218、1223、1224、1225、1226、1227、1229、1231、1233、1235、1237、1238、1239、1245、1247、1248、1253、1255、1258、1259、1262、1271、1289、1290、1293、1294、1296、2004、2007、2009、2010、3002、3003、3004、3012、3013、3014、4003、1002、1003、1006、1008、1010、1012、1014、1017、1020、1025、1026、1027、1028、1029、1032、1034、1036、1038、1039、1041、1042、1043、1045、1046、1047、1048、1050、1056、1057、1058、1064、1069、1081、1082、1096、1101、1102、1104、1113、

1115、1116、1119、1120、1124、1149、1152、1153、1164、1176、1179、1180、1181、1185、1187、1191、1194、1197、1198、1202、1211、1214、1240、1246、1249、1250、1251、1252、1257、1260、1261、1264、1265、1266、1267、1268、1274、1280、1282、1283、1284、1287、1292、1297、2003、2005、2011、2012、2014、3001、3007、3008、3009或3010，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0896】較佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1005、1021、1022、1037、1051、1055、1065、1077、1078、1079、1089、1099、1107、1109、1110、1111、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1132、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1144、1146、1147、1150、1154、1155、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1166、1168、1170、1171、1172、1177、2001、2002、1001、1007、1013、1015、1019、1023、1024、1030、1031、1035、1044、1049、1052、1053、1054、1059、1060、1061、1063、1068、1070、1075、1076、1080、1083、1084、1085、1086、1087、1088、1090、1091、1092、1093、1098、1103、1105、1106、1108、1112、1117、1118、1121、1122、1123、1131、1133、1142、1143、1145、1148、1151、1156、1165、1167、1169、1173、1174、1175、1178、3002、1002、1003、1006、1008、1010、1012、1014、1017、1020、1025、1026、1027、1028、1029、1032、1034、1036、1038、1039、1041、1042、1043、1045、1046、1047、1048、1050、1056、1057、1058、1064、1069、1081、1082、1096、1101、1102、1104、1113、1115、1116、1119、1120、1124、1149、1152、1153、1164、1176、2003或3001，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0897】更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：2017、1001、1005、1007、1013、1015、1019、1021、1022、1023、1024、1030、1031、1035、1037、

1044、1049、1051、1052、1053、1054、1055、1059、1060、1061、1063、1065、1068、1070、1075、1076、1077、1078、1079、1080、1083、1084、1085、1086、1087、1088、1089、1090、1091、1092、1093、1098、1099、1103、1105、1106、1107、1108、1109、1110、1111、1112、1117、1118、1121、1122、1123、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1131、1132、1133、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1142、1143、1144、1145、1146、1147、1148、1150、1151、1154、1155、1156、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1166、1167、1168、1169、1170、1171、1172、1173、1174、1175、1177、1178、1186、1188、1189、1193、1199、1200、1201、1203、1204、1209、1210、1213、1215、1216、1217、1218、1219、1220、1221、1222、1223、1224、1225、1226、1227、1229、1230、1231、1233、1234、1235、1236、1237、1238、1239、1245、1247、1248、1253、1254、1255、1256、1258、1259、1262、1271、1275、1288、1289、1290、1293、1294、1296、1299、1305、1306、1307、1309、1314、1317、1318、1319、1320、1321、1325、1326、1327、1352、1355、1371、1374、1376、1377、1378、1382、1383、1393、1394、1404、1406、1414、1415、1416、1424、1435、1437、1438、2001、2002、2004、2007、2008、2009、2010、2018、2019、2020、2022、2024、2025、2039、2040、2041、2043、2044、2046、2048、2049、2050、2053、2056、3002、3003、3004、3005、3006、3011、3012、3013、3014、3015、3016、3017、3019、3020、3021或4003，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0898】 更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：2017、1005、1021、1022、1037、1051、1055、1065、1077、1078、1079、1089、1099、1107、1109、1110、1111、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1132、1134、1135、1136、

1137、1138、1139、1140、1141、1144、1146、1147、1150、1154、1155、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1166、1168、1170、1171、1172、1177、1189、1217、1219、1220、1221、1222、1230、1234、1236、1254、1256、1275、1288、1299、1305、1306、1317、1318、1319、1321、1352、1376、1377、1378、1382、1383、2001、2002、2008、2018、2022、2024、2025、3005、3006、3011、3015、3017、1001、1007、1013、1015、1019、1023、1024、1030、1031、1035、1044、1049、1052、1053、1054、1059、1060、1061、1063、1068、1070、1075、1076、1080、1083、1084、1085、1086、1087、1088、1090、1091、1092、1093、1098、1103、1105、1106、1108、1112、1117、1118、1121、1122、1123、1131、1133、1142、1143、1145、1148、1151、1156、1165、1167、1169、1173、1174、1175、1178、1186、1188、1193、1199、1200、1201、1203、1204、1209、1210、1213、1215、1216、1218、1223、1224、1225、1226、1227、1229、1231、1233、1235、1237、1238、1239、1245、1247、1248、1253、1255、1258、1259、1262、1271、1289、1290、1293、1294、1296、1307、1309、1314、1320、1325、1326、1327、1355、1371、1374、2004、2007、2009、2010、2019、2020、3002、3003、3004、3012、3013、3014、3016、3019、3020、3021或4003，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0899】更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1005、1021、1022、1037、1051、1055、1065、1077、1078、1079、1089、1099、1107、1109、1110、1111、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1132、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1144、1146、1147、1150、1154、1155、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1166、1168、1170、1171、1172、1177、1189、

1217、1219、1220、1221、1222、1230、1234、1236、1254、1256、1275、1288、2001、2002、2008、3005、3006、3011、1001、1007、1013、1015、1019、1023、1024、1030、1031、1035、1044、1049、1052、1053、1054、1059、1060、1061、1063、1068、1070、1075、1076、1080、1083、1084、1085、1086、1087、1088、1090、1091、1092、1093、1098、1103、1105、1106、1108、1112、1117、1118、1121、1122、1123、1131、1133、1142、1143、1145、1148、1151、1156、1165、1167、1169、1173、1174、1175、1178、1186、1188、1193、1199、1200、1201、1203、1204、1209、1210、1213、1215、1216、1218、1223、1224、1225、1226、1227、1229、1231、1233、1235、1237、1238、1239、1245、1247、1248、1253、1255、1258、1259、1262、1271、1289、1290、1293、1294、1296、2004、2007、2009、2010、3002、3003、3004、3012、3013、3014或4003，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0900】 更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1005、1021、1022、1037、1051、1055、1065、1077、1078、1079、1089、1099、1107、1109、1110、1111、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1132、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1144、1146、1147、1150、1154、1155、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1166、1168、1170、1171、1172、1177、2001、2002、1001、1007、1013、1015、1019、1023、1024、1030、1031、1035、1044、1049、1052、1053、1054、1059、1060、1061、1063、1068、1070、1075、1076、1080、1083、1084、1085、1086、1087、1088、1090、1091、1092、1093、1098、1103、1105、1106、1108、1112、1117、1118、1121、1122、1123、1131、1133、

1142、1143、1145、1148、1151、1156、1165、1167、1169、1173、1174、1175、1178或3002，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0901】 更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：2017、1005、1021、1022、1037、1051、1055、1065、1077、1078、1079、1089、1099、1107、1109、1110、1111、1118、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1132、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1144、1146、1147、1150、1154、1155、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1166、1168、1170、1171、1172、1177、1189、1217、1219、1220、1221、1222、1230、1234、1236、1254、1256、1275、1288、1299、1305、1306、1317、1318、1319、1321、1352、1376、1377、1378、1382、1383、1393、1394、2001、2002、2008、2018、2022、2024、2025、2040、2041、2043、2044、2046、2048、2049、2050、2053、2056、3005、3006、3011、3015或3017，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0902】 更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：2017、1005、1021、1022、1037、1051、1055、1065、1077、1078、1079、1089、1099、1107、1109、1110、1111、1118、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1132、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1144、1146、1147、1150、1154、1155、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1166、1168、1170、1171、1172、1177、1189、1217、1219、1220、1221、1222、1230、1234、1236、1254、1256、1275、1288、1299、1305、1306、1317、1318、1319、1321、1352、1376、1377、1378、1382、1383、2001、2002、2008、2018、2022、2024、2025、3005、3006、3011、3015或3017，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0903】 更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1005、1021、1022、1037、1051、1055、1065、1077、1078、1079、1089、1099、1107、1109、1110、1111、1118、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1132、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1144、1146、1147、1150、1154、1155、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1166、1168、1170、1171、1172、1177、1189、1217、1219、1220、1221、1222、1230、1234、1236、1254、1256、1275、1288、2001、2002、2008、3005、3006或3011，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0904】 更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1005、1021、1022、1037、1051、1055、1065、1077、1078、1079、1089、1099、1107、1109、1110、1111、1118、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1132、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1144、1146、1147、1150、1154、1155、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1166、1168、1170、1171、1172、1177、2001、1024或2002，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0905】 更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：2017、1005、1021、1022、1037、1051、1055、1065、1077、1078、1079、1089、1099、1107、1109、1110、1111、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1132、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1144、1146、1147、1150、1154、1155、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1166、1168、1170、1171、1172、1177、1189、1217、1219、1220、1221、1222、1230、1234、1236、1254、1256、1275、1288、1299、1305、1306、1317、1318、1319、1321、1352、1376、1377、1378、1382、1383、1393、1394、2001、2002、2008、2018、2022、2024、2025、2040、

2041、2043、2044、2046、2048、2049、2050、2053、2056、3005、3006、3011、3015或3017，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0906】 更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：2017、1005、1021、1022、1037、1051、1055、1065、1077、1078、1079、1089、1099、1107、1109、1110、1111、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1132、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1144、1146、1147、1150、1154、1155、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1166、1168、1170、1171、1172、1177、1189、1217、1219、1220、1221、1222、1230、1234、1236、1254、1256、1275、1288、1299、1305、1306、1317、1318、1319、1321、1352、1376、1377、1378、1382、1383、2001、2002、2008、2018、2022、2024、2025、3005、3006、3011、3015或3017，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0907】 更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1005、1021、1022、1037、1051、1055、1065、1077、1078、1079、1089、1099、1107、1109、1110、1111、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1132、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1144、1146、1147、1150、1154、1155、1157、1158、1159、1160、1161、1162、1163、1166、1168、1170、1171、1172、1177、1189、1217、1219、1220、1221、1222、1230、1234、1236、1254、1256、1275、1288、2001、2002、2008、3005、3006或3011，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0908】 更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1005、1021、1022、1037、1051、1055、1065、1077、1078、1079、1089、1099、1107、1109、1110、1111、1125、1126、1127、1128、1129、1130、1132、1134、1135、1136、1137、1138、1139、1140、1141、1144、1146、1147、1150、1154、1155、1157、1158、

1159、1160、1161、1162、1163、1166、1168、1170、1171、1172、1177、2001、1024或2002，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0909】 甚至更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1024、1055、1128、1118、1166、1222、1236、2039、2048或2049，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0910】 甚至更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1024、1055、1128、1118、1166、1222或1236，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0911】 甚至更佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1024、1055、1128、1118或1166，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0912】 最佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1024、1055、1128、1149、1220、1222、2039、2048或2049，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0913】 最佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1024、1055、1128、1149、1220或1222，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0914】 最佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1024、1055、1128、1149或1220，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0915】 最佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：1024、1055或1128，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【0916】 最佳地，式(I)化合物為選自實例編號之化合物：2039、2048或2049，及其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

治療應用

【0917】 如上所述，本發明化合物(或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物)以及包含該等化合物(或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物)之醫藥組合物為FXIIa抑制劑。因此，其可用於治療以FXIIa為致病因素之疾病狀況。

【0918】 相應地，本發明提供本發明化合物(或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物)，或包含本發明化合物(或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物)之醫藥組合物，用於藥物中。

【0919】 本發明亦提供本發明化合物(或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物)或包含本發明化合物(或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物)之醫藥組合物的用途，用於製造用於治療或預防牽涉FXIIa活性之疾病或疾患之藥物。

【0920】 本發明亦提供一種治療牽涉FXIIa活性之疾病或疾患的方法，該方法包括向有需要之個體投與治療有效量之本發明化合物(或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物)，或包含本發明化合物(或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物)之醫藥組合物。

【0921】 如上文所論述，FXIIa可介導血漿前激肽釋放酶轉化為血漿激肽釋放酶。接著，血漿激肽釋放酶可導致高分子量激肽原裂解生成緩激肽，緩激肽為一種有效發炎激素。抑制FXIIa有可能抑制(或甚至阻止)血漿激肽釋放酶產生。因此，牽涉FXIIa活性之疾病或疾患可為緩激肽介導之血管性水腫。

【0922】 緩激肽介導之血管性水腫可為非遺傳性的。例如，非遺傳性緩激肽介導之血管性水腫可選自由正常C1抑制劑(AE-nC1 Inh)引起之非遺傳性血管性水腫，其可為環境、激素或藥物誘導的；獲得性血管性水腫；過敏反應相關之血管性水腫；血管緊張素轉換酶(ACE或ace)抑制劑誘導之血管性水腫；二肽基肽

酶-4抑制劑誘導之血管性水腫；及tPA誘導之血管性水腫(組織纖維蛋白溶酶原活化劑誘導之血管性水腫)。

【0923】 或者，且較佳地，緩激肽介導之血管性水腫可為遺傳性血管性水腫(HAE)，其為由遺傳性功能障礙/缺陷/突變引起之血管性水腫。可用根據本發明之化合物治療的HAE類型包括1型HAE、2型HAE及正常C1抑制劑HAE (正常C1 Inh HAE)。

【0924】 牽涉FXIIa活性之疾病或疾患可選自血管滲透性過高；中風，包括缺血性中風及出血性事件；視網膜水腫；糖尿病性視網膜病變；視力受損；DME；視網膜靜脈阻塞；及AMD。此等疾患亦可為緩激肽介導的。

【0925】 如上文所論述，FXIIa可活化FXIa以引起凝血級聯。血栓性病症與此級聯有關。因此，牽涉FXIIa活性之疾病或疾患可為血栓性病症。更特定言之，該血栓性病症可為血栓形成；因與血液接觸之醫學器件凝結血液之傾向增加而導致血栓栓塞；促血栓形成疾患，諸如瀰漫性血管內凝血(DIC)、靜脈血栓栓塞(VTE)、癌症相關之血栓形成、由機械及生物假體心臟瓣膜引起之併發症、由導管引起之併發症、由ECMO引起之併發症、由LVAD引起之併發症、由透析引起之併發症、由CPB引起之併發症、鐮狀細胞疾病、關節置換術、由tPA誘導之血栓形成、Paget-Schroetter症候群及Budd-Chari症候群；動脈粥樣硬化；COVID-19；與SARS-CoV-2感染相關之COVID-19；急性呼吸窘迫症候群(ARDS)；特發性肺纖維化(IPF)；類風濕性關節炎(RA)；及冷誘導之蕁麻疹自體發炎症候群。牽涉FXIIa活性之疾病或疾患可為遺傳性血管性水腫；COVID-19；與SARS-CoV-2感染相關之COVID-19；及特發性肺纖維化(IPF)。牽涉FXIIa活性之疾病或疾患可為

COVID-19。牽涉FXIIa活性之疾病或疾患可為與SARS-CoV-2感染相關之COVID-19。牽涉FXIIa活性之疾病或疾患可為特發性肺纖維化(IPF)。

【0926】 與血液接觸之醫學器件表面可引起血栓形成。本發明化合物(或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物)及醫藥組合物可塗佈於與血液接觸之器件的表面上，以減輕該器件引起血栓形成之風險。例如，其可降低此等器件凝結血液且因此導致血栓形成之傾向。與血液接觸之器件的實例包括血管移植物、支架、留置導管、外部導管、矯形假體、心臟假體及體外循環系統。

【0927】 FXIIa為致病因素之其他疾病狀況包括：神經發炎；神經發炎/神經退化性病症，諸如MS (多發性硬化症)；其他神經退化性疾病，諸如阿爾茲海默氏病、癲癇及偏頭痛；敗血症；細菌性敗血症；發炎；血管滲透性過高；及過敏反應。

【0928】 棕色脂肪組織(BAT)生熱活性可由激肽釋放酶-激肽系統介導，且BAT活性受損導致肥胖及胰島素抗性。抑制FXIIa有可能抑制(或甚至阻止)激肽釋放酶-激肽系統介導之BAT活性。因此，本發明化合物(或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物)及醫藥組合物可治療諸如肥胖及糖尿病之疾病狀況。

【0929】 因子XII抑制作用進一步與諸如腎病、腎纖維化、腎小球硬化、腎疤痕、原生或移植腎臟之缺血/再灌注損傷以及急性腎損傷之疾病狀況的治療有關。

【0930】 腦神經膠質母細胞瘤生長及惡性腫瘤以及包括水腫及認知功能在內之其併發症可能受到B1及B2激肽受體(激肽釋放酶-激肽系統之一部分，該等受體由緩激肽活化)調節作用之有益影響。因此，牽涉FXIIa活性之疾病或疾患可為

腦神經膠質母細胞瘤生長及惡性腫瘤，以及包括水腫及認知功能在內之其併發症。

【0931】 阻斷緩激肽之作用或抑制激肽釋放酶-激肽系統之活化對於治療及預防透析中低血壓(IDH)之發生具有治療作用。因此，牽涉FXIIa活性之疾病或疾患可為透析中低血壓(IDH)。

組合療法

【0932】 本發明化合物(或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物)可與其他治療劑組合投與。合適組合療法包括與一或多種選自以下之劑組合的任何本發明化合物(或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物)：抑制血小板源性生長因子(PDGF)、血管內皮生長因子(VEGF)之劑、整合素 $\alpha 5\beta 1$、類固醇、其他抑制FXIIa之劑以及其他發炎抑制劑。

【0933】 可與本發明化合物組合之治療劑的一些特定實例包括EP2281885A1中以及由S. Patel在*Retina*, 2009年6月;29(6 Suppl):S45-8中揭示之彼等治療劑。

【0934】 其他合適組合療法包括與一或多種選自以下之劑組合的本發明化合物(或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物)：治療HAE (如本文一般所定義)之劑，例如緩激肽B2拮抗劑，諸如艾替班特(Firazyr®)；血漿激肽釋放酶抑制劑，諸如艾卡拉肽(Kalbitor®)、拉那魯單抗(Takhzyro®)及貝羅司他(ORLADEYO™)；或C1酯酶抑制劑，諸如Cinryze®及Haegarda®及Berinert®及Ruconest®。

【0935】 其他合適組合療法包括與一或多種選自以下之劑組合的本發明化合物(或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物)：作為抗血栓形成劑(如上文所概述)之劑，例如其他因子XIIa抑制劑、凝血酶受體拮抗劑、凝血酶抑制劑、因子

VIIa抑制劑、因子Xa抑制劑、因子XIa抑制劑、因子IXa抑制劑、二磷酸腺苷抗血小板劑(例如，P2Y12拮抗劑)、纖維蛋白原受體拮抗劑(例如，以治療或預防不穩定型心絞痛或預防血管成形術後再阻塞以及再狹窄)、阿斯匹靈及血小板聚集抑制劑。

【0936】 當採用組合療法時，本發明化合物及該等組合劑可存在於同一或不同醫藥組合物中，且可單獨、依序或同時投與。

【0937】 本發明化合物可與視網膜之雷射治療組合投與。已知雷射療法與玻璃體內注射VEGF抑制劑組合用於治療糖尿病性黃斑水腫(Elman M, Aiello L, Beck R等人「Randomized trial evaluating ranibizumab plus prompt or deferred laser or triamcinolone plus prompt laser for diabetic macular edema」Ophthalmology. 2010年4月27日)。

定義

【0938】 如上所述，術語「烷基」為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代。此類烷基之實例包括但不限於C_1 - 甲基，C_2 - 乙基，C_3 - 丙基及C_4-正丁基，C_3 - 異丙基，C_4 - 第二丁基，C_4 - 異丁基，C_4 - 第三丁基及C_5 - 新戊基，如上所述視情況經取代。更特定言之，「烷基」可為具有至多6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈飽和烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈飽和烴，如上所述視情況經取代。甚至更特定言之，「烷基」可為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴，視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代，其在本文中稱為「小烷基」。較佳

地，「烷基」可定義為「小烷基」。更特定言之，「小烷基」可為「小烷基^{a}」，其在本文中為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基^{a}可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代。或者，「烷基」可定義為「小烷基^{b}」，其中小烷基^{b}為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴，視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、OMe (O-CH_3)、OEt (O-CH_2CH_3)、O^{i}Pr (O-$CH(CH_3)_2$)、O^{n}Pr (O-$CH_2CH_2CH_3$)、O(環丙基)、OCF_3、$OCHF_2$、CN、CF_3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代。更特定言之，「小烷基^{b}」可為「小烷基^{c}」，其在本文中為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基^{c}可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、OMe、OEt、CN、CF_3、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代。

【0939】 如上所述，「芳基」為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代。合適芳基之實例包括苯基、聯苯基及萘基(各自如先前所述視情況經取代)。較佳地，「芳基」選自苯基、經取代之苯基(其中該等取代基選自上文所述之彼等取代基)及萘基。更佳地，「芳基」選自苯基及經取代之苯基(其中該等取代基選自上文所述之彼等取代基)。

【0940】 如上所述，術語「環烷基^{b}」為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、NH_2、NH(小烷基)、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代。合適單環環烷基之實例包括環丙基、環丁基、環戊基及環己基，如上所述視情況經取代。更特定言

之，「環烷基[b]」可為具有3至5個碳原子、更特定言之3至4個碳原子之單環飽和烴環，如上所述視情況經取代。

【0941】 如上所述，術語「環烷基[a]」為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代。合適單環環烷基之實例包括環丙基、環丁基、環戊基及環己基，如上所述視情況經取代。更特定言之，「環烷基[a]」可為具有3至5個碳原子、更特定言之3至4個碳原子之單環飽和烴環，如上所述視情況經取代。

【0942】 如上所述，術語「環烷基」為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代。合適單環環烷基之實例包括環丙基、環丁基、環戊基及環己基，如上所述視情況經取代。更特定言之，「環烷基」可為具有3至5個碳原子、更特定言之3至4個碳原子之單環飽和烴環，如上所述視情況經取代。

【0943】 如上所述，「多環烷基」為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代。合適橋接雙環之實例包括雙環[1.1.1]戊烷、雙環[2.1.1]己烷、雙環[2.2.1]庚烷及雙環[2.2.2]辛烷，如上所述視情況經取代。更特定言之，「多環烷基」可為具有5至6個碳原子之橋接雙環飽和烴環系統或金剛烷基，更特定言之具有5至6個碳原子之橋接雙環飽和烴環系統，如上所述視情況經取代。

【0944】 如上所述，術語「烷氧基」為-OCF_3、O(環丙基)、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧

基可在可能之情況下視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代。此類烷氧基之實例包括但不限於C_1 - 甲氧基，C_2 - 乙氧基，C_3 - 正丙氧基及C_4 - 正丁氧基(針對直鏈烷氧基)，及C_3 - 異丙氧基，及C_4 – 第二丁氧基及第三丁氧基(針對分支鏈烷氧基)，如上所述視情況經取代。更特定言之，「烷氧基」可為-OCF_3、O(環丙基)、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；且可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代。此在本文中稱為「小烷氧基」。或者，術語「烷氧基」可為-OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可在可能之情況下視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代。或者且更特定言之，「烷氧基」可為-OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；且可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代，在本文中亦稱為「小烷氧基」。較佳地，「烷氧基」可定義為「小烷氧基」。

【0945】 如上所述，「鹵基」為Cl、F、Br或I。更特定言之，鹵基可選自Cl及F。

【0946】 如上所述，「雜芳基」為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代。在一些實施例中，「雜芳基」可為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代。例如，雜芳基可選自噻吩、呋喃、吡咯、吡唑、咪唑、噁唑、異噁唑、噻唑、

異噻唑、三唑、噁二唑、噻二唑、吡啶、噠嗪、嘧啶及吡嗪，如上所述視情況經取代。

【0947】 如上所述，雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、環丙基、烷氧基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代。在一些實施例中，雜芳基[a]可為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代。合適雜芳基[a]基團之實例包括噻吩基、呋喃基、吡咯基、吡唑基、咪唑基、噁唑基、異噁唑基、噻唑基、異噻唑基、三唑基、噁二唑基、噻二唑基、四唑基、吡啶基、噠嗪基、嘧啶基、吡嗪基、吲哚基、苯并咪唑基、苯并三唑基、喹啉基、異喹啉基、5-氮雜硫雜萘次甲基、吲嗪基、異吲哚基、吲唑基、苯并噻唑基、噌啉基、喹唑啉基、喹喏啉基、1,8-萘啶基及酞嗪基(如上所述視情況經取代)。更特定言之，「雜芳基[a]」可為如所定義之9員或10員雙環，且如上所述視情況經取代。合適9員或10員雜芳基[a]基團之實例包括吲哚基、苯并咪唑基、苯并三唑基、喹啉基、異喹啉基、5-氮雜硫雜萘次甲基、吲嗪基、異吲哚基、吲唑基、苯并噻唑基、噌啉基、喹唑啉基、喹喏啉基、1,8-萘啶基及酞嗪基。

【0948】 如上所述，「雜環烷基」為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，且其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、$(C_1$-$C_6)$烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取

代基取代。更特定言之，「雜環烷基」可為含有3、4、5或6個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代。

【0949】 如本文所用，「鹽」(包括「醫藥學上可接受之鹽」)意謂生理學或毒理學上可耐受之鹽，且在適當時包括醫藥學上可接受之鹼加成鹽及醫藥學上可接受之酸加成鹽。例如，(i)當本發明化合物含有一或多個酸性基團(例如羧基)時，可形成之鹼加成鹽(包括醫藥學上可接受之鹼加成鹽)包括鈉鹽、鉀鹽、鈣鹽、鎂鹽及銨鹽，或與諸如二乙胺、*N*-甲基-還原葡糖胺、二乙醇胺或胺基酸(例如離胺酸)及其類似物之有機胺形成的鹽；(ii)當本發明化合物含有鹼性基團(諸如胺基)時，可形成之酸加成鹽(包括醫藥學上可接受之酸加成鹽)包括鹽酸鹽、氫溴酸鹽、硫酸鹽、磷酸鹽、乙酸鹽、檸檬酸鹽、乳酸鹽、酒石酸鹽、甲磺酸鹽、琥珀酸鹽、草酸鹽、磷酸鹽、乙磺酸鹽、甲苯磺酸鹽、苯磺酸鹽、萘二磺酸鹽、馬來酸鹽、己二酸鹽、富馬酸鹽、馬尿酸鹽、樟腦酸鹽、昔萘酸鹽、對乙醯胺基苯甲酸鹽、二羥基苯甲酸鹽、羥基萘甲酸鹽、琥珀酸鹽、抗壞血酸鹽、油酸鹽、硫酸氫鹽、三氟乙酸鹽及其類似物。

【0950】 亦可形成酸及鹼之半鹽，例如半硫酸鹽及半鈣鹽。

【0951】 關於合適鹽之綜述，參見Stahl及Wermuth之「Handbook of Pharmaceutical Salts: Properties, Selection and Use」(Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2002)。

【0952】 「前藥」係指可在*活體內*藉由代謝手段(例如，藉由水解、還原或氧化)轉化為本發明化合物之化合物。用於形成前藥之合適基團描述於『The

Practice of Medicinal Chemistry, 第2版 第561-585頁 (2003)及F. J. Leinweber, *Drug Metab. Res.*, 1987, 18, 379中。

【0953】 本發明化合物可以非溶劑化形式及溶劑化形式存在。本文使用術語『溶劑合物』來描述包含本發明化合物及化學計量之量的一或多種醫藥學上可接受之溶劑分子(例如乙醇)之分子錯合物。當溶劑為水時，使用術語『水合物』。

【0954】 其中本發明化合物以一或多種幾何、光學、鏡像異構物、非鏡像異構物及互變異構物形式存在，包括但不限於*順*-及*反*-形式、*E*-及*Z*-形式、*R*-、*S*-及*內消旋*-形式、酮-及烯醇-形式。除非另有說明，否則對特定化合物之提及包括所有此類異構物形式，包括其外消旋物及其他混合物。在適當時，可藉由應用或調適已知方法(例如，層析技術及再結晶技術)將此類異構物自其混合物中分離出來。在適當時，可藉由應用或調適已知方法(例如，不對稱合成)來製備此類異構物。例如，當本發明化合物作為立體異構物之混合物存在時，一種立體異構物可以相對於剩餘立體異構物>90%之純度存在，或更特定言之以相對於剩餘立體異構物>95%之純度存在，或更特定言之以相對於剩餘立體異構物>99%之純度存在。例如，當本發明化合物以鏡像異構物形式存在時，該化合物可為>90%鏡像異構物過量(ee)，或更特定言之>95%鏡像異構物過量(ee)，或更特定言之>99% ee。

【0955】 除非另有說明，否則本發明化合物包括區別僅在於存在一或多個同位素富集原子之化合物。例如，其中氫由氘或氚置換或其中碳由^{13}C或^{14}C置換之化合物在本發明之範圍內。此類化合物可用作例如生物分析中之分析工具或探針。

【0956】 用於製備氘化類似物之方法將為熟習此項技術者顯而易見的。例如，方法可包括在本文所述之化合物之合成中使用氘化起始材料。熟練人員將容易由標準商業來源獲得氘化起始材料。用於製備氘化類似物及氘化起始材料之方法亦可包括氘交換。例如，可藉由使該等化合物與D_2O混合來實現氘交換。

【0957】 在本發明之上下文中，本文中提及「治療」包括提及治癒性、緩和及預防性治療。例如，治療包括預防以FXIIa為致病因素之疾病狀況的症狀。

方法

【0958】 本發明化合物可單獨或與一或多種其他本發明化合物組合或與一或多種其他藥物組合(或作為其任何組合)投與。一般而言，其將作為與一或多種醫藥學上可接受之賦形劑締合的調配物投與。本文使用術語『賦形劑』來描述除本發明化合物以外之任何成分，其可向調配物賦予功能性(亦即，藥物釋放速率控制)及/或非功能性(亦即，加工助劑或稀釋劑)特徵。賦形劑之選擇將在很大程度上取決於多種因素，諸如特定投與模式、賦形劑對溶解度及穩定性之影響以及劑型之性質。

【0959】 意欲用於醫藥用途之本發明化合物可作為固體或液體投與，諸如錠劑、膠囊或溶液。適合遞送本發明化合物之醫藥組合物及其製備方法將為熟習此項技術者顯而易見的。此類組合物及其製備方法可見於例如Remington’s Pharmaceutical Sciences, 第19版 (Mack Publishing Company, 1995)中。

【0960】 因此，本發明提供一種醫藥組合物，其包含本發明化合物及醫藥學上可接受之載劑、稀釋劑或賦形劑。

【0961】 為了治療疾患，諸如與糖尿病性視網膜病變及糖尿病性黃斑水腫相關之視網膜血管滲透性，本發明化合物可以適合注射至患者眼部區域中之形

式，尤其以適合玻璃體內注射之形式投與。已設想適合此類用途之調配物將採用本發明化合物於合適水性媒劑中之無菌溶液之形式。該等組合物可在主治醫師之監督下投與至患者。

【0962】 本發明化合物亦可直接投與至血流中、皮下組織中、肌肉中或內臟中。用於非經腸投與之合適手段包括靜脈內、動脈內、腹膜內、鞘內、心室內、尿道內、胸骨內、顱內、肌肉內、滑膜內及皮下。用於非經腸投與之合適器件包括針(包括微針)注射器、無針注射器及輸注技術。

【0963】 非經腸調配物通常為水性或油性溶液。當溶液為水性時，其可含有賦形劑，諸如糖(包括但不限於葡萄糖、甘露糖醇、山梨糖醇等)、鹽、碳水化合物及緩衝劑(較佳至pH為3至9)，但對於一些應用，其可更合適地經調配為無菌非水溶液或乾燥形式以與合適媒劑(諸如無菌、無熱原質水)聯合使用。

【0964】 非經腸調配物可包括植入物，該等植入物衍生自可降解聚合物，諸如聚酯(亦即，聚乳酸、聚丙交酯、聚丙交酯-共-乙交酯、聚己內酯、聚羥基丁酸酯)、聚原酸酯及聚酐。此等調配物可經由手術切口投與至皮下組織、肌肉組織中或直接投與至特定器官中。

【0965】 可使用熟習此項技術者熟知之標準醫藥技術容易地實現無菌條件下例如藉由凍乾製備非經腸調配物。

【0966】 用於製備非經腸溶液之本發明化合物之溶解度可藉由使用適當調配技術來增加，諸如併入共溶劑及/或溶解度增強劑，諸如界面活性劑、膠束結構及環糊精。

【0967】 本發明化合物可經口投與。經口投與可涉及吞嚥，使得化合物進入胃腸道，及/或頰、舌或舌下投與，藉此使化合物直接自口腔進入血流。

【0968】 適合經口投與之調配物包括固體插塞、固體微粒、半固體及液體(包括多相或分散系統)。適合經口投與之例示性調配物包括錠劑；含有多微粒或奈米微粒、液體、乳液或粉末之軟膠囊或硬膠囊；口含錠(包括液體填充)；咀嚼劑；凝膠；快速分散劑型；膜；胚珠；噴霧劑；及頰/黏膜黏附貼片。

【0969】 液體(包括多相及分散系統)調配物包括乳液、溶液、糖漿及酏劑。此類調配物可作為軟膠囊或硬膠囊(例如由明膠或羥基丙基甲基纖維素製成)中之填充劑呈遞，且通常包含載劑，例如水、乙醇、聚乙二醇、丙二醇、甲基纖維素或合適油，及一或多種乳化劑及/或懸浮劑。亦可藉由例如來自藥包之固體的重構來製備液體調配物。

【0970】 本發明化合物亦可用於快速溶解、快速崩解之劑型，諸如Liang及Chen, Expert Opinion in Therapeutic Patents, 2001, 11 (6), 981-986中所述之彼等劑型。

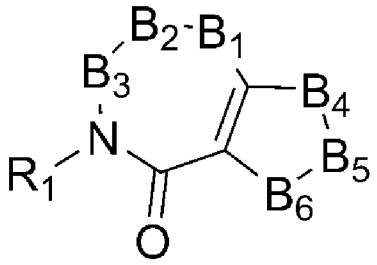
【0971】 錠劑之調配論述於Pharmaceutical Dosage Forms: Tablets, 第1卷, H. Lieberman及L. Lachman (Marcel Dekker, New York, 1980)中。

【0972】 對於投與至人類患者，本發明化合物之總每日劑量通常在0.1 mg與10,000 mg或1 mg與5000 mg之間或10 mg與1000 mg之間範圍內，當然，該範圍取決於投與模式。

【0973】 總劑量可以單一劑量或分次劑量投與，且根據醫師之判斷可落在本文所給出之典型範圍之外。此等劑量係基於具有約60 kg至70 kg重量之一般人類個體。醫師將能夠容易地確定重量超出此範圍之個體(諸如嬰兒及老年人)之劑量。

編號實施例

1. 一種式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且 其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為N(R_2)，B_5為N，且B_6為C(R_3)，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為C(R_2)，B_5為N，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為C(R_2)，B_5為C(H)，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2$$R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-$CF_3$、鹵基、芳基、雜芳基、-$CH_2$-O-$R_{16}$及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OR_{33}、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-N(R_{36})(R_{37})、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OR_{38}、-(C(H)(烷基))-(C=O)-N(R_{39})(R_{40})、-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}及 -(C(H)(雜芳基))-(C=O)-N(R_{41})(R_{42})；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_{28}、R_{33} R_{36}、R_{37}、R_{38}、R_{39}、R_{40}、R_{41}及R_{42}各自獨立地選自H及小烷基；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

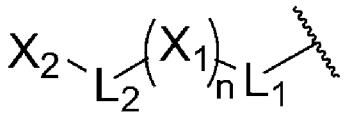
R_{16}選自H、烷基、環烷基、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

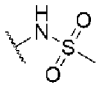
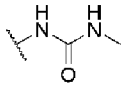
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

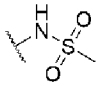
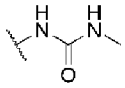
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

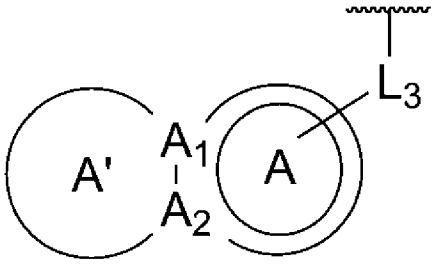
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

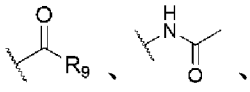
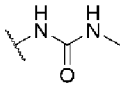
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A’可

視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1、2或3個獨立地選自小烷基^b、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

小烷基^{b}為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、OMe、OEt、O^{i}Pr、O^{n}Pr、O(環丙基)、OCF_3、$OCHF_2$、CN、CF_3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、O(環丙基)、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、O(環丙基)、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{12}R_{13}$、$OCF_3$及$CF_3$之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基[a]為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

環烷基[b]為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、NH_2、NH(小烷基)、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

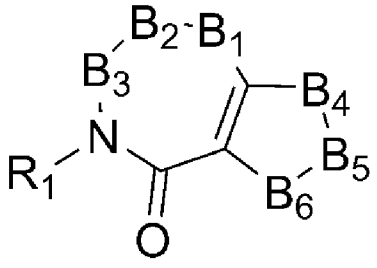
雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、$(C_1$-$C_6)$烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

2. 一種式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且 其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為$C(R_2)$，B_5為C(H)，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OR_{33}、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-N(R_{36})(R_{37})、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OR_{38}、-(C(H)(烷基))-(C=O)-N(R_{39})(R_{40})、-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}及 -(C(H)(雜芳基))-(C=O)-N(R_{41})(R_{42})；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_{28}、R_{33} R_{36}、R_{37}、R_{38}、R_{39}、R_{40}、R_{41}及R_{42}各自獨立地選自H及小烷基；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

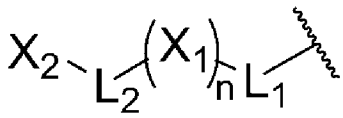
R_{16}選自H、烷基、環烷基、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

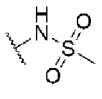
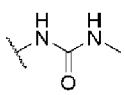
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

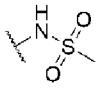
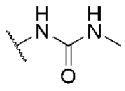
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

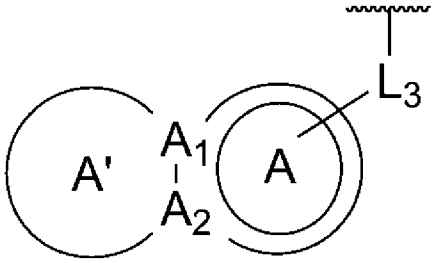
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

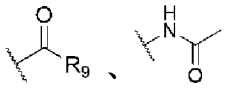
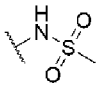
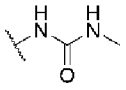
L_3為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A’可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基[a]為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

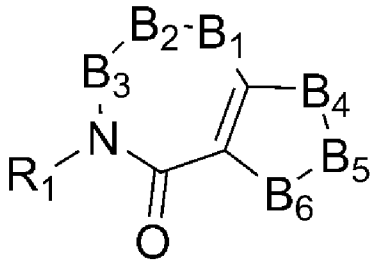
雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

3. 一種式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且 其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為N(R_2)，B_5為N，且B_6為C(R_3)，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為C(R_2)，B_5為N，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為C(R_2)，B_5為C(H)，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2$$R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-$CF_3$、鹵基、芳基、雜芳基、-$CH_2$-O-$R_{16}$及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及－(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及－(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及－(C(H)(雜芳基))-烷基；

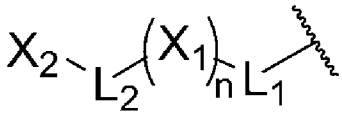
R_{16}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及－(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

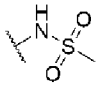
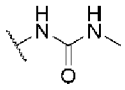
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

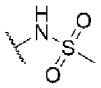
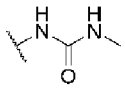
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及－$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

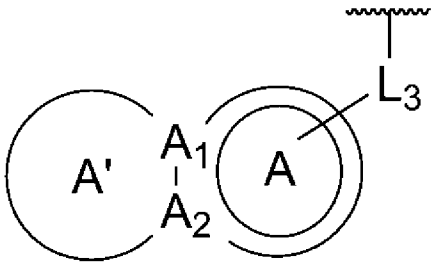
其中R_{21}選自H、烷基及－$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A’稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

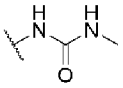
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A’為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A’可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及－$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A’可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A’可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

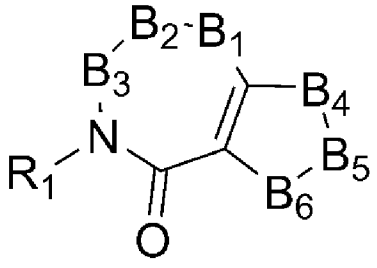
雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、$(C_1$-$C_6)$烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

4. 一種式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且 其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為$C(R_2)$，B_5為C(H)，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

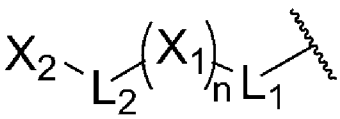
R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{16}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

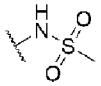
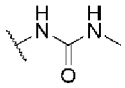
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

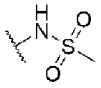
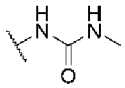
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

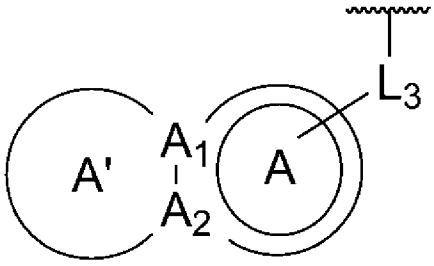
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}

在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

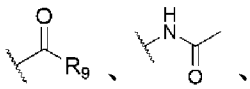
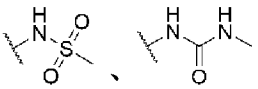
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

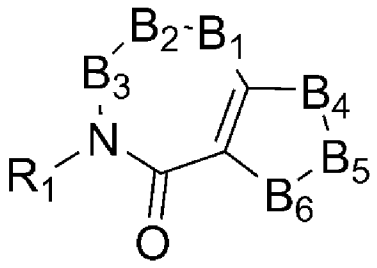
雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

5. 一種式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且 其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為$C(R_2)$，B_5為C(H)，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、$-(CH_2)_{0-3}-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{14}-C(=O)R_{15}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、$-CH_2-O-R_{16}$及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

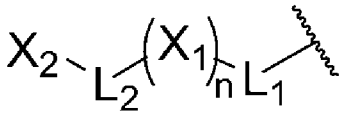
R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{16}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

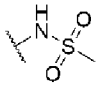
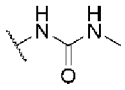
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

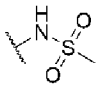
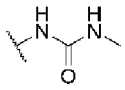
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

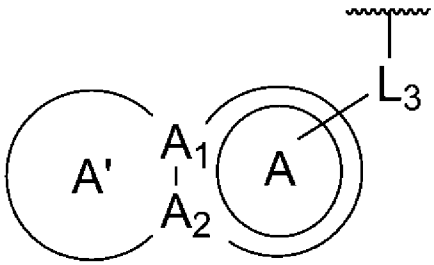
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

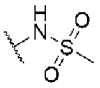
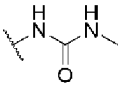
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

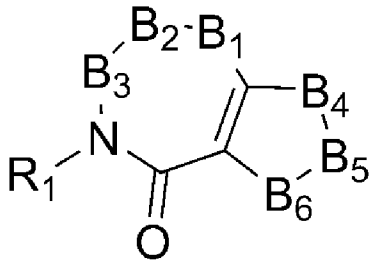
雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、$(C_1\text{-}C_6)$烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

6. 一種式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為$C(R_2)$，B_5為C(H)，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、$-(CH_2)_{0-3}-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{14}-C(=O)R_{15}$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{34}-S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、$-CF_3$、鹵基、芳基、雜芳基、$-CH_2-O-R_{16}$及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-OH、$-S(=O)_2-$(小烷基)、$-(CH_2)_{1-3}-(C=O)-OR_{33}$、$-(CH_2)_{1-3}-(C=O)-N(R_{36})(R_{37})$、$-(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、$-(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OR_{38}、-(C(H)(烷基))-(C=O)-$N(R_{39})(R_{40})$、-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}及 -(C(H)(雜芳基))-(C=O)-$N(R_{41})(R_{42})$；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_{28}、R_{33} R_{36}、R_{37}、R_{38}、R_{39}、R_{40}、R_{41}及R_{42}各自獨立地選自H及小烷基；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

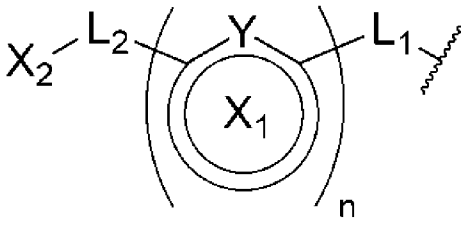
R_{16}選自H、烷基、環烷基、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，其中式(II)由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

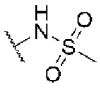
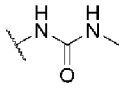
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

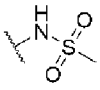
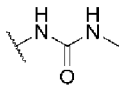
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

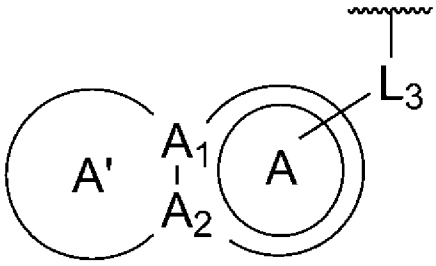
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}

在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

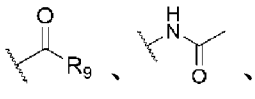
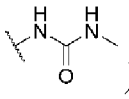
L_3為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、、  、  及  ；

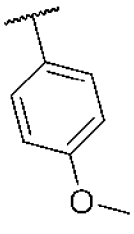
其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1、2或3個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；其中R_3不為  ；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

小烷基[b]為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、OMe、OEt、O^{i}Pr、O^{n}Pr、O(環丙基)、OCF_3、$OCHF_2$、CN、CF_3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、O(環丙基)、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、O(環丙基)、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基[a]為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

環烷基[b]為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、NH_2、NH(小烷基)、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

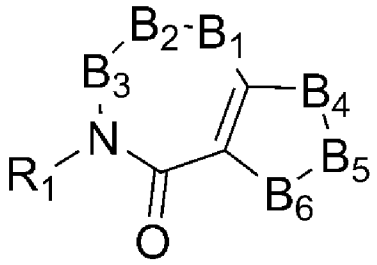
雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

7. 一種式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且 其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為N(R_2)，B_5為N，且B_6為C(R_3)，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為C(R_2)，B_5為N，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為C(R_2)，B_5為C(H)，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2$$R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OR_{33}、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-N(R_{36})(R_{37})、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OR_{38}、-(C(H)(烷基))-(C=O)-N(R_{39})(R_{40})、-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}及 -(C(H)(雜芳基))-(C=O)-N(R_{41})(R_{42})；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_{28}、R_{33} R_{36}、R_{37}、R_{38}、R_{39}、R_{40}、R_{41}及R_{42}各自獨立地選自H及小烷基；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

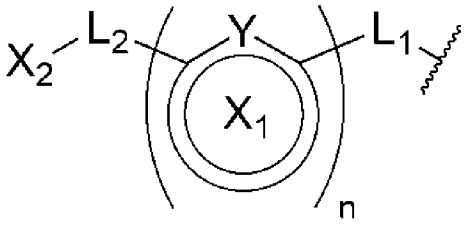
R_{16}選自H、烷基、環烷基、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，其中式(II)由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

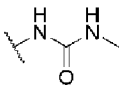
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

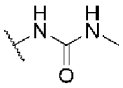
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

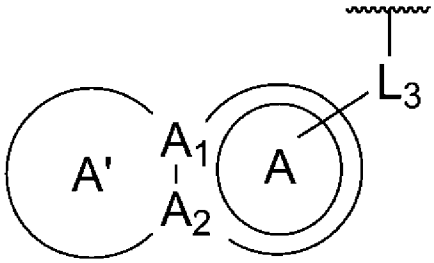
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

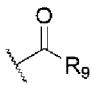
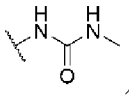
L_3為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

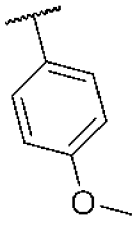
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及$-(CH_2)_{0-3}-R_8$，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、$N(R_{31})(R_{32})$及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；其中R_3不為  ；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{12}R_{13}$、$OCF_3$及$CF_3$之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基[a]為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

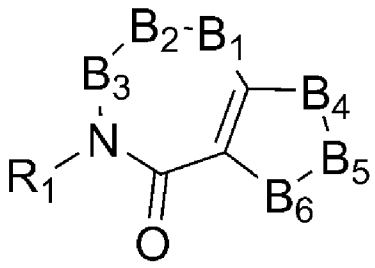
雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

8. 一種式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且 其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為$C(R_2)$，B_5為C(H)，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、$-(CH_2)_{0-3}-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{14}-C(=O)R_{15}$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{34}-S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、$-CH_2-O-R_{16}$及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

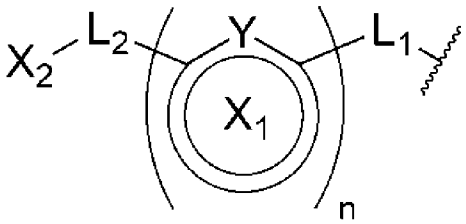
R_{16}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，其中式(II)由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

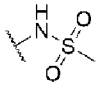
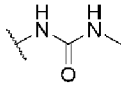
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO2-之連接基；且

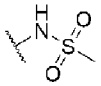
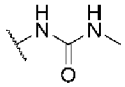
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

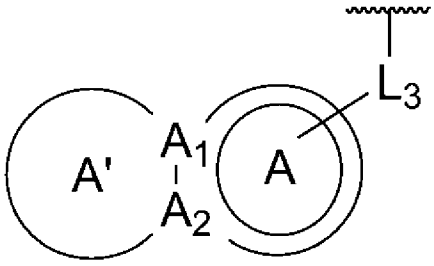
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}

在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

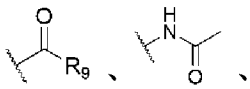
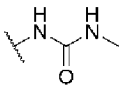
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

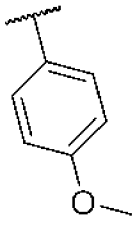
其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；其中R_3不為  ；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{12}R_{13}$、$OCF_3$及$CF_3$之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

9. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_2為碳中心或氮中心且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵。

10. 根據編號實施例1至8中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，或

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵。

11. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_2為碳中心且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵。

12. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

(i) B_1為碳中心，且B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_1為碳中心且B_2為碳中心，且B_1經由單鍵與B_2連接，或者

(iii) B_1為氮中心且B_2為碳中心，且B_1經由雙鍵與B_2連接。

13. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_1為碳中心且B_2為碳中心，且B_1經由單鍵與B_2連接，或 其中B_1為氮中心且B_2為碳中心且B_1經由雙鍵與B_2連接。

14. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_1為碳中心且B_2為碳中心，且B_1經由單鍵與B_2連接。

15. 根據編號實施例1至13中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_1為氮中心。

16. 根據編號實施例15之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_1為氮中心且B_2為碳中心且B_1經由雙鍵與B_2連接。

17. 根據編號實施例16之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_1為氮中心且B_2為碳中心且B_1經由雙鍵與B_2連接，且其中B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵。

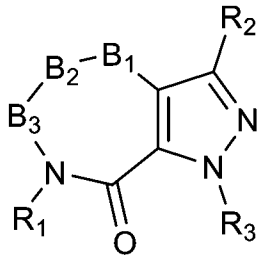
18. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

(i) B_4為N(R_2)，B_5為N，且B_6為C(R_3)，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；或

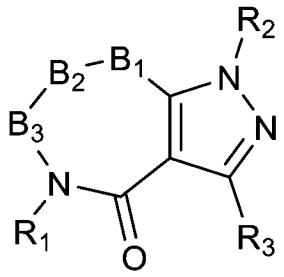
(ii) B_4為C(R_2)，B_5為N，且B_6為N(R_3)，且其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接。

19. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_4為C(R_2)，B_5為N，且B_6為N(R_3)，且其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接。

20. 根據編號實施例1至5或7至18中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中該化合物為式(Ia)或(Ie)化合物：



式(Ia)



式(Ie)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

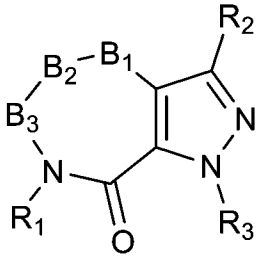
B_2為碳中心且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，或

B_2及B_3均為碳中心

其中，當B_2為碳中心時，B_1經由單鍵或雙鍵與B_2連接；且

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接。

21. 根據編號實施例18至20中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中該化合物為式(Ia)化合物：



式(Ia)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，或

(iii) B_2及B_3均為碳中心

其中，當B_2為碳中心時，B_1經由單鍵或雙鍵與B_2連接；且

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接。

22. 根據編號實施例20或編號實施例21之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

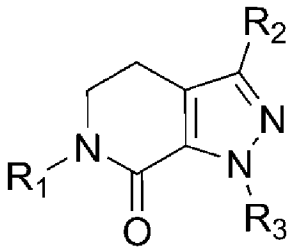
(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，或者，

(ii) B_2為碳中心且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵

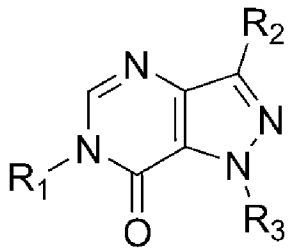
其中，當B_2為碳中心時，B_1經由單鍵或雙鍵與B_2連接。

23. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中在可能之情況下，B_1可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代。

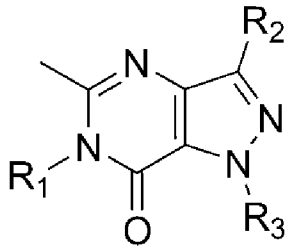
24. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中該化合物為式(Ib)、(Ic)、(Id)、(If)或(Ig)化合物：



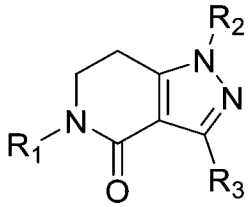
式(Ib)，



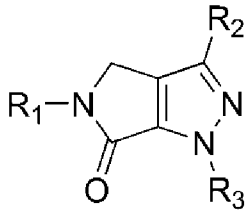
式(Ic)，



式(Id)，



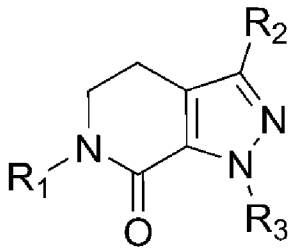
式(If)，



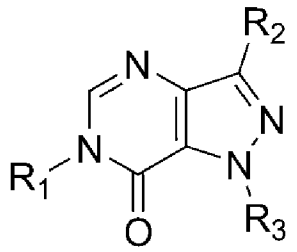
式(Ig)。

25. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化

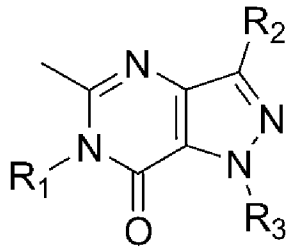
類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中該化合物為式(Ib)、(Ic)或(Id)化合物：



式(Ib)，



式(Ic)，



式(Id)。

26. 根據編號實施例24或編號實施例25中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當該化合物為式(Ic)或(Id)化合物時，R_2為-CN。

27. 根據編號實施例25或編號實施例26中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中該化合物為式(Ib)或(Id)化合物。

28. 根據編號實施例27之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中該化合物為式(Ib)化合物。

29. 根據編號實施例27之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中該化合物為式(Id)化合物。

30. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

31. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

32. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

33. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

34. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

35. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

36. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

37. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘

化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

38. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

39. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

40. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2$$R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-$CF_3$、鹵基、芳基、雜芳基、-$CH_2$-O-$R_{16}$及-CN。

41. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N

$(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

42. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

43. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

44. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

45. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

46. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

47. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

48. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

49. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

50. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘

化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

51. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

52. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2$$R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-$CF_3$、鹵基、芳基、雜芳基及-$CH_2$-O-$R_{16}$。

53. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2$$R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

54. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N

$(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

55. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

56. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN。

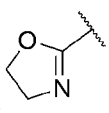
57. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

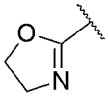
58. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N$(R_4)(R_5)$、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-S(=O)$_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

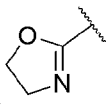
59. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

60. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-$S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

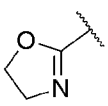
61. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、鹵基、芳基、雜芳基及-CH_2-O-R_{16}。

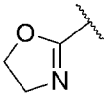
62. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-$S(=O)_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

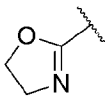
63. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

64. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

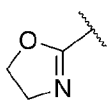
65. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN。

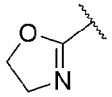
66. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-OH、-CH_2-O-R_{16}及  。

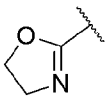
67. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-OH、-CH_2-O-R_{16}及  。

68. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-OH、-CH_2-O-R_{16}及  。

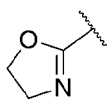
69. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-OH 及-CH_2-O-CH_3。

70. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

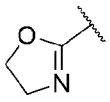
71. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

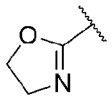
72. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

73. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN。

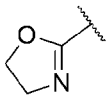
74. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  。

75. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘

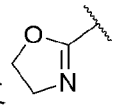
化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自$-(CH_2)_{0-3}-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-CH_2-NH-C(=O)CH_3$、$-CH_2-NH-S(=O)_2R_{35}$、$-CH_2-O-R_{16}$、$-CH_2-OH$及  。

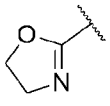
76. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自$-(CH_2)_{0-3}-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-CH_2-NH-C(=O)CH_3$、$-CH_2-NH-S(=O)_2$(環丙基)、$-CH_2-O-R_{16}$、$-CH_2-OH$及  。

77. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自$-(CH_2)_{0-3}-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-CH_2-NH-S(=O)_2$(環丙基)、$-CH_2-O-CH_3$及$-CH_2-OH$。

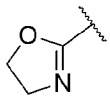
78. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-NH-C(=O)CH_3$、$-CH_2-NH-S(=O)_2R_{35}$、$-CH_2-O-R_{16}$、$-CH_2-OH$、$-CN$及  。

79. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、

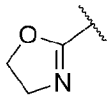
-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

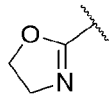
80. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

81. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN。

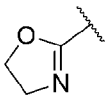
82. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  。

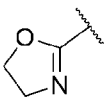
83. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、

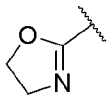
-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  。

84. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  。

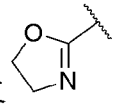
85. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3及-CH_2-OH。

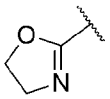
86. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

87. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

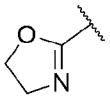
88. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

89. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN。

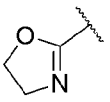
90. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-OH、-CH_2-O-R_{16}及  。

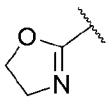
91. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-OH、-CH_2-O-R_{16}及  。

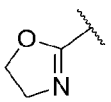
92. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘

化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-OH、-CH_2-O-R_{16}及  。

93. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-OH及-CH_2-O-CH_3。

94. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自H、-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-OH及  。

95. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$$R_{35}$、-$CH_2$-OH及  。

96. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-OH及  。

97. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘

化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)及-CH_2-OH。

98. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN。

99. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自
-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN。

100. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自
-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6及 -CH_2-O-CH_3。

101. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自
-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-O-CH_3及-CN。

102. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自
-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)及-CH_2-O-CH_3。

103. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN。

104. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-O-CH_3及-CN。

105. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6及-CH_2-O-CH_3。

106. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-O-CH_3及-CN。

107. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)及-CH_2-O-CH_3。

108. 根據編號實施例1至29中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2為-C(=O)-N(R_4)(R_5)。

109. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及－(C(H)(雜芳基))-烷基。

110. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及－(C(H)(雜芳基))-烷基。

111. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

112. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及－(C(H)(雜芳基))-烷基。

113. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_4為H或CH_3。

114. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_4為H。

115. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-2}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR$_{28}$。

116. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-2}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR$_{28}$。

117. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

118. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環

烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

119. 根據編號實施例1至115中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-2}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}。

120. 根據編號實施例116之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-2}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}。

121. 根據編號實施例117之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

122. 根據編號實施例118之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以

及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-芳基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

123. 根據編號實施例119之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-2}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-苯基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}。

124. 根據編號實施例120之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-2}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[a]、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-苯基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}。

125. 根據編號實施例121之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-苯基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

126. 根據編號實施例122之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以

及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-苯基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

127. 根據編號實施例124之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自-OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-2}$-(C=O)-OH、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[a]、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}。

128. 根據編號實施例125之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基及-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基。

129. 根據編號實施例1至115中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基及-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基。

130. 根據編號實施例127之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基[a]、-(C(H)(苯基))-烷基及-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基。

131. 根據編號實施例128之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-(C(H)(苯基))-烷基及-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基。

132. 根據編號實施例131之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5為-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基。

133. 根據編號實施例1至115中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OR_{33}、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-$N(R_{36})(R_{37})$、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OR_{38}及-(C(H)(烷基))-(C=O)-$N(R_{39})(R_{40})$。

134. 根據編號實施例133之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基。

135. 根據編號實施例134之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環丙基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基。

136. 根據編號實施例135之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環丙基及-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基。

137. 根據編號實施例136之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基。

138. 根據編號實施例137之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基及雜環烷基。

139. 根據編號實施例138之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自小烷基、吡咯啶、哌啶及四氫呋喃，其中吡咯啶、哌啶及四氫呋喃可視情況經1或2個獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代。

140. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_6選自H、小烷基及-(CH_2)-苯基。

141. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_{14}選自H及小烷基。

142. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

143. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

144. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_{15}選自H及小烷基。

145. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_{15}為甲基。

146. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_{16}選自H、小烷基、環烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基。

147. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化

化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基。

148. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_{34}選自H及小烷基。

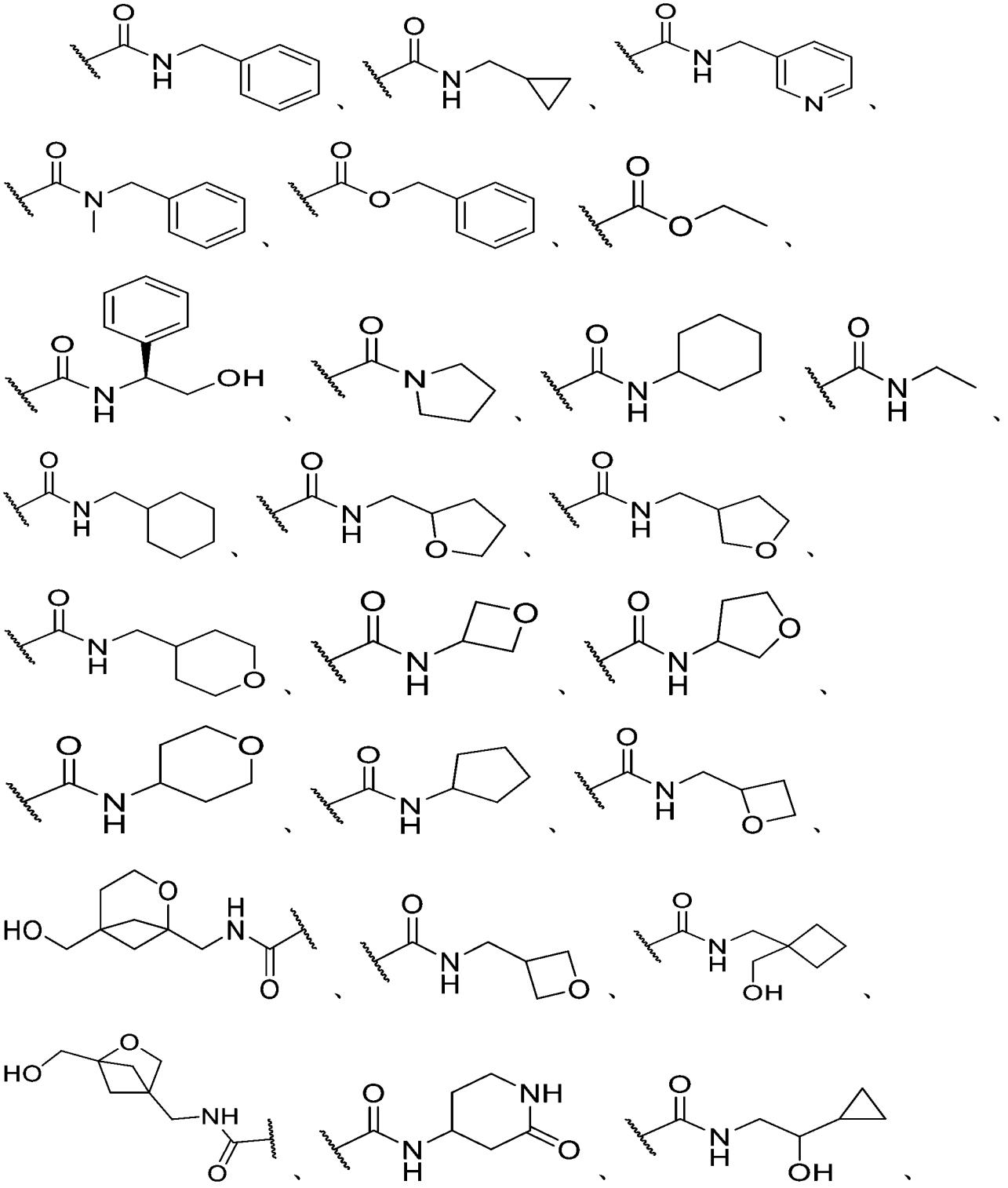
149. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_{34}選自H及CH_3。

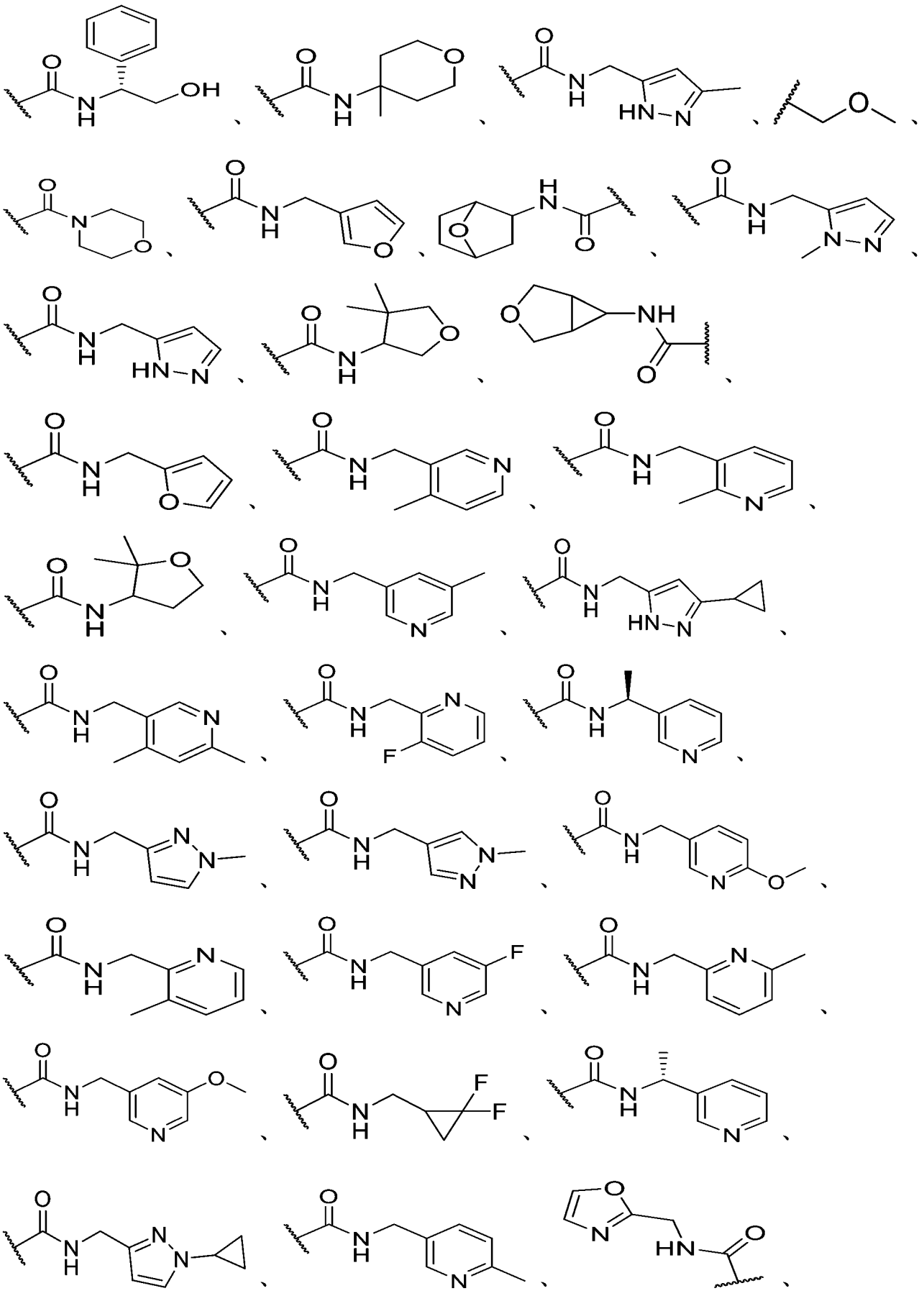
150. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-2}$-苯基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-2}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基。

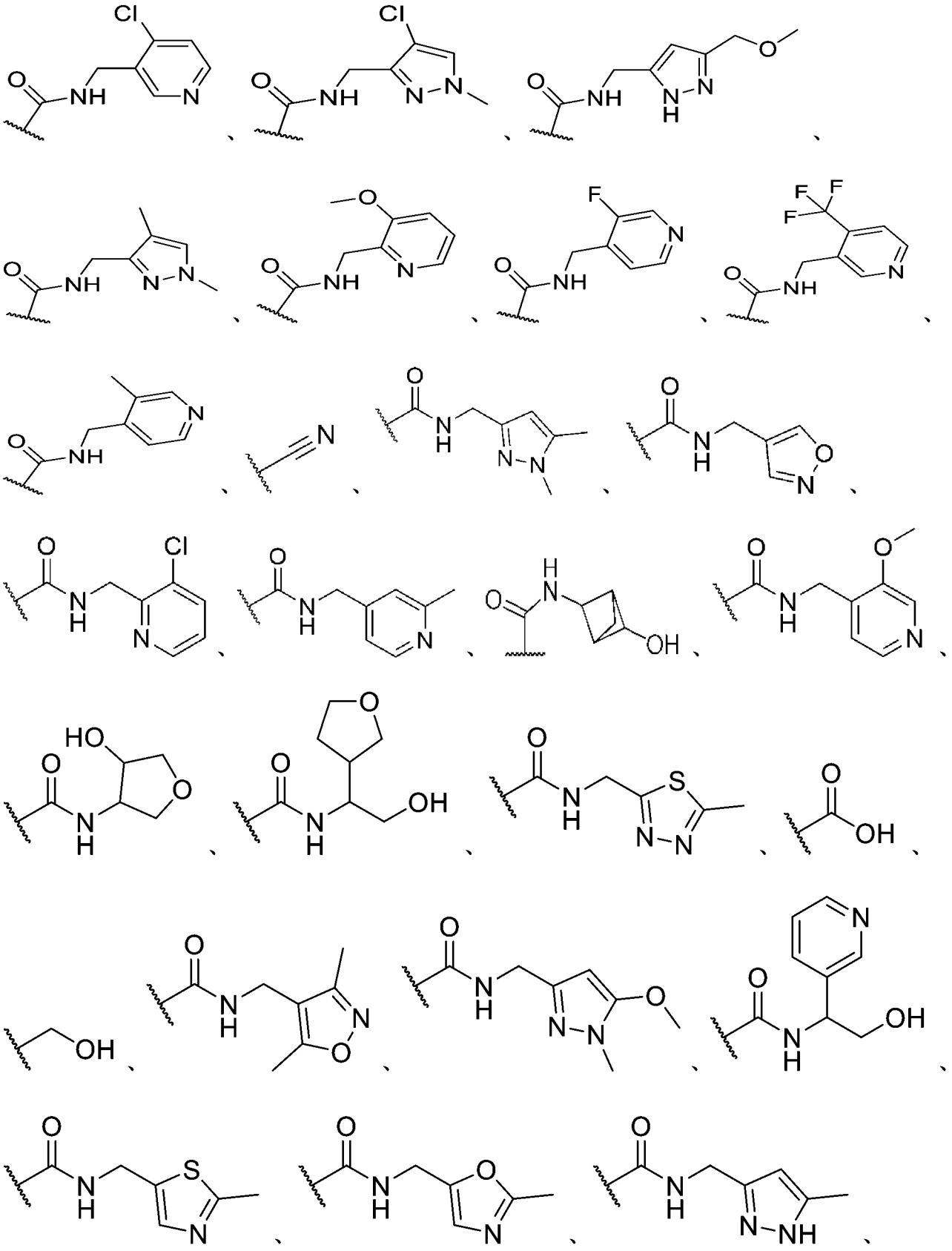
151. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_{35}選自H、烷基及環烷基。

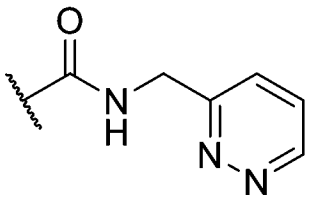
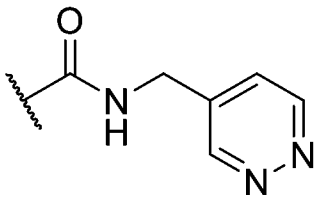
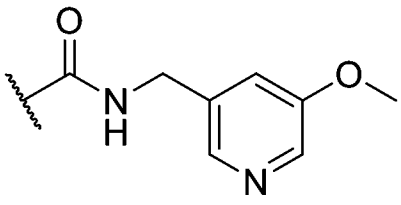
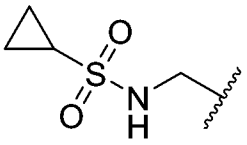
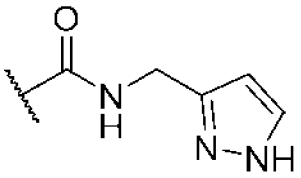
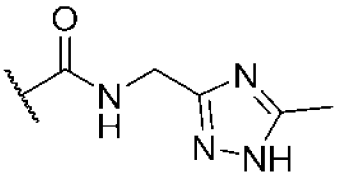
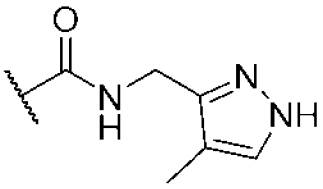
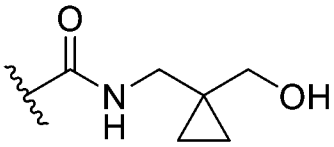
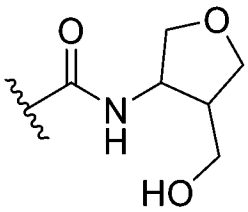
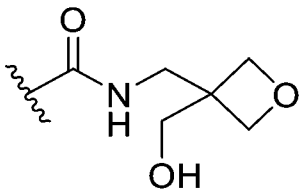
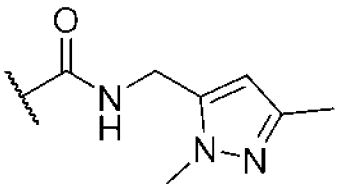
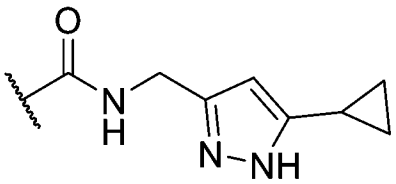
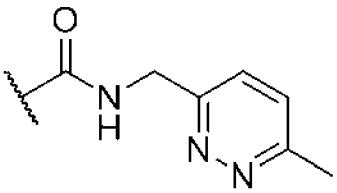
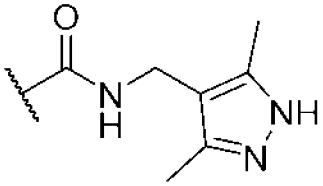
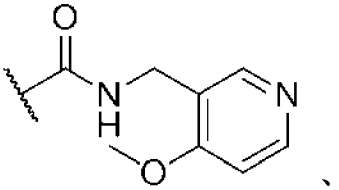
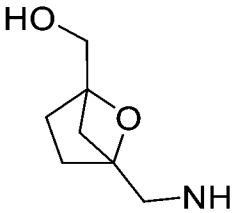
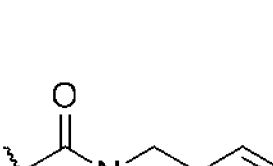
152. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

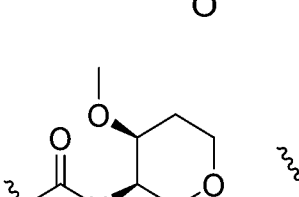
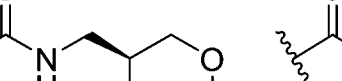
153. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自：





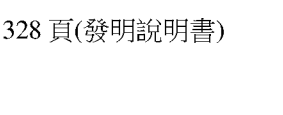



、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

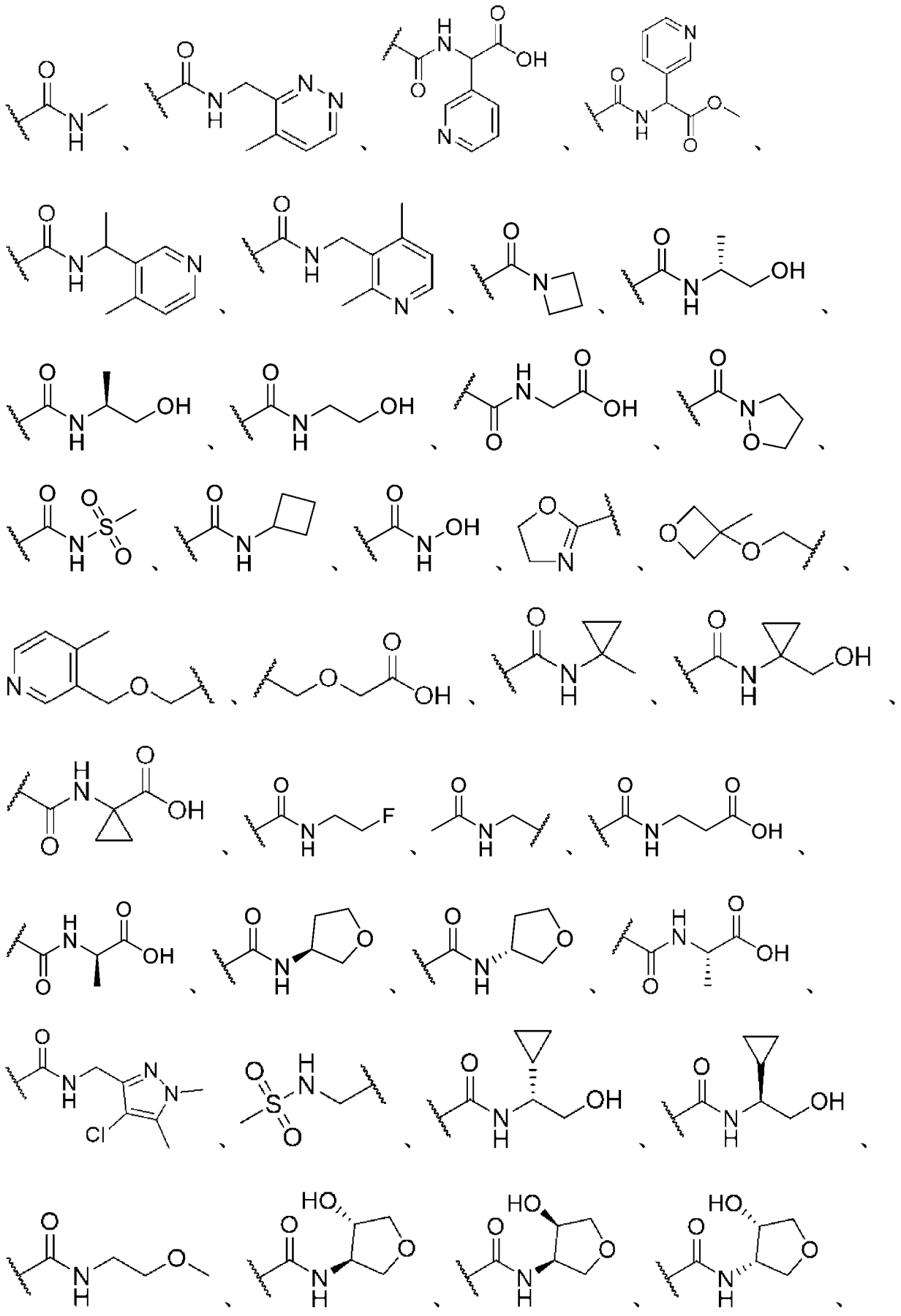
、

、

、

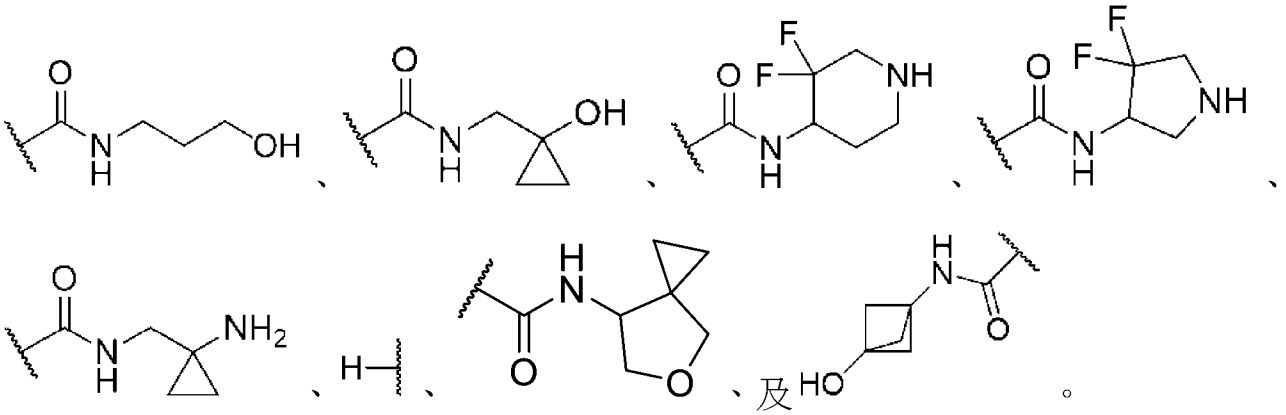
、

、

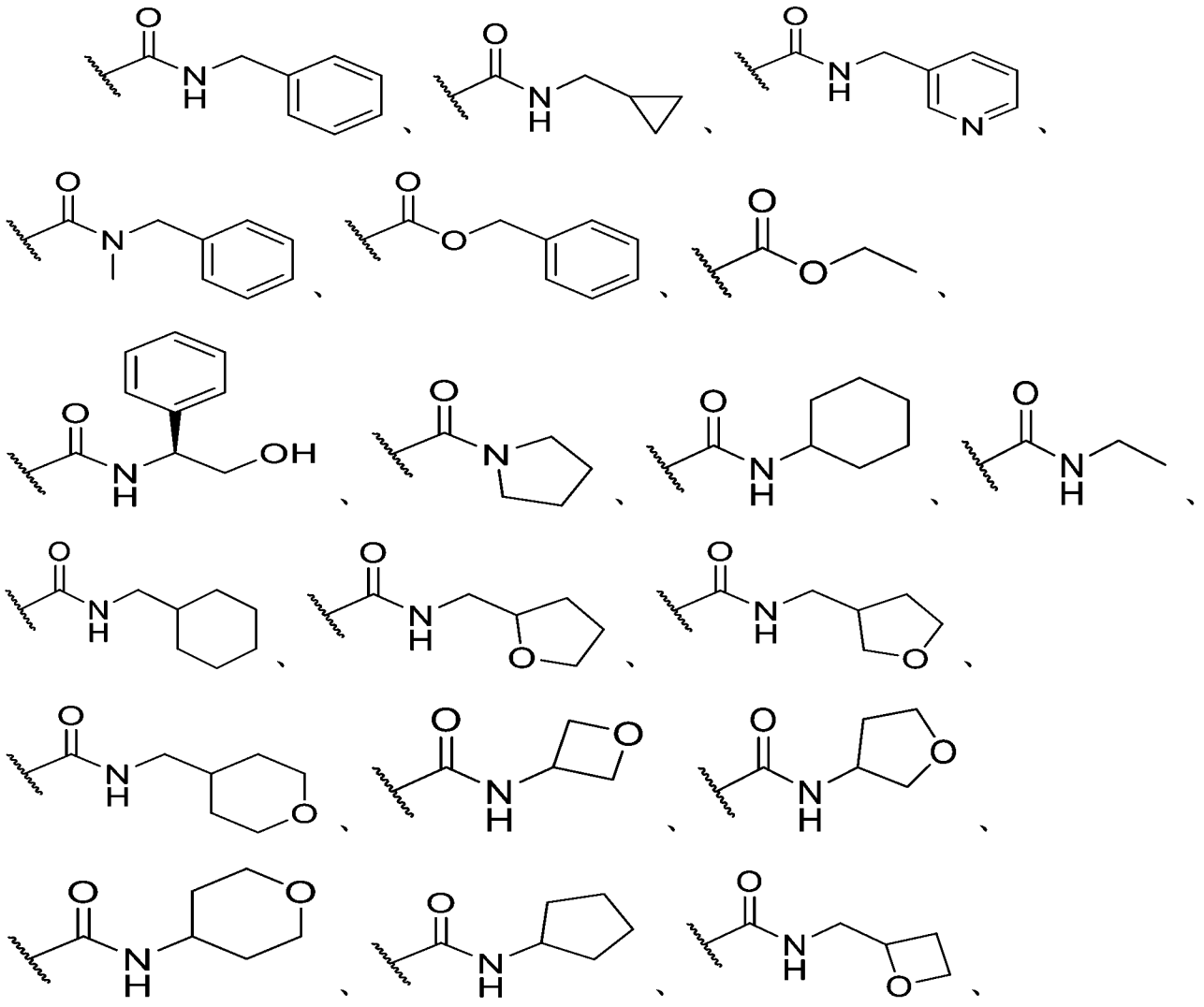
、

、

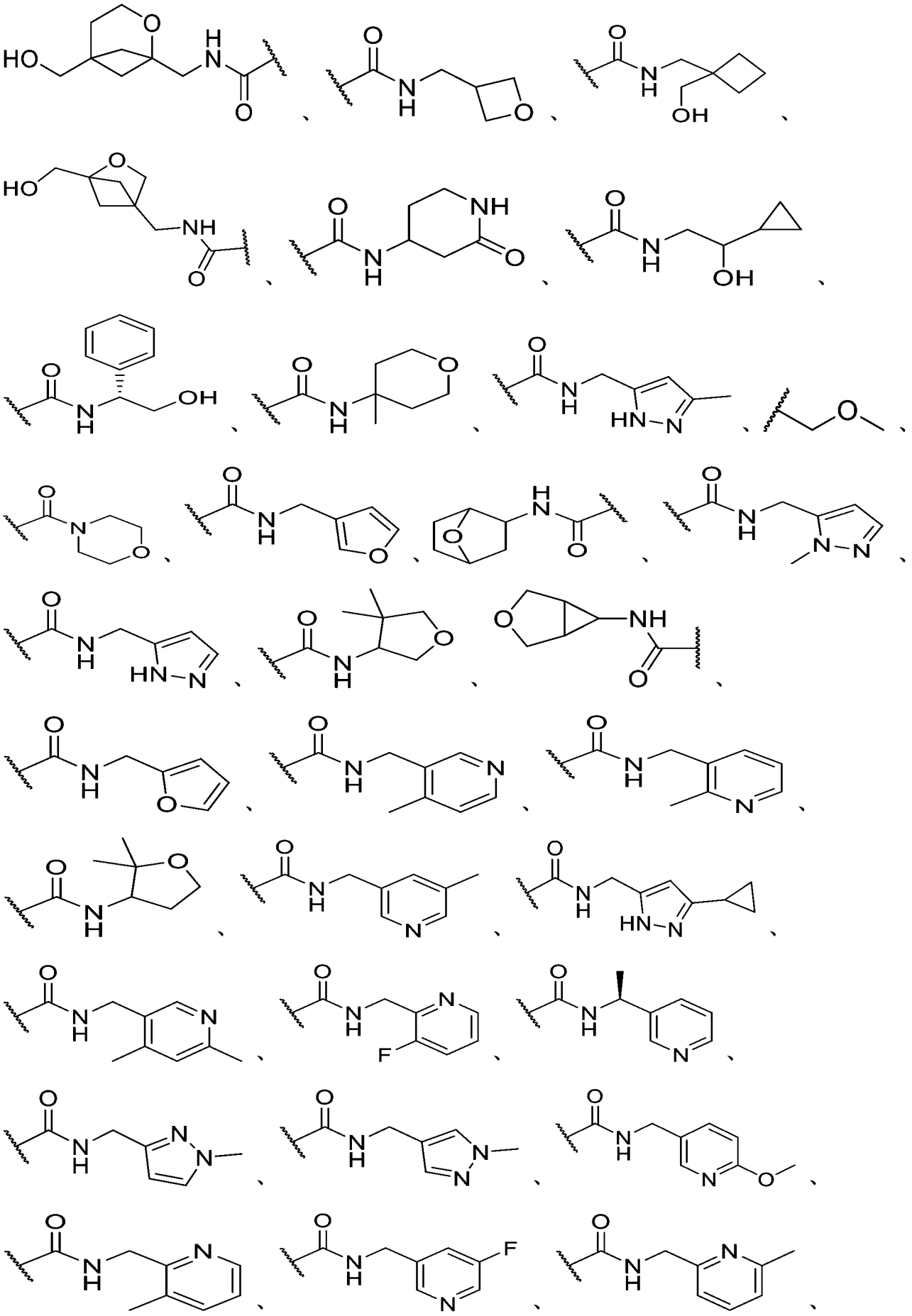
、

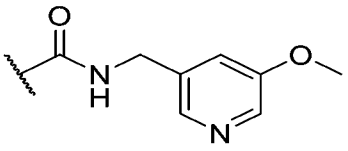
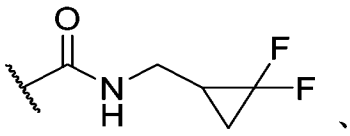
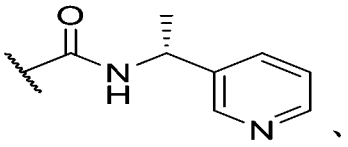
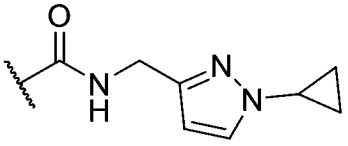
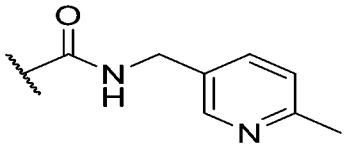
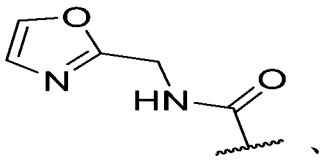
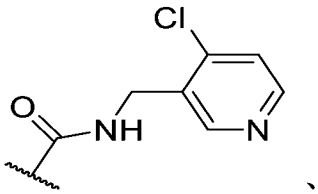
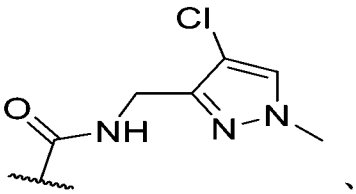
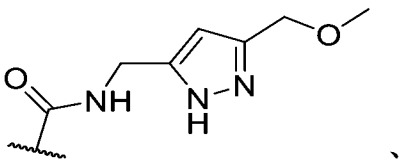
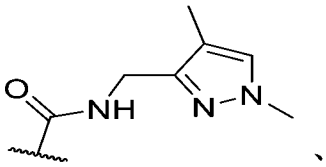
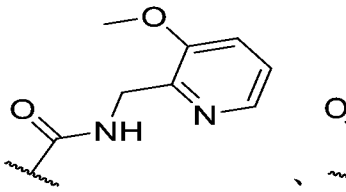
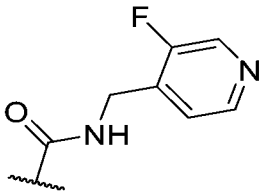
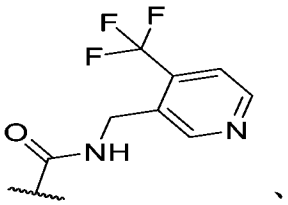
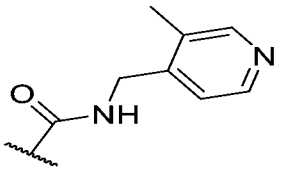


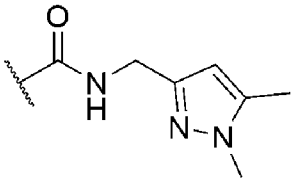
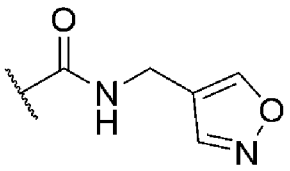
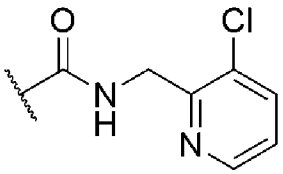
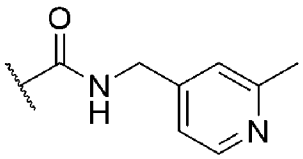
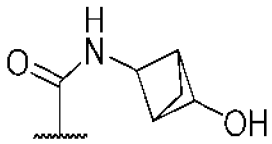
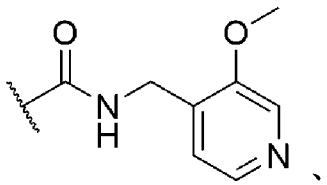
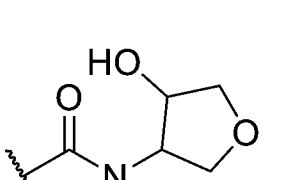
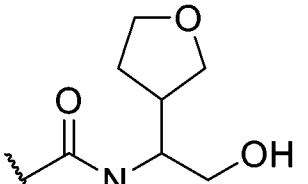
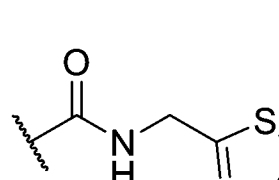
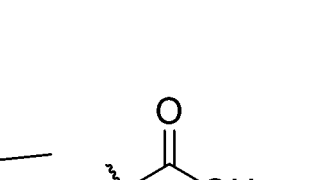


154. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自：

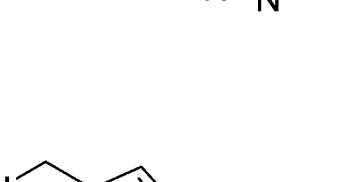
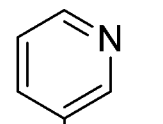
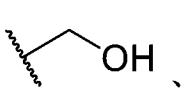
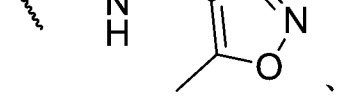
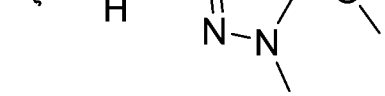
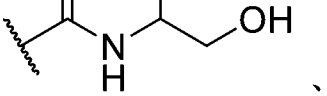


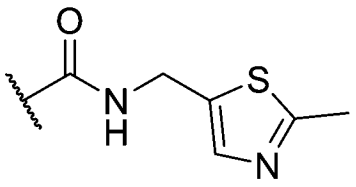
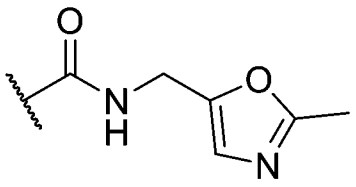
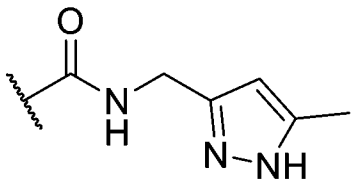
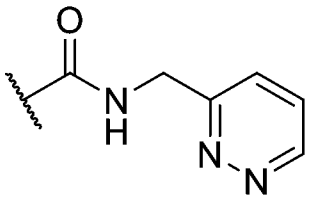
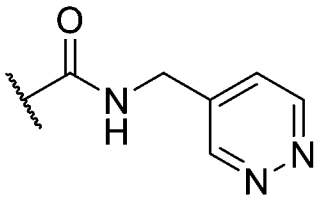
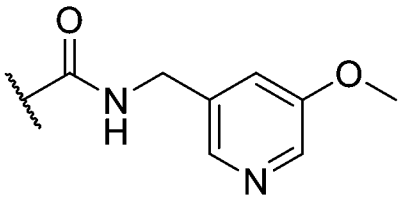
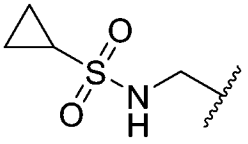
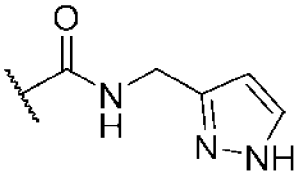
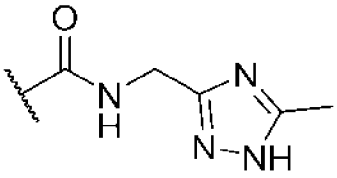
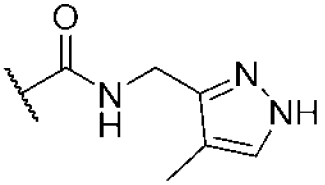
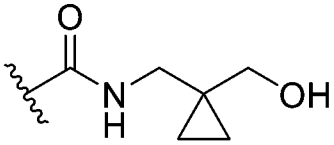
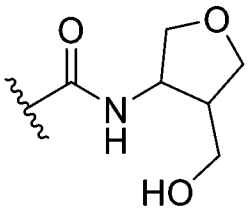
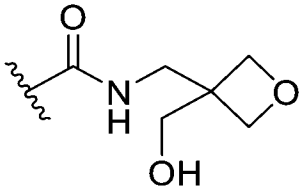
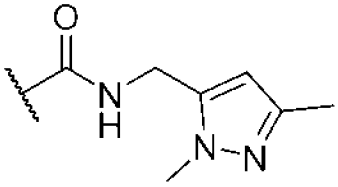
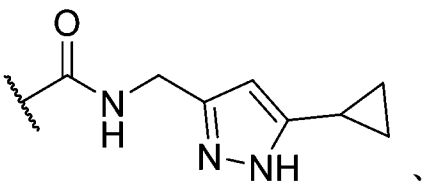
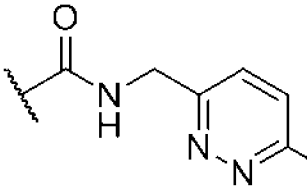
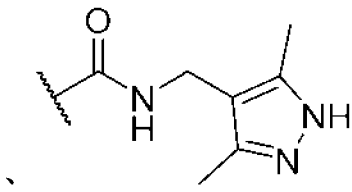
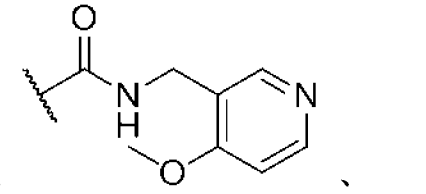
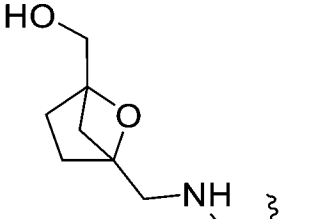
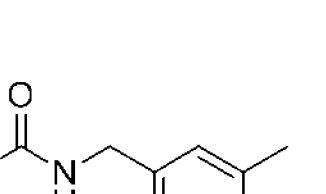
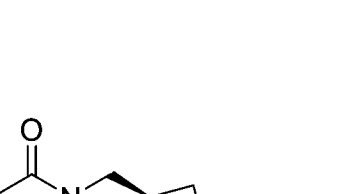



、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

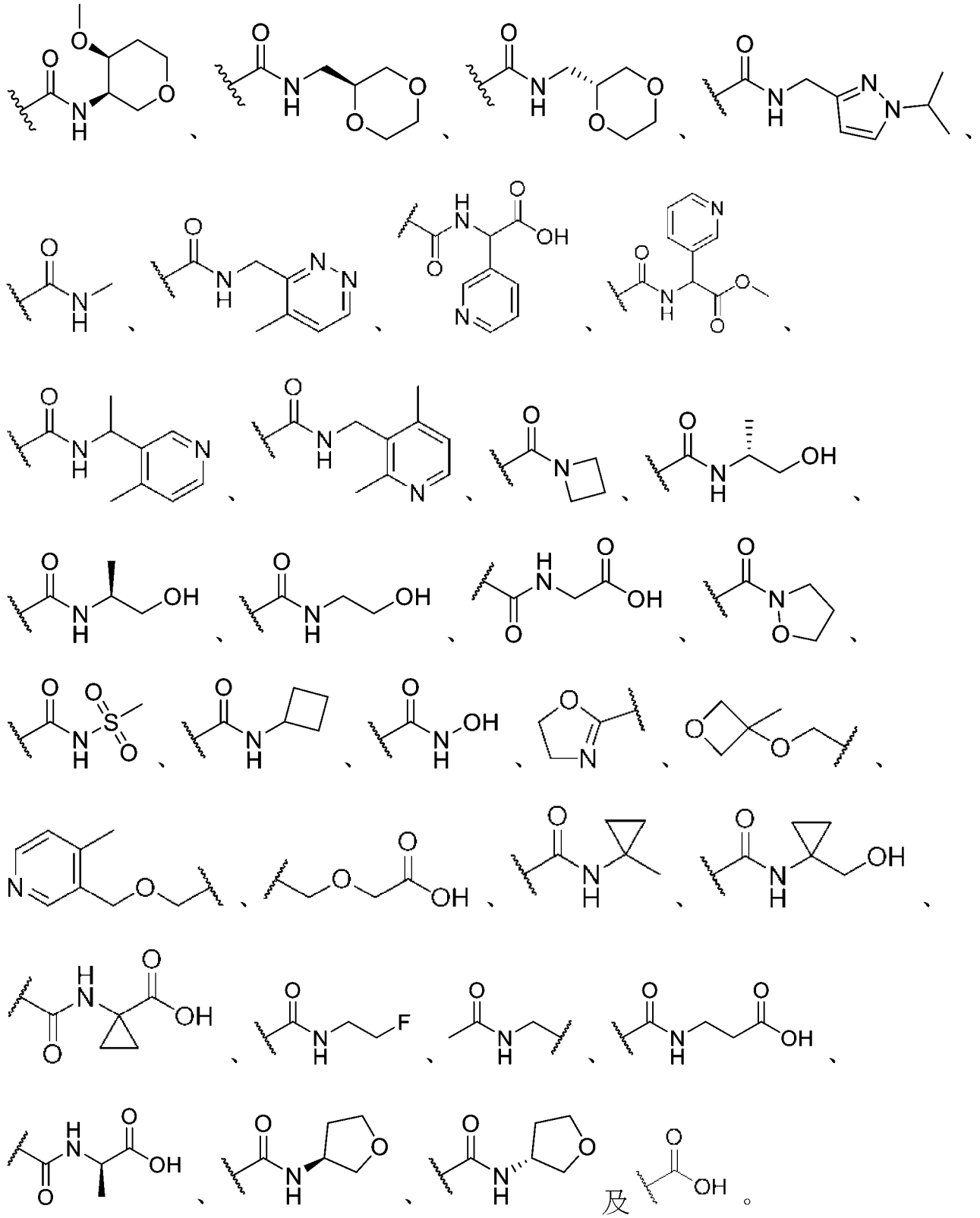
、

、

、

、

、

、

、


、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

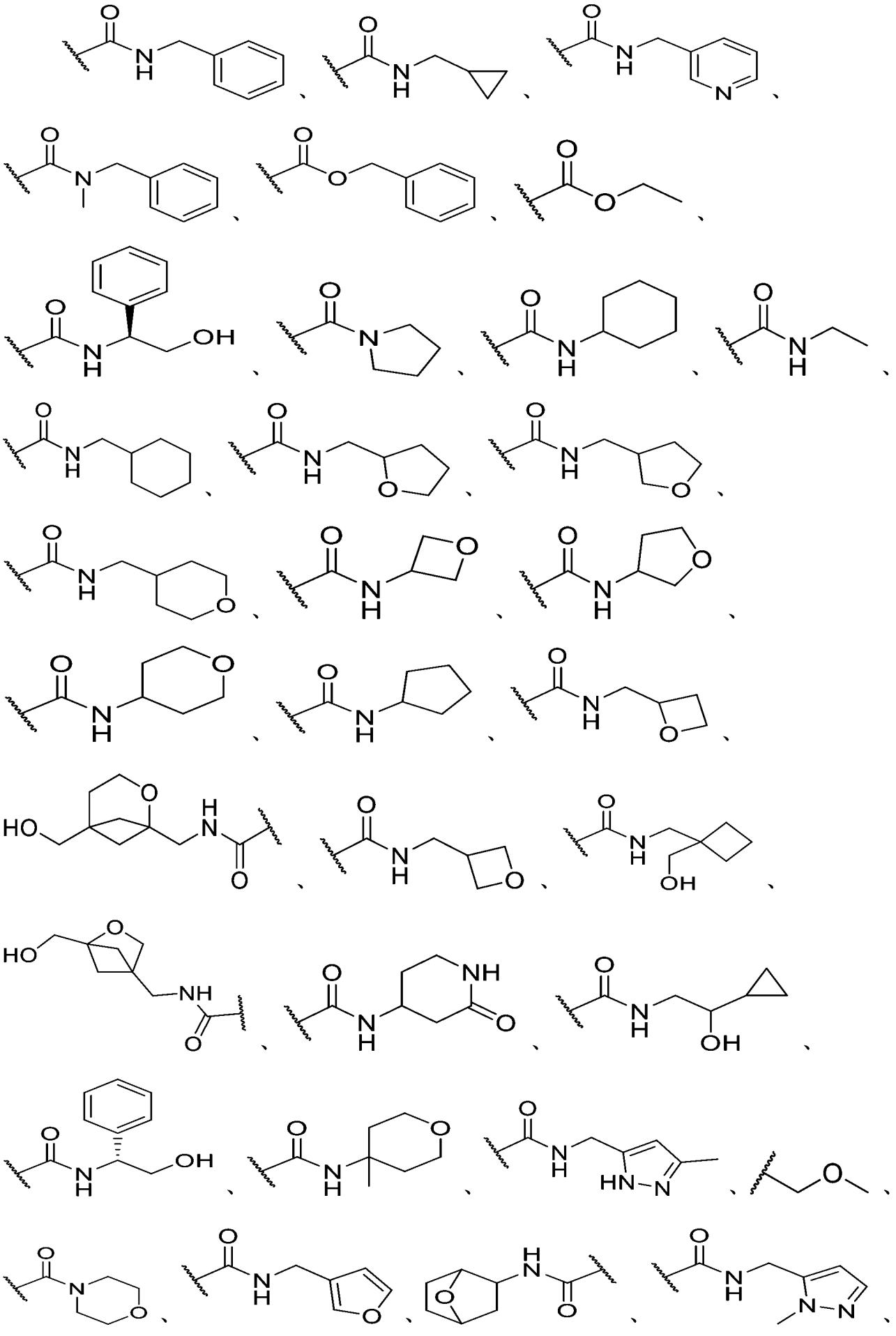
、

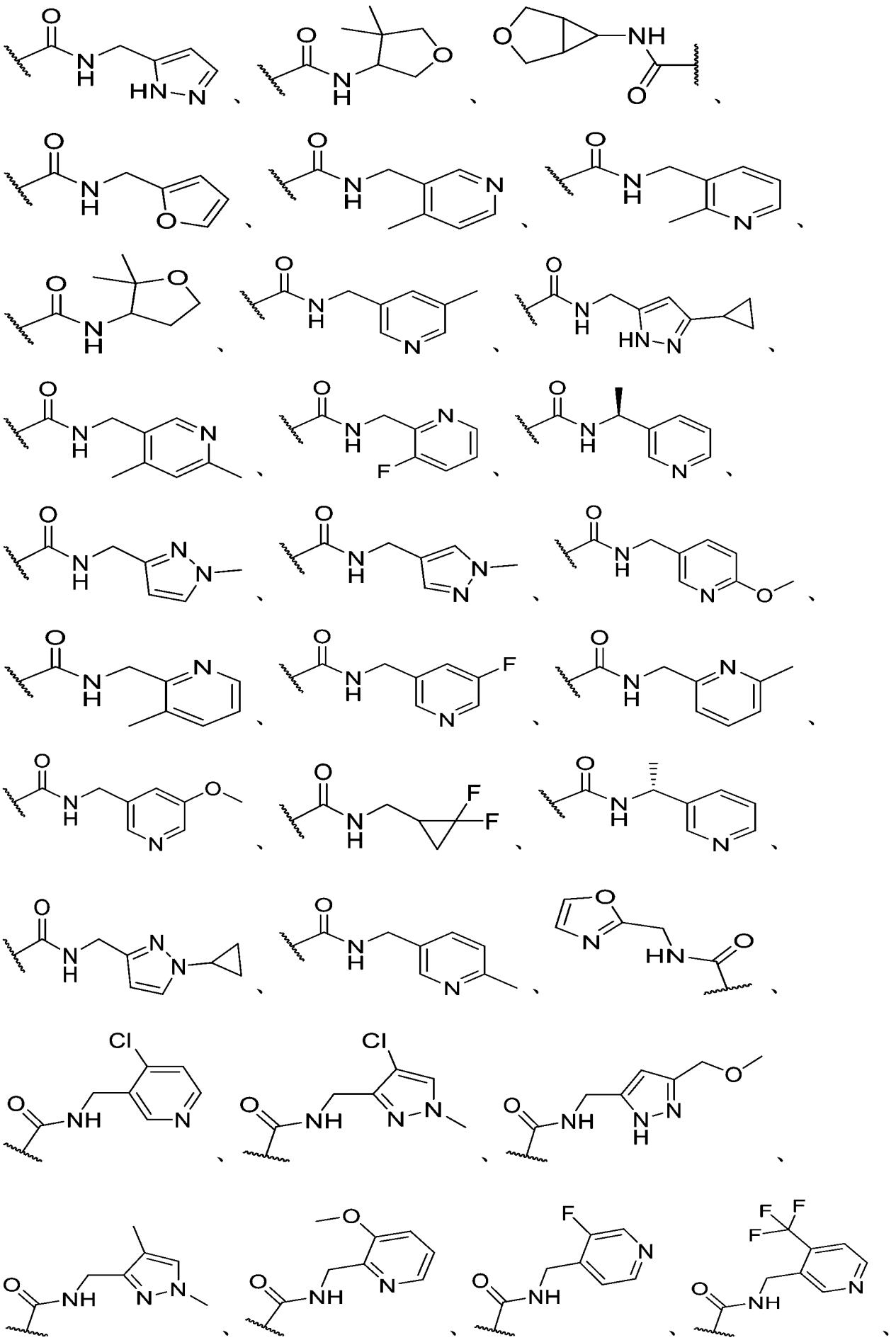
、

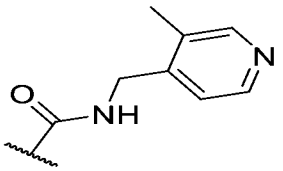
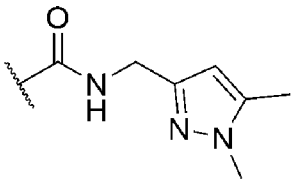
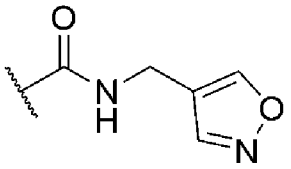
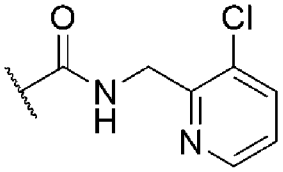
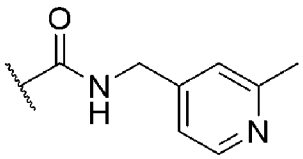
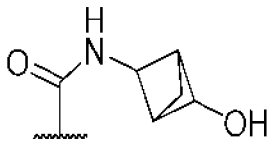
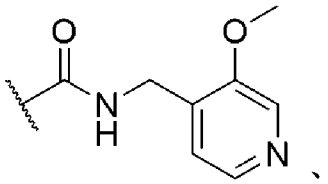
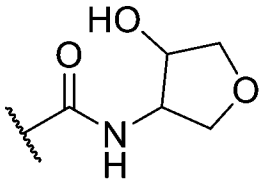
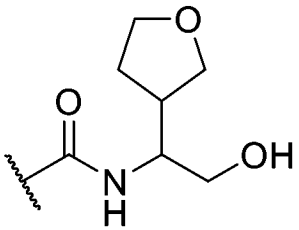
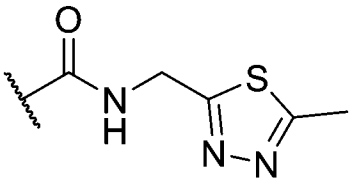
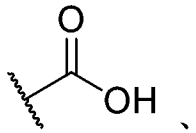
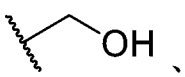
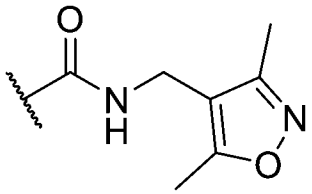
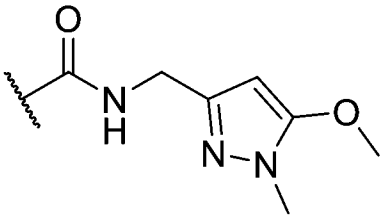
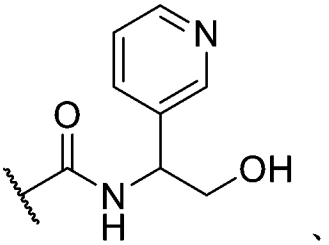
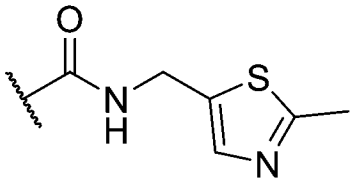
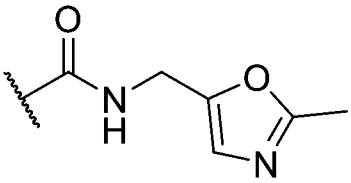
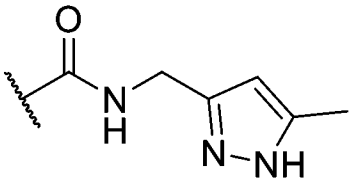
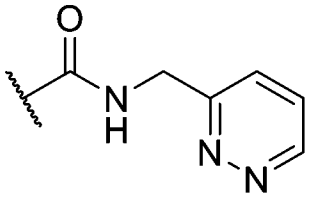
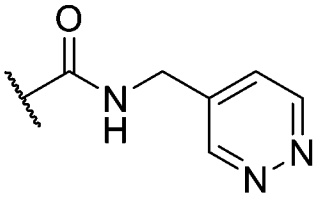
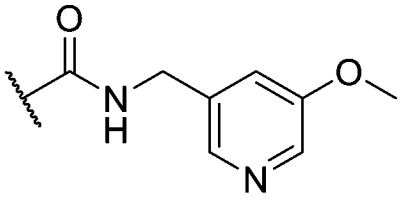
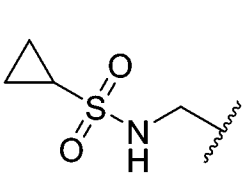
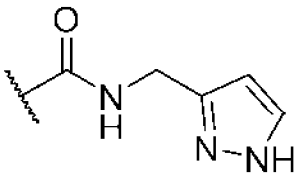
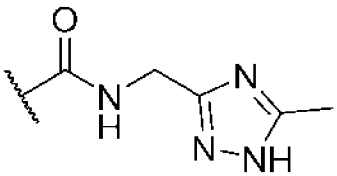
、

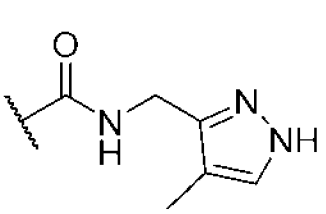
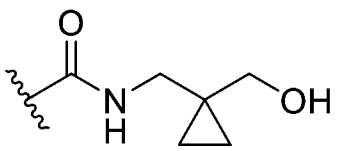
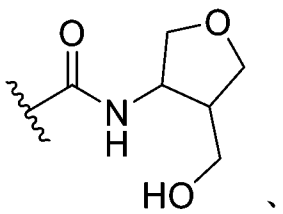
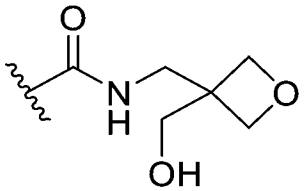
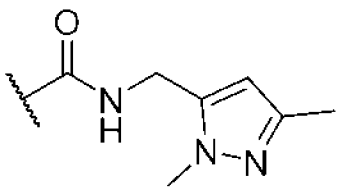
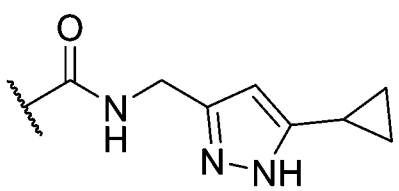
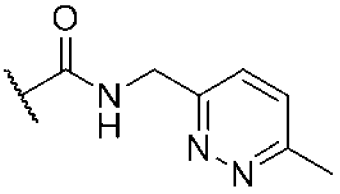
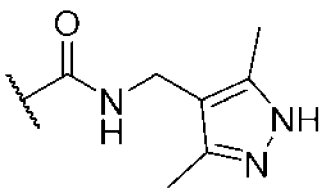
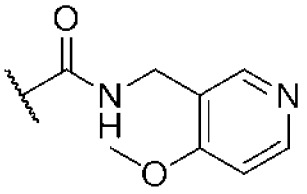
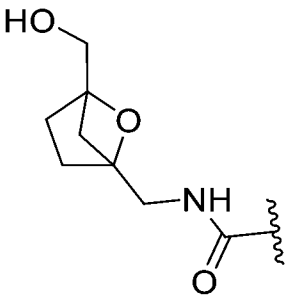
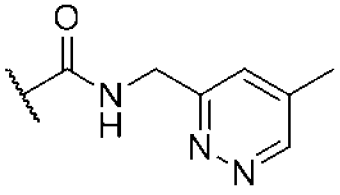
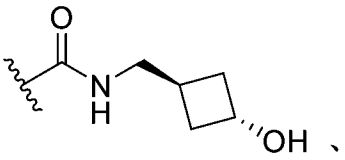
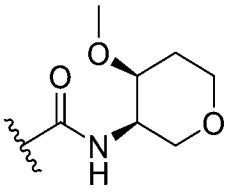
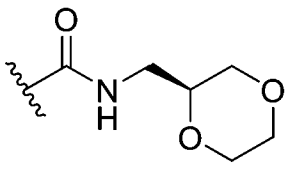
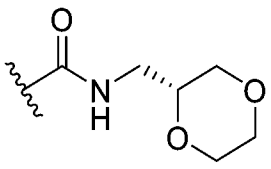
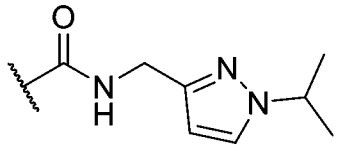


155. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自：

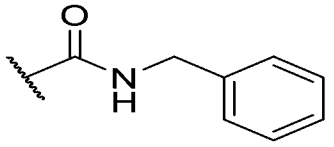
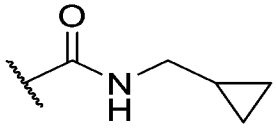
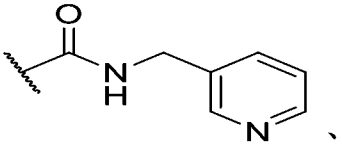
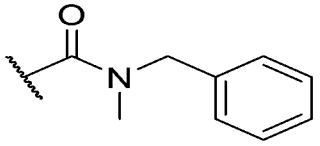
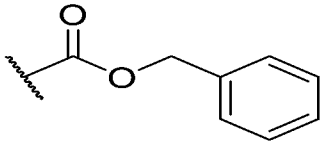
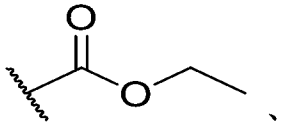


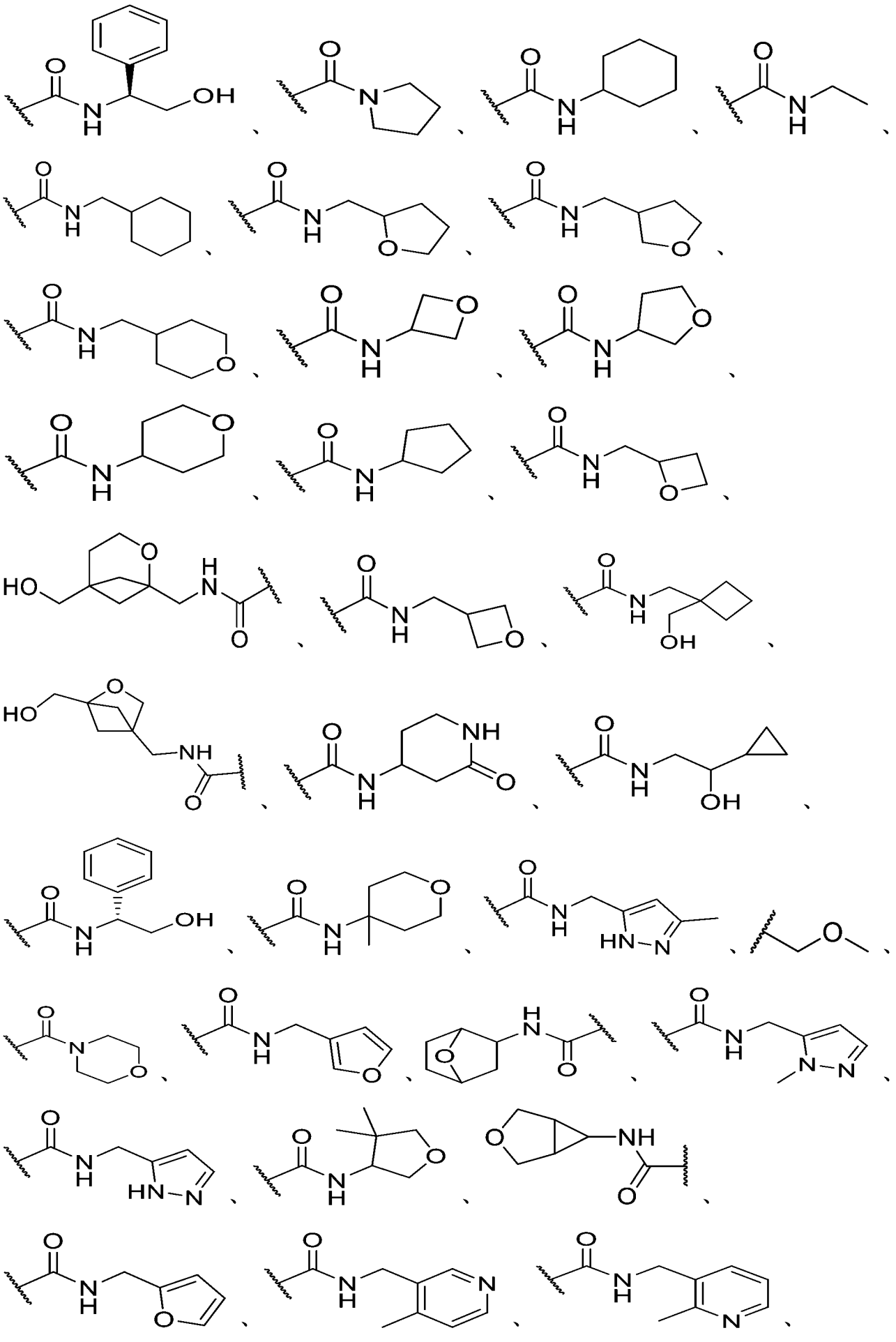


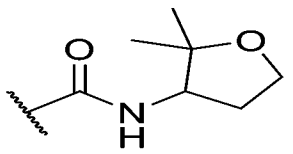
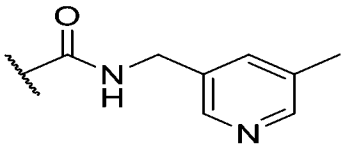
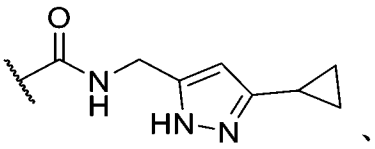
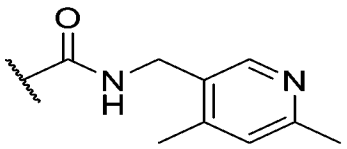
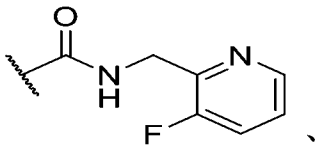
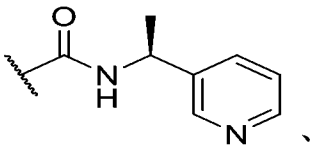
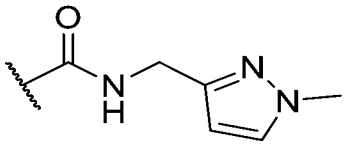
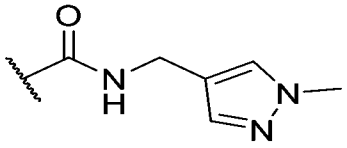
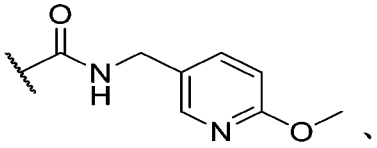
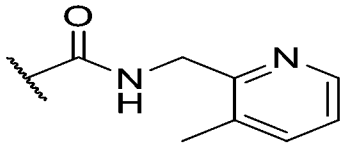
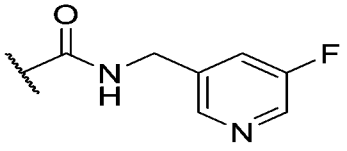
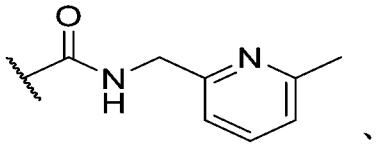
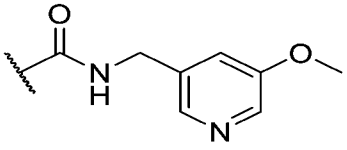
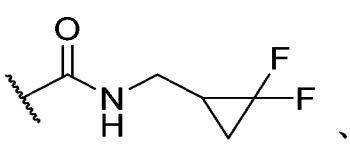
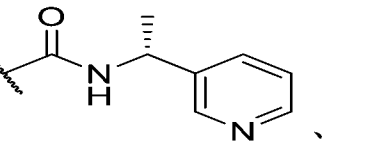
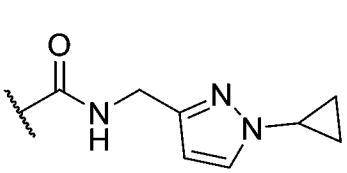
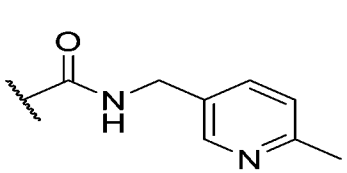
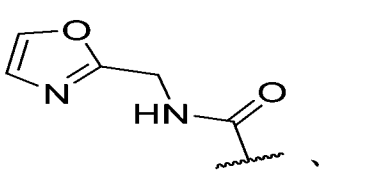
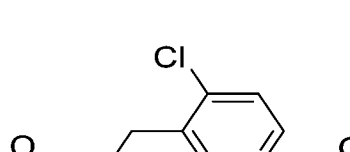
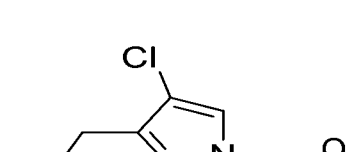
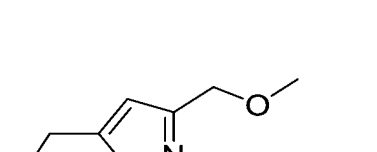
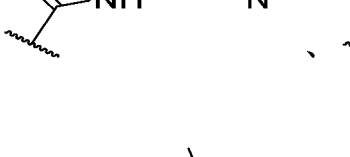
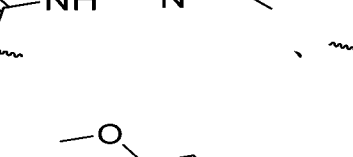
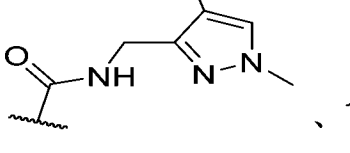
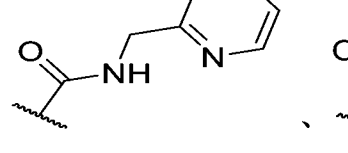
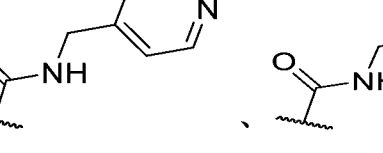

、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、

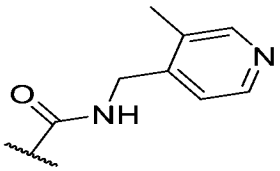
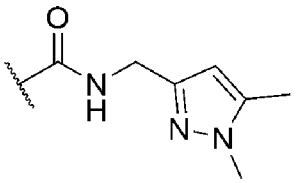
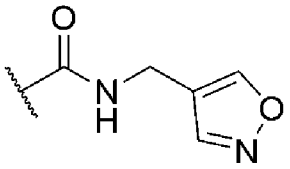
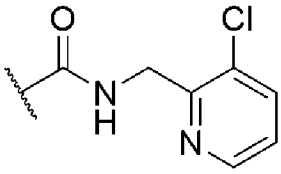
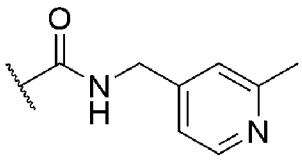
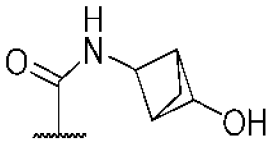
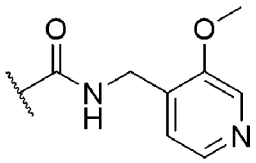
 、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  及  。

156. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自：

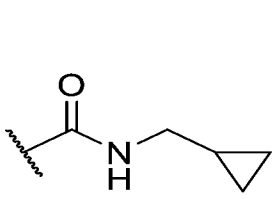
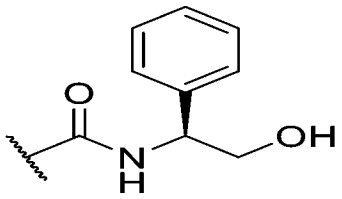
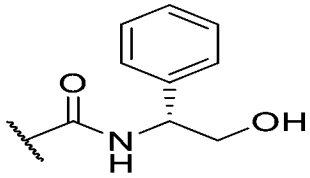
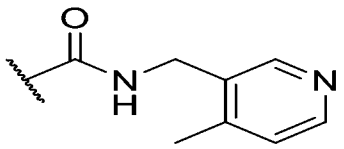
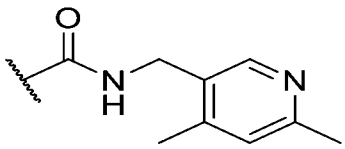
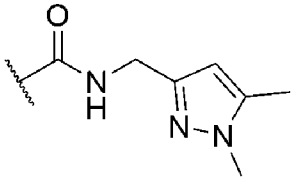
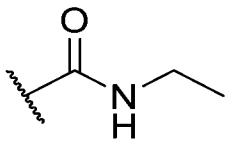
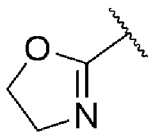
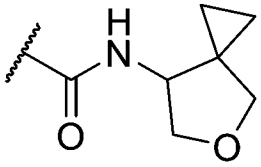
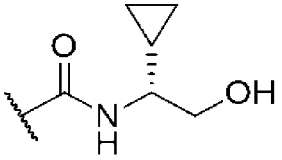
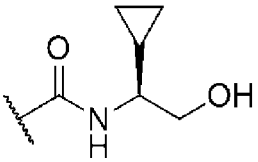
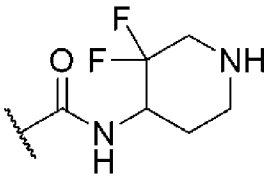
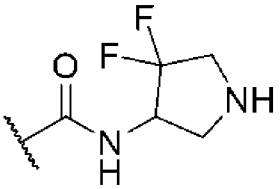
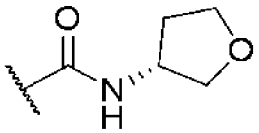
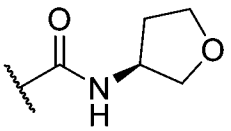
 、  、  、  、  、  、



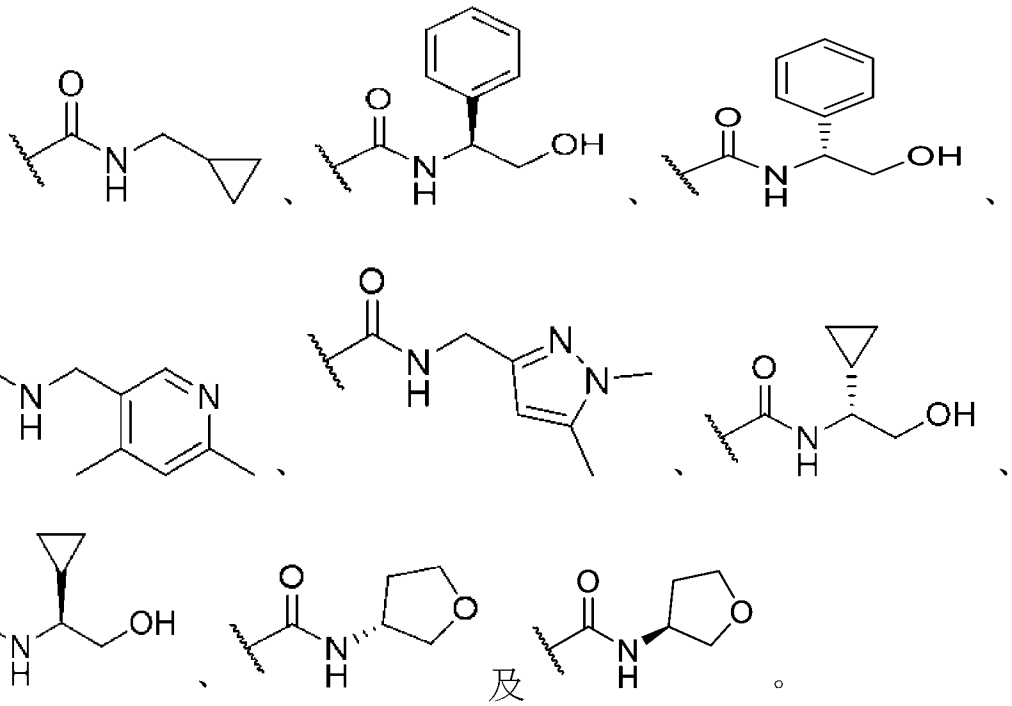
 、  、  、
 、  、  、
 、  、  、
 、  、  、
 、  、  、
 、  、  、
 、  、  、
 、  、  、
 、  、  、
、、、、


、 
、 
、 
、 
、 
、 
及 
。

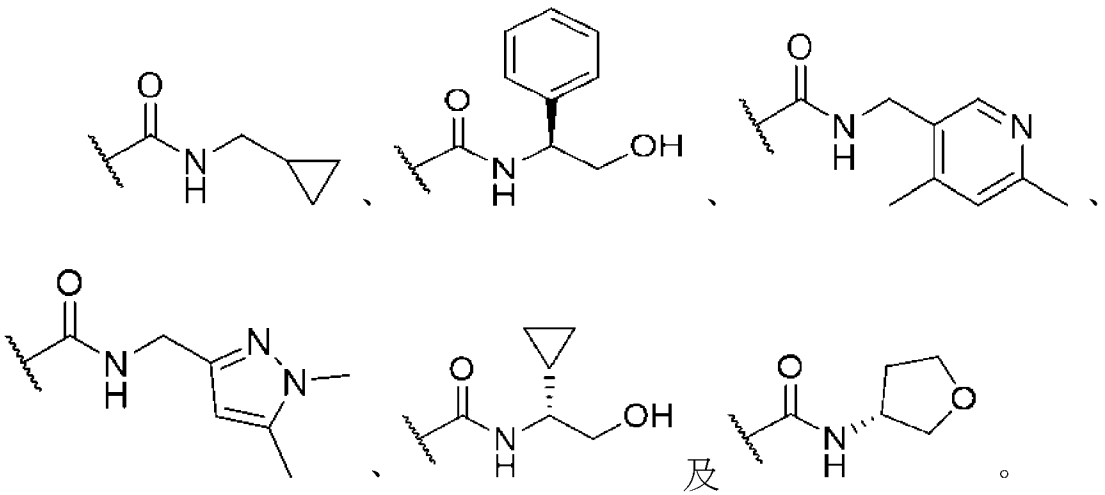
157. 根據編號實施例1至153中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自：


、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
、 
及 
。

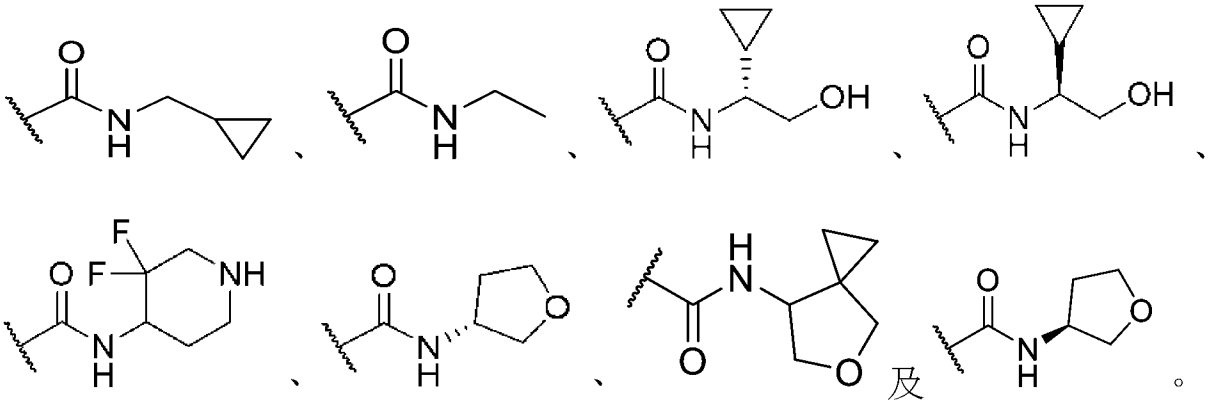
158. 根據編號實施例1至153中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自：



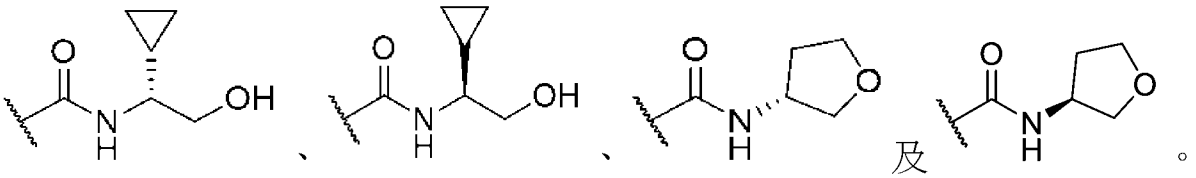
159. 根據編號實施例1至153中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自：



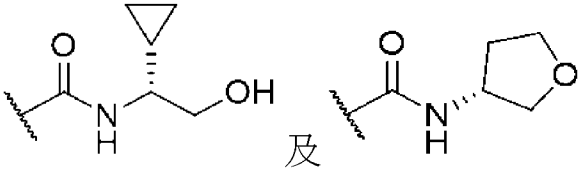
160. 根據編號實施例1至153中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自：



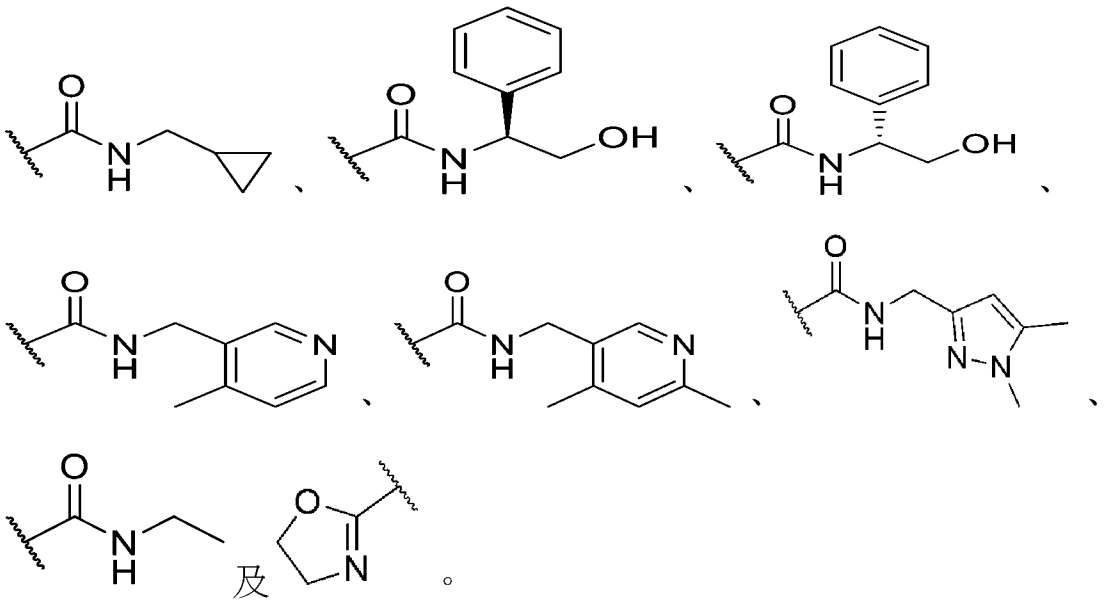
161. 根據編號實施例1至153中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自：



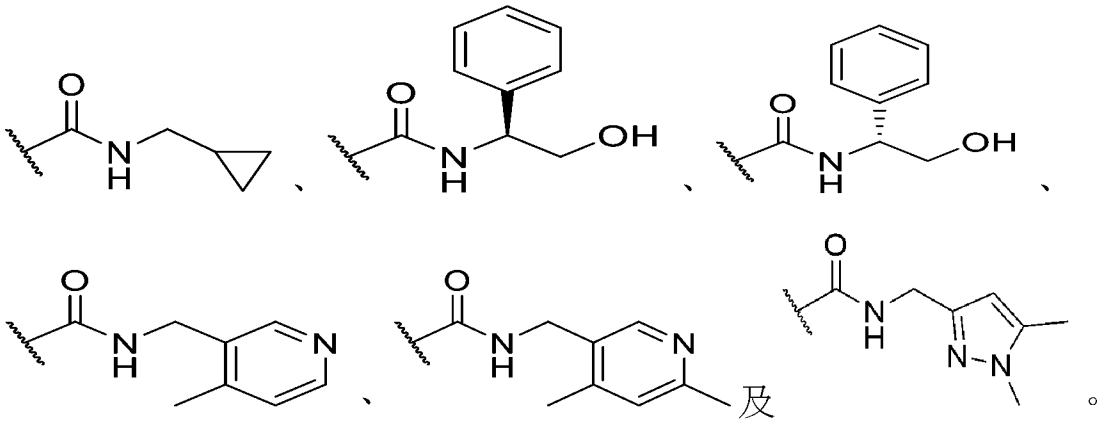
162. 根據編號實施例1至153中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自：



163. 根據編號實施例1至154中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自：



164. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自：



165. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中L_1為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基。

166. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中L_1為單鍵。

167. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)- 及$-SO_2-$之連接基。

168. 根據編號實施例1至166中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$及-C(=O)-之連接基。

169. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中L_2為選自單鍵及$-(CH_2)_{1-3}-$之連接基。

170. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中L_2為單鍵。

171. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中L_1及L_2各自獨立地為選自單鍵及$-(CH_2)_{1-3}-$之連接基。

172. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中L_1及L_2均為單鍵。

173. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_1選自噻吩、苯基及吡啶基。

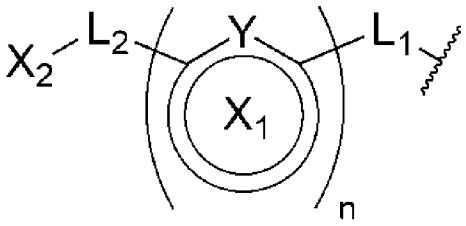
174. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_1選自苯基及吡啶基。

175. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_1為苯基。

176. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自小烷基、環丙基、小烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代。

177. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_{20}選自H及小烷基。

178. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中式(II)由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員芳族環；其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

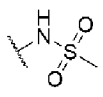
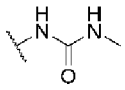
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

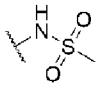
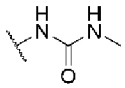
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

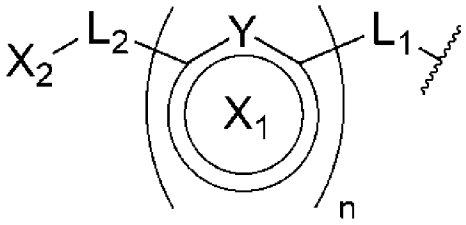
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

179. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中式(II)由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員芳族環；其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

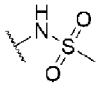
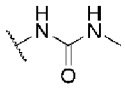
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及$-SO_2-$之連接基；且

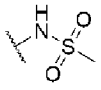
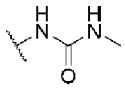
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

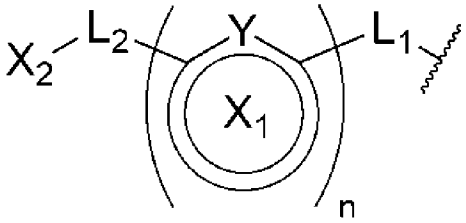
其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳

環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

180. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中式(II)由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員芳族環；其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

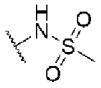
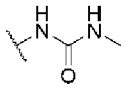
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及$-SO_2-$之連接基；且

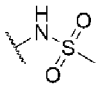
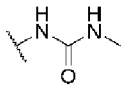
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及 $-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及－$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

181. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_{21}選自烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}。

182. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當X_2為-$NR_{20}R_{21}$時，L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-及-SO_2-之連接基。

183. 根據編號實施例182之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當X_2為-$NR_{20}R_{21}$時，L_2為選自單鍵或-CH_2-之連接基。

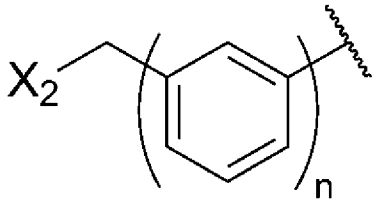
184. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當X_2為-$NR_{20}R_{21}$時，X_1為苯基或吡啶基。

185. 根據編號實施例1至181中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_2為2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

186. 根據編號實施例1至181中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_2為2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地

選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

187. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中式(II)由式(IIa)表示，



式(IIa)，

其中：

n為0或1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

188. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基。

189. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員為N。

190. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員為N，且其中，當X_2為雙環系統時，該雙環系統為稠合的。

191. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中X_2為含有5或6個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員為N。

192. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中X_2為含有5或6個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員為N，且其中，當X_2為雙環系統時，該雙環系統為稠合的。

193. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中一個環成員為N。

194. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中一個環成員為N，且其中，當X_2為雙環系統時，該雙環系統為稠合的。

195. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中X_2為含有5或6個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中一個環成員為N。

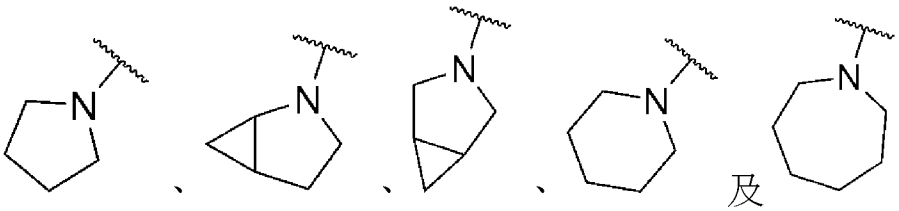
196. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中X_2為含有5或6個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中一個環成員為N，且其中，當X_2為雙環系統時，該雙環系統為稠合的。

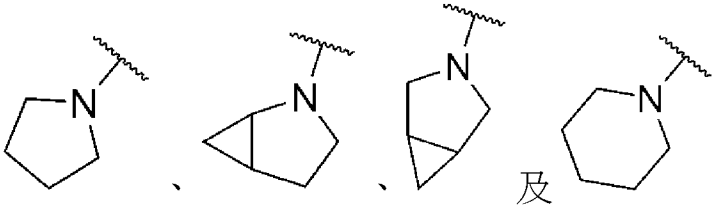
197. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中X_2經由X_2之N環成員連接至分子之剩餘部分。

198. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

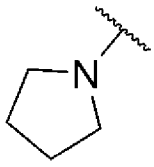
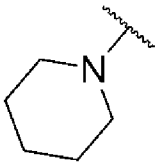
其中X_2選自結構  ，其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

199. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中X_2選自結構  ，其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之

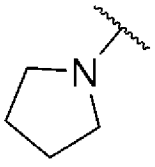
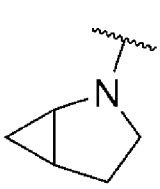
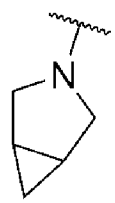
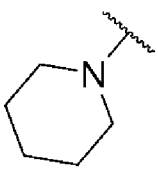
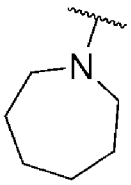
碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

200. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

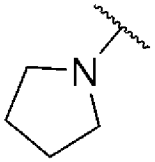
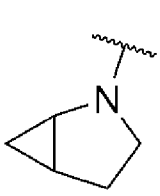
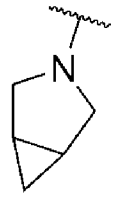
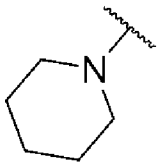
其中X_2選自結構  及  ，其中X_2可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代。

201. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

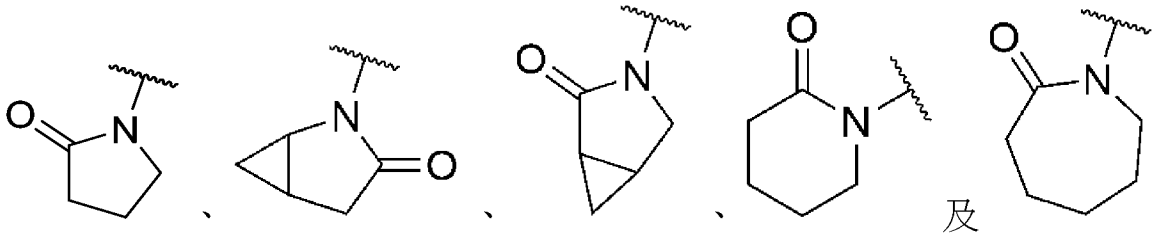
其中X_2可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代。

202. 根據編號實施例1-200中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_2選自結構  、  、  、  及  ，其中X_2經側氧基取代基取代，且

X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經R_{30}取代，其中R_{30}選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

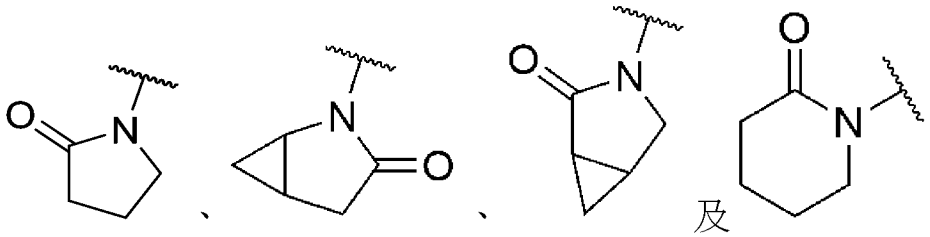
203. 根據編號實施例1-200中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_2選自結構  、  、  及  ，其中X_2經側氧基取代基取代，且X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經R_{30}取代，其中R_{30}選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

204. 根據編號實施例1-200中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_2選自結構



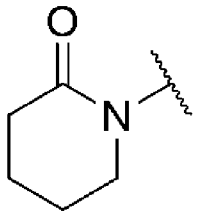
，其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經R_{30}取代，其中R_{30}選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

205. 根據編號實施例1-200中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_2選自結構



，其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

206. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中X_2不為  。

207. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中X_2為環醯胺。

208. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中X_2不為環醯胺。

209. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中n為1。

210. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中L_3為選自單鍵及-$(CH_2)_{1-3}$-之連接基。

211. 根據編號實施例210之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中L_3為單鍵。

212. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A不含N及S環成員。

213. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A為苯基或含有1、2或3個選自N及O之環成員的5員或6員含碳芳族環。

214. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A為苯基或含有1、2或3個氮環成員之6員含碳芳族環。

215. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A為苯基、吡啶基或嘧啶基。

216. 根據編號實施例215之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A為苯基、吡啶基或嘧啶基，其中A未進一步經任何視情況選用之取代基取代。

217. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A為苯基或吡啶基。

218. 根據編號實施例217之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A為苯基。

219. 根據編號實施例217之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A為吡啶基。

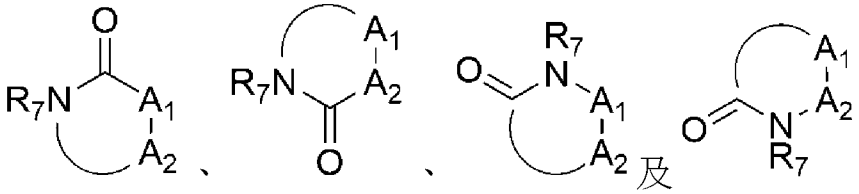
220. 根據編號實施例1-215或217-219中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A視情況經單一取代基取代，其中該取代基為鹵基取代基。

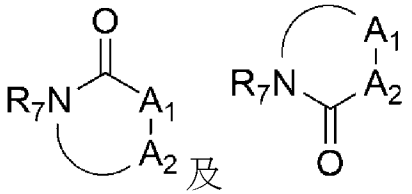
221. 根據編號實施例1-215或217-220中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A視情況經單一取代基取代，其中該取代基為F。

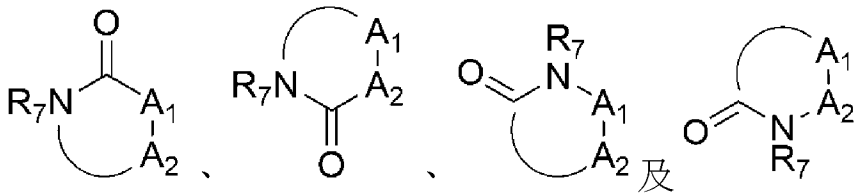
222. 根據編號實施例1-215或217-221中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A經單一取代基取代，其中該取代基為鹵基取代基。

223. 根據編號實施例1-215或217-222中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A經單一取代基取代，其中該取代基為F。

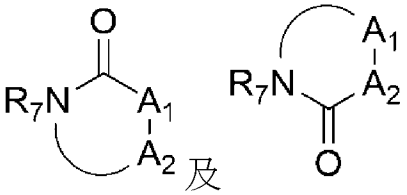
224. 根據編號實施例1-219中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A未經任何視情況選用之取代基取代。

225. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當A'為環醯胺時，A'選自  。

226. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當A'為環醯胺時，A'選自  。

227. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'為環醯胺，且A'選自  。

228. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'為環醯胺，且A'選自


及

。

229. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N。

230. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中A'為含有6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N。

231. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中A'為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N。

232. 根據編號實施例1-229中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘

化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N。

233. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中A'為含有6個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N。

234. 根據編號實施例1-230或232中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中A'為含有7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N或其中一個環成員為N且第二環成員為O。

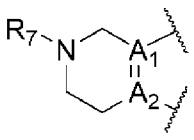
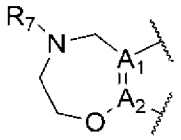
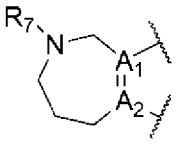
235. 根據編號實施例1-230或232中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中A'為含有7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N。

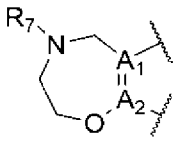
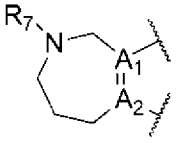
236. 根據編號實施例1-230、232或234中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中A'為含有7個環成員之非芳族含碳單環，其中一個環成員為N且第二環成員為O。

237. 根據編號實施例1-230中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

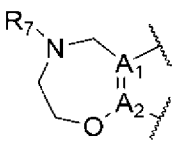
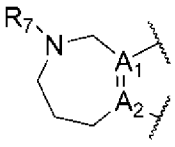
其中A'選自  、  及  ，且其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

238. 根據編號實施例1-230中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

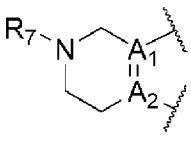
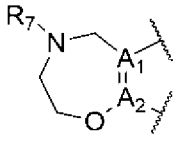
其中A'選自  及  ，且其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1或2

個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

239. 根據編號實施例1-230中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

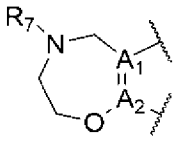
其中A'選自  及  ，且其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

240. 根據編號實施例237之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

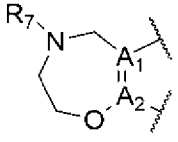
其中A'選自  及  ，且其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1或2

個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

241. 根據編號實施例240之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

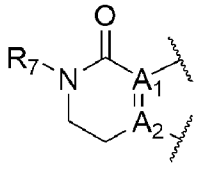
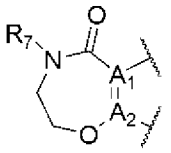
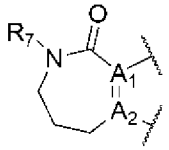
其中A'為  ，且其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

242. 根據編號實施例239之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

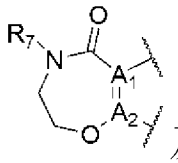
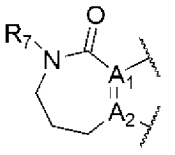
其中A'為  ，且其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中

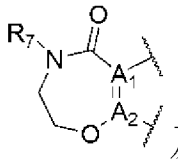
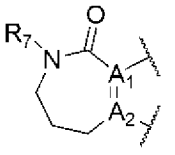
R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

243. 根據前述實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'進一步經側氧基取代基取代。

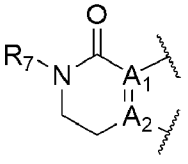
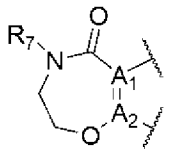
244. 根據編號實施例237之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'選自  、  及  ，且其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

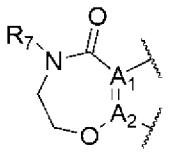
245. 根據編號實施例244之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以

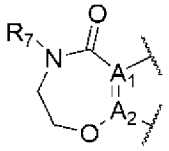
及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'選自  及  ，且其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

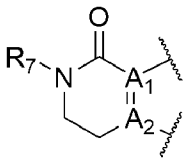
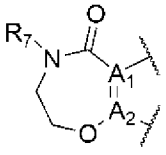
246. 根據編號實施例239之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'選自  及  ，且其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

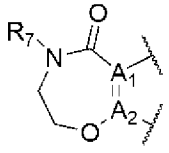
247. 根據編號實施例244之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以

及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'選自  及  ，且其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

248. 根據編號實施例247之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'為  ，且其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接-CH_2-基團連接。

249. 根據編號實施例246之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'為  ，且其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

250. 根據前述實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'選自  及  ，且其中A'不具有其他取代基。

251. 根據編號實施例250之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'為  且不具有其他取代基。

252. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中R_7當存在時經由N環成員鍵結至A'。

253. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中R_7存在。

254. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中R_7為烷基。

255. 根據編號實施例254之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7為(C_1-C_3)烷基。

256. 根據編號實施例255之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7為(C_1-C_2)烷基。

257. 根據編號實施例256之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7為(C_2)烷基。

258. 根據編號實施例257之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7為(C_2)烷基，其中(C_2)烷基為未經取代的或經OH或鹵基取代基取代。

259. 根據編號實施例255之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7選自$-CH_3$、$-CH_2-CH_3$、$-CH_2-CH_2-OH$、CH_2-CHF_2、CH_2-CF_3、$CH_2-CH_2-CH_2-OH$、$-CH(CH_3)_2$及$-CH_2-(C=O)-NH_2$。

260. 根據編號實施例255之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7選自$-CH_3$、$-CH_2-CH_3$、$-CH_2-CH_2-OH$、CH_2-CHF_2、CH_2-CF_3、$CH_2-CH_2-CH_2-OH$及$-CH(CH_3)_2$。

261. 根據編號實施例260之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7選自$-CH_3$、$-CH_2-CH_3$及CH_2-CH_2-OH。

262. 根據編號實施例260之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7選自$-CH_2-CH_3$及CH_2-CH_2-OH、CH_2-CHF_2、CH_2-CF_3、$-CH_2-CH_2-CH_2-OH$及$-CH(CH_3)_2$。

263. 根據編號實施例261之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7選自$-CH_2-CH_3$及CH_2-CH_2-OH。

264. 根據編號實施例261之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7選自-CH_3及CH_2-CH_2-OH。

265. 根據編號實施例263或編號實施例264之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中R_7為CH_2-CH_2-OH。

266. 根據編號實施例264之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7為-CH_3。

267. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中R_{10} R_{11}及R_{17}不存在。

268. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中R_{10}及R_{11}不存在。

269. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中R_{24}、R_{25}、R_{26}及R_{27}不存在。

270. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中R_{24}、R_{25}及R_{26}不存在。

271. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

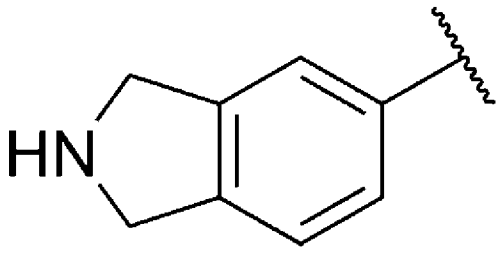
其中R_{43}及R_{44}不存在。

272. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

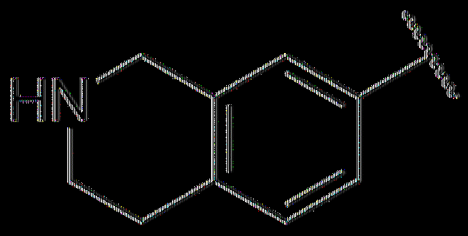
其中A'未經除R_7以外之其他取代基取代。

273. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

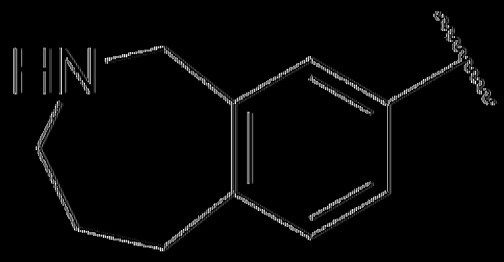
其中式(III)由式(IIIa)、式(IIIb)、式(IIIc)及式(IIId)表示，



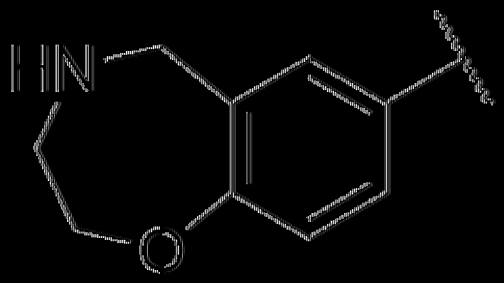
式(IIIa)，



式(IIIb)，



式(IIIc)，



式(IIId)，

其中：

A為苯基或吡啶基環，A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為稠合吡咯啶、哌啶、氮雜環庚烷或氧雜氮雜環庚烷環；

R_7當存在時經由式(IIIa)、式(IIIb)、式(IIIc)或式(IIId)之N環成員鍵結至A'，從而置換H；

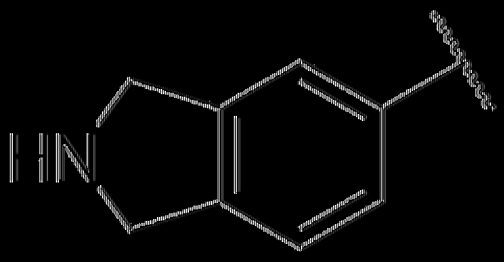
A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自小烷基、環烷基、小烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或A'可視情況經1或2個獨立地選自小烷基、環內基、小烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其中間連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{13}及R_{14}取代，且A'內之兩個不同碳環成員可由橋接CH_2基團連接。

274. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

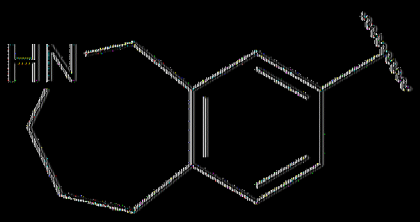
其中式(III)由式(IIIa)、式(IIIb)及式(IIIc)表示，



式(IIIa)，



式(IIIb)，



式(IIIc)，

其中：

A為苯基環且A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環內基、烯氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為稠合吡咯啶、哌啶或含氮雜環基烷環；

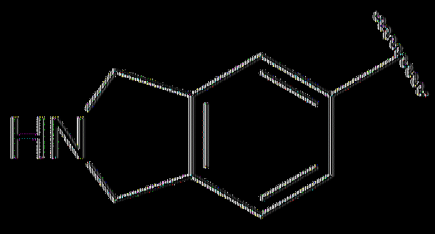
R_7當存在時經由式(IIIa)、式(IIIb)或式(IIIc)之N環成員鍵結至A'，從而置換H；

A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自小烷基、環內基、小烯氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

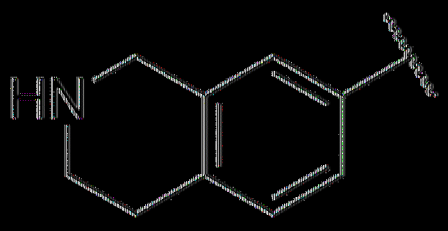
或A'可視情況經1或2個獨立地選自小烷基、環內基、小烯氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其共同連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

275. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

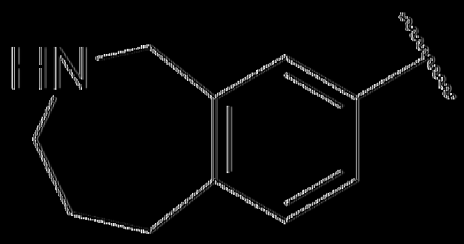
其中式(III)由式(IIIa)、式(IIIb)及式(IIIc)表示，



式(IIIa)，



式(IIIb)，



式(IIIc)，

其中：

A為苯基環且A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環內基、烯基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

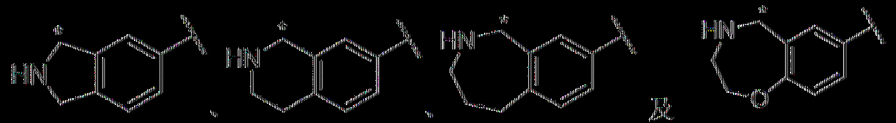
A'為稠合吡咯啶、哌啶或氮雜環庚烷環；

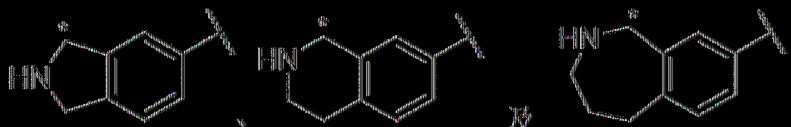
R當存在時經由式(IIIa)、式(IIIb)或式(IIIc)之N環成員鍵結至A'，從而置換H；

A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自小烷基、環內基、小烯基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，

或A'可視情況經1個選自小烷基、環內基、小烯基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其中間連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

216. 根據編號實施例213之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以

及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當A'係經側氧基取代時，側氧基處於標有(*)之位置處：  。

277. 根據編號實施例274或275之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當A'係經側氧基取代時，側氧基處於標有(*)之位置處：  。

278. 根據編號實施例273或276之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中式(III)由式(IIIb)、式(IIIc)或式(IIId)表示。

279. 根據編號實施例273至278中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中式(III)由式(IIIb)或式(IIId)表示。

280. 根據編號實施例273至279中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中式(III)由式(IIIb)表示。

281. 根據編號實施例273、276或278中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混

合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1為式(IIIa)、式(IIIb)、式(IIIc)或式(IIId)。

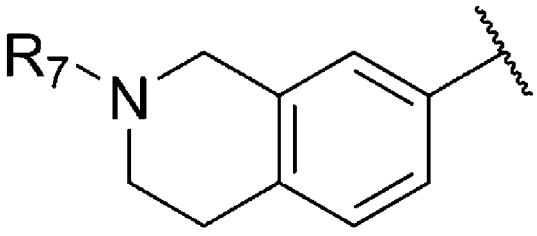
282. 根據編號實施例273至277中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1為式(IIIa)、式(IIIb)或式(IIIc)。

283. 根據編號實施例281之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1為式(IIIb)、式(IIIc)或式(IIId)。

284. 根據編號實施例283之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1為式(IIIb)或式(IIId)。

285. 根據編號實施例273-284中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1為式(IIIb)。

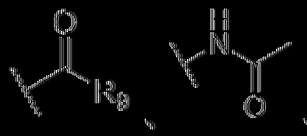
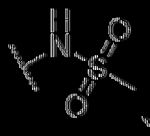
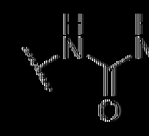
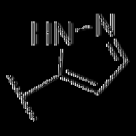
286. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中式(III)由式(IIIe)表示，



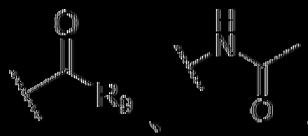
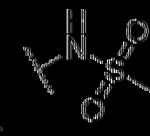
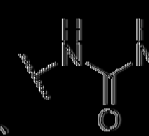
式(IIIe)。

287. 根據編號實施例286之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1為式(IIIc)。

288. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_8選自環烷基、雜環烷

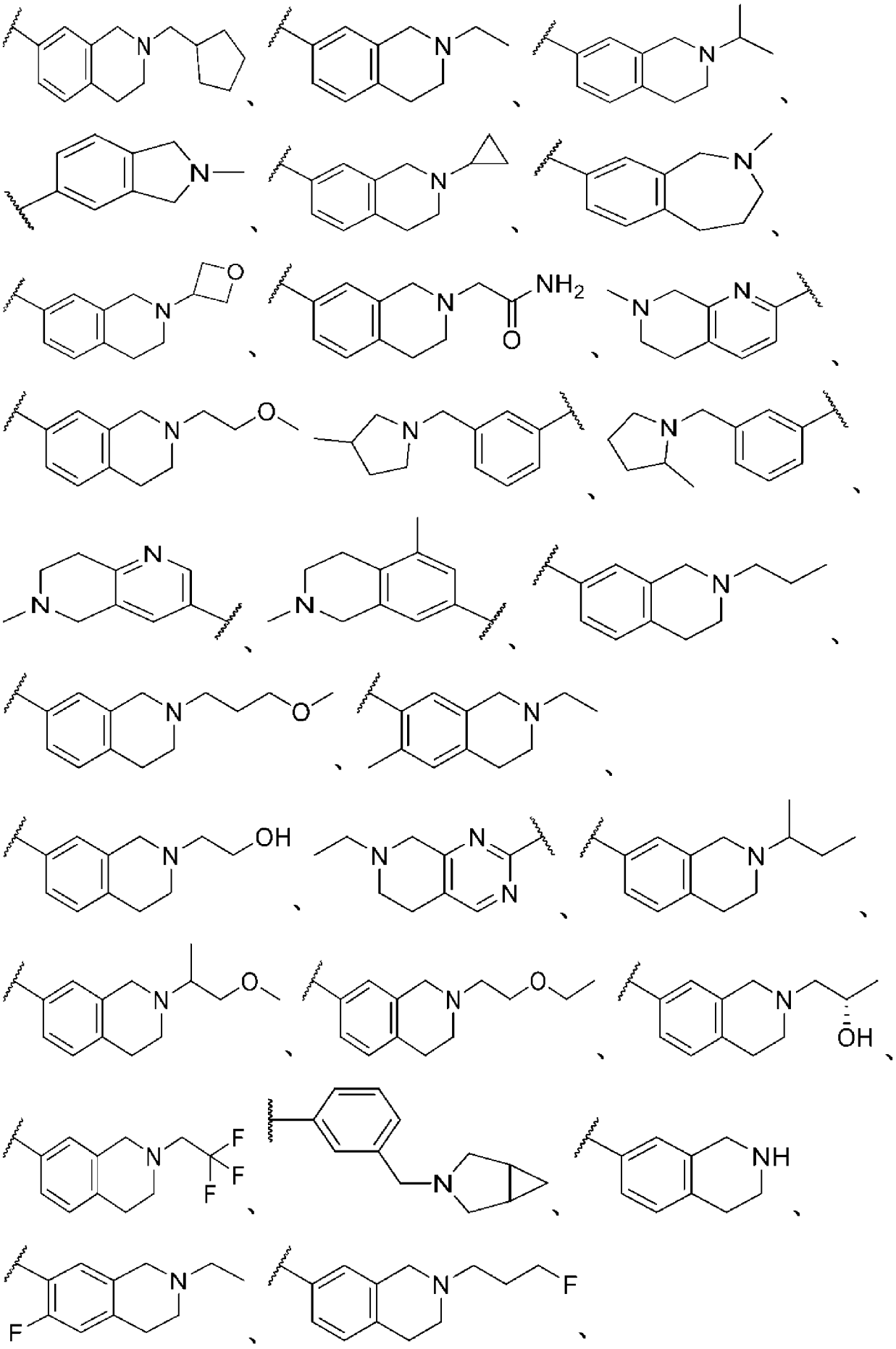
基、  、、  、  、  及  。

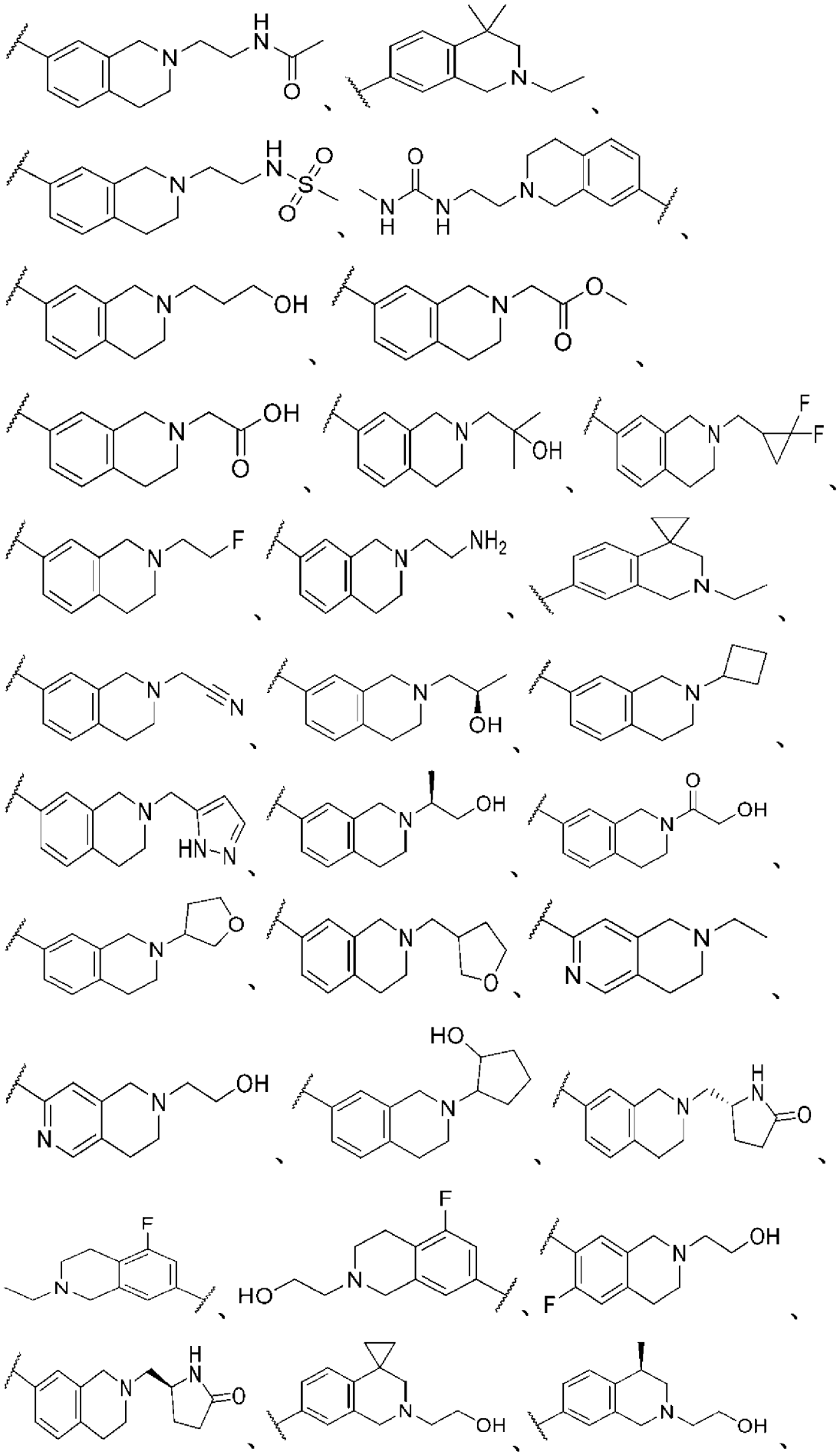
289. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_8選自環烷基、雜環烷

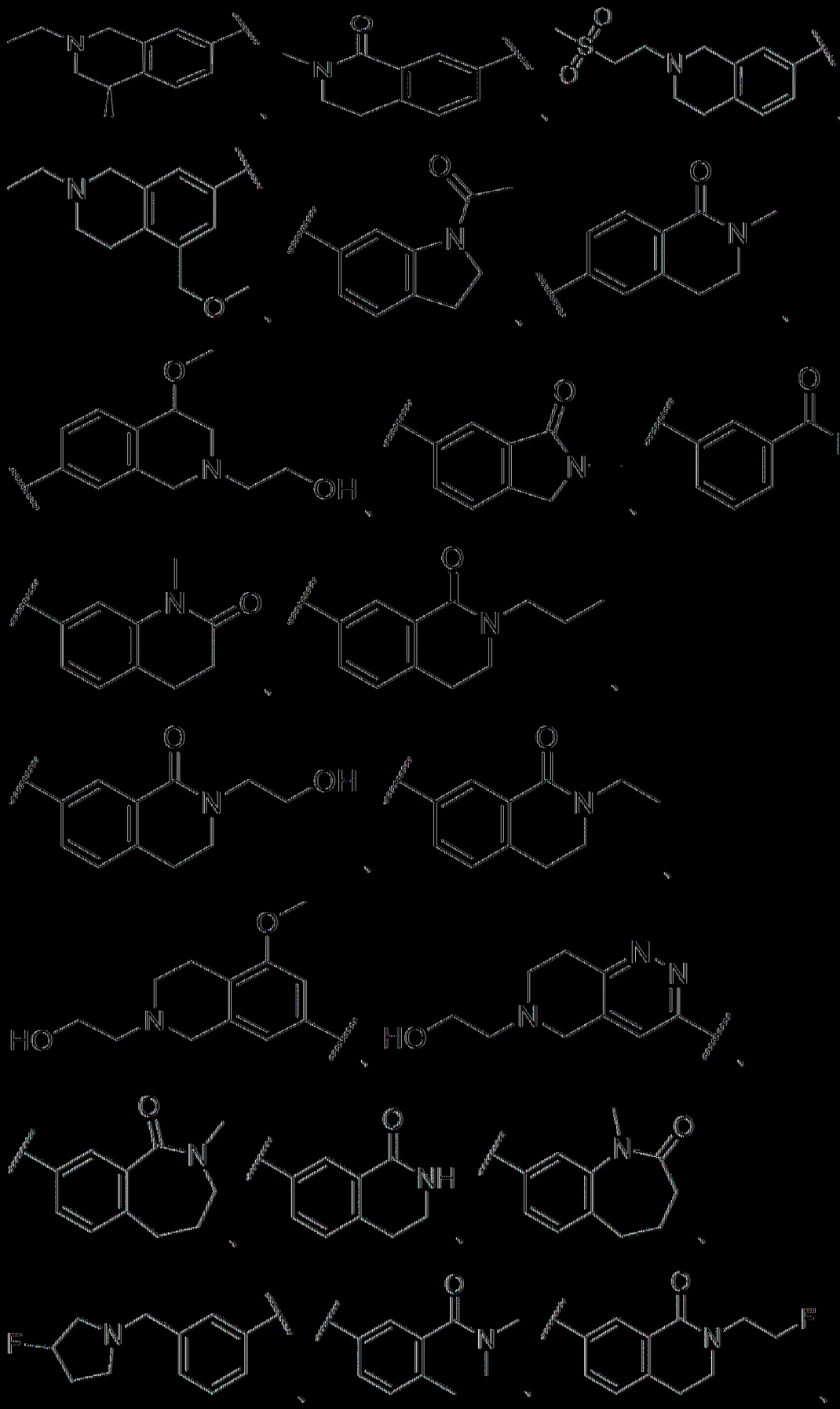
基、  、、  、  及  。

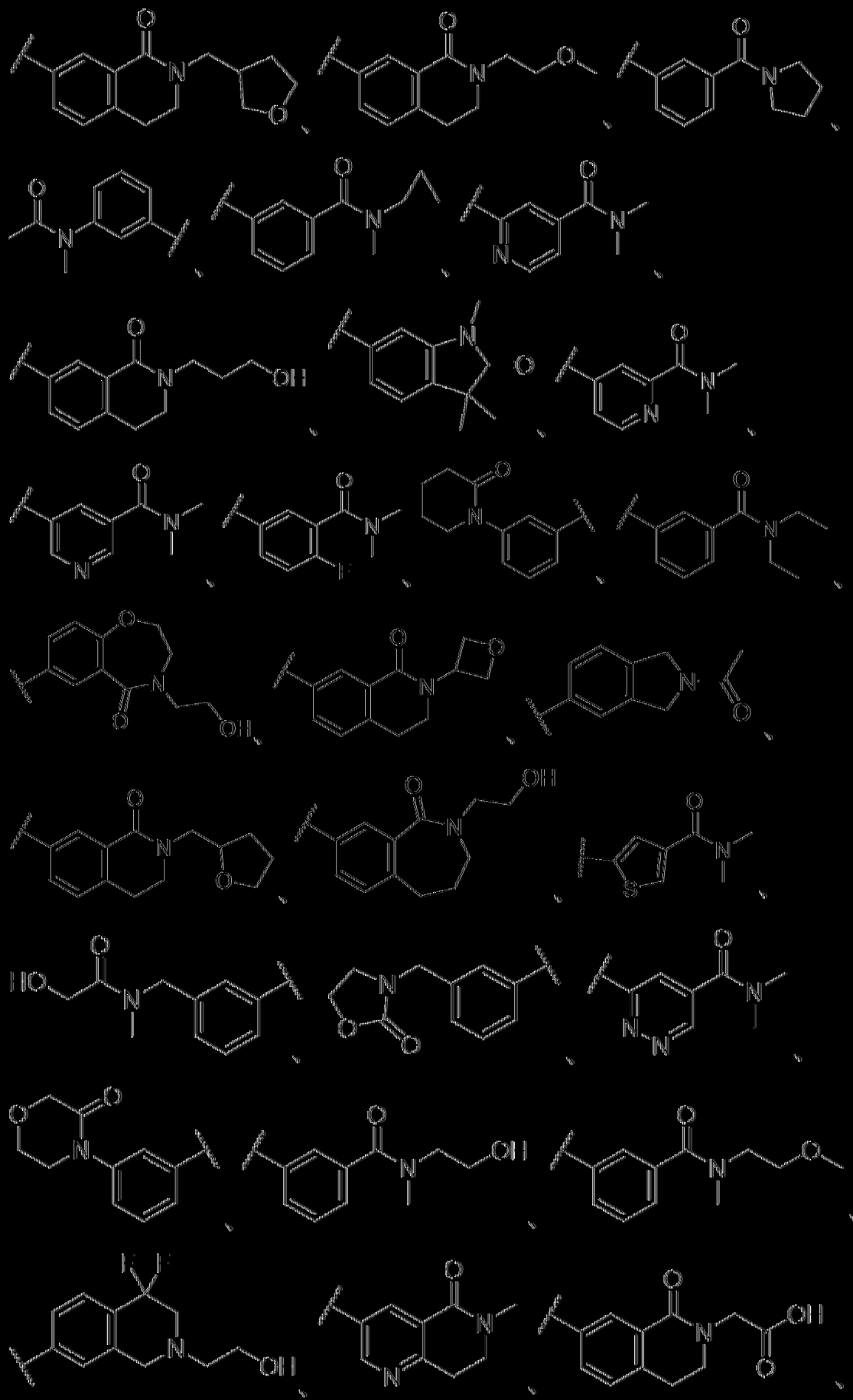
290. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1選自：

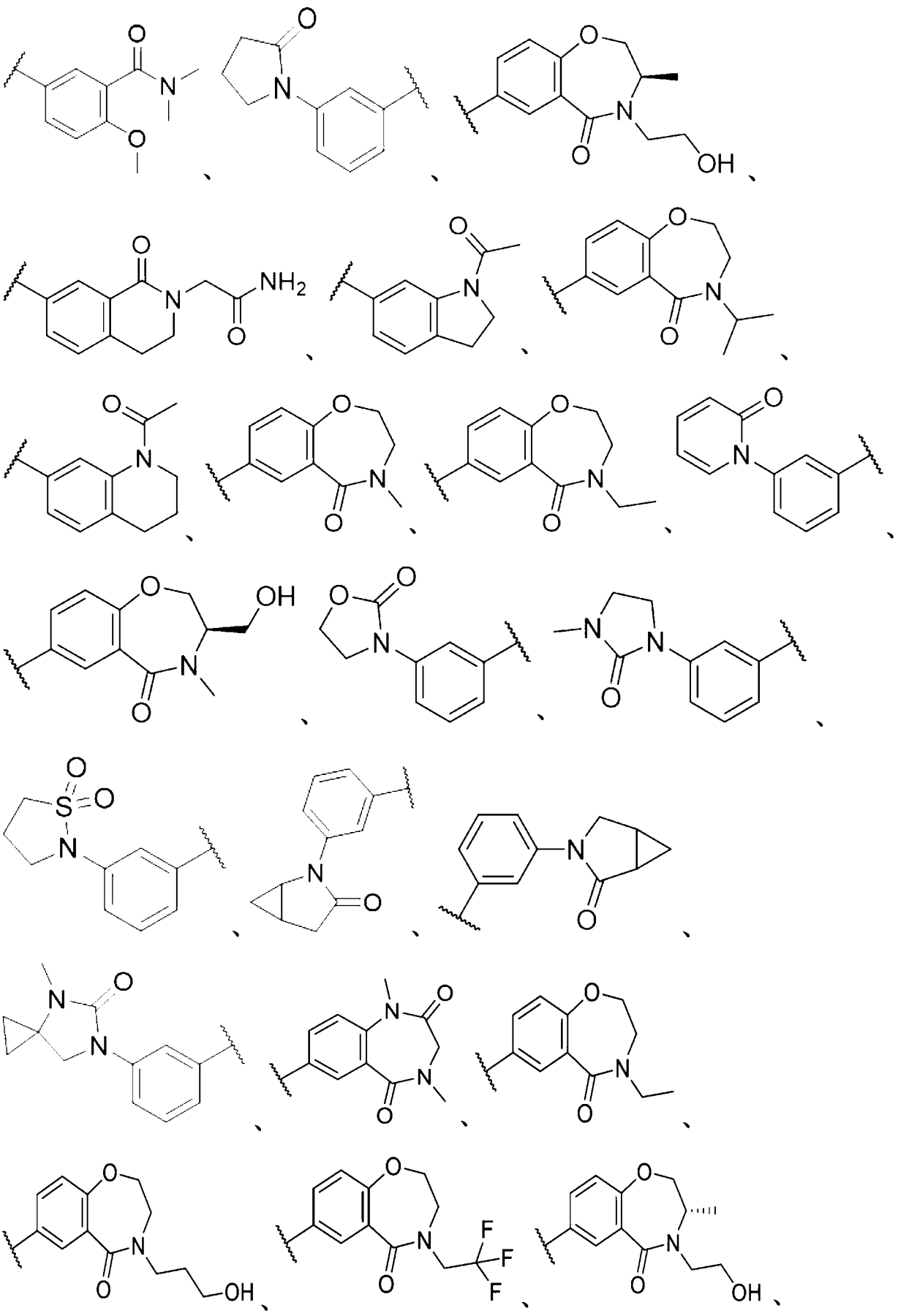


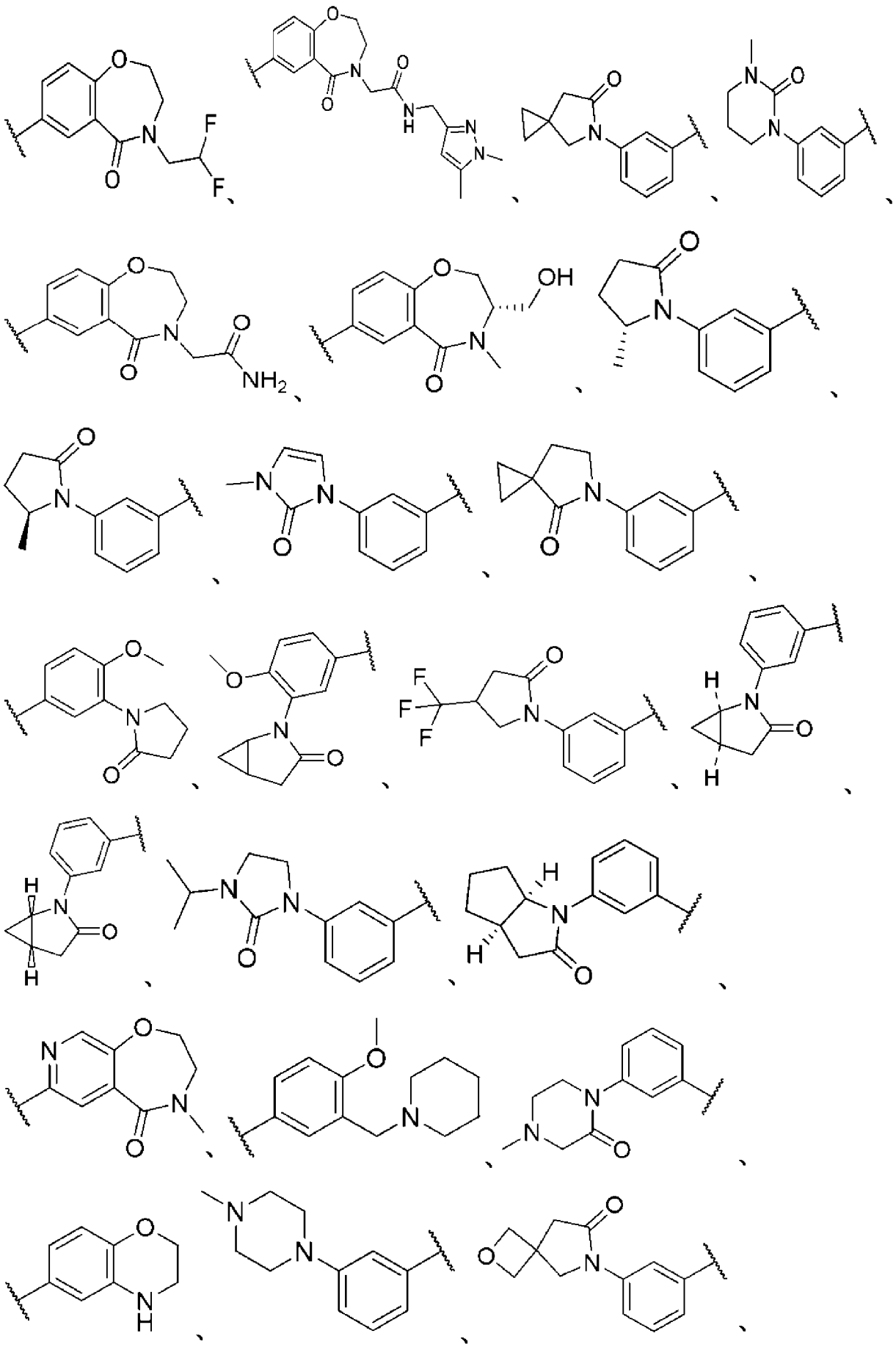


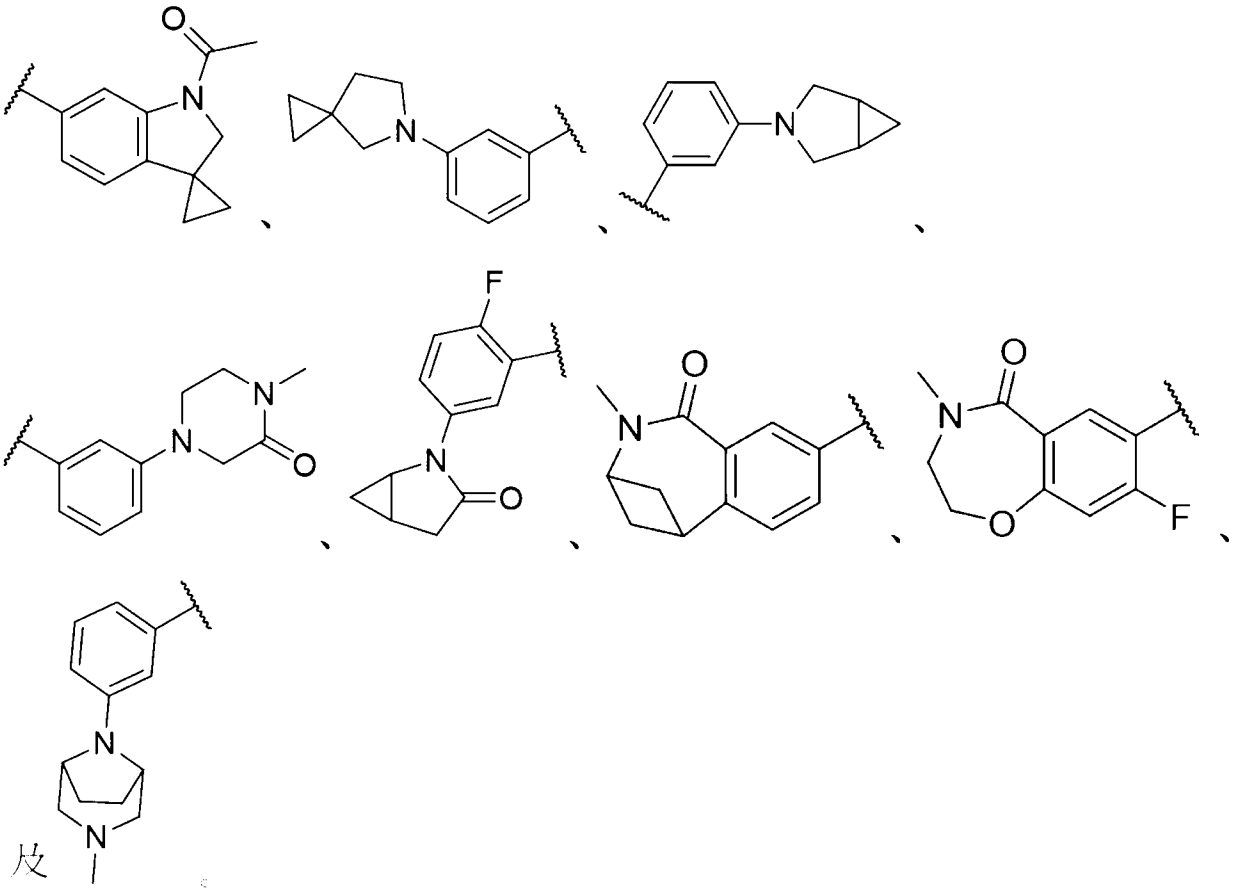




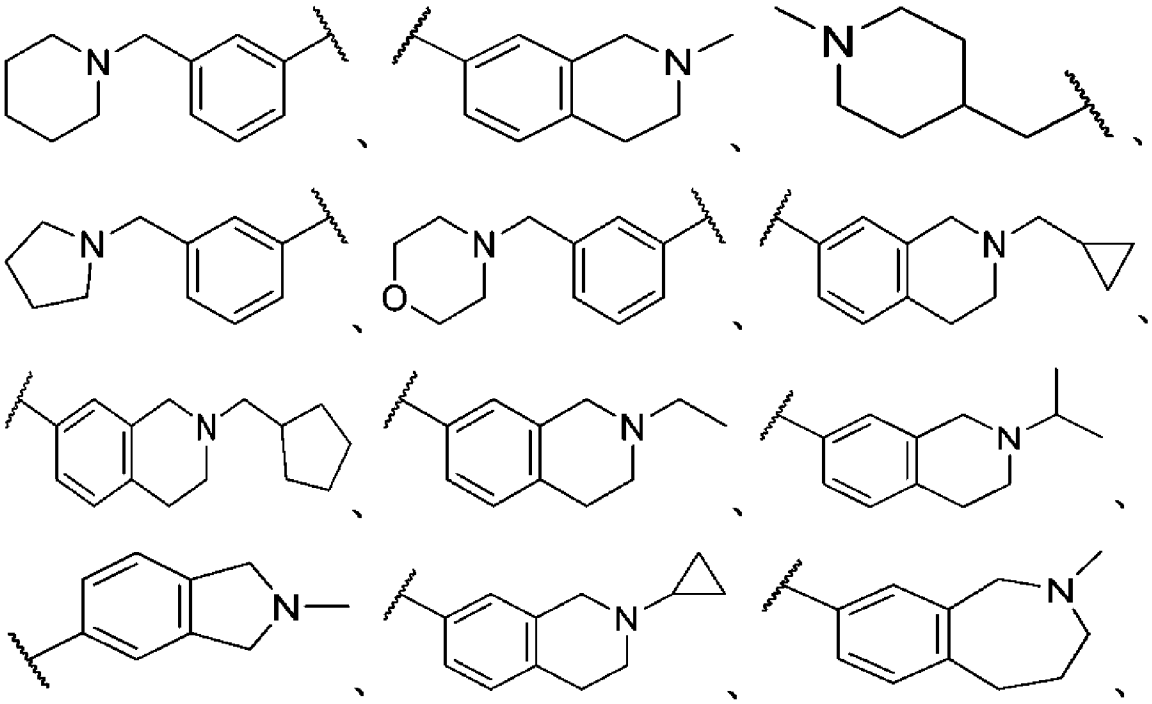


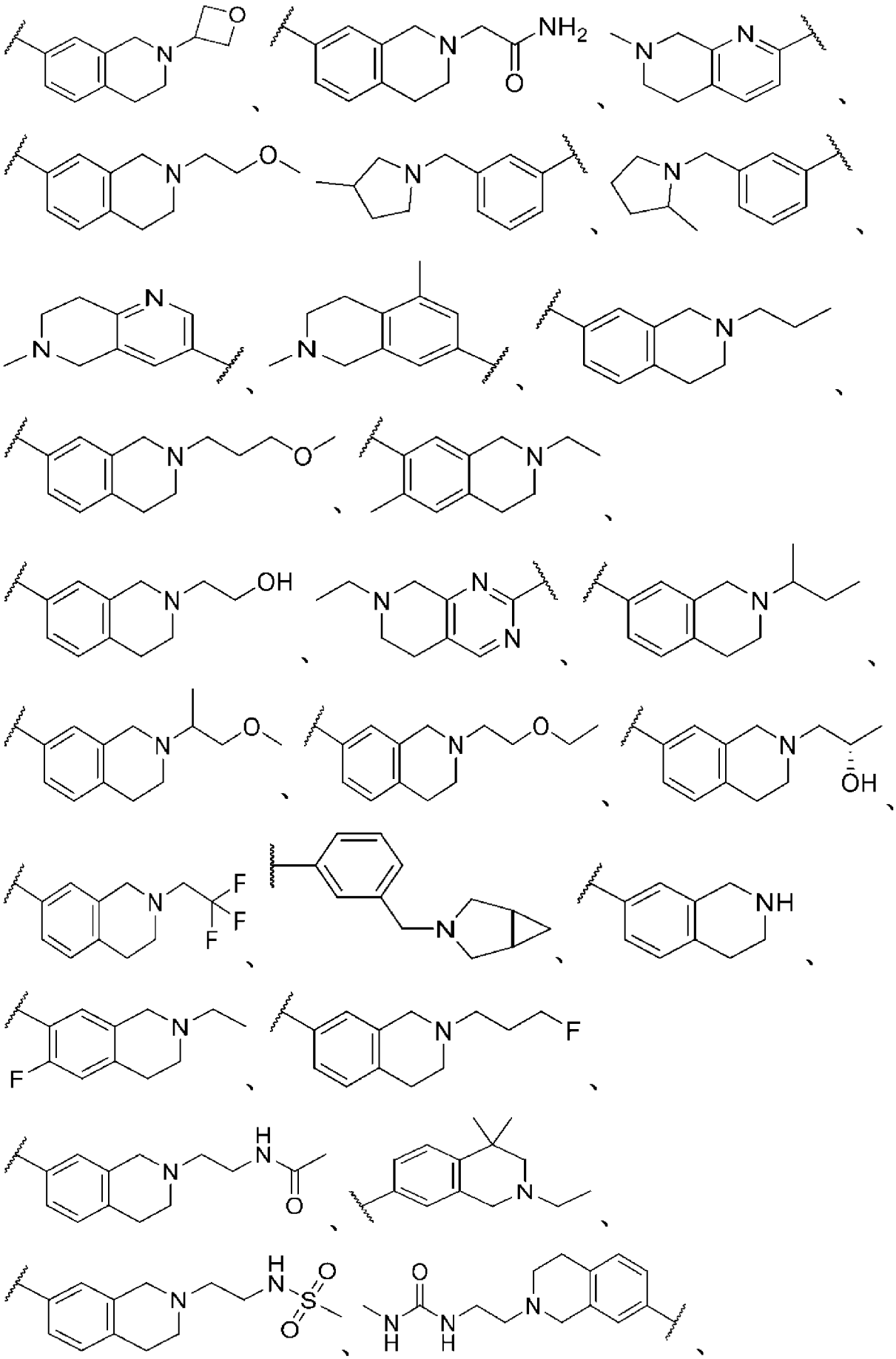


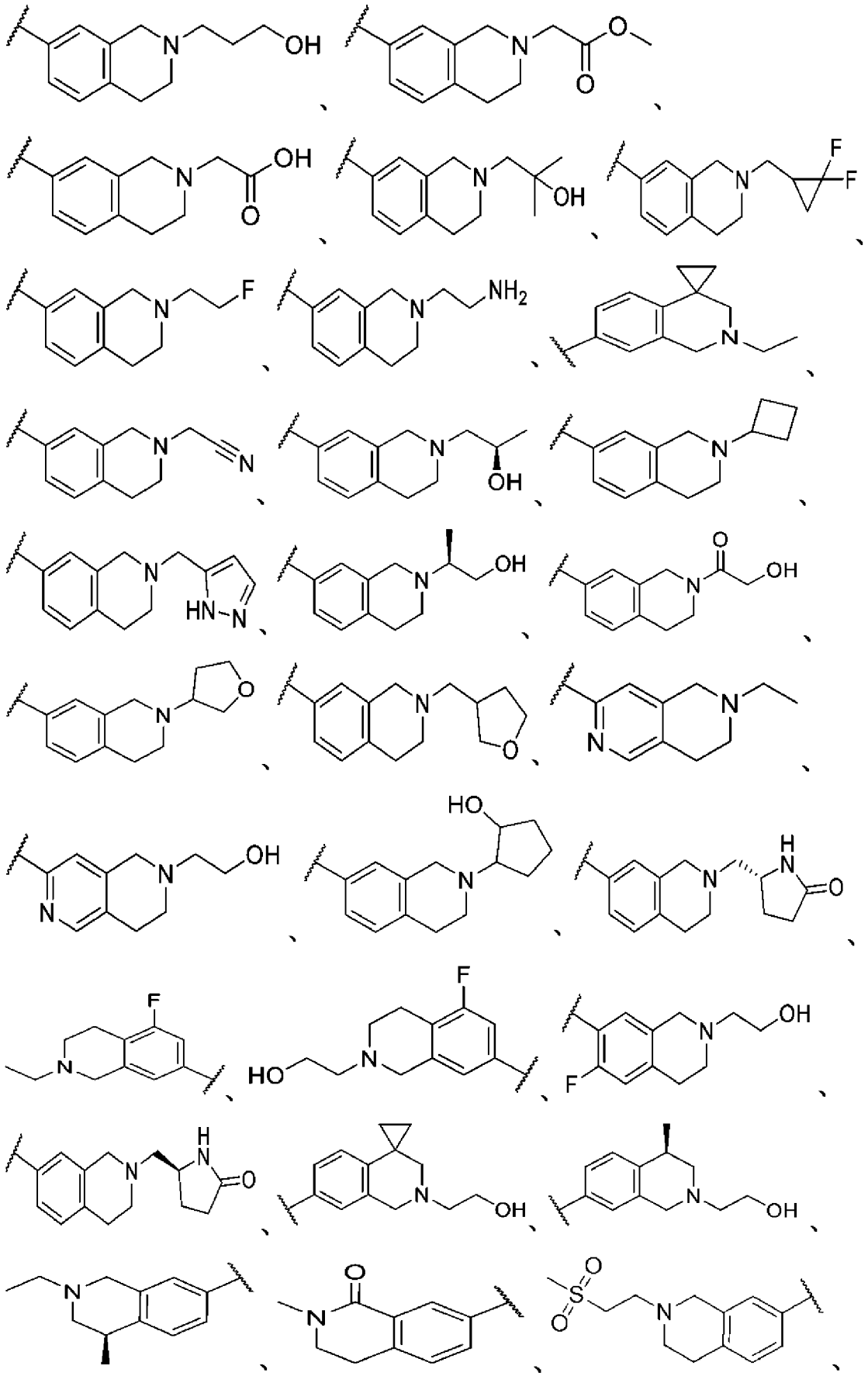


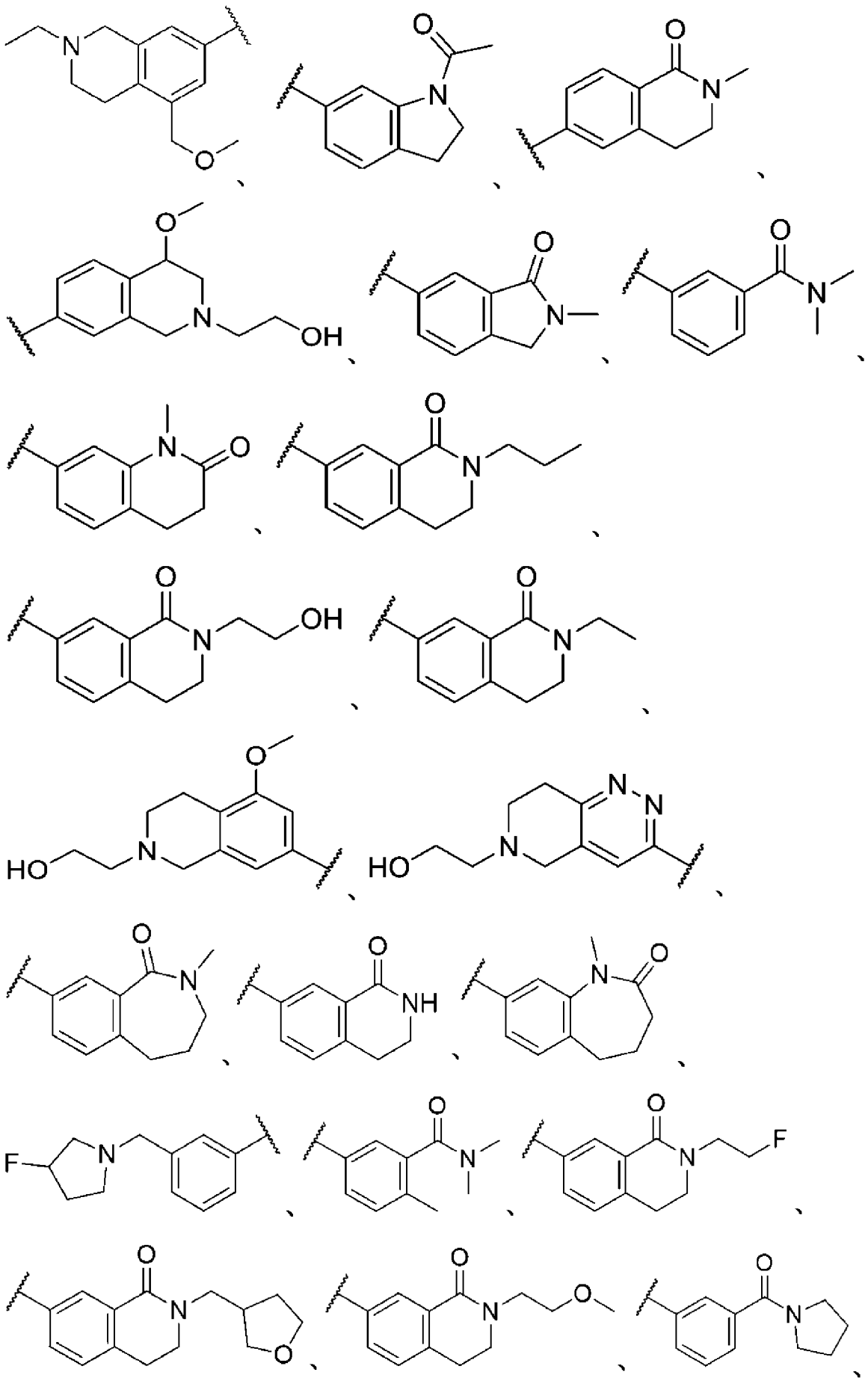


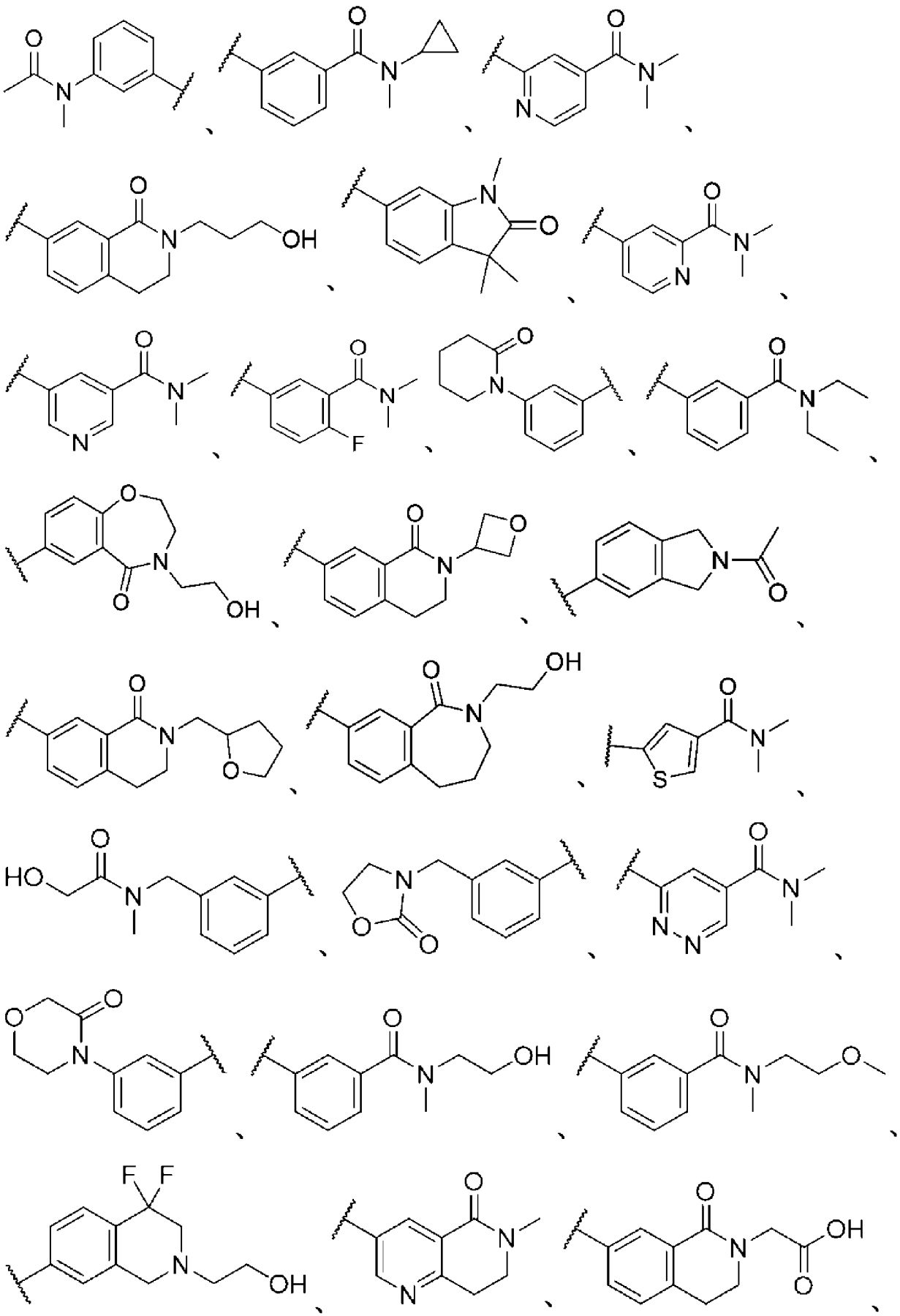
291. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1選自：

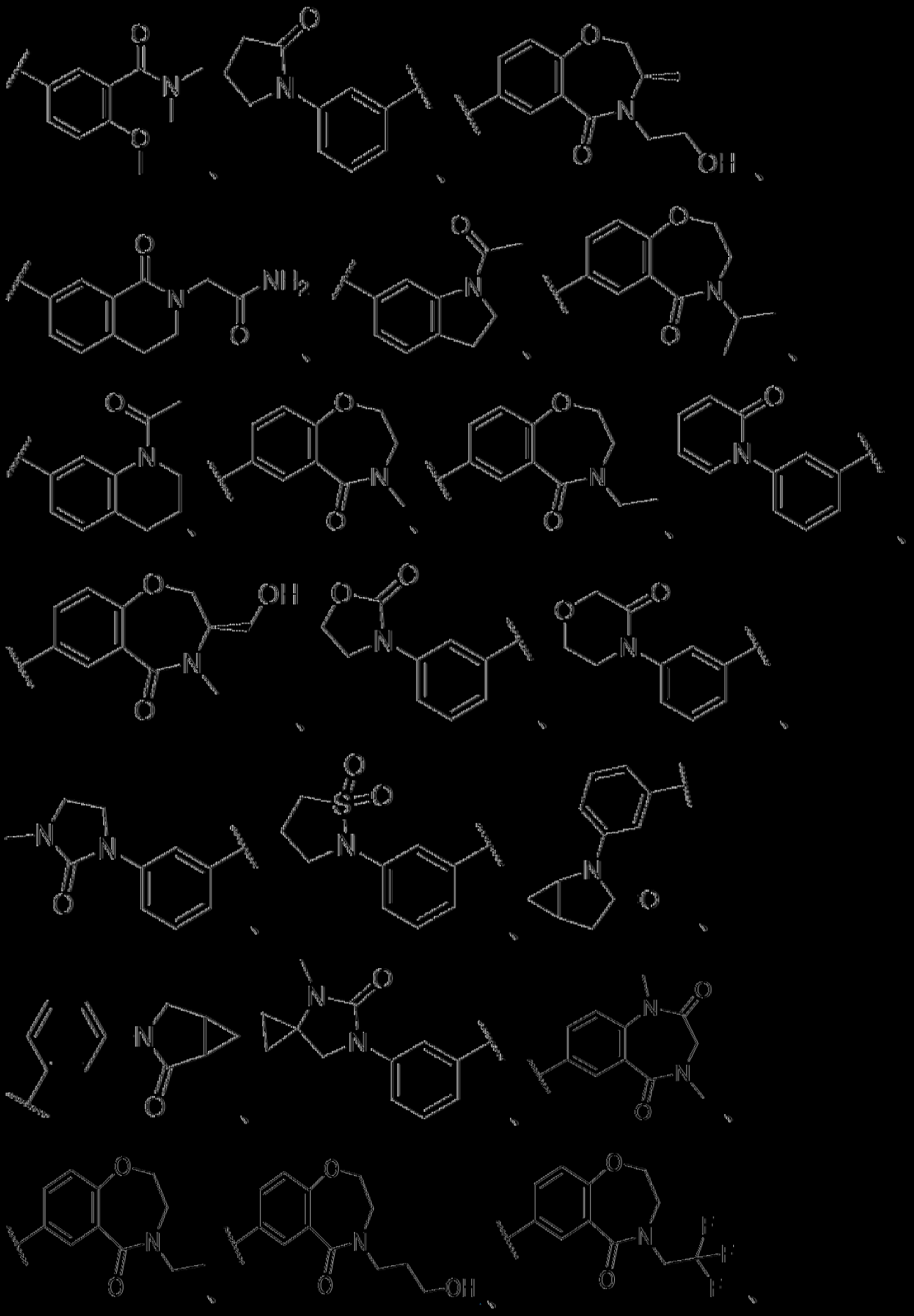


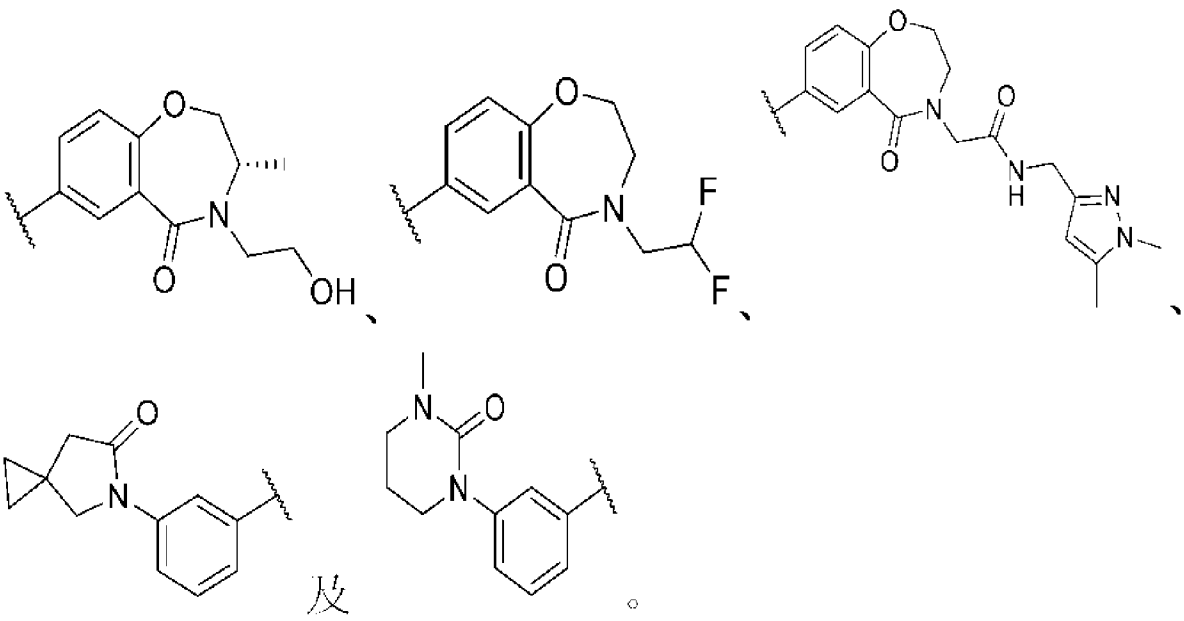




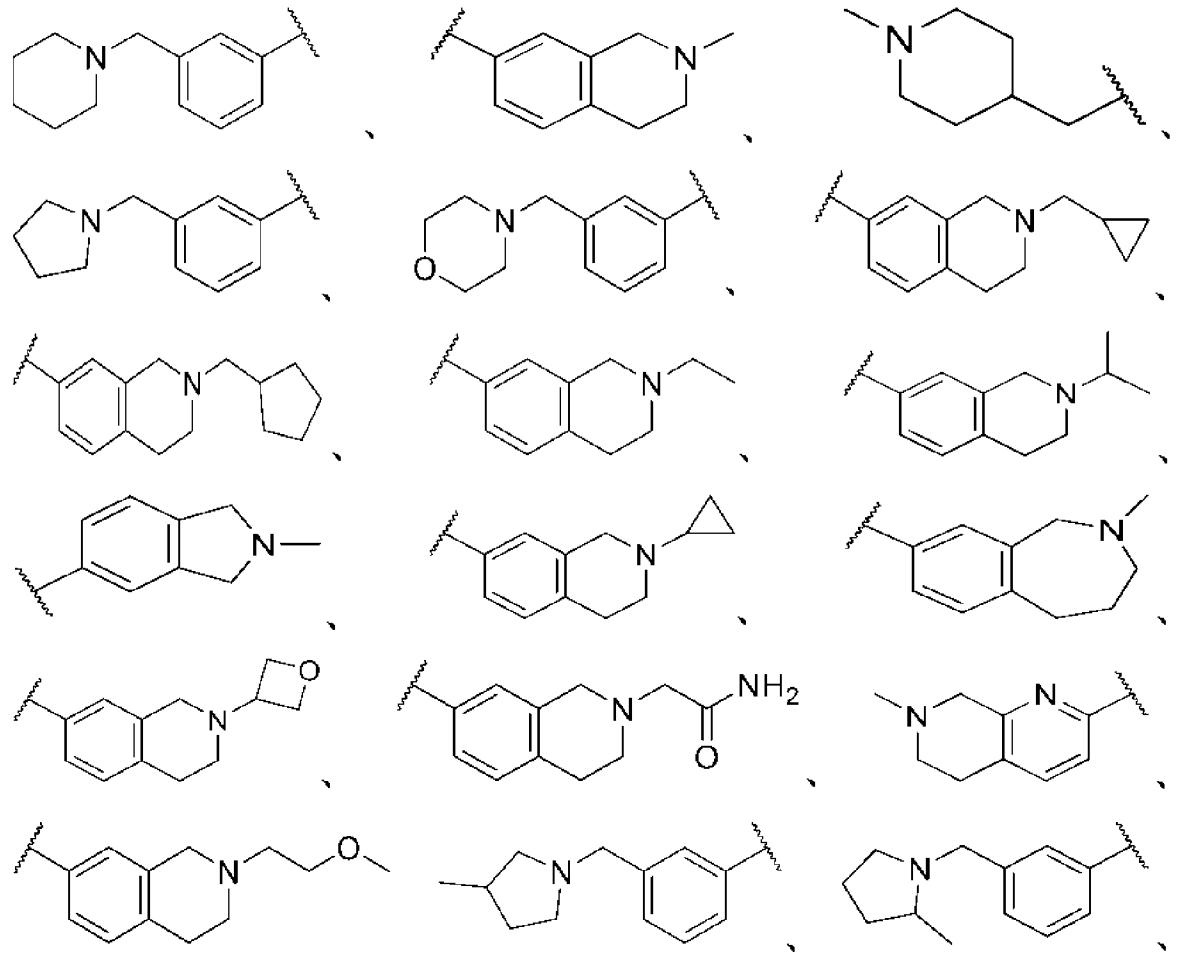


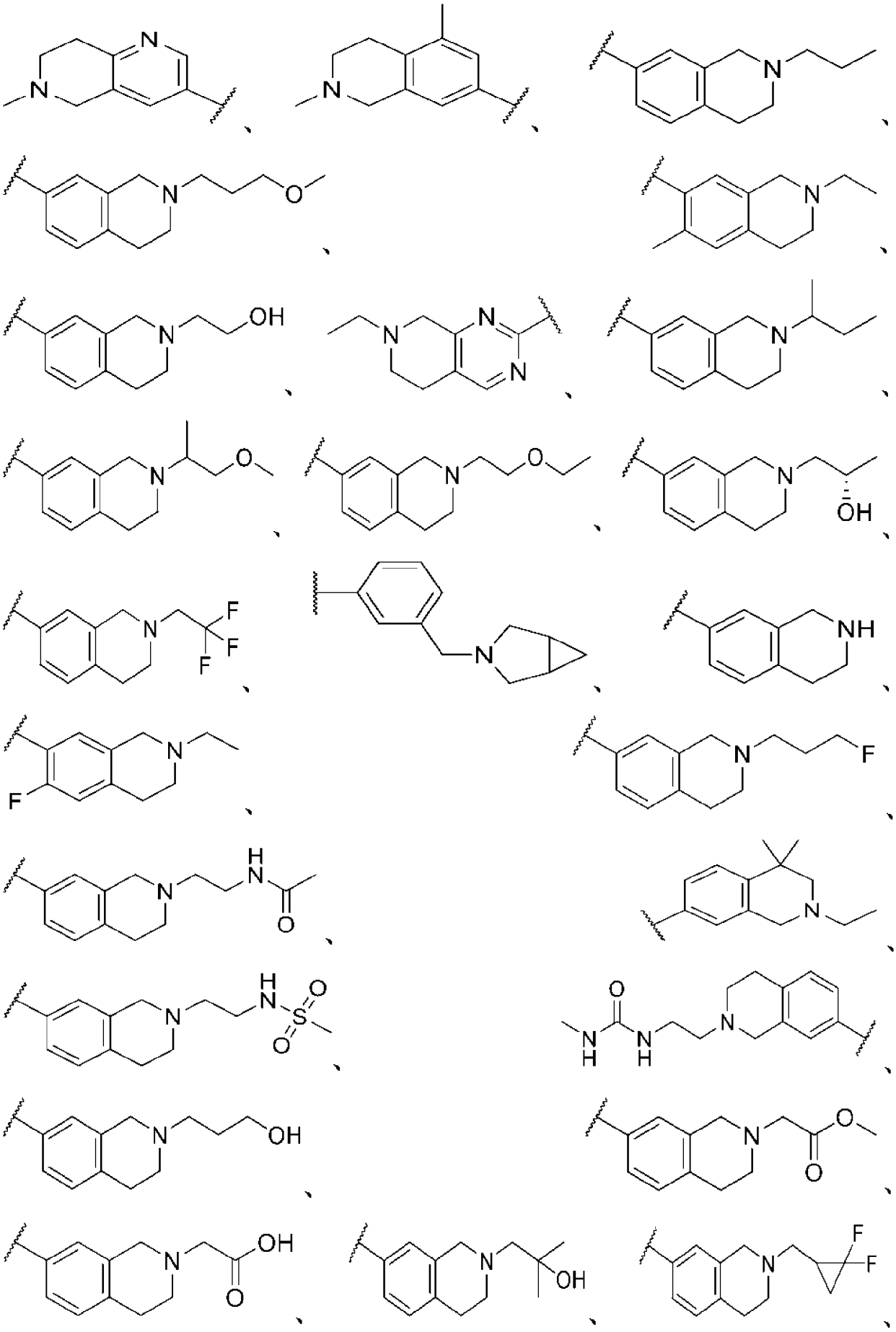


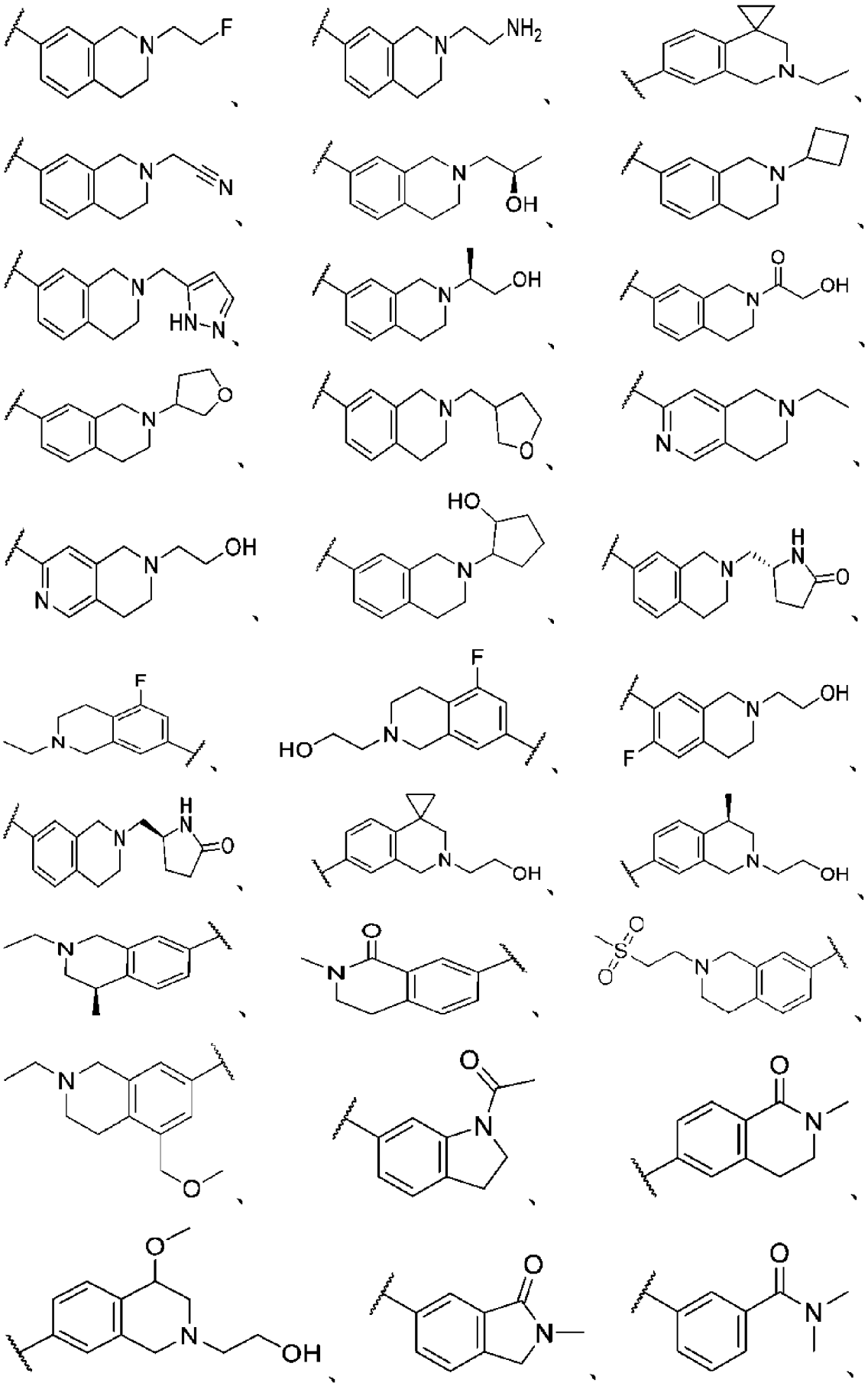


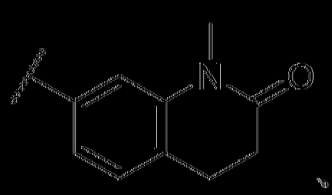


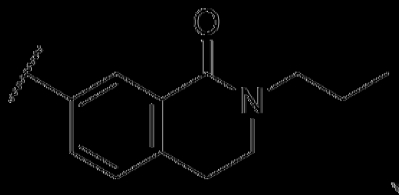
292. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1選自：

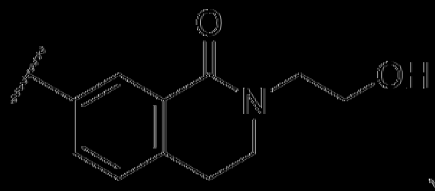


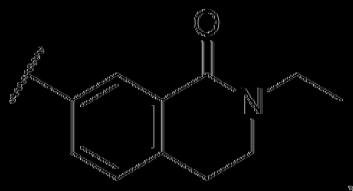


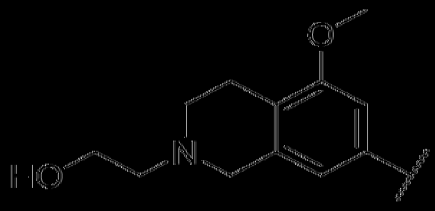


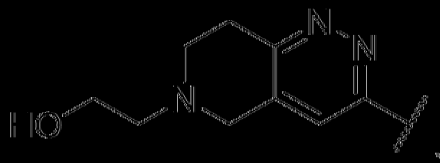


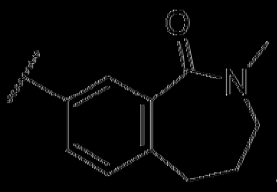


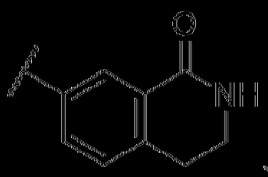


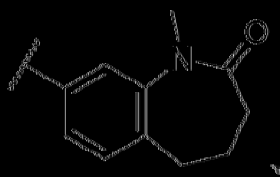




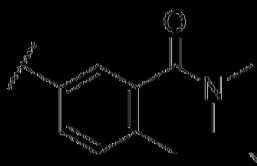


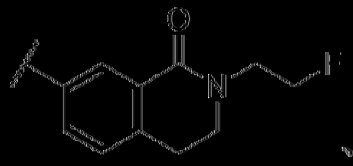


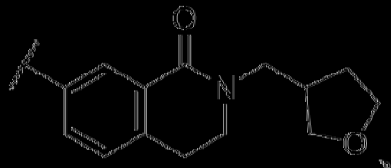


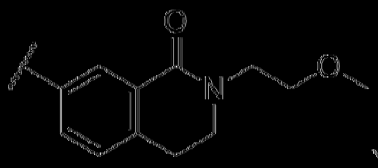


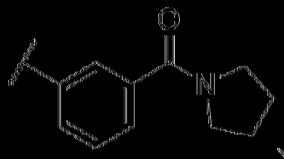


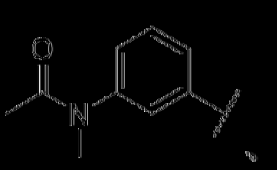


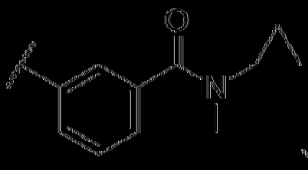


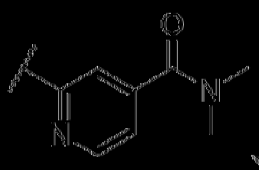


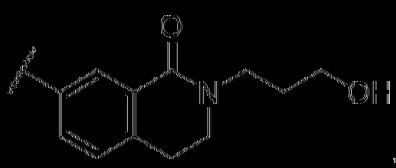


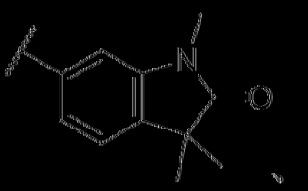




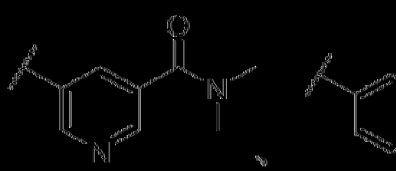


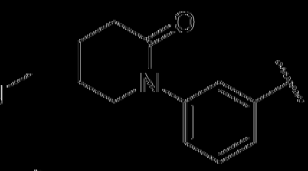


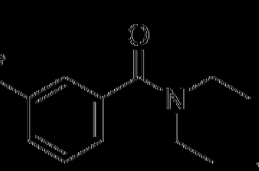


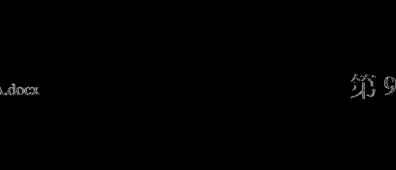






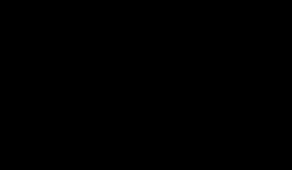


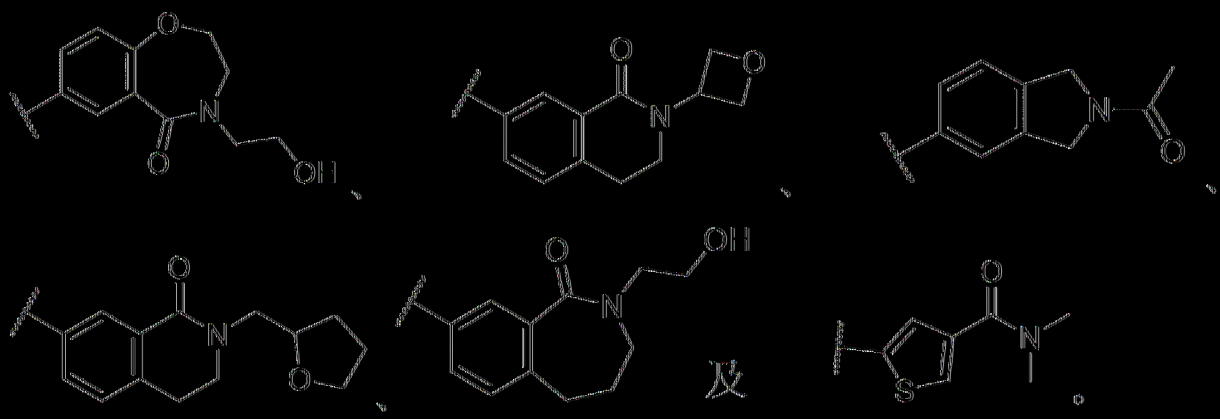




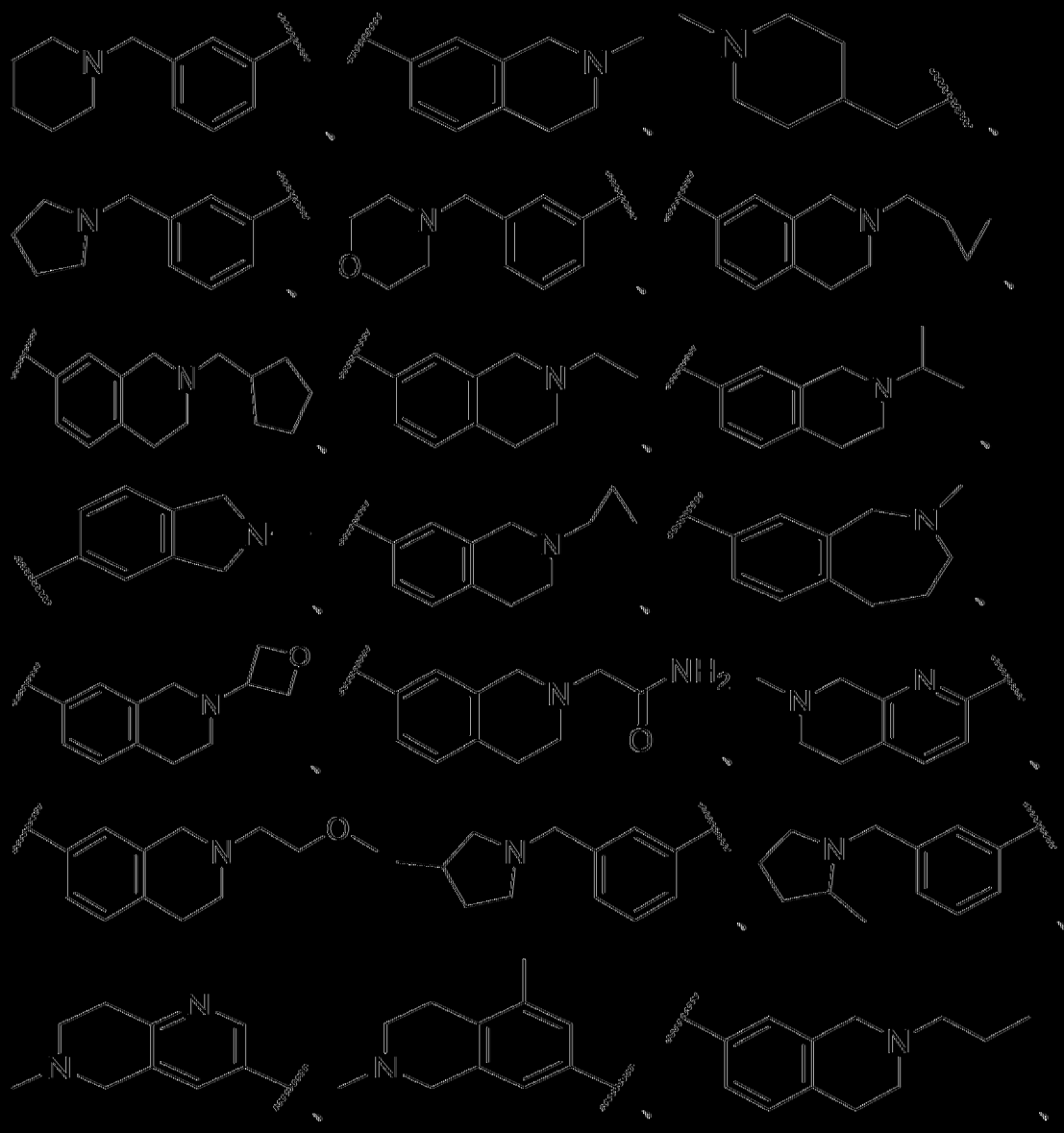


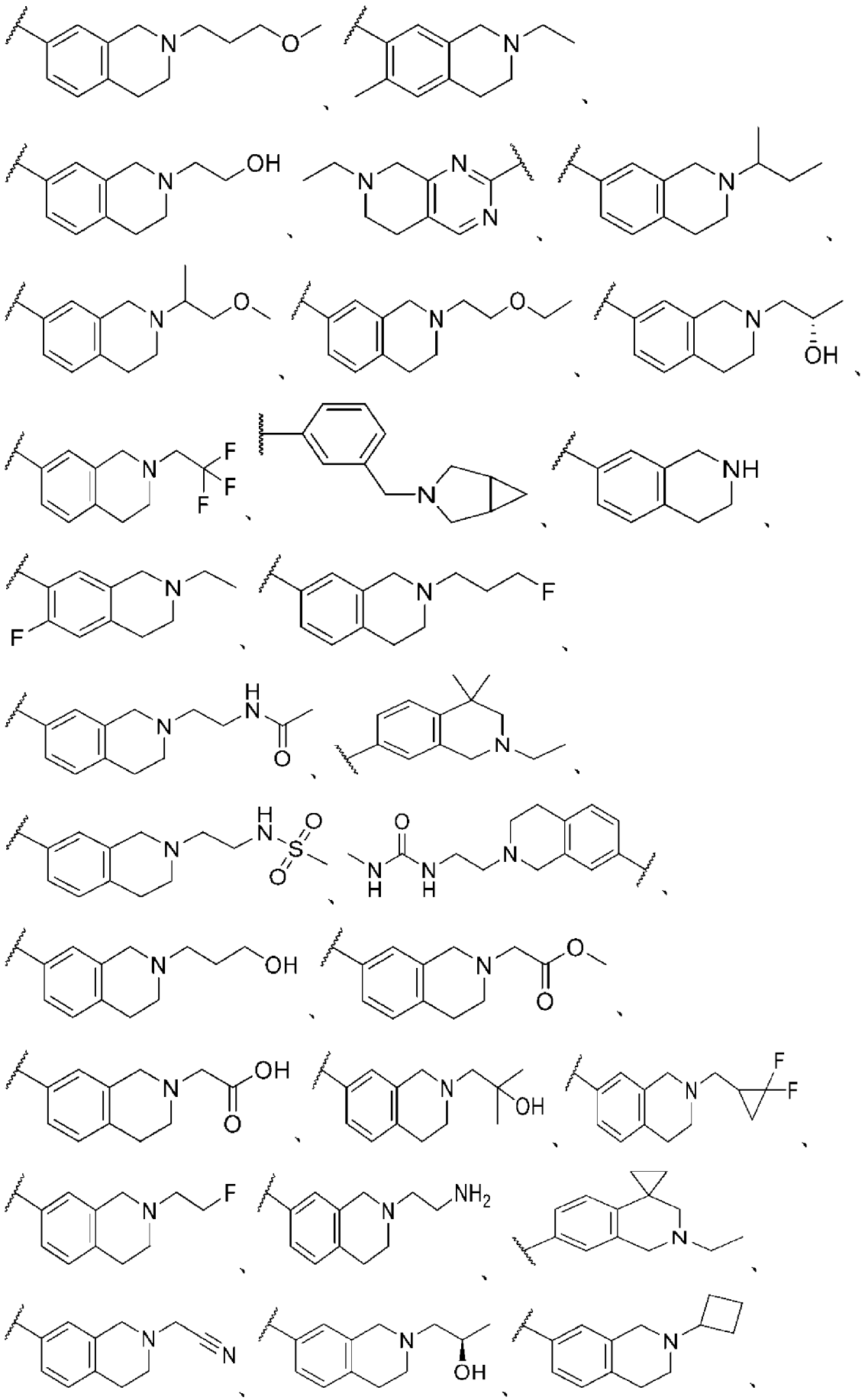


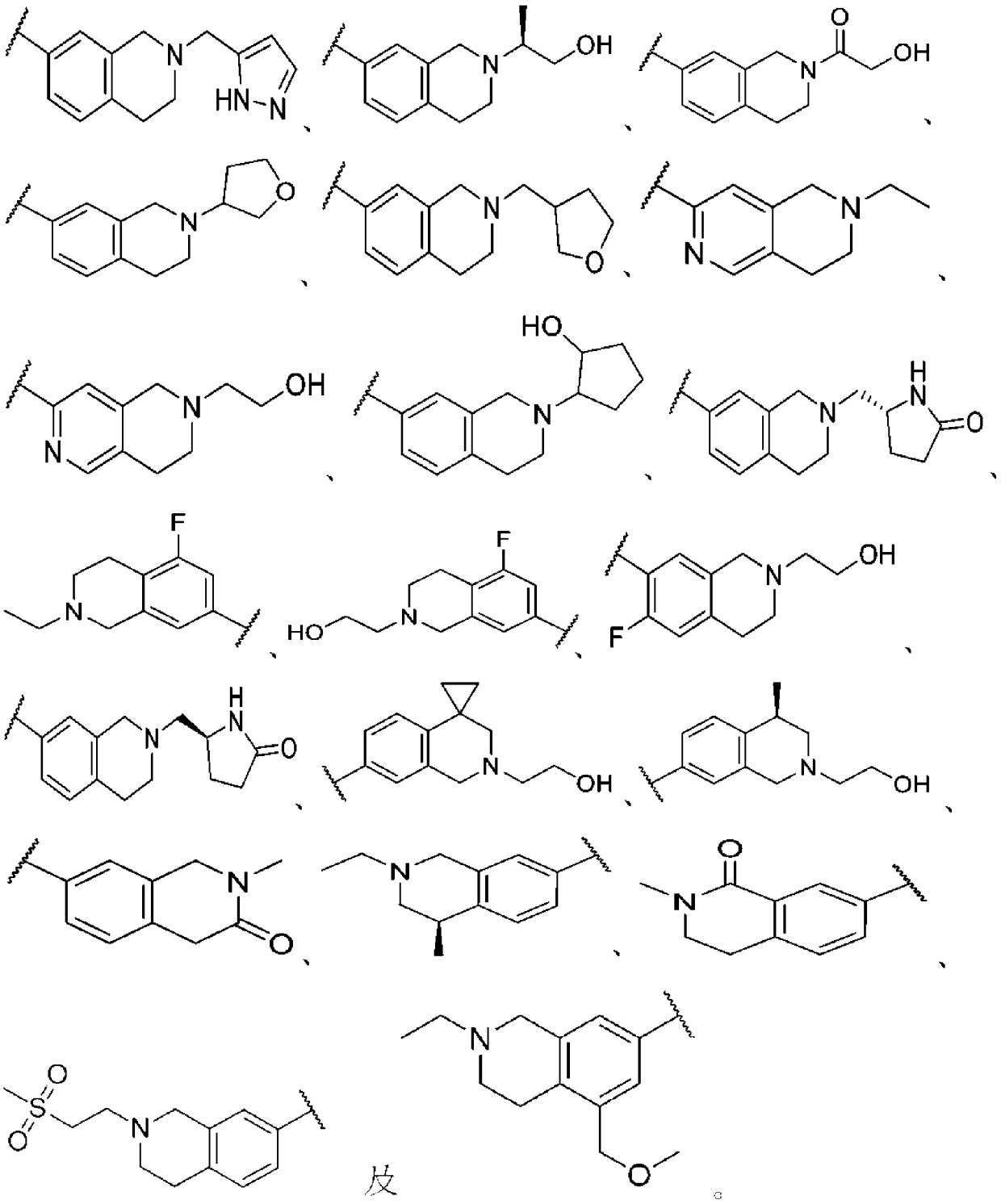




293. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、代謝類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1選自：

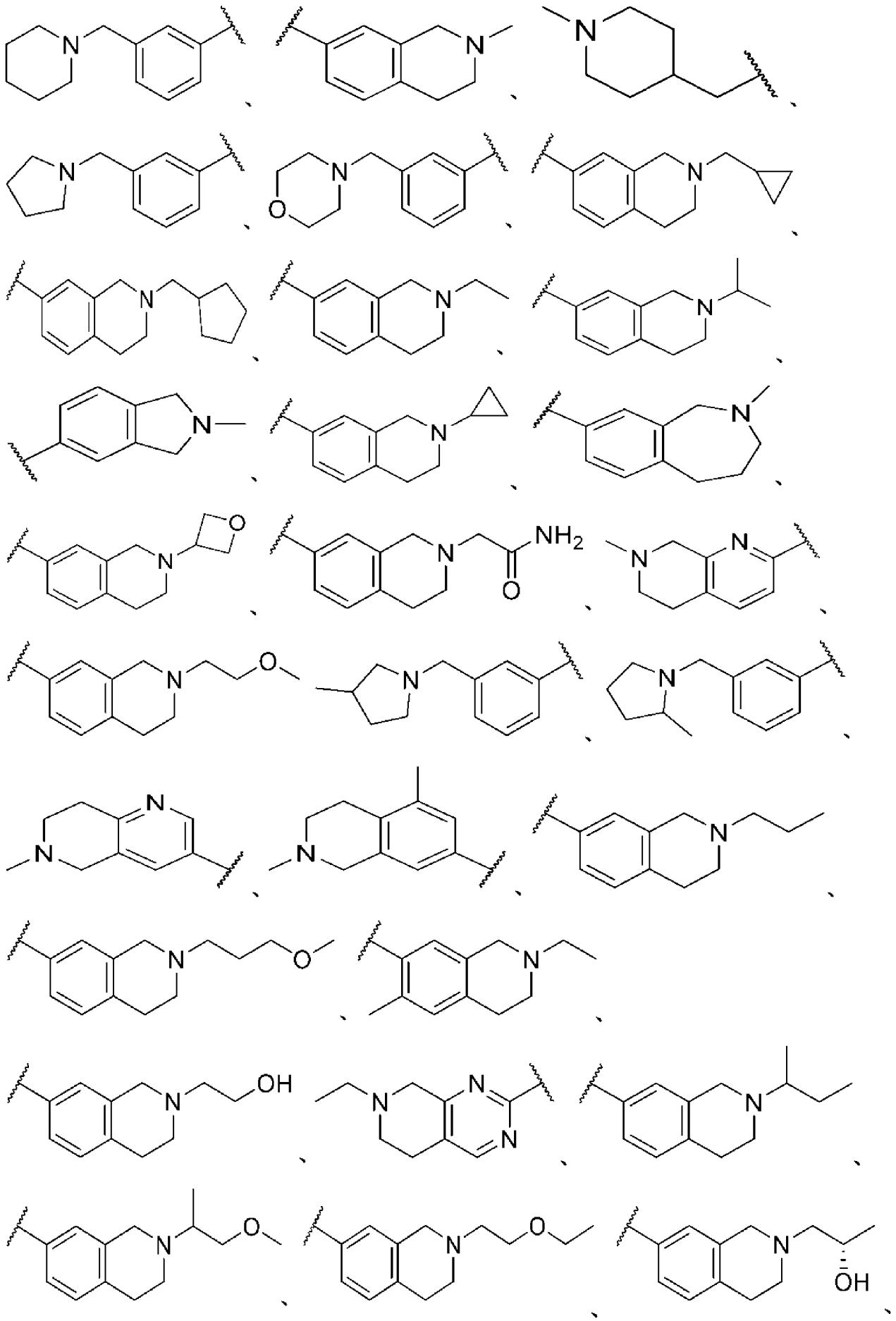


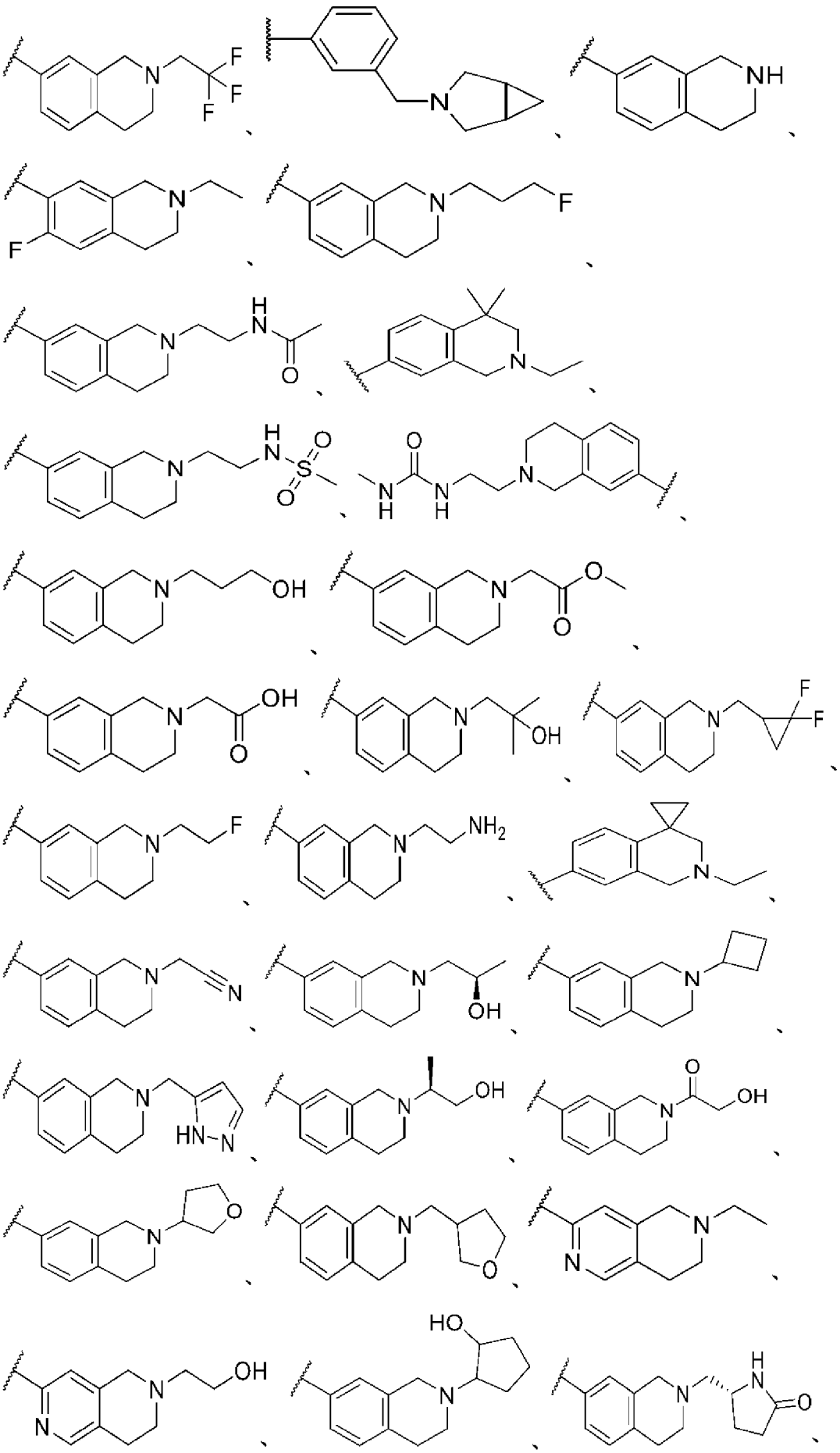


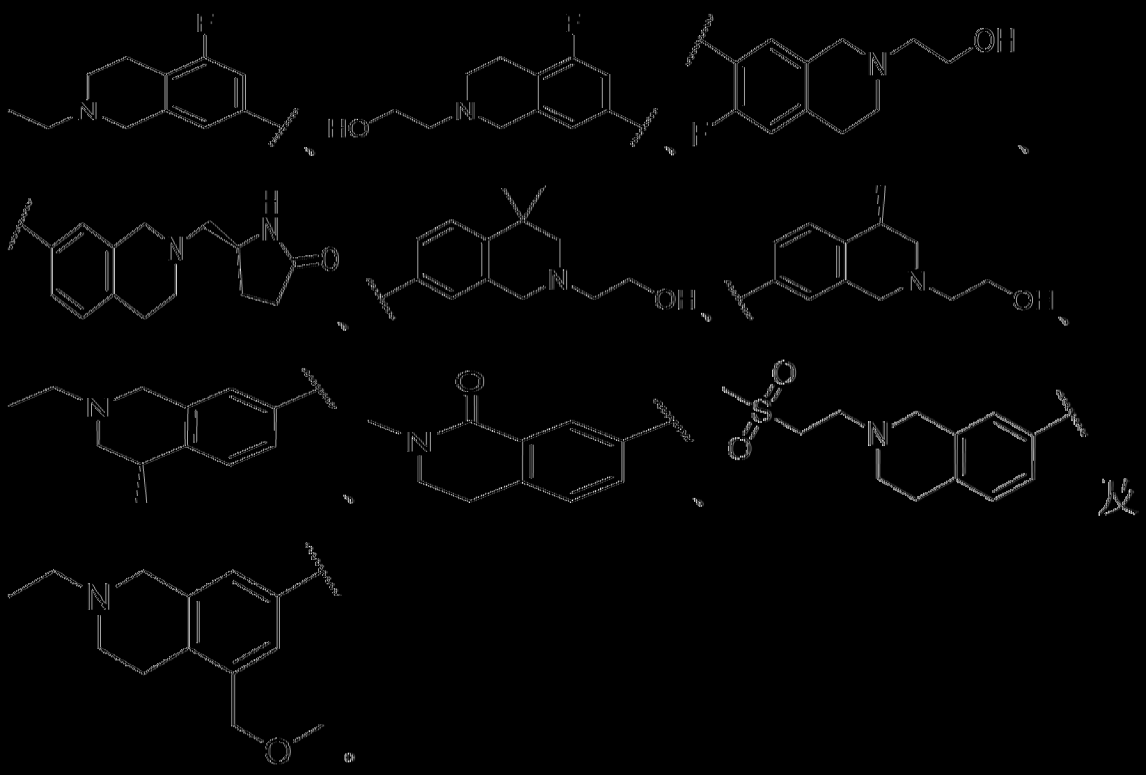


及

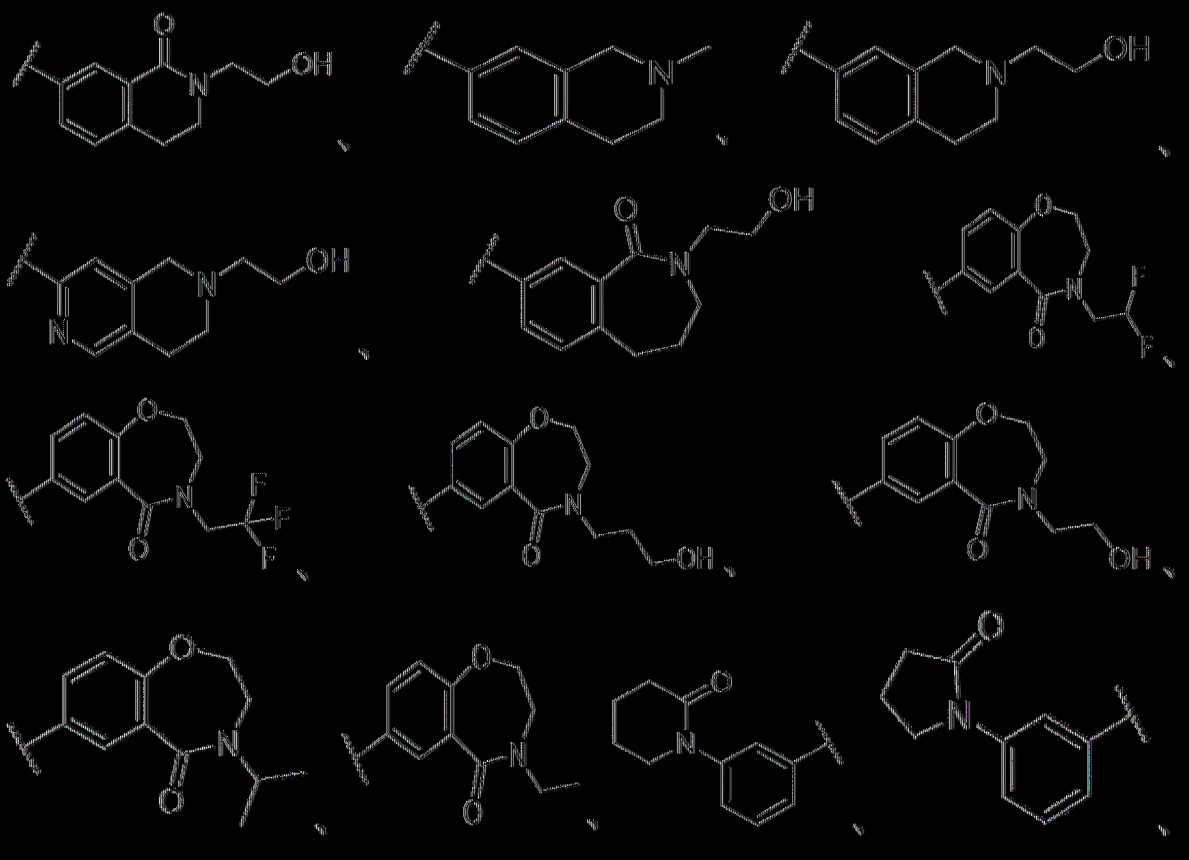
294. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1選自：

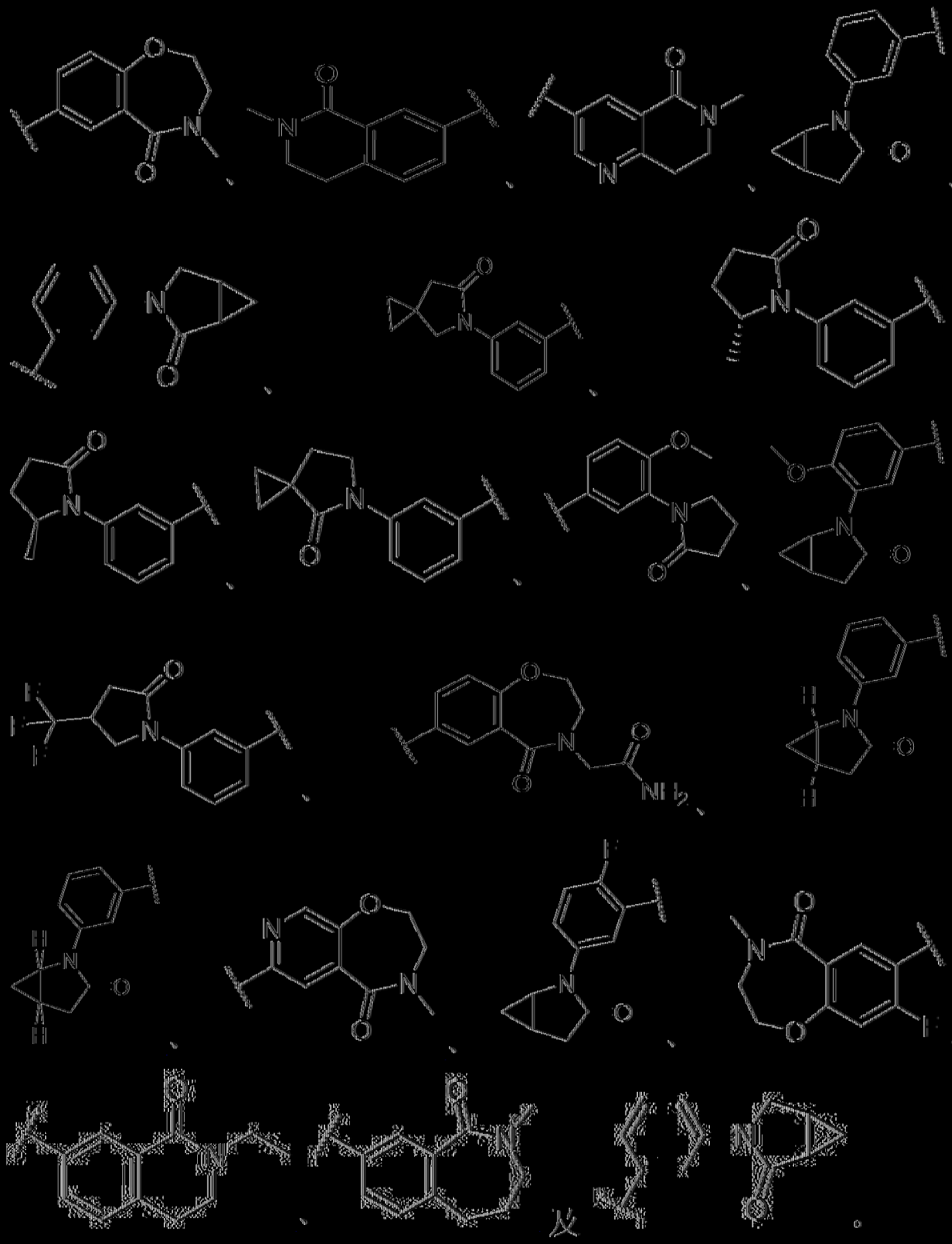




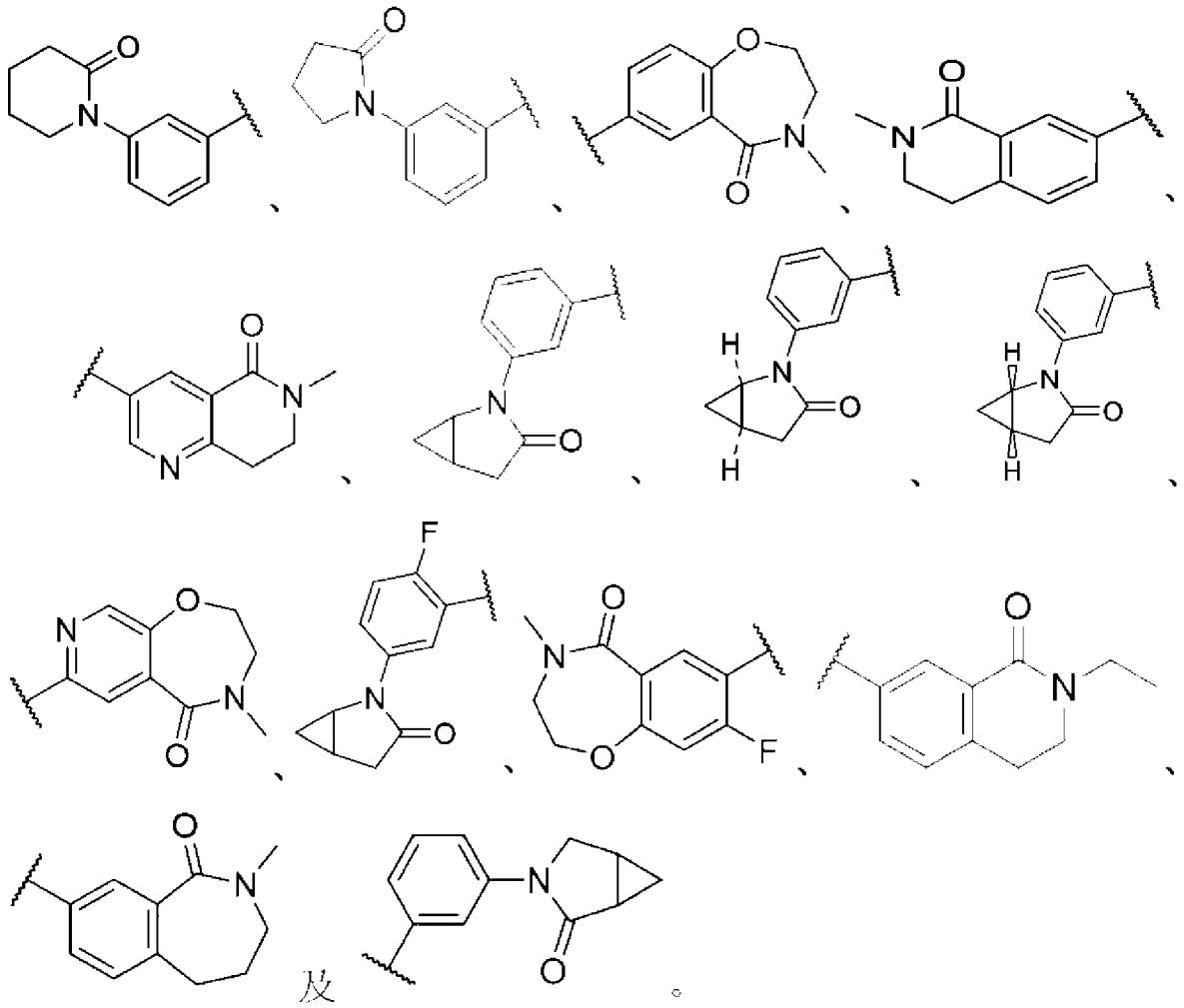


295. 根據編號實施例1至290中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、代謝類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R1選自：

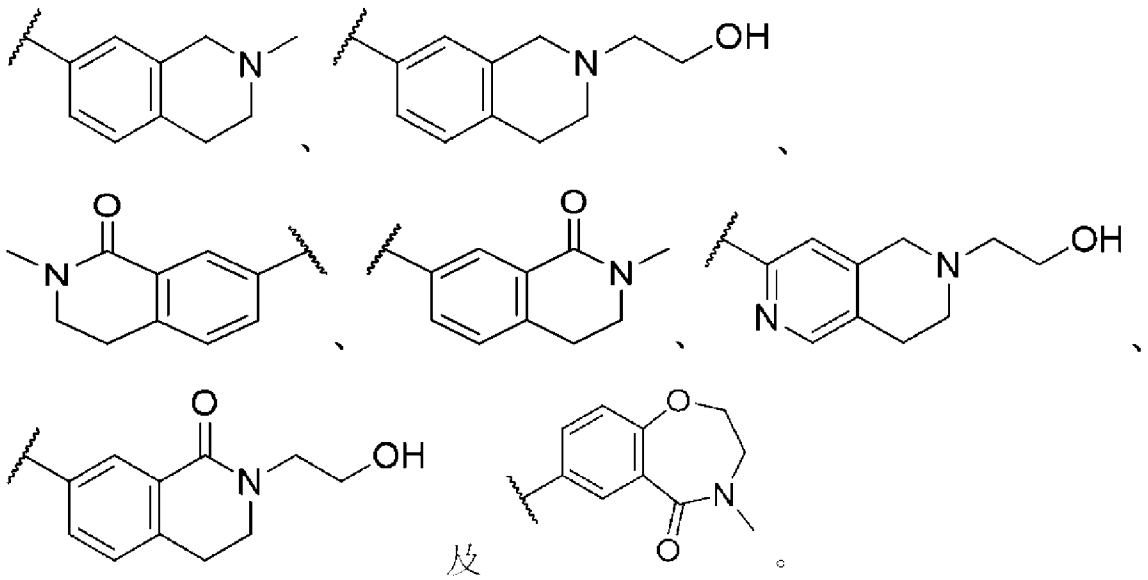


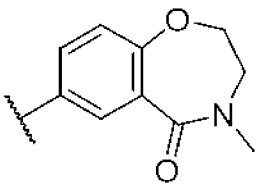
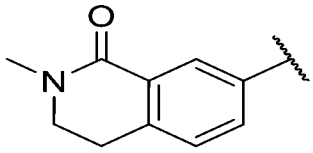


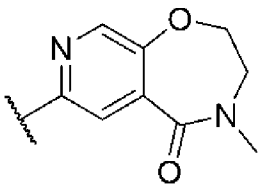
296. 根據編號實施例1至290中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R1選自：

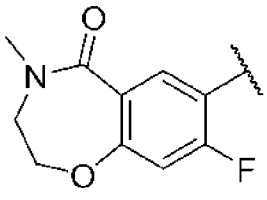


297. 根據編號實施例1至290中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1選自



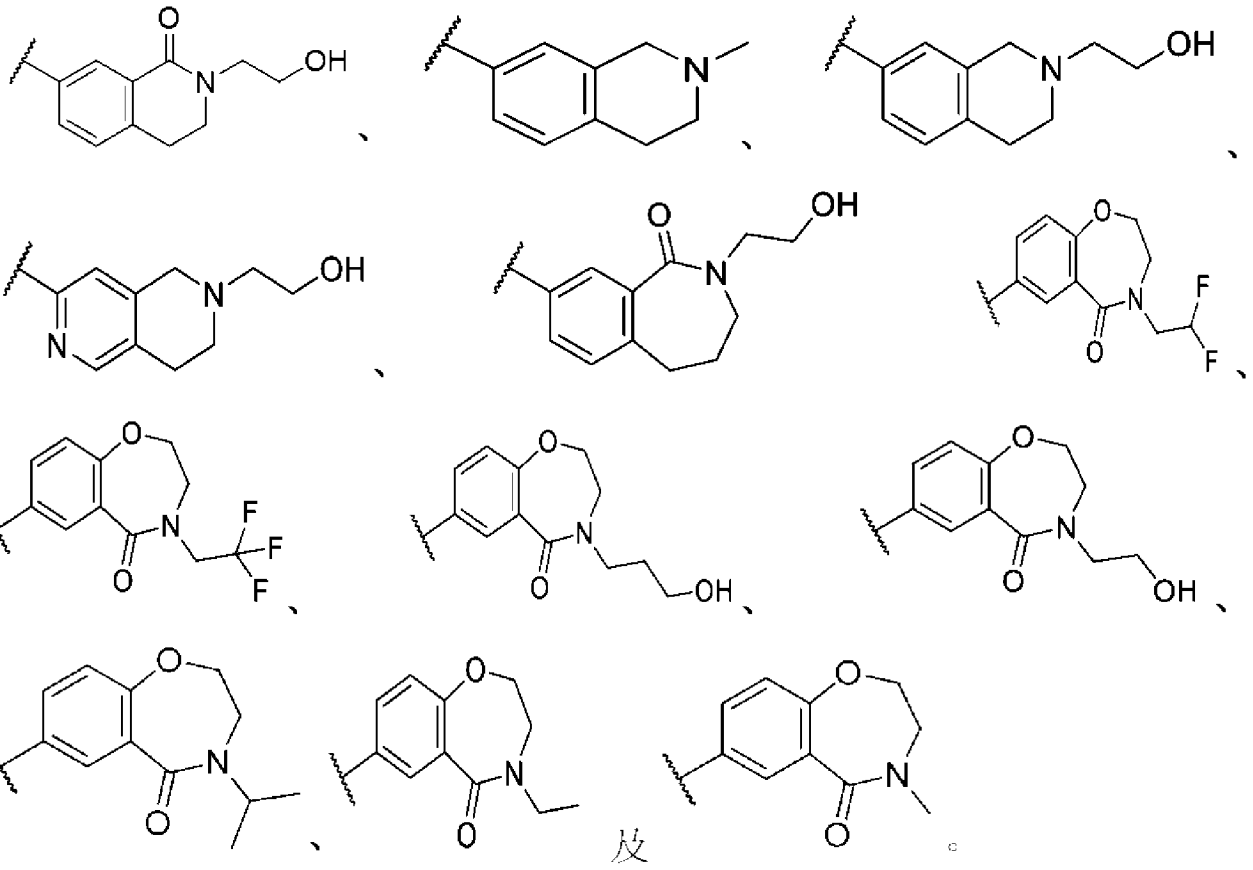
298. 根據編號實施例1至290中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1選自  及  。

299. 根據編號實施例1至290中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1為  。

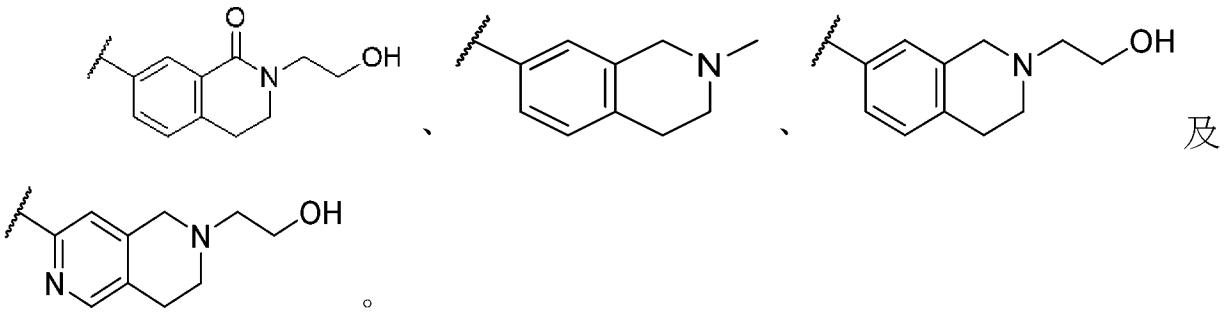
300. 根據編號實施例1至199中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1為  。

301. 根據編號實施例1至291中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化

化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1選自：

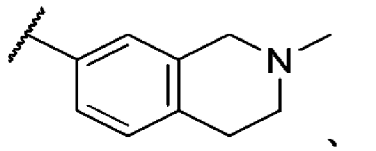
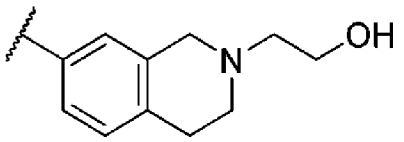
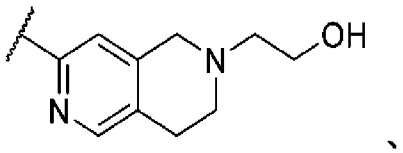
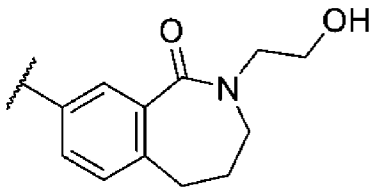
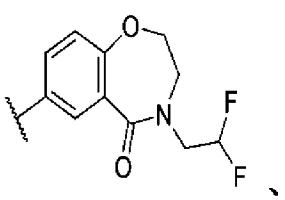
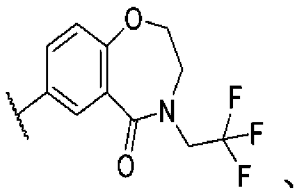
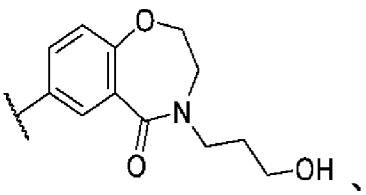
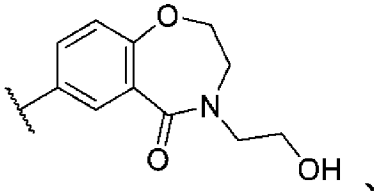
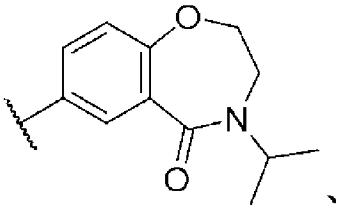
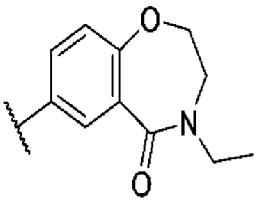
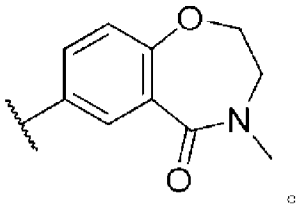


302. 根據編號實施例1至292中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1選自：

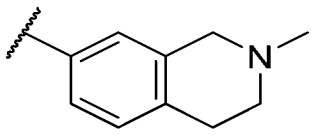
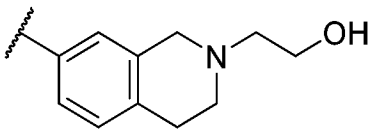
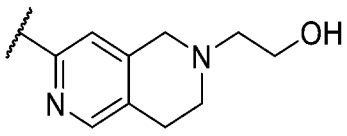


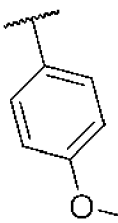
303. 根據編號實施例1至291中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘

化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1選自：


、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

及
。

304. 根據編號實施例1至292中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1選自：


、

及

。

305. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3不為

。

306. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3選自經取代之苯基、經取代之吡啶基及經取代之噻吩。

307. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3為經取代之苯基或經取代之吡啶基。

308. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3為經取代之苯基。

309. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當R_3僅經一個取代基取代時，R_3不經4-甲氧基取代。

310. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當R_3為經取代之6員環時，R_3在與B_6連接之*對*位處不經甲氧基取代。

311. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3不經4-甲氧基取代。

312. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當R_3為經取代之6員環時，R_3在與B_6連接之*對*位處不經烷氧基取代。

313. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3不經4-烷氧基取代。

314. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當R_3經三個取代基取代時，至少一個取代基為鹵基。

315. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當R_3經三個取代基取代時，至少一個取代基為F或Cl。

316. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)及CN之取代基取代。

317. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化

化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)及CN之取代基取代。

318. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)及CN之取代基取代。

319. 根據編號實施例1-315中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基[c]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)及CN之取代基取代，其中小烷基[c]為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基[c]可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、OMe、OEt、CN、CF_3、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代。

320. 根據編號實施例1-315中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基[a]、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)及CN之取代基取代，其中小烷基[a]為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基[a]可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代。

321. 根據編號實施例1-315中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中R_3不經任何甲氧基(-OCH_3)基團取代。

322. 根據編號實施例1-315中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中R_3不經任何甲氧基(-OCH_3)基團取代。

323. 根據編號實施例1-315中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基[c]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中小烷基[c]為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基[c]可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、OMe、OEt、CN、CF_3、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代，且其中R_3不經任何甲氧基(-OCH_3)基團取代。

324. 根據編號實施例1-315中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘

化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基[c]、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中小烷基[c]為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基[c]可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、OMe、OEt、CN、CF_3、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代，且其中R_3不經任何甲氧基(-OCH_3)基團取代。

325. 根據編號實施例1-315中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基[a]、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中小烷基[a]為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基[a]可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代，且其中R_3不經任何甲氧基(-OCH_3)基團取代。

326. 根據編號實施例321之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基[b]、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代。

327. 根據編號實施例322之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、環

丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代。

328. 根據編號實施例323之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基^c、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中小烷基^{c}為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基^{c}可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、OMe、OEt、CN、CF_3、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代。

329. 根據編號實施例325之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基^a、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代，其中小烷基^{a}為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基^{a}可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代。

330. 根據編號實施例1-315中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基^b、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

331. 根據編號實施例1-315中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘

化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

332. 根據編號實施例1-315中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基[c]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代，其中小烷基[c]為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基[c]可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、OMe、OEt、CN、CF_3、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代。

333. 根據編號實施例1-315中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基[a]、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代，其中小烷基[a]為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基[a]可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代。

334. 根據編號實施例330之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代，其中R_3不經4-甲氧基(-OCH_3)基團取代。

335. 根據編號實施例331之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代，其中R_3不經4-甲氧基(-OCH_3)基團取代。

336. 根據編號實施例332之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基^c、小烷氧基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代，其中小烷基^{c}為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基^{c}可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、OMe、OEt、CN、CF_3、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代，且其中R_3不經4-甲氧基(-OCH_3)基團取代。

337. 根據編號實施例333之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基^a、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代，其中小烷基^{a}為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基^{a}可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代，且其中R_3不經4-甲氧基(-OCH_3)基團取代。

338. 根據任何前述編號實施例之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、

-CH_2-OH、-CH_2-NH_2、-CH_2-O-CH_3、-OCH_3、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

339. 根據任何前述編號實施例之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-NH_2、-CH_2-O-CH_3、-OCH_3、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

340. 根據任何前述編號實施例之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-NH_2、-OCH_3、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

341. 根據任何前述編號實施例之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-O-CH_3、-OCH_3、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

342. 根據任何前述編號實施例之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、-OCH_3、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

343. 根據編號實施例338之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以

及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-NH_2、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

344. 根據編號實施例339之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-NH_2、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

345. 根據編號實施例340之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

346. 根據編號實施例341或編號實施例343之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-O-CH_3、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

347. 根據編號實施例341或編號實施例344之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-O-CH_3、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

348. 根據編號實施例342或編號實施例345之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

349. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當R_3為經兩個取代基取代之6員環時，R_3在與B_6連接之*間*位經氯取代基取代。

350. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當R_3經兩個取代基取代時，R_3經3-氯基取代。

351. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中當R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-NH_2、OH、NH_2、CF_3、鹵基及CN之取代基取代時。

352. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中當R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-NH_2、OH、CF_3、鹵基及CN之取代基取代時。

353. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中當R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-NH_2、CF_3、鹵基及CN之取代基取代時。

354. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中當R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-O-CH_3、CF_3、OH、NH_2、鹵基及CN之取代基取代時。

355. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中當R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、-CH_2-OH、-CH_2-O-CH_3、CF_3、OH、鹵基及CN之取代基取代時。

356. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中當R_3經1或2個獨立地選自-CH_3、CF_3、鹵基及CN之取代基取代時。

357. 根據編號實施例1-315中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經小烷基^{b}及視情況選用之其他取代基取代，該其他取代基選自小烷基^b、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN。

358. 根據編號實施例1-315中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經小烷基及視情況選用之其他取代基取代，該其他取代基選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN。

359. 根據編號實施例1-315中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經小烷基及視情況選用之其他取代基取代，該其他取代基選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN。

360. 根據編號實施例357之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經由NH_2取代之(C_1-C_3)烷基取代，且其中R_3視情況經選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之其他取代基取代。

361. 根據編號實施例358之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經由NH_2取代之(C_1-C_3)烷基取代，且其中R_3視情況經選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之其他取代基取代。

362. 根據編號實施例359之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經由NH_2取代之(C_1-C_3)烷基取代，且其中R_3視情況經選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之其他取代基取代。

363. 根據編號實施例360之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經-CH_2NH_2及視情況選用之其他取代基取代，該其他取代基選自小烷基[b]、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN。

364. 根據編號實施例362之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經-CH_2NH_2及視情況選用之其他取代基取代，該其他取代基選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN。

365. 根據編號實施例357至364中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經兩個取代基取代，其中該等取代基之一為-CH_2NH_2。

366. 根據編號實施例319至354中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合

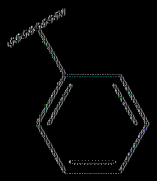
物)、冗仕類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3為經1或2個鹵基取代之取代之苯基或吡啶基。

367. 根據編號實施例319至354中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、冗仕類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3為經1或2個鹵基取代之取代之苯基。

368. 根據編號實施例366之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、冗仕類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3為經1或2個選自F及Cl之取代基取代之苯基或吡啶基。

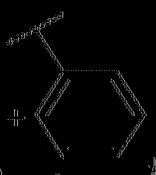
369. 根據編號實施例367或368之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、冗仕類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3為經1或2個選自F及Cl之取代基取代之苯基。

370. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、冗仕類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，



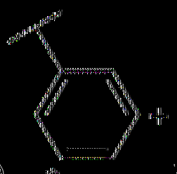
其中R_3在用(*) 標記之///位經1個取代基取代。

371. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，



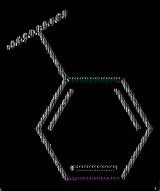
其中R_3在用(*)標記之///位經1個取代基取代，且在用(+) * 標記之類似經1個取代基取代。

372. 根據編號實施例1至370中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3在用(*)標記之///位經1



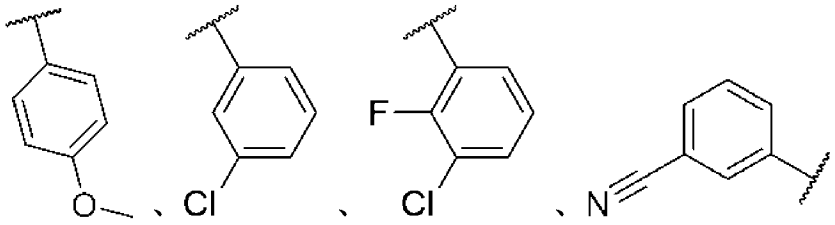
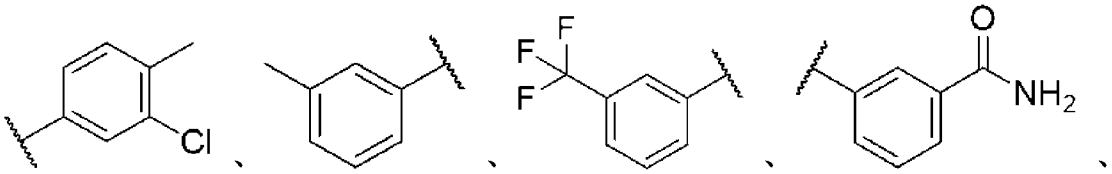
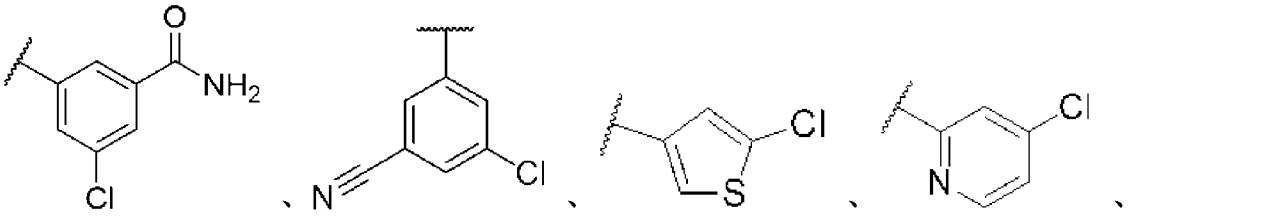
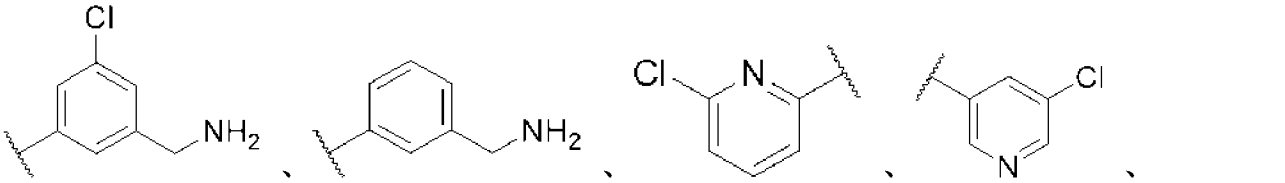
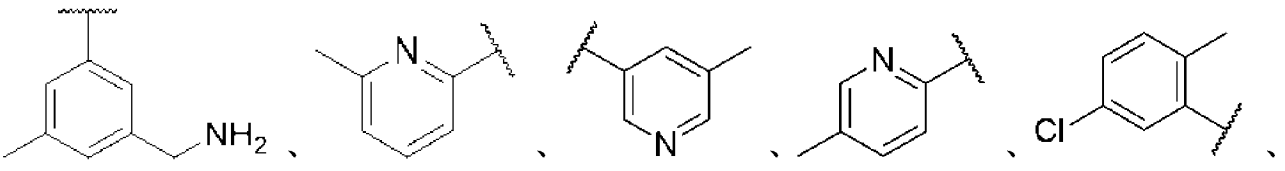
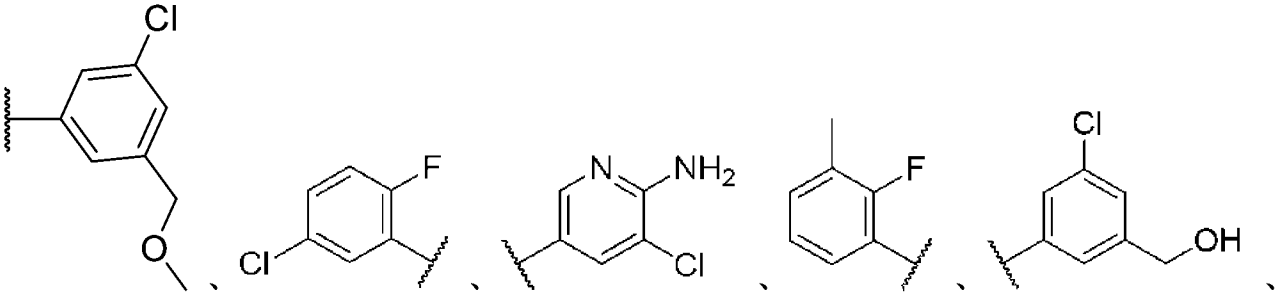
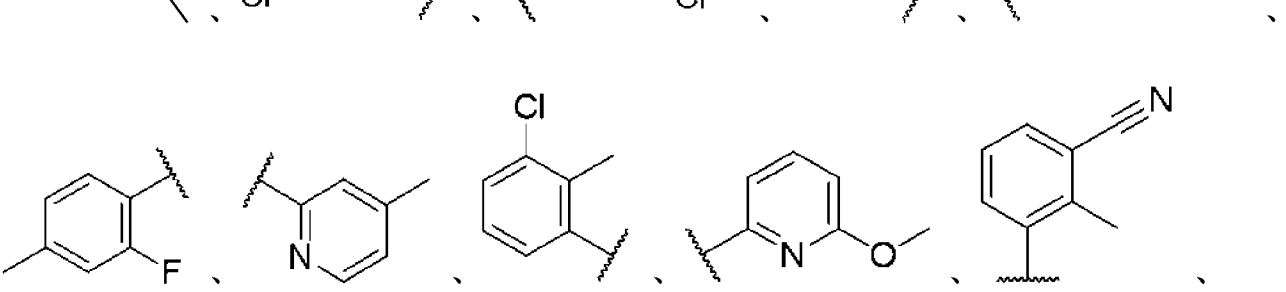
個取代基取代，且在用(+) * 標記之///位經1個取代基取代。

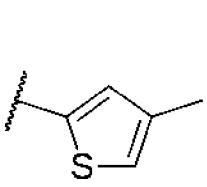
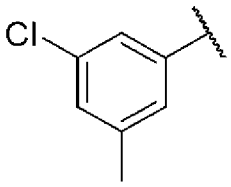
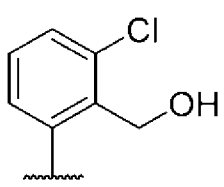
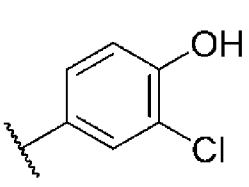
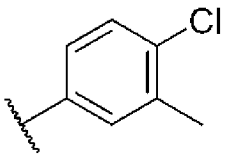
373. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，



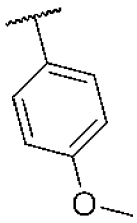
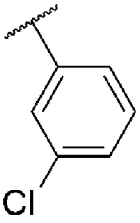
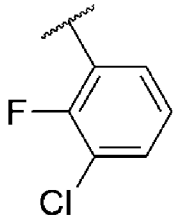
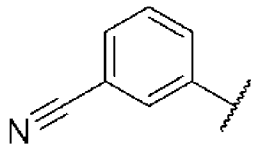
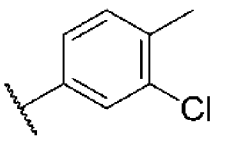
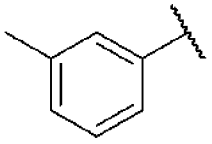
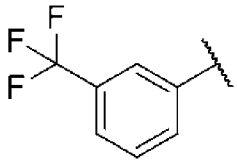
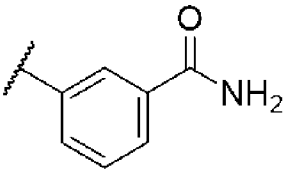
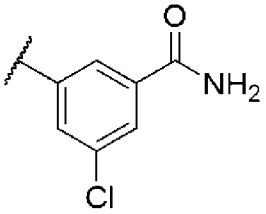
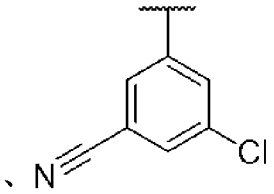
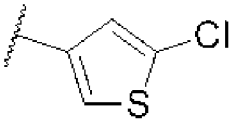
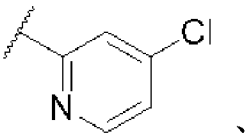
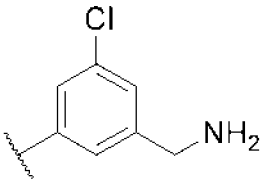
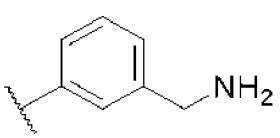
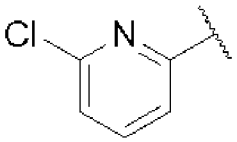
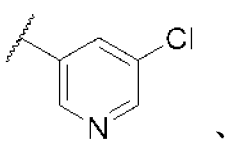
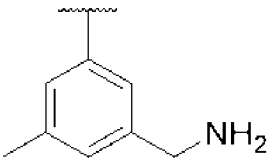
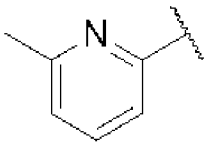
其中R_3在用(~) ~ 標記之類似未經取代。

374. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

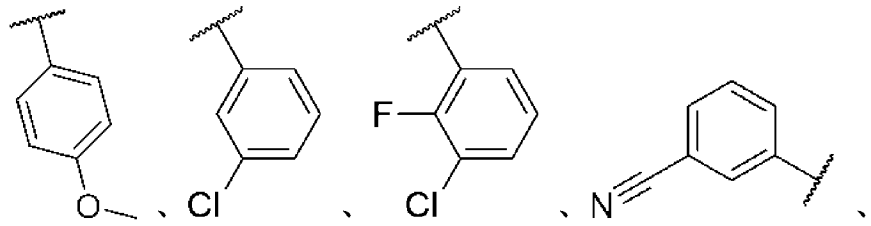
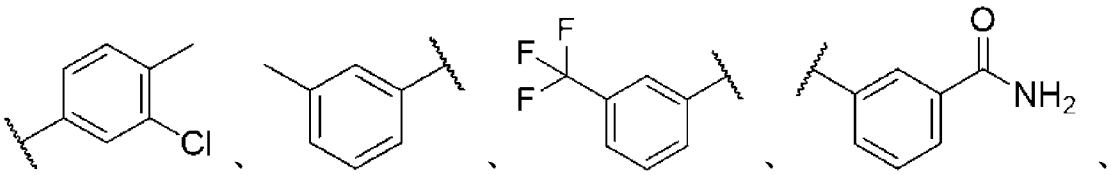
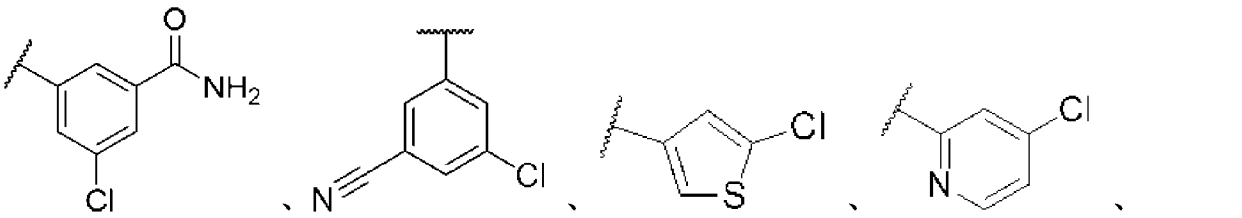
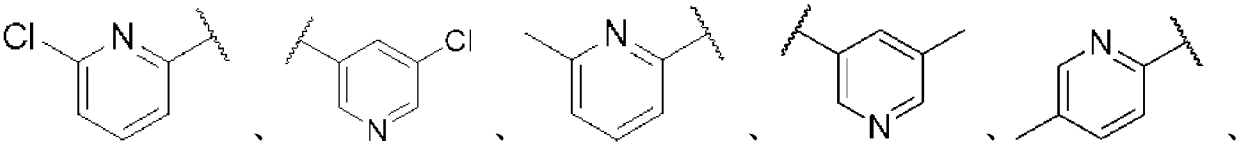
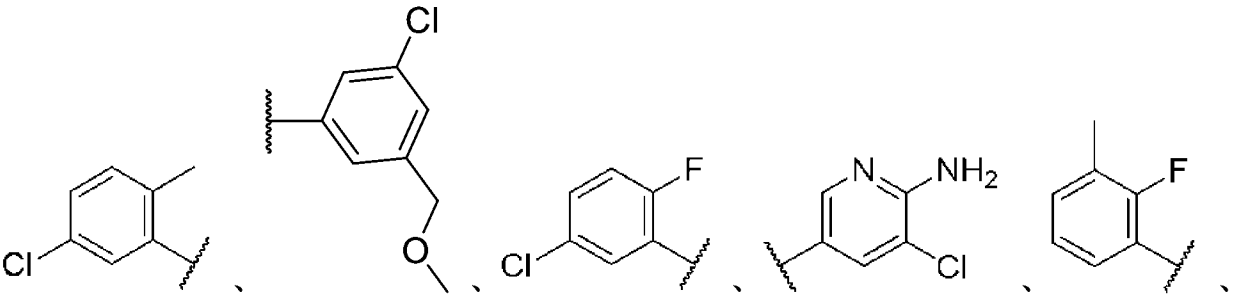
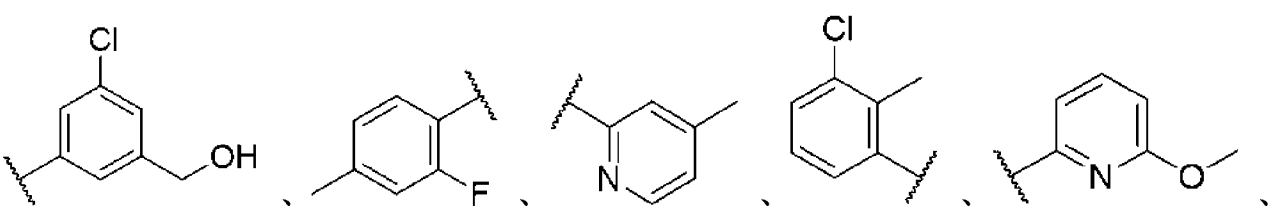
其中R_3選自：  、  、  、  、  、  、 

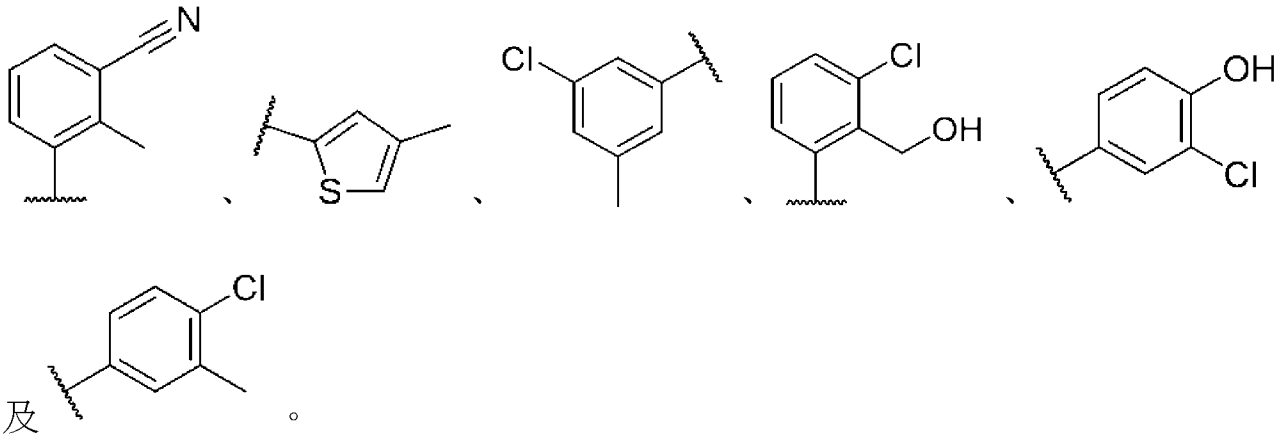
 、  、  、  及  。

375. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中R_3選自：  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  及  。

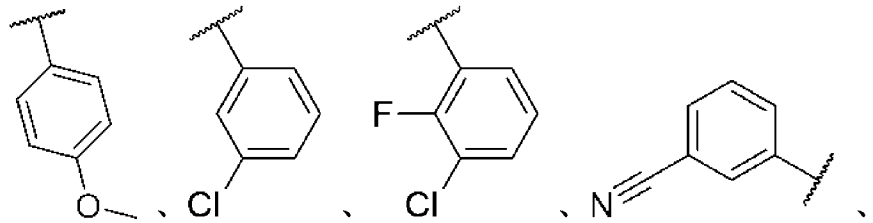
376. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

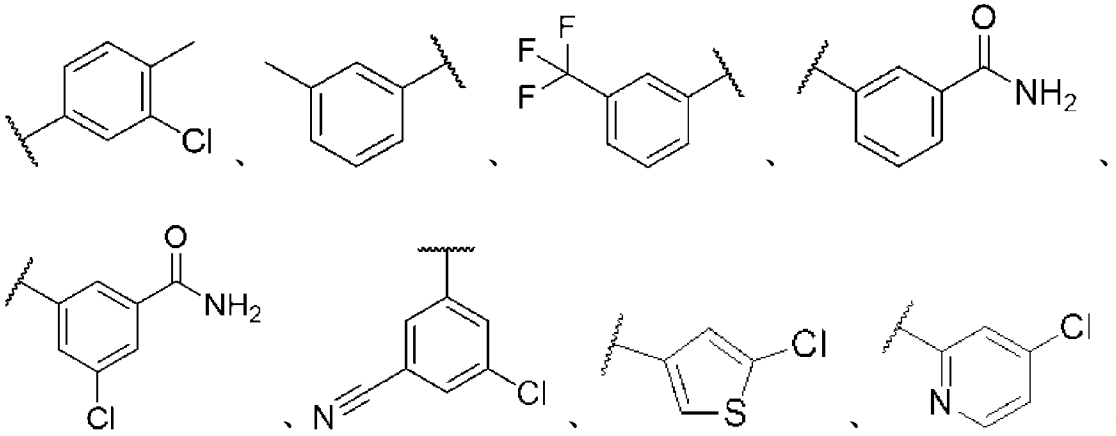
其中R_3選自：  、  、  、  、  、 



及 。

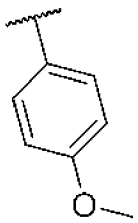
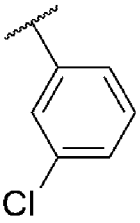
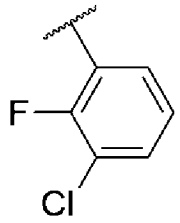
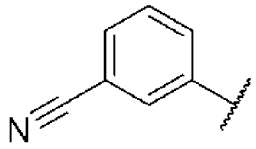
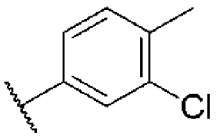
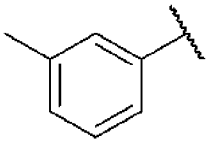
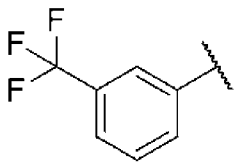
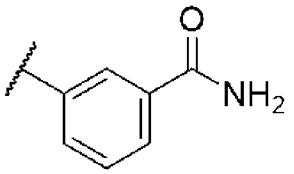
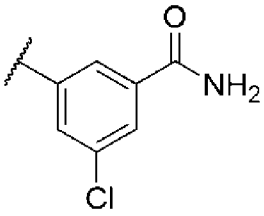
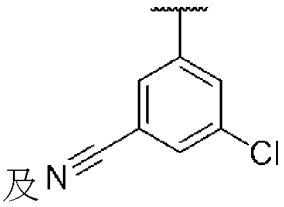
377. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

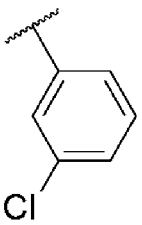
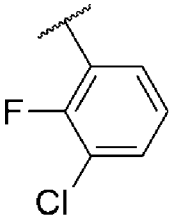
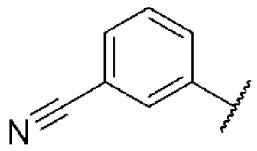
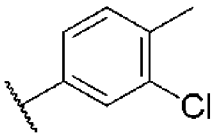
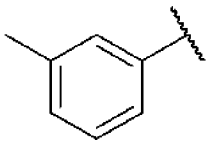
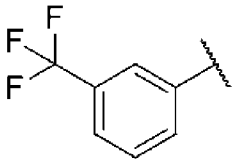
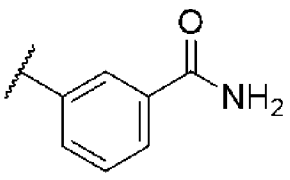
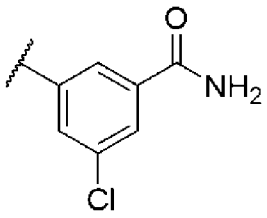
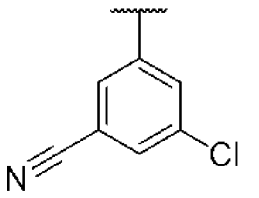
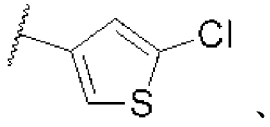
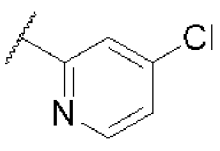
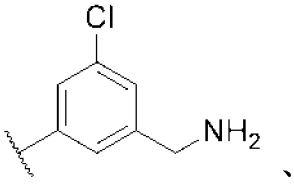
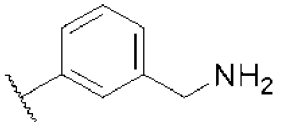
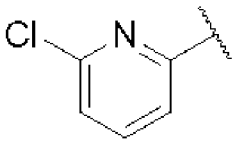
其中R_3選自： 

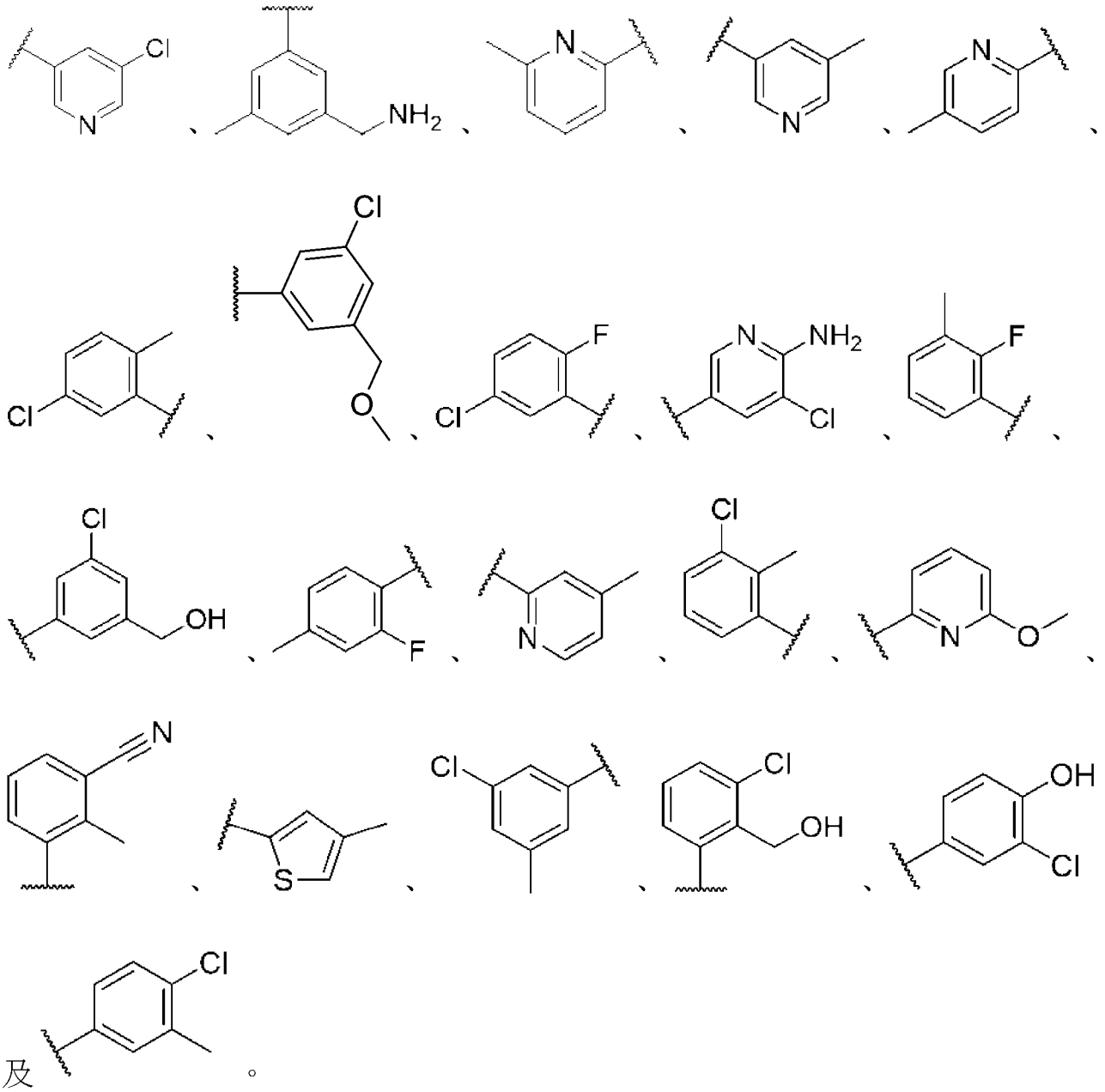


及 。

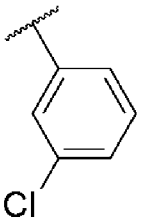
378. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

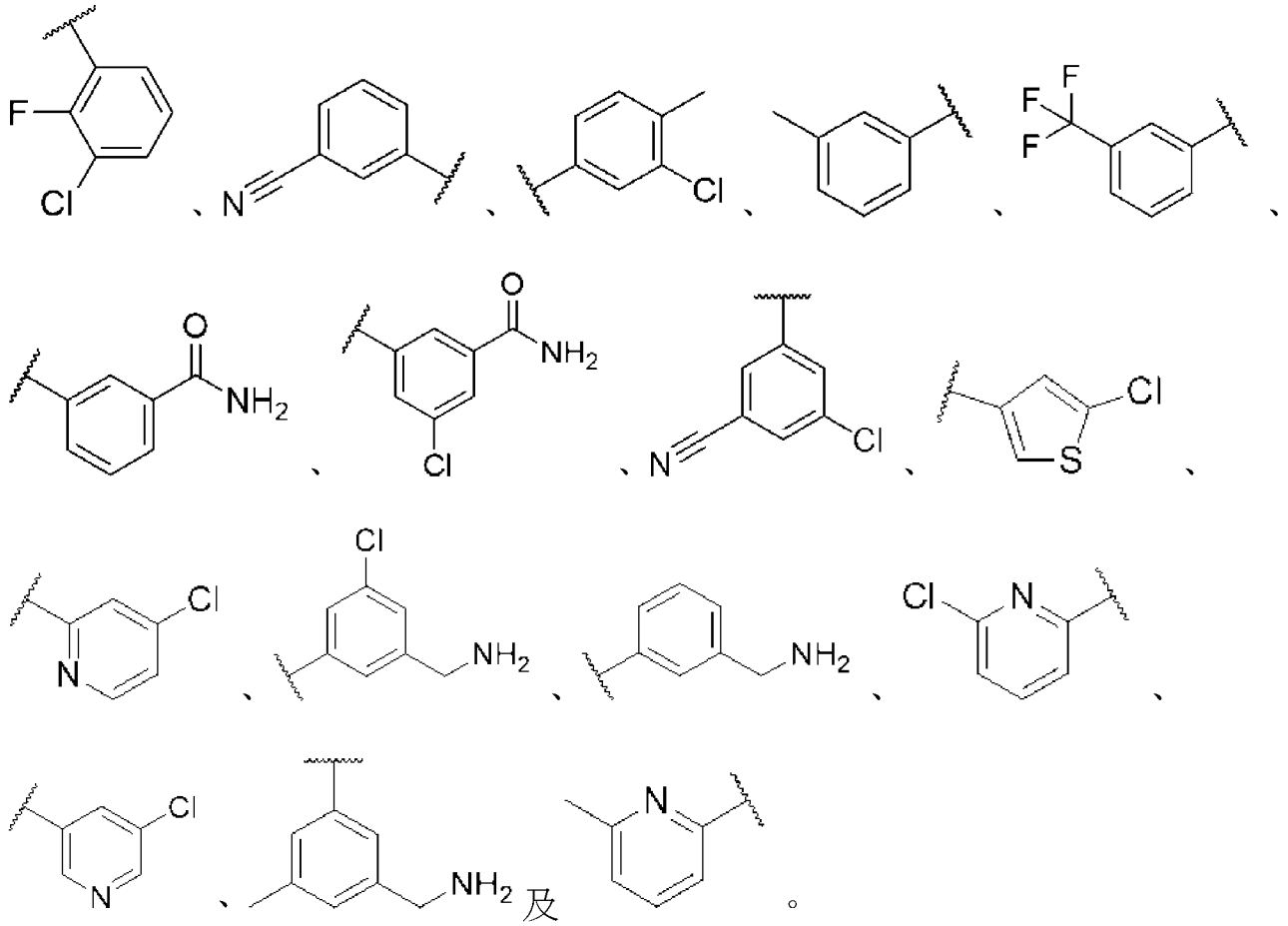
其中R_3選自：  、  、  、  、  、  、  、  、  、  及。

379. 根據編號實施例1-374中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3選自：  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、  、

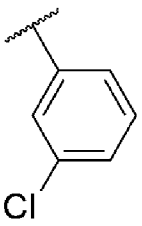


及 。

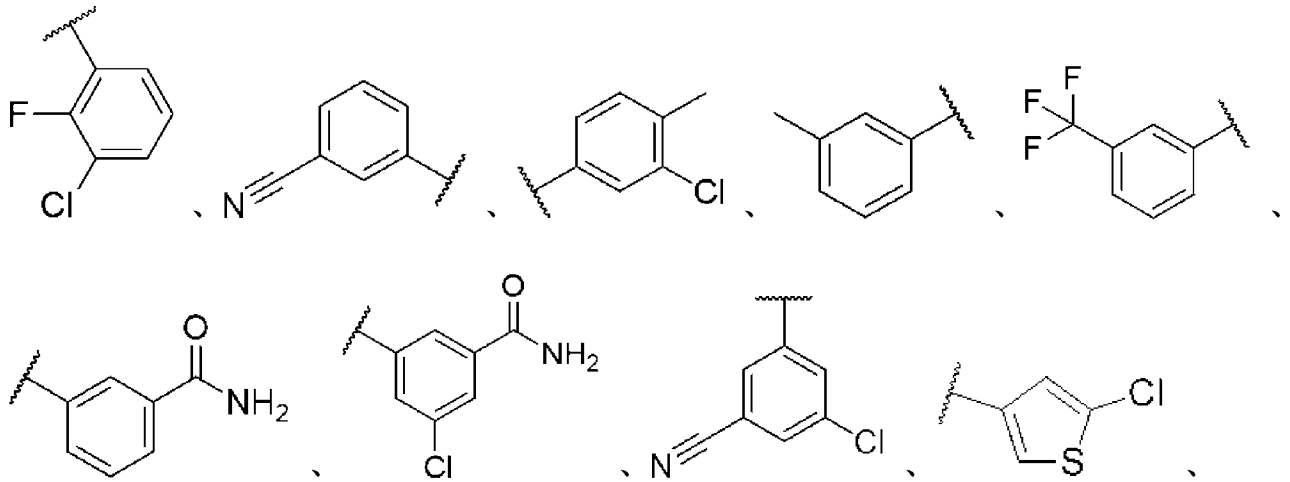
380. 根據編號實施例1-375中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3選自：  、

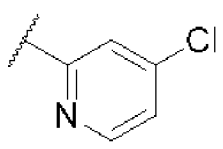
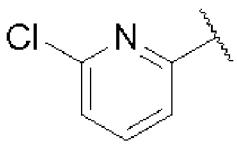
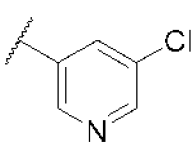


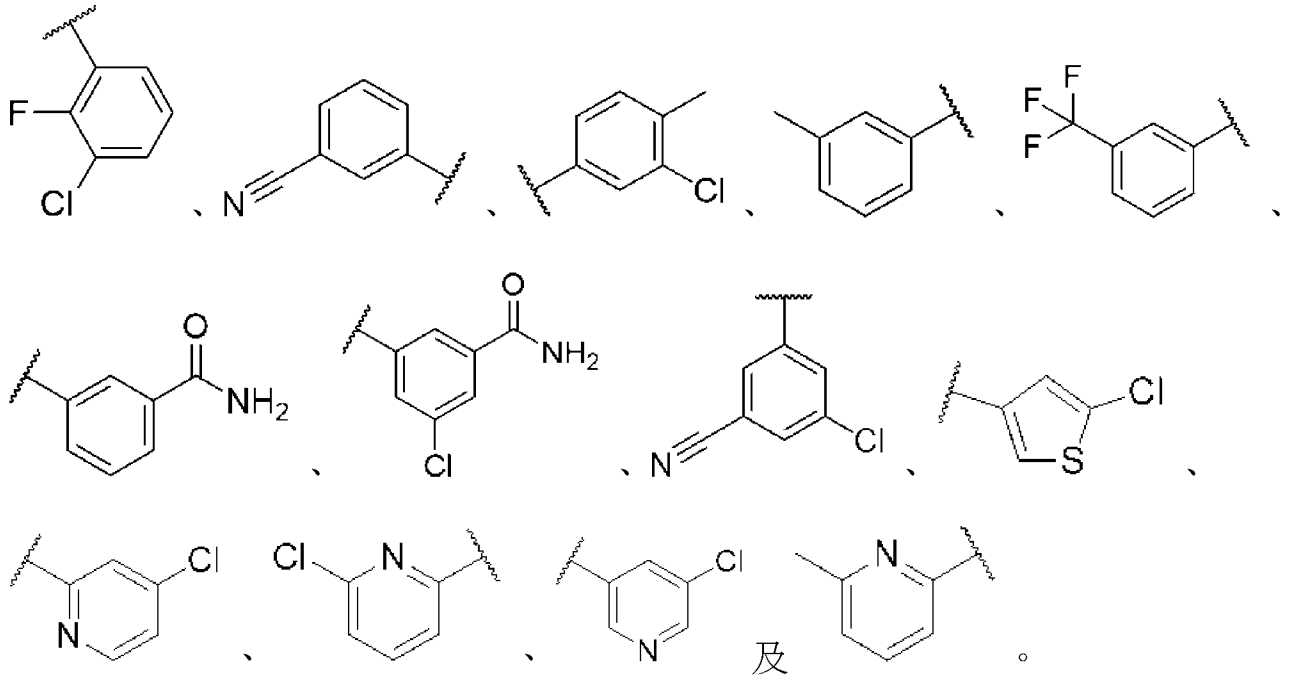
381. 根據編號實施例1-374中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3選自：

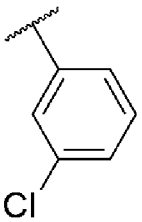


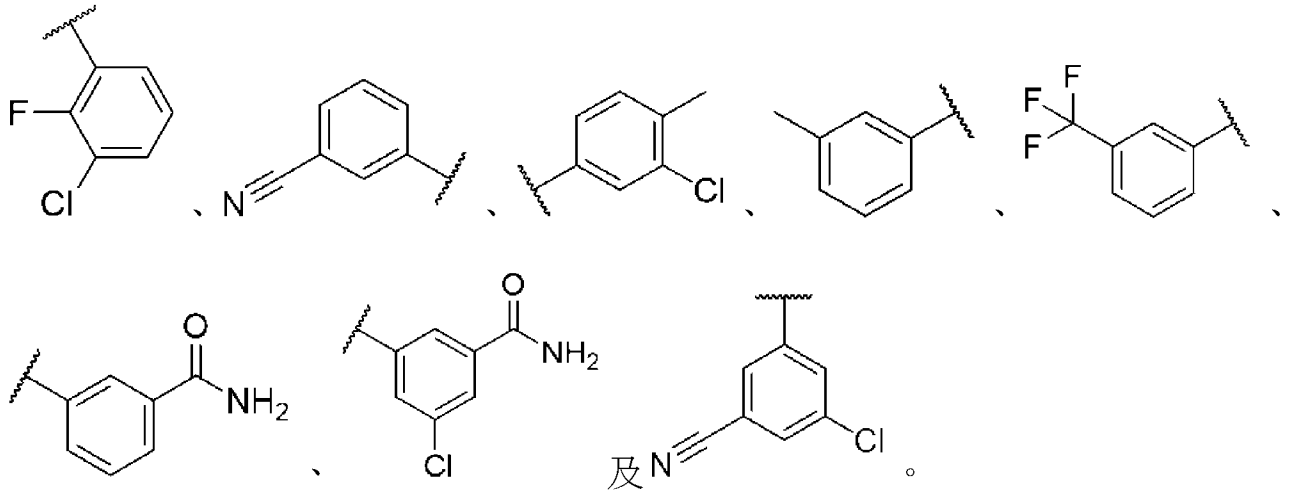
、



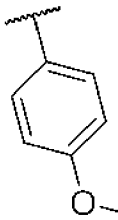

、 
、 
、

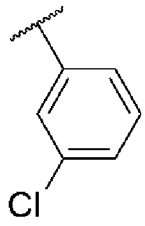
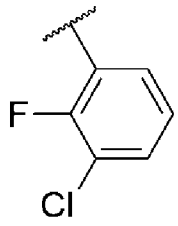


383. 根據編號實施例1-376中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3選自：  、

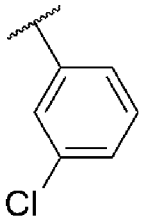
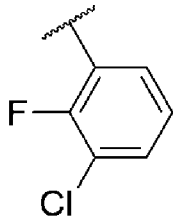


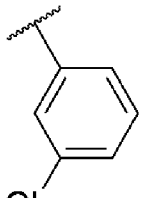
384. 根據編號實施例1-378中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化

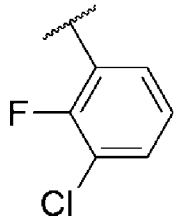
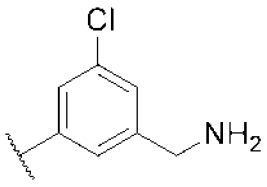
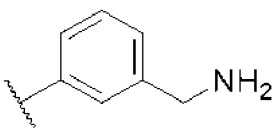
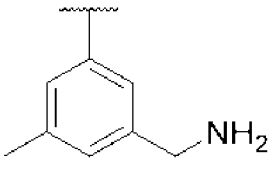
化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3選自：  、

 及  。

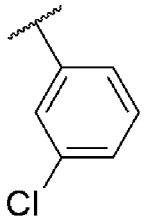
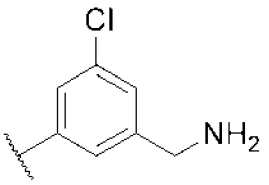
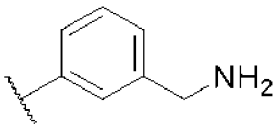
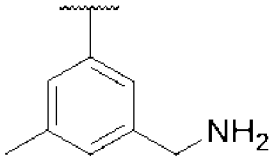
385. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

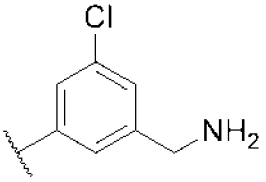
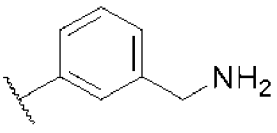
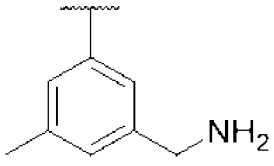
其中R_3選自：  及  。

386. 根據編號實施例1-374中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3選自：  、

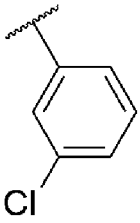
 、  、  及  。

387. 根據編號實施例1-375中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化

化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3選自：  、  、  及  。

388. 根據編號實施例387之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3選自：  、  及  。

389. 根據前述編號實施例中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，

其中R_3為  。

390. 根據任何前述編號實施例之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其抑制FXIIa。

391. 根據編號實施例390之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其以<40,000 nM之IC50值抑制FXIIa。

392. 根據編號實施例391之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其以<10,000 nM之IC50值抑制FXIIa。

393. 根據編號實施例392之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其以<3,000 nM之IC50值抑制FXIIa。

394. 根據編號實施例393之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其以<1,000 nM之IC50值抑制FXIIa。

395. 根據編號實施例394之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其以<300 nM之IC50值抑制FXIIa。

396. 根據編號實施例395之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其以<100 nM之IC50值抑制FXIIa。

397. 根據任何前述編號實施例之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，與任何其他絲胺酸蛋白酶之抑制作用相比，其選擇性地抑制FXIIa。

398. 根據編號實施例397之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，與PKal、KLK1、纖溶酶、FXa、FXIa或凝血酶中任一者之抑制作用相比，其選擇性地抑制FXIIa。

399. 根據編號實施例398之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，與FXa抑制作用相比，其選擇性地抑制FXIIa。

400. 根據編號實施例399之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，與FXa抑制作用相比，其對FXIIa抑制作用之選擇性為至少10倍。

401. 根據編號實施例400之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，與FXa抑制作用相比，其對FXIIa抑制作用之選擇性為至少100倍。

402. 根據編號實施例401之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，與FXa抑制作用相比，其對FXIIa抑制作用之選擇性為至少1,000倍。

403. 根據編號實施例402之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以

及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，與FXa抑制作用相比，其對FXIIa抑制作用之選擇性為至少10,000倍。

404. 一種選自表1a、表1b、表1c、表1d、表2a、表2b、表2c、表2d、表3a、表3b、表3c、表3d及表4之化合物，或其醫藥學上可接受之鹽、溶劑合物或鹽之溶劑合物。

405. 一種選自表1a、表1b、表1c、表2a、表2b、表2c、表3a、表3b、表3c及表4之化合物，或其醫藥學上可接受之鹽、溶劑合物或鹽之溶劑合物。

406. 一種選自表1a、表1b、表2a、表2b、表3a、表3b及表4之化合物，或其醫藥學上可接受之鹽、溶劑合物或鹽之溶劑合物。

407. 一種選自表1a、表2a及表3a之化合物，或其醫藥學上可接受之鹽、溶劑合物或鹽之溶劑合物。

408. 一種醫藥組合物，其包含：根據前述編號實施例中任一項之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，及至少一種醫藥學上可接受之賦形劑。

409. 如編號實施例1至407中任一項所定義之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或根據編號實施例408之醫藥組合物，用於藥物中。

410. 如編號實施例1至407中任一項所定義之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或根據編號實施例408之醫藥組合物，用於治療牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患的方法中。

411. 如編號實施例410所定義之供使用之化合物、其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或醫藥組合物，其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為緩激肽介導之血管性水腫，其中該緩激肽介導之血管性水腫為遺傳性血管性水腫。

412. 如編號實施例410所定義之供使用之化合物、其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或醫藥組合物，其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為緩激肽介導之血管性水腫，其中該緩激肽介導之血管性水腫為非遺傳性的。

413. 如編號實施例410所定義之供使用之化合物、其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或醫藥組合物，其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患選自血管滲透性過高；中風，包括缺血性中風及出血性事件；視網膜水腫；糖尿病性視網膜病變；視力受損；DME；視網膜靜脈阻塞；及AMD。

414. 如編號實施例410所定義之供使用之化合物、其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或醫藥組合物，其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為血栓性病症。

415. 如編號實施例414所定義之供使用之化合物、其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或醫藥組合物，其中該血栓性病症為血栓形成；因與血液接觸之醫學器件凝結血液之傾向增加而導致血栓栓塞；促血栓形成疾患，諸如瀰漫性血管內凝血(DIC)、靜脈血栓栓塞(VTE)、癌症相關之血栓形成、由機械及生物假體心臟瓣膜引起之併發症、由導管引起之併發症、由ECMO引起之併發症、由LVAD引起之併發症、由透析引起之併發症、由CPB引起之併發症、鐮狀細胞疾病、關節置換術、由tPA誘導之血栓形成、Paget-Schroetter症候群及Budd-Chari症候群；動脈粥樣硬化；COVID-19；與SARS-CoV-2感染相關之COVID-19；急性呼吸窘迫症候群(ARDS)；特發性肺纖維化(IPF)；類風濕性關節炎(RA)；及冷誘導之蕁麻疹自體發炎症候群。

416. 如編號實施例410所定義之供使用之化合物、其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或醫藥組合物，其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為遺傳性血

管性水腫；COVID-19；與SARS-CoV-2感染相關之COVID-19；及特發性肺纖維化(IPF)。

417. 如編號實施例410所定義之供使用之化合物、其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或醫藥組合物，其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為COVID-19。

418. 如編號實施例410所定義之供使用之化合物、其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或醫藥組合物，其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為與SARS-CoV-2感染相關之COVID-19。

419. 如編號實施例410所定義之供使用之化合物、其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或醫藥組合物，其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為特發性肺纖維化(IPF)。

420. 如編號實施例410所定義之供使用之化合物、其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或醫藥組合物，其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為神經發炎；神經發炎/神經退化性病症，諸如MS (多發性硬化症)；其他神經退化性疾病，諸如阿爾茲海默氏病、癲癇及偏頭痛；敗血症；細菌性敗血症；發炎；血管滲透性過高；及過敏反應。

421. 如編號實施例410所定義之供使用之化合物、其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或醫藥組合物，其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為肥胖或糖尿病。

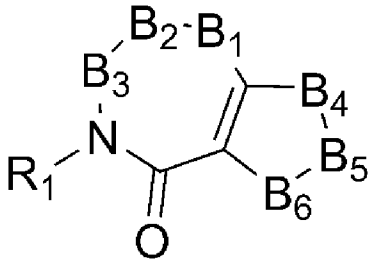
422. 如編號實施例410所定義之供使用之化合物、其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或醫藥組合物，其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為腎病、腎纖維化、腎小球硬化、腎疤痕、原生或移植腎臟之缺血/再灌注損傷以及急性腎損傷。

423. 如編號實施例410所定義之供使用之化合物、其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或醫藥組合物，其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為腦神經膠質母細胞瘤生長及惡性腫瘤，以及包括水腫及認知功能在內之其併發症。

424. 如編號實施例410所定義之供使用之化合物、其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或醫藥組合物，其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為透析中低血壓(IDH)。

編號段落

1. 一種式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為$C(R_2)$，B_5為C(H)，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、$-(CH_2)_{0-3}-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{14}-C(=O)R_{15}$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{34}-S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、$-CH_2-O-R_{16}$及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、$-OH$、$-S(=O)_2-$(小烷基)、$-(CH_2)_{1-3}-(C=O)-OR_{33}$、$-(CH_2)_{1-3}-(C=O)-N(R_{36})(R_{37})$、$-(CH_2)_{0-3}-$環烷基[a]、$-(CH_2)_{0-3}-$雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}-$芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、

-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OR_{38}、-(C(H)(烷基))-(C=O)-$N(R_{39})(R_{40})$、-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-$N(R_{41})(R_{42})$；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_{28}、R_{33} R_{36}、R_{37}、R_{38}、R_{39}、R_{40}、R_{41}及R_{42}各自獨立地選自H及小烷基；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

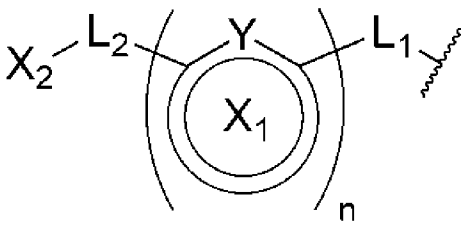
R_{16}選自H、烷基、環烷基、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，其中式(II)由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

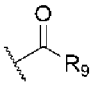
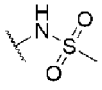
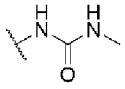
L_2為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及$-SO_2-$之連接基；且

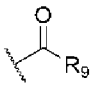
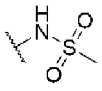
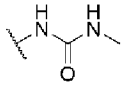
X_2為：

(a) $-NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{22}$；

其中R_{21}選自H、烷基及$-(CH_2)_{0-3}-R_{23}$；

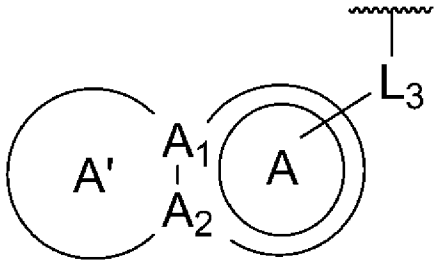
其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽

和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

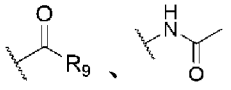
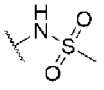
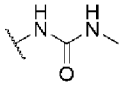
L_3為選自單鍵、$-(CH_2)_{1-3}-$、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

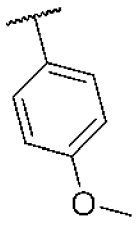
其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；其中R_3不為  ；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基[a]為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、$(C_1$-$C_6)$烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

2. 根據編號段落1之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，或

(ii) B_2為碳中心或氮中心且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵。

3. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

(i) B_1為碳中心，且B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_1為碳中心且B_2為碳中心，且B_1經由單鍵與B_2連接，或者

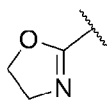
(iii) B_1為氮中心且B_2為碳中心，且B_1經由雙鍵與B_2連接。

4. 根據編號段落3之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_1為碳中心且B_2為碳中心，且B_1經由單鍵與B_2連接，或其中B_1為氮中心且B_2為碳中心且B_1經由雙鍵與B_2連接。

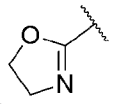
5. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；或

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接。

6. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-$N(R_4)(R_5)$、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-$S(=O)_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH、-CN及  。

7. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類

似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  。

8. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

R_4為H或小烷基，且

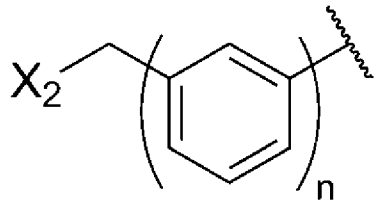
R_5選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[a]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及 -(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時選自H、烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、－(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及－(C(H)(雜芳基))-烷基。

9. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_1選自苯基及吡啶基。

10. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中式(II)由式(IIa)表示，



式(IIa)，

其中：

n為0或1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

11. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A為苯基或含有1、2或3個氮環成員之6員含碳芳族環。

12. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類

似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N。

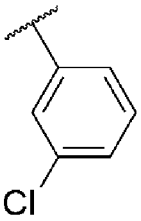
13. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7當存在時經由N環成員鍵結至A'。

14. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7為(C_1-C_3)烷基。

15. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3不經4-甲氧基取代。

16. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3選自經取代之苯基、經取代之吡啶基及經取代之噻吩。

17. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

18. 根據前述編號段落中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3為  。

19. 一種選自表1a、表1b、表1c、表2a、表2b、表2c、表3a、表3b、表3c及表4之化合物，或其醫藥學上可接受之鹽、溶劑合物或鹽之溶劑合物。

20. 一種醫藥組合物，其包含：根據前述編號段落中任一項之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，及至少一種醫藥學上可接受之賦形劑。

21. 如編號段落1至19中任一項所定義之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或根據編號段落20之醫藥組合物，用於藥物中。

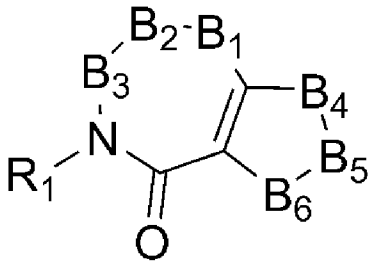
22. 如編號段落1至19中任一項所定義之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或根據編號段落20之醫藥組合物，用於治療牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患的方法中；其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為緩激肽介導之血管性水腫，其中該緩激肽介導之血管性水腫為遺傳性血管性水腫。

23. 如編號段落1至19中任一項所定義之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或根據編號段落20之醫藥組合物，用於治療牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患的方法中；其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為緩激肽介導之血管性水腫；其中該緩激肽介導之血管性水腫為非遺傳性的。

24. 如編號段落1至19中任一項所定義之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或根據編號段落20之醫藥組合物，用於治療牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患的方法中；其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為血栓性病症。

編號態樣

1. 一種式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且其中，當B_3為碳中

心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為$C(R_2)$，B_5為C(H)，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、$-(CH_2)_{0-3}-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{14}-C(=O)R_{15}$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{34}-S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、$-CH_2-O-R_{16}$及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、$-(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、$-(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

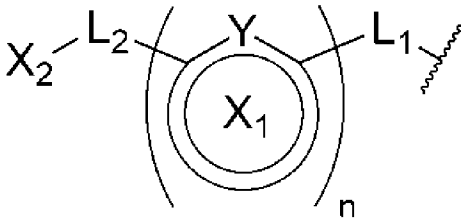
R_{16}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，其中式(II)由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

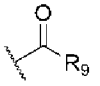
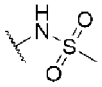
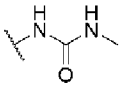
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

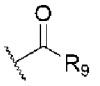
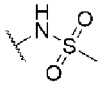
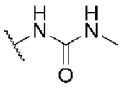
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

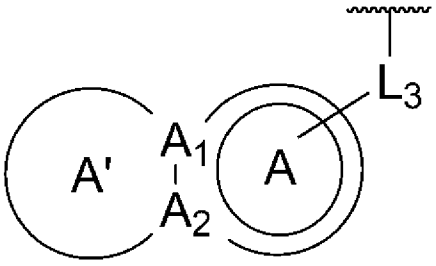
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

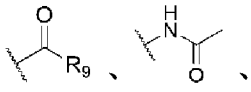
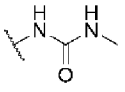
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

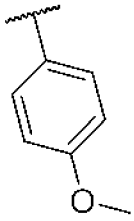
A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、、  、  及  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之

碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；其中R_3不為  ；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

2. 根據編號態樣1之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵。

3. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

(i) B_1為碳中心，且B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_1為碳中心且B_2為碳中心，且B_1經由單鍵與B_2連接，或者

(iii) B_1為氮中心且B_2為碳中心，且B_1經由雙鍵與B_2連接。

4. 根據編號態樣3之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_1為碳中心且B_2為碳中心，且B_1經由單鍵與B_2連接，或其中B_1為氮中心且B_2為碳中心且B_1經由雙鍵與B_2連接。

5. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

(i) B_4為N(R_2)，B_5為N，且B_6為C(R_3)，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；或

(ii) B_4為C(R_2)，B_5為N，且B_6為N(R_3)，且其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接。

6. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3、-CH_2-OH及-CN。

7. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-CH_2-NH-S(=O)$_2$(環丙基)、-CH_2-O-CH_3及-CH_2-OH。

8. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

R_4為H或小烷基，且

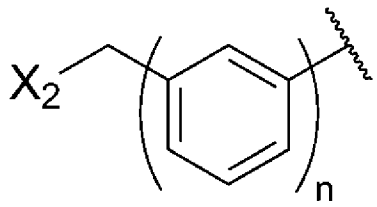
R_5選自烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、－$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及－(C(H)(雜芳基))-烷基。

9. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_1選自苯基及吡啶基。

10. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中式(II)由式(IIa)表示，



式(IIa)，

其中：

n為0或1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

11. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_2為含有5或6個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員為N，且其中，當X_2為雙環系統時，該雙環系統為稠合的。

12. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A為苯基或含有1、2或3個氮環成員之6員含碳芳族環。

13. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N。

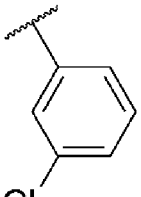
14. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7當存在時經由N環成員鍵結至A'。

15. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7為(C_1-C_2)烷基。

16. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3不經4-甲氧基取代。

17. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3為苯基，經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

18. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

19. 根據前述編號態樣中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3為 

。

20. 一種選自表1a、表1b、表2a、表2b、表3a、表3b及表4之化合物，或其醫藥學上可接受之鹽、溶劑合物或鹽之溶劑合物。

21. 一種醫藥組合物，其包含：根據前述編號態樣中任一項之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，及至少一種醫藥學上可接受之賦形劑。

22. 如編號態樣1至20中任一項所定義之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或根據編號態樣21之醫藥組合物，用於藥物中。

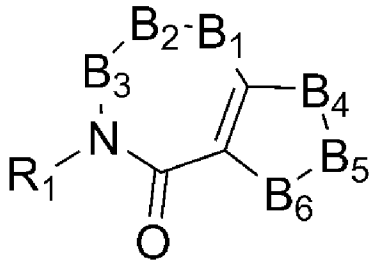
23. 如編號態樣1至20中任一項所定義之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或根據編號態樣21之醫藥組合物，用於治療牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患的方法中；其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為緩激肽介導之血管性水腫，其中該緩激肽介導之血管性水腫為遺傳性血管性水腫。

24. 如編號態樣1至20中任一項所定義之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或根據編號態樣21之醫藥組合物，用於治療牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患的方法中；其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為緩激肽介導之血管性水腫；其中該緩激肽介導之血管性水腫為非遺傳性的。

25. 如編號態樣1至20中任一項所定義之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或根據編號態樣21之醫藥組合物，用於治療牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患的方法中；其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為血栓性病症。

編號條款

1. 一種式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

(iii) B_2為碳中心且B_3為氮中心，或

(iv) B_2及B_3均為碳中心，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中，當B_2及B_3均存在時，B_2及B_3經由單鍵或雙鍵連接；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；且其中，當B_3為碳中心時，B_3可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或者

(iii) B_4為$C(R_2)$，B_5為C(H)，且B_6為$N(R_3)$，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、$-(CH_2)_{0-3}-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-(CH_2)_{0-3}-NR_{14}-C(=O)R_{15}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF3、鹵基、芳基、雜芳基、$-CH_2-O-R_{16}$及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

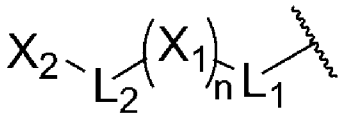
R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{16}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，



式(II)，

其中：

n為0或1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

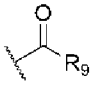
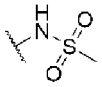
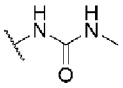
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

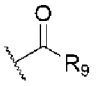
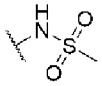
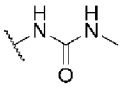
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

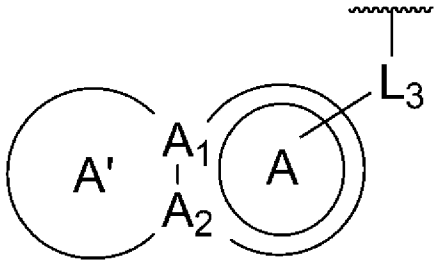
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

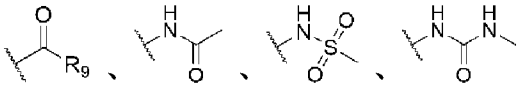
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、NH_2及烷氧基；

其中A'可視情況經1或2個其他取代基R_{10}及R_{11}取代，其中R_{10}及R_{11}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1個選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{24}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基、小烷氧基、環丙基、OH、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C1-C4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C3-C4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

2. 根據編號條款1之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_2為碳中心或氮中心且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵。

3. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_1為碳中心且B_2為碳中心，且B_1經由單鍵與B_2連接，或其中B_1為氮中心且B_2為碳中心且B_1經由雙鍵與B_2連接。

4. 根據編號條款3之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_1為碳中心且B_2為碳中心，且B_1經由單鍵與B_2連接。

5. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接。

6. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-O-CH_3$及-CN。

7. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$及$-CH_2-O-CH_3$。

8. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

R_4為H或小烷基，且

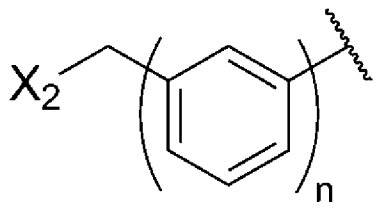
R_5選自烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；且

R_6當存在時選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及－(C(H)(雜芳基))-烷基。

9. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_1選自苯基及吡啶基。

10. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中式(II)由式(IIa)表示，



式(IIa)，

其中：

n為0或1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

11. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_2為含有5或6個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員為N，且其中，當X_2為雙環系統時，該雙環系統為稠合的。

12. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中n為1。

13. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A為苯基或含有1、2或3個氮環成員之6員含碳芳族環。

14. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類

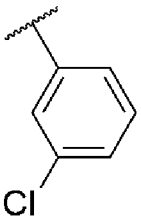
似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N。

15. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7當存在時經由N環成員鍵結至A'。

16. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7為(C_1-C_2)烷基。

17. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3不經4-甲氧基取代。

18. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3為經1或2個鹵基取代基取代之苯基。

19. 根據前述編號條款中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3為 

。

20. 一種選自表1a、表2a及表3a之化合物，或其醫藥學上可接受之鹽、溶劑合物或鹽之溶劑合物。

21. 一種醫藥組合物，其包含：根據前述編號條款中任一項之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，及至少一種醫藥學上可接受之賦形劑。

22. 如編號條款1至20中任一項所定義之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或根據編號條款21之醫藥組合物，用於藥物中。

23. 如編號條款1至20中任一項所定義之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或根據編號條款21之醫藥組合物，用於治療牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患的方法中；其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為緩激肽介導之血管性水腫；其中該緩激肽介導之血管性水腫為遺傳性血管性水腫。

24. 如編號條款1至20中任一項所定義之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或根據編號條款21之醫藥組合物，用於治療牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患的方法中；其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為緩激肽介導之血管性水腫；其中該緩激肽介導之血管性水腫為非遺傳性的。

25. 如編號條款1至20中任一項所定義之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或根據編號條款21之醫藥組合物，用於治療牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患的方法中；其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為血栓性病症。

合成方法

【0974】 本發明化合物可根據以下流程及實例之程序，使用適當材料來製備，且藉由下文所提供之特定實例進一步舉例說明。此外，藉由利用本文所述之方法，一般技術者可容易地製備落入本文所主張之本發明的範圍內之額外化合物。然而，實例中所說明之化合物不應被解釋為形成被視為本發明之唯一種

類。熟習此項技術者應容易理解，在以下製備程序中執行合成步驟之條件、方法及次序之已知變化可用於製備此等化合物。

【0975】 本發明化合物及中間體可以其醫藥學上可接受之鹽(諸如上文先前所描述之彼等)之形式經分離。熟習此項技術者將容易知曉遊離形式與鹽形式之間之相互轉化。

【0976】 可能有必要保護用於製備本發明化合物之中間體中之反應性官能基(例如，羥基、胺基、硫基或羧基)，以避免它們非期望地參與導致化合物形成之反應。可使用習知保護基，例如，Peter G. M. Wuts在「Greene’ s Protective Groups in Organic Chemistry」John Wiley and Sons, 第5版, 2014.中所描述之彼等保護基。例如，適合用於本文中之常見胺基保護基為第三丁氧羰基(boc)，其藉由在有機溶劑(諸如二氯甲烷)中用酸(諸如三氟乙酸或氯化氫)處理而容易地經移除。或者，胺基保護基可為苄氧羰基(Cbz或Z)，其可藉由在氫氣氛圍下用鈀催化劑氫化而經移除；或9-芴基甲氧羰基(Fmoc)，其可由二級有機胺(諸如二乙胺或哌啶)於有機溶劑中之溶液移除。羧基通常經保護為酯，諸如甲基、乙基、苄基或第三丁基，其均可藉由在鹼(諸如氫氧化鋰或氫氧化鈉)存在下水解而經移除。亦可藉由在氫氣氛圍下用鈀催化劑氫化來移除苄基保護基，同時亦可由三氟乙酸移除第三丁基。或者，用乙酸中之鋅移除三氯乙酯保護基。適合用於本文中之常見羥基保護基為甲基醚，去保護條件包括在48% HBr水溶液中回流，或藉由在有機溶劑(諸如DCM)中與三溴硼烷一起攪拌。或者，當羥基經保護為苄基醚時，去保護條件包括在氫氣氛圍下用鈀催化劑氫化。

【0977】 本文所述之烏爾曼偶合化學係指各種親核試劑(例如，經取代之酚鹽、胺、醯胺)與芳基鹵化物之間之銅催化之親核芳族取代。

【0978】 形成碳-碳、碳-氮及碳-氧鍵之鈀催化之交叉偶合反應通常需要鈀催化劑及能夠形成*原位*催化活性$L_nPd^{(0)}$物質之配位體。

【0979】 本文所用之外消旋、雙非外消旋及非外消旋或鏡像異構物純化合物的圖示取自Maehr *J. Chem. Ed.* 62, 114-120 (1985)：實心楔形( )及虛線楔形( )用於表示對掌性元素之絕對組態；波浪線( )指示否認它所表示之鍵可能生成的任何立體化學意義；粗實線( )及粗虛線( )為幾何描述符，指示所示之相對組態，但表示外消旋特徵；且楔形輪廓( )及虛線( )表示不確定絕對組態之鏡像異構物純化合物。對於文本中對應於楔形輪廓( )及虛線( )之命名法，吾人將R*及S*定義為指示不確定絕對組態之單一鏡像異構物。

【0980】 藉由以下非限制性實例說明本發明，其中使用以下縮寫及定義：

AcOH	乙酸
aq	水溶液
AIBN	偶氮雙異丁腈
BFMO	N,N’-二糠基草醯胺
boc	第三丁氧羰基
Boc_2O	二碳酸二-第三丁酯
B_2Pin_2	雙(頻哪醇基)二硼
BrettPhos	2-(二環己基膦基)-3,6-二甲氧基-2’,4’,6’-三異丙基-1,1’-聯苯
BrettPhos Pd G3	甲烷磺酸[(2-二-環己基膦基-3,6-二甲氧基-2’,4’,6’-三異丙基-1,1’-聯苯)-2-(2’-胺基-1,1’-聯苯)]鈀(II)
BrettPhos Pd G4	甲烷磺酸根(2-二環己基膦基-3,6-二甲氧基-2’,4’,6’-三-異丙基-1,1’-聯苯)(2'-甲基胺基-1,1’-聯苯-2-基)鈀(II) (CAS編號1599466-83-7)
tBu	第三丁基
tert-BuBrettphos Pd G3	甲烷磺酸[(2-二-第三丁基膦基-3,6-二甲氧基-2’,4’,6’-三異丙基-1,1’-聯苯)-2-(2’-胺基-1,1’-聯苯)]鈀(II)
nBuLi	正丁基鋰
Cbz	胺基甲酸苄酯
CDI	1,1’-羰基二咪唑
Celite®	過濾劑(矽藻土)
COMU	1-氰基-2-乙氧基-2-側氧基亞乙基胺基氧基)二甲基胺基-嗎啉基-碳鎓六氟磷酸鹽
DBU	1,8-二氮雜雙環[5.4.0]十一碳-7-烯
DCE	1,2-二氯乙烷

DCM	二氯甲烷
DEA	二乙胺
Dess-Martin高碘烷	1,1,1-參(乙醯氧基)-1,1-二氫-1,2-苯碘醯-3-(1H)-酮
DIAD	偶氮二甲酸二異丙酯
DIPEA	N,N-二異丙基乙胺
DMAP	4-二甲基胺基吡啶
DMF	N,N-二甲基甲醯胺
DMSO	二甲亞碸
EDC	1-乙基-3-(3-二甲基胺基丙基)碳化二亞胺鹽酸鹽
eq	當量
Et_2O	二乙醚
Et	乙基
EtOH	乙醇
EtOAc	乙酸乙酯
HATU	2-(3H-[1,2,3]三唑并[4,5-b]吡啶-3-基)-1,1,3,3-四甲基異脲鎓六氟磷酸鹽(V)
HBTU	*N,N,N’,N’*-四甲基-*O*-(1*H*-苯并三唑-1-基)脲鎓六氟磷酸鹽
h	小時
HOBt	1-羥基苯并三唑水合物
IPA	異丙醇
KHMDS	六甲基二矽氮化鉀
LCMS	液相層析質譜分析
LiHMDS	六甲基二矽氮化鋰
Me	甲基
MeCN	乙腈
MeI	碘甲烷
MeOH	甲醇
min	分鐘
MS	質譜
Ms	甲烷磺醯基
MsCl	甲烷磺醯氯
NaHMDS	六甲基二矽氮化鈉
NBS	*N*-溴琥珀醯亞胺
NCS	*N*-氯琥珀醯亞胺
NMR	核磁共振光譜
NMP	N-甲基-2-吡咯啶酮
OAc	乙酸鹽
Pd-175	[^{t}BuBrettPhos Pd(烯丙基)]OTf，三氟甲磺酸烯丙基(2-二-第三丁基膦基-3,6-二甲氧基-2’,4’,6’-三異丙基-1,1’-聯苯)鈀(II)
Pd(dppf)Cl_2:DCM	[1,1’-雙(二苯基膦基)二茂鐵]二氯化鈀(II)二氯甲烷錯合物
Pd-PEPPSI-IPent	[1,3-雙(2,6-二-3-戊基苯基)咪唑-2-亞基](3-氯吡啶基)二氯化鈀(II)
$Pd_2(dba)_3$	參(二亞苄基丙酮)二鈀(0)
Pet. 醚	在60-80℃下沸騰之石油醚餾分
Ph	苯基

Pin	頻那醇
PyBOP	六氟磷酸苯并三唑-1-基-氧基-參-吡咯啶基-鏻
iPr	異丙基
nPr	正丙基
RockPhos Pd G3	甲烷磺酸[(2-二-第三丁基膦基-3-甲氧基-6-甲基-2’,4’,6’-三異丙基-1,1’-聯苯)-2-(2-胺基聯苯)]鈀(II)
rt	室溫
RuPhos Pd G3	甲烷磺酸(2-二環己基膦基-2’,6’-二異丙氧基-1,1’-聯苯)[2-(2’-胺基-1,1’-聯苯)]鈀(II)
RuPhos Pd G4	甲烷磺酸根(2-二環己基膦基-2’,6’-二-異丙氧基-1,1’-聯苯)(2'-甲基胺基-1,1’-聯苯-2-基)鈀(II)
RuPhos	2-二環己基膦基-2’,6’-二異丙氧基聯苯
sat.	飽和
SCX	強陽離子交換濾筒
SEM-Cl	2-(三甲基矽烷基)乙氧基甲基氯
SFC	超臨界流體層析
STAB	三乙醯氧基硼氫化鈉
SWFI	無菌注射用水
T3P	丙烷膦酸酐
TBAB	四-正丁基溴化銨
TBAF	四-正丁基氟化銨
TDAI	四-正丁基碘化銨
TBDMS	*第*三丁基二甲基矽烷基
TBME	*第*三丁基甲醚
TBDPS	*第*三丁基二苯基矽烷基
TCFH	氯-N,N,N',N'-四甲基甲脒鎓六氟磷酸鹽
THF	四氫呋喃
TEA	三乙胺
TFA	三氟乙酸
XantPhos	4,5-雙(二苯基膦基)-9,9-二甲基
XantPhos Pd G4	鈀, [[5-(二苯基膦基)-9,9-二甲基-9H-　　-4-基]二苯基膦-κP](甲烷磺酸根-κO)[2’-(甲基胺基-κN)[1,1’-聯苯]-2-基-κC]-, (SP-4-3)-
Z	胺基甲酸苄酯

【0981】 除非另有規定，否則所有反應均在氮氣氛圍下進行。

【0982】 氫化通常使用H-Cube®反應器(由Thalesnano, Inc, Hungary製造)進行。

【0983】 提及微波之使用，微波反應器、微波加熱及微波輻射均指CEM Discover微波反應器之使用。

【0984】 在具有Bruker Avance II或Avance III控制台之Bruker (500MHz或400MHz)光譜儀上或在Jeol 400 MHz上記錄^{1}H NMR譜，且以化學位移(ppm)進行報告。應理解，當任何化合物中存在可交換質子時，^{1}H NMR譜中之質子數可能不精確地對應於本文所合成之任何化合物之結構中的質子數。

【0985】 使用LCMS在選自以下之適當條件下獲得分子離子：

• 配備有具有電噴霧電離(ESI)之Waters Acquity QDa質譜儀的Waters Acquity H-Class LC系統。Waters Acquity UPLC BEH C18 2.1 x 50 mm 1.7 μm管柱。移動相A：- 0.1%甲酸/CH_3CN，移動相B：- 0.1%甲酸/水。流動速率1.0 mL/min，歷經3 min梯度2-98% B。

• 在Waters Acquity UPLC系統上進行UPLC-MS分析，該系統由Acquity I-Class樣品管理器-FL、Acquity I-Class二元溶劑管理器及Acquity UPLC管柱管理器組成。使用Acquity UPLC PDA偵測器(自210至400 nm進行掃描)進行UV偵測，同時使用Acquity QDa偵測器(自100 – 1250 Da進行質量掃描；同時正模式及負模式)實現質量偵測，且使用Acquity UPLC ELS偵測器實現ELS偵測。Waters Acquity UPLC BEH C18管柱(2.1 × 50 mm, 1.7 μm)。通常，移動相A：-0.1% v/v/水；移動相B 0.1% v/v甲酸/MeCN；流動速率0.8 mL/min；歷經4 min梯度5-95% B。應理解，可根據需要使用此方法之變化。

【0986】 應理解，替代條件(諸如管柱、流動速率範圍、溶劑、調節劑及pH之選擇)可用於LCMS以便分離及獲得質譜。

【0987】 通常在『矽石』(用於層析之矽膠，0.035至0.070 mm (220至440目) (例如Merck矽膠60))上進行急驟層析，且高達10 p.s.i之施加氮氣壓力加速管柱溶離。或者，使用預準備之矽膠濾筒，例如來自Silicycle之預填充SiliaSep™管柱或來自

Biotage之Sfär C18 D－Duo 100 Å 30 μm管柱。典型條件包括例如18 200 mL/min之流動速率範圍，以及0 225 PSI之施加壓力範圍。己烷、EtOAc、DCM、MeOH用作正相層析純化之移動相。MeOH、MeCN、含10 mM甲酸銨pH 4之H2O及含10 mM碳酸氫銨pH 10之H2O緩衝液用作逆相層析之移動相。應理解，替代條件(諸如流動速率範圍、施加壓力、溶劑及pH)可用於常規層析以便分離及純化本文所合成之化合物。

〔0988〕術語「製備型HPLC」係指逆相製備型HPLC純化。使用配備有具有電噴霧電離(ESI)之Waters Acquity QDa質量偵測器之Waters AutoPurification HPLC/MS系統進行製備型HPLC。典型條件為Waters SunFire Prep C18 OBD 19 x 250 mm 5 μm管柱。移動相A：0.1%甲酸/水，移動相B：0.1%甲酸/MeCN。流動速率20 ml/min，歷經20 min梯度2-98% B。應理解，替代條件(諸如管柱、流動速率範圍、溶劑、調節劑及pH之選擇)可用於製備型HPLC以便分離及純化本文所合成之化合物。

〔0989〕凍乾(或冷凍乾燥)之程序通常為此項技術中熟知的。通常，將物質溶解於水中，必要時添加最少量之MeCN以幫助溶解，且通常藉由在-78℃之冷浴中快速冷卻使其冷凍。*在真空中*將所得冷凍固體混合物蒸發至乾。

〔0990〕術語「濃縮」及「蒸發」係指使用旋轉蒸發器使溶劑在減壓下蒸發，必要時加熱。

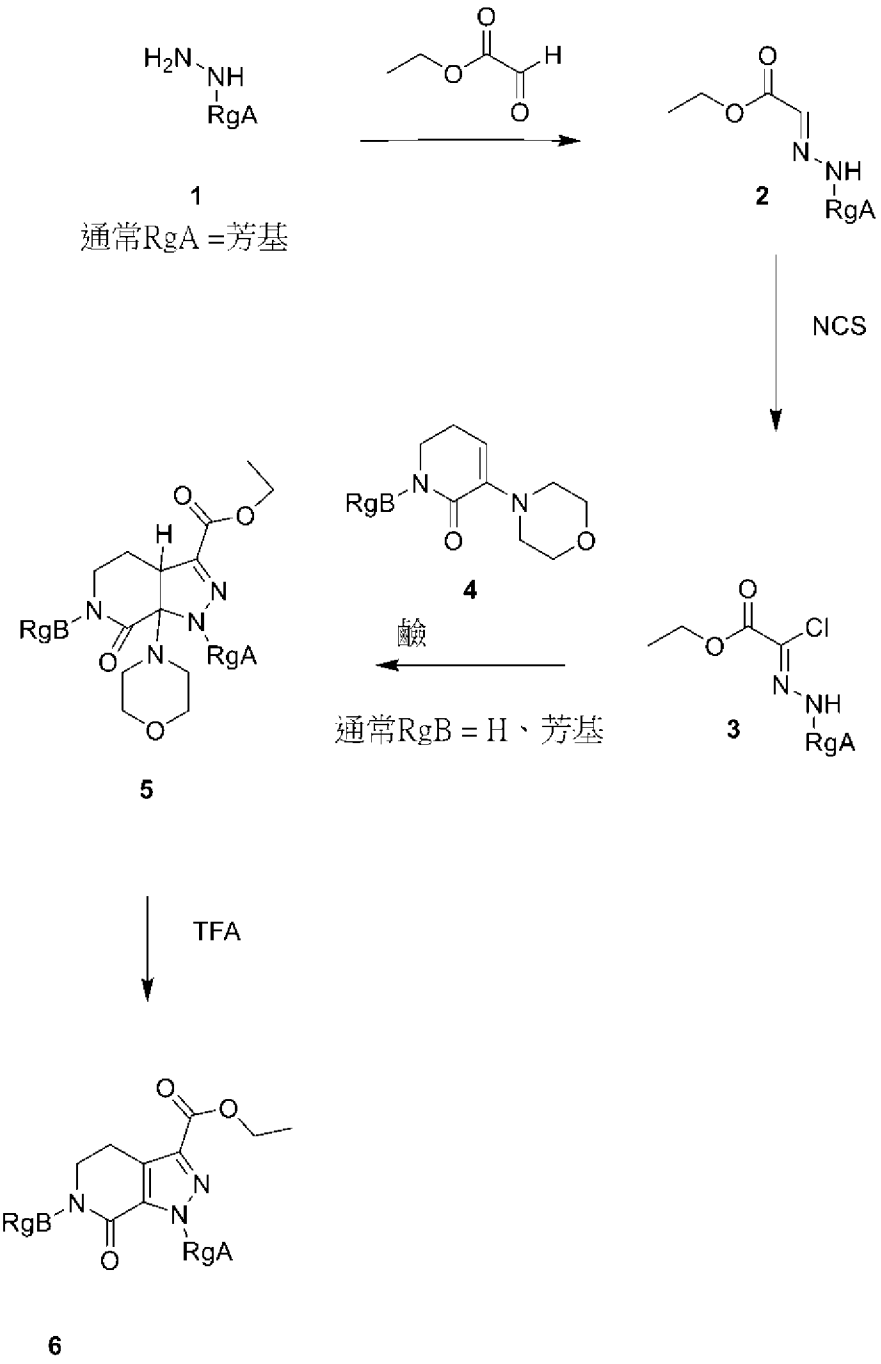
〔0991〕所有溶劑及商業試劑均按原樣使用。

〔0992〕使用諸如Dotmatics Studies Notebook或ChemDraw (PerkinElmer)之自動化軟體生成IUPAC化學名稱。藉由以下方法產生之化合物可以鹽形式進行分離。然而，本文所使用之化合物命名通常係指不含任何鹽相關離子之化合物。

【0993】 可使用習知合成方法，例如但不限於以下一般流程中所概述之途徑來製備本文所述之實例化合物。

一般流程

【0994】 一般流程1-5概述某些實例化合物之合成途徑，且RgA、RgB、RgC、RgD及RgE係指實例所需之各種取代基。起始材料之可用性以及RgA、RgB、RgC、RgD及RgE之反應性/敏感性可決定由熟習此項技術者選擇之途徑。



一般流程1

【0995】 一般流程1之化學反應已公開於WO2003049681A2中。肼(諸如**1**，其中RgA = 芳基)與乙醇酸酯(在此情況下由乙醇酸乙酯例示)通常在THF中在0-25℃下反應，其中乙基起到保護基之作用。替代保護基可與不同去保護條件一起使用，使得可應用正交保護基策略。例如，Peter G. M. Wuts在「Greene’ s Protective Groups in Organic Chemistry」John Wiley and Sons, 第5版, 2014中描述了不同保護基之程序。所得腙**2**與氯化劑(諸如NCS)通常在rt下在溶劑(諸如THF)中反應，生成氯腙**3**。在0℃下在EtOAc中用鹼(諸如TEA)處理，或在85℃下在二噁烷中用K_2CO_3處理，產生腈亞胺，該腈亞胺使得能夠與親偶極試劑(諸如**4** (RgB = H，芳基))發生環加成，生成中間體**5**。可藉由通常在溶劑(諸如DCM)中使用TFA消除嗎啉來生成所需4.5-二氫-吡唑并[3,4-c]吡啶-2-酮衍生物**6**。衍生物**6**可用作關鍵中間體，其中如在稍後描述之本發明之特定實例中，RgB為四氫異喹啉，且隨後將羧酸酯官能基精心製成所需化合物。

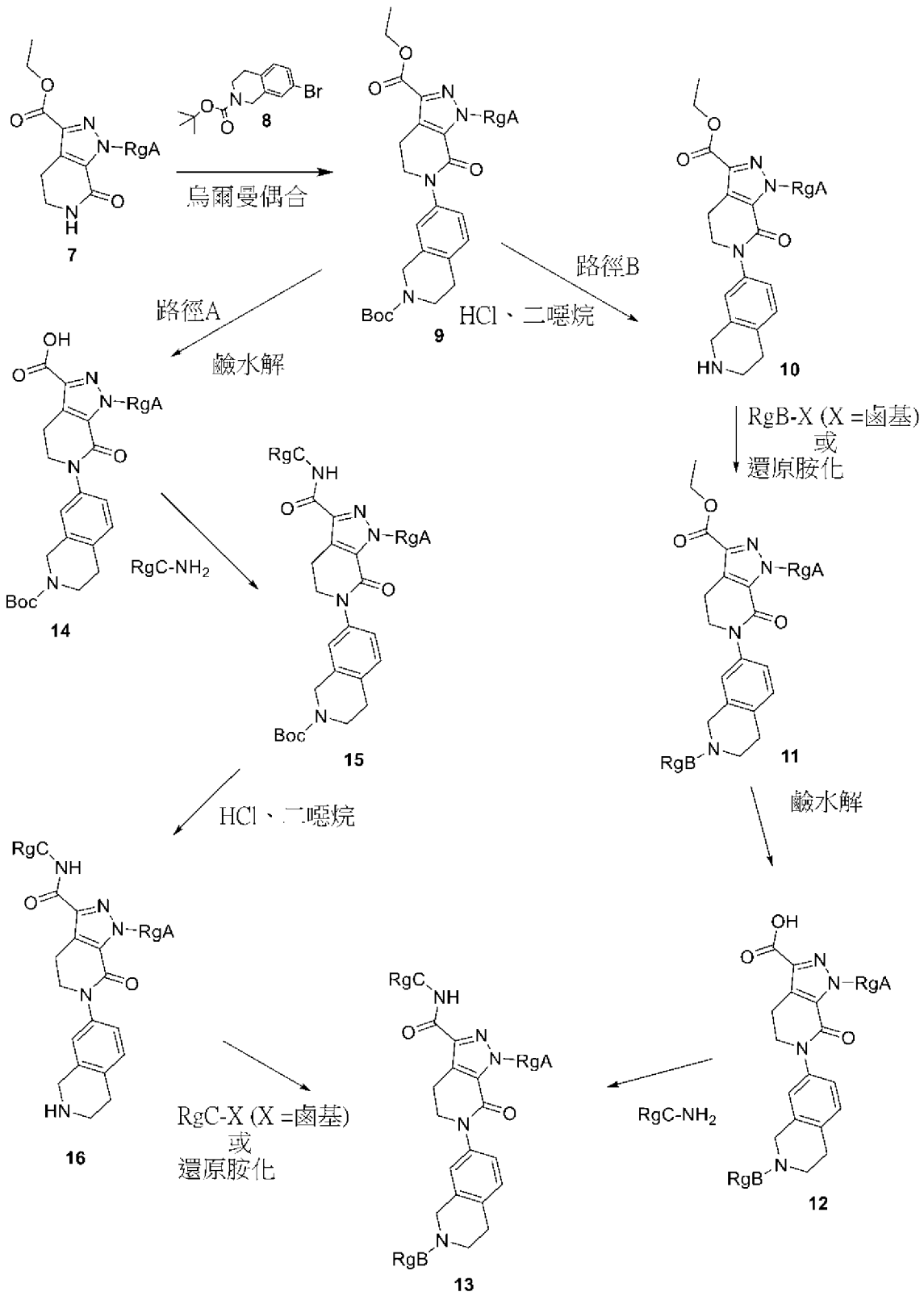
【0996】 或者，當需要進一步精心製成RgB基團以及精心製成羧酸酯官能基時，這可經由一般流程2中所述之化學方法根據特定實例所需之路徑A或路徑B來實現。一般流程2說明了Boc保護基之使用。可使用替代保護基。例如，由4.5-二氫-吡唑并[3,4-c]吡啶-2-酮衍生物**7**與Boc保護之四氫異喹啉衍生物**8**的烏爾曼偶合(例如CuI、K_2CO_3、1,10-菲咯啉、DMSO、130℃)獲得經保護之中間體**9**。或者，鈀催化之交叉偶合反應可用於此步驟。鈀催化之交叉偶合之實例為Buchwald偶合。例如，使用BrettPhos Pd G3、BrettPhos Pd G4或RuPhos Pd G3催化劑在鹼(諸如NaOtBu、Cs_2CO_3或KHMDS)存在下在溶劑(諸如1,4-二噁烷或THF)進行Buchwald偶合。在路徑B中，乙酯**9**鹼水解為羧酸**14**通常使用LiOH在水/THF中在rt下進行。與

RgC形成醯胺以生成15以及使Boc基團去保護以生成16可使用多種條件(均為此項技術中一般已知的)進行，例如在rt下在DCM中與HBTU/TEA進行醯胺偶合且使用HCl在1,4-二噁烷中進行去保護。最終，可藉由使用鹵化物RgC-X進行烷基化或藉由用醛或酮進行還原胺化程序來實現形成烷基化四氫喹啉衍生物16之反應。通常，使用烷基鹵化物Rg-X之烷基化條件需要鹼(諸如TEA)且在極性溶劑(諸如DMF)中進行。還原胺化條件利用各種硼烷還原試劑來還原中間亞胺物質，例如STAB。流程2中之路徑A描述了與路徑B相同之轉換，除了次序不同。

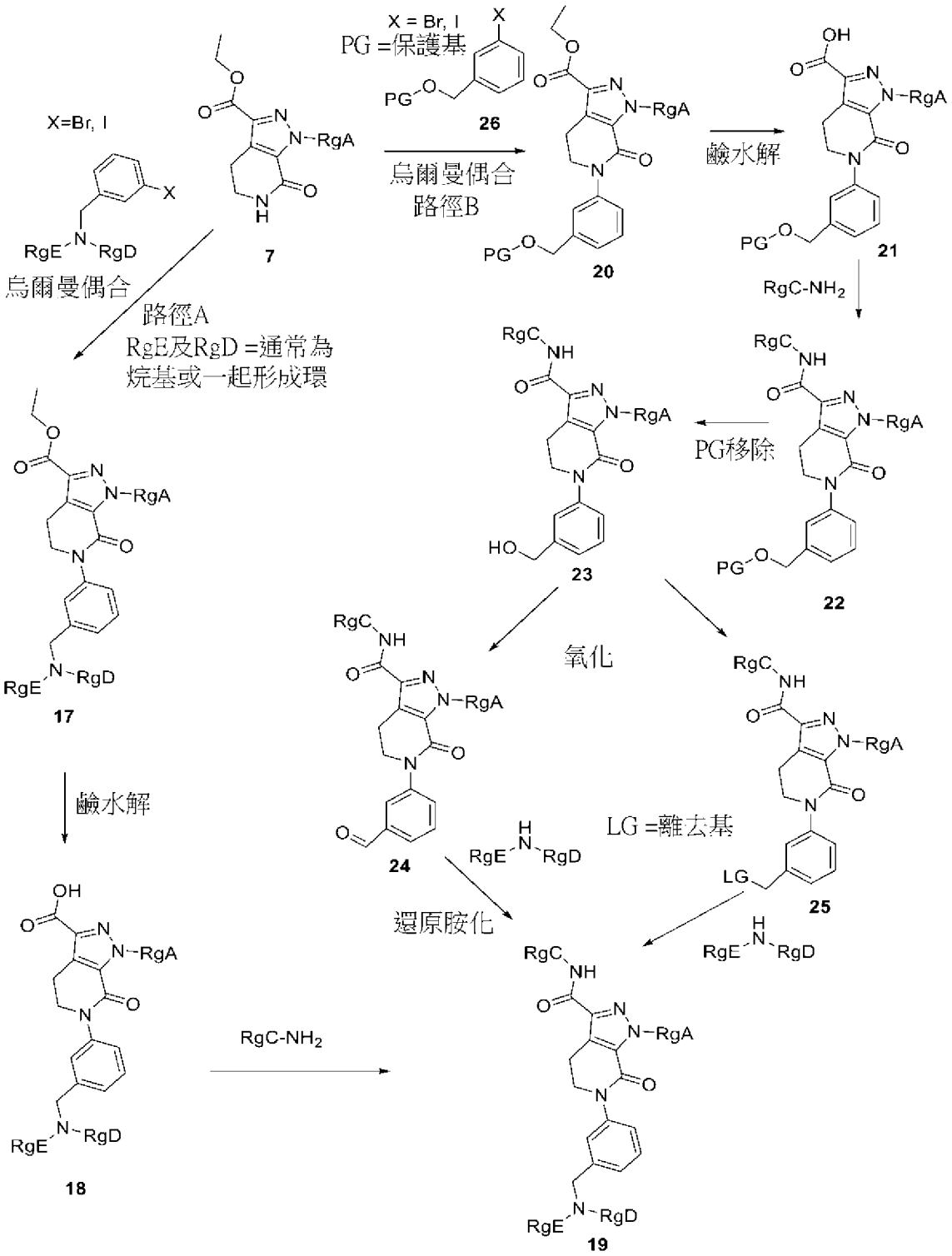
【0997】 一般流程3顯示實例19之合成，其中RgB不為四氫異喹啉且以關鍵中間體7為起始物。中間體7由乙酯例示，其中乙基起到保護基之作用。可使用替代保護基，如例如Peter G. M. Wuts在「Greene’ s Protective Groups in Organic Chemistry」John Wiley and Sons, 第5版, 2014中所述。路徑A描述了烏爾曼偶合(通常為CuI、K_2CO_3、1,10-菲咯啉、DMSO、130℃)，生成具有一步安裝之所需-N(RgE)(RgD)部分之酯17。或者，鈀催化之交叉偶合反應可用於此步驟。鈀催化之交叉偶合之實例為Buchwald偶合。例如，使用BrettPhos Pd G3、BrettPhos Pd G4或RuPhos Pd G3催化劑在鹼(諸如NaOtBu、Cs_2CO_3或KHMDS)存在下在溶劑(諸如1,4-二噁烷或THF)進行Buchwald偶合。當如一般流程3中所例示，使用乙基保護基時，使用鹼水解來移除保護基，通常為THF/水中之LiOH，生成18。若使用替代保護基，則適當去保護條件例如由Peter G. M. Wuts在「Greene’ s Protective Groups in Organic Chemistry」John Wiley and Sons, 第5版, 2014中描述。隨後與RgC-NH_2形成醯胺，這可使用多種偶合反應進行，諸如在rt下在DCM中使用HBTU/TEA。

【0998】 路徑B說明了正交保護基策略且可用於允許-N(RgE)(RgD)部分之額外可能性，因為它在該次序之最終步驟中進行安裝。第一步涉及用經保護之

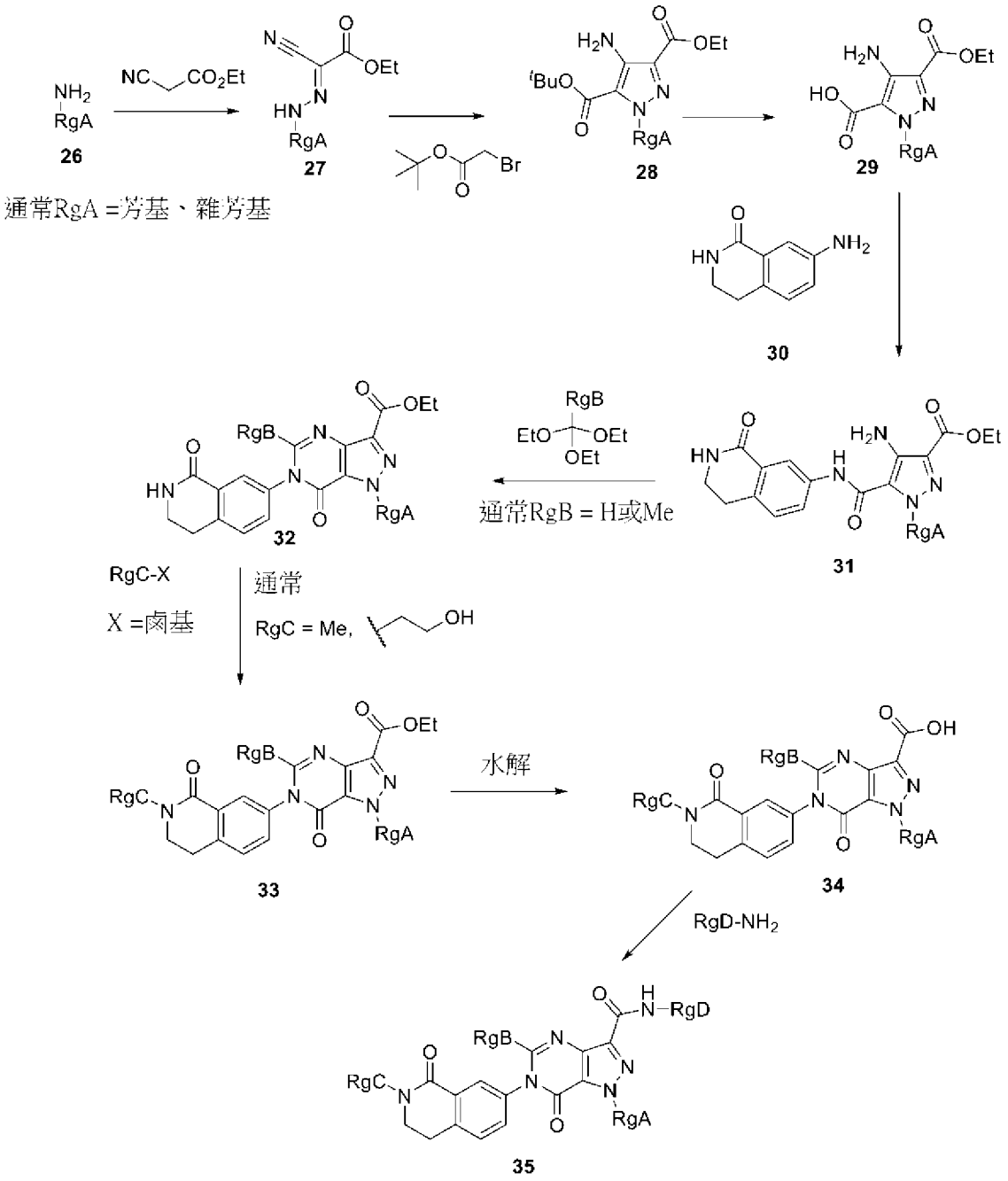
苯甲醇**26**進行烏爾曼偶合(通常為CuI、K_2CO_3、1,10-菲咯啉、DMSO、130℃)以生成酯**20**。或者，可使用鈀催化之交叉偶合。通常，保護基為TBDMS，但亦可使用如例如Peter G. M. Wuts在「Greene’ s Protective Groups in Organic Chemistry」中所述之其他保護基。在如一般流程3中所示例，正交保護基為乙酯時，使用鹼水解來移除保護基，通常為THF/水中之LiOH以生成**21**。隨後與$RgC\text{-}NH_2$形成醯胺，這可使用多種偶合反應進行，諸如在rt下在DCM中使用HBTU/TEA，生成**22**。保護基PG之移除生成苯甲醇**23**，例如當保護基為TBDMS時，這可在THF中用TBAF實現。醇**23**可經氧化成醛**24**，例如使用Dess-Martin高碘烷或藉由使用MnO_2，從而允許隨後用一系列胺HN(RgE)(RgD)進行還原胺化，且其可使用多種硼烷還原試劑(例如STAB)來還原中間亞胺物質，生成**19**。或者，苯甲醇**23**可轉化為合適離去基，例如使用MsCl及鹼獲得之甲磺酸酯，且在S_N2反應中與胺HN(RgE)(RgD)反應(通常在DMF中使用K_2CO_3)，再次生成**19**。


烏爾曼偶合
路徑A
鹼水解
路徑B
HCl、二噁烷
RgB-X (X =鹵基)
或
還原胺化
RgC-NH2
HCl、二噁烷
RgC-X (X =鹵基)
或
還原胺化
鹼水解
RgC-NH2

一般流程2


X = Br, I
PG =保護基
26
X=Br, I
烏爾曼偶合
路徑B
鹼水解
烏爾曼偶合
路徑A
RgE及RgD =通常為
烷基或一起形成環
7
20
21
RgC-NH2
PG移除
23
22
氧化
17
鹼水解
24
25
LG =離去基
還原胺化
18
RgC-NH2
19

一般流程3



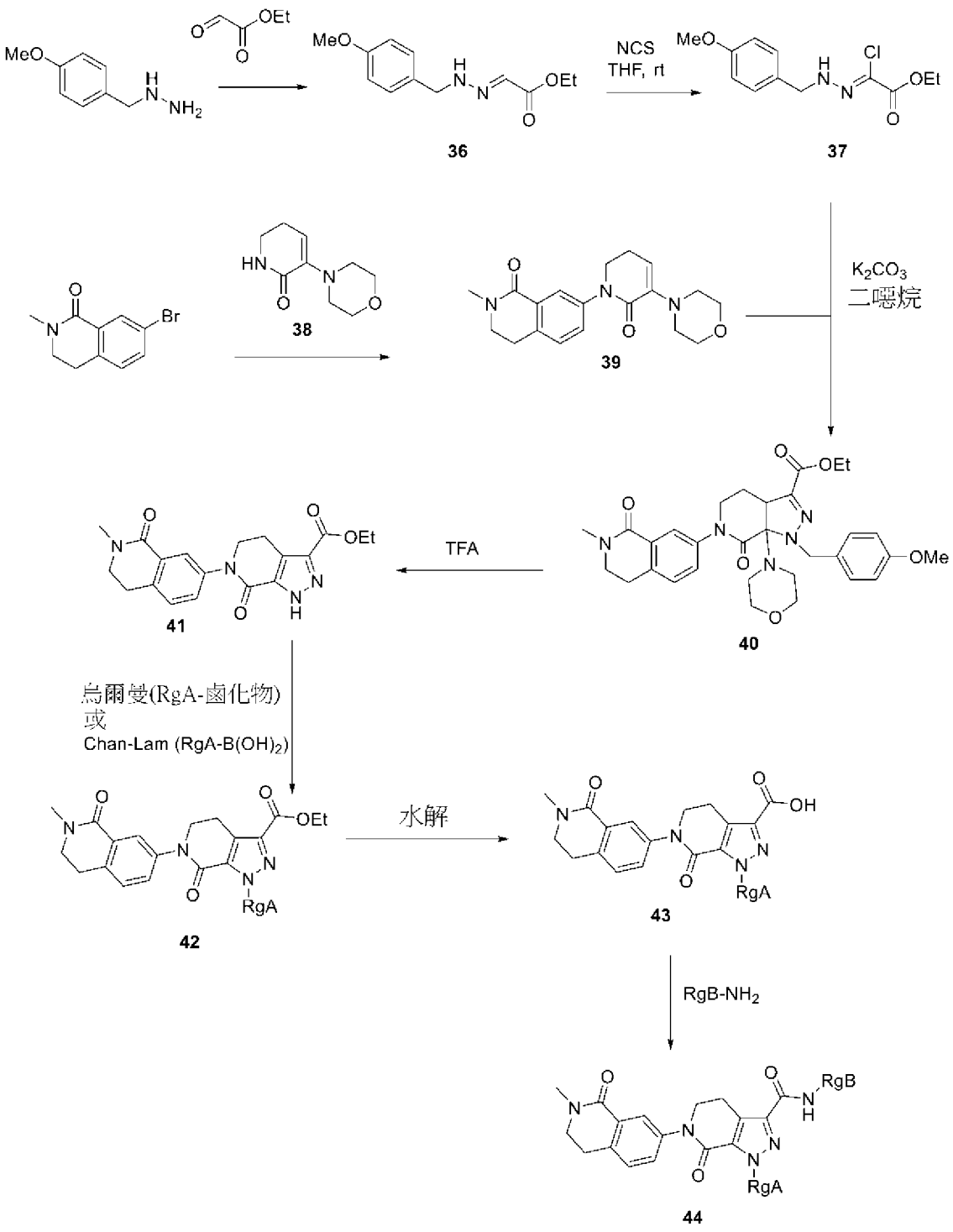
一般流程4

【0999】一般流程4顯示用於製備表3a、3b及3c中例示之7-側氧基-吡唑并[4,3-d]嘧啶之合成流程。通常，在化合物26中，RgA為芳基或雜芳基，且使用含$NaNO_2$之HCl (aq)進行重氮化，且與氰基乙酸乙酯及NaOAc反應，生成腙中間體27。或者(流程4中未顯示)，可使用丙二腈替代氰基乙酸乙酯以提供酯27之腈類似物。隨後與溴乙酸第三丁酯反應且環化，生成吡唑中間體28，其中第三丁酯

經選擇性水解(含HCl之二噁烷，在rt下)為中間體29。與30偶合(例如在rt下使用HATU及DIPEA)允許連接異喹啉酮片段。或者(流程4中未顯示)，有可能偶合經保護形式之異喹啉(通常在氮上具有Boc保護)。用原乙酸三乙酯(其中RgB = Me)或原甲酸三乙酯(其中RgB = H)進行環化，生成7-側氧基-吡唑并[4,3-d]嘧啶中間體32。中間體32可在醯胺位置處經RgC-X烷基化(典型條件為NaH、DMF、MeI，在rt下)，生成衍生物33。在水解(例如，在rt下在水/THF中使用LiOH)成羧酸34後，與RgD-NH_2形成所需醯胺產物35，這可使用此項技術中一般已知之多種偶合反應來進行，諸如在rt下在DCM中使用HBTU/TEA。

【1000】 對於一些本發明化合物，諸如表2a、2b及2c中所示之實例，能夠在合成流程之後期階段添加官能基以允許方便地合成各種衍生物係有用的。因此，流程5顯示流程1之變化，其中化合物41可用作共同中間體來合成一系列芳基或雜芳基1-取代之4,5-二氫-吡唑并[3,4-c]吡啶-2-酮。在此情況下，4-甲氧基苄基肼通常在0 - 25℃下在THF中與2-側氧基乙酸乙酯反應形成腙36，其中乙基作為保護基存在。替代保護基可與不同去保護條件一起使用，使得可應用正交保護基策略。例如，Peter G. M. Wuts在「Greene’ s Protective Groups in Organic Chemistry」John Wiley and Sons, 第5版, 2014中描述了不同保護基之程序。腙36與氯化劑(諸如NCS)通常在rt下在溶劑(諸如THF)中反應，生成氯腙37。在0℃下在EtOAc中用鹼(諸如TEA)處理，或在85℃下在二噁烷中用K_2CO_3處理，產生腈亞胺(未示)，該腈亞胺使得能夠與親偶極試劑(諸如39)發生環加成，得到中間體40。可藉由通常在溶劑(諸如DCM)中使用TFA消除嗎啉且同時移除4-甲氧基苄基來生成所需4,5-二氫-吡唑并[3,4-c]吡啶-2-酮共同中間體41。在本發明化合物中，如表2a、2b及2c中所例示，RgA可為芳基或雜芳基且可使用烏爾曼反應(M.B. Smith, J. March

「March’ s Advanced Organic Chemistry」第6版, 2007, Wiley - Blackwell, 897-898)或Chan-Lam反應(K. S. Rao, T. Wu, Chan - Lam coupling reactions: synthesis of heterocycles, *Tetrahedron*, 第68卷, 第38期, 2012, 7735-7754, https://doi.org/10.1016/j.tet.2012.06.015.) 來提供**42**。隨後水解以移除乙基保護基(例如在rt下在水/THF中使用LiOH)來生成**43**，且與適當胺RgB-NH_2偶合(使用此項技術中一般已知之條件，諸如在rt下在DCM中使用HBTU/TEA)，生成所需醯胺化合物**44**。

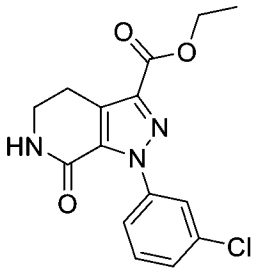


流程5

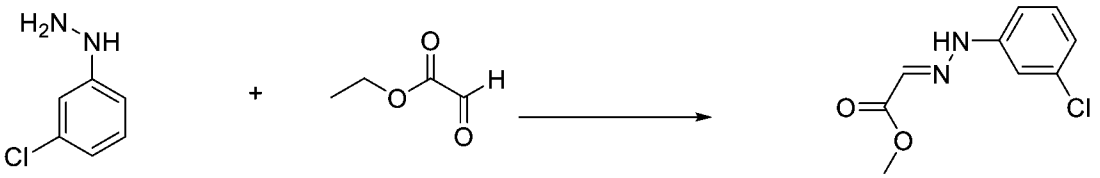
合成中間體

中間體1

1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



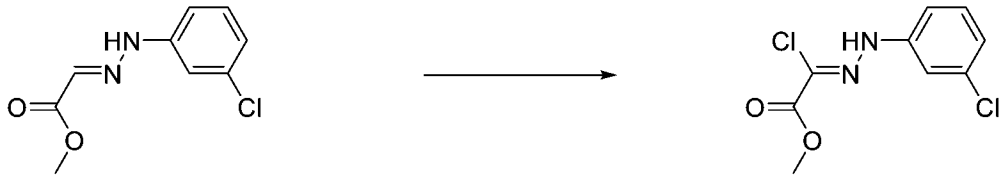
2-[(3-氯苯基)亞肼基]乙酸乙酯



【1001】 將3-氯苯肼鹽酸鹽 (500 mg，2.79 mmol)溶解於THF (25 mL)中，且添加TEA (467 μL，3.35 mmol)。在0℃下逐滴添加2-側氧基乙酸乙酯(甲苯中之50%溶液) (609 μL，3.07 mmol)。將混合物在rt下攪拌7天。過濾混合物且蒸發濾液。經由急驟層析(矽石，0-2% MeOH/DCM)純化殘餘物，得到產物 (291 mg，46%產率)。

【1002】 $[M+H]^+$ = 227.0

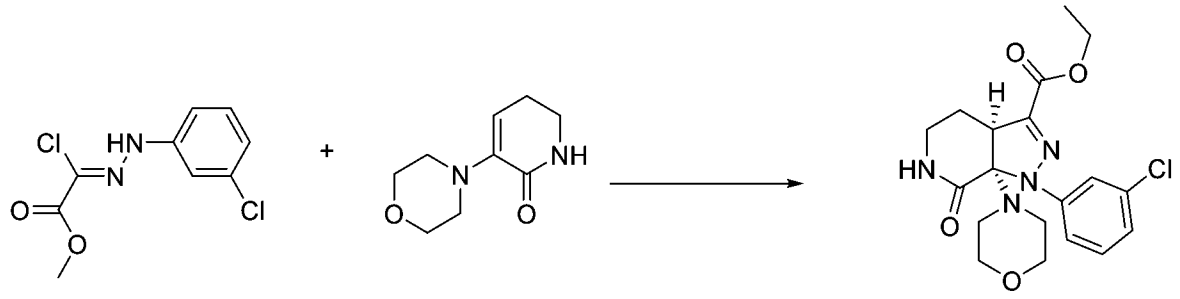
2-氯-2-[(3-氯苯基)亞肼基]乙酸乙酯



【1003】 在0℃下向2-[(3-氯苯基)亞肼基]乙酸乙酯 (291 mg，1.28 mmol)於無水THF (20 mL)中之溶液中添加NCS (206 mg, 1.54 mmol)且將混合物在rt下攪拌18 h。使溶劑蒸發且藉由急驟層析(矽石，0-50% EtOAc/Pet. 醚)純化殘餘物，得到產物 (331 mg，99%產率)。

【1004】 $[M+H]^+$ = 261.0

(3aS,7aR)-1-(3-氯苯基)-7a-嗎啉-4-基-7-側氧基-3a,4,5,6-四氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯

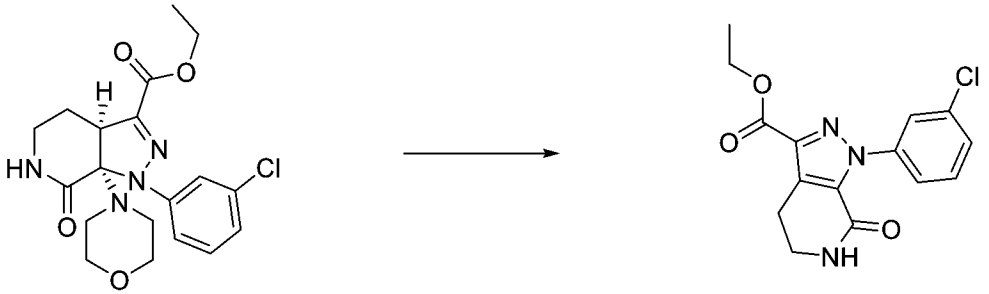


【1005】 將2-氯-2-[(3-氯苯基)亞肼基]乙酸乙酯 (331 mg，1.27 mmol)溶解於EtOAc (10 mL)中。將溶液冷卻至0℃且添加3-(嗎啉-4-基)-1,2,5,6-四氫吡啶-2-酮 (508 mg，1.39 mmol)，接著添加TEA (442 μL，3.17 mmol)。歷經30 min將混合物加溫至rt且接著在回流下加熱持續18 h。將混合物冷卻至rt，用EtOAc (10 mL)稀釋且用水(1 x 30 mL)洗滌。用EtOAc萃取水層。用鹽水(1 x 30 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥($MgSO_4$)且蒸發。急驟層析(矽石，0-50% EtOAc/Pet. 醚)得到呈外消旋混合物形式之產物(295 mg，57%產率)。

【1006】 $[M+H]^+$ = 407.1

【1007】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.40 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.86 - 1.99 (1H, m), 2.33 - 2.47 (3H, m), 2.61 (2H, s), 3.06 - 3.20 (2H, m), 3.66 - 3.84 (4H, m), 4.01 (1H, d, J = 6.5 Hz), 4.36 (2H, q, J = 6.9 Hz), 6.90 - 7.02 (1H, m), 7.14 - 7.23 (1H, m), 7.81 (2H, d, J = 1.4 Hz) 未觀察到NH質子

1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



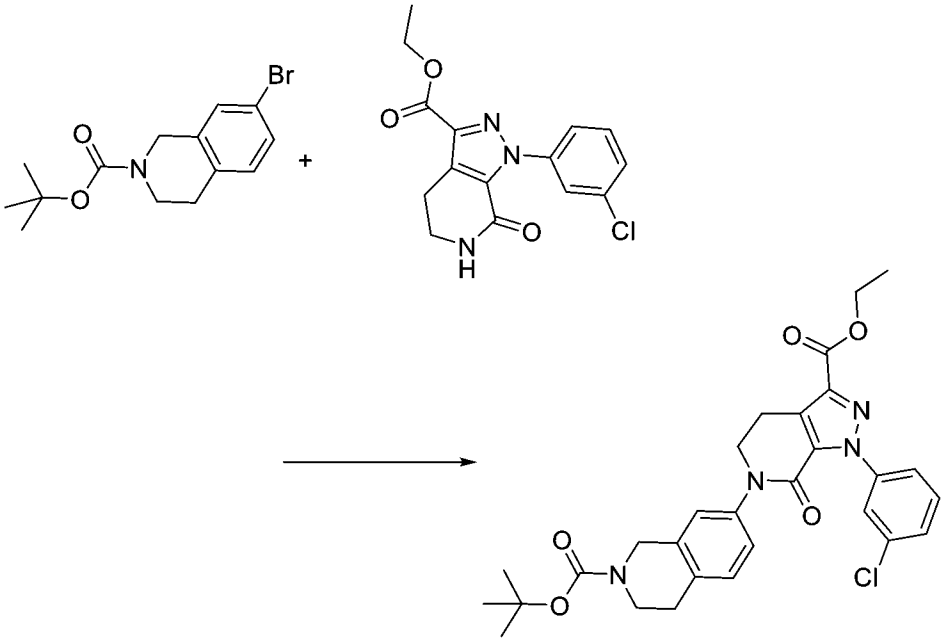
【1008】 將(3aS,7aR)-1-(3-氯苯基)-7a-嗎啉-4-基-7-側氧基-3a,4,5,6-四氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(呈外消旋混合物形式) (295 mg，0.73 mmol)溶解於DCM (2 mL)中。添加 TFA (500 μL)且將混合物在rt下攪拌30 min。將混合物蒸發且經由急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/Pet. 醚)純化，得到產物(143 mg，62%產率)。

【1009】 $[M+H]^+$ = 320.0

【1010】 ^{1}H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.43 (3H, t, J = 7.1 Hz), 3.20 (2H, d, J = 7.0 Hz), 3.65 (2H, td, J = 6.8, 2.9 Hz), 4.45 (2H, d, J = 7.1 Hz), 5.71 (1H, s), 7.31 - 7.58 (3H, m), 7.58 - 7.85 (1H, m)

中間體2

7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



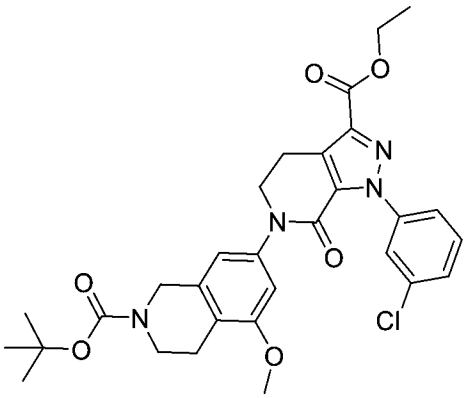
【1011】 將1-(3-氯苯基)-4,5,6,7-四氫-7-側氧基-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯 (1000 mg，3.13 mmol)溶解於DMSO (3 mL)中，添加1,10-菲咯啉 (113 mg，0.63 mmol)、Cu(I) I (655 mg，3.44 mmol)、7-溴-3,4-二氫異喹啉-2(1H)-甲酸第三丁酯 (1074

mg，3.44 mmol)及K_2CO_3 (865 mg，6.26 mmol)。將反應混合物在130℃下攪拌1 h，之後用EtOAc (70 mL)稀釋該混合物。用水(3 x 30 mL)、鹽水(1 x 30 mL)洗滌此溶液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，1% MeOH/$CHCl_3$)純化殘餘物，得到產物(1200 mg，70%產率)。

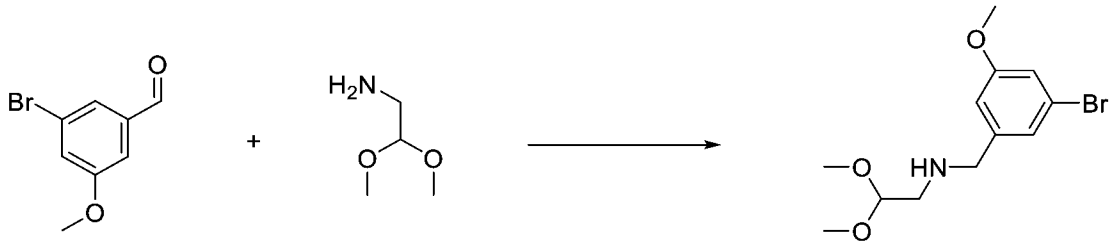
【1012】 $[M+H+Na]^+ = 575.1$

中間體3

7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-5-甲氧基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



N-[(3-溴-5-甲氧基-苯基)甲基]-2,2-二甲氧基-乙胺



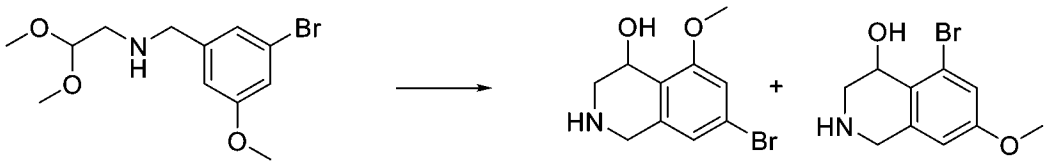
【1013】 向3-溴-5-甲氧基苯甲醛(1000 mg，4.65 mmol)於甲苯(15 mL)中之溶液中添加胺基乙醛二甲基縮醛(538 mg，5.12 mmol)且將所得混合物在120℃下加熱18 h。冷卻後，將混合物濃縮，再溶解於MeOH (15 mL)中且用$NaBH_4$ (202 mg，5.35 mmol)處理，同時在冰/水浴中冷卻。加溫至rt後，將反應攪拌3 h。用冰/水(20

mL)淬滅混合物且用EtOAc (3x50 mL)萃取。用鹽水(50 mL)洗滌合併之有機物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮，得到產物(1370 mg，91%產率)。

【1014】 $[M+H]^+$ = 304.1/306.1

【1015】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.49 (2H, d, J = 5.5 Hz), 3.20 (6H, s), 3.62 (2H, s), 3.71 (3H, s), 4.35 (1H, t, J = 5.5 Hz), 6.77 - 6.92 (1H, m), 6.95 (1H, dd, J = 2.4, 1.8 Hz), 7.00 - 7.11 (1H, m)

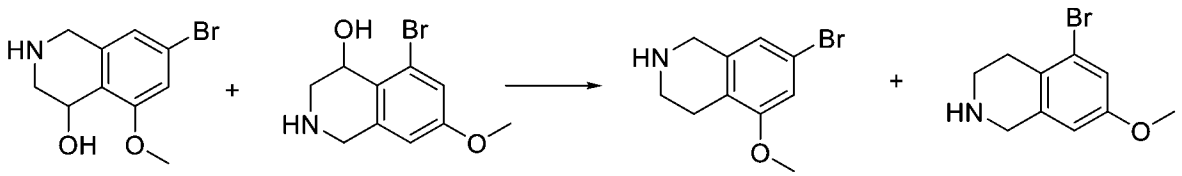
7-溴-5-甲氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-4-醇鹽酸鹽



【1016】 將N-[(3-溴-5-甲氧基-苯基)甲基]-2,2-二甲氧基-乙胺(1370 mg，4.23 mmol)於6M HCl (aq) (3.0 mL，18.0 mmol)中之懸浮液在40℃下加熱18 h。將混合物濃縮，得到呈固體形式之7-溴-5-甲氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-4-醇鹽酸鹽及5-溴-7-甲氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-4-醇鹽酸鹽之混合物(1430 mg)，其無需純化即用於下一步驟。

【1017】 LCMS上之兩個產物峰均具有$[M+H]^+$ = 258.1/260.1.。

7-溴-5-甲氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉

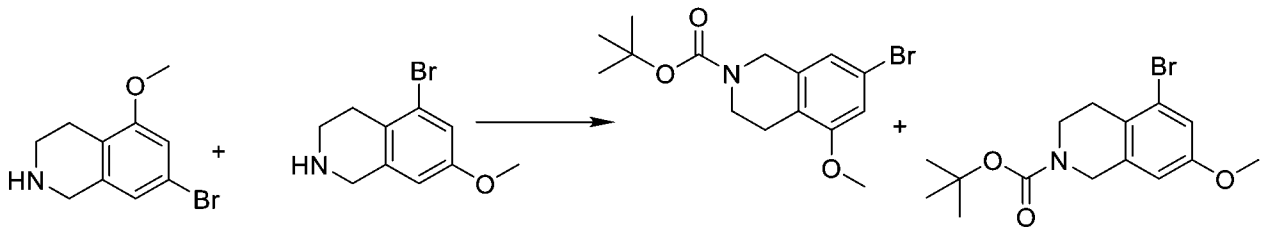


【1018】 用三乙基矽烷(1.5 mL，9.53 mmol)及TFA (2.8 mL，37.0 mmol)處理DCM (6.6 mL)中之含有7-溴-5-甲氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-4-醇及5-溴-7-甲氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-4-醇之混合物(1230 mg)。將混合物在40℃下加熱18 h，濃縮且

將殘餘物溶解於EtOAc (100 mL)中。此用飽和$NaHCO_3$(aq) (30 mL)、鹽水(30 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮，得到7-溴-5-甲氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉及5-溴-7-甲氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉之混合物(2120 mg)，其直接用於下一步驟。

【1019】 $[M+H]^+$ = 242.1/244.0

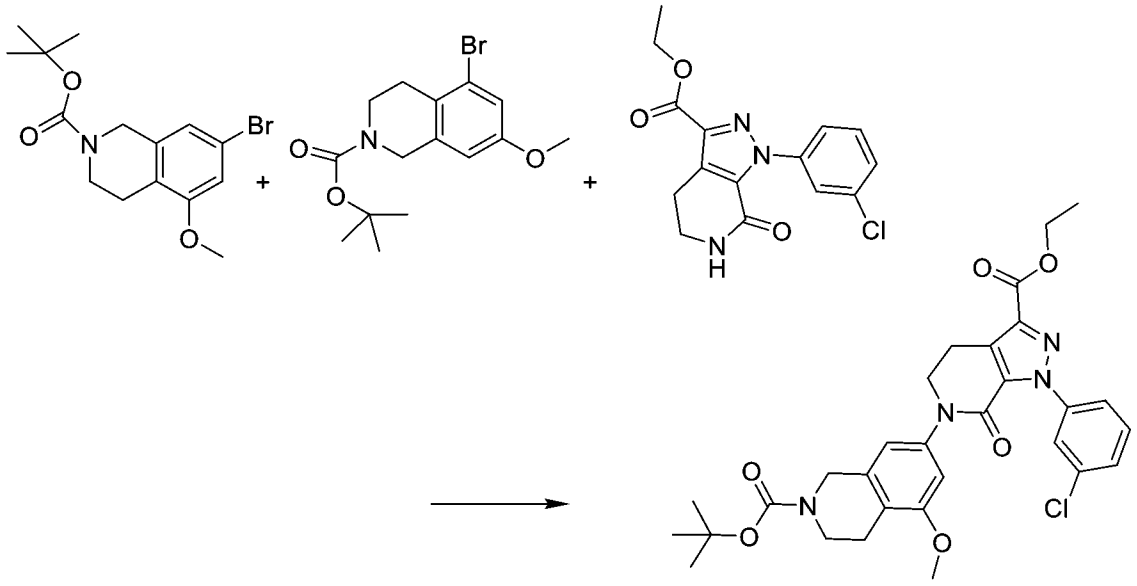
7-溴-5-甲氧基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



【1020】 相繼用TEA (4.3 mL，31.1 mmol)、Boc_2O (1604 mg，7.35 mmol)處理DCM (12 mL)中之7-溴-5-甲氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉及5-溴-7-甲氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉之混合物(2014 mg)，且將所得混合物在rt下攪拌18 h。用DCM (100 mL)稀釋混合物，用水(50 mL)、鹽水(50 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。急驟層析(矽石，0 - 80% EtOAc/異己烷)得到7-溴-5-甲氧基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯及5-溴-7-甲氧基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯之混合物(280 mg)，其直接用於下一步驟。

【1021】 $[M+H-Boc]^+$ = 242.0/244.0

7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-5-甲氧基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



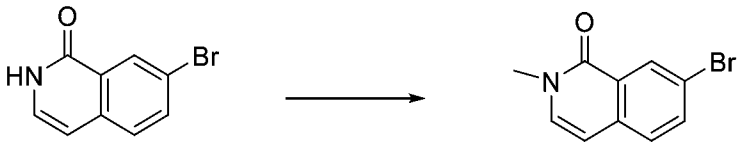
【1022】 將7-溴-5-甲氧基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯及5-溴-7-甲氧基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯之混合物(244 mg，0.392 mmol)及1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(190 mg，0.594 mmol)溶解於1,4-二噁烷(6 mL)中。添加Cu(I)I (23 mg，0.119 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷-二胺(34 mg，0.238 mmol)及磷酸三鉀(315 mg，1.49 mmol)且將所得混合物在100℃下攪拌72 h。用EtOAc (50 mL)稀釋混合物且用水(20 mL)及鹽水(20 mL)洗滌有機物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。急驟層析(矽石，0 - 80% EtOAc/異己烷)得到產物(88 mg，0.118 mmol，20%產率)。

【1023】 $[M+H - {}^{t}Bu]^{+}$ = 525.2/527.2

【1024】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.34 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.42 (9H, s), 2.60 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.76 (3H, s), 4.05 - 4.12 (2H, m), 4.36 (2H, q, J = 7.1Hz), 4.46 (3H, s), 6.77 (1H, d, J = 1.8 Hz), 6.83 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.48 - 7.65 (3H, m), 7.74 (1H, t, J = 1.8 Hz)

中間體4

7-溴-2-甲基-異喹啉-1-酮



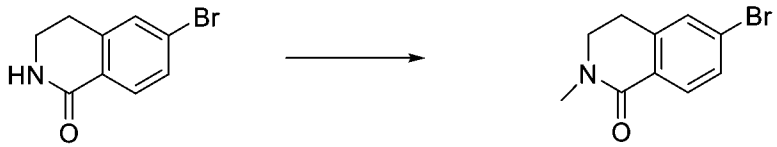
【1025】 在rt下向7-溴-1-羥基異喹啉(500 mg，2.23 mmol)於THF (20 mL)中之溶液中添加NaH (60%於礦物油中，107 mg，2.68 mmol)及MeI (0.42 mL，6.69 mmol)且將混合物在rt下攪拌4 h。用EtOAc (100 mL)稀釋溶液且用飽和NH_4Cl (aq)淬滅。在分離各層後，用EtOAc (2 x40 mL)萃取水層，且用生理食鹽水(40 mL)洗滌合併之有機層，乾燥(Na_2SO_4)且過濾。移除溶劑，生成產物。急驟層析(矽石，0 - 80% EtOAc/庚烷)得到產物(550 mg，91%產率)。

【1026】 $[M+H]^+$ = 238.0/240.0

【1027】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 3.51 (3H, s), 6.64 (1H, dd, J = 7.3, 0.7 Hz), 7.53 (1H, d, J = 7.3 Hz), 7.64 (1H, d, J = 8.5 Hz), 7.85 (1H, dd, J = 8.5, 2.2 Hz), 8.28 - 8.30 (1H, m)

中間體5

6-溴-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1-酮



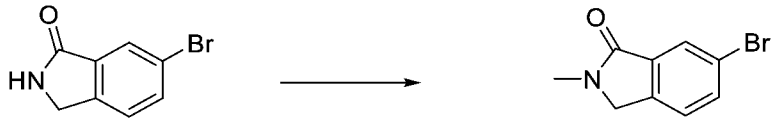
【1028】 在冰/水浴中冷卻之同時，向6-溴-3,4-二氫-2H-異喹啉-1-酮(500 mg，2.21 mmol)於無水DMF (11 mL)中之溶液中添加NaH (60%於礦物油中，115 mg，2.88 mmol)且將混合物在rt下攪拌1 h。逐滴添加MeI (0.18 mL，2.88 mmol)，且將反應攪拌1 h。添加飽和NH_4Cl (aq) (50 mL)，隨後添加EtOAc (120 mL)。用飽和NH_4Cl (aq) (10 mL)及鹽水(3 x 20 mL)洗滌EtOAc層，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。急驟層析(矽石，0-30% EtOAc/異己烷)得到產物(493 mg，93%產率)。

【1029】 $[M+H]^+$ = 240.0/242.0

【1030】 ^{1}H NMR (400 MHz, DMSO-d6) δ 2.96 – 3.00 (2H, m), 3.01 (3H, s), 3.50 – 3.58 (2H, m), 7.51 – 7.57 (2H, m), 7.77 (1H, d, J = 8.2 Hz)

中間體6

6-溴-2-甲基-異吲哚啉-1-酮



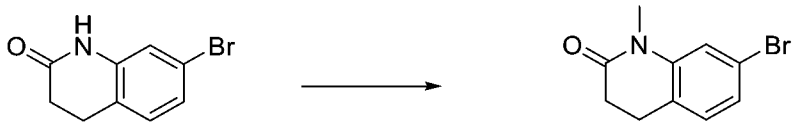
【1031】 在冰/水浴中冷卻之同時，向6-溴異吲哚啉-1-酮(500 mg，2.36 mmol)於無水DMF (40 mL)中之溶液中添加NaH (60%於礦物油中，113 mg，2.83 mmol)且將混合物攪拌15 min。逐滴添加MeI (402 mg，2.83mmol)且使反應逐漸加溫至rt且攪拌18 h。添加飽和NH_4Cl (aq) (254 mL)，隨後添加EtOAc (150 mL)。用飽和NH_4Cl (aq) (25 mL)及鹽水(50 mL)洗滌EtOAc層，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。急驟層析(矽石，0-80% EtOAc/異己烷)得到產物(288 mg，54%產率)。

【1032】 $[M+H]^+$ =226.1/228.1

【1033】 ^{1}H NMR (400 MHz, DMSO-d6) δ 3.07 (3H, s), 4.44 (2H, s), 7.55 – 7.59 (1H, m), 7.72 – 7.81 (2H, m)

中間體7

7-溴-1-甲基-3,4-二氫喹啉-2-酮



【1034】 在冰/水浴中冷卻之同時，向7-溴-3,4-二氫喹啉-2(1H)-酮(500 mg，2.21 mmol)於無水DMF (40 mL)中之溶液中添加NaH (60%於礦物油中，106 mg，2.65 mmol)且將混合物攪拌15 min。添加 MeI (377 mg，2.65 mmol)且使混合物逐漸加溫

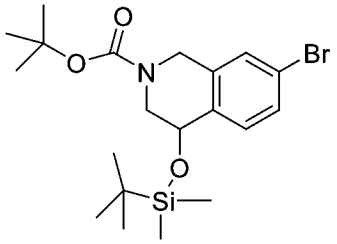
至rt且攪拌18 h。添加飽和NH_4Cl (aq) (254 mL)，隨後添加EtOAc (150 mL)。用飽和NH_4Cl (aq) (25 mL)及鹽水(30 mL)洗滌EtOAc層，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮，得到呈油狀之產物(580 mg，100%產率)。

【1035】 $[M+H]^+$ = 240.0/242.0

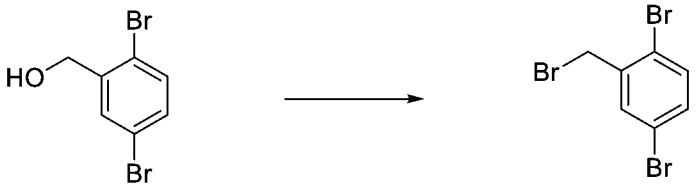
【1036】 ^1H NMR (400 MHz, DMSO-d6) δ 2.47 – 2.52 (2H, m), 2.75 – 2.82 (2H, m), 3.19 (3H, s), 7.11 – 7.17 (2H, m), 7.20 – 7.22 (1H, m)

中間體8

7-溴-4-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



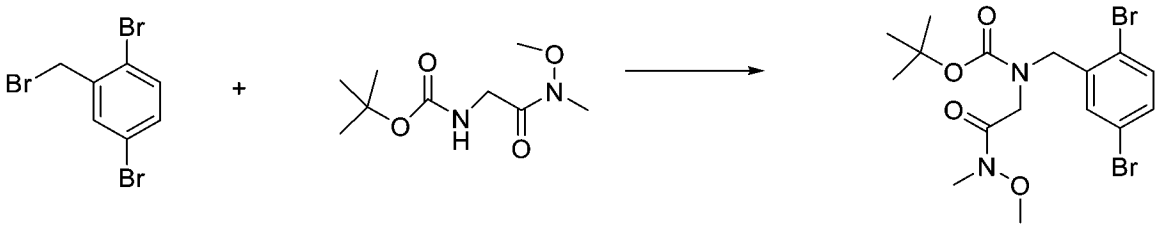
1,4-二溴-2-(溴甲基)苯



【1037】 將PBr_3 (0.89 mL，9.40 mmol)添加至(2,5-二溴苯基)甲醇(5.00 g，18.8 mmol)於DCM (125 mL)中之溶液中，同時在冰/水浴中冷卻，且攪拌，同時繼續冷卻2 h。使混合物加溫至rt且再攪拌20 h。添加水(150 mL)，且用DCM (3 × 25 mL)萃取混合物。合併DCM部分且乾燥(Na_2SO_4)。過濾且濃縮所得混合物，生成產物(5.01 g，81%產率)，其無需進一步純化即用於後續反應。

【1038】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 4.53 (2H, s), 7.24 - 7.33 (1H, m), 7.44 (1H, d, J = 8.5 Hz), 7.59 (1H, d, J = 2.4 Hz)。

N-[(2,5-二溴苯基)甲基]-N-[2-[甲氧基(甲基)胺基]-2-側氧基-乙基]胺基甲酸第三丁酯

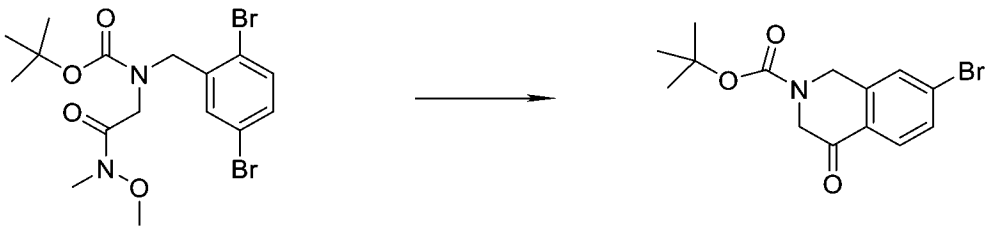


【1039】 在-40℃下將KHMDS (1M於THF中，16.4 mL，16.4 mmol)添加至DMF (25 mL)中。將混合物冷卻至-78℃且緩慢添加Boc-Gly-N(OMe)Me (3733 mg，17.1 mmol)於DMF (25 mL)中之溶液。接著將所得混合物在-78℃下攪拌15 min。緩慢添加1,4-二溴-2-(溴甲基)苯(4500 mg，13.7 mmol)於THF (25 mL)中之溶液，且將所得混合物在-78℃下攪拌1 h。添加飽和NH_4Cl (aq) (100 mL)且將所得混合物在攪拌下加溫至rt。將有機物萃取至EtOAc (2×250 mL)中，合併，用鹽水(3×300 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾，且濃縮。進行急驟層析(矽石，0 - 80% EtOAc/異己烷)，隨後與甲苯(5 × 20 mL)多次共沸，得到產物(5.74 g，83%產率)。

【1040】 $[M\text{-}Boc+H]^+$ = 365.0/367.0/368.9，具有1:2:1二溴分裂模式。

【1041】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.45 (9H, d, J = 18.2 Hz), 3.20 (3H, d, J = 1.3 Hz), 3.68 (3H, d, J = 17.2 Hz), 4.12 (2H, d, J = 57.4 Hz), 4.58 (2H, d, J = 29.3 Hz), 7.25 - 7.30 (1H, m), 7.39 (1H, dd, J =8.4, 5.3 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.4, 2.4 Hz

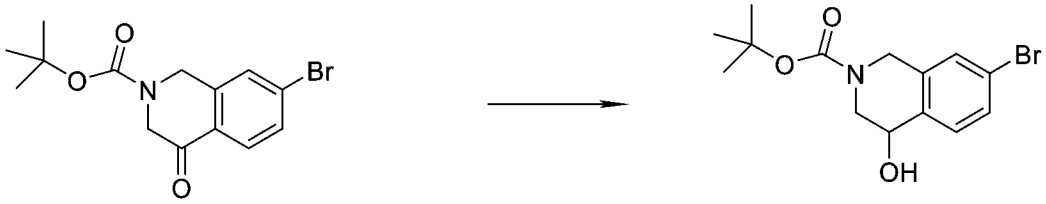
7-溴-4-側氧基-1,3-二氫異喹啉-2-甲酸第三丁酯



【1042】 在-78℃下將nBuLi (2.5 M於己烷中，6.8 mL，17.0 mmol)添加至N-[(2,5-二溴苯基)甲基]-N-[2-[甲氧基(甲基)胺基]-2-側氧基-乙基]胺基甲酸第三丁酯(5.74 g，11.3 mmol)於THF (100 mL)中之攪拌溶液中。將混合物在-78℃下攪拌1 h。添加水(50 mL)且使反應加溫至rt。用水(300 mL)稀釋混合物且萃取至EtOAc (3×100 mL)中。合併EtOAc部分，用鹽水(200 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。急驟層析(矽石，0 - 80% EtOAc/異己烷)得到產物(1856 mg，49%產率)。

【1043】 ^{1}H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.47 (9H, s), 4.32 (2H, s), 4.74 (2H, s), 7.46 - 7.61 (2H, m), 7.91 (1H, d, J = 8.4 Hz)。

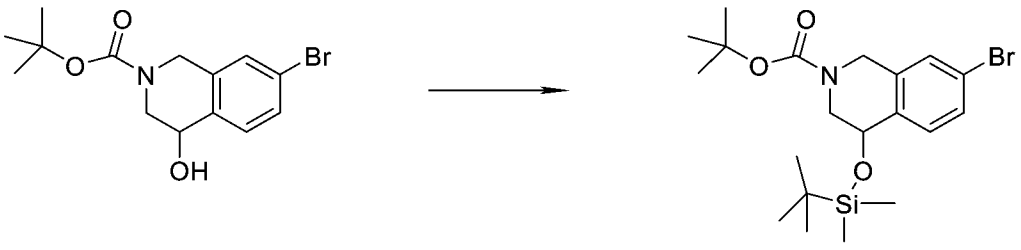
7-溴-4-羥基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



【1044】 在冰/水浴中冷卻之同時，將$NaBH_4$ (539 mg，14.3 mmol)添加至7-溴-4-側氧基-1,3-二氫異喹啉-2-甲酸第三丁酯(1200 mg，3.56 mmol)於MeOH (25 mL)中之攪拌溶液中，且攪拌3 h。添加水(100 mL)，且濃縮混合物。將有機物萃取至DCM (3 × 50 mL)中。合併DCM部分，用鹽水(100 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮以生成產物(1100 mg，92%產率)。

【1045】 ^{1}H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.49 (9H, s), 3.55 - 3.65 (1H, m), 3.81 - 3.93 (1H, m), 4.42 (1H, d, J = 17.3 Hz), 4.68 - 4.77 (2H, m), 7.24 - 7.36 (2H, m), 7.36 -7.47 (1H, m)。

7-溴-4-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

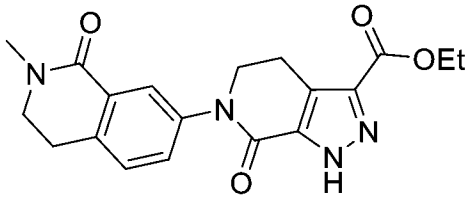


【1046】 在冰/水浴中冷卻之同時，將第三丁基二甲基氯矽烷(628 mg，4.17 mmol)添加至7-溴-4-羥基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(1100 mg，3.20 mmol)及咪唑(436 mg，6.41 mmol)於DCM (30 mL)中之攪拌溶液中。將混合物加溫至rt且攪拌18 h。添加水(50 mL)且萃取至DCM (3×25 mL)中。合併DCM部分，用鹽水(50 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。急驟層析(矽石，0 - 80% EtOAc/異己烷)得到產物(916 mg，65%產率)。

【1047】 ^{1}H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 3 0.15 - 0.22 (6H, m), 0.94 (9H, s), 1.49 (9H, s), 3.11 - 3.22 (1H, m), 3.95 - 4.04 (1H, m), 4.40 (1H, t, J = 17.2 Hz), 4.67 - 4.72 (2H, m), 7.21 - 7.31 (2H, m), 7.33 - 7.40 (1H, m)。

中間體9

6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



7-溴-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮

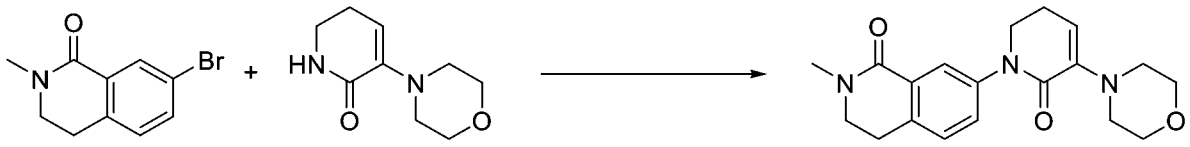


【1048】 將7-溴-3,4-二氫-2H-異喹啉-1-酮(15 g，66.4 mmol)溶解於THF (400 mL)中且歷經5 min分成數份添加NaH (礦物油中之60%分散液，3.19 g，79.6 mmol)。攪拌10 min後，歷經5 min添加MeI (10.4 g，73.0 mmol)且將混合物在rt下攪拌隔夜。濃縮混合物且分配於EtOAc (100 mL)與飽和$NaHCO_3$ (aq) (100 mL)之間。濃縮有機層且藉由急驟層析(矽石，20-65% Pet醚/EtOAc:MeOH (9:1))純化，得到產物(13.1 g，82%產率)。

【1049】 $[M+H]^+$ = 239.9/241.9

【1050】 ^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 2.93 – 2.85 (2H, m), 3.08 (3H, s), 3.49 (2H, dd, J = 7.1, 6.3 Hz), 6.98 (1H, dt, J = 7.9, 0.9 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.0, 2.2 Hz), 8.14 (1H, d, J = 2.2 Hz)。

2-甲基-7-(5-嗎啉基-6-側氧基-3,6-二氫吡啶-1(2H)-基)-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮



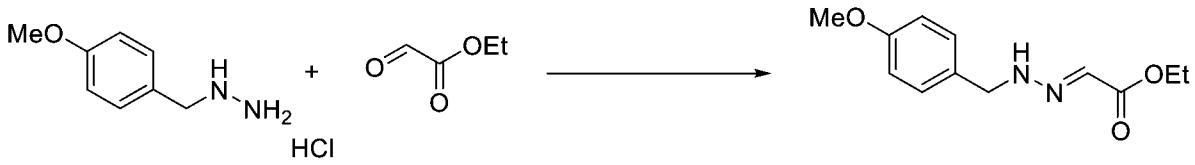
【1051】 將5-嗎啉基-2,3-二氫-1H-吡啶-6-酮(6 g，33 mmol)、7-溴-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1-酮(9.5 g，40 mmol)、磷酸三鉀(10.5 g，49.4 mmol)及(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷二胺(2.81 g，19.8 mmol)溶解於1,4-二噁烷(100 ml)中。使N_2 (g)鼓泡通過混合物持續15 min。添加Cu(I)I (1.88 g，9.88 mmol)且使N_2 (g)鼓泡通過持續5 min，接著使Ar (g)通過持續3 min。將容器密封且加熱至85℃持續5 h。冷卻隔夜後，添加EtOAc (200 mL)及飽和NH_4Cl (aq) (150 mL)。分離各相，用EtOAc (200 mL)萃取水層，且用飽和NH_4Cl (aq) (100 mL)洗滌合併之有機層。用額外EtOAc (200

mL)萃取合併之水層且合併所有有機層且濃縮。藉由急驟層析(矽石，40-100% Pet醚/EtOAc:MeOH (9:1))純化殘餘物，得到產物(5.5 g，49%)。

【1052】 $[M+H]^+$ = 342.2

【1053】 ^{1}H NMR (400 MHz, CD_3OD) δ 2.54 (2H, td, J = 6.8, 4.7 Hz), 2.86 – 2.82 (4H, m), 3.04 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.15 (3H, s), 3.63 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.84 – 3.73 (6H, m), 5.88 (1H, t, J = 4.7 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.86 (1H, d, J = 2.3 Hz)

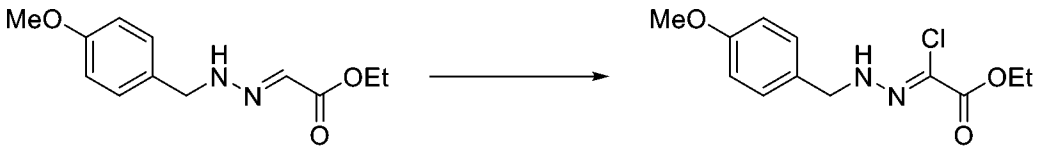
2-(2-(4-甲氧基苄基)亞肼基)乙酸乙酯



【1054】 將(4-甲氧基苯基)甲基肼HCl (5 g，27 mmol)添加至THF (50 mL)中，隨後添加TEA (3.22 g，31.8 mmol)且將混合物在rt下攪拌5 min。歷經10 min添加2-側氧基乙酸乙酯(5.95 g，29.2 mmol)且將所得混合物在rt下攪拌隔夜。過濾反應且將濾液蒸發至乾，得到產物，其不經純化(假設100%產率及純度)即用於下一步驟。

【1055】 $[M+H]^+$ = 237.1

2-氯-2-(2-(4-甲氧基苄基)亞肼基)乙酸乙酯



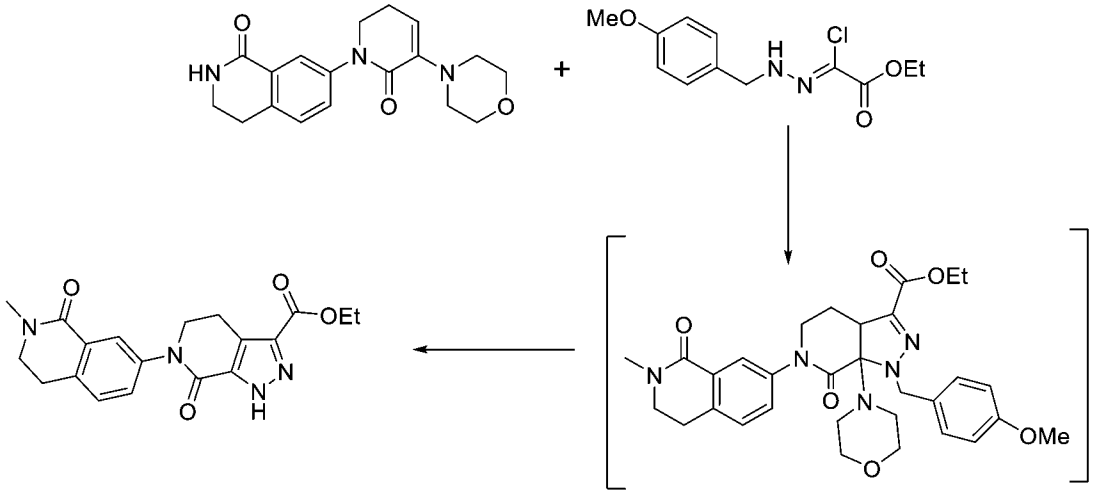
【1056】 將2-(2-(4-甲氧基苄基)亞肼基)乙酸乙酯(6.26 g，26.5 mmol)溶解於THF (75 mL)中。添加NCS (3.89 g，29.1 mmol)且將反應在rt下攪拌隔夜。蒸發混

合物，將殘餘物溶解於Pet醚/EtOAc (8:1) (30 mL)中，過濾且藉由急驟層析(矽石，10-40% Pet醚/EtOAc)純化，得到產物(4.2 g，59%產率)。

【1057】 $[M+H+H_2O]^+$ = 288.1/290.1

【1058】 ^{1}H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 1.37 (3H, t, J = 7.1 Hz), 3.81 (3H, s), 4.35 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.63 (2H, s), 6.62 (1H, s), 6.93 – 6.86 (2H, m), 7.26 – 7.22 (2H, m)

6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



【1059】 將2-甲基-7-(5-嗎啉基-6-側氧基-3,6-二氫吡啶-1(2H)-基)-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮(4.8 g，14 mmol)溶解於1,4-二噁烷 (75 mL)中。添加K_2CO_3 (4.9 g，35 mM)，隨後添加2-氯-2-(2-(4-甲氧基苄基)亞肼基)乙酸乙酯(7.23 g，26.7 mmol)且加熱至85℃持續18 h。將混合物冷卻，過濾，且用EtOAc (50 ml)洗滌。使合併之濾液蒸發，溶解於TFA (27 mL)中且加熱至60℃持續3 h。冷卻混合物且與DCM (2 x 100 ml)及甲苯(2 x 100 mL)共蒸發。將殘餘物溶解於EtOAc (100 ml)中且添加固體K_2CO_3，直至不再發生氣體逸出。添加水(50 ml)及鹽水(50 mL)，且分離各相。用DCM (2 x 50 mL)及含5% MeOH之EtOAc (50 mL)萃取水層。用鹽水(50 mL)洗滌

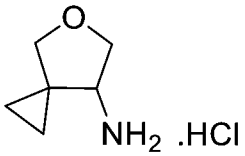
DCM層，且過濾合併之EtOAc層且用鹽水(50 mL)洗滌濾液。合併所有有機層，蒸發且藉由急驟層析(矽石，10-60% DCM/(DCM:7M NH_3 MeOH 9:1)純化，得到產物(2.25 g，43%產率)。

【1060】 $[M+H]^+$ =369.1

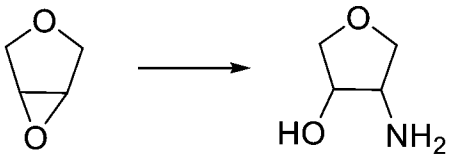
【1061】 ^{1}H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ 1.42 (3H, t, J = 7.1 Hz). 3.02 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.17 (3H, s), 3.25 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.59 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.09 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.43 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.23 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.50 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.98 (1H, d, J = 2.4 Hz)

中間體10

5-氧雜螺[2.4]庚-7-胺鹽酸鹽



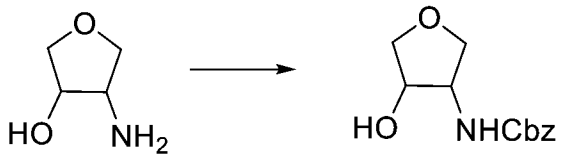
4-胺基四氫呋喃-3-醇



【1062】 將NH_4OH (28-30%於水中，50 mL，740 mmol)添加至3,6-二氧雜雙環[3.1.0]己烷(3 g，34.8 mmol)於IPA (10 mL)中之溶液中。將混合物在密封管中於80℃下攪拌16 h。濃縮反應混合物，得到產物(3.8 g，95%)，其不經進一步純化即用於下一步驟。

【1063】 ^{1}H NMR (500 MHz, DMSO-d6) δ 3.14 (1H, ddd, *J* = 4.7, 2.7, 1.9 Hz), 3.33 (1H, dd, *J* = 8.3, 2.7 Hz), 3.44 (1H, dd, *J* = 8.8, 1.7 Hz), 3.82 (2H, dd, *J* = 5.2, 3.0 Hz), 3.83 – 3.87 (1H, m)。不可見可交換質子。

N-(4-羥基四氫呋喃-3-基)胺基甲酸苄酯

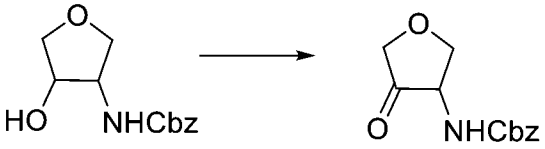


【1064】 在0℃下將氯甲酸苄酯(5.21 mL，36.5 mmol)添加至4-胺基四氫呋喃-3-醇(3.8 g，33.2 mmol)及DIPEA (11.3 mL，66.3 mmol)之懸浮液中。使反應混合物加溫至rt且攪拌18 h。依序用水(50 mL)、飽和$NaHCO_3$ (aq) (50 mL)及鹽水(50 mL)洗滌混合物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾，且濃縮。藉由急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/己烷)純化殘餘物，得到產物(4.2 g，53%產率)。

【1065】 $[M+H]^+$ = 238.0

【1066】 ^1H NMR (400 MHz, DMSO-d6) δ 3.41 – 3.51 (2H m), 3.72 – 3.81 (2H, m), 3.86 (1H, ddd, J = 8.9, 5.5, 1.1 H,), 3.95 – 4.06 (1H, m), 5.00 (2H, s), 5.17 (1H, dd, J = 3.9, 1.3 Hz), 7.24 – 7.39 (5H, m,), 7.46 (1H, d, J = 6.6 Hz)。

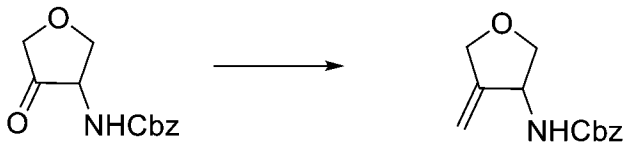
N-(4-側氧基四氫呋喃-3-基)胺基甲酸苄酯



【1067】 在0℃下，將Dess-Martin高碘烷(15.0 g，35.4 mmol)添加至N-(4-羥基四氫呋喃-3-基)胺基甲酸苄酯(4.20 mg，17.7 mmol)於DCM (90 mL)中之溶液中。將混合物加溫至rt且攪拌16 h。此用飽和$NaHCO_3$ (aq) (100 mL)淬滅且用DCM (3 x 50 mL)萃取。用飽和鹽水(100 ml)洗滌合併之有機相，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。藉由急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/己烷)純化殘餘物，得到產物(3.24 g，74%)。

【1068】 $[M+H]^+$ = 336.0

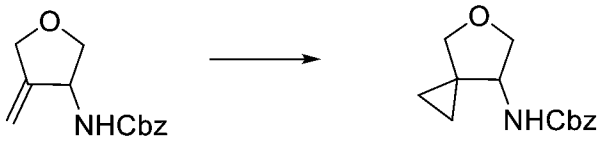
N-(4-亞甲基四氫呋喃-3-基)胺基甲酸苄酯



【1069】 在0℃下將NaHMDS (18.7 mL，18.7 mmol)添加至甲基(三苯基)溴化鏻(6.68 g，18.7 mmol)於THF (40 mL)中之懸浮液中。將反應在rt下攪拌1 h，冷卻至0℃，接著逐滴添加含N-(4-側氧基四氫呋喃-3-基)胺基甲酸苄酯(2.0 g，8.5 mmol)之THF (17 mL)。將反應混合物加溫至rt，攪拌16 h且藉由飽和NH_4Cl (aq)淬滅。用EtOAc (3 x 30 mL)萃取混合物且將合併之有機層乾燥(Na_2SO_4)且濃縮。藉由急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/己烷)純化，得到產物(70%純，530 mg，19%)。

【1070】 $[M+H]^+$ = 234.0

N-(5-氧雜螺[2.4]庚-7-基)胺基甲酸苄酯

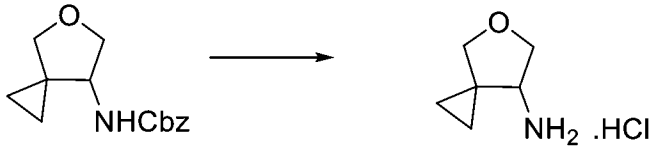


【1071】 在0℃下將二乙基鋅(1 M於庚烷中，6.22 mL，6.22 mmol)逐滴添加至二碘甲烷(1.67 g，6.22 mmol)於DCM (1 mL)中之溶液中。攪拌15 min後，逐滴添加N-(4-亞甲基四氫呋喃-3-基)胺基甲酸苄酯(290 mg，1.24 mmol)於DCM (1 mL)中之溶液。將反應加溫至rt且攪拌2 h。添加1M HCl (aq) (15 mL)且用DCM (2 x 15 mL)萃取反應。將合併之有機層乾燥(Na_2SO_4)，過濾，且濃縮。藉由急驟層析(矽石，0-70% EtOAc/己烷)純化，得到產物(190 mg，62%產率)。

【1072】 $[M+H]^+$ = 248.1

【1073】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 0.53 - 0.59 (1H, m), 0.62 - 0.68 (1H, m), 0.87 (2H, s), 3.53 - 3.58 (1H, m), 3.80 - 3.88 (3H, m), 4.05 - 4.11 (1H, m), 5.08 (2H, s), 5.10 - 5.21 (1H, m), 7.35 - 7.37 (5H, m)

氧雜螺[2.4]庚-7-胺鹽酸鹽]



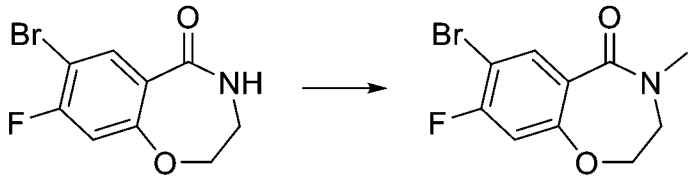
【1074】 將HCl (aq) (1M於EtOAc中，768 μL，0.768 mmol)添加至N-(5-氧雜螺[2.4]庚-7-基)胺基甲酸苄酯(100 mg，0.384 mmol)於MeOH (30 mL)中之溶液中。將混合物注射至H-Cube裝置中且在40℃下氫化(1.5 mL/min，20巴，20% $Pd(OH)_2/C$)，隨後濃縮以得到產物(91 mg，95%產率)。

【1075】 $[M+H]^+$ = 114.0

【1076】 ^1H NMR (DMSO-d6, 500 MHz) δ 0.62 (1H, s), 0.82 (1H, s), 1.05 - 1.42 (2H, m), 3.25 - 3.50 (2H, m), 3.75 - 4.24 (3H, m), 8.32 (3H, s)

中間體11

7-溴-8-氟-4-甲基-2,3-二氫-1,4-苯并氧氮雜卓-5-酮

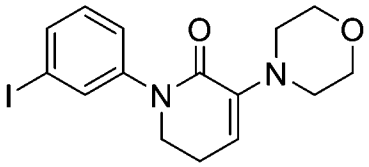


【1077】 將含7-溴-8-氟-3,4-二氫-2H-1,4-苯并氧氮雜卓-5-酮(130 mg，0.5 mmol)之DMF (3 mL)冷卻至0℃且添加NaH (60%油分散液，69 mg，1.73 mmol)，且將懸浮液在rt下攪拌30 min。冷卻至0℃後，添加MeI (62 μL，1.0 mmol)且將混合物加溫至rt且攪拌18 h。在用水(10 mL)淬滅且用EtOAc (3 x 20 mL)萃取後，用鹽水(20 mL)洗滌合併之有機層，乾燥($MgSO_4$)且濃縮。藉由急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/Pet. 醚)純化，得到產物(78 mg，57%產率)。

【1078】 $[M+H]^+$ = 273.9 / 275.9

中間體12

1-(3-碘苯基)-3-嗎啉基-5,6-二氫吡啶-2(1H)-酮



5-溴-N-(3-碘苯基)戊醯胺

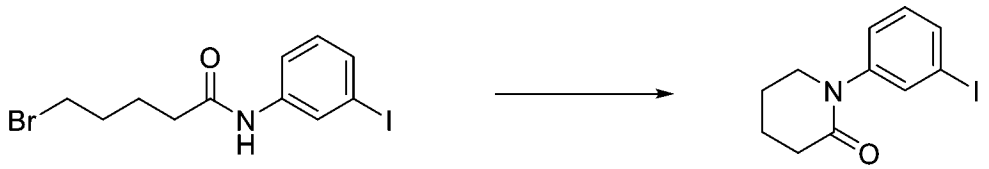


【1079】 在0℃下，歷經30 min向3-碘苯胺(25.0 g，114 mmol)及DIPEA (14.8 g，114 mmol)於DCM (350 mL)中之溶液中添加含5-溴戊醯氯(24.9 g，126 mmol)之DCM (350 mL)。使混合物加溫至5℃ – 15℃且攪拌4 h。用1M HCl (aq) (2 x 175 mL)、水(175 mL)洗滌混合物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮，得到產物(42 g)，其直接進入下一步驟。

【1080】 $[M+H]^+$ = 381.0/383.1

【1081】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 300 MHz) δ 1.77-1.88 (4H, m), 2.38 (2H, td, J = 5.6, 4.4, 1.7 Hz), 3.66 – 3.50 (2H, m), 7.18 (1H, t, J = 7.9 Hz), 7.30 (1H, ddd, J = 8.1, 2.0, 1.1 Hz), 7.60 (1H, dt, J = 7.8, 1.4 Hz), 7.67 (1H, t, J = 1.8 Hz)

1-(3-碘苯基)哌啶-2-酮



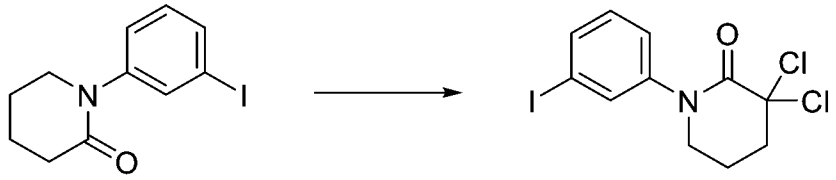
【1082】 將5-溴-N-(3-碘苯基)戊醯胺(42.0 g，111 mmol)及K_3PO_4 (58.6 g，279 mmol)於甲苯(170 mL)及DMF (42 mL)中之溶液加熱至110℃且攪拌7 h。將混合物冷卻至rt且添加鹽水(420 mL)。用鹽水洗滌有機層，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。

藉由用正庚烷(420 mL)製漿來純化殘餘物，得到產物(29.0 g，歷經兩個步驟80%產率)。

【1083】 $[M+H]^+$ = 301.9

【1084】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.78-1.88 (4H, m), 2.37 (2H, t, J = 6.2 Hz), 3.58 (2H, t, J = 5.5 Hz), 7.18 (1H, t, J = 7.9 Hz), 7.33 – 7.27 (1H, m), 7.60 (1H, dt, J = 7.9, 1.4 Hz), 7.67 (1H, t, J = 1.9 Hz)

3,3-二氯-1-(3-碘苯基)哌啶-2-酮

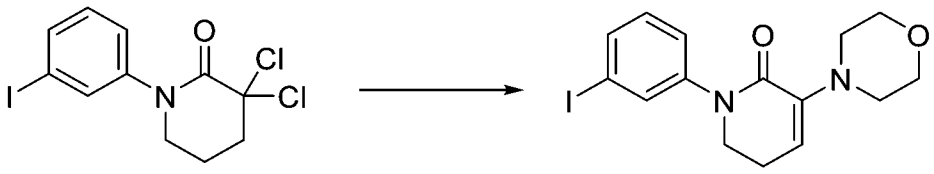


【1085】 將1-(3-碘苯基)哌啶-2-酮(28.0 g，93.0 mmol)及PCl_5 (96.7 g，465 mmol)於DCM (1400 mL)中之溶液加熱至回流且攪拌6 h。將混合物冷卻至rt且接著傾入冰冷水中。用DCM (3 x 280 mL)萃取混合物，乾燥(Na_2SO_4)且濃縮濾液。藉由用MeCN (140 mL)製漿來純化殘餘物，得到產物(19.5 g，58%產率)。

【1086】 $[M+H]^+$ = 369.9/371.9

【1087】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 300 MHz) δ 2.17-2.04 (2H, m), 2.98-2.86 (2H, m), 3.72 (2H, t, J = 6.1 Hz), 7.24 (1H, t, J = 7.8 Hz), 7.38-7.30 (1H, m), 7.78-7.65 (2H, m)

1-(3-碘苯基)-3-嗎啉基-5,6-二氫吡啶-2(1H)-酮



【1088】 將3,3-二氯-1-(3-碘苯基)哌啶-2-酮(19.5 g，53 mmol)及嗎啉(19.5 mL)於DMF (39 mL)中之溶液加熱至110℃且攪拌5-6 h。將反應冷卻至rt且用甲苯(100

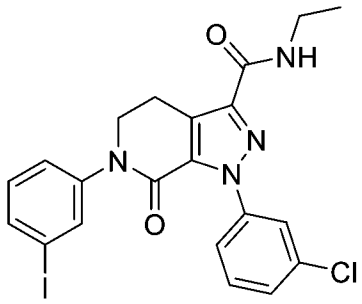
mL)稀釋。用水(3 x 20 mL)洗滌有機相。將合併之有機相乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。藉由用MeCN (100 mL)製漿來純化殘餘物且過濾，得到產物(12.6 g，61%產率)。

【1089】 $[M+H]^+ = 385.0$

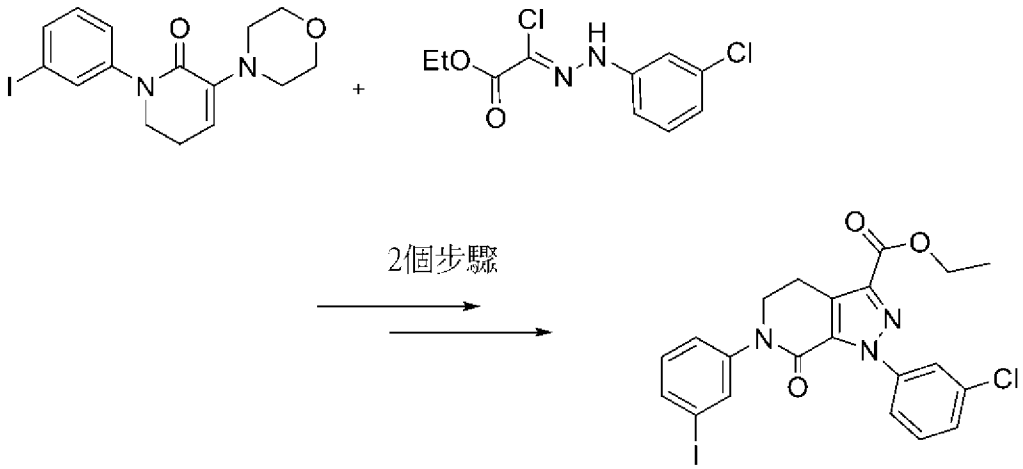
【1090】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.43 (2H, td, J = 6.6, 4.6 Hz), 2.84 – 2.72 (4H, m), 3.64 (4H, t, J = 4.7 Hz), 3.70 (2H, t, J = 6.7 Hz), 5.72 (1H, t, J = 4.7 Hz), 7.18 (1H, t, J = 8.0 Hz), 7.35 (1H, ddd, J = 8.1, 2.1, 1.0 Hz), 7.61 – 7.52 (1H, m), 7.73 (1H, t, J = 1.9 Hz)

中間體13

1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-碘苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



1-(3-氯苯基)-6-(3-碘苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯

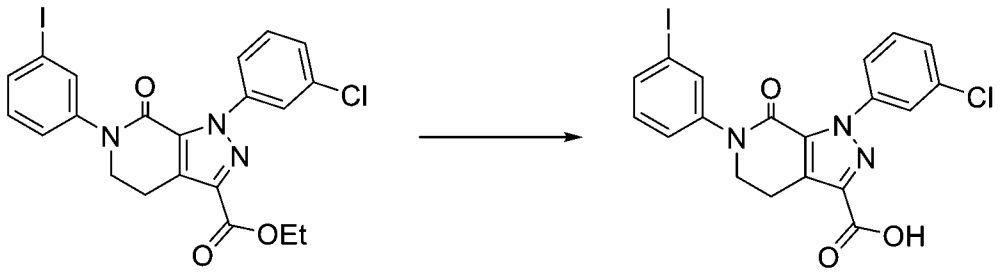


【1091】 根據與1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(中間體1)類似之途徑，用3-(嗎啉-4-基)-1,2,5,6-四氫吡啶-2-酮取代1-(3-碘苯基)-3-嗎啉基-5,6-二氫吡啶-2(1H)-酮來合成該產物。

【1092】 $[M+H]^+$ = 521.9。

【1093】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.36 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.21 (1H, t, J = 7.9 Hz), 7.40 (1H, dt, J = 8.3, 1.4 Hz), 7.67 – 7.49 (4H, m), 7.76 (2H, dt, J = 4.5, 2.0 Hz)

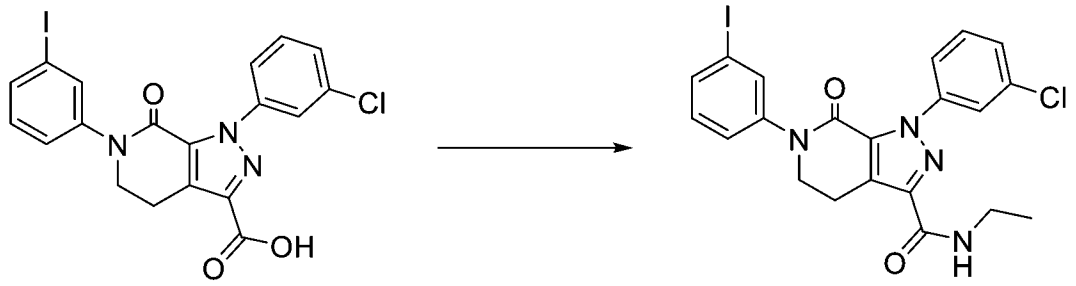
1-(3-氯苯基)-6-(3-碘苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸



【1094】 將1-(3-氯苯基)-6-(3-碘苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(500 mg，0.96 mmol)溶解於THF (10 mL)、MeOH (1 mL)及水(2 mL)中且用LiOH.H_2O (192 mg，3.35 mmol)處理。將混合物在rt下攪拌2天。濃縮混合物且用水(20 mL)稀釋殘餘物。使用2M HCl (aq)將混合物調節至pH 2，且用EtOAc (3 x 20 mL)萃取。用鹽水洗滌合併之有機層，乾燥($MgSO_4$)且濃縮，得到產物(473 mg，100%產率)。

【1095】 $[M+H]^+$ = 493.9

1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-碘苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



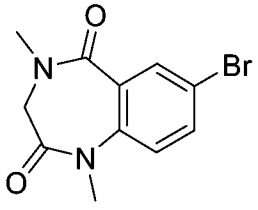
【1096】 將1-(3-氯苯基)-6-(3-碘苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(460 mg,，0.93 mmol)溶解於DCM (15 mL)及DIPEA (487 μL，2.8 mmol)中且用HATU (779 mg，2.05 mmol)處理。將混合物在rt下攪拌10 min且添加乙胺(2M於THF中) (932 μL，1.86 mmol)。在rt下攪拌3天後，用DCM (30 mL)及飽和$NaHCO_3$ (aq) (30 mL)稀釋混合物且分離各層。用DCM (3 x 15 mL)再萃取水層，接著用飽和NH_4Cl (aq) (10 mL)、鹽水(10 mL)洗滌合併之有機物，乾燥($MgSO_4$)且濃縮。藉由急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/Pet. 醚60-80)純化，得到產物(380 mg，78%產率)。

【1097】 $[M+H]^+ = 521.0$

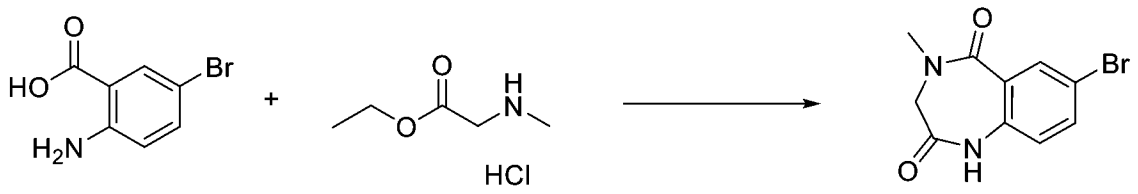
【1098】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.25 - 3.30 (2H, m), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.21 (1H, t, J = 8.0 Hz), 7.37 - 7.42 (1H, m), 7.50 - 7.55 (2H, m), 7.60 - 7.66 (2H, m), 7.74 - 7.79 (2H, m), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)

中間體14

7-溴-1,4-二甲基-3,4-二氫-1H-苯并[e][1,4]二氮雜卓-2,5-二酮



7-溴-4-甲基-3,4-二氫-1H-苯并[e][1,4]二氮雜卓-2,5-二酮

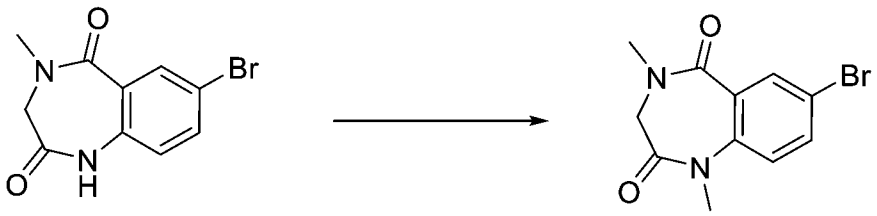


【1099】 向2-胺基-5-溴苯甲酸(1.00 g，4.63 mmol)於DMF (11 mL)中之溶液中添加肌胺酸乙酯鹽酸鹽(1.42 g，9.26 mmol)、DIPEA (4.0 mL，23.1 mmol)及COMU (1.98 g，4.63 mmol)且將混合物在rt下攪拌20 h。用EtOAc (70 mL)稀釋該溶液且用飽和$NaHCO_3$ (aq) (20 mL)及鹽水(3 x 20 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。藉由急驟管柱層析(矽石，0-100% EtOAc/異己烷)純化，得到產物。(513 mg，26%產率)。

【1100】 $[M-H]^-$ = 267.1/269.1

【1101】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 3.11 (3H, s), 3.88 (2H, s), 7.05 (1H, d, J=8.6 Hz), 7.69 (1H, dd, J=8.7, 2.5 Hz), 7.82 (1H, d, J=2.5 Hz), 10.56 (1H, br s)

7-溴-1,4-二甲基-3,4-二氫-1H-苯并[e][1,4]二氮雜卓-2,5-二酮



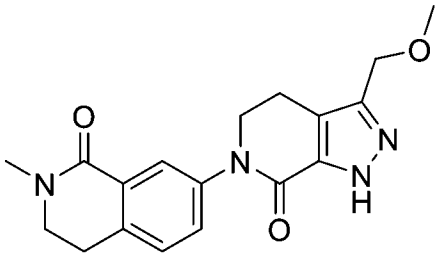
【1102】 在0℃下向7-溴-4-甲基-3,4-二氫-1H-苯并[e][1,4]二氮雜卓-2,5-二酮(513 mg，1.24 mmol)於DMF (6 mL)中之溶液中添加NaH (60%於礦物油中，74 mg，1.86 mmol)且將所得混合物攪拌1 h。添加MeI (0.15 mL，2.5 mmol)且將混合物攪拌16 h。在冷卻且用EtOAc (70 mL)及水(20 mL)稀釋後，分離各層。用鹽水(3 x 20 mL)洗滌有機相，乾燥(Na_2SO_4)，過濾，且濃縮。藉由急驟管柱層析(矽石，0-100% EtOAc/異己烷)純化，得到產物(220 mg，63%產率)。

【1103】 $[M+H]^+$ = 282.9/284.9

【1104】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 3.10 (3H, s), 3.27 (3H, s), 3.72 (1H, d, J=15.1 Hz), 4.12 (1H, d, J = 15.0 Hz), 7.34-7.42 (1H, m), 7.75-7.79 (2H, m)

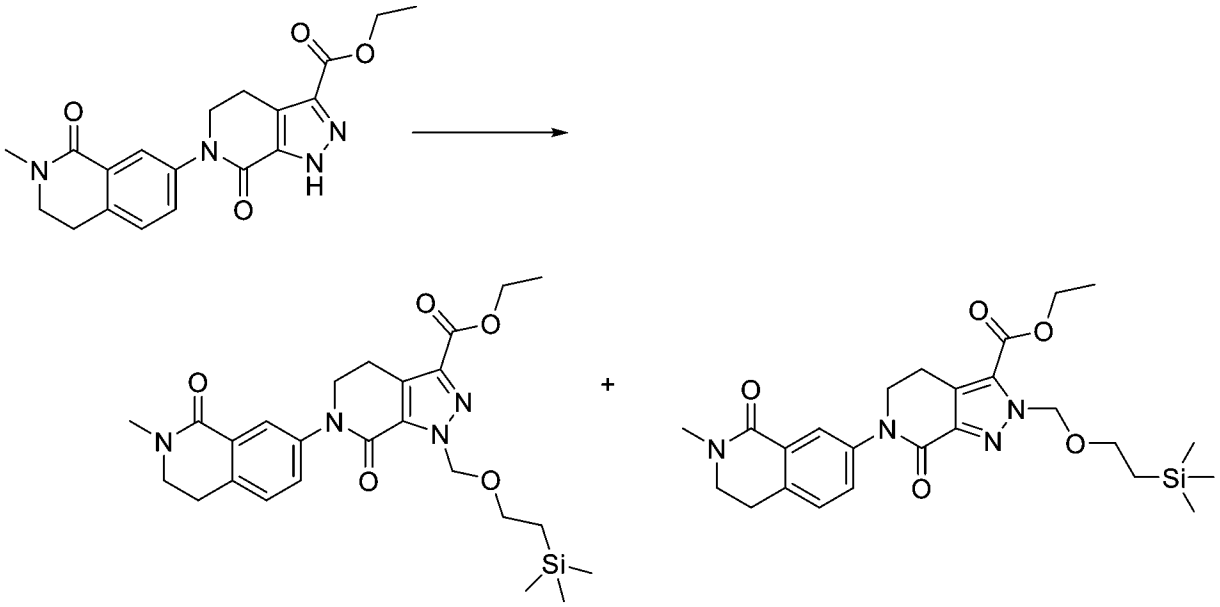
中間體15

7-(3-(甲氧基甲基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮



6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-1-((2-(三甲基矽烷基)乙氧基)甲基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯及

6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-2-((2-(三甲基矽烷基)乙氧基)甲基)-4,5,6,7-四氫-2H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



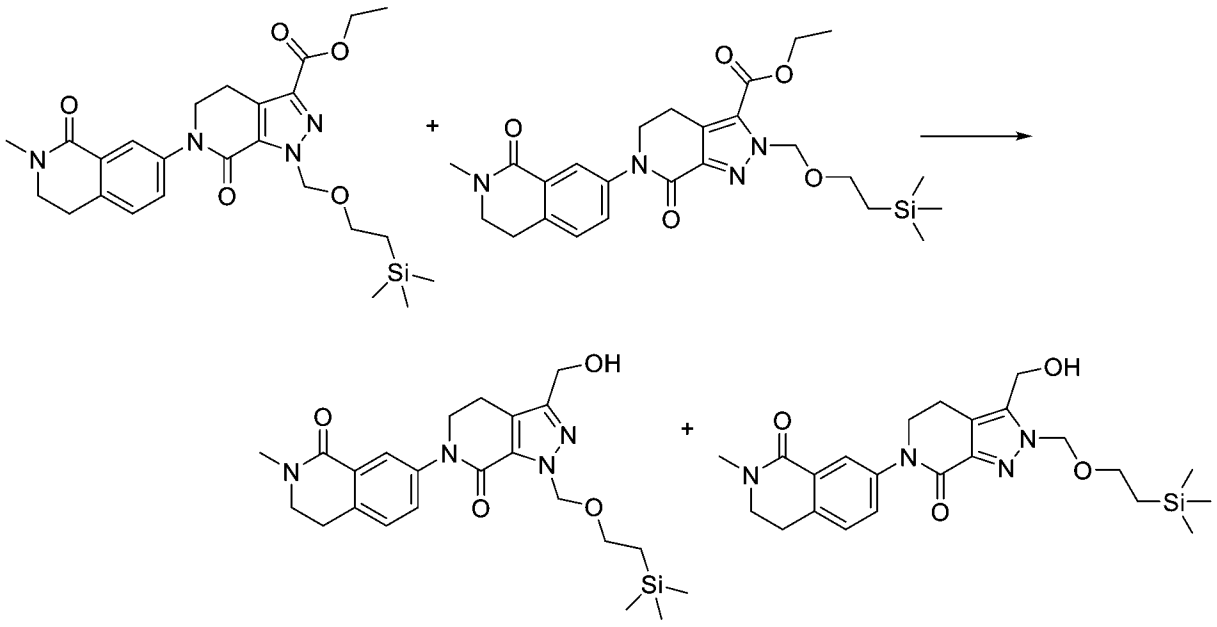
【1105】 在0℃下將6-(2-甲基-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(5.00 g，12.9 mmol)於DMF (40 mL)中之溶

液添加至NaH (60%於礦物油中，788 mg，20.6 mmol)於DMF (10 mL)中之懸浮液中。將混合物在0℃下攪拌15 min且添加SEM-Cl (3 mL，16.3 mmol)。將混合物加溫至rt，攪拌18 h且濃縮。將殘餘物稀釋於$CHCl_3$/IPA (4:1 v/v，100 mL)之混合物中且用鹽水(3 x 50 mL)洗滌。將有機相乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。藉由急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/己烷)純化，提供產物(1:1混合物，5.13 g，80%產率)。

【1106】 $[M+H]^+ = 499.1$

7-(3-(羥基甲基)-7-側氧基-1-((2-(三甲基矽烷基)乙氧基)甲基)-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮及

7-(3-(羥基甲基)-7-側氧基-2-((2-(三甲基矽烷基)乙氧基)甲基)-2,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮

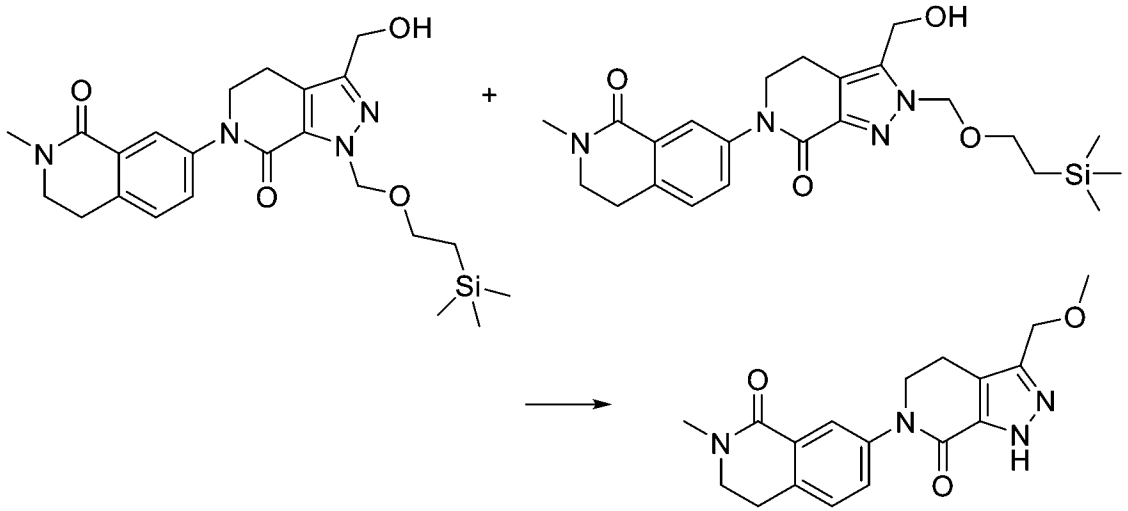


【1107】 在0℃下將$LiBH_4$ (2M於THF中，10 mL，20 mmol)添加至6-(2-甲基-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-1-(2-三甲基矽烷基乙氧基甲基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(與6-(2-甲基-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-2-(2-三甲基矽烷基乙氧基甲基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯之1:1混

合物，5.10 g，9.20 mmol)及MeOH (780 μL，18.9 mmol)於無水THF (30 mL)中之混合物中。將混合物在0℃下攪拌15 min，加溫至30℃，攪拌18 h，用水(3 mL)淬滅且濃縮。將殘餘物稀釋於$CHCl_3$/IPA (4:1 v/v，60 mL)之混合物中且用HCl (aq) (0.5 M，3 x 50 mL)洗滌。將有機相乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。藉由急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/己烷，接著0-15% MeOH/EtOAc)純化，提供產物(1:1混合物，2.30 g，55%產率。

【1108】 $[M+H]^+ = 457.1$

7-(3-(甲氧基甲基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮



【1109】 在0℃下將7-[3-(羥基甲基)-7-側氧基-1-(2-三甲基矽烷基乙氧基甲基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1-酮(與7-[3-(羥基甲基)-7-側氧基-2-(2-三甲基矽烷基乙氧基甲基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1-酮之1:1混合物，1.70 g，3.72 mmol)於THF (15 mL)中之混合物添加至NaH (60%於礦物油中，428 mg，11.2 mmol)於THF (5 mL)中之混合物中。將混合物攪拌15 min且在0℃下逐滴添加MeI (500 μL，7.87 mmol)。在加溫至rt且攪拌2 h後，用鹽水(5 mL)及水(5 mL)淬滅混合物。分離各層，且用EtOAc (2

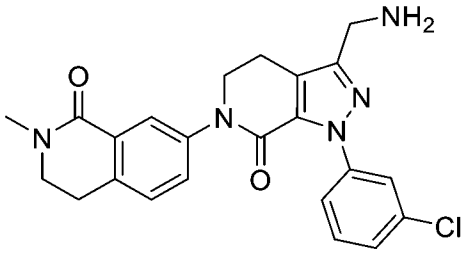
x 10 mL)萃取水層。將合併之有機層乾燥($MgSO_4$)，過濾且濃縮。將DCM (20 mL)添加至殘餘物中且在rt下逐滴添加TFA (3 mL，40 mmol)。將混合物在rt下攪拌4 h且用LiOH (aq) (2M, 20 mL)及$CHCl_3$/IPA (4:1 v/v，25 mL)之混合物稀釋。分離各相且用$CHCl_3$/IPA (4:1 v/v，25 mL)之混合物萃取水相。濃縮合併之有機相且藉由自動化製備型HPLC (UV導向，12-22% MeCN/10 mM $(NH_4)HCO_3$(aq)，歷經11 min)純化且凍乾以提供產物(780 mg，62%產率)。

【1110】 $[M+H]^+$ = 442.2

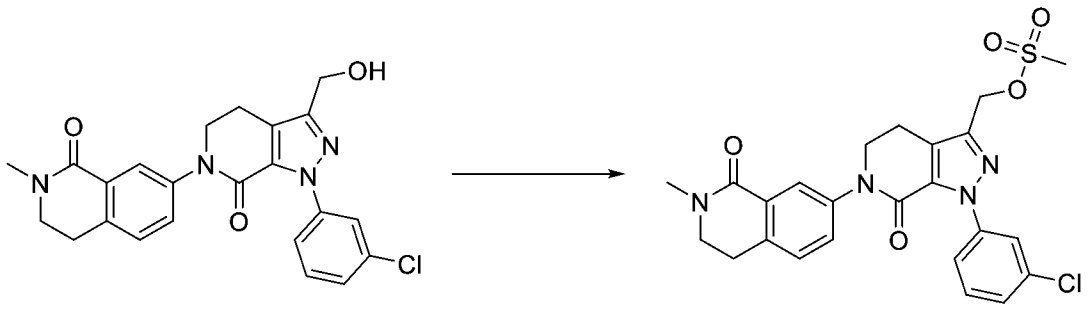
【1111】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 500 MHz) δ 2.90 (2H, q, J = 6.8 Hz), 2.99 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.04 (3H, s), 3.27 (3H, d, J = 7.7 Hz), 3.56 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.91 - 4.02 (2H, m), 4.44 (2H, d, J = 15.5 Hz), 7.33 (1H, t, J = 7.5 Hz), 7.46 (1H, ddd, J = 10.9, 8.0, 2.4 Hz), 7.81 (1H, dd, J = 11.3, 2.4 Hz), 13.29 - 13.70 (1H, m)

中間體16

7-(3-(胺基甲基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮



甲烷磺酸1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-基)甲酯

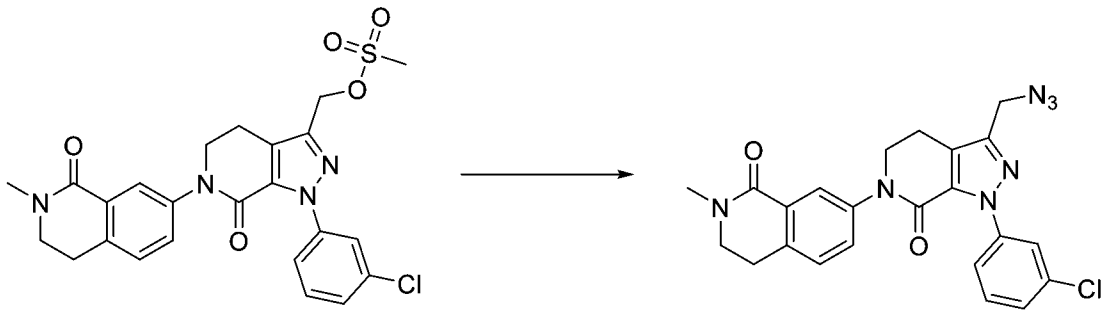


【1112】 在0℃下將甲烷磺酸甲基磺醯基酯(233 mg，1.34 mmol)添加至7-[1-(3-氯苯基)-3-(羥基甲基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1-酮(390 mg，0.893 mmol)及TEA (249 μL，1.79 mmol)於DCM (10 mL)中之混合物中。使混合物加溫至rt且攪拌15 min。將水(4 mL)添加至反應混合物中。添加DCM/MeOH 9:1 (10 mL)且用水(3 x 20 mL)洗滌分離之有機層，乾燥(Na_2SO_4)，且濃縮，得到產物(474 mg，93%)。

【1113】 $[M+H]^+$ = 515.3

【1114】 ^{1}H NMR (400 MHz, DMSO-d6) δ 2.98 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.04 – 3.08 (2H, m), 3.28 (3H, s), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.5 Hz), 5.39 (2H, s), 7.29 – 7.37 (1H, m), 7.43 – 7.48 (1H, m), 7.48 – 7.53 (2H, m), 7.55 – 7.63 (1H, m), 7.69 – 7.73 (1H, m), 7.82 – 7.86 (1H, m)

7-(3-(疊氮基甲基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮

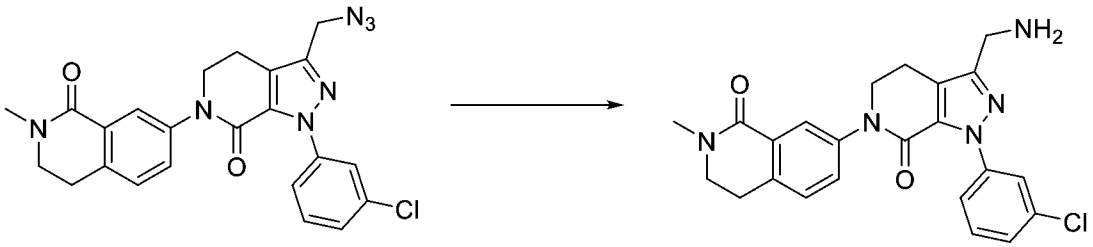


【1115】 將疊氮化鈉(85 mg，1.31 mmol)添加至甲烷磺酸1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-基]甲酯(225 mg，0.437 mmol)於DMF (5 mL)中之溶液中。將所得混合物在70℃下攪拌10 min，冷卻且添加EtOAc (15 mL)。用H_2O (3 x 5 mL)、鹽水(5 mL)洗滌混合物，乾燥(Na_2SO_4)且濃縮。藉由急驟層析(矽石，0-10% MeOH/DCM)純化，得到產物(188 mg，79%)。

【1116】 $[M+H]^+$ = 461.5

【1117】 ^1H NMR (DMSO-d6, 500 MHz) δ 2.98 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.01 – 3.05 (5H, m), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.60 (2H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.44 – 7.52 (3H, m), 7.55 – 7.60 (1H, m), 7.68 – 7.72 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz)

7-(3-(胺基甲基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮



【1118】 在rt下將三苯基膦結合之聚合物(3 mmol/g，204 mg，0.611 mmol)添加至7-[3-(疊氮基甲基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1-酮(188 mg，0.407 mmol)於THF (5 mL)中之混合物中。將混合物在rt下攪拌6 h且添加額外三苯基膦結合之聚合物(3 mmol/g，136 mg，0.407 mmol)。將混合物在rt下攪拌20 h，添加額外三苯基膦結合之聚合物(3 mmol/g，68 mg，0.204 mmol)且在rt下攪拌20 h。添加水(73 uL，4.05 mmol)且將混

合物在回流下加熱3 h，冷卻至rt且用Celite®過濾。用10% MeOH於DCM (200 mL)中之混合物洗滌樹脂且濃縮，得到產物(167 mg，75%)。

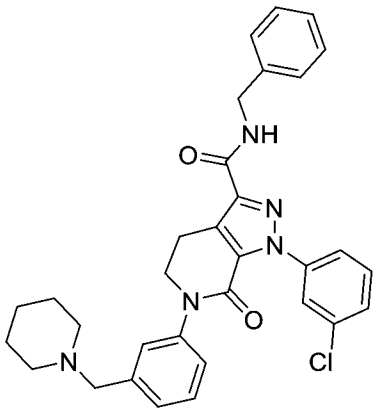
【1119】 $[M+H]^+$ = 436.1

【1120】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 500 MHz) δ 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.01 – 3.08 (5H, m), 3.17 (4H, d, J = 4.5 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.05 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.40 – 7.49 (3H, m), 7.52 – 7.56 (1H, m), 7.66 (1H, t, J = 2.1 Hz), 7.82 (1H, d, J = 2.4 Hz)。

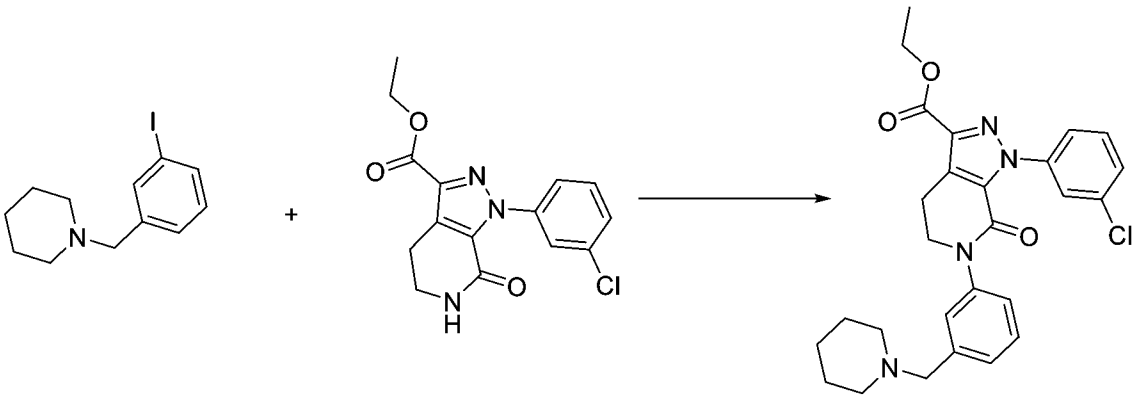
本發明之特定實例

實例編號1001

N-苄基-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



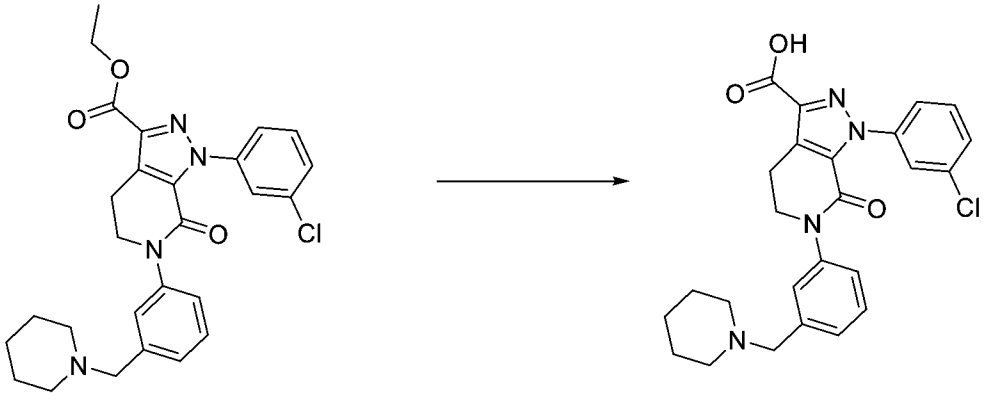
1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-[3-(哌啶-1-基甲基)苯基]-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



【1121】 將1-(3-氯苯基)-4,5,6,7-四氫-7-側氧基-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯 (200 mg，0.63 mmol)溶解於DMSO (3 mL)中，添加1,10-菲咯啉 (23 mg，0.13 mmol)、Cu(I) I (131 mg，0.69 mmol)、1-(3-碘苄基)哌啶 (207 mg，0.69 mmol)及K_2CO_3 (173 mg，1.25 mmol)。將混合物在130℃下攪拌4 h，接著用EtOAc (70 mL)稀釋。此用水(30 mL)、鹽水(30 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，3% MeOH/$CHCl_3$)純化殘餘物，得到產物 (178 mg，58%產率)。

【1122】 $[M+H]^+$ = 493.4

1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-[3-(哌啶-1-基甲基)苯基]-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸

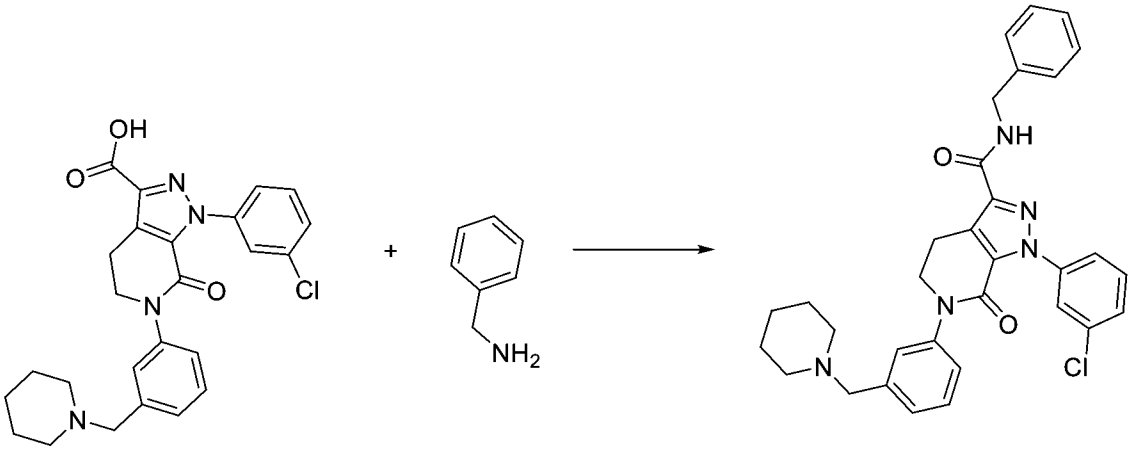


【1123】 將1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-[3-(哌啶-1-基甲基)苯基]-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯 (178 mg，0.36 mmol)溶解於THF (50 mL)及水 (5 mL)中。添加$LiOH.H_2O$ (47 mg，1.08 mmol)且將混合物在rt下攪拌18 h。移除THF，用2M HCl

(aq)將殘餘物之pH調節至pH7且用$CHCl_3$/IPA (4:1，3 x 50 mL)萃取。將合併之有機萃取物乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(165 mg，98%產率)。

【1124】 $[M+H]^+$ = 465.3

N-苄基-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



【1125】 將1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-[3-(哌啶-1-基甲基)苯基]-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸 (67 mg，0.14 mmol)及HBTU (41 mg，0.17 mmol)溶解於DCM (30 mL)中。添加TEA (60 μL，0.43 mmol)且20 min後添加苄胺 (17 mg，0.16 mmol)。將混合物在rt下攪拌18 h，此後用$CHCl_3$ (100 mL)稀釋混合物，用飽和$NaHCO_3$ (aq) (30 mL)、水(30 mL)、鹽水(30 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石4% MeOH/$CHCl_3$)純化殘餘物，藉由自動化製備型HPLC (質量導向，在酸性移動相中2-60%，歷經20 min)進一步純化且自MeCN/水中凍乾，得到產物(65 mg，75%產率)。

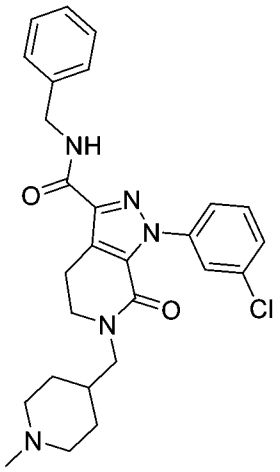
【1126】 $[M+H]^+$ = 554.3

【1127】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.32 - 1.42 (2H, m), 1.44 - 1.54 (4H, m), 2.21 - 2.38 (4H, m), 3.21 (4H, t, J = 6.6 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.45 (2H, d, J =

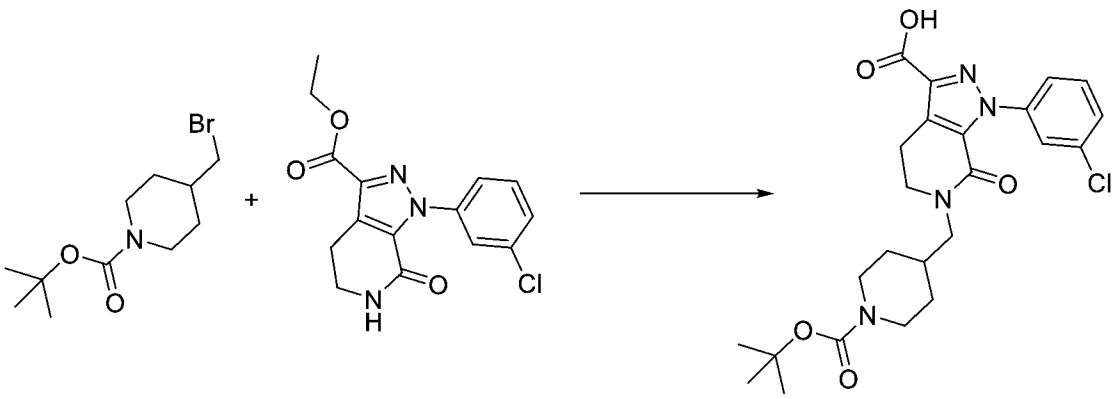
6.3 Hz), 7.13 - 7.21 (1H, m), 7.21 - 7.28 (3H, m), 7.29 - 7.37 (5H, m), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.75 - 7.83 (1H, m), 8.25 (1H, s), 9.02 (1H, t, J = 6.3 Hz)

實例編號1016

N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-((1-甲基哌啶-4-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



1-(3-氯苯基)-6-[[1-[(2-甲基丙-2-基)氧羰基]哌啶-4-基]甲基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸

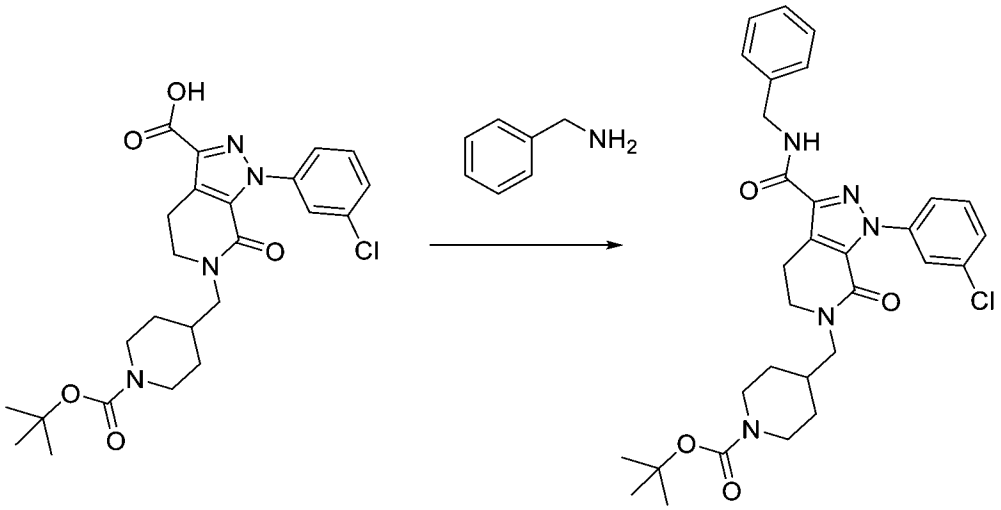


【1128】 在0℃下將1-(3-氯苯基)-4,5,6,7-四氫-7-側氧基-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯 (200 mg，0.63 mmol)溶解於THF (30 mL)中。添加NaH (60%油分散液) (30 mg，0.75 mmol)且將懸浮液在0℃下攪拌15 min且在rt下再攪拌30 min。將反應冷卻至0℃且添加N-Boc-4-溴甲基-哌啶 (191 mg，0.69 mmol)，且使混合物在1

h內加溫至rt。用0.3M $KHSO_4$ (aq) (10 mL)淬滅反應且用EtOAc (2 x 30 mL)萃取。將合併之有機萃取物乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，4% MeOH/$CHCl_3$)純化殘餘物，得到產物 (180 mg，59%產率)。

【1129】 $[M+Na]^+ = 511.2$

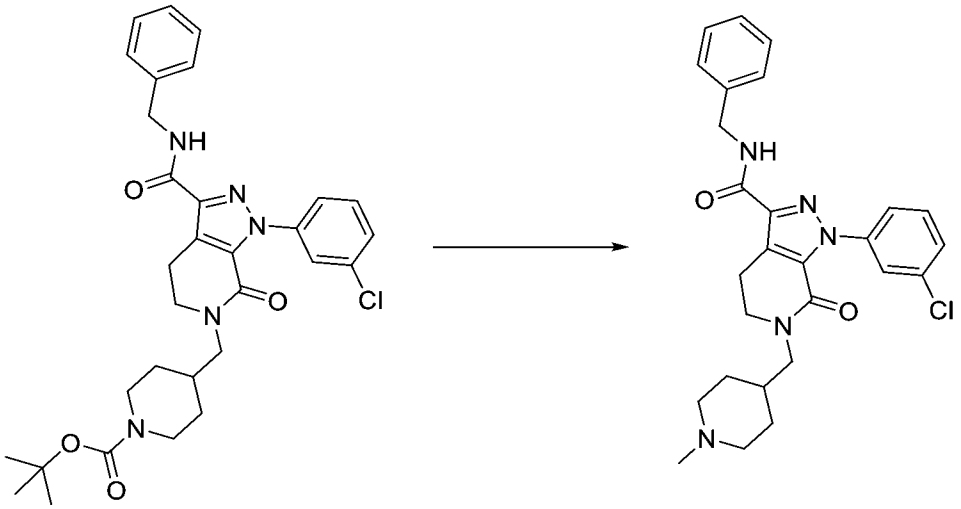
4-[[3-(苄基胺甲醯基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]甲基]哌啶-1-甲酸第三丁酯



【1130】 將1-(3-氯苯基)-6-[[1-[(2-甲基丙-2-基)氧羰基]哌啶-4-基]甲基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸 (180 mg，0.37 mmol)及HBTU (103 mg，0.44 mmol)溶解於DCM (30 mL)中。添加 TEA (154 µL，1.1 mmol)。20 min後，添加苄胺 (43 mg，0.4 mmol)。將混合物在rt下攪拌18 h，此後用$CHCl_3$ (100 mL)稀釋反應混合物。此溶液用飽和$NaHCO_3$ (30 mL)、水(30 mL)、鹽水(30 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，2% MeOH/$CHCl_3$)純化殘餘物，得到產物 (132 mg，62%產率)。

【1131】 $[M-Boc+H]^+ = 478.5$

N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-((1-甲基哌啶-4-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺甲酸酯



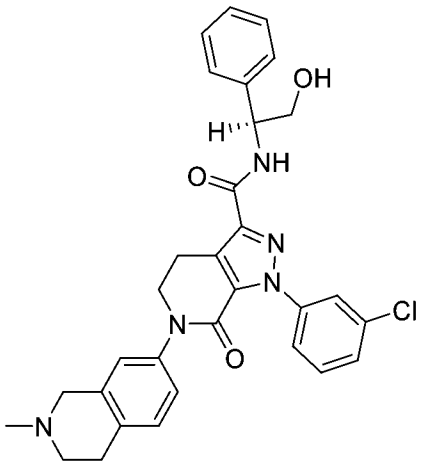
【1132】 將4-[[3-(苄基胺甲醯基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]甲基]哌啶-1-甲酸第三丁酯 (80 mg，0.14 mmol) 於甲酸 (52 μL，1.38 mmol) 中之溶液在50℃下攪拌30 min，添加甲醛(37%於水中) (13 μL，0.35 mmol)且將混合物加熱至90℃持續2 h。使反應混合物冷卻至rt且蒸發。藉由自動化製備型HPLC (質量導向，在2.5%甲酸/水之酸性移動相中2-60% MeCN/水，得到產物(22 mg，30%產率)。

【1133】 $[M+H]^+$ = 492.2

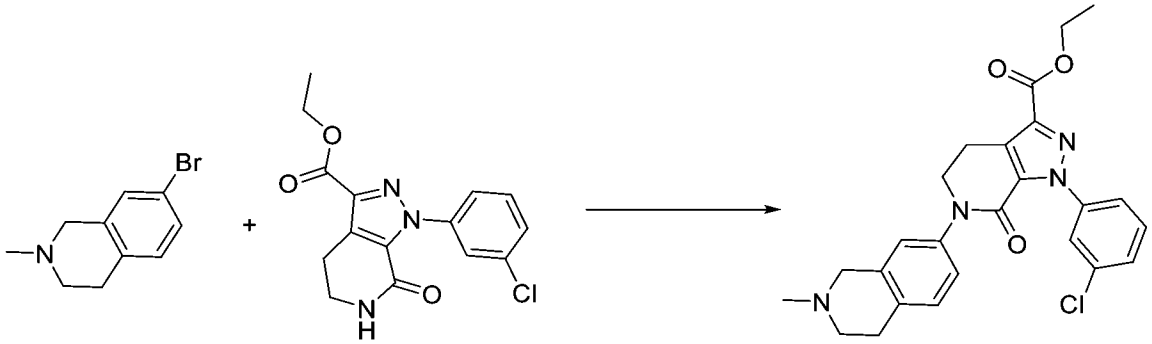
【1134】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.93 (1H, t, J = 7.1 Hz), 1.09 - 1.21 (2H, m), 1.54 - 1.60 (2H, m), 1.79 (2H, td, J = 11.7, 2.3 Hz), 2.11 (3H, s), 2.71 (2H, dt, J = 11.6, 3.3 Hz), 3.04 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.27 (2H, d,J = 6.6 Hz), 3.65 (2H, d, J = 6.7 Hz), 4.42 (2H, d, J = 6.3 Hz), 7.22 (1H, ddd, J = 8.8, 5.0, 3.8 Hz), 7.31 (3H, d, J = 4.3 Hz), 7.49 - 7.54 (2H, m), 7.58 (1H, dt, J = 6.3, 2.3 Hz), 7.71 - 7.74 (1H, m), 8.42 (3H, s), 8.96 (1H, t, J = 6.3 Hz)

實例編號1024

(S)-1-(3-氯苯基)-N-(2-羥基-1-苯基乙基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



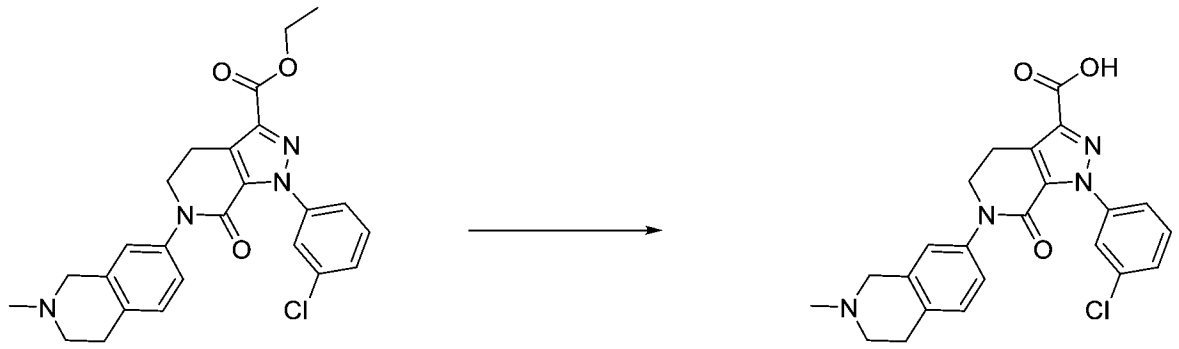
1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



【1135】 將1-(3-氯苯基)-4,5,6,7-四氫-7-側氧基-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯 (2500 mg，7.82 mmol)溶解於DMSO (3 mL)中且添加1,10-菲咯啉 (282 mg，1.56 mmol)、Cu(I)I (1638 mg，8.6 mmol)、7-溴-2-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉 (1945 mg，8.6 mmol)及K_2CO_3 (2161 mg，15.64 mmol)。將混合物在130℃下攪拌30 min且接著用EtOAc (70 mL)稀釋。用水、鹽水洗滌此溶液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，3% MeOH/$CHCl_3$)純化殘餘物，得到產物 (2620 mg，72%產率)。

【1136】 [M+H]+ = 465.2

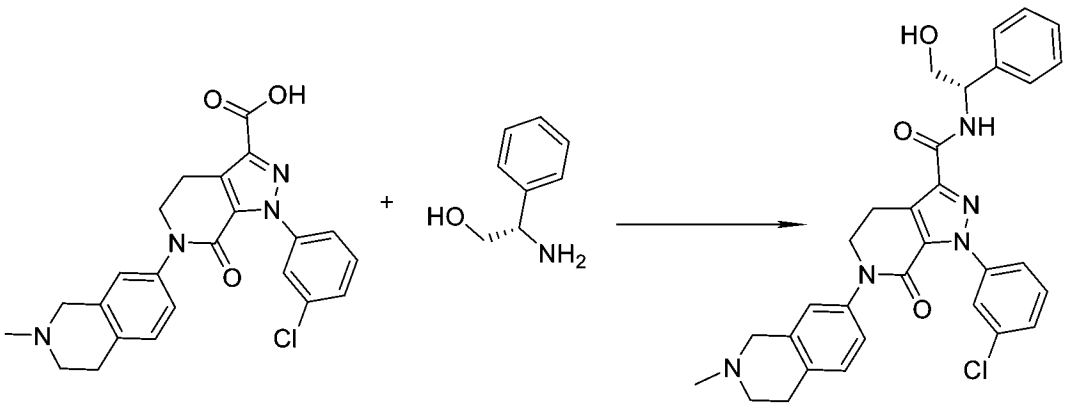
1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸-



【1137】 將1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯 (2600 mg，5.59 mmol)溶解於THF (100 mL)及水(10 mL)中。添加 $LiOH.H_2O$ (721 mg，16.8 mmol)且將混合物在rt下攪拌3 h。移除THF，用2M HCl (aq)將殘餘物之pH調節至pH7且用$CHCl_3$/IPA (4:1，3 x 50 mL)萃取。將合併之有機萃取物乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(2320 mg，95%產率)。

【1138】 $[M+H]^+ = 437.1$

(S)-1-(3-氯苯基)-N-(2-羥基-1-苯基乙基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



【1139】 將1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸 (63 mg，0.14 mmol)及HBTU (41 mg，0.17 mmol)溶解於DCM (30 mL)中。添加 TEA (60 μL，0.43 mmol)。20 min後，添加(S)-2-苯基甘胺醇 (22 mg，0.16 mmol)。將反應混合物在rt下攪拌18 h，接著用$CHCl_3$ (100 mL)稀釋。此溶液用飽和$NaHCO_3$ (30 mL)、水(30 mL)、鹽水(30 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)

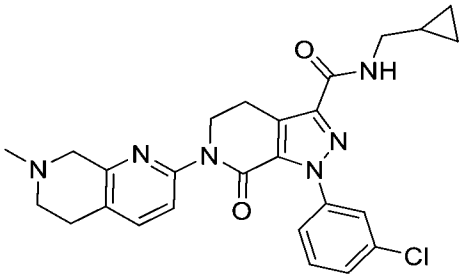
且蒸發。藉由急驟層析(矽石，4% MeOH/$CHCl_3$)純化殘餘物且自MeCN/水中凍乾，得到產物(38 mg，47%產率)。

【1140】 $[M+H]^+ = 556.2$

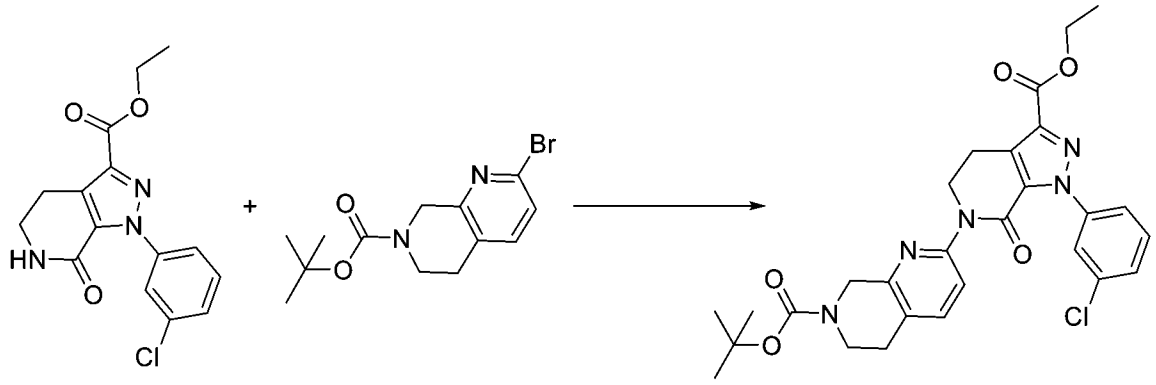
【1141】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.32 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.11 - 3.17 (2H, m), 3.44 (2H, s), 3.64 - 3.81 (2H, m), 4.00 (2H, t, J = 6.6 Hz), 5.00 (1H, t, J = 5.6 Hz), 5.06 (1H, td, J = 7.7, 5.2 Hz), 6.98 - 7.04 (1H, m), 7.07 - 7.13 (2H, m), 7.19 - 7.27 (1H, m), 7.29 - 7.35 (2H, m), 7.37 - 7.42 (2H, m), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.78 - 7.83 (1H, m), 8.61 (1H, d, J = 8.3 Hz)

實例編號1034

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(7-甲基-5,6,7,8-四氫-1,7-萘啶-2-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



2-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-6,8-二氫-5H-1,7-萘啶-7-甲酸第三丁酯

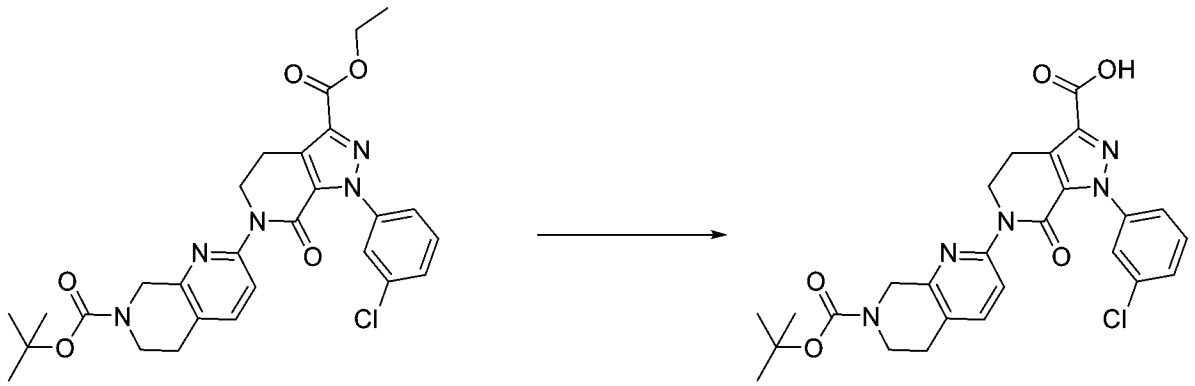


【1142】 用N_2 (g)吹掃1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(125 mg，0.39 mmol)及2-氯-6,8-二氫-5H-1,7-萘啶-7-甲酸第三丁酯(126 mg，0.47 mmol)於無水1,4-二噁烷(4 mL)中之溶液持續5 min。依序添加K_3PO_4 (207 mg，0.98 mmol)及(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷二胺(22 mg，0.16 mmol)，隨後添加Cu(I) I (15 mg，0.078 mmol)。將密封容器在100℃下攪拌18 h。經由Celite®過濾混合物，用EtOAc (50 mL)洗滌殘餘物；用水及鹽水洗滌濾液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，0-60% EtOAc/異己烷)純化殘餘物，得到產物(70 mg，32%產率)。

【1143】 $[M+H]^+$ = 552.0, 554.0

【1144】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.44 (9H, s), 2.77 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.16 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.60 (2H, t, J = 5.7 Hz), 4.31 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.36 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.50 (2H, s), 7.48 - 7.65 (5H, m), 7.79 (1H, t, J = 1.8 Hz)

6-(7-第三丁氧羰基-6,8-二氫-5H-1,7-萘啶-2-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸

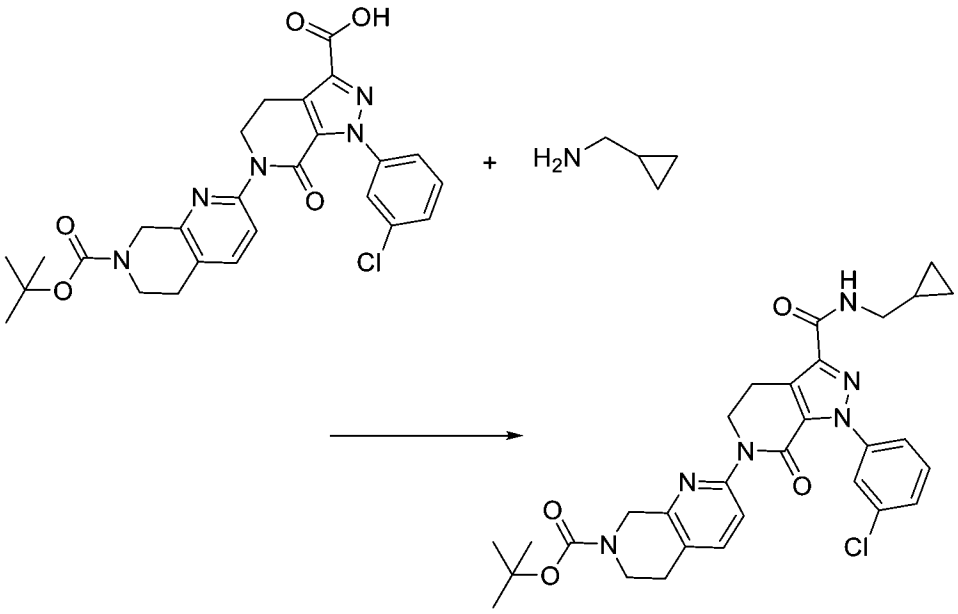


【1145】 向2-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-6,8-二氫-5H-1,7-萘啶-7-甲酸第三丁酯(70 mg，0.13 mmol)於THF (3 mL)及水

(1 mL)之混合物中之溶液中添加LiOH.H_2O (13 mg，0.32 mmol)。將混合物在rt下攪拌72 h。移除THF，且使用1M HCl (aq)將剩餘水溶液酸化至pH = 2-3。此用EtOAc (3 x 40 mL)萃取且將合併之有機萃取物乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(57 mg，85%產率)。

【1146】 $[M+H]^+$ = 524.1, 526.1

7-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

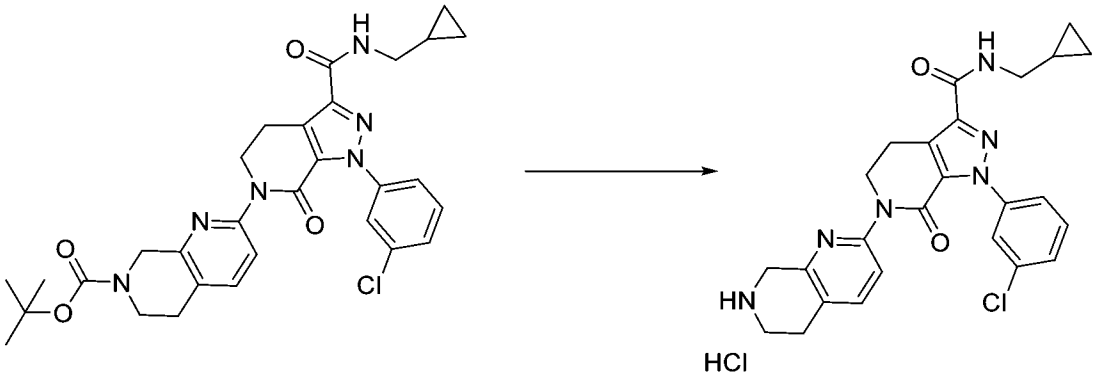


【1147】 向6-(7-第三丁氧羰基-6,8-二氫-5H-1,7-萘啶-2-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(55 mg，0.1 mmol)於MeCN (12 mL)中之懸浮液中添加胺基甲基環丙烷(13 μL，0.15 mmol)、1-甲基咪唑(29 μL，0.32 mmol)及TCFH (38 mg，0.14 mmol)。將混合物在rt下攪拌20 h。用EtOAc (75 mL)稀釋此溶液，用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，0-40% EtOAc/異己烷)純化殘餘物，得到產物(56 mg，92%產率)。

【1148】 $[M+H]^+$ = 577.2, 579.2

【1149】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.21 - 0.27 (2H, m), 0.38 - 0.47 (2H, m), 0.99 - 1.11 (1H, m), 1.44 (9H, s), 2.77 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.17 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.60 (2H, t, J = 5.8 Hz), 4.29 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.50 (2H, s), 7.48 - 7.61 (4H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.80 - 7.84 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(5,6,7,8-四氫-1,7-萘啶-2-基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽

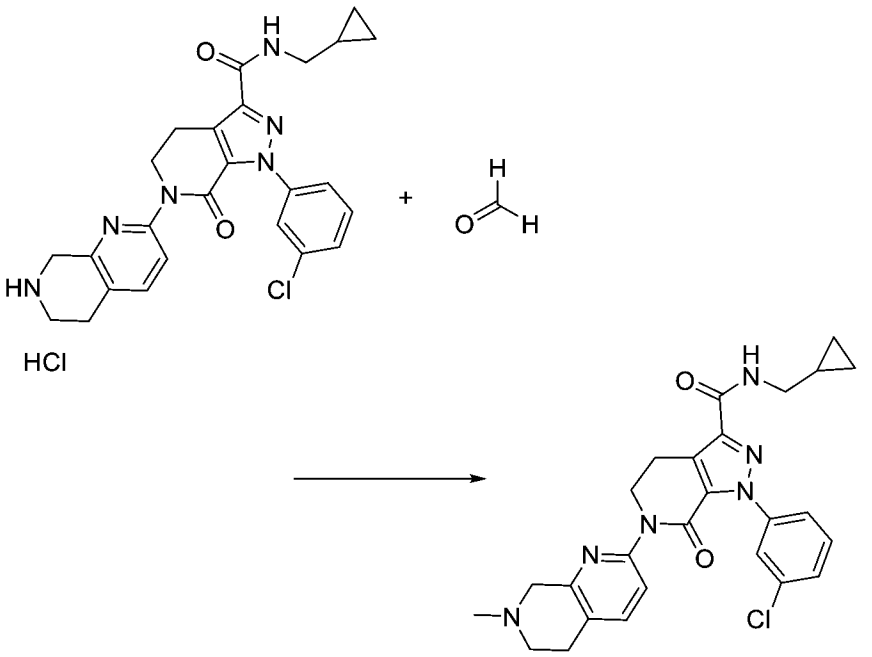


【1150】 將7-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯 (50 mg，0.09 mmol)溶解於含4M HCl之1,4-二噁烷 (3 mL)中。在rt下20 h後，移除溶劑，得到產物 (42 mg，95%產率)。

【1151】 $[M+H]^+$ = 477.2, 479.2

【1152】 ^{1}H NMR DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.19 - 0.28 (2H, m), 0.38 - 0.46 (2H, m), 0.99 - 1.10 (1H, m), 3.01 (2H, t, J = 6.1 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.39 - 3.44 (2H, m), 4.23 - 4.35 (4H, m), 7.50 - 7.57 (2H, m), 7.60 - 7.71 (3H, m), 7.80 - 7.86 (1H, m), 8.54 (1H, t, J = 6.0 Hz), 9.49 (2H, s br)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(7-甲基-5,6,7,8-四氫-1,7-萘啶-2-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



【1153】 向1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(5,6,7,8-四氫-1,7-萘啶-2-基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽 (40 mg，0.078 mmol)於DCM (1 mL)及MeOH (0.2 mL)之混合物中之溶液中添加TEA (33 μL，0.23 mmol)及甲醛(37 wt.%於H_2O中，29 μL，0.39 mmol)且將混合物在rt下攪拌15 min。逐份添加STAB (25 mg，0.12 mmol)且將混合物攪拌2 h。用DCM (50 mL)稀釋該溶液，用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌，經(Na_2SO_4)乾燥且蒸發。藉由離子交換SCX-2管柱純化殘餘物，用MeOH (10 mL)洗滌且用含3M NH_3之MeOH (10 mL)溶離，得到產物(28 mg，72%產率)。

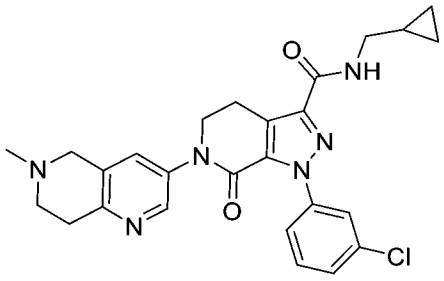
【1154】 $[M+H]^+$ = 491.1, 493.0

【1155】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.21 - 0.27 (2H, m), 0.38 - 0.46 (2H, m), 1.04 (1H, dddd, J = 12.7, 8.1, 5.1, 2.1 Hz), 2.37 (3H, s), 2.61 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.16 (2H, t, J = 6.9 Hz), 3.50 (2H, s), 4.27

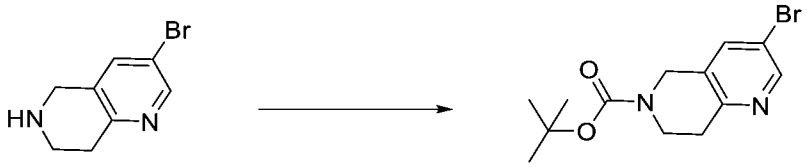
(2H, t, J = 6.5 Hz), 7.46 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.49 - 7.57 (3H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.81 - 7.84 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號1040

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(6-甲基-5,6,7,8-四氫-1,6-萘啶-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



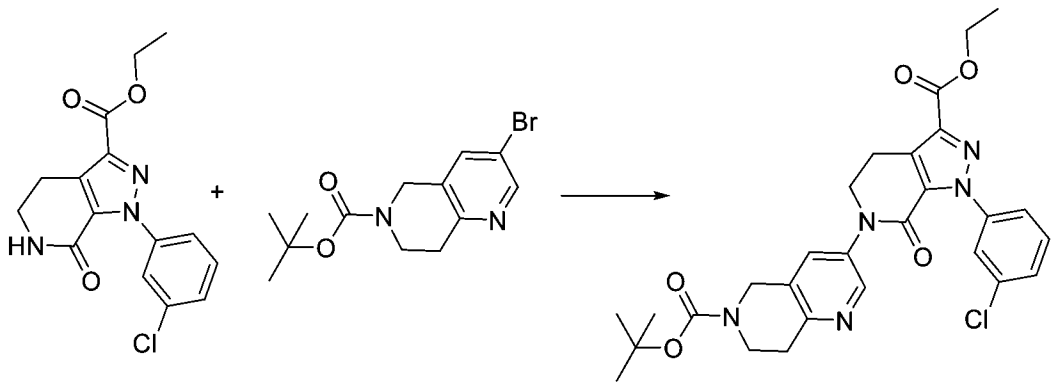
3-溴-7,8-二氫-5H-1,6-萘啶-6-甲酸第三丁酯



【1156】 將Boc_2O (262 mg，1.20 mmol)添加至3-溴-5,6,7,8-四氫-1,6-萘啶鹽酸鹽(250 mg，1.00 mmol)及TEA (420 μL，3.01 mmol)於DCM (10 mL)中之溶液中。將混合物在rt下攪拌18 h。添加水(10 mL)，分離有機相，且用DCM (3 × 5 mL)進一步萃取水相。用鹽水洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(354 mg，100%產率)。

【1157】 $[M+H]^+$ = 312.9, 314.9

3-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-7,8-二氫-5H-1,6-萘啶-6-甲酸第三丁酯

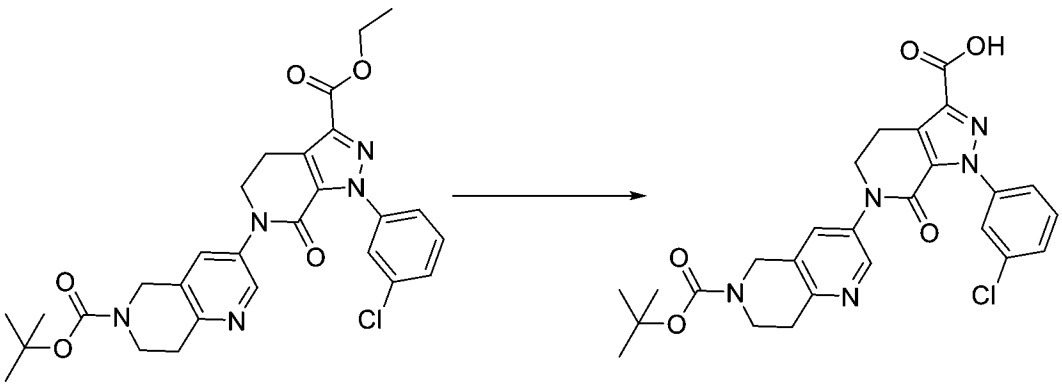


【1158】 將Cu(I) I (9.8 mg，0.051 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(82 mg，0.26 mmol)、3-溴-7,8-二氫-5H-1,6-萘啶-6-甲酸第三丁酯(117 mg，0.36 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷-二胺(15 mg，0.10 mmol)及K_3PO_4 (136 mg，0.64 mmol)於無水1,4-二噁烷(1.7 mL)中之攪拌懸浮液中。接著將混合物在100℃下加熱20 h。使混合物冷卻至rt。經由Celite®過濾混合物，用EtOAc (50 mL)沖洗，用水及鹽水洗滌濾液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，0 - 100% EtOAc/異己烷)純化殘餘物，得到產物(100 mg，44%產率)。

【1159】 $[M+H]^+$ = 552.1, 554.0

【1160】 ^{1}H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.44 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.48 (9H, s), 2.99 (2H, s), 3.36 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.73 (2H, s), 4.12 - 4.19 (2H, m), 4.48 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.58 (2H, s), 7.31 - 7.50 (4H, m), 7.61 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.40 (1H, d, J = 2.5 Hz)

6-(6-第三丁氧羰基-7,8-二氫-5H-1,6-萘啶-3-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸

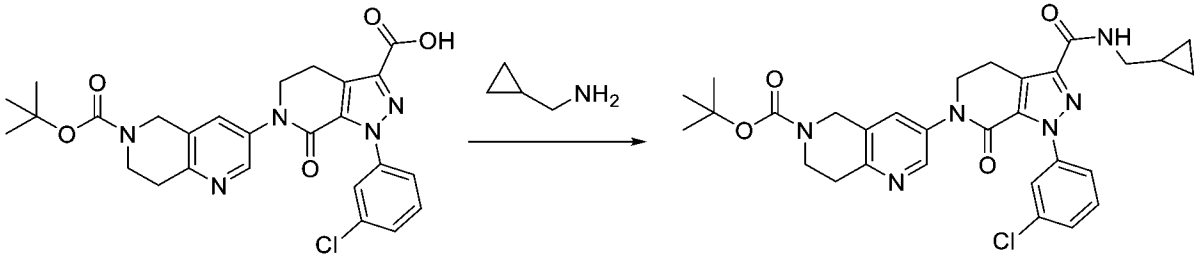


【1161】 將2M NaOH (aq) (0.14 mL，0.27 mmol)添加至3-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-7,8-二氫-5H-1,6-萘啶-6-甲酸第三丁酯(100 mg，0.18 mmol)於THF (1 mL)及MeOH之混合物中之溶液中。將混合物在rt下攪拌2 h。移除反應溶劑，將殘餘物溶解於5%檸檬酸(aq) (5 mL)中，且萃取至EtOAc (3 × 5 mL)中。將合併之有機萃取物乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(104 mg，100%產率)。

【1162】 $[M+H]^+$ = 524.1, 526.0

【1163】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.43 (9H, s), 2.86 (2H, t, J = 6.0 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.66 (2H, t, J = 5.9 Hz), 4.00 - 4.13 (2H, m), 4.54 (2H, s), 7.48 - 7.67 (4H, m), 7.74 (1H, d, J = 2.1 Hz), 8.41 (1H, d, J = 2.5 Hz), 13.35 (1H, s)

3-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-7,8-二氫-5H-1,6-萘啶-6-甲酸第三丁酯



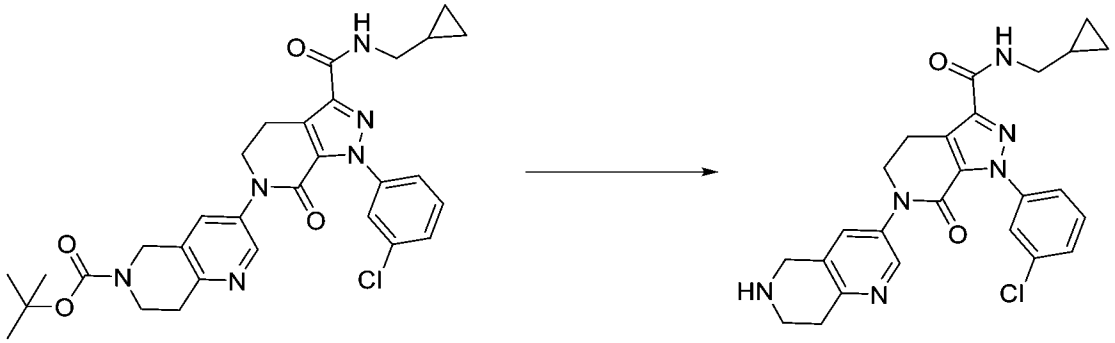
【1164】 在0℃下將TCFH (100 mg，0.36 mmol)添加至6-(6-第三丁氧羰基-7,8-二氫-5H-1,6-萘啶-3-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸

(104 mg，0.20 mmol)、胺基甲基環丙烷(0.022 mL，0.26 mmol)及1-甲基咪唑(100 μL，0.89 mmol)於MeCN (2 mL)中之溶液中。將混合物在rt下攪拌20 h，用EtOAc (75 mL)稀釋，用飽和$NaHCO_3$ (aq) (20 mL)及鹽水(2 x 20 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，5 - 100% EtOAc/異己烷)純化殘餘物，得到產物(91 mg，73%產率)。

【1165】 $[M+H]^+$ = 577.2, 579.2

【1166】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 0.30 (2H, t, J = 4.9 Hz), 0.53 - 0.62 (2H, m), 1.07 (1H, s), 1.48 (9H, s), 2.99 (2H, s), 3.28 - 3.36 (2H, m), 3.43 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.73 (2H, s), 4.13 (2H, t, J = 7.0 Hz), 4.58 (2H, s), 7.07 (1H, s), 7.31 - 7.51 (4H, m), 8.40 (1H, d, J = 2.4 Hz)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(5,6,7,8-四氫-1,6-萘啶-3-基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

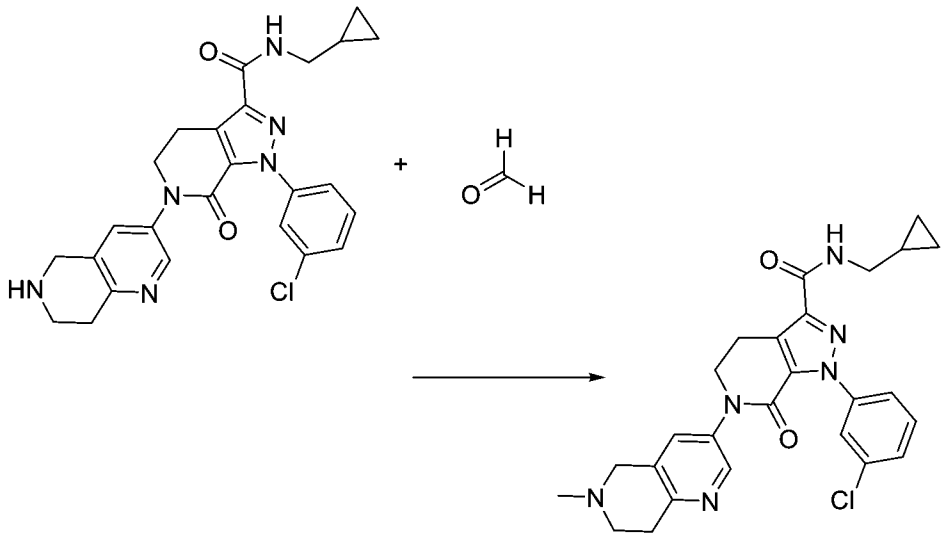


【1167】 將3-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-7,8-二氫-5H-1,6-萘啶-6-甲酸第三丁酯(91 mg，0.15 mmol)溶解於含4M HCl之1,4-二噁烷 (3 mL)中。在rt下20 h後，使溶劑蒸發。藉由SCX離子交換純化殘餘物，裝載MeOH (10 mL)且用含2M NH_3之MeOH (10 mL)溶離，得到產物 (64 mg，92%產率)。

【1168】 $[M+H]^+$ = 477.2

【1169】 ^{1}H NMR (甲醇-d4, 400 MHz) δ 0.27 - 0.34 (2H, m), 0.50 - 0.57 (2H, m), 1.07 - 1.20 (1H, m), 2.94 (2H, t, J = 6.1 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.1 Hz), 3.22 - 3.28 (2H, m), 3.33 - 3.36 (2H, m), 4.00 (2H, s), 4.15 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.44 - 7.49 (2H, m), 7.58 - 7.63 (2H, m), 7.72 - 7.76 (1H, m), 8.40 (1H, d, J = 2.4 Hz)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(6-甲基-5,6,7,8-四氫-1,6-萘啶-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



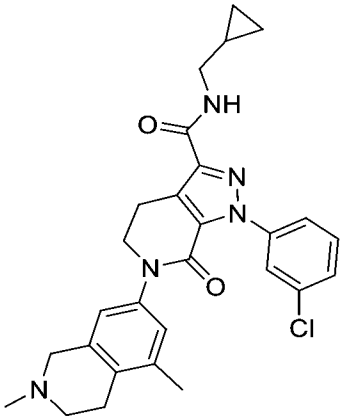
【1170】 將甲醛(37 wt.%於H_2O中，50 μL，0.67 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(5,6,7,8-四氫-1,6-萘啶-3-基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺(64 mg，0.13 mmol)及AcOH (38 μL，0.67 mmol)於DCM (1.5 mL)及MeOH (0.3 mL)之混合物中之溶液中。將混合物在rt下攪拌30 min。添加STAB (57 mg，0.29 mmol)且將所得混合物在rt下攪拌1 h。添加飽和K_2CO_3 (aq) (5 mL)且將混合物萃取至DCM (3 × 5 mL)中。用鹽水(10 mL)洗滌合併之有機萃取物且乾燥(Na_2SO_4)，且蒸發。藉由急驟層析(矽石，0 - 15% MeOH/DCM)純化殘餘物，得到產物(33 mg，50%產率)。

【1171】 $[M+H]^+$ = 491.2, 493.2

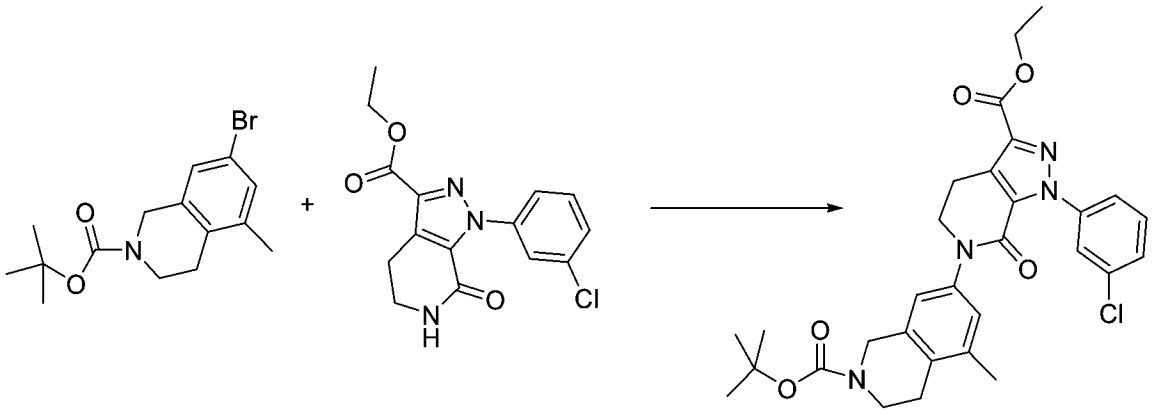
【1172】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.20 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.12 (1H, m), 2.36 (3H, s), 2.69 (2H, t, J = 6.0 Hz), 2.88 (2H, t, J = 6.0 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.50 (2H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.47 - 7.58 (3H, m), 7.58 - 7.67 (1H, m), 7.79 (1H, t, J = 1.7 Hz), 8.37 (1H, d, J = 2.5 Hz), 8.53 (1H, t, J = 6.1 Hz)

實例編號1048

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2,5-二甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-5-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



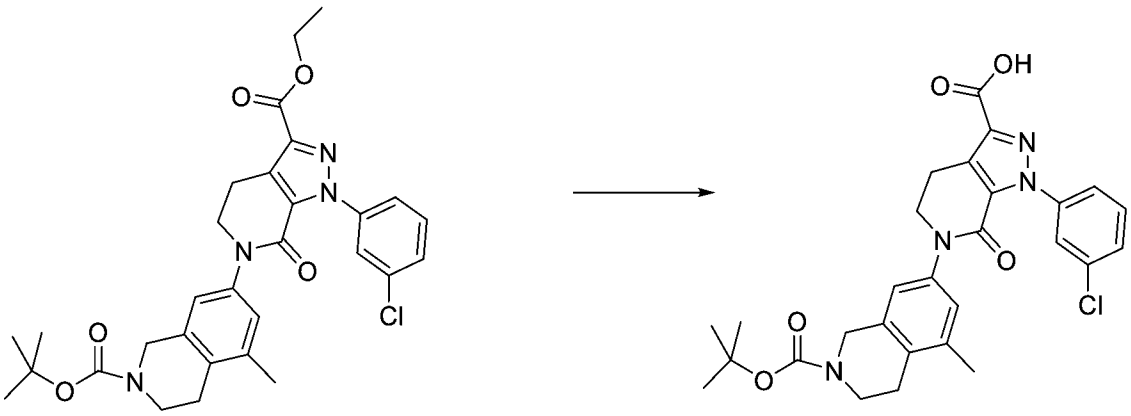
【1173】 用N_2 (g)使1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(100 mg，0.313 mmol)及7-溴-5-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

(122 mg，0.375 mmol)於1,4-二噁烷(3 mL)中之溶液鼓泡5 min。此後，且保持鼓泡，依序添加K_3PO_4 (166 mg，0.782 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷二胺(18 mg，0.13 mmol)及最終Cu(I)I (12 mg，0.063 mmol)。用N_2 (g)鼓泡2 min後，關閉系統且在100℃下攪拌18 h。經由Celite®過濾該溶液，用EtOAc (50 mL)沖洗；用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌濾液，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，0-50% EtOAc/異己烷)得到產物(72 mg，41%產率)。

【1174】 $[M-tBu+H]^+$ = 509.1/511.1

【1175】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.41 (9H, s), 2.19 (3H, s), 2.64 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.58 (2H, t, J = 6.1 Hz), 4.00 - 4.09 (2H, m), 4.35 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.47 (2H, s), 6.99 (1H, s), 7.04 (1H, s), 7.48 - 7.62 (3H, m), 7.71 - 7.75 (1H, m)

6-(2-第三丁氧羰基-5-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸



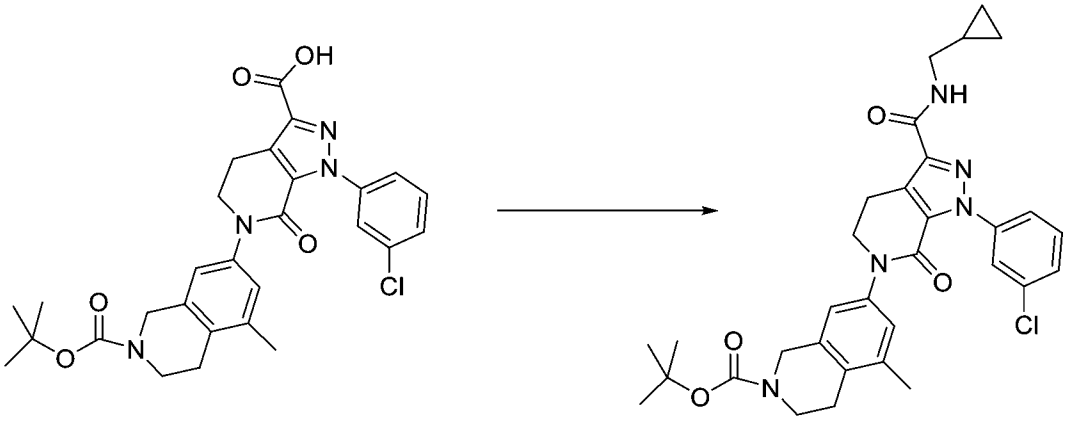
【1176】 向7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-5-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(70 mg，0.124 mmol)於THF (2 mL)及水(1 mL)之混合物中之溶液中添加$LiOH.H_2O$ (13 mg，0.31 mmol)且將混合物在rt下攪拌18 h。使THF蒸發且使用1N HCl (aq)將剩餘水溶液酸化至pH = 2-3。用

EtOAc萃取酸化之水相且將合併之有機相乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發以提供產物(68 mg)。

【1177】 $[M\text{-}tBu+H]^+$ = 481.0/483.0

【1178】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.42 (9H, s), 2.19 (3H, s), 2.65 (2H, t, J = 6.1 Hz), 3.17 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.58 (2H, t, J = 6.0 Hz), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.47 (2H, s), 6.99 (1H, s), 7.04 (1H, s), 7.48 - 7.62 (3H, m), 7.70 - 7.73 (1H, m), 13.32 (1H, s br)

7-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-5-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

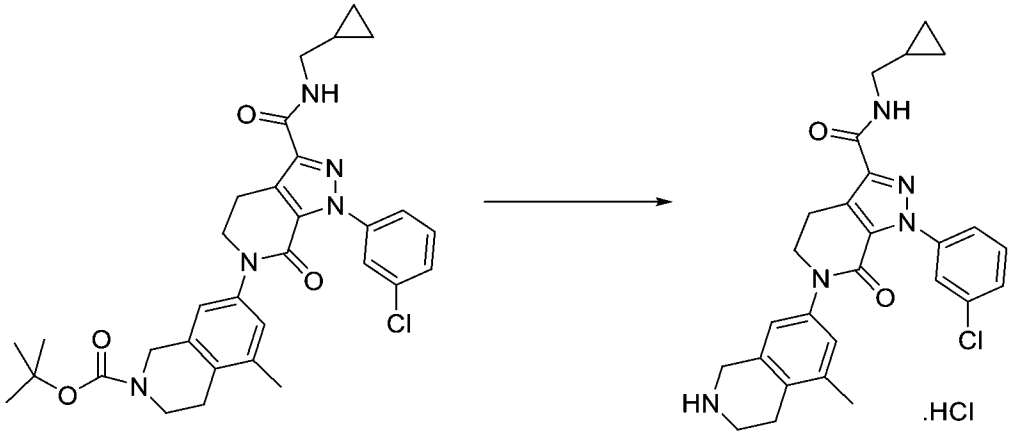


【1179】 向6-(2-第三丁氧羰基-5-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(65 mg，0.121 mmol)於MeCN (1.5 mL)中之懸浮液中添加胺基甲基環丙烷(0.015 mL，0.17 mmol)、1-甲基咪唑(0.034 mL，0.42 mmol)及TCFH (44 mg，0.16 mmol)，且將混合物在rt下攪拌20 h。用EtOAc (50 mL)稀釋該溶液且用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，2-50% EtOAc/異己烷)得到產物(52 mg，73%產率)。

【1180】 $[M\text{-}tBu+H]^+$ = 534.2/536.2

【1181】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.21 - 0.28 (2H, m), 0.38 - 0.46 (2H, m), 1.00 - 1.10 (1H, m), 1.42 (9H, s), 2.19 (3H, s), 2.64 (2H, t, J = 6.0 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.58 (2H, t, J = 5.9 Hz), 4.02 (2H, t, J = 6.9 Hz), 4.47 (2H, s), 7.00 (1H, s), 7.04 (1H, s), 7.48 - 7.57 (2H, m), 7.60 - 7.66 (1H, m), 7.75 - 7.79 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(5-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽

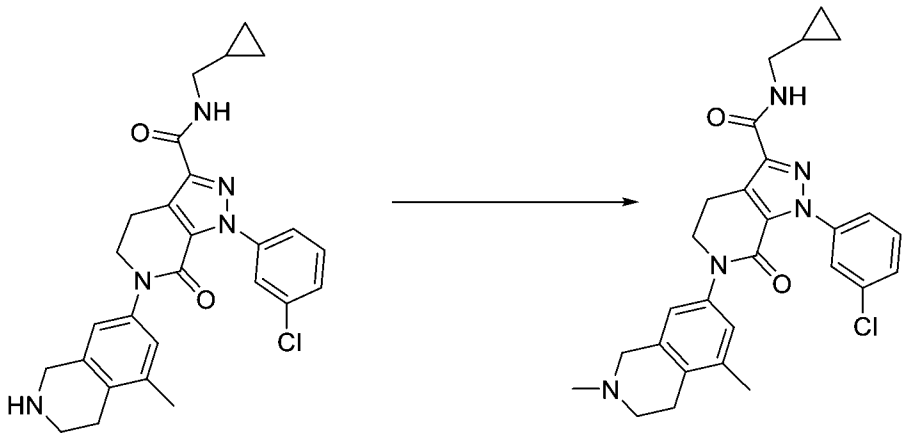


【1182】 向7-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-5-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(50 mg，0.085 mmol)於1,4-二噁烷(0.5 mL)中之溶液中添加HCl (4M於1,4-二噁烷中) (0.44 mL，1.8 mmol)且將混合物在rt下攪拌20 h。使溶劑蒸發，得到產物(45 mg)。

【1183】 $[M+H]^+$ = 490.1/492.1

【1184】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.20 - 0.29 (2H, m), 0.38 - 0.48 (2H, m), 1.00 - 1.11 (1H, m), 2.22 (3H, s), 2.84 (2H, t, J = 6.3 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.40 (2H, t, J = 8.1 Hz), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.23 (2H, s), 7.08 (1H, s), 7.16 (1H, s), 7.47 - 7.58 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.74 - 7.79 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.1 Hz), 9.16 (2H, s br)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2,5-二甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



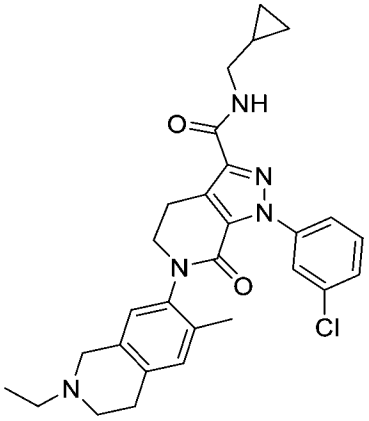
【1185】 向1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(5-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽(43 mg，0.082 mmol)於DCM (1 mL)及MeOH (0.2 mL)之混合物中之溶液中添加TEA (0.034 mL，0.25 mmol)及甲醛(37 wt.%於H_2O中) (0.030 mL，0.41 mmol)且將混合物在rt下攪拌30 min。逐份添加STAB (26 mg，0.12 mmol)且將混合物攪拌72 h。用DCM (50 mL)稀釋該溶液且用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。藉由裝載至離子交換SCX-2管柱上、用MeOH洗滌且用含3M NH_3之MeOH溶離來純化產物。濃縮溶離液且凍乾以提供產物(32 mg，75%產率)。

【1186】 $[M+H]^+$ = 504.1/506.1

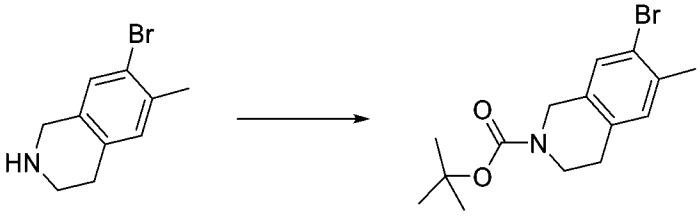
【1187】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.19 - 0.28 (2H, m), 0.35 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.12 (1H, m), 2.16 (3H, s), 2.32 (3H, s), 2.59 - 2.68 (4H, m), 3.11 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.43 (2H, s), 4.00 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.84 - 6.89 (1H, m), 6.96 - 7.01 (1H, m), 7.45 - 7.56 (2H, m), 7.56 - 7.65 (1H, m), 7.74 - 7.79 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號1054

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-乙基-6-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



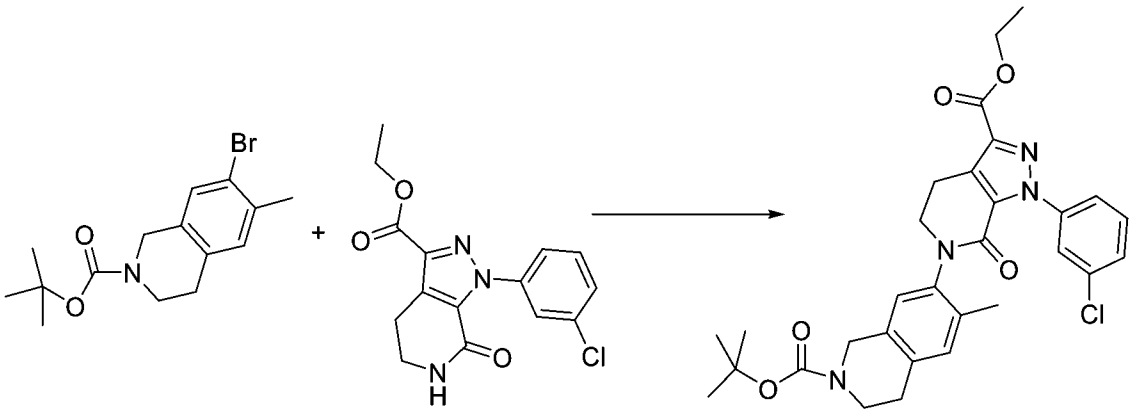
7-溴-6-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



【1188】 在rt下將Boc_2O (157 mg，0.719 mmol)添加至7-溴-6-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉(125 mg，0.553 mmol)及TEA (0.15 mL，1.11 mmol)於DCM (5 mL)中之攪拌溶液中。將混合物在rt下攪拌20 h。添加水(5 mL)，分離有機相且將水相萃取至DCM (3 × 5 mL)中。合併有機部分，用飽和$NaHCO_3$ (aq) (10 mL)及飽和鹽水溶液(10 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮，生成產物(199 mg，100%產率)，其無需進一步純化即用於後續反應。

【1189】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.48 (9H, s), 2.34 (3H, d, J = 0.9 Hz), 2.74 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.61 (2H, s), 4.50 (2H, s), 7.00 (1H, s), 7.28 (1H, s)

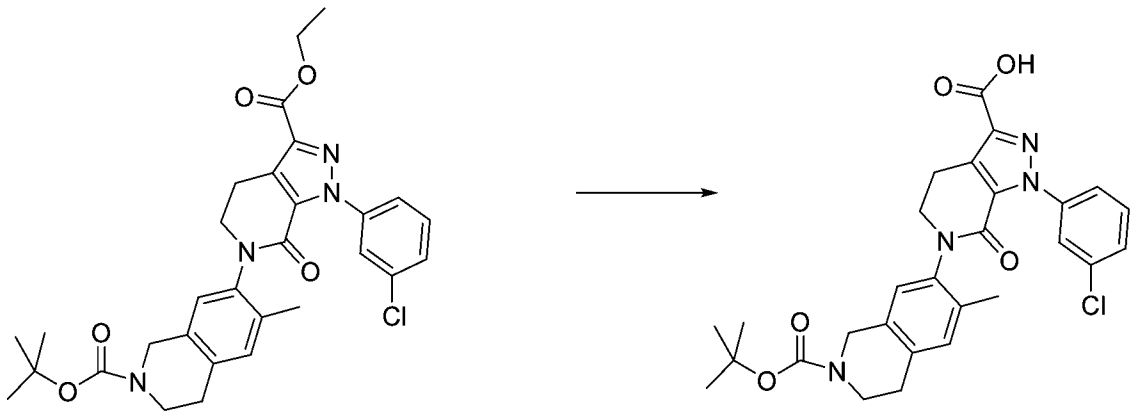
7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-6-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



【1190】 在rt下將Cu(I)I (19 mg，0.10 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(160 mg，0.500 mmol)、7-溴-6-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(196 mg，0.600 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷-二胺(28 mg，0.20 mmol)及K_3PO_4 (266 mg，1.25 mmol)於無水1,4-二噁烷(3.5 mL)中之懸浮液中。用N_2 (g)噴射混合物持續5 min，加熱至100℃且攪拌20 h。經由Celite®墊過濾混合物，且用EtOAc (5 × 10 mL)洗滌有機物。合併有機部分，用水(20 mL)及飽和鹽水溶液(20 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。藉由層析(矽石，5 - 100% EtOAc/異己烷)純化產物，生成產物(56 mg，20%產率)。

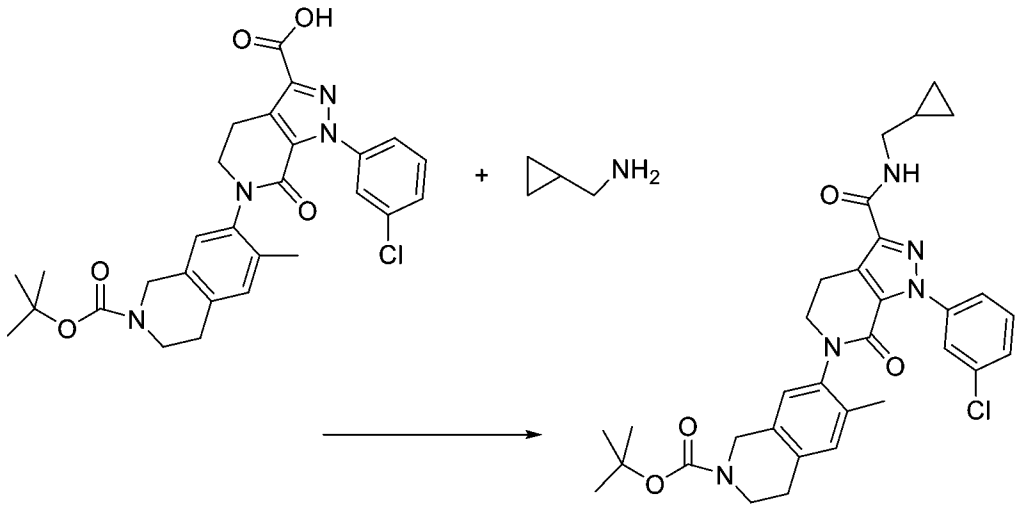
【1191】 $[M\text{-}tBu+H]^+$ = 509.2/511.1

6-(2-第三丁氧羰基-6-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸



【1192】 在rt下將LiOH.H_2O (18 mg，0.43 mmol)添加至7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-6-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(96 mg，0.170 mmol)於THF (1 mL)及水(0.5 mL)之混合物中之溶液中。將混合物在rt下攪拌6 h。移除溶劑，添加5%檸檬酸(aq) (5 mL)且將有機物萃取至EtOAc (3 × 5 mL)中。合併萃取物，用飽和鹽水溶液(10 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮，生成產物(80 mg，88%產率)，其無需進一步處理直接進入下一反應。

7-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-6-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

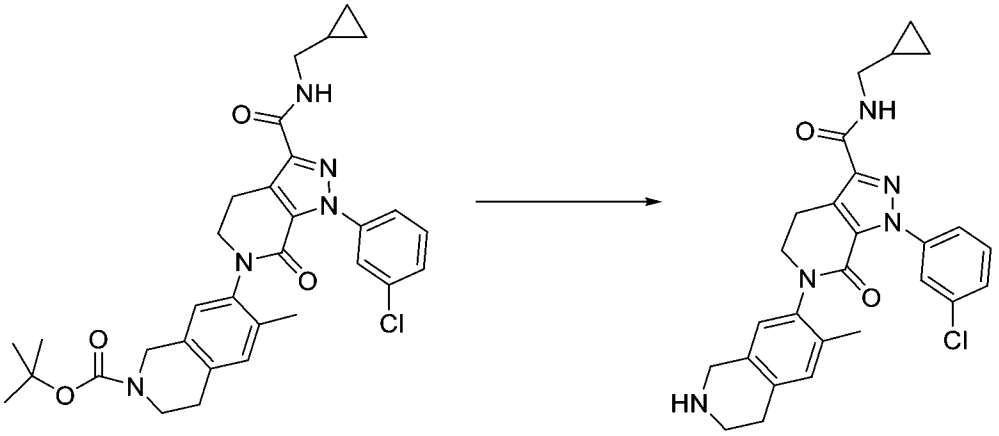


【1193】 在rt下將TCFH (63 mg，0.22 mmol)添加至6-(2-第三丁氧羰基-6-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(80 mg，0.15 mmol)、胺基甲基環丙烷(0.017 mL，0.19 mmol)及1-甲基咪唑(0.053 mL，0.67 mmol)於無水MeCN (2 mL)中之攪拌懸浮液中。將混合物在rt下攪拌20 h。在移除溶劑後，添加水(5 mL)且用EtOAc (3 × 5 mL)萃取。合併萃取物，用飽和$NaHCO_3$ (aq) (10 mL)及飽和鹽水溶液(10 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮，生成產物。藉由急驟層析(矽石，0 - 80% EtOAc/異己烷)純化此產物，生成產物(68 mg，77產率)。

【1194】 $[M\text{-}tBu+H]^+$ = 534.1/536.1

【1195】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 0.25 - 0.34 (2H, m), 0.53 - 0.62 (2H, m), 1.03 - 1.11 (1H, m), 1.48 (9H, s), 2.20 (3H, s), 2.78 (2H, s), 3.30 - 3.41 (2H, m), 3.38 - 3.49 (2H, m), 3.62 - 3.67 (3H, m), 4.49 (2H, s), 6.93 (1H, s), 7.02 - 7.10 (2H, m), 7.22 (1H, s), 7.31 - 7.40 (2H, m), 7.50 - 7.57 (1H, m), 7.62 - 7.67 (1H, m)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(6-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽

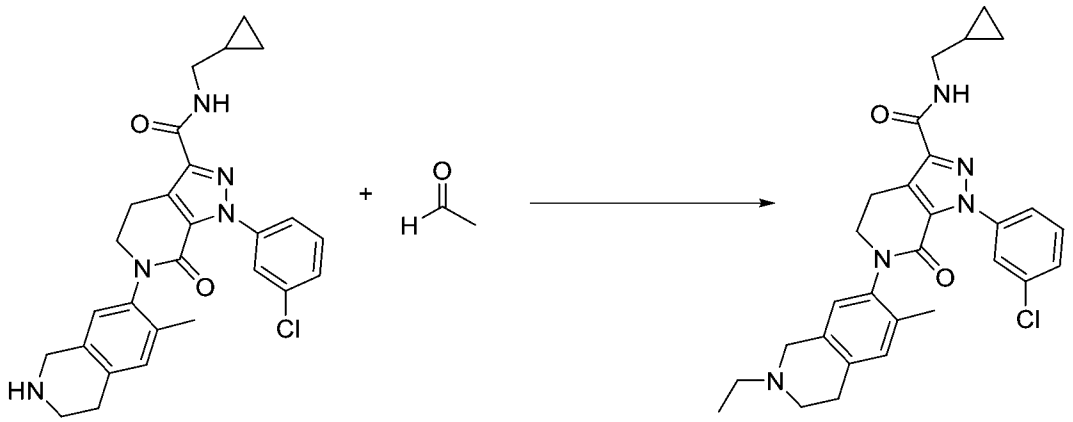


【1196】 在rt下將HCl (4N於1,4-二噁烷中) (0.50 mL)添加至7-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-6-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(68 mg，0.115 mmol)於1,4-二噁烷(0.5 mL)中之溶液中。將混合物在rt下攪拌20 h。蒸發得到產物(61 mg，99%產率)，其無需進一步純化即用於後續反應。

【1197】 $[M+H]^+$ = 490.2/492.2

【1198】 ^1H NMR (甲醇-d4, 400 MHz) δ 0.30 (2H, dt, J = 6.0, 4.5 Hz), 0.49 - 0.58 (2H, m), 1.06 - 1.18 (1H, m), 2.25 (3H, s), 3.10 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.22 - 3.29 (2H, m), 3.31 - 3.56 (4H, m), 3.82 - 3.93 (1H, m), 4.04 - 4.16 (1H, m), 4.32 (2H, s), 7.17 (1H, s), 7.22 (1H, s), 7.43 - 7.50 (2H, m), 7.55 - 7.64 (1H, m), 7.73 (1H, s)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-乙基-6-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



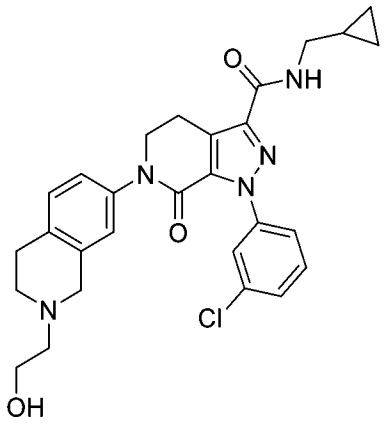
【1199】 在rt下將乙醛(EtOH中之50 wt.%溶液) (0.046 mL，0.46 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(6-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽(61 mg , 0.115 mmol)及TEA (0.064 mL, 0.46 mmol)於DCM (1.5 mL)及MeOH (0.3 mL)之混合物中之溶液中。將混合物在rt下攪拌1 h。添加STAB (37 mg，0.17 mmol)且將混合物在rt下攪拌2 h。添加飽和K_2CO_3 (aq) (10 mL)且用DCM (3 × 5 mL)萃取混合物。合併DCM部分，用飽和鹽水溶液(10 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮，生成產物。藉由層析(矽石，0 - 15% MeOH/DCM)純化此產物且凍乾，生成產物(40 mg，66%產率)。

【1200】 $[M+H]^+$ = 518.2/520.2

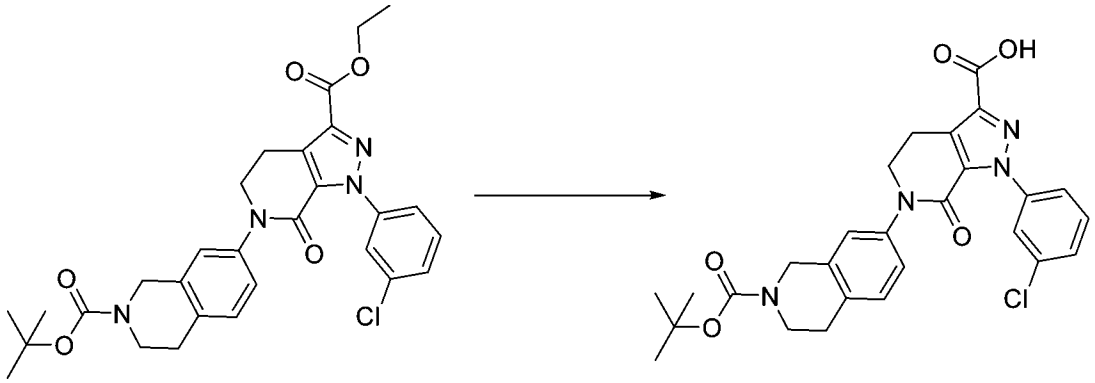
【1201】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.20 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.46 (2H, m), 0.99 - 1.14 (4H, m), 2.10 (3H, s), 2.47 (2H, t, J = 7.1 Hz), 2.55 - 2.68 (2H, m), 2.76 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.13 - 3.32 (2H, m), 3.42 - 3.55 (2H, m), 3.68 - 3.78 (1H, m), 3.97 - 4.08 (1H, m), 6.99 (2H, d, J = 7.4 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.57 - 7.67 (1H, m), 7.74 - 7.80 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號1055

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



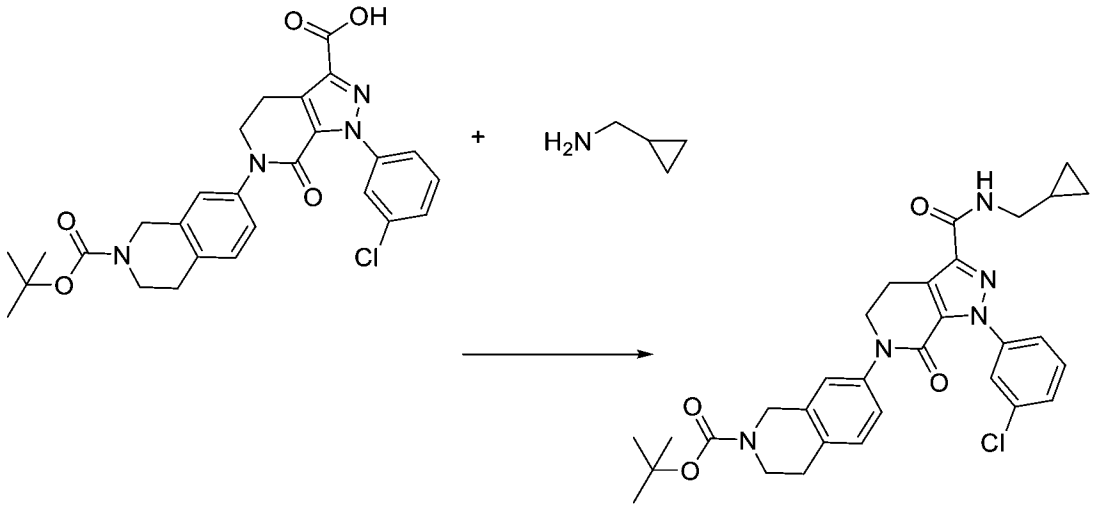
6-(2-第三丁氧羰基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸



【1202】 向7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(785 mg，1.42 mmol)於THF (10 mL)及水(5 mL)之混合物中之溶液中添加$LiOH.H_2O$ (149 mg，3.56 mmol)。將混合物在rt下攪拌72 h。移除THF且使用1M HCl (aq)將剩餘水溶液酸化至pH = 2-3。用EtOAc (3 x 40 mL)萃取酸化之水相，將合併之有機萃取物乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(661 mg，89%產率)。

【1203】 $[M-^tBu+H]^+$ = 467.1, 469.0

7-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

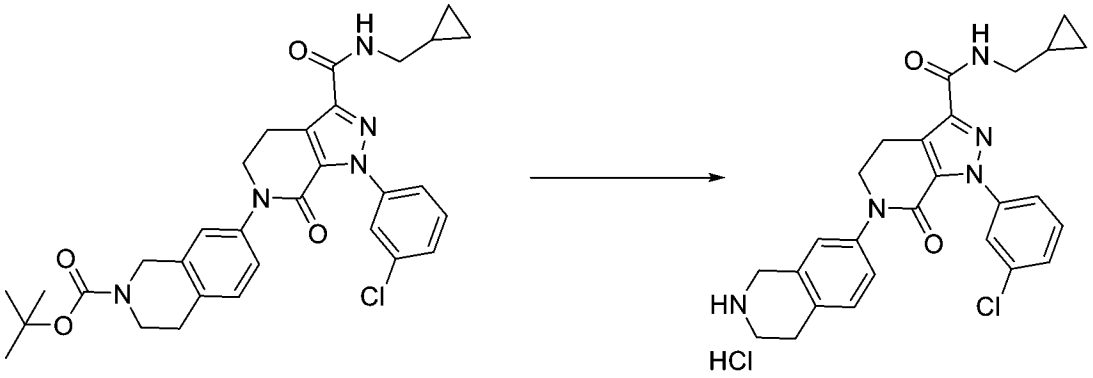


【1204】 向6-(2-第三丁氧羰基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(660 mg，1.26 mmol)於無水MeCN (12 mL)中之懸浮液中添加胺基甲基環丙烷(0.15 mL，1.77 mmol)、1-甲基咪唑(0.35 mL，4.42 mmol)及TCFH (460 mg，1.64 mmol)。將混合物在rt下攪拌20 h。用EtOAc (75 mL)稀釋此溶液且用飽和$NaHCO_3$ (20 mL)及鹽水(2 x 20 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，2-50% EtOAc/異己烷)純化殘餘物，得到產物(625 mg，86%產率)。

【1205】 $[M-^tBu+H]^+$ = 520.1, 522.1

【1206】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.18 - 0.30 (2H, m), 0.39 - 0.47 (2H, m), 0.98 - 1.10 (1H, m), 1.42 (9H, s), 2.76 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.99 - 4.08 (2H, m), 4.48 (2H, s), 7.16 - 7.19 (3H, m), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.61 - 7.65 (1H, m), 7.76 - 7.79 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽

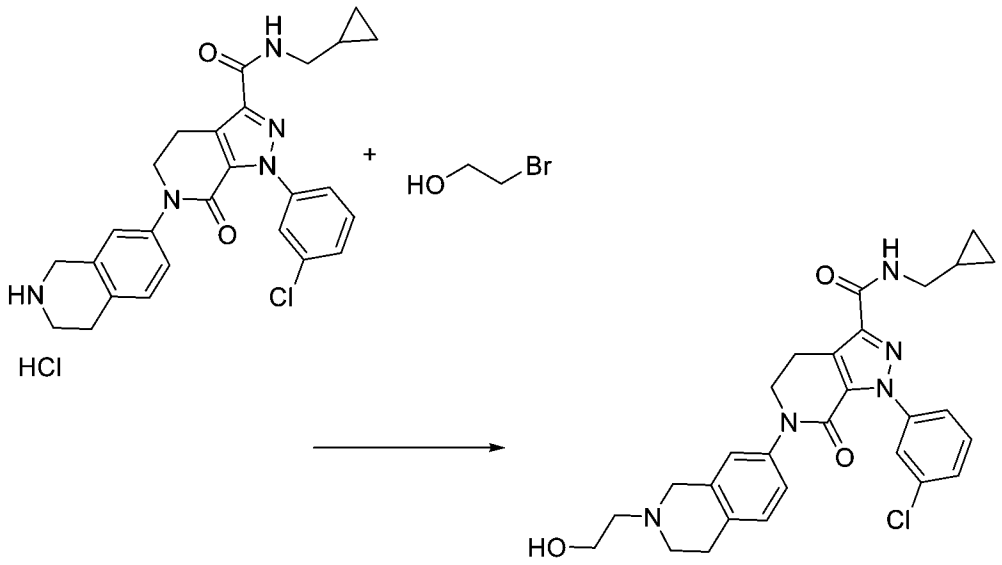


【1207】 將7-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯 (620 mg，1.08 mmol)溶解於含4M HCl之1,4-二噁烷 (3 mL)中。在rt下20 h後，移除溶劑，得到產物 (563 mg，98%產率)。

【1208】 $[M+H]^+$ = 476.2, 478.2

【1209】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.19 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.10 (1H, m), 2.99 (2H, t, J = 6.2 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.36 - 3.40 (2H, m), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.25 (2H, s), 7.22 - 7.31 (3H, m), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.57 - 7.66 (1H, m), 7.75 - 7.81 (1H, m), 8.54 (1H, t, J = 6.0 Hz), 9.17 (2H, s)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



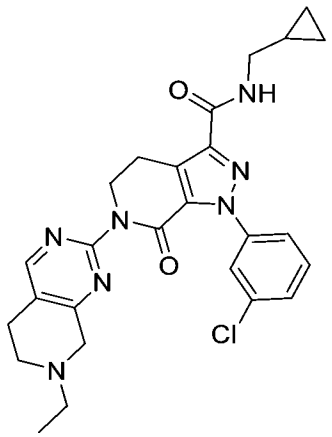
【1210】 將1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽 (70 mg，0.14 mmol)溶解於DMF (1.5 mL)中。添加TEA (67 μL，0.48 mmol)及2-溴乙醇 (29 μL，0.41 mmol)。將反應在rt下攪拌20 h，用EtOAc (100 mL)稀釋，用飽和$NaHCO_3$ (3 x 15 mL)、鹽水(3 x mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。藉由急驟層析(矽石，0-10% MeOH/DCM)純化殘餘物，在交換SCX-2管柱上進一步純化，用MeOH (10 mL)洗滌且用含3 M NH_3之MeOH (10 mL)溶離，得到產物 (42 mg，58%產率)。

【1211】 $[M+H]^+$ = 520.2, 522.2

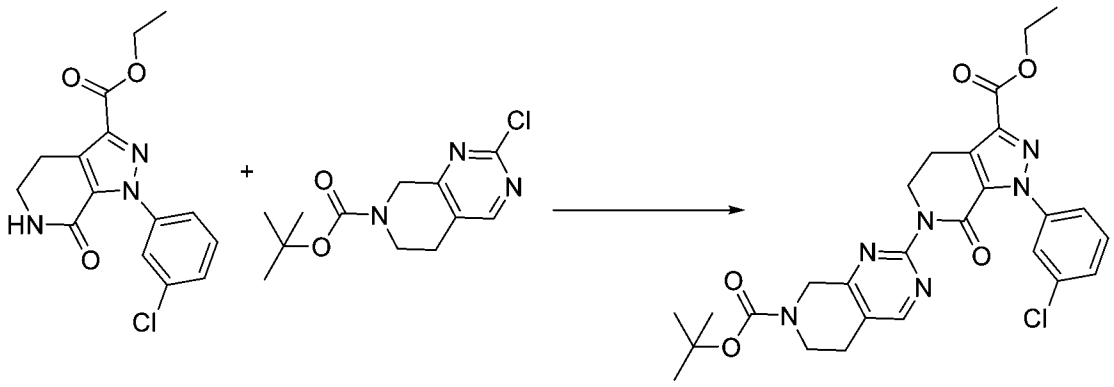
【1212】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.21 - 0.28 (2H, m), 0.38 - 0.45 (2H, m), 1.00 - 1.10 (1H, m), 2.55 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.69 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 - 3.61 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.47 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.04 (1H, s), 7.11 (2H, s), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.76 - 7.80 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號1056

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(7-乙基-5,6,7,8-四氫吡啶并[3,4-d]嘧啶-2-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



2-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-6,8-二氫-5H-吡啶并[3,4-d]嘧啶-7-甲酸第三丁酯

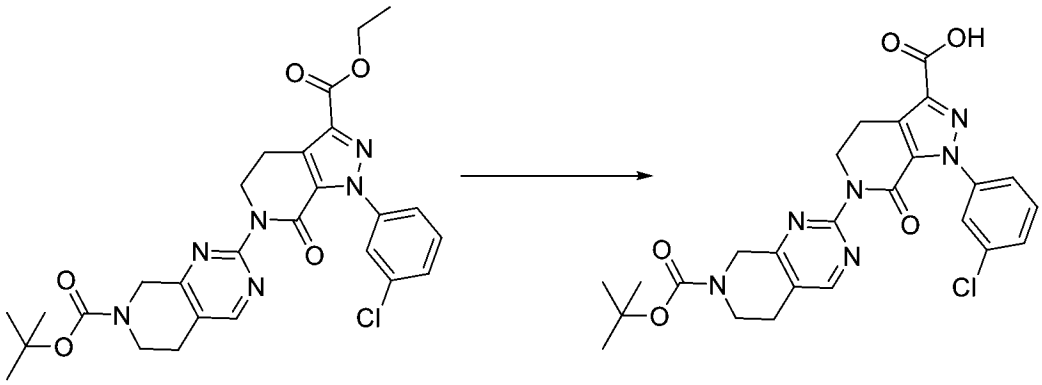


【1213】 用N_2 (g)吹掃1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(100 mg，0.31 mmol)及2-氯-5H,6H,7H,8H-吡啶并[3,4-d]嘧啶-7-甲酸第三丁酯(101 mg，0.38 mmol)於無水1,4-二噁烷(3 mL)中之溶液持續5 min。添加Cs_2CO_3 (204 mg，0.63 mmol)、XantPhos (36 mg，0.063 mmol)及$Pd_2(dba)_3$ (29 mg，0.031 mmol)。將密封之反應容器在100℃下攪拌20 h。經由Celite®過濾該溶液，用EtOAc (50 mL)洗滌殘餘物，用水(15 mL)及鹽水(2 x 15 mL)洗滌濾液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，5-80% EtOAc/異己烷)純化殘餘物，得到產物(98 mg，57%產率)。

【1214】 $[M+H]^+$ = 553.2, 555.2

【1215】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.42 (9H, s), 2.79 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.61 (2H, t, J = 5.8 Hz), 4.24 (2H, t, J = 6.4 Hz), 4.35 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.48 (2H, s), 7.50 - 7.64 (3H, m), 7.74 - 7.80 (1H, m), 8.60 (1H, s)

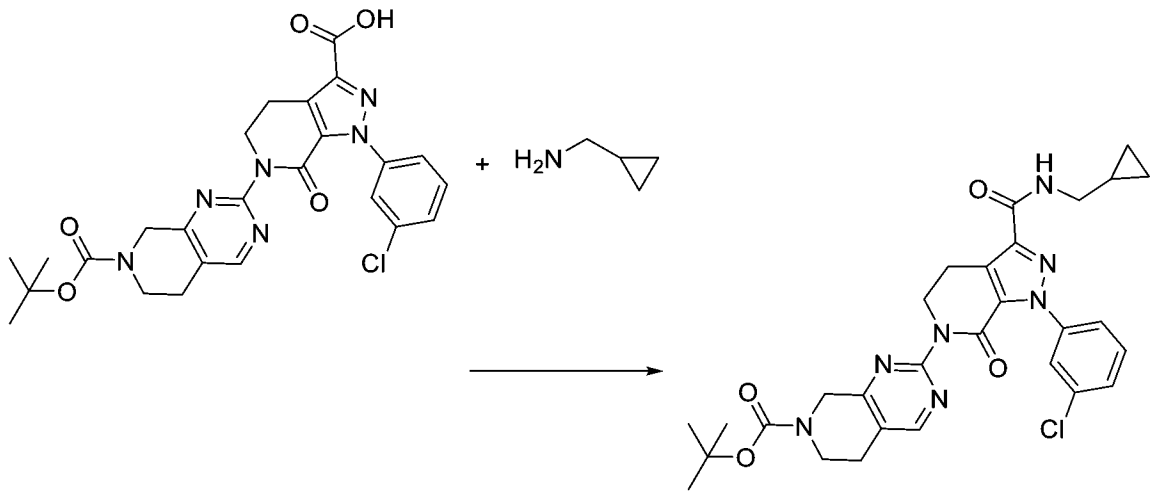
6-(7-第三丁氧羰基-6,8-二氫-5H-吡啶并[3,4-d]嘧啶-2-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸



【1216】 向2-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-6,8-二氫-5H-吡啶并[3,4-d]嘧啶-7-甲酸第三丁酯(95 mg，0.17 mmol)於THF (2 mL)及水(1 mL)之混合物中之溶液中添加LiOH.H_2O (18 mg，0.43 mmol)且將混合物在rt下攪拌72 h。移除THF且使用1M HCl (aq)將剩餘水溶液酸化至pH = 2-3。用EtOAc (3 x 40 mL)萃取酸化之水相且將合併之有機萃取物乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(84 mg，93%產率)。

【1217】 $[M+H]^+$ = 543.1, 545.1

2-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-6,8-二氫-5H-吡啶并[3,4-d]嘧啶-7-甲酸第三丁酯

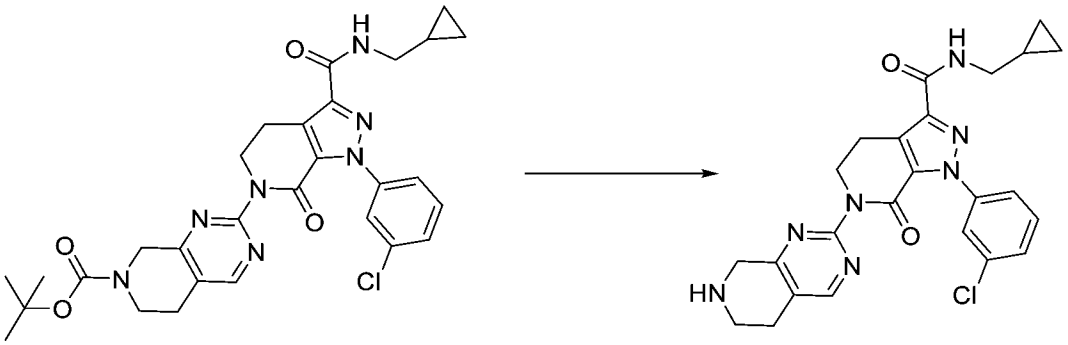


【1218】 在N_2 (g)下，向6-(7-第三丁氧羰基-6,8-二氫-5H-吡啶并[3,4-d]嘧啶-2-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(80 mg，0.15 mmol)於無水MeCN (2 mL)中之懸浮液中添加胺基甲基環丙烷(19 μL，0.21 mmol)、1-甲基咪唑(43 μL，0.53 mmol)及TCFH (56 mg，0.20 mmol)。將混合物在rt下攪拌20 h。用EtOAc (75 mL)稀釋此溶液，用飽和$NaHCO_3$ (20 mL)及鹽水(2 x 20 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，5-100% EtOAc/異己烷)純化殘餘物，得到產物(54 mg，61%產率)。

【1219】 $[M+H]^+$ = 578.4, 580.2

【1220】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.21 - 0.27 (2H, m), 0.38 - 0.45 (2H, m), 1.02 - 1.07 (1H, m), 1.42 (9H, s), 2.79 (2H, t, J = 5.6 Hz), 3.11 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.61 (2H, s br), 4.22 (2H, t, J = 6.4 Hz), 4.48 (2H, s), 7.50 - 7.60 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 7.3, 1.9 Hz), 7.80 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.54 (1H, t, J = 6.1 Hz), 8.60 (1H, s)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(5,6,7,8-四氫吡啶并[3,4-d]嘧啶-2-基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

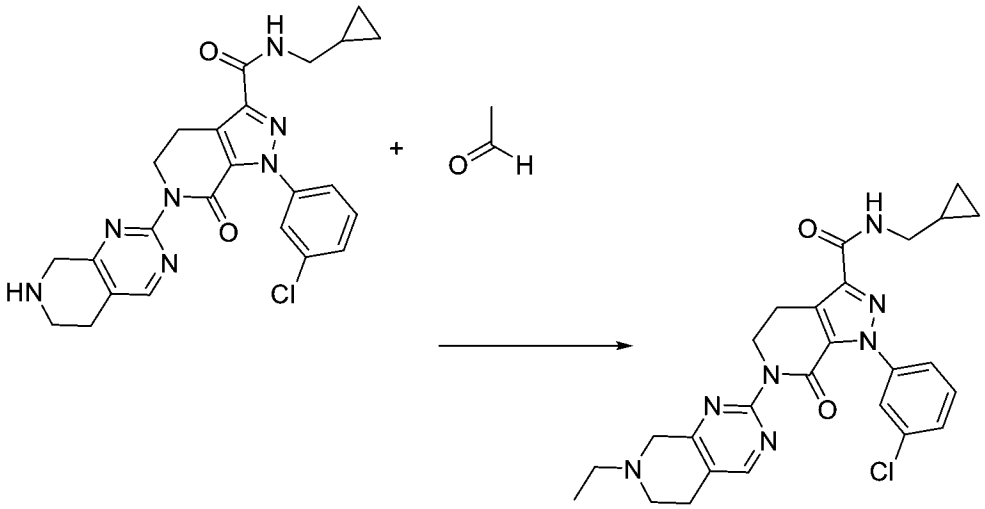


【1221】 向2-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-6,8-二氫-5H-吡啶并[3,4-d]嘧啶-7-甲酸第三丁酯(50 mg，0.087 mmol)於1,4-二噁烷(0.5 mL)中之溶液中添加含4M HCl之1,4-二噁烷 (0.50 mL)且將混合物在rt下攪拌20 h。使溶劑蒸發且藉由離子交換SCX-2管柱純化殘餘物，用MeOH (10 mL)洗滌且用含3M NH_3之MeOH (10 mL)溶離，得到產物(34 mg，81%)。

【1222】 $[M+H]^+$ = 478.1, 480.0

【1223】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.21 - 0.26 (2H, m), 0.38 - 0.45 (2H, m), 1.00 - 1.10 (1H, m), 2.66 - 2.71 (2H, m), 2.94 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.11 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.78 (2H, s), 4.18 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.49 - 7.58 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 7.3, 1.8 Hz), 7.79 (1H, td, J = 2.0, 0.5 Hz), 8.49 (1H, s), 8.52 (1H, t, J = 6.1 Hz)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(7-乙基-5,6,7,8-四氫吡啶并[3,4-d]嘧啶-2-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



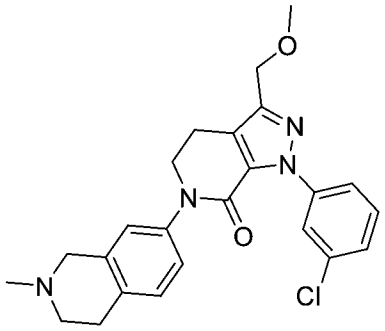
【1224】 向1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(5,6,7,8-四氫吡啶并[3,4-d]嘧啶-2-基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺(30 mg，0.063 mmol)於DCM (1 mL)及MeOH (0.2 mL)之混合物中之溶液中添加TEA (26 μL，0.19 mmol)及乙醛(50%於EtOH中) (21 μL，0.19 mmol)且將混合物在rt下攪拌20 h。逐份添加STAB (20 mg，0.094 mmol)且將混合物再攪拌4 h。用DCM (50 mL)稀釋混合物，用飽和$NaHCO_3$ (aq) (15 mL)及鹽水(15 mL)洗滌，經(Na_2SO_4)乾燥，藉由急驟層析(矽石，0-10% MeOH/DCM)純化且在離子交換SCX-2管柱上進一步純化，用MeOH (10 mL)洗滌且用含3M NH_3之MeOH (10 mL)溶離，得到產物(21 mg，63%產率)。

【1225】 $[M+H]^+$ = 506.1, 508.1

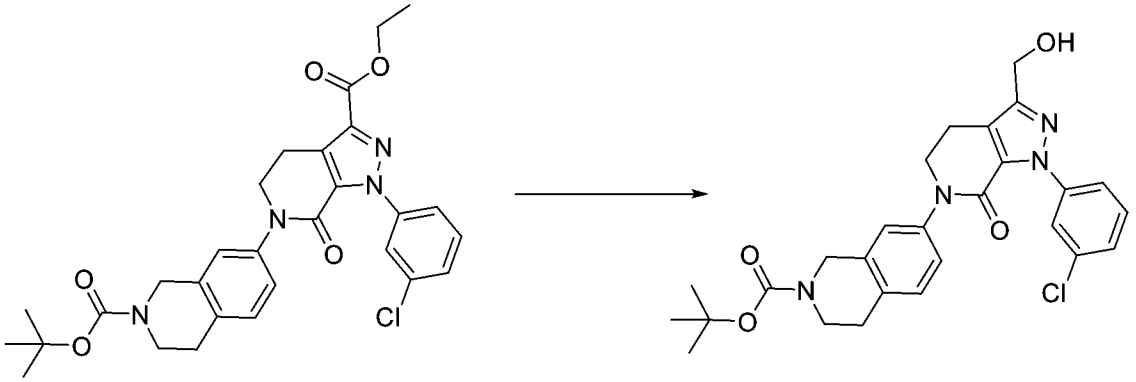
【1226】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.21 - 0.27 (2H, m), 0.38 - 0.45 (2H, m), 1.00 - 1.06 (1H, m), 1.08 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.54 (2H, q, J = 7.3 Hz), 2.70 (2H, t, J = 5.7 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.11 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.53 (2H, s), 4.19 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.49 - 7.58 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 7.3, 1.8 Hz), 7.79 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.52 (1H, t, J = 6.1 Hz), 8.54 (1H, s)

實例編號1066

1-(3-氯苯基)-3-(甲氧基甲基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1,4,5,6-四氫-7H-吡唑并[3,4-c]吡啶-7-酮



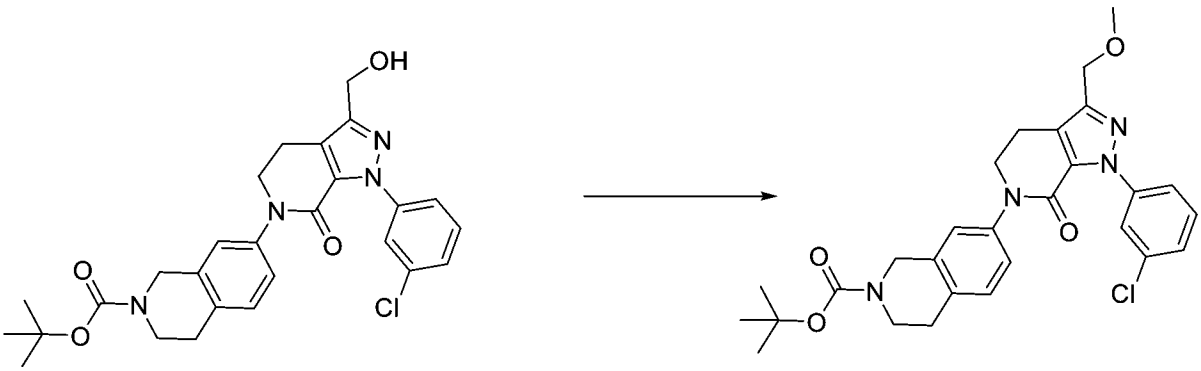
7-[1-(3-氯苯基)-3-(羥基甲基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



【1227】 將7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯 (500 mg，0.91 mmol)溶解於無水甲苯(50 mL)中。將該溶液冷卻至0℃且緩慢添加氫化二異丁基鋁(甲苯中之1M溶液) (1.9 mL，1.9 mmol)。將混合物在0℃至rt下攪拌2 h。緩慢添加MeOH (2 mL)。再過5 min後，添加飽和酒石酸鈉鉀溶液(羅謝爾鹽) (20 mL)且在rt下繼續攪拌30 min。經由Celite®濾出所形成之固體且用EtOAc (100 mL)洗滌殘餘物。用水(1 x 30 mL)、鹽水(1 x 30 mL)洗滌合併之濾液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，6% MeOH/CHCl3)純化殘餘物，得到產物(270 mg，58%產率)。

【1228】 $[M\text{-}Boc]^+ = 409.2$

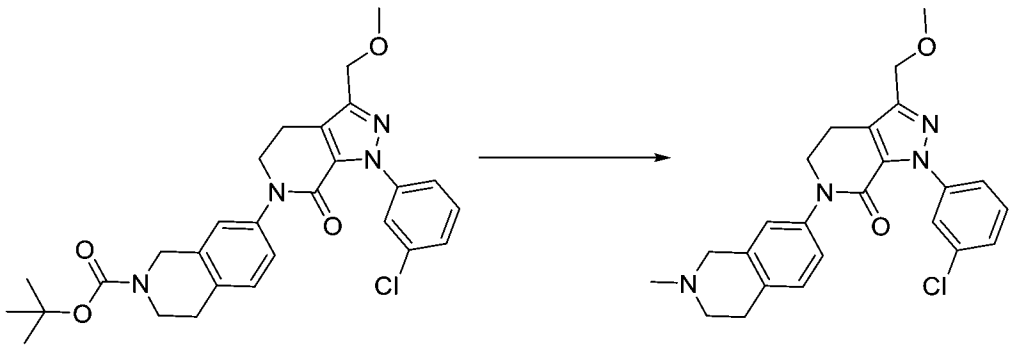
7-[1-(3-氯苯基)-3-(甲氧基甲基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



【1229】 在0℃下將7-[1-(3-氯苯基)-3-(羥基甲基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯 (260 mg，0.51 mmol)溶解於THF (30 mL)中。添加NaH (60%油分散液) (25 mg，0.61 mmol)且將懸浮液在0℃ 下攪拌15 min且在rt下再攪拌30 min。將反應冷卻至0℃且添加MeI (35 μL，0.56 mmol)，且使混合物在3 h內加溫至rt。用水(10 mL)淬滅反應且用EtOAc (2 x 30 mL)萃取。將合併之有機萃取物乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。藉由急驟層析(矽石，1% MeOH/$CHCl_3$)純化殘餘物，得到產物 (220 mg，82%產率)。

【1230】 $[M+Na]^+$ = 545.2

1-(3-氯苯基)-3-(甲氧基甲基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1,4,5,6-四氫-7H-吡唑并[3,4-c]吡啶-7-酮



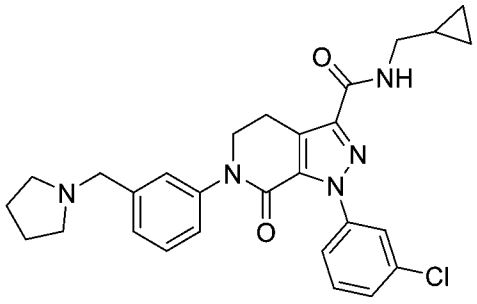
【1231】 將7-[1-(3-氯苯基)-3-(甲氧基甲基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯 (72 mg，0.14 mmol)於甲酸 (52 μL，1.38 mmol) 中之溶液在50℃下攪拌30 min，接著添加甲醛(37%於水中) (13 μL，0.35 mmol)且將混合物加熱至90℃持續2 h。使混合物冷卻至rt且蒸發。藉由自動化製備型HPLC (質量導向，在2.5%甲酸/水之酸性移動相中2-60% MeCN/水)純化殘餘物，得到產物(22 mg，36%產率)。

【1232】 $[M+H]^+$ = 437.1

【1233】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.33 (3H, s), 2.58 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.80 (2H, s), 2.96 (2H, s), 3.32 (3H, s), 3.45 (2H, s), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.51 (2H, s), 7.04 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.11 (2H, d, J = 1.8 Hz), 7.46 - 7.48 (2H, m), 7.51 - 7.56 (1H, m), 7.66 (1H, dt, J = 2.5, 1.0 Hz)

實例編號1072

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(3-(吡咯啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



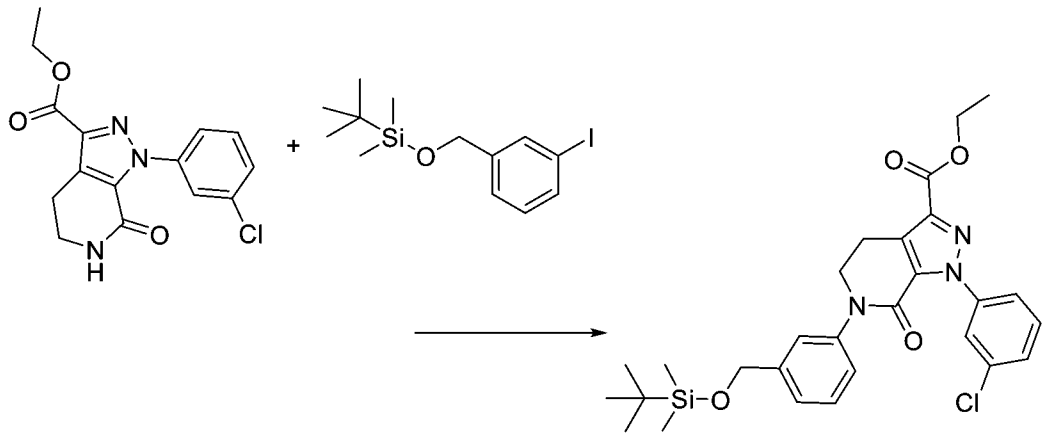
第三丁基-[(3-碘苯基)甲氧基]-二甲基-矽烷



【1234】 在rt下將第三丁基二甲基氯矽烷(773 mg，5.13 mmol)添加至(3-碘苯基)甲醇(0.54 mL，4.27 mmol)及咪唑(378 mg，5.55 mmol)於DCM (40 mL)中之溶液中。將混合物在rt下攪拌20 h。添加水(40 mL)，分離有機相且將水層萃取至DCM (2 × 10 mL)中。用鹽水(40 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由層析(矽石，0 - 50% EtOAc/異己烷)純化殘餘物，得到產物(868 mg，58%產率)。

【1235】 ^{1}H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 0.10 (6H, s), 0.94 (9H, s), 4.66 - 4.71 (2H, m), 7.06 (1H, t, J = 7.7 Hz), 7.24 - 7.32 (1H, m), 7.53 - 7.61 (1H, m), 7.64 - 7.70 (1H, m)

6-[3-[[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基甲基]苯基]-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯

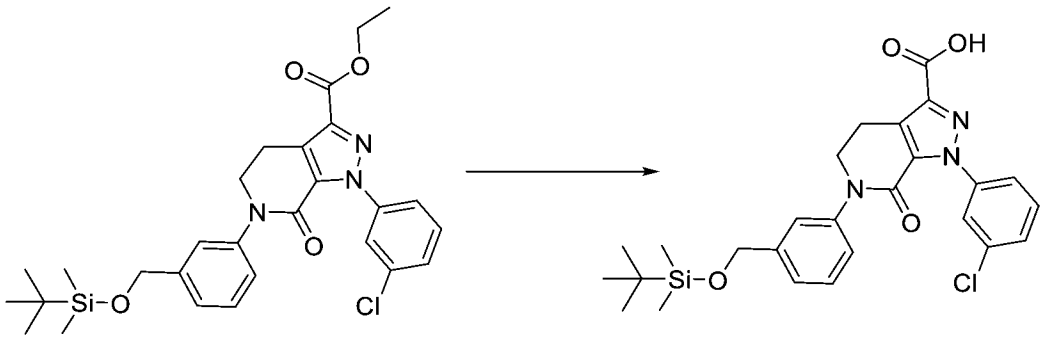


【1236】 在rt下將Cu(I)I (26 mg，0.14 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(220 mg，0.69 mmol)、第三丁基-[(3-碘苯基)甲氧基]-二甲基-矽烷(288 mg，0.83 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷-二胺(39 mg，0.28 mmol)及K_3PO_4 (365 mg，1.72 mmol)於無水1,4-二噁烷(4.5 mL)中之懸浮液中。將反應容器密封且在100℃下在攪拌下加熱20 h。使混合物冷卻至rt，經由Celite®過濾且用EtOAc (6 × 5 mL)洗滌殘餘物。用水(25 mL)、鹽水(25 mL)洗滌合併

之濾液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，0 - 60% EtOAc/異己烷)純化殘餘物，得到產物(386 mg，35%產率)。

【1237】 $[M+H]^+$ = 540.2, 542.2

6-[3-[[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基甲基]苯基]-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸

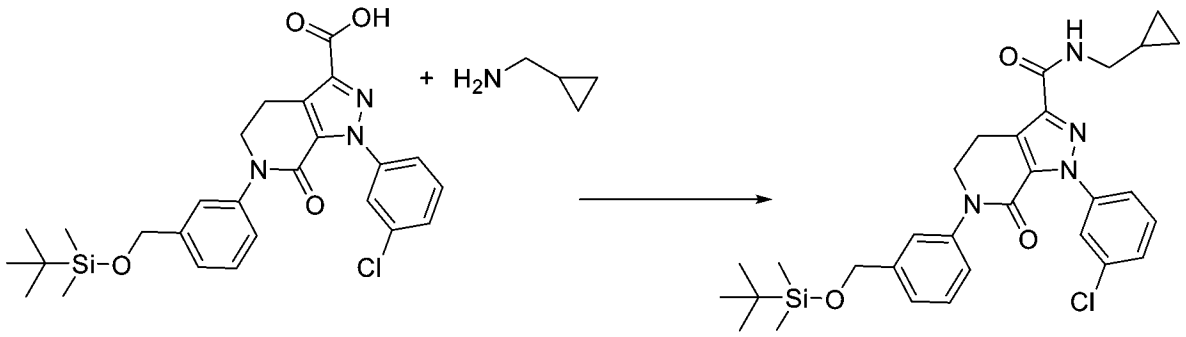


【1238】 將2M NaOH (aq) (0.54 mL，1.1 mmol)添加至6-[3-[[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基甲基]苯基]-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(386 mg，0.715 mmol)於THF (3 mL)及MeOH (3 mL)中之溶液中。將混合物在rt下攪拌2 h。使溶劑蒸發，將殘餘物溶解於5%檸檬酸(aq) (10 mL)中且萃取至EtOAc (3 × 10 mL)中。用鹽水(20 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(371 mg，97%產率)。

【1239】 $[M+H]^+$ = 512.1, 514.1

【1240】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.08 (6H, s), 0.90 (9H, s), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.71 (2H, s), 7.20 - 7.34 (3H, m), 7.37 (1H, t, J = 7.8 Hz), 7.46 - 7.62 (3H, m), 7.71 - 7.78 (1H, m), 13.34 (1H, s)

6-[3-[[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基甲基]苯基]-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

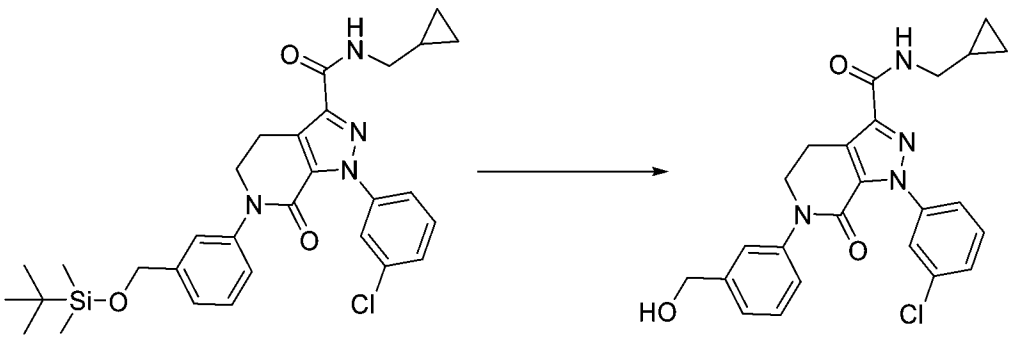


【1241】 將TCFH (305 mg，1.1 mmol)添加至6-[3-[[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基甲基]苯基]-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(371 mg，0.73 mmol)、胺基甲基環丙烷(75 μL，0.87 mmol)及1-甲基咪唑(260 μL，3.26 mmol)於無水MeCN (4 mL)中之懸浮液中。將混合物在rt下攪拌20 h且使溶劑蒸發。將殘餘物溶解於水(10 mL)中且用EtOAc (3 × 10 mL)萃取。用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟管柱層析(矽石，5 - 100% EtOAc/異己烷)純化殘餘物，得到產物(360 mg，81%產率)。

【1242】 $[M+H]^+$ = 565.3, 567.3

【1243】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 0.09 (6H, s), 0.25 - 0.33 (2H, m), 0.51 - 0.61 (2H, m), 0.93 (9H, s), 0.99 - 1.14 (1H, m), 3.28 - 3.35 (2H, m), 3.32 - 3.43 (2H, m), 4.07 - 4.13 (2H, m), 4.72 (2H, d, J = 0.9 Hz), 7.07 (1H, t, J = 5.7 Hz), 7.18 - 7.25 (3H, m), 7.29 - 7.42 (3H, m), 7.44 - 7.53 (1H, m), 7.59 - 7.65 (1H, m)

N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-[3-(羥基甲基)苯基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

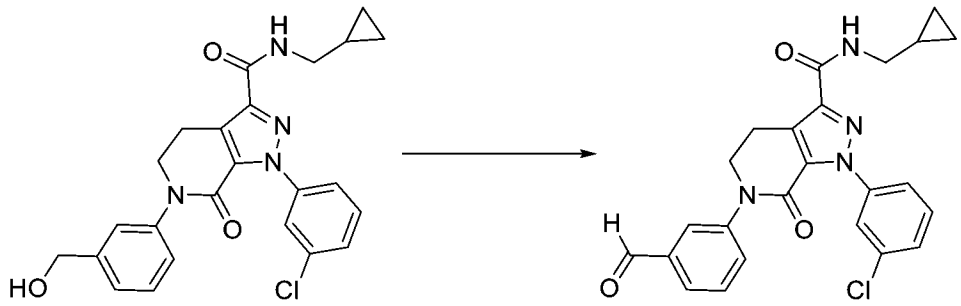


【1244】 在0℃下將TBAF (1M於THF中，950 μL，0.96 mmol)添加至N-苄基-6-[3-[[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基甲基]苯基]-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺(360 mg，0.64 mmol)於THF (5 mL)中之溶液中。將混合物在0℃下攪拌2 h且使溶劑蒸發。將殘餘物溶解於水(10 mL)中且用EtOAc (3 × 10 mL)萃取。用鹽水洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，5 – 100% EtOAc/異己烷)純化殘餘物，得到產物(216 mg，73%產率)。

【1245】 $[M+H]^+$ = 451.2, 453.2

【1246】 ^{1}H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 0.25 - 0.33 (2H, m), 0.51 - 0.62 (2H, m), 1.00 - 1.14 (1H, m), 1.73 (1H, t, J = 6.0 Hz), 3.32 (2H, dd, J = 7.1, 5.7 Hz), 3.40 (2H, dd, J = 7.1, 6.4 Hz), 4.07 - 4.18 (2H, m), 4.70 (2H, d, J = 5.8 Hz), 7.07 (1H, t, J = 5.7 Hz), 7.20 - 7.28 (1H, m), 7.31 - 7.43 (4H, m), 7.46 - 7.53 (1H, m), 7.61 (1H, td, J = 1.9, 0.5 Hz)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(3-甲醯基苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

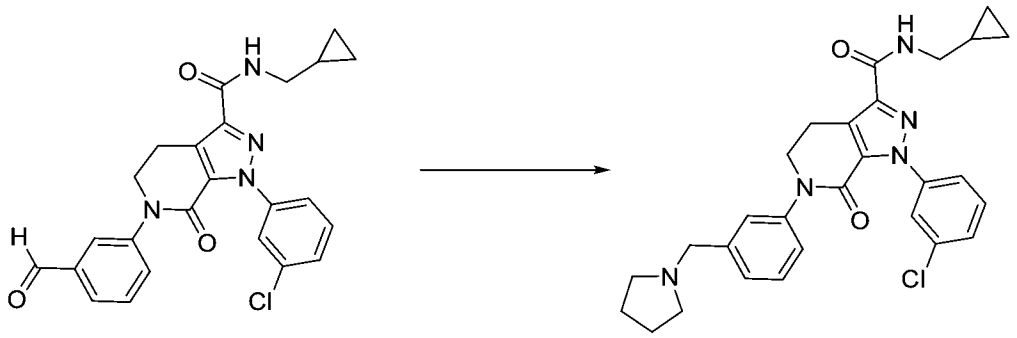


【1247】 將經活化之MnO_2 (416 mg，4.79 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-[3-(羥基甲基)苯基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺(216 mg，0.48 mmol)於THF (5 mL)中之溶液中。將混合物加熱至40℃且攪拌20 h。使混合物冷卻至rt，經由Celite®過濾且用THF (5 × 10 mL)洗滌殘餘物。使合併之濾液蒸發，得到產物(229 mg，100%產率)。

【1248】 $[M+H]^+$ = 449.1, 451.1

【1249】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 0.25 - 0.34 (2H, m), 0.53 - 0.62 (2H, m), 1.01 - 1.13 (1H, m), 3.28 - 3.36 (2H, m), 3.36 - 3.48 (2H, m), 4.18 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.07 (1H, t, J = 5.6 Hz), 7.37 - 7.64 (6H, m), 7.72 - 7.79 (1H, m), 7.84 (1H, t, J = 1.9 Hz), 10.00 (1H, s)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(3-(吡咯啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



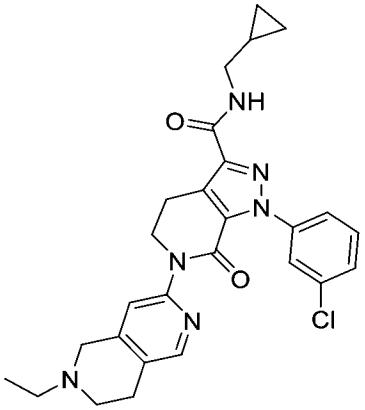
【1250】 在rt下將AcOH (43 μL，0.76 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(3-甲醯基苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺(110 mg，0.25 mmol)及吡咯啶(62 μL，0.76 mmol)於DCM (2 mL)及MeOH (0.4 mL)之混合物中之溶液中。將混合物在rt下攪拌2 h。添加STAB (80 mg，0.38 mmol)且將所得混合物在rt下攪拌20 h。用飽和K_2CO_3 (aq) (10 mL)淬滅混合物且萃取至DCM (3 × 5 mL)中。用鹽水(10 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，0 - 15% MeOH/DCM)純化殘餘物，藉由SCX離子交換進一步純化，裝載MeOH (10 mL)且用含2M NH_3至MeOH (10 mL)溶離，且用製備型HPLC (質量導向之製備型LC，用5 - 95% MeCN/水溶離，均含有0.1% NH_3)進一步純化，得到產物(9.8 mg，8%產率)。

【1251】 $[M+H]^+$ = 504.1, 506.1

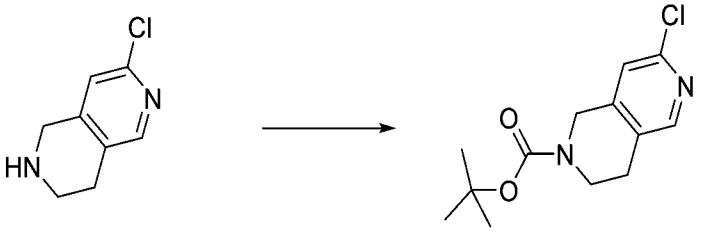
【1252】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.20 - 0.28 (2H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 1.00 - 1.09 (1H, m), 1.65 - 1.73 (4H, m), 2.38 - 2.44 (4H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.56 (2H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.15 - 7.26 (2H, m), 7.26 - 7.37 (2H, m), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.59 - 7.66 (1H, m), 7.76 - 7.81 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號1117

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(6-乙基-5,6,7,8-四氫-2,6-萘啶-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



7-氯-3,4-二氫-1H-2,6-萘啶-2-甲酸第三丁酯



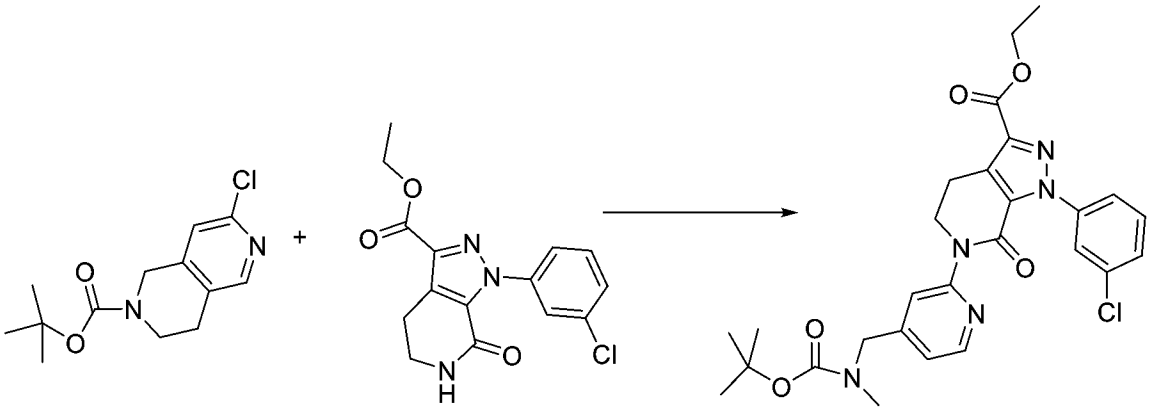
【1253】 在rt下將Boc_2O (346 mg，1.58 mmol)添加至7-氯-1,2,3,4-四氫-2,6-萘啶鹽酸鹽(1:1) (250 mg，1.22 mmol)及TEA (0.42 mL，3.05 mmol)於DCM (10 mL)中之溶液中。將混合物在rt下攪拌20 h。添加水(20 mL)，分離有機相，且用DCM (2 × 15 mL)萃取水性部分。合併有機部分，用飽和鹽水溶液(20 mL)洗滌且乾燥

(Na_2SO_4)。過濾且濃縮所得混合物，生成產物(315 mg，96%產率)，其無需進一步純化即用於後續反應。

【1254】 [M+H]+= 269.1/271.1

【1255】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.42 (10H, d, J = 2.1 Hz), 2.76 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.51 - 3.59 (2H, m), 4.54 (2H, s), 7.41 (1H, s), 8.22 (1H, d, J = 2.0 Hz)

7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-2,6-萘啶-2-甲酸第三丁酯

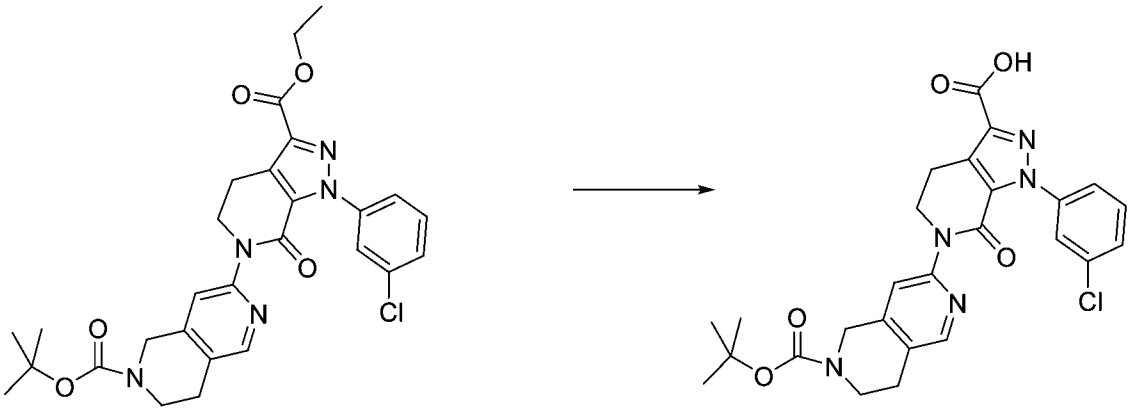


【1256】 在rt下將$Pd_2(dba)_3$ (83 mg，0.0907 mmol)及XantPhos (131 mg，0.227 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(290 mg，0.907 mmol)、7-氯-3,4-二氫-1H-2,6-萘啶-2-甲酸第三丁酯(313 mg，1.09 mmol)及Cs_2CO_3 (591 mg，1.81 mmol)於無水1,4-二噁烷(6.4 mL)中之N_2 (g)噴射懸浮液中。用N_2 (g)再噴射混合物持續5 min，接著在100℃下加熱18 h。使混合物冷卻至rt，且經由Celite®墊過濾。用EtOAc (5 × 15 mL)洗滌濾液。合併濾液且依序用水(30 mL)及鹽水(30 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾，濃縮，且藉由急驟層析(矽石，0 - 100% EtOAc/異己烷)純化，生成產物(385 mg 75%產率)。

【1257】 [M+H]+ = 552.3/554.3

【1258】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.41 (9H, s), 2.77 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.16 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.57 (2H, t, J = 5.6 Hz), 4.25 - 4.44 (3H, m), 4.50 (2H, s), 7.48 (1H, s), 7.49 - 7.60 (2H, m), 7.60 (1H, tt, J = 6.4, 1.9 Hz), 7.78 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.28 (1H, s)

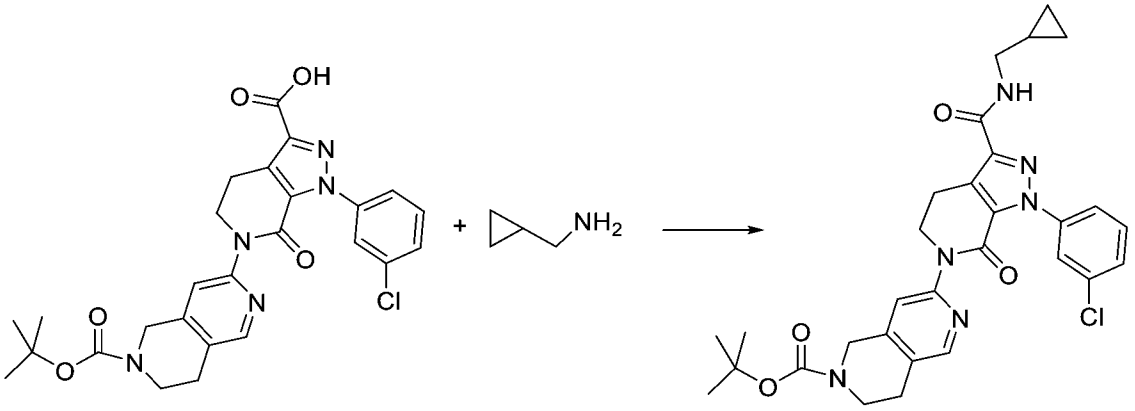
6-(6-第三丁氧羰基-7,8-二氫-5H-2,6-萘啶-3-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸



【1259】 用2M NaOH (aq) (0.70 mL，1.4 mmol)處理7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-2,6-萘啶-2-甲酸第三丁酯(385 mg，0.697 mmol)於THF (5 mL)及MeOH (5 mL)之混合物中之溶液且在rt下攪拌18 h。濃縮混合物，用1M HCl酸化至pH～3且用EtOAc (3 x 50 mL)萃取。用鹽水(30 mL)洗滌合併之有機物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮，得到產物(254 mg，54%產率)。

【1260】 [M+H]+= 524.1/526.1

7-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-2,6-萘啶-2-甲酸第三丁酯

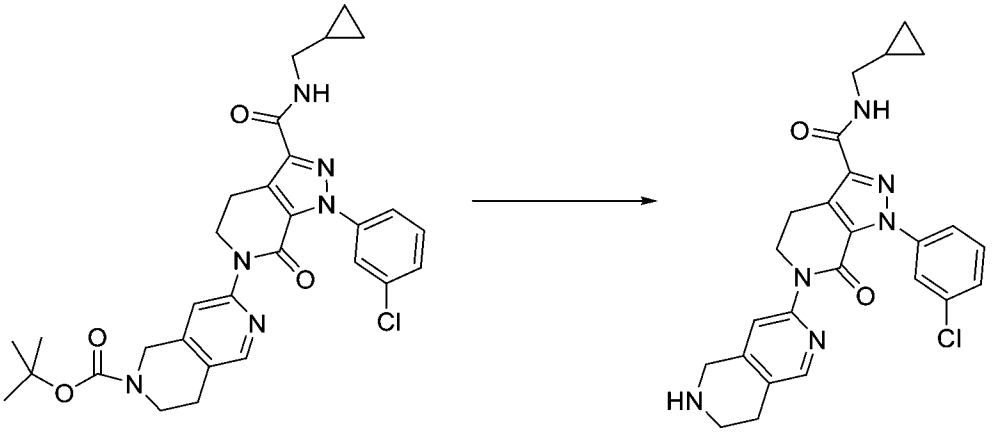


【1261】 在rt下將TCFH (80 mg，0.29 mmol)添加至6-(6-第三丁氧羰基-7,8-二氫-5H-2,6-萘啶-3-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(100 mg，0.191 mmol)、胺基甲基環丙烷(0.020 mL，0.23 mmol)及1-甲基咪唑(0.068 mL，0.86 mmol)於無水MeCN (2 mL)中之懸浮液中。將混合物在rt下攪拌20 h。使有機物蒸發，添加水(10 mL)且用EtOAc (3 × 15 mL)萃取。合併萃取物，用飽和$NaHCO_3$ (aq) (10 mL)及飽和鹽水溶液(10 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾，濃縮且藉由急驟層析(矽石，0 - 100% EtOAc/異己烷)純化，生成產物(91 mg，74%產率)。

【1262】 $[M+H]^+$ = 577.3/579.4

【1263】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.18 - 0.32 (2H, m), 0.35 - 0.53 (2H, m), 0.99 - 1.11 (1H, m), 1.41 (9H, s), 2.77 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.16 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.57 (2H, s), 4.29 (2H, t, J =6.4 Hz), 4.50 (2H, s), 7.45 - 7.60 (3H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.81 (1H, t, J = 1.6 Hz), 8.28 (1H, s), 8.53 (1H, t, J = 6.0 Hz)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(5,6,7,8-四氫-2,6-萘啶-3-基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽

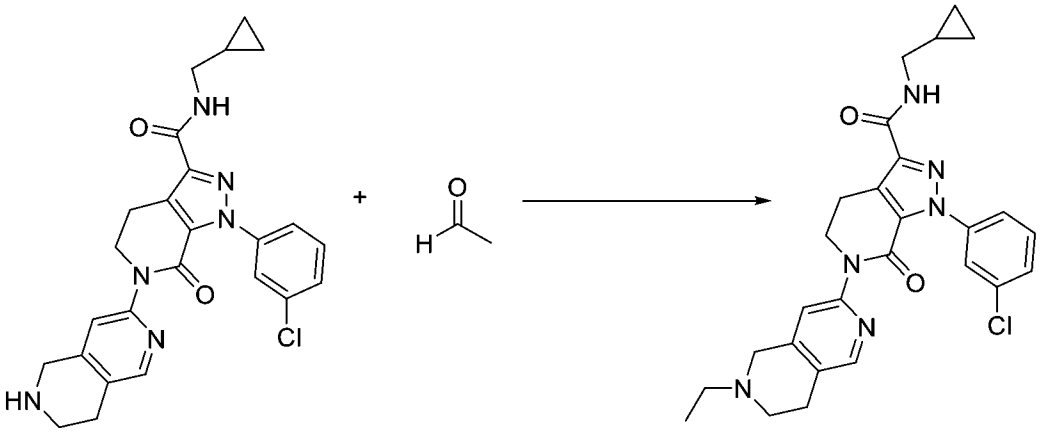


【1264】 在rt下將HCl (4N於1,4-二噁烷中) (0.83 mL，3.3 mmol)添加至7-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-2,6-萘啶-2-甲酸第三丁酯(91 mg，0.16 mmol)於1,4-二噁烷(0.8 mL)中之攪拌溶液中。將混合物在rt下攪拌18 h。移除溶劑，得到產物(69 mg，75%產率)。

【1265】 $[M+H]^+$ = 477.3/479.3

【1266】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.15 - 0.26 (2H, m), 0.30 - 0.45 (2H, m), 0.94 - 1.05 (1H, m), 2.97 (2H, d, J = 5.9 Hz), 3.08 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.14 (2H, t, J = 6.2 Hz), 3.35 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.18 - 4.38 (4H, m), 7.45 - 7.54 (2H, m), 7.55 (1H, s), 7.61 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.78 (1H, t, J = 1.9 Hz), 8.32 (1H, s), 8.50 (1H, t, J = 5.9 Hz), 9.25 (2H, br s)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(6-乙基-5,6,7,8-四氫-2,6-萘啶-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



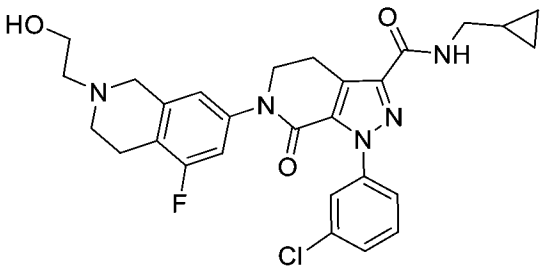
【1267】 向1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(5,6,7,8-四氫-2,6-萘啶-3-基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽(33 mg，0.064 mmol)於DCM (0.8 mL)及MeOH (0.2 mL)之混合物中之溶液中添加TEA (0.027 mL，0.19 mmol)及乙醛(0.0072 mL，0.13 mmol)且將混合物在rt下攪拌1 h。逐份添加STAB (20 mg，0.096 mmol)且將混合物攪拌18 h。用DCM (20 mL)稀釋混合物且用飽和$NaHCO_3$ (aq) (10 mL)及鹽水(10 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾，蒸發，藉由急驟層析(矽石，0-8% MeOH/DCM)純化，藉由裝載至SCX-2上且用DCM (10 mL)洗滌，用含3M NH_3至MeOH (15 mL)溶離進行進一步純化，且凍乾以提供產物(14 mg，41%產率)。

【1268】 $[M+H]^+$ = 505.3.1/507.3

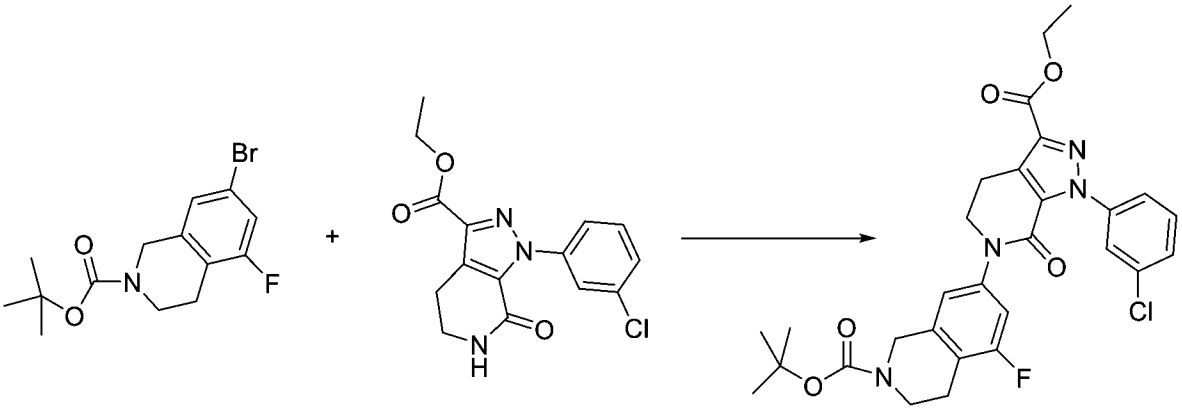
【1269】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.15 - 0.28 (2H, m), 0.34 - 0.56 (2H, m), 0.98 - 1.15 (4H, m), 2.67 (2H, s), 2.80 (2H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.16 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.52 (2H, s), 4.29 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.40 (1H, s), 7.47 - 7.59 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.81 (1H, d, J = 2.2 Hz), 8.23 (1H, s), 8.51 (1H, t, J = 6.1 Hz) 2H由DMSO峰遮蔽

實例編號1122

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(5-氟-2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-5-氟-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



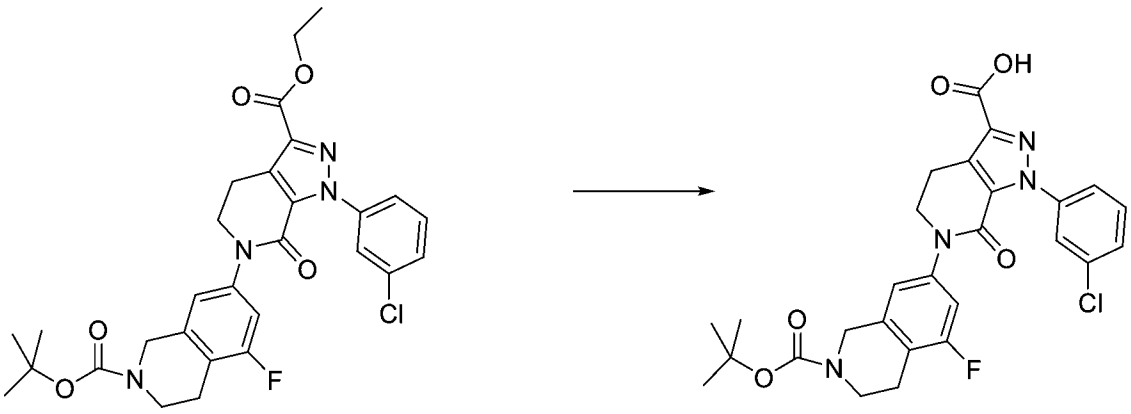
【1270】 用N_2 (g)使1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(220 mg，0.688 mmol)及7-溴-5-氟-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(250 mg，0.757 mmol)於1,4-二噁烷(8 mL)中之溶液鼓泡5 min。此後，同時保持鼓泡，依序添加K_3PO_4 (365 mg，1.72 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷二胺(39 mg，0.275 mmol)及最終Cu(I)I (26 mg，0.14 mmol)。用N_2 (g)再鼓泡2 min後，關閉系統且在100℃下攪拌18 h。經由Celite®過濾該溶液，用EtOAc (50 mL)沖洗，且用水及鹽水洗滌濾液，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，2-50% EtOAc/異己烷)得到產物(185 mg，47%產率)。

【1271】 $[M\text{-}tBu+H]^+$ = 513.1/515.1

【1272】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.42 (9H, s), 2.70 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.58 (2H, t, J = 5.9 Hz), 4.07 (2H, t, J =

6.6 Hz), 4.35 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.52 (2H, s), 7.08 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.12 (1H, d, J = 10.9 Hz), 7.49 - 7.58 (2H, m), 7.58 - 7.64 (1H, m), 7.72 - 7.76 (1H, m)

6-(2-第三丁氧羰基-5-氟-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸

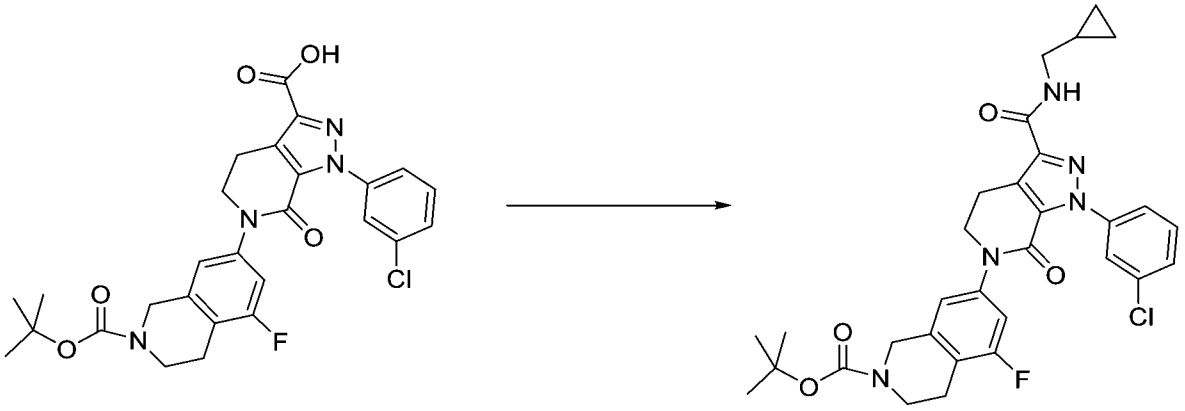


【1273】 向7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-5-氟-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(180 mg，0.316 mmol)於THF (2 mL)及水(1 mL)之混合物中之溶液中添加LiOH.H_2O (33 mg，0.79 mmol)。將混合物在rt下攪拌18 h。使THF在減壓下蒸發且使用1M HCl (aq)將剩餘水溶液酸化至pH = 2-3。用EtOAc萃取酸化之水相且將合併之有機相乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發以提供產物(160 mg，94%產率)。

【1274】 $[M\text{-}tBu+H]^+$= 502.1/504.2

【1275】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.42 (9H, s), 2.71 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.58 (2H, t, J = 5.9 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.52 (2H, s), 7.08 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.12 (1H, dd, J = 10.8, 1.9 Hz), 7.48 - 7.57 (2H, m), 7.59 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.72 - 7.75 (1H, m), 13.34 (1H, s br)

7-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-5-氟-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

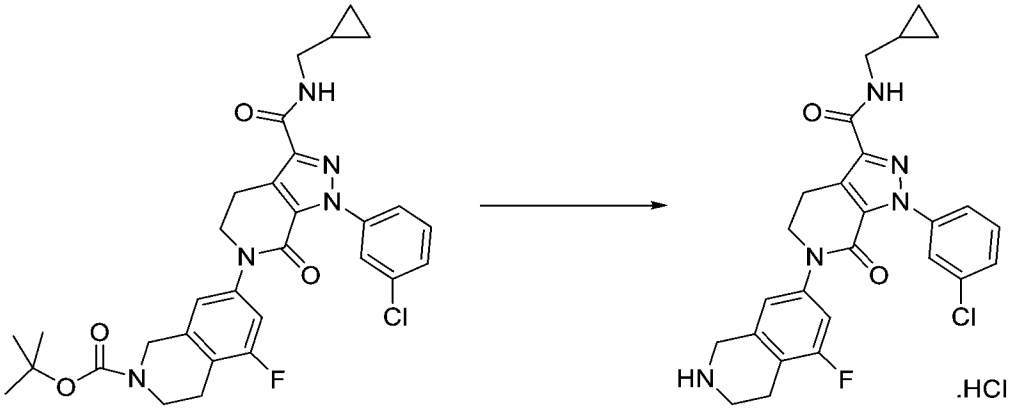


【1276】 在N_2 (g)下向6-(2-第三丁氧羰基-5-氟-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(160 mg，0.296 mmol)於MeCN (3 mL)中之懸浮液中添加胺基甲基環丙烷(0.051 mL，0.59 mmol)、1-甲基咪唑(0.094 mL，1.2 mmol)及TCFH (124 mg，0.444 mmol)，且將混合物在rt下攪拌72 h。用EtOAc (50 mL)稀釋混合物且用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，2-45% EtOAc/異己烷)得到產物(131 mg，74%產率)。

【1277】 $[M\text{-}tBu+H]^+$ = 538.1/540.1

【1278】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.21 - 0.27 (2H, m), 0.39 - 0.46 (2H, m), 1.00 - 1.09 (1H, m), 1.42 (9H, s), 2.71 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.58 (2H, t, J = 6.0 Hz), 4.05 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.52 (2H, s), 7.08 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.12 (1H, dd, J = 10.8, 2.0 Hz), 7.45 - 7.60 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.4, 2.2 Hz), 7.76 - 7.80 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(5-氟-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽

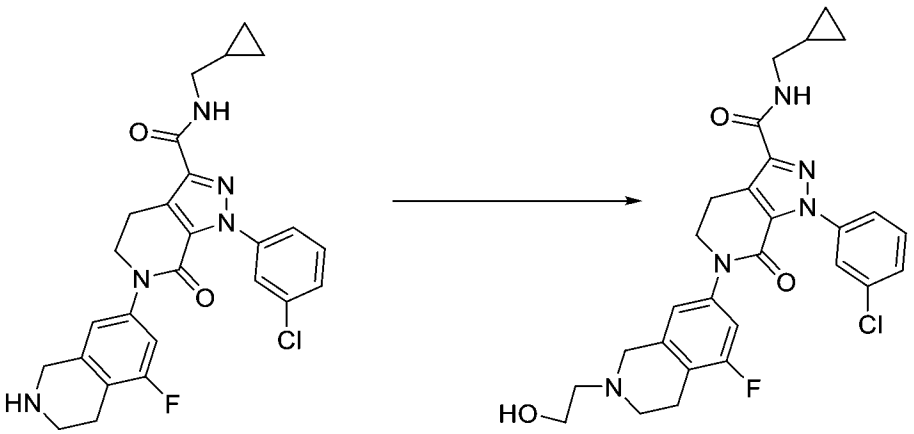


【1279】 向7-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-5-氟-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(130 mg，0.219 mmol)於1,4-二噁烷(2 mL)中之溶液中添加HCl溶液(4M於1,4-二噁烷中) (1.5 mL，6.0 mmol)且將混合物在rt下攪拌20 h。使溶劑蒸發以提供產物(123 mg)。

【1280】 $[M+H]^+$ = 494.2/496.1

【1281】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.21 - 0.27 (2H, m), 0.39 - 0.45 (2H, m), 0.99 - 1.11 (1H, m), 2.93 (2H, t, J = 6.3 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.40 (2H, t, J = 7.2 Hz), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.28 (2H, s), 7.15 (1H, s), 7.25 (1H, d, J = 10.7 Hz), 7.49 - 7.57 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.77 - 7.81 (1H, m), 8.53 (1H, t, J = 6.0 Hz), 9.29 (2H, s br)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(5-氟-2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



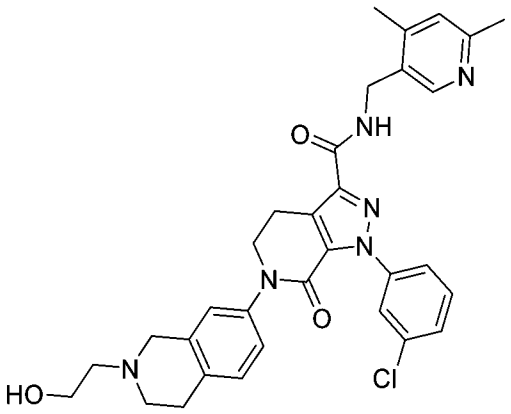
【1282】 在N_2 (g)下向1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(5-氟-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽(60 mg，0.11 mmol)於DMF (1.5 mL)中之溶液中添加TEA (0.055 mL，0.40 mmol)及2-溴乙醇(0.024 mL，0.34 mmol)，且將混合物在rt下攪拌20 h。用EtOAc (50 mL)稀釋該溶液且用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。藉由急驟層析(矽石，0-7% MeOH/DCM)純化產物。藉由將產物裝載至離子交換SCX-2管柱上、用MeOH洗滌且用含3M NH_3至MeOH (10 mL)溶離來進一步純化產物。濃縮溶離液且凍乾以提供產物(32 mg，52%產率)。

【1283】 $[M+H]^+$ = 538.3/540.3

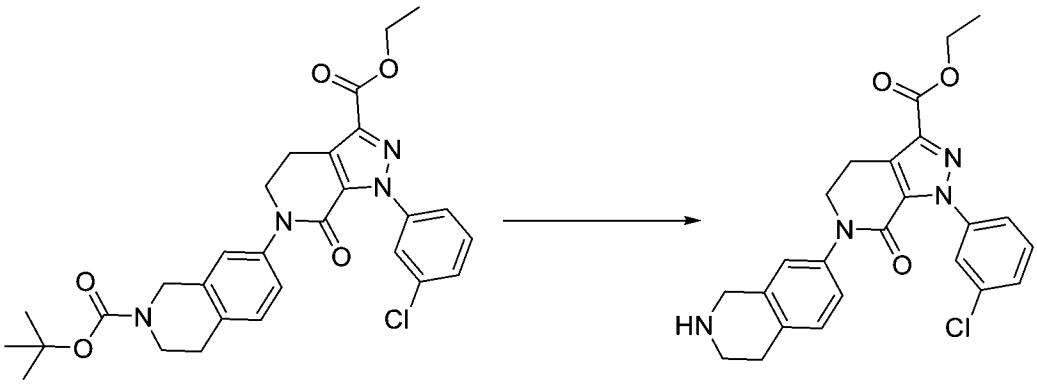
【1284】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.24 (2H, dt, J = 6.1, 4.3 Hz), 0.39 - 0.46 (2H, m), 0.99 - 1.11 (1H, m), 2.56 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.69 - 2.76 (4H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.53 - 3.64 (4H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.49 (1H, t, J = 5.4 Hz), 6.95 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.06 (1H, dd, J = 10.8, 2.0 Hz), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.58 - 7.67 (1H, m), 7.76 - 7.81 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號1128

1-(3-氯苯基)-N-((4,6-二甲基吡啶-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



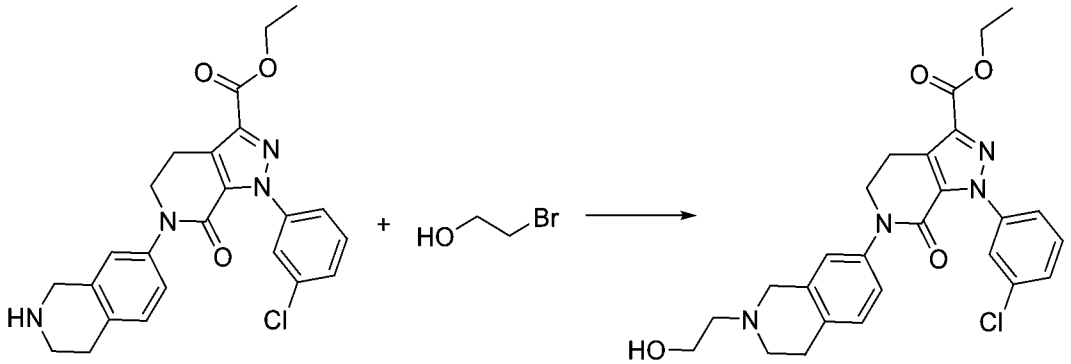
1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯鹽酸鹽



【1285】 將7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯 (1200 mg，2.2 mmol)溶解於含4M HCl之1,4-二噁烷 (104 mL，415 mmol)中。在rt下1 h後，添加Et_2O (100 mL)且濾出固體，得到產物(1040 mg，98%產率)。

【1286】 $[M+H]^+$ = 451.1

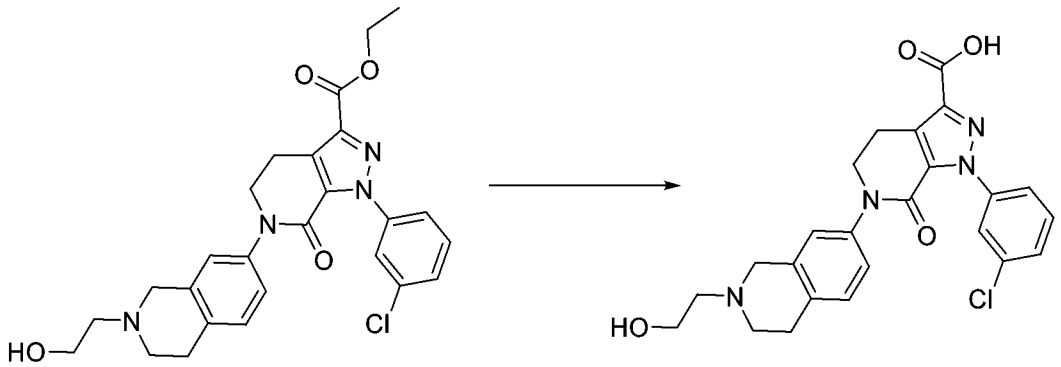
1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



【1287】 將1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯鹽酸鹽 (1000 mg，2.1 mmol)溶解於THF (30 mL)中。添加TEA (858 uL，6.16 mmol)及2-溴乙醇 (308 mg，2.46 mmol)。將反應在rt下攪拌18 h。用EtOAc (100 mL)稀釋混合物，用水(1 x 50 mL)、鹽水(1 x 50 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。藉由急驟層析(矽石，6% MeOH/$CHCl_3$)純化殘餘物，得到產物(488 mg，48%產率)。

【1288】 $[M+H]^+$ = 495.2

1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸

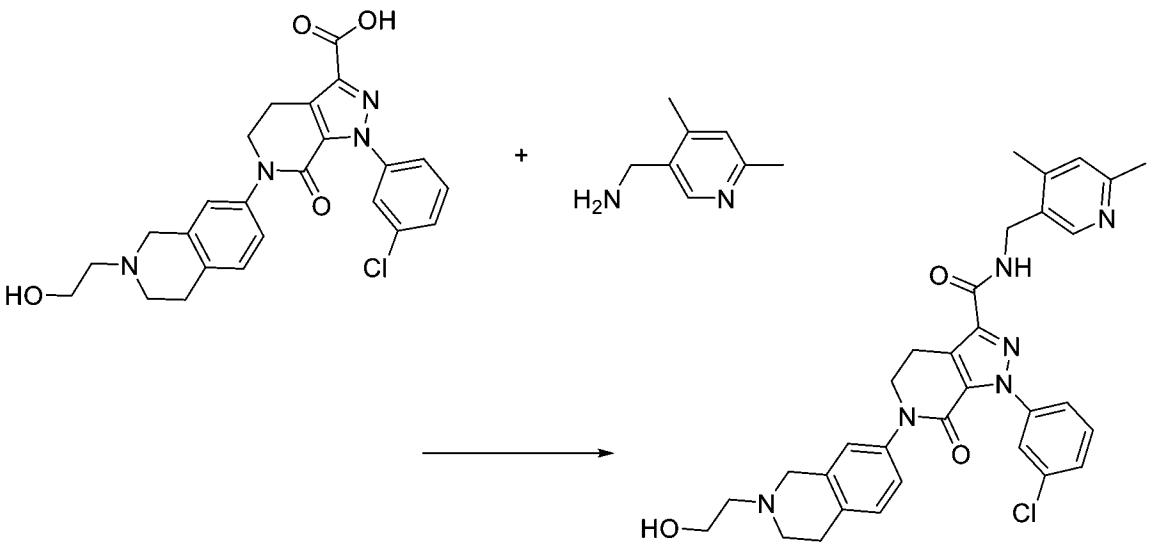


【1289】 將1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯 (490 mg，0.99 mmol)溶解於THF (100 mL)及水 (10 mL)中。添加$LiOH.H_2O$ (127 mg，2.96 mmol)。將混合物在rt下攪拌18 h。

移除THF，用2M HCl將殘餘物之pH調節至pH7且用$CHCl_3$/IPA (4:1，3 x 50 mL)萃取。將合併之有機萃取物乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(430 mg，93%產率)。

【1290】 $[M+H]^+ = 467.1$

1-(3-氯苯基)-N-((4,6-二甲基吡啶-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



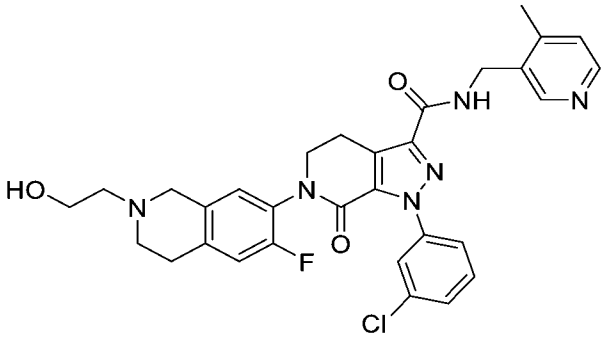
【1291】 將1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸 (68 mg，0.14 mmol)及[苯并三唑-1-基氧基(二甲基胺基)亞甲基]-二甲基銨氮 (41 mg，0.17 mmol)溶解於DCM (30 mL)中。添加TEA (60 uL，0.43 mmol)。20 min後，添加(4,6-二甲基吡啶-3-基)甲胺二鹽酸鹽 (33 mg，0.16 mmol)。將混合物在rt下攪拌18 h，此後用$CHCl_3$ (100 mL)稀釋混合物。此溶液用飽和$NaHCO_3$ (aq) (1 x 30 mL)、水(1 x 30 mL)、鹽水(1 x 30 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。藉由急驟層析(矽石，10% MeOH/$CHCl_3$)純化殘餘物，藉由自動化製備型HPLC (質量導向，2-60% MeCN/水，使用2.5% NH_4OH/水之鹼性移動相)進一步純化且自MeCN/水中凍乾，得到產物(28 mg，33%產率)。

【1292】 $[M+H]^+ = 585.3$

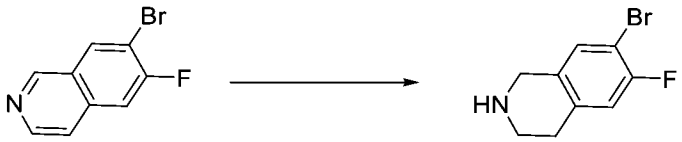
【1293】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) 2.31 (3H, s), 2.38 (3H, s), 2.54 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.65 - 2.73 (2H, m), 2.75 - 2.82 (2H, m), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.51 - 3.61 (4H, m), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.43 (2H, d, J = 5.9 Hz), 4.46 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.03 (1H, s), 7.04 (1H, s), 7.07 - 7.13 (2H, m), 7.47 - 7.54 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.73 - 7.82 (1H, m), 8.30 (1H, s), 8.92 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號1134

1-(3-氯苯基)-6-(6-氟-2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



7-溴-6-氟-1,2,3,4-四氫異喹啉

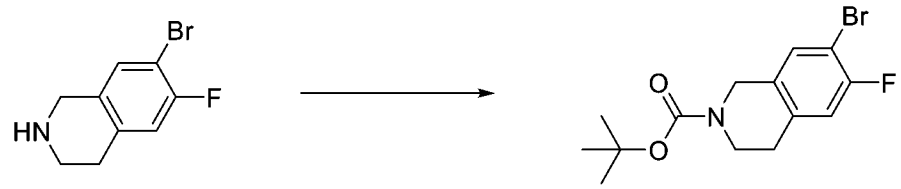


【1294】 在0℃下，將三乙基硼氫化鈉於THF中之1.0 M溶液(7.4 mL，7.4 mmol)添加至7-溴-6-氟-異喹啉(420 mg，1.86 mmol)於THF (15 mL)中之攪拌溶液中。將混合物在0℃下攪拌2 h。在0℃下添加水(10 mL)且在攪拌下使混合物加溫至rt。移除溶劑，添加1M HCl (aq) (20 mL)且將有機物萃取至DCM中。用飽和K_2CO_3 (aq) (20 mL)鹼化水層，用DCM萃取且用鹽水洗滌此等DCM萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(470 mg，100%產率)。

【1295】 $[M+H]^+$ = 230.1, 232.0

【1296】 ^{1}H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 2.67 - 2.82 (2H, m), 3.10 (2H, t, J = 6.0 Hz), 3.94 (2H, t, J = 1.2 Hz), 6.77 - 6.88 (1H, m), 7.18 (1H, d, J = 6.9 Hz)

7-溴-6-氟-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

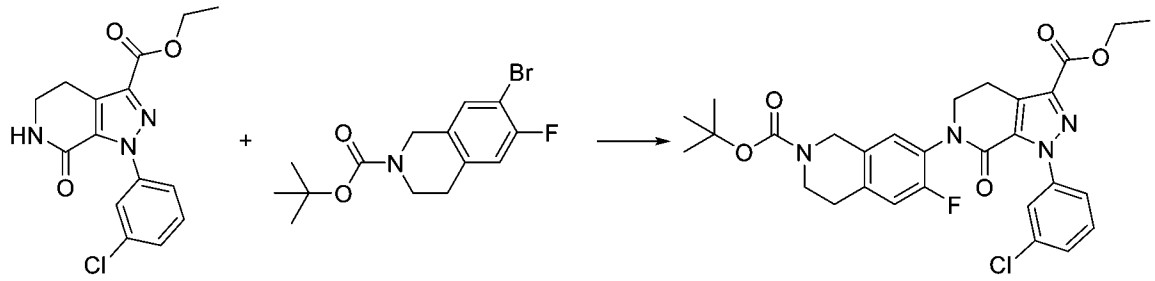


【1297】 將Boc_2O (580 mg，2.66 mmol)添加至7-溴-6-氟-1,2,3,4-四氫異喹啉(470 mg，2.04 mmol)及TEA (710 μL，5.11 mmol)於DCM (10 mL)中之攪拌溶液中。將混合物在rt下攪拌18 h。添加水(10 mL)，分離有機相，且用DCM萃取水相。用鹽水(20 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟管柱層析(矽石，0-80% EtOAc/異己烷)得到產物(663 mg，98%產率)。

【1298】 $[M\text{-}Boc+H]^+$ = 230.1, 232.0

【1299】 ^{1}H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.48 (9H, s), 2.73 - 2.81 (2H, m), 3.62 (2H, t, J = 5.9 Hz), 4.51 (2H, s), 6.90 (1H, d, J = 9.0 Hz), 7.24 - 7.32 (1H, m)

7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-6-氟-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



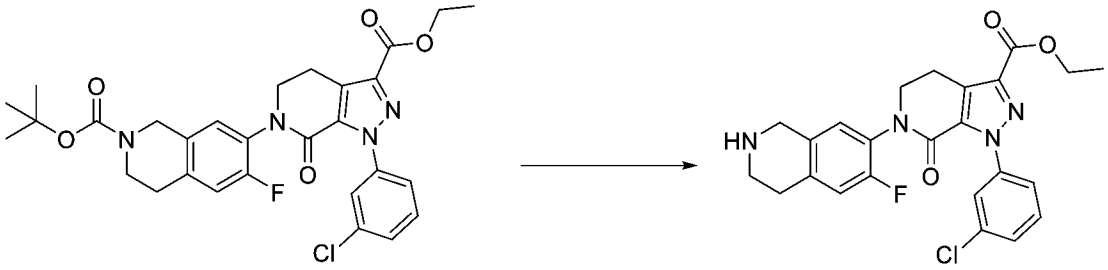
【1300】 將Cu(I)I (63 mg，0.33 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(530 mg，1.66 mmol)、7-溴-6-氟-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(657 mg，1.99 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷-二胺(94

mg，0.66 mmol)及K_3PO_4 (880 mg，4.14 mmol)於無水1,4-二噁烷(11 mL)中之N_2 (g)噴射攪拌懸浮液中。將密封之反應容器在100℃下攪拌20 h。使混合物冷卻至rt且經由Celite®過濾，用EtOAc沖洗。用水及鹽水洗滌濾液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0 - 80% EtOAc/異己烷)得到產物(387 mg，38%產率)。

【1301】 $[M-^tBu+H]^+$ = 513.2, 515.2

【1302】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.44 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.47 (9H, s), 2.80 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.34 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.59 - 3.63 (2H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.47 (2H, q, J = 7.0 Hz), 4.50 - 4.53 (2H, m), 6.95 (1H, d, J = 10.5 Hz), 7.06 (1H, d, J = 7.4 Hz), 7.28 - 7.41 (2H, m), 7.46 - 7.53 (1H, m), 7.60 - 7.66 (1H, m)

1-(3-氯苯基)-6-(6-氟-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯鹽酸鹽



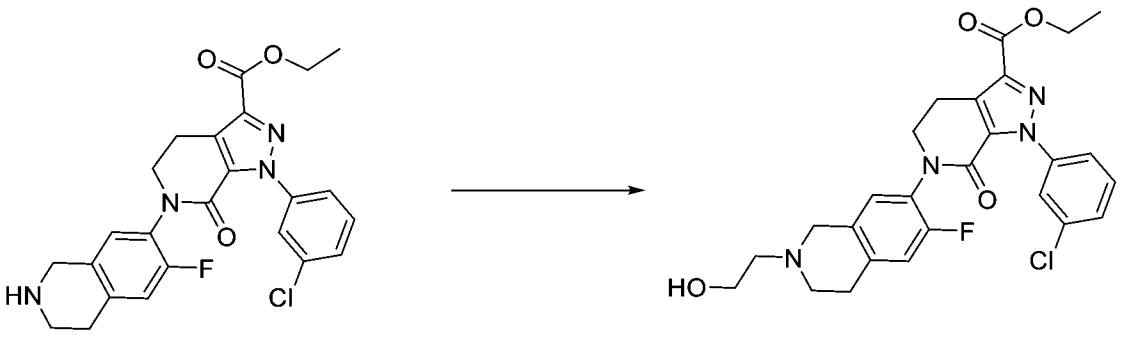
【1303】 將含4M HCl之1,4-二噁烷(3.0 mL，12.0 mmol)添加至7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-6-氟-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(390 mg，0.63 mmol)於1,4-二噁烷(3 mL)中之溶液中。接著將混合物在rt下攪拌4 h。使溶劑蒸發，得到產物(334 mg，100%產率)。

【1304】 $[M+H]^+$ = 469.3, 471.3

【1305】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 3.01 (2H, t, J = 6.3 Hz), 3.18 - 3.31 (2H, m), 3.33 - 3.42 (2H, m), 4.00 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.23 (2H, s),

4.36 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.23 (1H, d, J = 10.8 Hz), 7.36 (1H, d, J = 7.5 Hz), 7.48 - 7.59 (2H, m), 7.58 (1H, dd, J = 7.4, 1.8 Hz), 7.73 (1H, td, J = 1.9, 0.5 Hz), 9.34 (2H, s)

1-(3-氯苯基)-6-[6-氟-2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



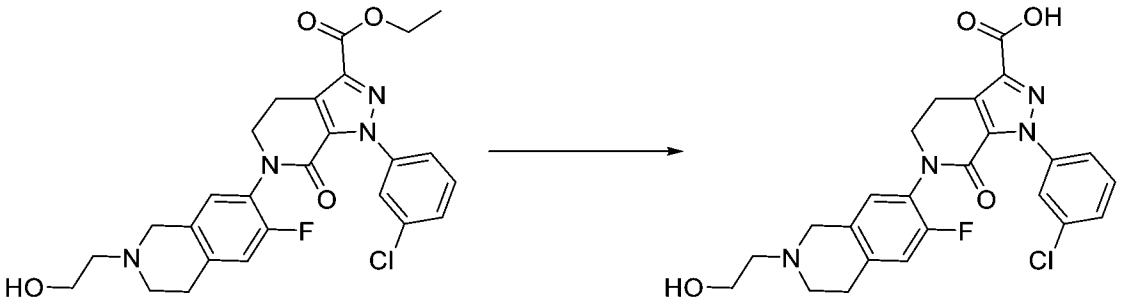
HCl

【1306】 將2-溴乙醇(94 μL，1.3 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-6-(6-氟-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯鹽酸鹽(334 mg，0.66 mmol)及TEA (370 μL，2.64 mmol)於DMF (4 mL)中之溶液中。將混合物在rt下攪拌24 h。用飽和K_2CO_3 (aq) (20 mL)淬滅混合物且用EtOAc萃取。用鹽水(15 mL)洗滌合併之有機萃取物，經(Na_2SO_4)乾燥且蒸發。藉由SCX-2離子交換純化殘餘物，裝載MeOH (20 mL)且用含2M NH_3之MeOH (20 mL)溶離，得到產物(246 mg，71%產率)。

【1307】 $[M+H]^+$ = 513.2, 515.2

【1308】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.54 - 2.60 (2H, m), 2.68 (2H, t, J = 5.5 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.55 (2H, s), 3.52 - 3.61 (2H, m), 3.99 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.35 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.47 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.04 (1H, d, J = 11.1 Hz), 7.14 (1H, d, J = 7.7 Hz), 7.48 - 7.57 (1H, m), 7.53 - 7.61 (2H, m), 7.69 - 7.75 (1H, m)

1-(3-氯苯基)-6-[6-氟-2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸

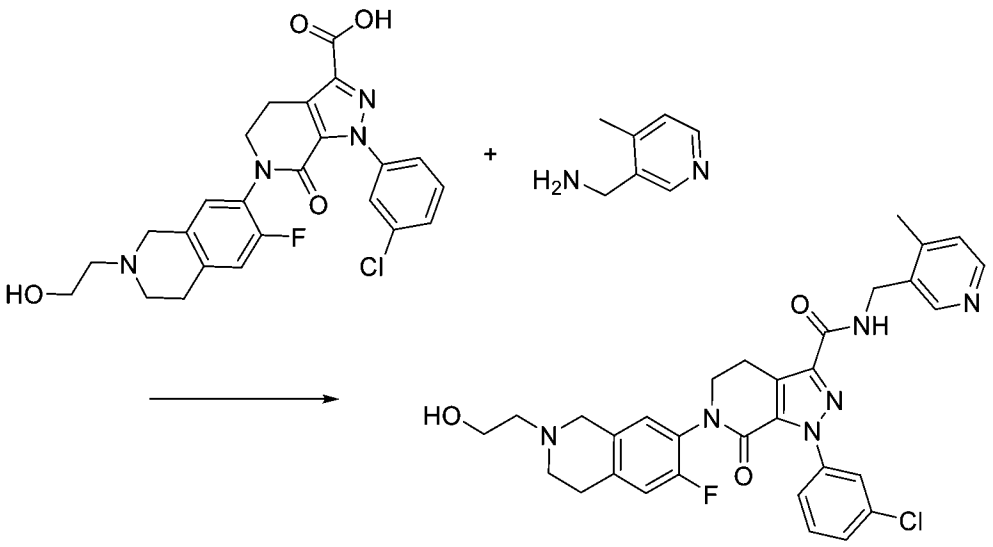


【1309】 向1-(3-氯苯基)-6-[6-氟-2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(246 mg，0.470 mmol)於THF (3 mL)及水(1.5 mL)之混合物中之溶液中添加LiOH.H_2O (30 mg，0.71 mmol)，且將混合物在rt下攪拌18 h。移除THF且使用1M HCl (aq)將剩餘水溶液酸化至pH = 2-3。用EtOAc萃取酸化之水相且將合併之有機萃取物乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(268 mg，100%產率)。

【1310】 $[M+H]^+$ = 485.1, 485.2

【1311】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.58 (2H, t, J = 6.1 Hz), 2.72 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.81 (2H, d, J = 5.8 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.55 - 3.62 (4H, m), 3.95 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.04 (1H, d, J = 10.9 Hz), 7.15 (1H, d, J = 7.7 Hz), 7.46 - 7.61 (3H, m), 7.69 (1H, dt, J = 2.4, 1.0 Hz)

1-(3-氯苯基)-6-(6-氟-2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



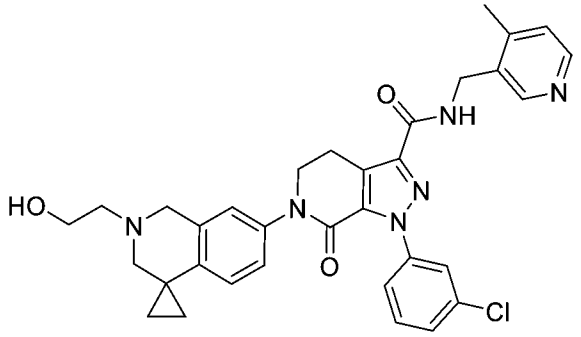
【1312】 將O-(7-氮雜苯并三唑-1-基)-N,N,N',N'-四甲基脲鎓六氟磷酸鹽(120 mg，0.32 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-6-[6-氟-2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(85 mg，0.18 mmol)、(4-甲基吡啶-3-基)甲胺(32 mg，0.26 mmol)及DIPEA (140 μL，0.79 mmol)於DMF (1.5 mL)中之溶液中。將混合物在rt下攪拌24 h。添加飽和K_2CO_3 (aq) (10 mL)且用EtOAc (3 × 5 mL)萃取。用鹽水洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。進行急驟層析(矽石，0 - 10% MeOH/DCM)，接著進行SCX-2離子交換-裝載MeOH (10 mL)且用含3M NH_3之MeOH (10 mL)溶離，得到產物(24 mg，23%產率)。

【1313】 $[M+H]^+$ = 589.2

【1314】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.36 (3H, s), 2.45 - 2.57 (2H, m), 2.68 - 2.73 (1H, m), 2.79 - 2.84 (2H, m), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.26 - 3.37 (2H, m), 3.56 - 3.60 (4H, m), 3.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.05 (1H, d, J = 11.0 Hz), 7.12 - 7.22 (2H, m), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.57 - 7.65 (1H, m), 7.74 - 7.80 (1H, m), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.44 (1H, s), 9.01 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號1144

1-(3-氯苯基)-6-(2'-(2-羥基乙基)-2',3'-二氫-1'H-螺[環丙烷-1,4'-異喹啉]-7'-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



N-[[1-(4-溴苯基)環丙基]甲基]-2,2,2-三氟-乙醯胺

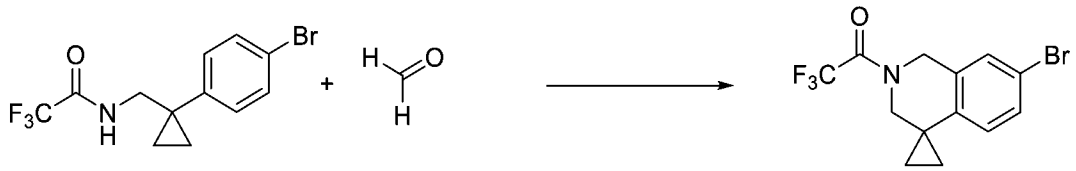


【1315】 向[1-(4-溴苯基)環丙基]甲胺(650 mg，2.87 mmol)於DCM (30 mL)中之溶液中添加TEA (1.2 mL，8.62 mmol)及三氟乙酸酐(0.60 mL，4.31 mmol)，且將混合物在rt下攪拌20 h。用DCM (50 mL)稀釋該溶液且用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-50% EtOAc/異己烷)得到產物(881 mg，95%產率)。

【1316】 $[M+H]^+$ = 320.0, 322.0

【1317】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.73 - 0.82 (2H, m), 0.90 - 0.98 (2H, m), 3.40 (2H, d, J = 5.9 Hz), 7.18 - 7.27 (2H, m), 7.42 - 7.51 (2H, m), 9.45 (1H, t, J = 5.9 Hz)

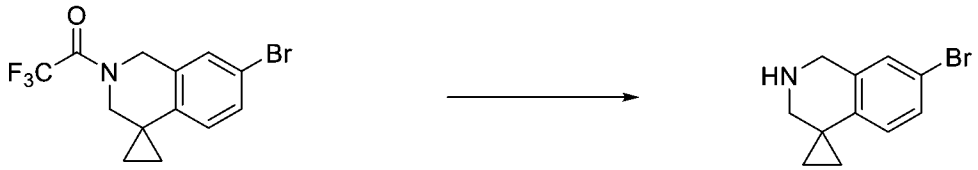
1-(7-溴螺[1,3-二氫異喹啉-4,1'-環丙烷]-2-基)-2,2,2-三氟-乙酮



【1318】 將N-[[1-(4-溴苯基)環丙基]甲基]-2,2,2-三氟-乙醯胺(875 mg，2.72 mmol)及聚甲醛(408 mg，13.6 mmol)添加至AcOH (5 mL)及硫酸(3.5 mL)之混合物中且將混合物在rt下攪拌20 h。將混合物傾入冷水(100 mL)中且用EtOAc (2 x 75 mL)萃取。用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-30% EtOAc/異己烷)得到產物(524 mg，58%產率)。

【1319】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.98 - 1.08 (4H, m), 3.66 (2H, d, J = 9.9 Hz), 4.89 (2H, d, J = 11.1 Hz), 6.83 (1H, dd, J = 8.5, 1.9 Hz), 7.33 - 7.40 (1H, m), 7.54 (1H, dd, J = 15.2, 1.7 Hz)

7-溴螺[2,3-二氫-1H-異喹啉-4,1'-環丙烷]

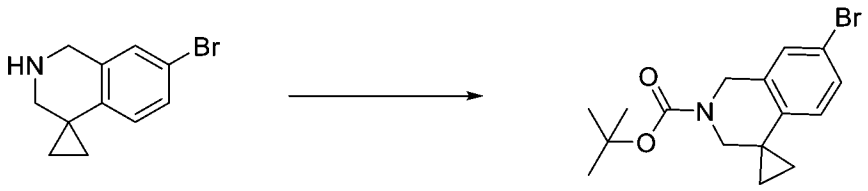


【1320】 向1-(7-溴螺[1,3-二氫異喹啉-4,1'-環丙烷]-2-基)-2,2,2-三氟-乙酮(520 mg，1.56 mmol)於MeOH (15 mL)中之溶液中添加K_2CO_3 (430 mg，3.11 mmol)且將混合物在rt下攪拌20 h且蒸發。將殘餘物分配於EtOAc (50 mL)與水(15 mL)之間。用鹽水洗滌有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(343 mg，93%產率)。

【1321】 $[M+H]^+$ = 238.1, 240.1

【1322】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.77 - 0.84 (2H, m), 0.87 - 0.95 (2H, m), 2.62 - 2.71 (1H, m), 2.72 (2H, s), 3.91 (2H, s), 6.67 (1H, d, J = 8.4 Hz), 7.20 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.21 - 7.24 (1H, m)

7-溴螺[1,3-二氫異喹啉-4,1'-環丙烷]-2-甲酸第三丁酯 (163848)

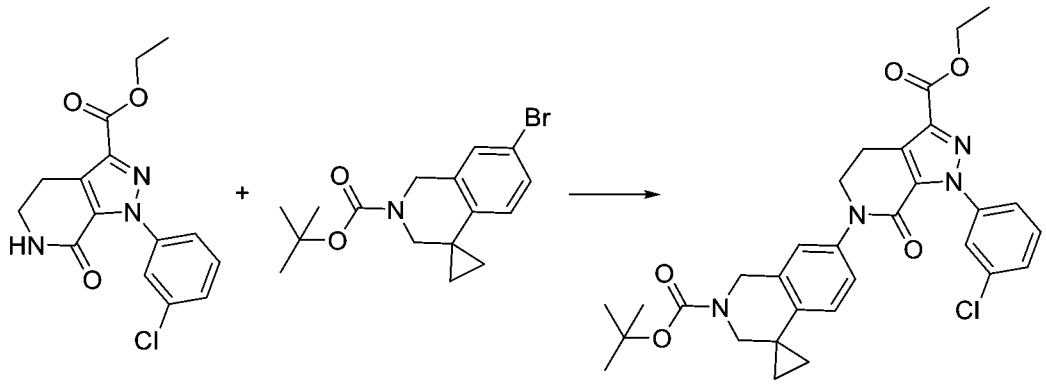


【1323】 向7-溴螺[2,3-二氫-1H-異喹啉-4,1'-環丙烷] (340 mg，1.43 mmol)於DCM (15 mL)中之溶液中添加TEA (0.40 mL，2.9 mmol)及Boc_2O (436 mg，2.00 mmol)且將混合物在rt下攪拌20 h。用DCM (50 mL)稀釋混合物且用飽和$NaHCO_3$ (aq) (15 mL)及鹽水(15 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-35% EtOAc/異己烷)得到產物(359 mg，74%產率)。

【1324】 $[M\text{-}Boc+H]^+$ = 238.1, 240.1

【1325】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.95 (4H, d, J = 5.0 Hz), 1.41 (9H, s), 3.39 (2H, s), 4.62 (2H, s), 6.77 (1H, d, J = 8.4 Hz), 7.30 (1H, dd, J = 8.4, 2.2 Hz), 7.39 (1H, d, J = 2.2 Hz)

7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]螺[1,3-二氫異喹啉-4,1'-環丙烷]-2-甲酸第三丁酯



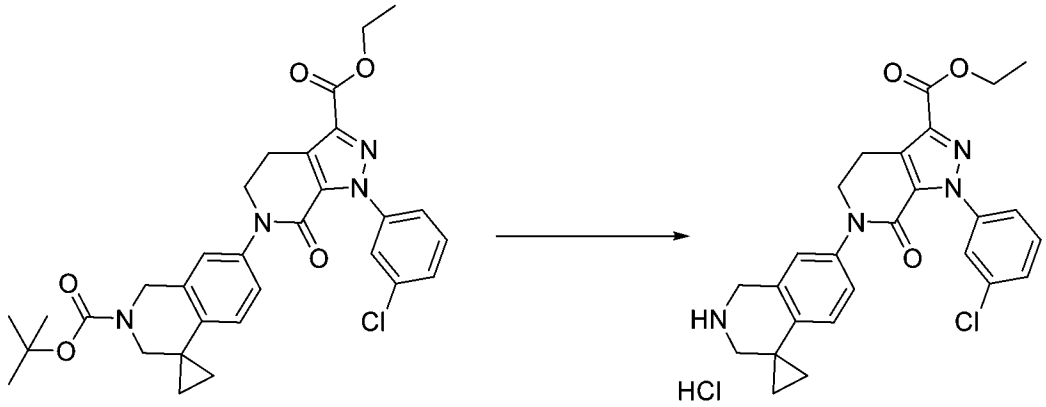
【1326】 用N_2 (g)吹掃1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(470 mg，1.47 mmol)及7-溴螺[1,3-二氫異喹啉-4,1'-環丙烷]-2-甲酸第三丁酯(355 mg，1.05 mmol)於無水1,4-二噁烷(10 mL)中之溶液持續5 min。添加Cs_2CO_3 (684 mg，2.10 mmol)、XantPhos (121 mg，0.210 mmol)及$Pd_2(dba)_3$ (96 mg，0.11 mmol)。

將密封之容器在100℃下攪拌20 h。經由Celite®過濾混合物且用EtOAc (100 mL)沖洗。用水及鹽水洗滌濾液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-50% EtOAc/異己烷)得到產物(279 mg，46%產率)。

【1327】 $[M-^tBu+H]^+$ = 521.2, 523.2

【1328】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.93 - 0.98 (4H, m), 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.41 (9H, s), 3.19 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.41 (2H, s), 4.05 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.35 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.61 (2H, s), 6.84 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.10 - 7.17 (2H, m), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.58 (1H, dt, J = 7.3, 1.9 Hz), 7.72 - 7.75 (1H, m)

1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-螺[2,3-二氫-1H-異喹啉-4,1'-環丙烷]-7-基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯鹽酸鹽



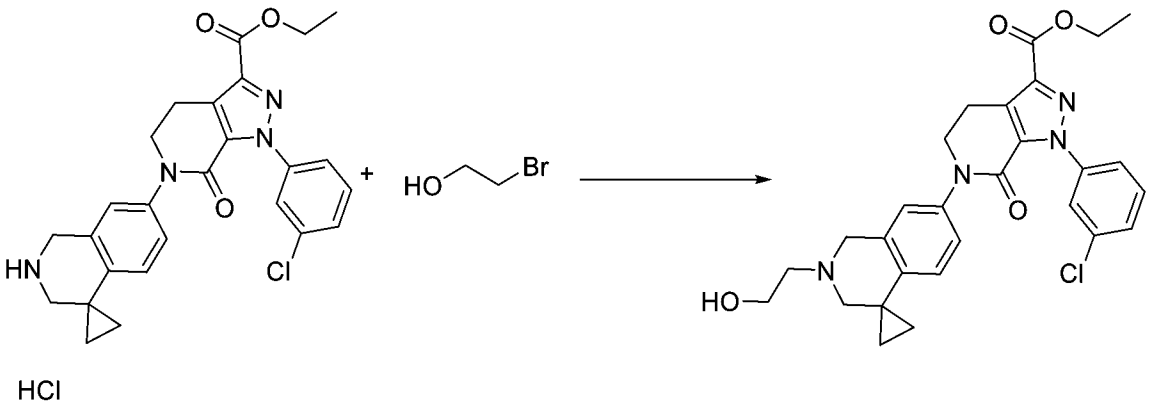
【1329】 向7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]螺[1,3-二氫異喹啉-4,1'-環丙烷]-2-甲酸第三丁酯(28 mg，0.48 mmol)於1,4-二噁烷(2.5 mL)中之溶液中添加含4M HCl之1,4-二噁烷(2.5 mL)且將混合物在rt下攪拌3 h。使溶劑蒸發，得到產物(250 mg，100%產率)。

【1330】 $[M+H]^+$ = 477.2, 479.2

【1331】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.06 - 1.16 (4H, m), 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.25 (2H, s), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.28 - 4.41 (4H,

m), 6.90 (1H, d, J = 8.4 Hz), 7.21 - 7.27 (2H, m), 7.48 - 7.57 (2H, m), 7.59 (1H, dt, J = 7.4, 1.8 Hz), 7.71 - 7.76 (1H, m), 9.43 (2H, s br)

1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)螺[1,3-二氫異喹啉-4,1'-環丙烷]-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯

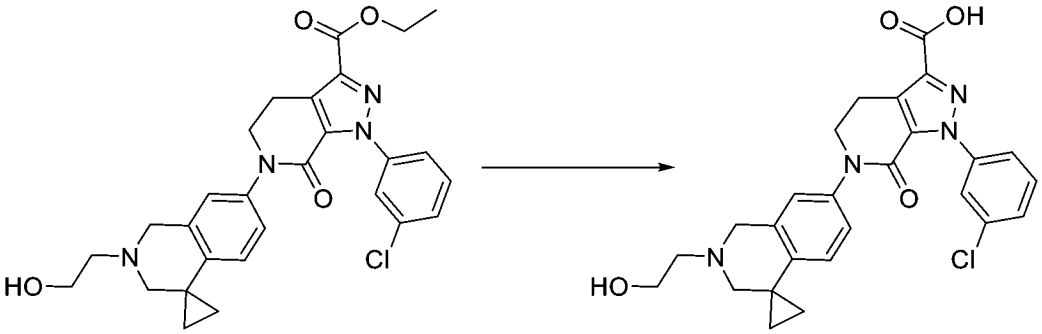


【1332】 向1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-螺[2,3-二氫-1H-異喹啉-4,1'-環丙烷]-7-基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯鹽酸鹽(250 mg，0.49 mmol)於DMF (5 mL)中之溶液中添加TEA (240 μL，1.70 mmol)及2-溴乙醇(69 μL，0.97 mmol)且將混合物在rt下攪拌20 h。用EtOAc (50 mL)稀釋該溶液且用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌，經(Na_2SO_4)乾燥且蒸發。用SCX-2管柱進行離子交換，用MeOH (10 mL)洗滌且用含3M NH_3之MeOH (10 mL)溶離，得到產物(190 mg，75%產率)。

【1333】 $[M+H]^+$ = 521.1, 523.1

【1334】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.82 - 0.89 (2H, m), 0.89 - 0.99 (2H, m), 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.51 - 2.57 (4H, m), 3.15 - 3.24 (2H, m), 3.55 (2H, q, J = 6.1 Hz), 3.69 (2H, s), 4.03 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.35 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.45 (1H, t, J = 5.4 Hz), 6.72 (1H, d, J = 8.4 Hz), 7.02 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.08 (1H, dd, J = 8.3, 2.3 Hz), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.58 (1H, dt, J = 7.3, 1.8 Hz), 7.73 (1H, t, J = 2.0 Hz)

1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)螺[1,3-二氫異喹啉-4,1'-環丙烷]-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸

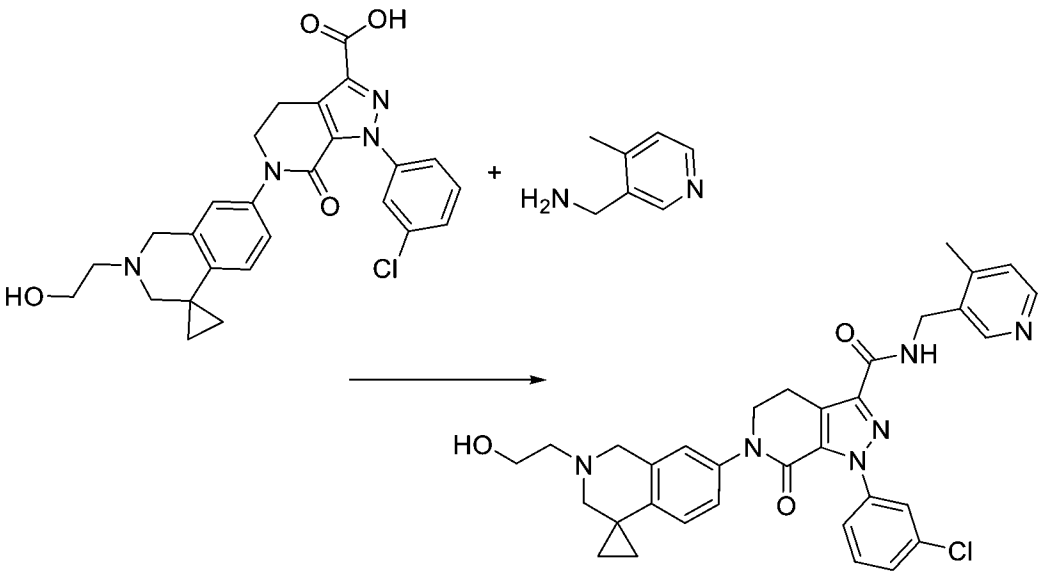


【1335】 向1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)螺[1,3-二氫異喹啉-4,1'-環丙烷]-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(190 mg，0.37 mmol)於THF (3 mL)及水(1.5 mL)之混合物中之溶液中添加$LiOH.H_2O$ (23 mg，0.55 mmol)且將混合物在rt下攪拌18 h。移除THF且使用1M HCl (aq)將水溶液酸化至pH = 2-3。用EtOAc (3 x 40 mL)萃取酸化之水相，將合併之有機萃取物乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(213 mg，100%產率)。

【1336】 $[M+H]^+$ = 493.2, 495.2

【1337】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.88 - 0.95 (2H, m), 0.95 - 1.00 (2H, m), 2.67 - 2.74 (2H, m), 2.75 - 2.79 (2H, m), 3.17 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.57 - 3.67 (3H, m), 3.89 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.5 Hz), 6.75 (1H, d, J = 8.4 Hz), 7.06 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.12 (1H, dd, J = 8.4, 2.2 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.58 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.72 (1H, t, J = 1.9 Hz)

1-(3-氯苯基)-6-(2'-(2-羥基乙基)-2',3'-二氫-1'H-螺[環丙烷-1,4'-異喹啉]-7'-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



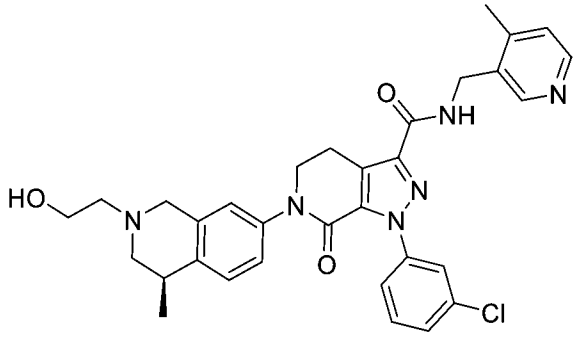
【1338】 向1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)螺[1,3-二氫異喹啉-4,1'-環丙烷]-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(60 mg，0.12 mmol)於DMF (1.5 mL)中之溶液中添加(4-甲基吡啶-3-基)甲胺(30 mg，0.24 mmol)、DIPEA (110 μL，0.61 mmol)及HATU (69 mg，0.18 mmol)，且將混合物在rt下攪拌72 h。用EtOAc (75 mL)稀釋混合物且用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。進行急驟層析(矽石，0-9% MeOH/DCM)，隨後使用SCX-2管柱進行離子交換，用MeOH (10 mL)洗滌且用含3M NH_3之MeOH (10 mL)溶離，得到產物(42 mg，55%產率)。

【1339】 $[M+H]^+$ = 597.3, 599.3

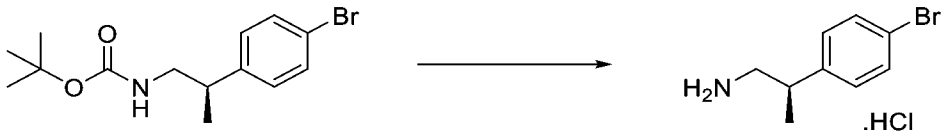
【1340】 ^1H NMR ((DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.86 (2H, t, J = 4.1 Hz), 0.91 (2H, t, J = 4.3 Hz), 2.36 (3H, s), 2.52 - 2.58 (4H, m), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.56 (2H, q, J = 6.0 Hz), 3.69 (2H, s), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.44 (1H, t, J = 5.4 Hz), 4.47 (2H, d, J = 6.0 Hz), 6.71 (1H, d, J = 8.5 Hz), 7.02 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.08 (1H, dd, J = 8.3, 2.2 Hz), 7.18 (1H, d, J = 4.9 Hz), 7.45 - 7.58 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 8.98 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號1148

(R)-1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-4-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



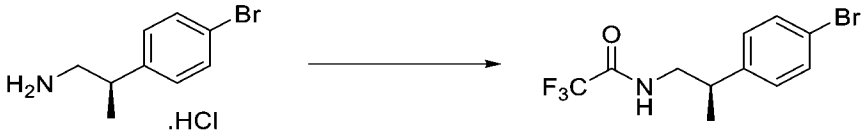
(2R)-2-(4-溴苯基)丙-1-胺鹽酸鹽



【1341】 向(R)-(2-(4-溴苯基)丙基)胺基甲酸第三丁酯(1.00 g，3.18 mmol)於1,4-二噁烷(10 mL)中之溶液中添加含4M HCl之1,4-二噁烷(15 mL)且將混合物在rt下攪拌72 h。使溶劑蒸發，得到產物(836 mg，100%產率)。

【1342】 $[M+H]^+$ = 214.1, 216.1

N-[(2R)-2-(4-溴苯基)丙基]-2,2,2-三氟-乙醯胺

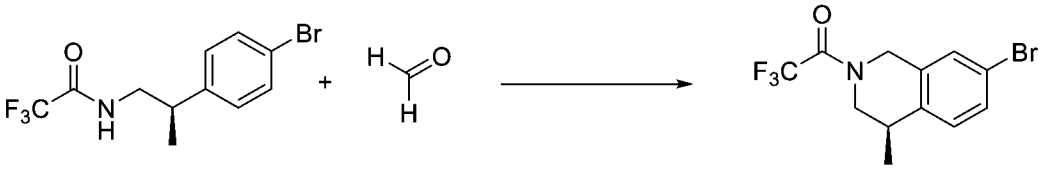


【1343】 向(2R)-2-(4-溴苯基)丙-1-胺鹽酸鹽(800 mg，3.19 mmol)於DCM (25 mL)中之溶液中添加TEA (1.2 mL，8.62 mmol)及三氟乙酸酐(0.60 mL，4.31 mmol)且將混合物在rt下攪拌20 h。用DCM (50 mL)稀釋混合物且用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-50% EtOAc/異己烷)得到產物(935 mg，94%產率)。

【1344】 $[M+H]^+$ = 308.0, 310.0

【1345】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.18 (3H, d, J = 7.0 Hz), 2.99 (1H, h, J = 7.2 Hz), 3.30 - 3.34 (2H, m), 7.19 (2H, d, J = 8.4 Hz), 7.49 (2H, d, J = 8.5 Hz), 9.43 (1H, t, J = 5.7 Hz)

2,2,2-三氟-1-[(4R)-7-溴-4-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-基]乙酮



【1346】 將AcOH (6 mL)及硫酸(3.8 mL)之冷混合物添加至2,2,2-三氟-N-[(2R)-2-(4-溴苯基)丙基]乙醯胺(930 mg，3.00 mmol)中，隨後添加聚甲醛(630 mg，21.0 mmol)。將混合物在rt下攪拌48 h，傾入冷水(100 mL)中且用EtOAc (2 x 75 mL)萃取。用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-30% EtOAc/異己烷)得到產物(806 mg，83%產率)。

【1347】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.18 (3H, dd, J = 8.6, 7.0 Hz), 3.06 (1H, h, J = 6.5 Hz), 3.58 - 3.71 (1H, m), 3.72 - 3.83 (1H, m), 4.54 - 4.79 (1H, m), 4.85 (1H, d, J = 17.5 Hz), 7.25 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.35 - 7.48 (1H, m), 7.54 (1H, dd, J = 14.6, 2.2 Hz)

(4R)-7-溴-4-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉

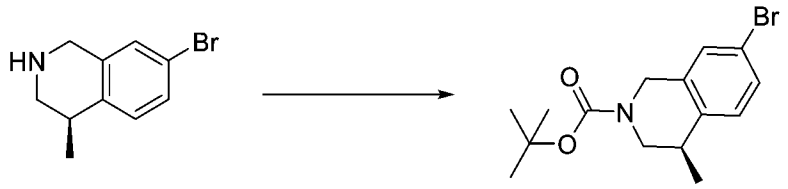


【1348】 向2,2,2-三氟-1-[(4R)-7-溴-4-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-基]乙酮(800 mg，2.48 mmol)於MeOH (25 mL)中之溶液中添加K_2CO_3 (687 mg，4.97 mmol)且將混合物在rt下攪拌20 h且蒸發 將殘餘物分配於EtOAc (50 mL)與水(15 mL)之間。用鹽水洗滌有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(504 mg，90%產率)。

【1349】 $[M+H]^+$ = 226.1, 228.1

【1350】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.18 (3H, d, J = 7.0 Hz), 2.60 (1H, dd, J = 12.4, 5.8 Hz), 2.72 (1H, h, J = 6.6 Hz), 2.98 (1H, dd, J = 12.4, 4.9 Hz), 3.78 (1H, d, J = 16.6 Hz), 3.83 (1H, d, J = 16.7 Hz), 7.15 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.20 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.28 (1H, dd, J = 8.2, 2.2 Hz)

(4R)-7-溴-4-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

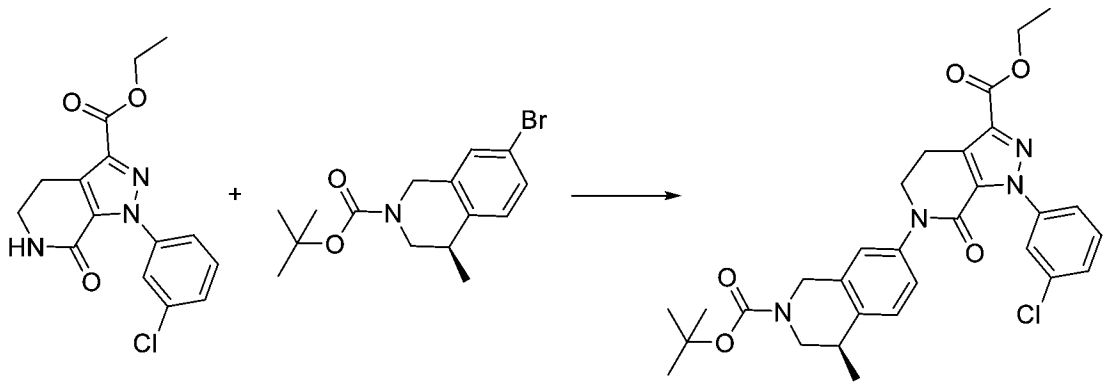


【1351】 向(4R)-7-溴-4-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉(340 mg，1.43 mmol)於DCM (15 mL)中之溶液中添加TEA (0.40 mL，2.86 mmol)及Boc_2O (436 mg，2.00 mmol)，且將混合物在rt下攪拌20 h。用DCM (50 mL)稀釋混合物且用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-35% EtOAc/異己烷)得到產物(359 mg，74%產率)。

【1352】 $[M-Boc+H]^+$ = 226.1, 228.1

【1353】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.15 (3H, d, J = 7.0 Hz), 1.42 (9H, s), 2.89 (1H, h, J = 5.8 Hz), 3.41 (1H, dd, J = 13.1, 4.3 Hz), 3.46 - 3.53 (1H, m), 4.27 - 4.49 (1H, m), 4.67 (1H, d, J = 17.4 Hz), 7.19 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.36 (1H, dd, J = 8.3, 2.2 Hz), 7.41 (1H, d, J = 2.1 Hz)

(4R)-7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-4-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

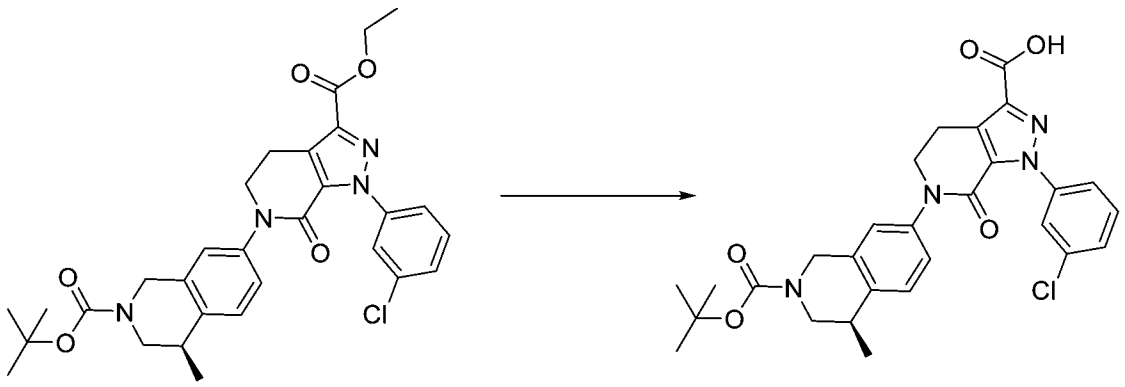


【1354】 用N_2 (g)吹掃1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(676 mg，2.12 mmol)及(4R)-7-溴-4-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(575 mg，1.76 mmol)於1,4-二噁烷(15 mL)中之溶液持續5 min。添加Cs_2CO_3 (1150 mg，3.53 mmol)、XantPhos (102 mg，0.18 mmol)及XantPhos Pd G4 (85 mg，0.088 mmol)。將密封之反應容器在100℃下攪拌20 h。經由Celite®過濾混合物，用EtOAc (50 mL)沖洗，用水及鹽水洗滌濾液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-50% EtOAc/異己烷)得到產物(309 mg，31%產率)。

【1355】 $[M-^tBu+H]^+$ = 509.1, 511.1

【1356】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.18 (3H, dd, J = 7.1, 1.8 Hz), 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.42 (9H, s), 2.93 (1H, p, J = 5.7 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.40 - 3.54 (2H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.35 (3H, q, J = 7.1 Hz), 4.59 - 4.70 (1H, m), 7.15 - 7.21 (2H, m), 7.26 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.49 - 7.57 (2H, m), 7.59 (1H, dt, J = 7.4, 1.8 Hz), 7.73 (1H, t, J = 2.0 Hz)

1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-[(4R)-2-第三丁氧羰基-4-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸

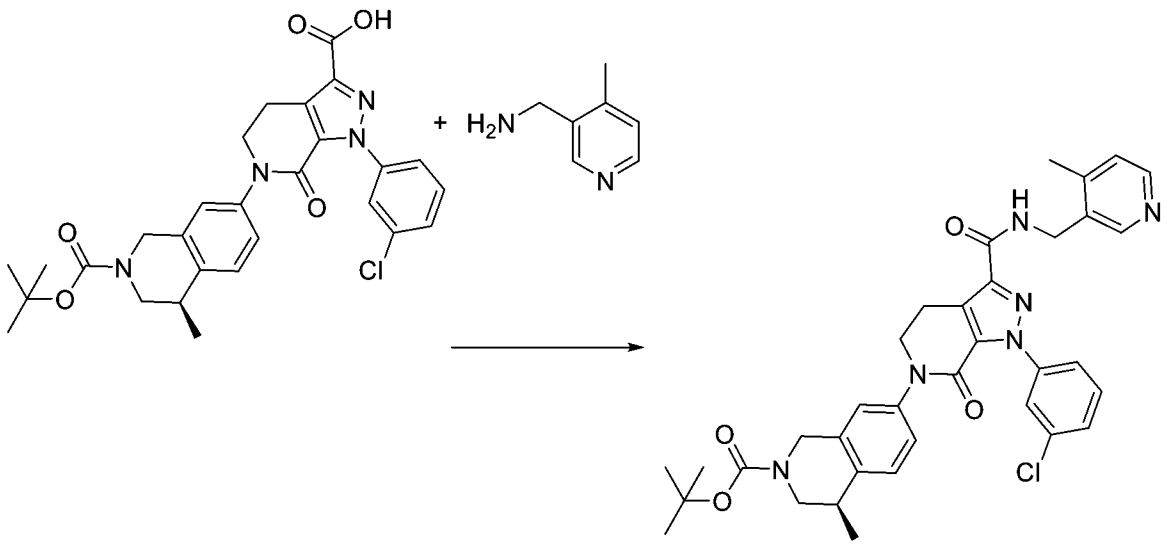


【1357】 向(4R)-7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-4-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(305 mg，0.54 mmol)於THF (4 mL)及水(2 mL)之混合物中之溶液中添加LiOH.H_2O (45 mg，1.08 mmol)且將混合物在rt下攪拌18 h。移除THF且使用1M HCl (aq)將剩餘水溶液酸化至pH = 2-3。用EtOAc萃取酸化之水相且將合併之有機萃取物乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(299 mg，100%產率)。

【1358】 $[M-^tBu+H]^+$ = 481.2, 483.2

【1359】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.15 - 1.22 (3H, m), 1.42 (9H, s), 2.93 (1H, p, J = 5.7 Hz), 3.17 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.40 - 3.54 (2H, m), 4.03 - 4.10 (2H, m), 4.25 - 4.48 (1H, m), 4.60 - 4.71 (1H, m), 7.14 - 7.21 (2H, m), 7.26 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.58 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.72 - 7.74 (1H, m), 13.26 (1H, s br)

(4R)-7-[1-(3-氯苯基)-3-[(4-甲基-3-吡啶基)甲基胺甲醯基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-4-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

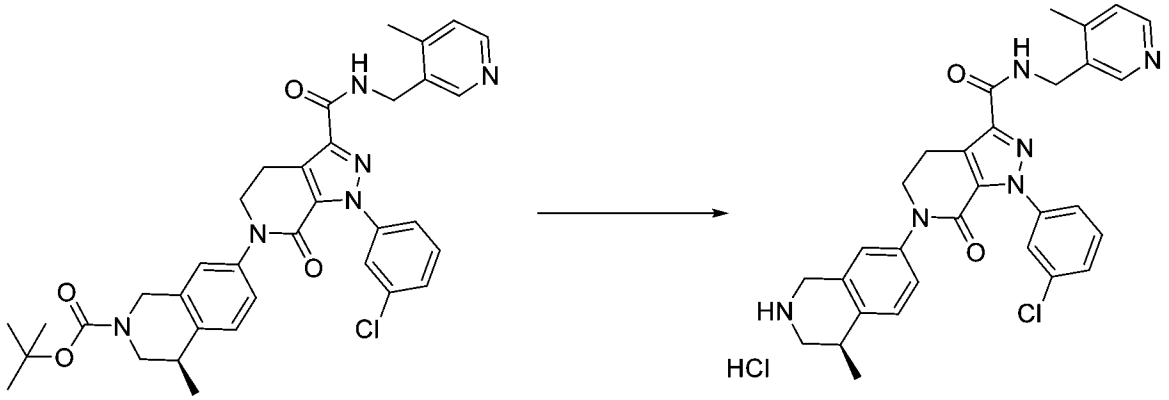


【1360】 向1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-[(4R)-2-第三丁氧羰基-4-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(145 mg，0.27 mmol)於MeCN (3 mL)中之溶液中添加(4-甲基吡啶-3-基)甲胺(66 mg，0.54 mmol)、1-甲基咪唑(86 μL，1.08 mmol)及TCFH (114 mg，0.41 mmol)且將混合物在rt下攪拌20 h。用EtOAc (75 mL)稀釋混合物且用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/異己烷)得到產物(142 mg，82%產率)。

【1361】 $[MH]^+$ = 641.4, 643.4

【1362】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.18 (3H, d, J = 6.8 Hz), 1.42 (9H, s), 2.36 (3H, s), 2.93 (1H, p, J = 5.5 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.41 - 3.56 (2H, m), 4.04 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.26 - 4.45 (1H, m), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.60 - 4.71 (1H, m), 7.13 - 7.22 (3H, m), 7.25 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.44 (1H, s), 8.99 (1H, t, J = 6.0 Hz)

1-(3-氯苯基)-N-[(4-甲基-3-吡啶基)甲基]-7-側氧基-6-[(4R)-4-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基]-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽

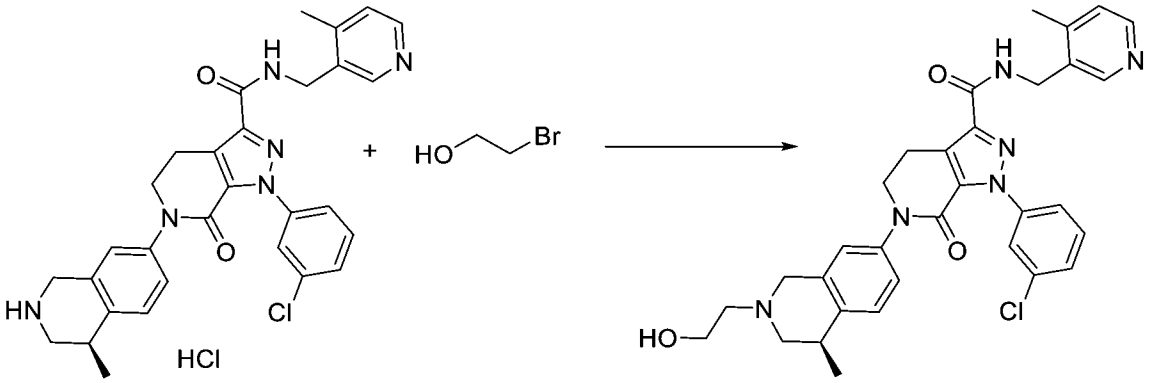


【1363】 向(4R)-7-[1-(3-氯苯基)-3-[(4-甲基-3-吡啶基)甲基胺甲醯基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-4-甲基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(140 mg，0.22 mmol)於1,4-二噁烷(1.5 mL)中之溶液中添加含4M HCl之1,4-二噁烷(1.5 mL)。在rt下72 h後，移除溶劑，得到產物(135 mg，100%產率)。

【1364】 $[M+H]^+$ = 541.2, 543.2

【1365】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.32 (3H, d, J = 7.0 Hz), 2.61 (3H, s), 3.03 (1H, t, J = 9.8 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.21 - 4.26 (2H, m), 4.60 (2H, d, J = 5.8 Hz), 7.23 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.30 (1H, dd, J = 8.4, 2.2 Hz), 7.41 (1H, d, J = 8.5 Hz), 7.48 - 7.59 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 7.2, 1.9 Hz), 7.75 - 7.80 (1H, m), 7.82 (1H, d, J = 5.7 Hz), 8.64 - 8.70 (2H, m), 9.17 (1H, t, J = 5.9 Hz), 9.26 (1H, s br), 9.39 (1H, s br)

(R)-1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-4-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



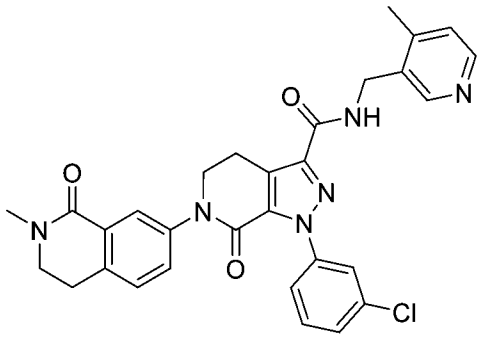
【1366】 向1-(3-氯苯基)-N-[(4-甲基-3-吡啶基)甲基]-7-側氧基-6-[(4R)-4-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基]-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽(70 mg，0.12 mmol)於無水DMF (1.5 mL)中之溶液中添加TEA (51 μL，0.36 mmol)及2-溴乙醇(17 μL，0.24 mmol)且將混合物在rt下攪拌20 h。用EtOAc (50 mL)稀釋混合物且用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。進行急驟層析(矽石，0-10% MeOH/DCM)，隨後使用SCX-2管柱進行離子交換，用MeOH (10 mL)洗滌且用含3M NH_3之MeOH (10 mL)溶離，得到產物(32 mg，46%產率)。

【1367】 $[M+H]^+$ = 585.3, 587.3

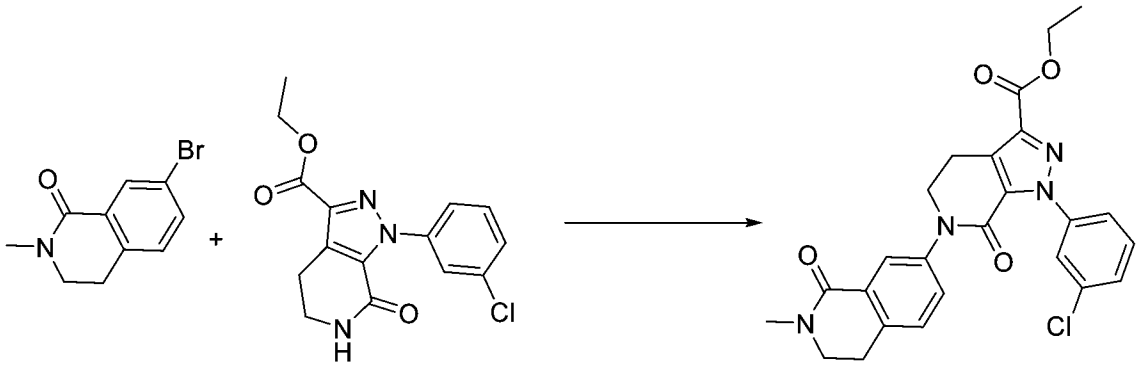
【1368】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.23 (3H, d, J = 6.9 Hz), 2.36 (3H, s), 2.37 - 2.41 (1H, m), 2.52 - 2.57 (2H, m), 2.74 - 2.82 (1H, m), 2.89 - 2.97 (1H, m), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 - 3.61 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.44 (1H, s br), 4.47 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.02 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.13 (1H, dd, J = 8.2, 2.2 Hz), 7.19 (1H, d, J = 5.0 Hz), 7.24 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 8.99 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號1159

1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



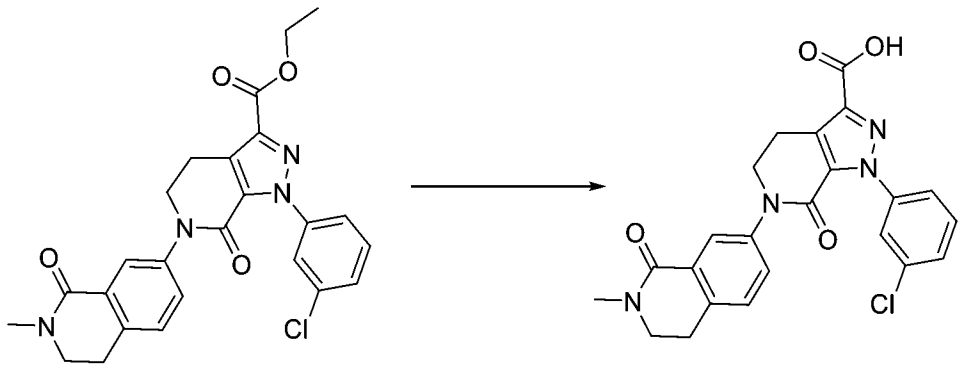
【1369】 將Cu(I)I (30 mg，0.16 mmol)添加至含1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(250 mg，0.78 mmol)、7-溴-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1-酮(225 mg，0.94 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷-二胺(44 mg，0.31 mmol)、K_3PO_4 (415 mg，1.95 mmol)及4Å分子篩(10% w/w)之無水1,4-二噁烷(10 mL)中。將密封之容器在100℃下攪拌20 h。使混合物冷卻至rt，經由Celite®過濾且用EtOAc (5 × 10 mL)洗滌殘餘物。用水(20 mL)、鹽水(20 mL)洗滌合併之濾液，乾燥(Na_2SO_4)，蒸發且藉由急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/異己烷)純化，得到產物(60 mg，16%產率)。

【1370】 $[M+H]^+$ = 479.2, 481.2

【1371】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.09 (2H, t, J =

6.6 Hz), 4.35 (2H, q, J = 6.9 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.43 - 7.47 (1H, m), 7.49 - 7.57 (2H, m), 7.58 - 7.62 (1H, m), 7.72 - 7.79 (1H, m), 7.79 - 7.85 (1H, m)

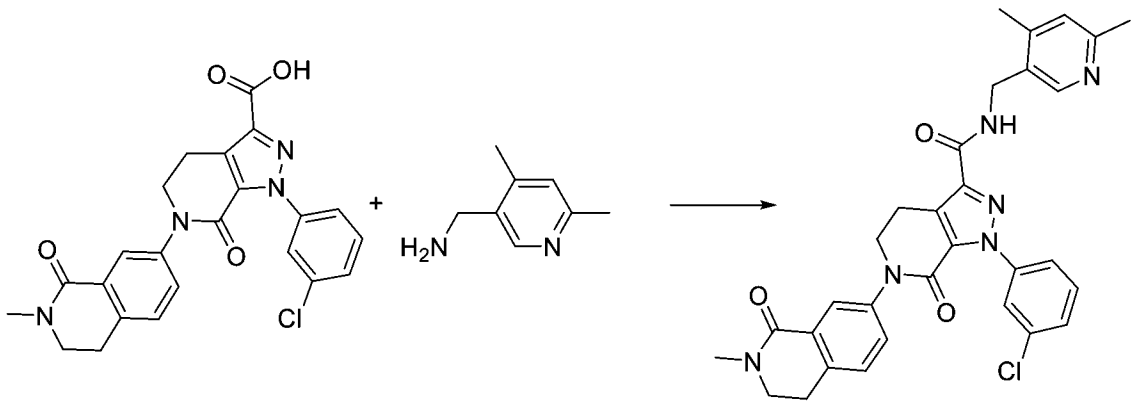
1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸



【1372】 向1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(58 mg，0.12 mmol)於THF (1 mL)及水(0.5 mL)之混合物中之溶液中添加LiOH.H_2O (10 mg，0.24 mmol)。將混合物在rt下攪拌72 h。移除THF，用2M HCl (aq)將殘餘物之pH調節至pH7且用$CHCl_3$/IPA (4:1，3 x 50 mL)萃取。將合併之有機萃取物乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(58 mg，100%產率)。

【1373】 $[M+H]^+$ = 451.1

1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



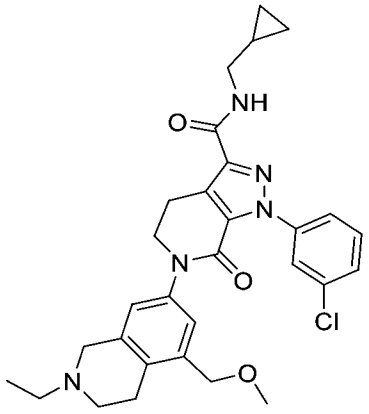
【1374】 在N_2 (g)下向1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(57 mg，0.13 mmol)於無水MeCN (3 mL)中之溶液中添加(4-甲基吡啶-3-基)甲胺(31 mg，0.25 mmol)、1-甲基咪唑(10 μL，0.13 mmol)及TCFH (53 mg，0.19 mmol)。將混合物在rt下攪拌18 h。用EtOAc (75 mL)稀釋此溶液，用飽和$NaHCO_3$ (aq)及鹽水洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，蒸發且藉由急驟層析(矽石，40-100% (EtOAc:MeOH (9:1)/DCM)且接著0-5% MeOH/DCM)純化，得到產物(56 mg，92%產率)。

【1375】 $[M+H]^+$ = 555.3, 557.2

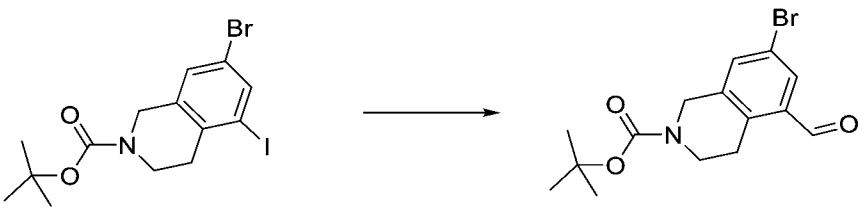
【1376】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.36 (3H, s), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.19 (1H, d, J = 5.0 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.47 - 7.54 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.6, 2.1 Hz), 7.76 - 7.85 (2H, m), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.44 (1H, s), 8.99 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號1169

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-乙基-5-(甲氧基甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



7-溴-5-甲醯基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

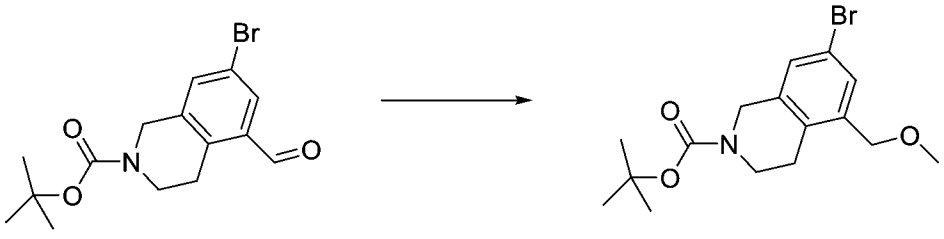


【1377】 在-78℃ (丙酮/乾冰浴)下向7-溴-5-碘-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(1.00 g，2.28 mmol)於無水THF (20 mL)中之溶液中添加異丙基氯化鎂氯化鋰錯合物(Turbo-Grignard)於THF中之1.3 M溶液(1.4 mL，1.8 mmol)且將混合物攪拌30 min。逐滴添加DMF (0.71 mL，9.1 mmol)且將反應攪拌20 h，從而使其加溫至rt。用飽和NH_4Cl (aq) (10 mL)淬滅該溶液且用EtOAc (100 mL)稀釋。用飽和NH_4Cl (aq) (25 mL)及鹽水(25 mL)洗滌有機層，乾燥(Na_2SO_4)，過濾，蒸發且藉由急驟層析(矽石，0-30% EtOAc/異己烷)純化以提供產物(159 mg，20%產率)。

【1378】 $[M\text{-}Boc+H]^+$ = 240.0/242。

【1379】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.42 (9H, s), 3.16 (2H, t, J = 6.1 Hz), 3.56 (2H, t, J = 5.9 Hz), 4.58 (2H, s), 7.77 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.88 (1H, d, J = 2.2 Hz), 10.15 (1H, s)

7-溴-5-(甲氧基甲基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



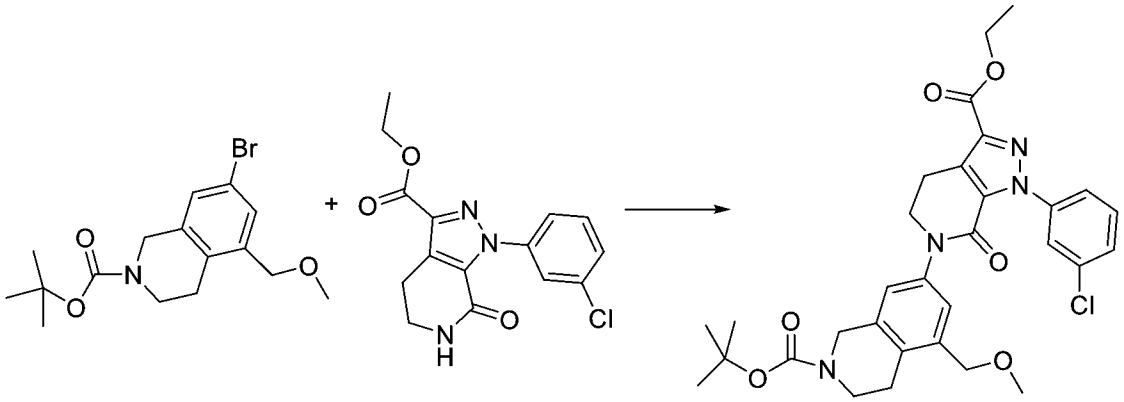
【1380】 在0℃下，向7-溴-5-甲醯基-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(155 mg，0.456 mmol)於無水DCM (5 mL)中之溶液中添加MeOH (0.092 mL，2.28 mmol)、三乙基矽烷(0.22 mL，1.4 mmol)及最終三氟甲烷磺酸三甲基矽烷基酯(0.16 mL，0.91 mmol)，且將混合物攪拌3 h，從而使其加溫至rt。用飽和$NaHCO_3$ (aq) (1

mL)淬滅反應且用DCM (50 mL)稀釋混合物且用飽和$NaHCO_3$ (aq) (15 mL)及鹽水(15 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。將殘餘物溶解於DCM (5 mL)中，隨後添加TEA (0.16 mL，1.14 mmol)及Boc_2O (149 mg，0.683 mmol)，且使混合物在rt下攪拌20 h。用DCM (50 mL)稀釋該溶液且用飽和$NaHCO_3$ (aq) (15 mL)及鹽水(15 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾，蒸發且藉由急驟層析(矽石，0-30% EtOAc/異己烷)純化，提供產物(129 mg，80%產率)。

【1381】 $[M\text{-}Boc+H]^+$ = 256.1/258.1

【1382】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.42 (9H, s), 2.66 (2H, t, J = 6.0 Hz), 3.31 (3H, s), 3.54 (2H, t, J = 5.9 Hz), 4.39 (2H, s), 4.50 (2H, s), 7.36 (2H, s)

7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-5-(甲氧基甲基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



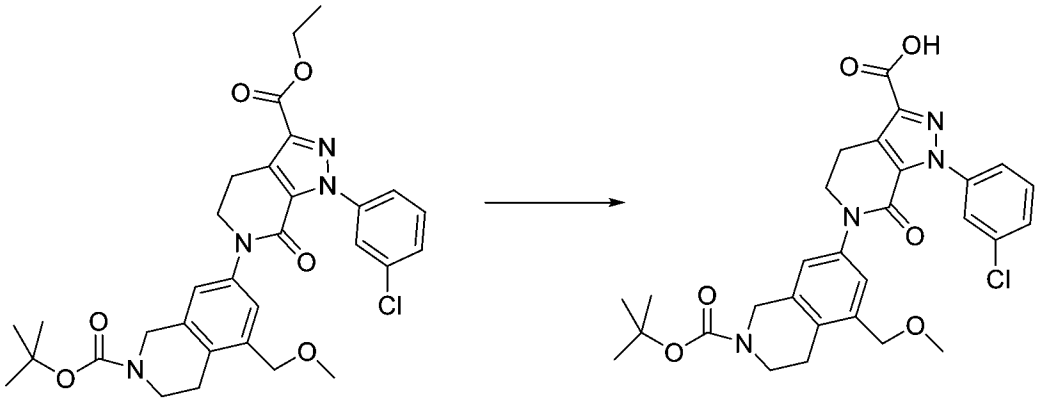
【1383】 用N_2 (g)使1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(161 mg，0.503 mmol)及7-溴-5-(甲氧基甲基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(128 mg，0.359 mmol)於無水1,4-二噁烷(3.5 mL)中之溶液鼓泡5 min。此後，且保持鼓泡，依序添加K_3PO_4 (191 mg，0.898 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷二胺(20 mg，0.14 mmol)及最終Cu(I)I (14 mg，0.072 mmol)。關閉系統且在100℃下攪拌18 h。接著經由Celite®過濾該溶液，用EtOAc (50 mL)沖洗，且用水(20

mL)及鹽水(2 x 20 mL)洗滌濾液，乾燥(Na_2SO_4)，過濾，蒸發且藉由急驟層析(矽石，1-50% EtOAc/異己烷)純化以提供產物(29 mg，13%產率)。

【1384】 $[M\text{-}tBu+H]^+$ = 539.1/541.1

【1385】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.42 (9H, s), 2.71 (2H, t, J = 6.0 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.31 (3H, s), 3.56 (2H, t, J = 5.9 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.35 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.39 (2H, s), 4.50 (2H, s br), 7.12 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.19 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.49 - 7.57 (2H, m), 7.58 (1H, dt, J = 7.4, 1.9 Hz), 7.73 (1H, t, J = 2.0 Hz)

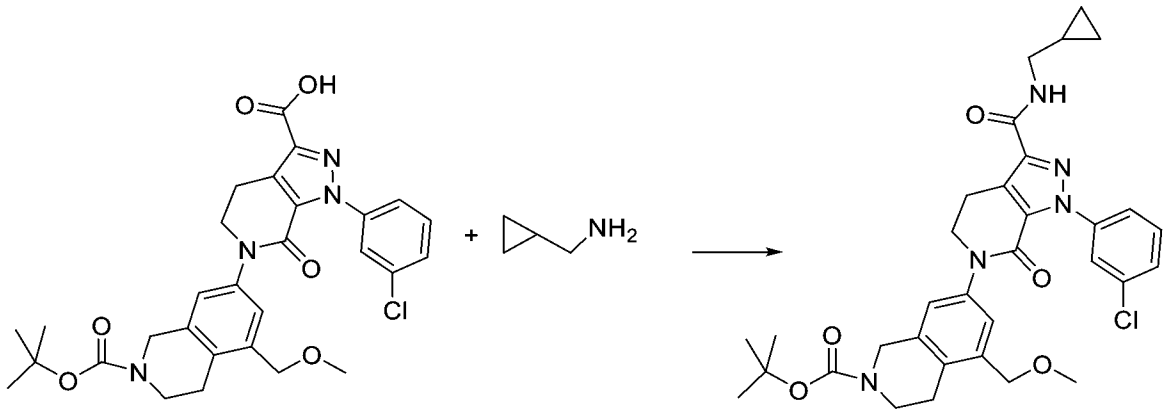
6-[2-第三丁氧羰基-5-(甲氧基甲基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸



【1386】 向7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-5-(甲氧基甲基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(28 mg，0.047 mmol)於THF (1 mL)及水(0.5 mL)之混合物中之溶液中添加$LiOH.H_2O$ (3.9 mg，0.094 mmol)且將混合物在rt下攪拌2 h。藉由添加1M HCl (aq) (0.1 mL)中和混合物且蒸發以提供產物(29 mg，100%產率)。

【1387】 $[M\text{-}tBu+H]^+$= 511.1/513.1

7-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-5-(甲氧基甲基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

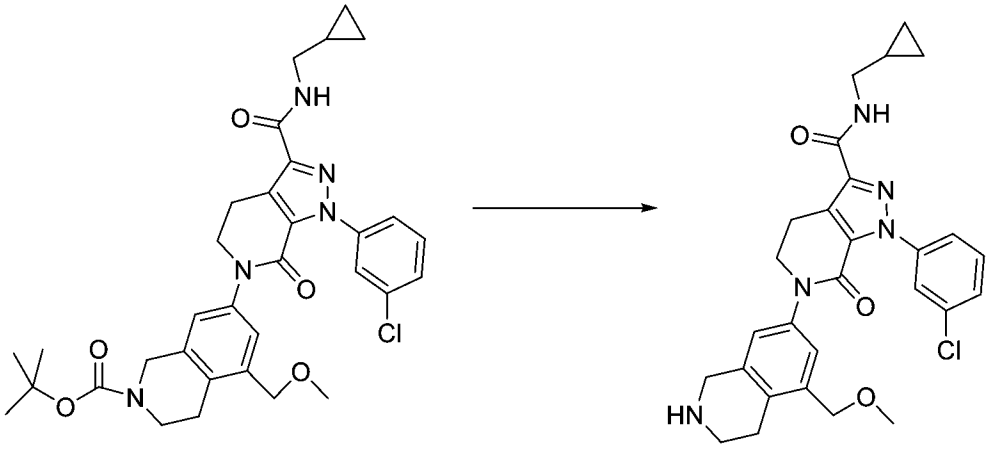


【1388】 向6-[2-第三丁氧羰基-5-(甲氧基甲基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(27 mg，0.048 mmol)於無水MeCN (1.5 mL)中之溶液中添加胺基甲基環丙烷(0.021 mL，0.24 mmol)、1-甲基咪唑(0.034 mL，0.43 mmol)及TCFH (27 mg，0.095 mmol)且將混合物在rt下攪拌20 h。用EtOAc (50 mL)稀釋該溶液，用飽和$NaHCO_3$ (aq) (15 mL)及鹽水(15 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾，蒸發且藉由急驟層析(矽石，2-80% EtOAc/異己烷)純化，提供產物(23 mg，77%產率)。

【1389】 $[M\text{-}tBu+H]^+$ = 564.2/566.2

【1390】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.21 - 0.27 (2H, m), 0.39 - 0.45 (2H, m), 1.00 - 1.08 (1H, m), 1.42 (9H, s), 2.70 (2H, t, J = 6.2 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.32 (3H, s), 3.53 - 3.59 (2H, m), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.39 (2H, s), 4.50 (2H, s br), 7.12 (1H, s), 7.19 (1H, s), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dd, J = 8.1, 1.8 Hz), 7.75 - 7.79 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz

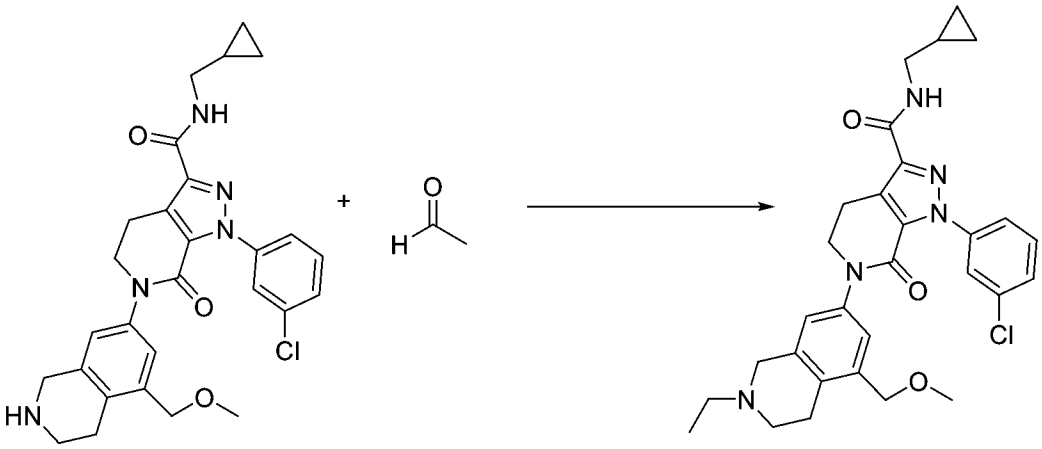
1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-[5-(甲氧基甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽



【1391】 向7-[1-(3-氯苯基)-3-(環丙基甲基胺甲醯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-5-(甲氧基甲基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(22 mg，0.036 mmol)於1,4-二噁烷(0.5 mL)中之溶液中添加HCl (4M於1,4-二噁烷中) (0.52 mL，2.1 mmol)且將混合物在rt下攪拌6 h。使溶劑蒸發以提供產物(21 mg，100%產率)。

【1392】 $[M\text{-}HCl+H]^+$ = 520.2/522.2

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-乙基-5-(甲氧基甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



【1393】 向1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-[5-(甲氧基甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺鹽酸鹽(21 mg，0.038 mmol)於DCM (2 mL)及MeOH (0.4 mL)之混合物中之溶液中添加TEA (0.021 mL，

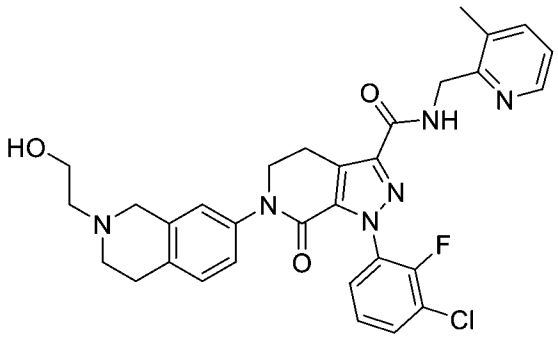
0.15 mmol)及乙醛(50%於EtOH中) (0.013 mL，0.11 mmol)且將混合物在rt下攪拌1 h。逐份添加STAB (16 mg，0.076 mmol)且將混合物攪拌20 h。用DCM (50 mL)稀釋該溶液且用飽和$NaHCO_3$ (aq) (15 mL)及鹽水(15 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾，蒸發，藉由製備型HPLC (C18，45-70% [10 mM NH_4CO_3/MeCN + 0.1% NH_3])純化且凍乾以提供產物(8.0 mg，38%產率)。

【1394】 $[M+H]^+$ = 548.3/550.3

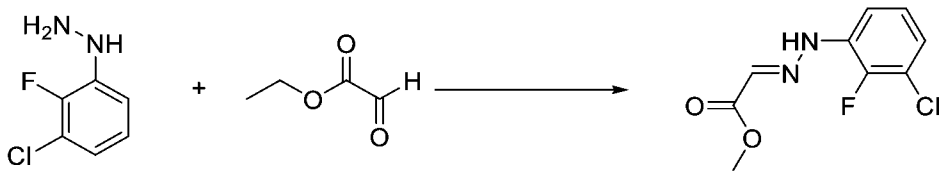
【1395】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.21 - 0.27 (2H, m), 0.39 - 0.45 (2H, m), 1.00 - 1.05 (1H, m), 1.08 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.46 (2H, q, J = 7.2 Hz), 2.62 - 2.67 (2H, m), 2.71 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.31 (3H, s), 3.51 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.36 (2H, s), 7.00 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.13 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.77 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.49 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號2002

1-(3-氯-2-氟苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



2-[(3-氯-2-氟苯基)亞肼基]乙酸乙酯



【1396】 將2-氟-3-氯苯肼鹽酸鹽 (2000 mg，10.15 mmol)懸浮於無水THF (50 mL)中且添加TEA (1698 μL，12.18 mmol)。在0℃下逐滴添加2-側氧基乙酸乙酯(甲苯中之50%溶液) (2280 mg，11.17 mmol)。將混合物在rt下攪拌18 h。濾出固體且用THF (50 mL)洗滌。使合併之濾液蒸發且藉由急驟層析(矽石，2% MeOH/$CHCl_3$)純化，得到產物 (2380 mg，96%產率)。

【1397】 $[M+H]^+$ = 245.0

【1398】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.36 (3H, t, J = 7.1 Hz), 4.33 (2H, q, J = 7.1 Hz), 6.97 (1H, ddd, J = 8.2, 6.7, 1.7 Hz), 7.04 (1H, ddd, J = 8.2, 1.5, 0.6 Hz), 7.20 (1H, d, J = 1.4 Hz), 7.50 - 7.59 (1H, m), 8.38 (1H, s)

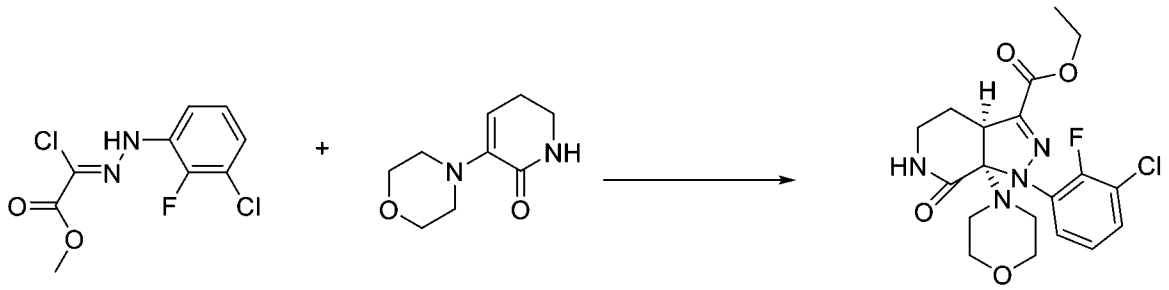
2-氯-2-[(3-氯-2-氟苯基)亞肼基]乙酸乙酯



【1399】 在0℃下，向2-[(3-氯-2-氟苯基)亞肼基]乙酸乙酯 (2300 mg，9.4 mmol)於無水THF (20 mL)中之溶液中添加NCS (1506 mg，11.28 mmol)且將反應在rt下攪拌18 h。移除溶劑且藉由急驟層析(矽石，2% MeOH/$CHCl_3$)純化殘餘物，得到產物 (1620 mg，62%產率)。

【1400】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.41 (3H, t, J = 7.1 Hz), 4.38 - 4.45 (2H, m), 6.95 - 7.13 (2H, m), 7.47 - 7.56 (1H, m), 8.46 (1H, s)

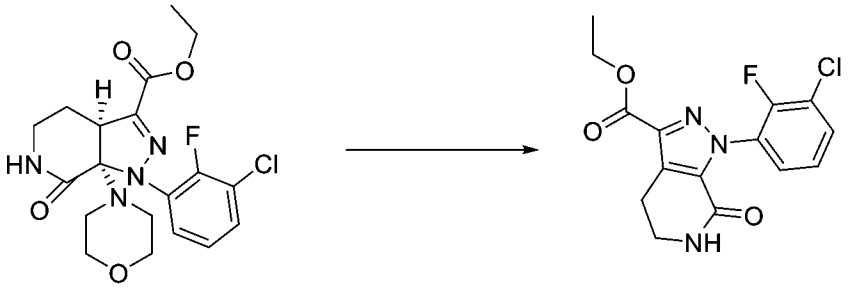
(3aS,7aR)-1-(3-氯-2-氟苯基)-7a-嗎啉-4-基-7-側氧基-3a,4,5,6-四氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



【1401】 將2-氯-2-[(3-氯-2-氟苯基)亞肼基]乙酸乙酯 (1600 mg，5.73 mmol)溶解於EtOAc (50 mL)中且在0℃下添加3-(嗎啉-4-基)-1,2,5,6-四氫吡啶-2-酮 (2300 mg，6.31 mmol)。歷經30 min將混合物加溫至rt且接著在回流下加熱持續5 h。用EtOAc (50 mL)稀釋混合物，用水(30 mL)及鹽水(30 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，蒸發且藉由急驟層析(矽石，2% MeOH/$CHCl_3$)純化，得到外消旋產物 (2430 mg，100%產率)。

【1402】 $[M+H]^+$ = 425.1

1-(3-氯-2-氟苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸酯

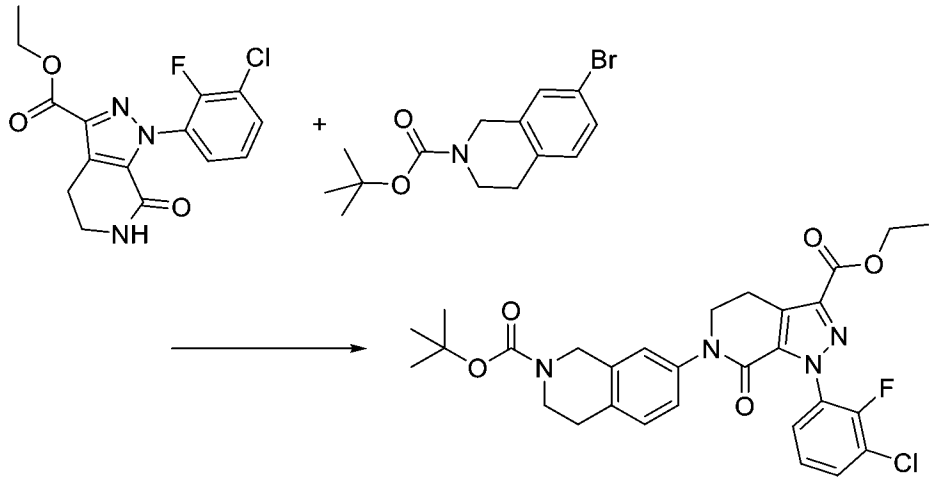


【1403】 將(3aS,7aR)-1-(3-氯-2-氟苯基)-7a-嗎啉-4-基-7-側氧基-3a,4,5,6-四氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯 (760 mg，1.8 mmol)溶解於TFA (10 mL)及DCM (10 mL)中。在rt下3 h後，移除溶劑且藉由急驟層析(矽石，4% MeOH/$CHCl_3$)純化殘餘物，得到產物 (480 mg，79%產率)。

【1404】 $[M+H]^+$ = 338.0

【1405】 ^{1}H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.42 (3H, t, J = 7.1 Hz), 3.22 (2H, t, J = 7.0 Hz), 3.70 (2H, td, J = 7.0, 2.9 Hz), 4.39 - 4.50 (2H, m), 6.94 (1H, dt, J = 5.7, 4.1 Hz), 7.20 (1H, td, J = 8.2, 1.6 Hz), 7.45 (1H, ddd, J = 8.0, 6.4, 1.6 Hz), 7.50 - 7.54 (1H, m)

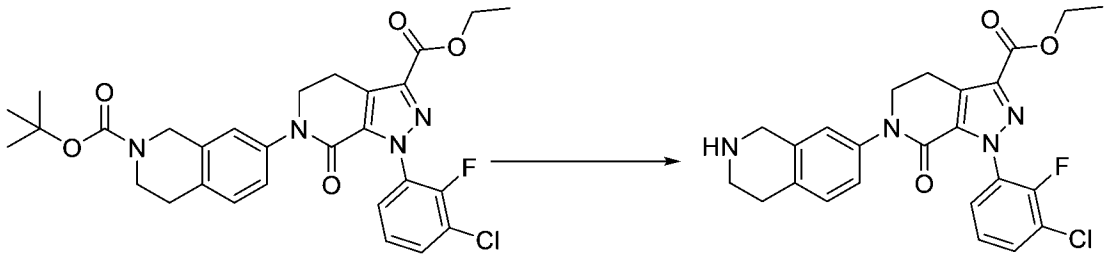
7-[1-(3-氯-2-氟苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



【1406】 將1-(3-氯-2-氟苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯 (400 mg，1.18 mmol)溶解於DMSO (20 mL)中且添加1,10-菲咯啉 (43 mg，0.24 mmol)、Cu(I)I (248 mg，1.3 mmol)、7-溴-3,4-二氫異喹啉-2(1H)-甲酸第三丁酯 (407 mg，1.3 mmol)及K_2CO_3 (327 mg，2.37 mmol)。將混合物在130℃下攪拌18 h，之後用EtOAc (70 mL)稀釋該混合物，用水(3 x 30 mL)及鹽水(30 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，蒸發且藉由急驟層析(矽石，1% MeOH/$CHCl_3$)純化，得到產物(160 mg，24%產率)。

【1407】 $[M\text{-}tBu+H]^+$ = 513.2

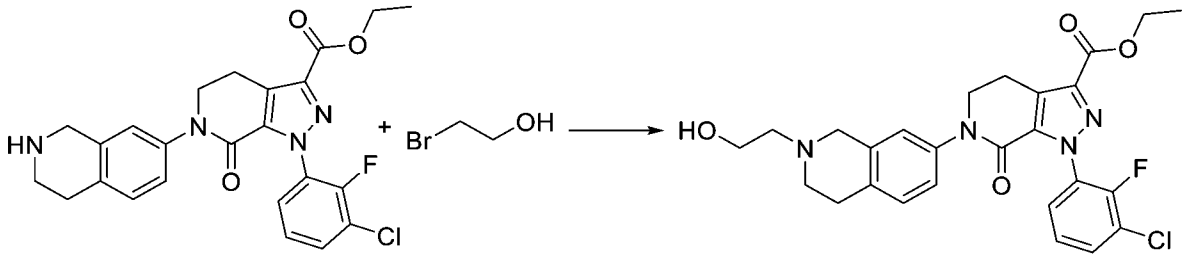
1-(3-氯-2-氟苯基)-7-側氧基-6-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯鹽酸鹽



【1408】 將7-[1-(3-氯-2-氟苯基)-3-乙氧羰基-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯 (160 mg，0.28 mmol)溶解於含4M HCl之1,4-二噁烷 (13 mL)中。在rt下1 h後，添加Et_2O (50 mL)且濾出固體，得到產物 (132 mg，93%產率)。

【1409】 $[M+H]^+$ = 469.2

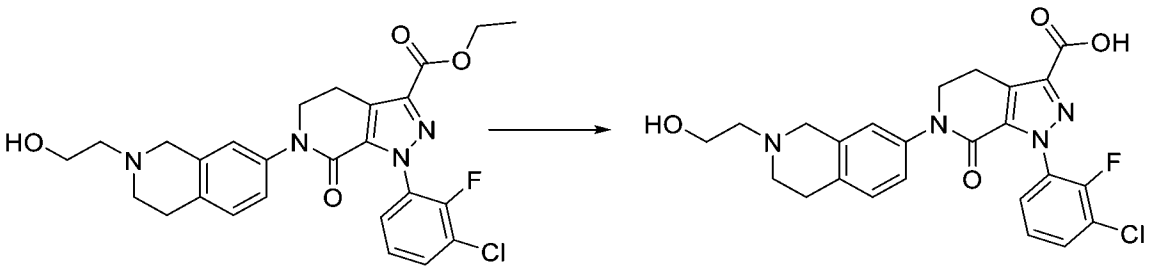
1-(3-氯-2-氟苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



【1410】 將1-(3-氯-2-氟苯基)-7-側氧基-6-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯鹽酸鹽 (142 mg，0.28 mmol)溶解於DMF (15 mL)中。添加2-溴乙醇 (42 mg，0.34 mmol)及TEA (117 μL，0.84 mmol)。將反應在rt下攪拌18 h。用EtOAc (100 mL)稀釋混合物，用水(50 mL)及鹽水(50 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾，蒸發且藉由急驟層析(矽石，6% MeOH/$CHCl_3$)純化，得到產物 (118 mg，82%產率)。

【1411】 $[M+H]^+$ = 513.2

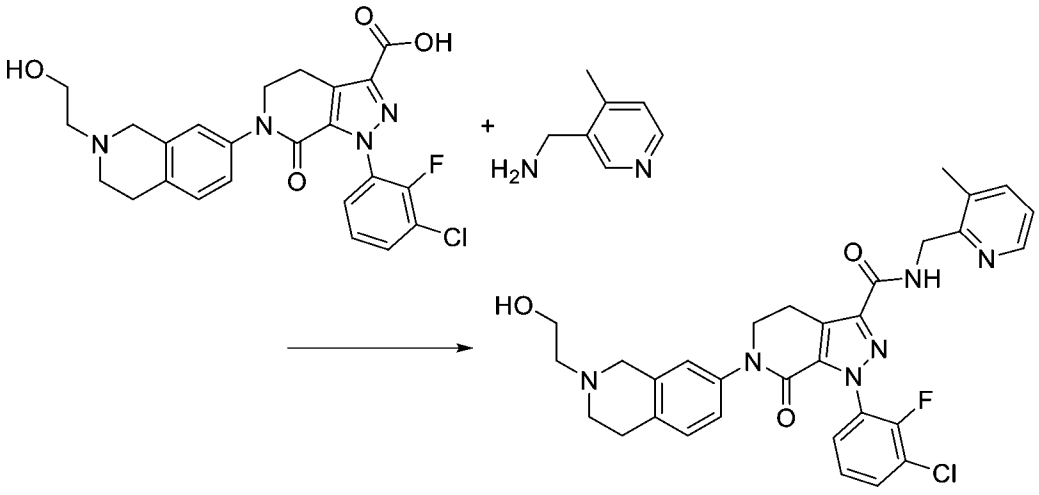
1-(3-氯-2-氟苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸



【1412】 將1-(3-氯-2-氟苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯 (118 mg，0.23 mmol)溶解於THF (100 mL)及水 (10 mL)中。添加$LiOH.H_2O$ (30 mg，0.69 mmol)且將混合物在rt下攪拌3天。移除THF，用2M HCl (aq)將殘餘物之pH調節至pH7且用$CHCl_3$/IPA (4:1，3 x 50 mL)萃取。將合併之有機萃取物乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物 (81 mg，73%產率)。

【1413】 $[M+H]^+ = 485.1$

1-(3-氯-2-氟苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



【1414】 將1-(3-氯-2-氟苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸 (50 mg，0.10 mmol)及HBTU (29 mg，0.12 mmol)溶解於DCM (30 mL)中。添加TEA (43 μL，0.31 mmol)且20 min後，添加(4-

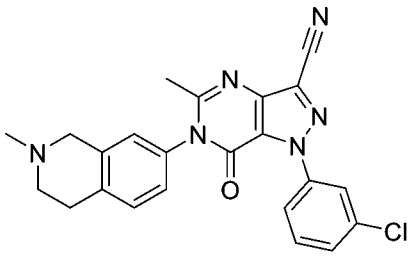
甲基吡啶-3-基)甲胺 二鹽酸鹽(14 mg，0.11 mmol)。將混合物在rt下攪拌18 h，此後用$CHCl_3$ (100 mL)稀釋混合物，用飽和$NaHCO_3$ (aq) (30 mL)、水(30 mL)及鹽水(30 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，蒸發，藉由急驟層析(矽石，10% MeOH/$CHCl_3$)純化且凍乾，得到產物 (28 mg，46%產率)。

【1415】 $[M+H]^+$ = 589.3

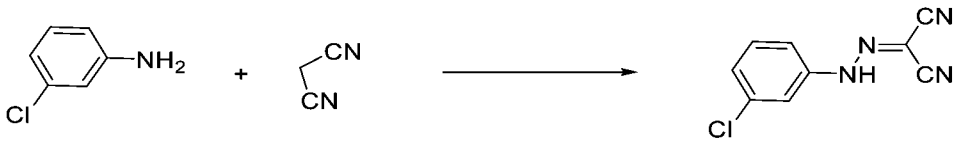
【1416】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.34 (3H, s), 2.51 - 2.55 (2H, m), 2.65 - 2.70 (2H, m), 2.76 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.55 (4H, d, J = 5.4 Hz), 4.03 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.45 (3H, d, J = 6.2 Hz), 7.00 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.03 - 7.11 (2H, m), 7.16 - 7.19 (1H, m), 7.37 (1H, td, J = 8.2, 1.4 Hz), 7.65 (1H, ddd, J = 8.3, 6.7, 1.6 Hz), 7.76 (1H, ddd, J = 8.4, 6.8, 1.6 Hz), 8.29 - 8.31 (1H, m), 8.41 (1H, s), 9.03 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號3002

1-(3-氯苯基)-5-甲基-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲腈



2-[(3-氯苯基)亞肼基]丙二腈



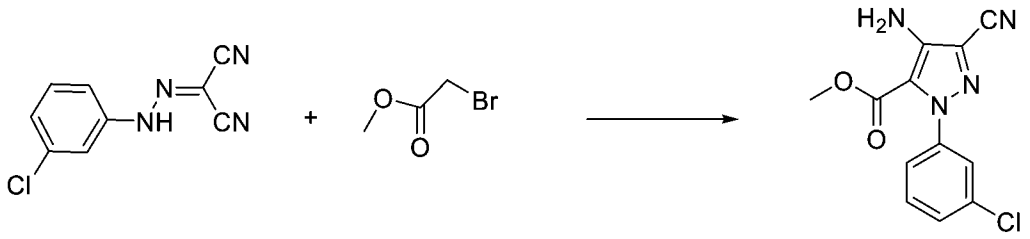
【1417】 在0℃下將HCl (12M，7.4 mL，86.2 mmol)添加至3-氯苯胺(0.83 mL，7.8 mmol)於水(40 mL)中之懸浮液中。添加1M $NaNO_2$ (aq) (7.8 mL，7.8 mmol)且將

混合物在0℃下攪拌30 min。在0℃下，歷經30 min時期將混合物緩慢添加至丙二腈(777 mg，11.8 mmol)及KOAc (23.1 g，235 mmol)之攪拌溶液中。將所得混合物在0℃下再攪拌60 min。濾出固體且用水(5 × 10 mL)洗滌。將此固體溶解於EtOAc (50 mL)中且用鹽水洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(1600 mg，100%產率)。

【1418】 $[M+H]^+$ = 203.1, 205.1

【1419】 ^1H ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 7.14 - 7.23 (1H, m), 7.20 - 7.28 (1H, m), 7.29 - 7.43 (2H, m), 9.61 (1H, s)

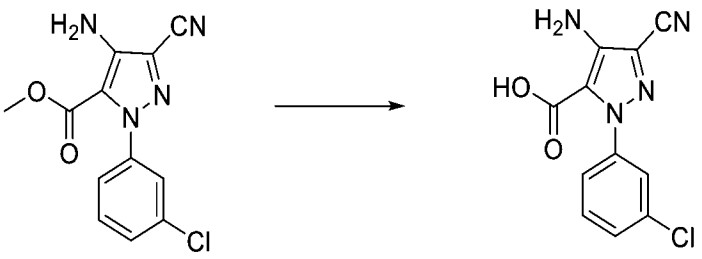
4-胺基-2-(3-氯苯基)-5-氰基-吡唑-3-甲酸甲酯



【1420】 在rt下將2-溴乙酸甲酯(2.0 mL，21.3 mmol)添加至2-[(3-氯苯基)亞肼基]丙二腈(870 mg，4.25 mmol)及K_2CO_3, 325目(1590 mg，11.5 mmol)於1,4-二噁烷(20 mL)中之攪拌混合物中。將混合物加熱至100℃且攪拌20 h。移除溶劑，用水(50 mL)處理殘餘物且用EtOAc萃取。合併有機部分，用飽和鹽水(50 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮，得到產物(1525 mg)。藉由急驟層析(矽石，5 - 100% EtOAc/異己烷)純化一部分產物(195 mg)。

【1421】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 3.71 (3H, s), 6.12 (2H, s), 7.44 - 7.61 (3H, m), 7.63 - 7.72 (1H, m)

4-胺基-2-(3-氯苯基)-5-氰基-吡唑-3-甲酸

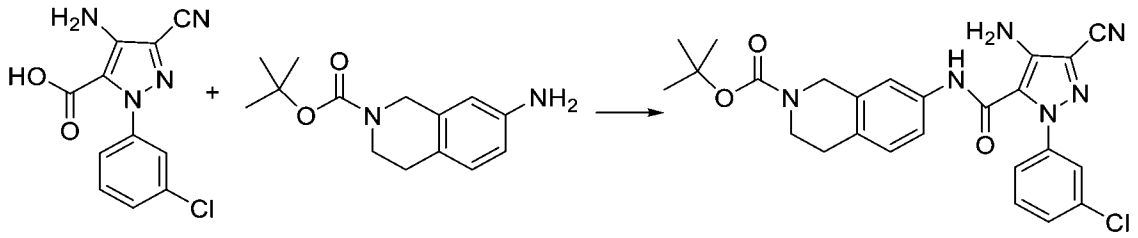


【1422】 在0℃下將LiOH.H_2O (337 mg，8.02 mmol)添加至4-胺基-2-(3-氯苯基)-5-氰基-吡唑-3-甲酸甲酯(740 mg，2.67 mmol)於THF (2 mL)中之攪拌溶液中。將混合物在rt下攪拌3 h。小心地用1M HCl (aq) (8 mL)淬滅混合物，直至達到pH 3。濃縮混合物且與甲苯(10 mL)共沸四次，得到產物(1060 mg)。

【1423】 $[M-H]^-$ = 261.0/263.0

【1424】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 7.40 - 7.54 (3H, m), 7.58 (1H, t, J = 2.0 Hz)

7-[[4-胺基-2-(3-氯苯基)-5-氰基-吡唑-3-羰基]胺基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

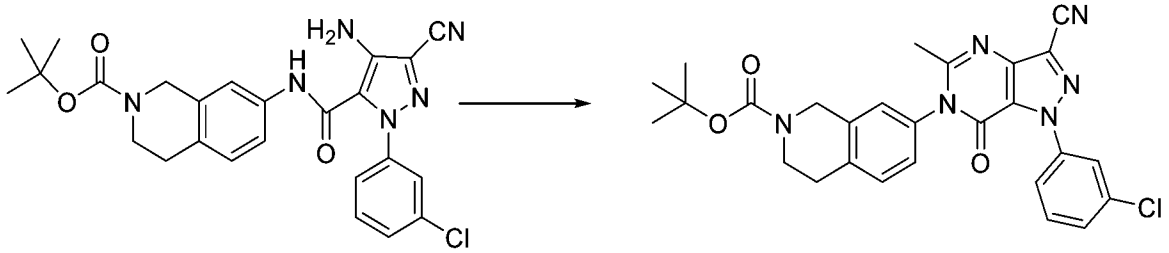


【1425】 在rt下將HATU (1950 mg，5.14 mmol)添加至4-胺基-2-(3-氯苯基)-5-氰基-吡唑-3-甲酸(750 mg，2.86 mmol)、7-胺基-3,4-二氫異喹啉-2(1H)-甲酸第三丁酯(1060 mg，4.28 mmol)及DIPEA (2.5 mL)於DMF (15 mL)中之攪拌混合物中。將混合物攪拌3 h。添加鹽水(75 mL)且用EtOAc (2 × 50 mL)萃取混合物。合併有機部分，用飽和$NaHCO_3$ (aq)及飽和鹽水溶液洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。急驟層析(矽石，0 - 100% EtOAc/異己烷)得到產物(615 mg，44%產率)。

【1426】 ^{1}H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.42 (9H, s), 2.72 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.52 (2H, t, J = 5.9 Hz), 4.43 (2H, s), 5.54 (2H, s), 7.10 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.23 (1H, s), 7.35 (1H, s), 7.36 - 7.46 (1H, m), 7.46 - 7.55 (2H, m), 7.57 (1H, s), 10.17 (1H, s)

【1427】 $[M-H]^-$ = 491.3/493.3

7-[1-(3-氯苯基)-3-氰基-5-甲基-7-側氧基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

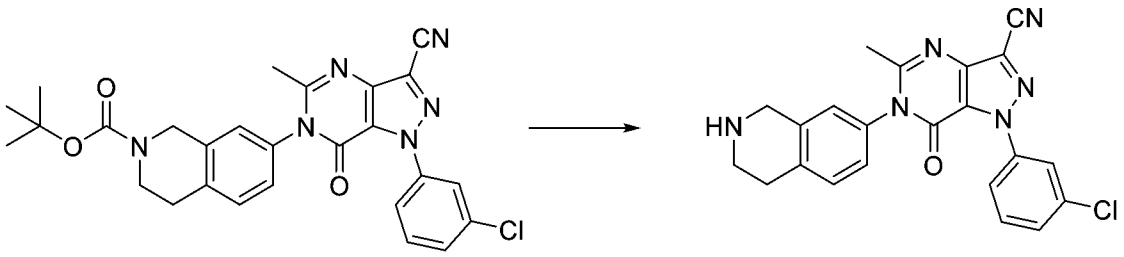


【1428】 在rt下將原乙酸三乙酯(0.19 mL，1.01 mmol)添加至7-[[4-胺基-2-(3-氯苯基)-5-氰基-吡唑-3-羰基]胺基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(50 mg，0.101 mmol)於AcOH (0.5 mL)中之攪拌溶液中。將混合物加熱至100℃，攪拌2 h且使其冷卻。添加飽和$NaHCO_3$ (aq) (10 mL)且用DCM (3 × 5 mL)萃取混合物。合併有機部分，用飽和鹽水溶液洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮，得到產物(52 mg，99%產率)。

【1429】 $[M+H]^+$ = 517.3/519.3

【1430】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.43 (9H, s), 2.22 (3H, s), 2.86 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.55 - 3.60 (2H, m), 4.41 - 4.62 (2H, m), 7.17 - 7.26 (2H, m), 7.37 (1H, d, J = 7.9 Hz), 7.54 - 7.62 (1H, m), 7.62 (1H, dt, J = 8.0, 1.7 Hz), 7.72 (1H, dt, J = 7.5, 1.8 Hz), 7.87 (1H, t, J = 2.0 Hz)

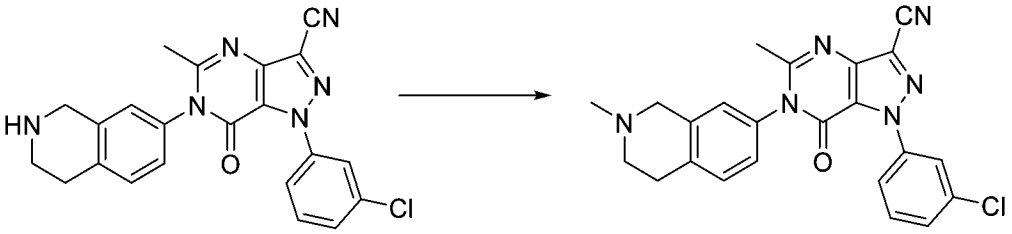
1-(3-氯苯基)-5-甲基-7-側氧基-6-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲腈鹽酸鹽



【1431】 在rt下將HCl溶液(4M於1,4-二噁烷中，0.50 mL)添加至7-[1-(3-氯苯基)-3-氰基-5-甲基-7-側氧基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(52 mg，0.10 mmol)於1,4-二噁烷(0.5 mL)中之攪拌溶液中且攪拌2 h。移除反應溶劑，得到產物(61 mg)。

【1432】 $[M+H]^+$ = 417.3/419.3

1-(3-氯苯基)-5-甲基-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲腈



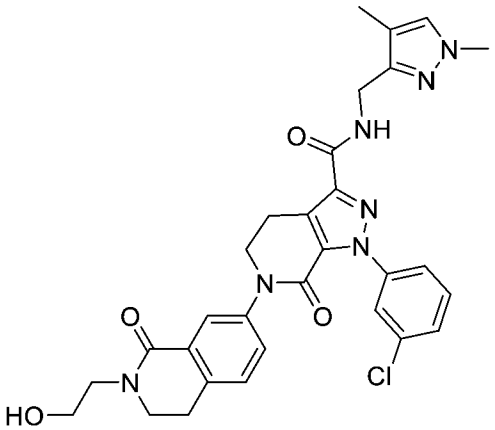
【1433】 在rt下將H_2O中之37 wt.%甲醛(0.037 mL，0.50 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-5-甲基-7-側氧基-6-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲腈鹽酸鹽(61 mg，0.13 mmol)及TEA (0.069 mL，0.50 mmol)於DCM (1 mL)及MeOH (0.2 mL)之混合物中之攪拌溶液中且攪拌15 min。添加STAB (53 mg，0.25 mmol)且將混合物在rt下攪拌2 h。添加飽和K_2CO_3 (aq) (5 mL)且用DCM (3 × 5 mL)萃取混合物。合併有機部分，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。急驟層析(矽石，0 - 15% MeOH/DCM)及凍乾得到產物(9.0 mg，17%產率)。

【1434】 $[M+H]^+$ = 431.1/433.1

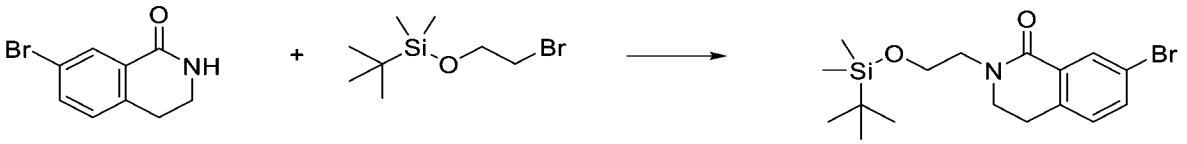
【1435】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.21 (3H, s), 2.35 (3H, s), 2.55 - 2.72 (2H, m), 2.89 (2H, s), 3.34 - 3.61 (2H, m), 7.09 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.15 (1H, dd, J = 8.0, 2.2 Hz), 7.30 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.54 - 7.66 (2H, m), 7.69 - 7.76 (1H, m), 7.87 (1H, t, J = 1.9 Hz)

實例編號1217

1-(3-氯苯基)-N-[(1,4-二甲基吡唑-3-基)甲基]-6-[2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



7-溴-2-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-3,4-二氫異喹啉-1-酮

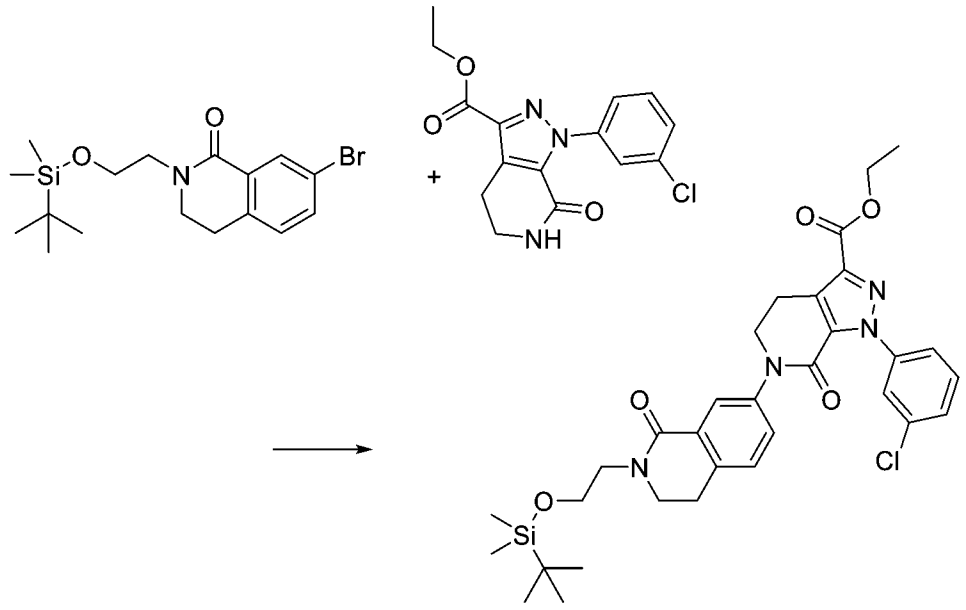


【1436】 向7-溴-3,4-二氫-2h-異喹啉-1-酮(1000 mg，4.42 mmol)於DMF (40 mL)中之溶液中添加NaH (60%於礦物油中，230 mg，5.75 mmol)且將混合物在rt下攪拌1 h。逐滴添加2-溴乙氧基-第三丁基二甲基矽烷(1.2 mL，5.75 mmol)且將反應攪拌20 h。接著用飽和NH_4Cl (aq) (25 mL)淬滅該溶液且用EtOAc (150 mL)稀釋。用飽和NH_4Cl (aq) (25 mL)及鹽水(3 x 50 mL)洗滌EtOAc層，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。急驟管柱層析(矽石，5-30% EtOAc/異己烷)得到產物(1280 mg，75%產率)。

【1437】 $[M+H]^+$ = 384.1/386.1

【1438】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.02 (6H, s), 0.84 (9H, s), 2.92 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.56 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.62 (2H, t, J = 6.3 Hz), 3.76 (2H, t, J = 5.7 Hz), 7.28 (1H, dd, J = 8.1, 0.5 Hz), 7.66 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.92 (1H, d, J = 2.1 Hz)。

6-[2-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基]-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯

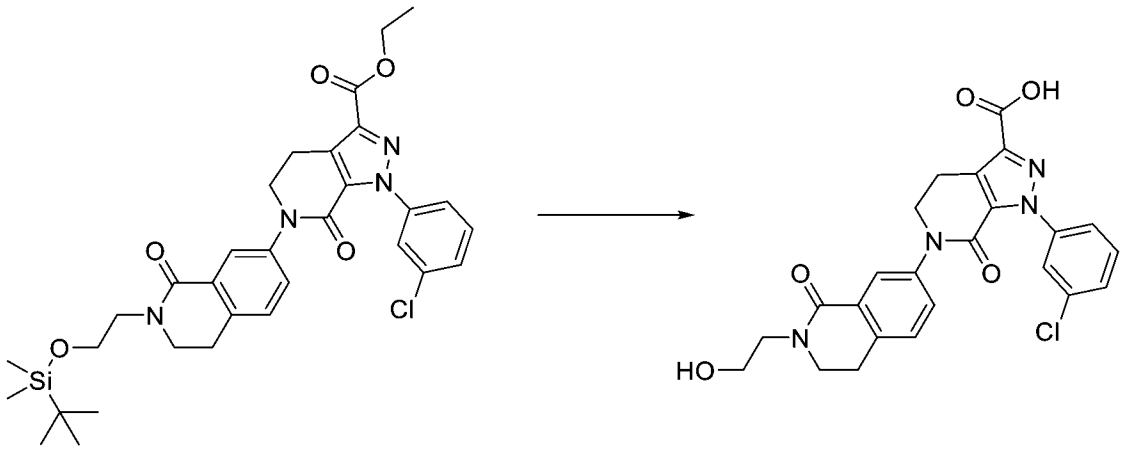


【1439】 用N_2使1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(1273 mg，3.98 mmol)及7-溴-2-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-3,4-二氫異喹啉-1-酮(1275 mg，3.32 mmol)於無水1,4-二噁烷(35 mL)中之溶液鼓泡10 min。依序添加磷酸三鉀(2112 mg，9.95 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環已烷二胺(377 mg，2.65 mmol)及Cu(I)I (253 mg，1.33 mmol)。關閉系統且在110℃下攪拌20 h。經由Celite®過濾該溶液，用EtOAc (120 mL)沖洗，且用飽和$NaHCO_3$ (aq) (2x25 mL)及鹽水(25 mL)洗滌濾液，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。急驟層析(矽石，1-50% EtOAc/異己烷)得到產物(690 mg，33%產率)。

【1440】 $[M+H]^+$ = 623.3/625.3

【1441】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.03 (6H, s), 0.85 (9H, s), 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.95 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.57 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.62 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.76 (2H, t, J =5.8 Hz), 4.09 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.35 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.49 - 7.58 (2H, m), 7.60 (1H, dt, J = 7.3, 1.9 Hz), 7.76 (1H, td, J = 2.0, 0.6 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.4 Hz)。

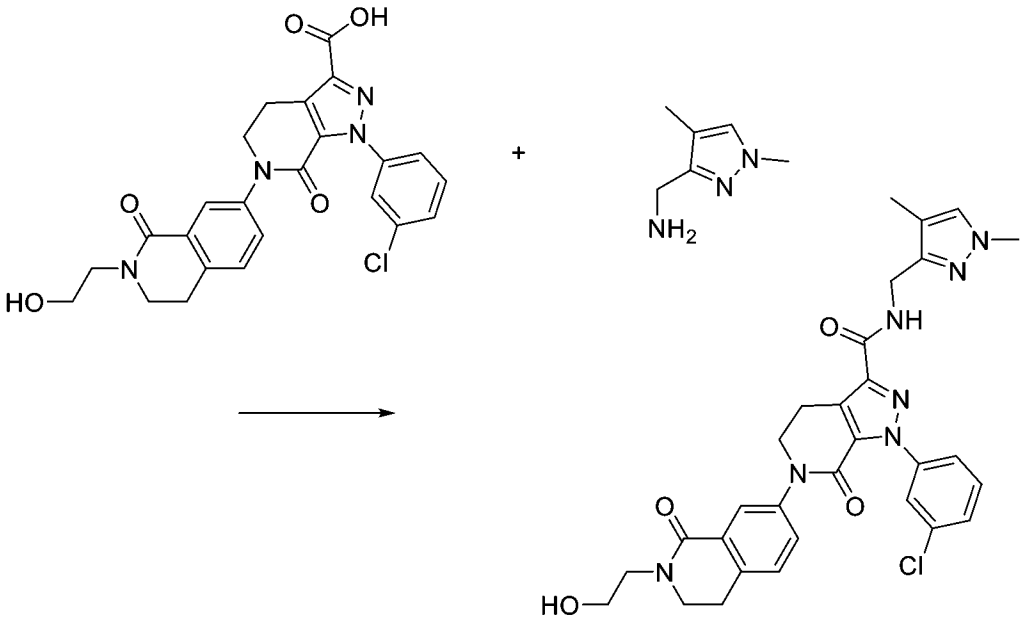
1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸



【1442】 向6-[2-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基]-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(685 mg，1.10 mmol)於THF (8 mL)及水(4 mL)之混合物中之溶液中添加LiOH.H_2O (115 mg，2.75 mmol)，且將混合物在rt下攪拌20 h。用4M HCl於二噁烷中之溶液(2 mL)酸化混合物，攪拌1 h且蒸發以提供產物(811 mg，100%產率)。

【1443】 $[M+H]^+$= 481.2/483。

1-(3-氯苯基)-N-[(1,4-二甲基吡唑-3-基)甲基]-6-[2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



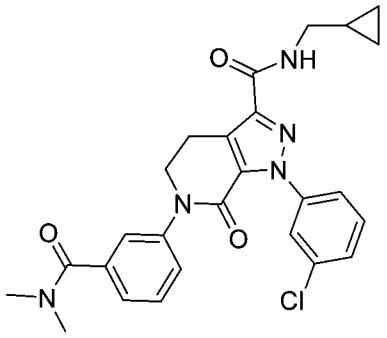
【1444】 向1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(60 mg，0.125 mmol)於DMF (2 mL)中之溶液中添加1-(1,4-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲胺二鹽酸鹽(42 mg，0.212 mmol)、DIPEA (0.13 mL，0.749 mmol)及HATU (71 mg，0.187 mmol)且將混合物在rt下攪拌18 h。用EtOAc (30 mL)稀釋該溶液且用飽和$NaHCO_3$(aq) (15 mL)、鹽水(15 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且濃縮。藉由急驟層析(矽石，0-10% MeOH/DCM)純化殘餘物且裝載至DCM中之SCX上且用DCM (10 mL)洗滌。用3M NH_3於MeOH中之溶液溶離產物且凍乾，生成產物(42 mg，55%產率)。

【1445】 $[M+H]^+$ = 588.2/590.2

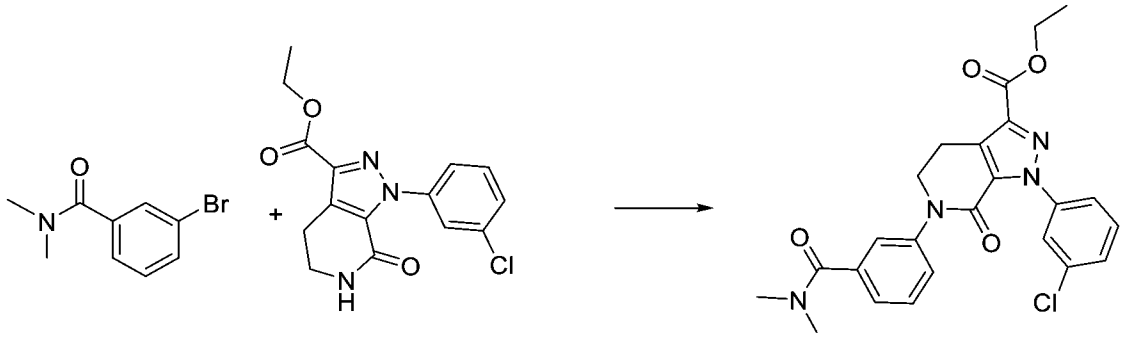
【1446】 ^1H NMR (400 MHz, DMSO-d6) δ 1.98 (3H, s), 2.88 – 3.02 (2H, m), 3.17 – 3.26 (2H, m), 3.51 – 3.64 (6H, m), 3.72 (3H, m), 4.00 – 4.15 (2H, m), 4.30 – 4.43 (2H, m), 4.73 – 4.81 (1H, m), 7.30 – 7.34 (1H, m), 7.38 (1H, s), 7.41 – 7.56 (3H, m), 7.61 – 7.69 (1H, m), 7.78 – 7.85 (2H, m), 8.49 – 8.58 (1H, m)

實例編號1195

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-[3-(二甲基胺甲醯基)苯基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



1-(3-氯苯基)-6-[3-(二甲基胺甲醯基)苯基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



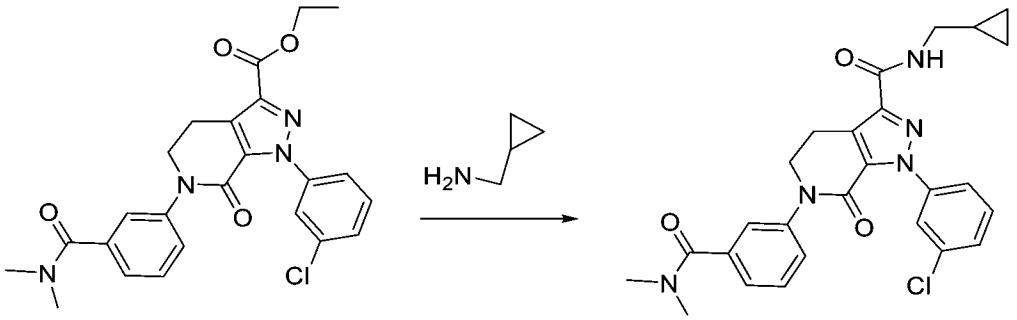
【1447】 向壓力瓶中饋入Cu(I)I (48 mg，0.25 mmol)、磷酸三鉀(269 mg，1.25 mmol)、1-(3-氯苯基)-4,5,6,7-四氫-7-側氧基-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(200 mg，0.63 mmol)及3-溴-N,N-二甲基苯甲醯胺(157 mg，0.69 mmol)。將燒瓶密封，抽真空且用N_2 (g)回填。添加N,N’ 二甲基乙二胺(35 μL，0.25 mmol)及甲苯(5 mL)。用N_2 (g)吹掃混合物持續10 min且在100℃下攪拌22 h。經由Celite®過濾混合物，用EtOAc (100 mL)、DCM (100 mL)及MeOH (10 mL)洗滌。濃縮濾液且經由急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/Pet. 醚)純化殘餘物，得到產物(100 mg，34%產率)。

【1448】 $[M+H]^+$=467.1

【1449】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.92 (3H, s), 2.97 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.12 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.36 (2H, q, J = 7.1 Hz),

7.25 - 7.30 (1H, m), 7.40 - 7.49 (3H, m), 7.50 - 7.55 (1H, m), 7.56 (1H, dt, J = 8.0, 1.7 Hz), 7.61 (1H, dt, J = 7.4, 1.8 Hz), 7.76 - 7.79 (1H, m)

1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-[3-(二甲基胺甲醯基)苯基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



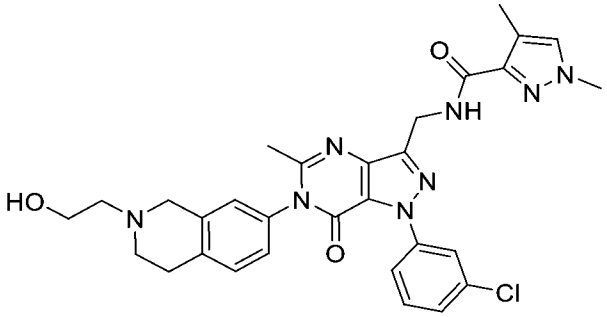
【1450】 將三甲基鋁(2M於甲苯中) (80 μL，0.16 mmol)添加至環丙基甲胺(14 μL，0.16 mmol)於1,4-二噁烷(1 mL)中之溶液中。將混合物在rt下攪拌30 min且緩慢地逐滴添加含1-(3-氯苯基)-6-[3-(二甲基胺甲醯基)苯基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(50 mg，0.11 mmol)之1,4-二噁烷(1 mL) (放熱)。在rt下攪拌5 min後，反應溫度增加至90℃。攪拌22 h後，將反應分配於飽和$NaHCO_3$ (aq) (30 mL)與DCM (30 mL)之間。分離有機層且再用DCM (20 mL)萃取水層。將合併之DCM萃取物乾燥($MgSO_4$)，過濾且濃縮。急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/Pet. 醚)得到產物(18 mg，34%產率)。

【1451】 $[M+H]^+$= 492.1

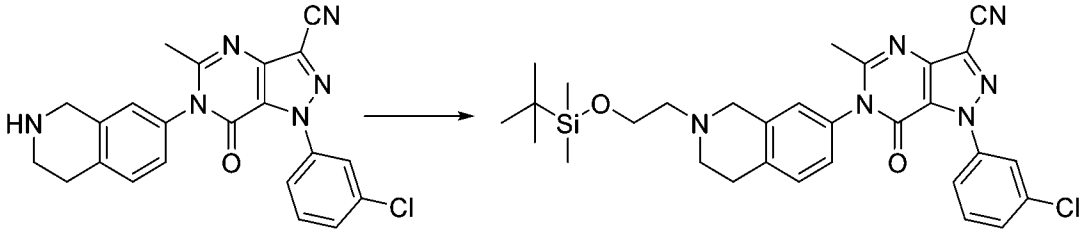
【1452】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.19 - 0.26 (2H, m), 0.34 - 0.48 (2H, m), 0.98 - 1.10 (1H, m), 2.92 (3H, s), 2.97 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.09 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.26 - 7.31 (1H, m), 7.40 - 7.50 (3H, m), 7.50 - 7.56 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.79 - 7.82 (1H, m), 8.56 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號3009

N-[[1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-5-甲基-7-側氧基吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-基]甲基]-1,4-二甲基吡唑-3-甲醯胺



6-[2-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-1-(3-氯苯基)-5-甲基-7-側氧基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲腈

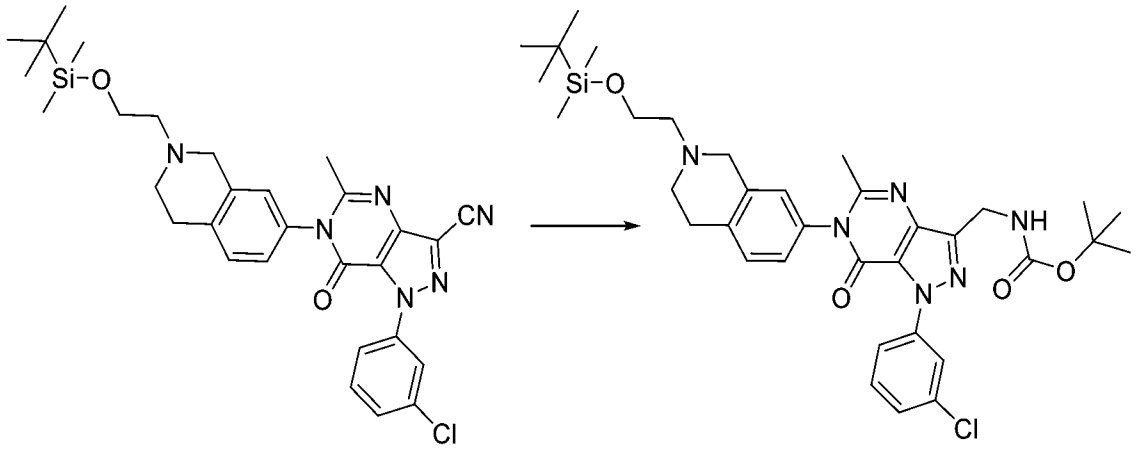


【1453】 將2-溴乙氧基-第三丁基二甲基矽烷(0.99 mL，4.63 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-5-甲基-7-側氧基-6-(1,2 ,3,4-四氫異喹啉-7-基)吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲腈二鹽酸鹽(1.13 g，2.32 mmol)及TEA (1.6 mL，11.6 mmol)於DMF (12 mL)中之溶液中。在rt下攪拌3天後，添加飽和K_2CO_3 (aq) (10 mL)且用EtOAc (2 × 100 mL)萃取混合物。用鹽水(3 × 150 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，0 - 100% EtOAc/異己烷)得到產物(726 mg，51%產率)。

【1454】 $[M+H]^+$ = 575.2/577.2

【1455】 ^{1}H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 0.07 (6H, s), 0.90 (9H, s), 2.30 (3H, s), 2.70 - 2.74 (4H, m), 2.99 - 3.04 (2H, m), 3.65 - 3.87 (4H, m), 6.86 (1H, s), 6.97 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.30 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.35 - 7.46 (2H, m), 7.61 - 7.70 (1H, m), 7.76 - 7.81 (1H, m)

N-[[6-[2-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-1-(3-氯苯基)-5-甲基-7-側氧基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-基]甲基]胺基甲酸第三丁酯



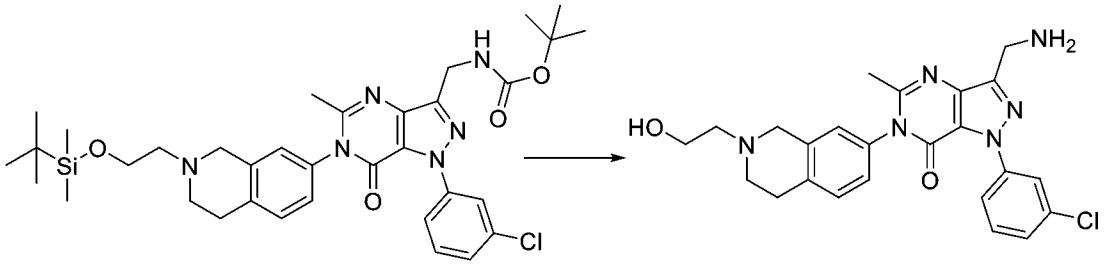
【1456】 歷經25 min時期將$NaBH_4$ (334 mg，8.84 mmol)添加至6-[2-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-1-(3-氯苯基)-5-甲基-7-側氧基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲腈(726 mg，1.26 mmol)、Boc_2O (413 mg，1.89 mmol)及$Ni(II)Cl_2.6H_2O$ (30 mg，0.126 mmol)於MeOH (6 mL)中之溶液中，同時在冰/水浴中冷卻。攪拌混合物，同時繼續冷卻4 h。添加THF (6 mL)，隨後歷經25 min時期添加$NaBH_4$ (334 mg，8.84 mmol)。攪拌混合物，同時在冰/水浴中冷卻2 h。用水(10 mL)淬滅反應，使有機溶劑蒸發，且用EtOAc (2 × 100 mL)萃取殘餘物。用鹽水(3 × 150 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，0 - 100% EtOAc/異己烷)得到產物(299 mg，31%產率)。

【1457】 $[M+H]^+$ = 679.6/681.5

【1458】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 0.07 (6H, s), 0.86 - 0.95 (9H, m), 1.49 (9H, s), 2.24 (3H, s), 2.70 - 2.74 (2H, m), 2.86 - 3.04 (4H,m), 3.65 - 3.87 (4H, m), 4.73

(2H, d, J = 5.6 Hz), 5.48 (1H, s), 6.86 (1H, s), 6.98 (1H, s), 7.24 - 7.37 (3H, m), 7.64 - 7.71 (1H, m),7.79 (1H, t, J = 2.0 Hz)。

3-(胺基甲基)-1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-5-甲基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-7-酮二鹽酸鹽

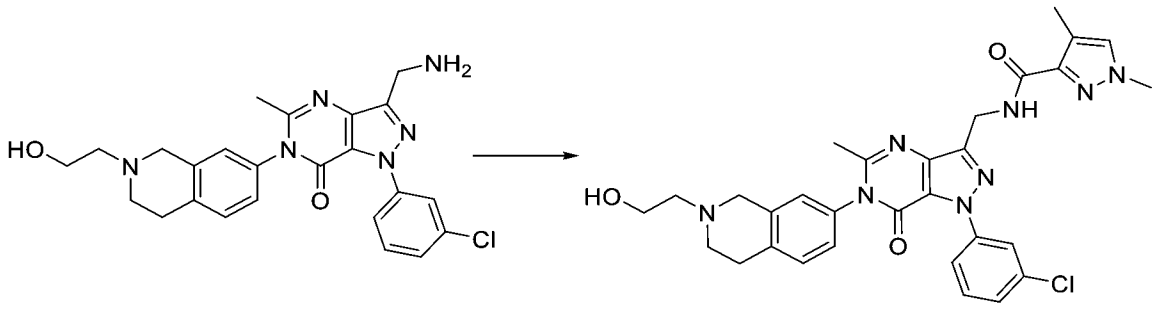


【1459】 將含4M HCl之1,4-二噁烷(2.0 mL，8.00 mmol)添加至N-[[6-[2-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-1-(3-氯苯基)-5-甲基-7-側氧基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-基]甲基]胺基甲酸第三丁酯 (299 mg，0.39 mmol)於1,4-二噁烷(2 mL)中之溶液中。在rt下3 h後，使混合物蒸發，得到產物(360 mg)。

【1460】 $[M+H]^+$ = 465.3/467.3

【1461】 ^{1}H NMR (DMSO-d6 , 400 MHz) δ 2.19 (3H, d, J = 2.8 Hz), 3.14 - 3.19 (2H, m), 3.27 - 3.36 (2H, m), 3.86 (2H, t, J = 5.1 Hz), 4.38 - 4.48 (4H, m), 4.61 (2H, t, J = 15.3 Hz), 7.28 - 7.38 (2H, m), 7.43 - 7.61 (3H, m), 7.70 - 7.78 (1H, m), 7.86 (1H, d, J =2.0 Hz), 8.61 - 8.65 (3H, m), 10.55 - 10.59 (1H, m)

N-[[1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-5-甲基-7-側氧基吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-基]甲基]-1,4-二甲基吡唑-3-甲醯胺



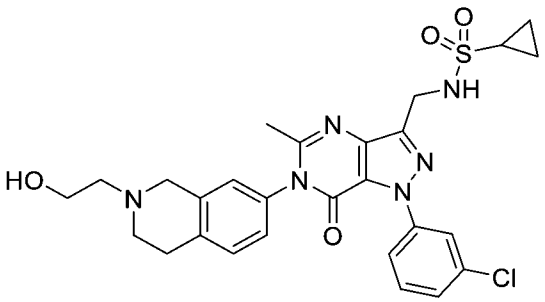
【1462】 將HATU (71 mg，0.19mmol)添加至3-(胺基甲基)-1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-5-甲基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-7-酮二鹽酸鹽(90 mg，0.12 mmol)、1,4-二甲基-1H-吡唑-3-甲酸(17 mg，0.12 mmol)及DIPEA (0.13 mL，0.75 mmol)於DMF (1 mL)中之溶液中。在rt下3 h後，添加飽和K_2CO_3 (aq) (10 mL)且用EtOAc (2 × 50 mL)萃取混合物。用鹽水(3 × 20 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。進行急驟層析(矽石，0 - 15% MeOH/DCM)且藉由製備型HPLC (AccQPrep，30 - 60%含有0.1% NH_3之MeCN/0.01 M碳酸氫銨水溶液)進一步純化，得到產物(16 mg，22%產率)。

【1463】 $[M+H]^+$ = 587.2/589.2

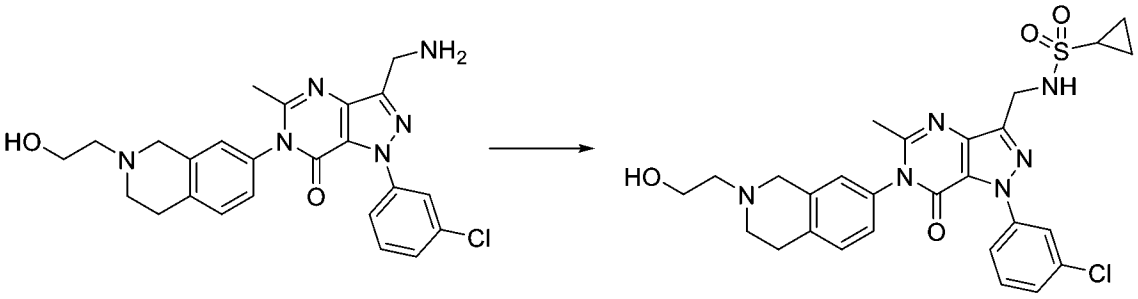
【1464】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.17 (3H, s), 2.18 - 2.21 (3H, m), 2.57 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.65 - 2.84 (2H, m), 2.84 - 2.90 (2H, m), 3.54 - 3.72 (4H, m), 3.82 (3H, s), 4.50 (1H, t, J = 5.4 Hz), 4.76 (2H, d, J = 5.8 Hz), 7.07 - 7.12 (1H, m), 7.12 - 7.18 (1H, m), 7.28 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.42 - 7.54 (2H, m), 7.54 - 7.59 (1H, m), 7.62 - 7.69 (1H, m), 7.74 - 7.80 (1H, m), 8.31 (1H, t, J = 5.7 Hz)

實例編號3007

N-[[1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-5-甲基-7-側氧基吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-基]甲基]環丙烷磺醯胺



N-[[1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-5-甲基-7-側氧基吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-基]甲基]環丙烷磺醯胺



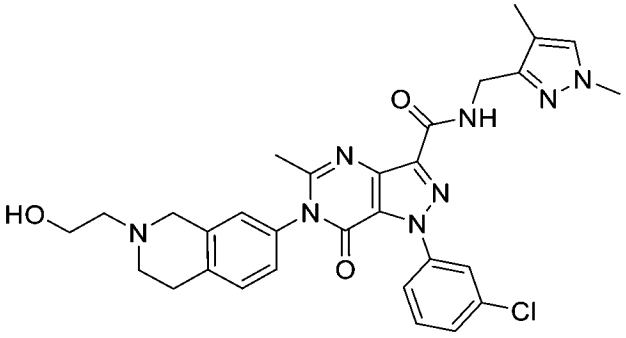
【1465】 將環丙烷磺醯氯(0.013 mL，0.12 mmol)添加至3-(胺基甲基)-1-(3-氯苯基)-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-5-甲基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-7-酮二鹽酸鹽(90 mg，0.12 mmol)及TEA (0.069 mL，0.50 mmol)於DCM (1.5 mL)中之溶液中。在rt下3 h後，添加飽和K_2CO_3 (aq) (10 mL)且用EtOAc (2 × 50 mL)萃取混合物。用鹽水(3 × 20 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。藉由急驟層析(矽石，0 - 15% MeOH/DCM)純化，接著進行SCX-2離子交換，裝載MeOH (10 mL)且用含2M NH_3之MeOH (10 mL)溶離，得到產物(16 mg，23%產率)。

【1466】 $[M+H]^+$ = 569.3/571.3

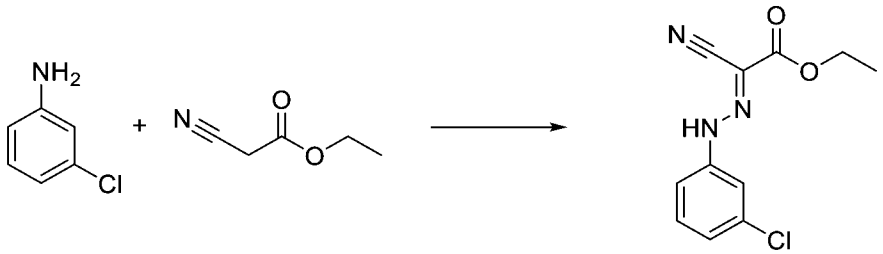
【1467】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.85 - 0.99 (4H, m), 2.17 (3H, s), 2.54 - 2.83 (5H, m), 2.86 - 2.90 (2H, m), 3.54 - 3.73 (4H, m), 4.49 - 4.55 (3H, m), 7.08 -7.12 (1H, m), 7.12 - 7.19 (1H, m), 7.28 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.62 - 7.76 (2H, m), 7.79 - 7.85 (1H, m)

實例編號3005

1-(3-氯苯基)-N-[(1,4-二甲基吡唑-3-基)甲基]-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-5-甲基-7-側氧基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺



2-[(3-氯苯基)亞肼基]-2-氰基-乙酸乙酯

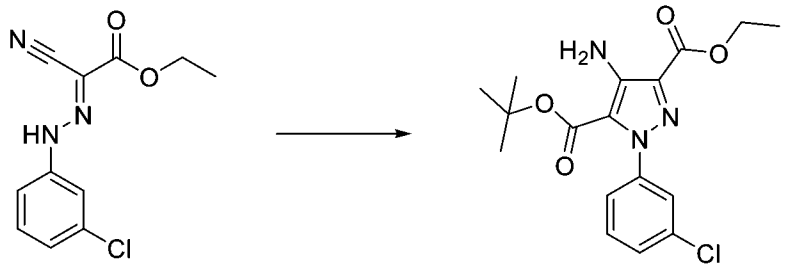


【1468】 將HCl (aq) (11.5M，15 mL，172 mmol)添加至3-氯苯胺(1.7 mL，15.7 mmol)於水(40 mL)中之懸浮液中，同時在冰/水浴中冷卻。添加1M $NaNO_2$ (aq) (16 mL，16 mmol)且攪拌混合物，同時繼續冷卻90 min。接著在0℃下歷經30分鐘時期將反應混合物緩慢添加至氰基乙酸乙酯(2.5 mL，23.5 mmol)及乙酸鈉三水合物(64.00 g，470 mmol)於水(50 mL)中之攪拌溶液中。接著將所得混合物在0℃下再攪拌60 min。過濾混合物且用水(5 × 10 mL)洗滌沈澱物。將沈澱物溶解於EtOAc (100 mL)中，用鹽水(100 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(3.92 g，99%產率)。

【1469】 $[M+H]^+$ = 250.1

【1470】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.41 (3H, t, J = 7.1 Hz), 4.41 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.11 - 7.22 (2H, m), 7.27 - 7.39 (1H, m), 7.393- 7.45 (1H, m), 9.28 (1H, s)

4-胺基-1-(3-氯苯基)吡唑-3,5-二甲酸O-5-第三丁基O-3-乙酯

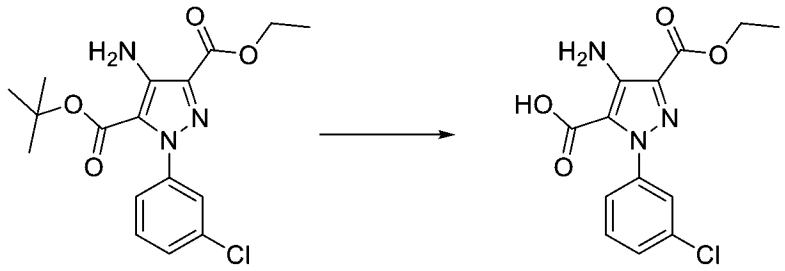


【1471】 將溴乙酸第三丁酯(5.7 mL，39 mmol)添加至2-[(3-氯苯基)亞肼基]-2-氰基-乙酸乙酯(3.92 g，15.6 mmol)及K_2CO_3 (325目，5.80 g，42.0 mmol)於1,4-二噁烷 (80 mL)中之攪拌懸浮液中。將混合物加熱至100℃持續20 h。使溶劑蒸發，添加水(250 mL)且萃取至EtOAc (3 × 100 mL)中。用鹽水(250 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(6.0g，94%產率)。

【1472】 $[M+H]^+$ = 366.1/368.1

【1473】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.35 (9H, s), 1.41 (3H, t, J = 7.1 Hz), 4.44 (2H, q, J = 7.1 Hz), 5.46 (2H, s), 7.26 - 7.43 (4H, m)

4-胺基-2-(3-氯苯基)-5-乙氧羰基-吡唑-3-甲酸鹽酸鹽

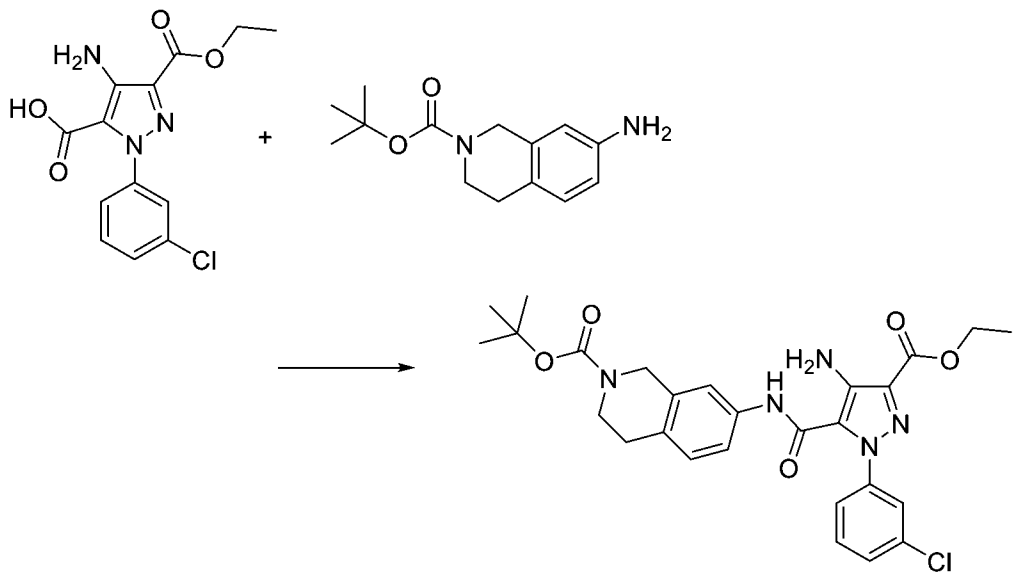


【1474】 將含4M HCl之1,4-二噁烷(25 mL，100 mmol)添加至4-胺基-1-(3-氯苯基)吡唑-3,5-二甲酸O-5-第三丁基O-3-乙酯(2.0 g，4.9 mmol)於1,4-二噁烷(10 mL)中之溶液中。將混合物在rt下攪拌48 h。使溶劑蒸發，得到產物(1.55 g，84%產率)。

【1475】 $[M+H]^+$ = 310.0/312.0

【1476】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.27 - 1.32 (3H, m), 4.25 - 4.39 (2H, m), 7.40 - 7.54 (2H, m), 7.50 - 7.65 (2H, m)

7-[[4-胺基-2-(3-氯苯基)-5-乙氧羰基-吡唑-3-羰基]胺基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

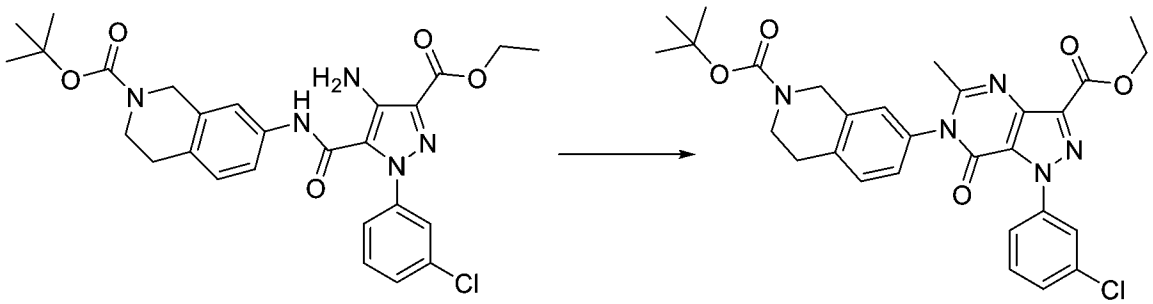


【1477】 將O-(7-氮雜苯并三唑-1-基)-N,N,N',N'-四甲基脲鎓六氟磷酸鹽(2.12 g，5.29 mmol)添加至4-胺基-2-(3-氯苯基)-5-乙氧羰基-吡唑-3-甲酸鹽酸鹽(1.55 g，4.07 mmol)、2-boc-7-胺基-1,2,3,4-四氫異喹啉(1.11 g，4.48 mmol)及DIPEA (2.8 mL，16.3 mmol)於DMF (25 mL)中之溶液中。將混合物在rt下攪拌20 h。添加飽和K_2CO_3 (aq) (150 mL)且用EtOAc (2 × 100 mL)萃取混合物。用鹽水(3 × 150 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，0 - 100% EtOAc/異己烷)得到產物(1.2 g，52%產率)。

【1478】 $[M+H]^+$ = 538.3/540.3

【1479】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ: 1.32 (3H, t, J = 7.0 Hz), 1.42 (9H, s), 2.71 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.54 (2H, s), 4.35 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.44 (2H, s), 5.33 (2H, s),7.09 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.21 - 7.25 (1H, m), 7.36 - 7.44 (2H, m), 7.46 - 7.56 (3H, m), 10.01 (1H, s)

7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-5-甲基-7-側氧基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

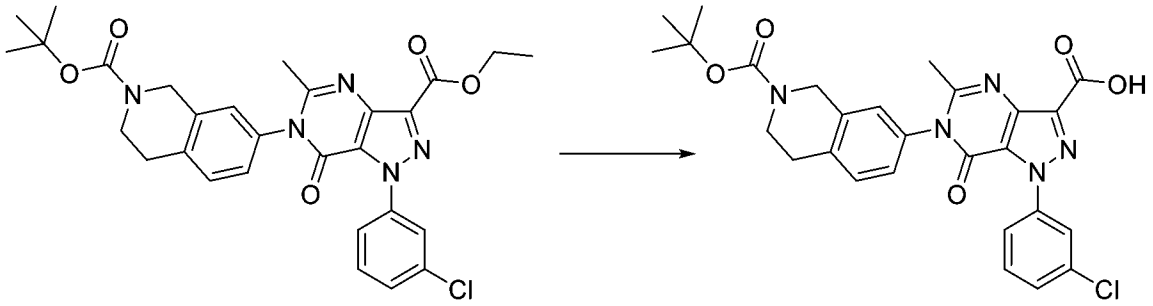


【1480】 將原乙酸三乙酯(2.0 mL，10.7 mmol)添加至7-[[4-胺基-2-(3-氯苯基)-5-乙氧羰基-吡唑-3-羰基]胺基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(1.24 g，2.14 mmol)於AcOH (10 mL)中之溶液中。將混合物加熱至100℃持續1 h，冷卻至rt且添加飽和K_2CO_3 (aq) (150 mL)。用DCM (3 × 25 mL)萃取混合物且用鹽水(3 × 150 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，0 -100% EtOAc/異己烷)得到產物(969 mg，78%產率)。

【1481】 $[M+H]^+$ = 564.2/566.2

【1482】 ^1H NMR ($CDCl_3$) 1.45 - 1.51 (12H, m), 2.36 (3H, s), 2.88 - 2.92 (2H, m), 3.65 - 3.78 (2H, m), 4.52 - 4.78 (4H, m), 6.96 - 7.05 (2H, m), 7.30 - 7.42 (3H, m), 7.60 - 7.70 (1H, m), 7.76 - 7.81 (1H, m)

6-(2-第三丁氧羰基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-5-甲基-7-側氧基-吡唑并[4,3-d]吡啶-3-甲酸

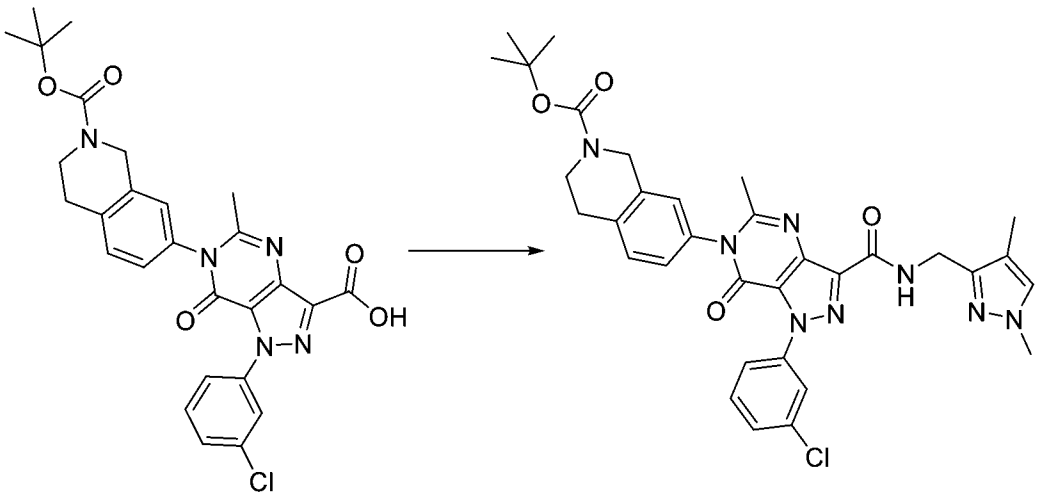


【1483】 將LiOH.H_2O (105 mg，2.50 mmol)添加至7-[1-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-5-甲基-7-側氧基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(969 mg，1.66 mmol)於THF (12 mL)及水(3 mL)之混合物中之溶液中。在rt下2 h後，使溶劑蒸發，添加5%檸檬酸(aq) (25 mL)且萃取至EtOAc (3 × 10 mL)中。用鹽水(3 × 150 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發，得到產物(961 mg，100%產率)。

【1484】 $[M+H]^+$ = 536.1/538.1

【1485】 ^1H NMR (DMSO-d6 , 400 MHz) δ 1.43 (9H, s), 2.19 (3H, s), 2.86 (2H, t, J = 6.0 Hz), 3.52 - 3.67 (2H, m), 4.51 - 4.60 (2H, m),7.18 - 7.26 (2H, m), 7.36 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.51 - 7.60 (2H, m), 7.64 - 7.74 (1H, m), 7.79 - 7.84 (1H, m), 13.39 (1H, s)

7-[1-(3-氯苯基)-3-[(1,4-二甲基吡唑-3-基)甲基胺甲醯基]-5-甲基-7-側氧基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



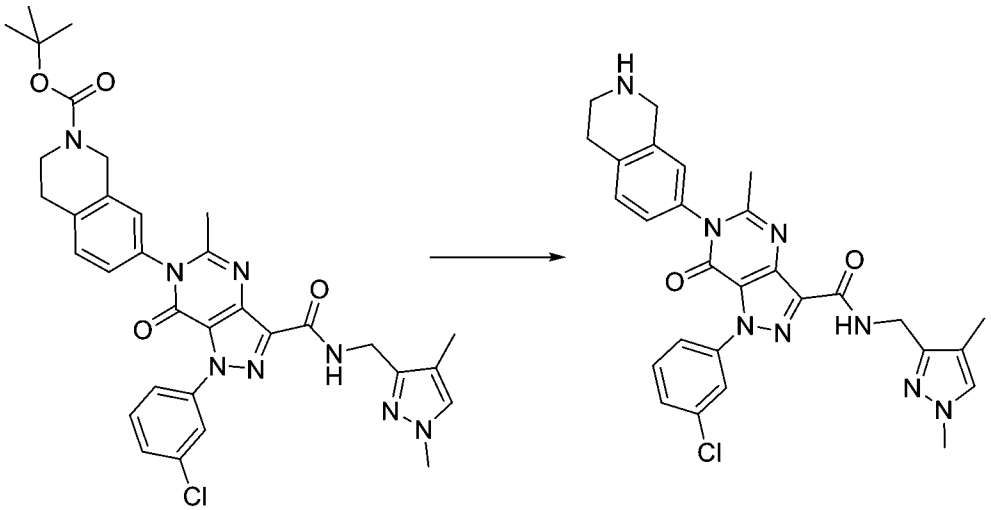
【1486】 將TCFH (117 mg，0.42 mmol)添加至6-(2-第三丁氧羰基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-5-甲基-7-側氧基-吡唑并[4,3-d]吡啶-3-甲酸(160 mg，0.28 mmol)、1-(1,4-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲胺二鹽酸鹽(72 mg，0.36 mmol)及1-甲基咪唑(0.11 mL，1.40 mmol)於MeCN (2.5 mL)中之溶液中且在rt下攪拌2 h。使

溶劑蒸發，將殘餘物溶解於EtOAc (100 mL)中，用飽和$NaHCO_3$ (aq) (1 x 50 mL)、鹽水(3 × 50 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，0 -100% EtOAc/異己烷)得到產物(154 mg，81%產率)。

【1487】 $[M+H]^+$ = 643.3/645.3

【1488】 ^1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) δ 1.49 (9H, s), 2.15 (3H, s), 2.30 - 2.37 (3H, m), 2.88 - 2.93 (2H, m), 3.35 - 3.83 (2H, m), 3.89 (3H, s), 4.52 - 4.73 (2H, m), 4.77(2H, d, J = 5.1 Hz), 6.95 - 7.05 (2H, m), 7.17 (1H, s), 7.29 - 7.38 (3H, m), 7.66 - 7.76 (1H, m), 7.83 - 7.89 (1H, m), 8.76 - 8.83 (1H, m)

1-(3-氯苯基)-N-[(1,4-二甲基吡唑-3-基)甲基]-5-甲基-7-側氧基-6-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺二鹽酸鹽

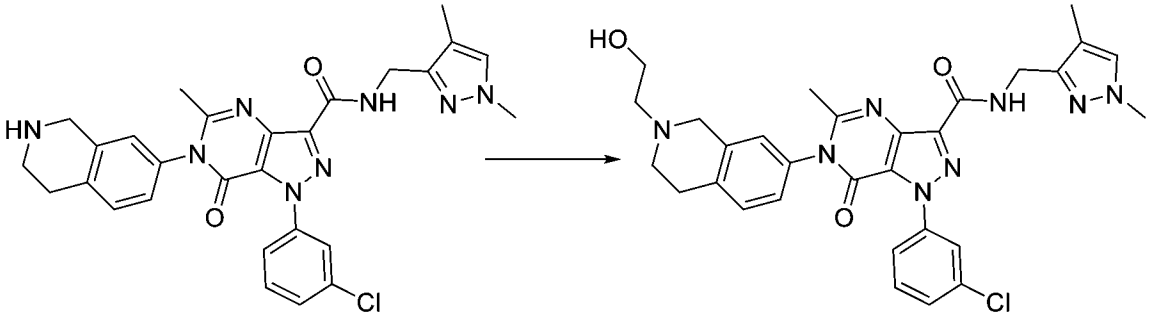


【1489】 將含4M HCl之1,4-二噁烷(1.0 mL，4.0 mmol)添加至7-[1-(3-氯苯基)-3-[(1,4-二甲基吡唑-3-基)甲基胺甲醯基]-5-甲基-7-側氧基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-6-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(154 mg，0.23 mmol)於1,4-二噁烷(1 mL)中之溶液中。將混合物在rt下攪拌3 h。使溶劑蒸發，得到產物(199 mg，100%產率)。

【1490】 $[M+H]^+$ = 543.2/545.2

【1491】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.01 - 2.06 (3H, m), 2.20 (3H, s), 3.09 (2H, t, J = 6.3 Hz), 3.41 - 3.45 (2H, m), 3.72 - 3.76 (3H, m), 4.30 - 4.35 (2H, m), 4.52(2H, d, J = 5.4 Hz), 7.28 - 7.36 (2H, m), 7.41 - 7.51 (2H, m), 7.51 - 7.61 (2H, m), 7.68 - 7.77 (1H, m), 7.84 - 7.89 (1H, m), 8.90 (1H, t, J = 5.4 Hz), 9.21 - 9.29(3H, m)

1-(3-氯苯基)-N-[(1,4-二甲基吡唑-3-基)甲基]-6-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-5-甲基-7-側氧基-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺



【1492】 將2-溴乙醇(0.024 mL，0.34 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-N-[(1,4-二甲基吡唑-3-基)甲基]-5-甲基-7-側氧基-6-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺二鹽酸鹽(100 mg，0.11 mmol)及TEA (0.079 mL，0.57 mmol)於DMF (1 mL)中之溶液中。將混合物在rt下攪拌6 h。再添加2-溴乙醇(0.012 mL，0.17 mmol)且將所得混合物在rt下再攪拌16 h。添加飽和K_2CO_3 (aq) (10 mL)且用EtOAc (2 × 100 mL)萃取混合物。用鹽水(3 × 150 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。製備型HPLC (30 - 60%含有0.1% NH_3之MeCN/0.01M NH_4HCO_3 (aq))得到產物(22 mg，33%產率)。

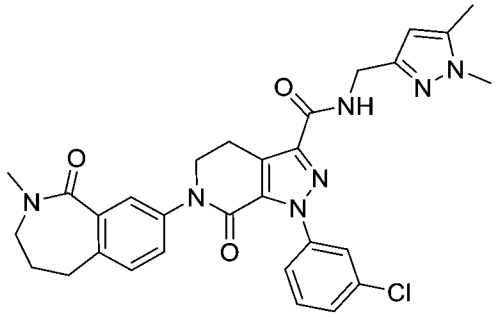
【1493】 $[M+H]^+$ = 587.3/589.2

【1494】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.00 - 2.05 (3H, m), 2.20 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.66 - 2.83 (2H, m), 2.84 - 2.90 (2H, m), 3.53 - 3.66 (4H, m), 3.74 (3H, s), 4.47 - 4.54 (3H, m), 7.10 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.16 (1H, dd, J = 8.1, 2.2 Hz),

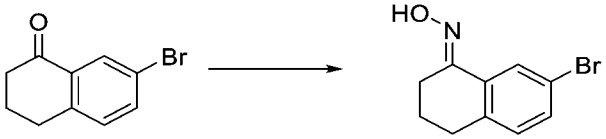
7.28 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.43 (1H, d, J = 0.9 Hz), 7.51 - 7.60 (2H, m), 7.68- 7.77 (1H, m), 7.83 - 7.89 (1H, m), 8.91 (1H, t, J = 5.3 Hz)

實例編號1238

1-(3-氯苯基)-N-[(1,5-二甲基吡唑-3-基)甲基]-6-(2-甲基-1-側氧基-4,5-二氫-3H-2-苯并氮雜卓-8-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



7-溴四氫萘-1-酮肟

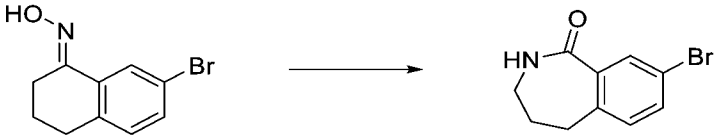


【1495】 將7-溴-1-四氫萘酮(1.0 g，4.44 mmol)、KOAc (654 mg，6.66 mmol)及$NH_2OH.HCl$ (370 mg，5.33 mmol)於EtOH (20 mL)中之溶液在80℃下加熱2 h且蒸發。將殘餘物溶解於EtOAc (100 mL)中，用水(100 mL)及鹽水(100 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到產物(887 mg，81%產率)。

【1496】 $[M+H]^+$ = 240.0/242.0

【1497】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.68 - 1.78 (2H, m), 2.57 - 2.71 (4H, m), 7.16 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.42 (1H, dd, J = 8.2, 2.2 Hz),7.91 - 7.95 (1H, m), 11.30 (1H, s)

8-溴-2,3,4,5-四氫-2-苯并氮雜卓-1-酮

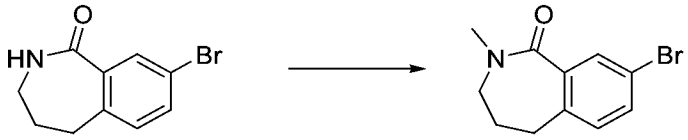


【1498】 將7-溴四氫萘-1-酮肟(880 mg，3.67 mmol)於$SOCl_2$ (70 mL，970 mmol)中之溶液在50℃下攪拌2 h。使混合物蒸發，將殘餘物在冰/水浴中冷卻且緩慢地添加飽和$NaHCO_3$ (aq) (50 mL)。用EtOAc (100 mL)萃取懸浮液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/異己烷)得到產物(447 mg，51%產率)。

【1499】 $[M+H]^+$ = 240.0/242.0

【1500】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.78 - 1.94 (2H, m), 2.71 (2H, t, J = 7.1 Hz), 2.80 - 2.96 (2H, m), 7.22 - 7.27 (1H, m), 7.58 -7.61 (1H, m), 7.62 (1H, d, J = 2.2 Hz), 8.19 (1H, t, J = 6.0 Hz)

8-溴-2-甲基-4,5-二氫-3H-2-苯并氮雜卓-1-酮

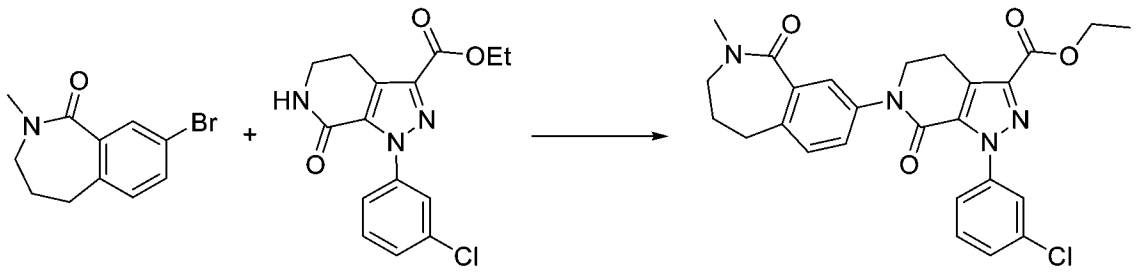


【1501】 向8-溴-2,3,4,5-四氫-2-苯并氮雜卓-1-酮(432 mg，1.80 mmol)於THF (10 mL)中之溶液中添加NaH (60%於礦物油分散液中，86 mg，2.16 mmol)及MeI (0.11 mL，1.80 mmol)。在rt下20 h後，添加飽和NH_4Cl (aq) (20 mL)且用EtOAc (2 x 40 mL)萃取。用鹽水(40 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-10% MeOH/DCM)得到產物(447 mg，91%產率)。

【1502】 $[M+H]^+$ = 254.0/256.0

【1503】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.93 - 2.02 (2H, m), 2.66 (2H, t, J = 7.1 Hz), 3.05 (3H, s), 3.15 (2H, t, J = 6.4 Hz), 7.21 (1H, m),7.56 - 7.62 (2H, m)

1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-4,5-二氫-3H-2-苯并氮雜卓-8-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯

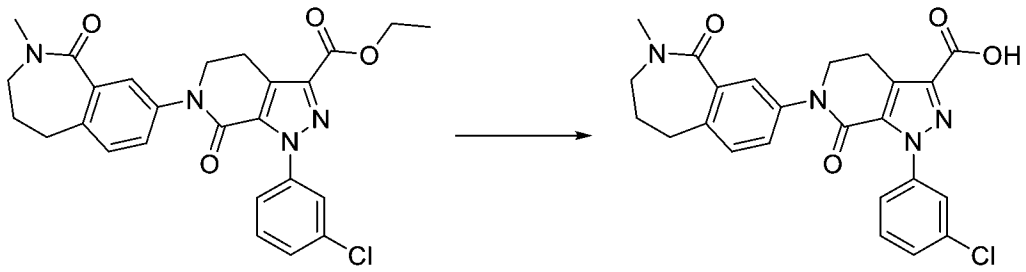


【1504】 在rt下將Cu(I)I (91 mg，0.48 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(365 mg，1.14 mmol)、8-溴-2-甲基-4,5-二氫-3H-2-苯并氮雜卓-1-酮(260 mg，0.95 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷-二胺(81 mg，0.57 mmol)及磷酸三鉀(505 mg，2.38 mmol)於1,4-二噁烷(3 mL)中之懸浮液中。將混合物在密封管中於110℃下加熱18 h。使混合物冷卻至rt，經由Celite®過濾且用EtOAc (5 × 15 mL)洗滌。用水(20 mL)及鹽水(20 mL)洗滌濾液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-100% MeOH:EtOAc (9:1)/異己烷)得到產物(195 mg，36%產率)。

【1505】 $[M+H]^+$ = 493.2

【1506】 ^{1}H NMR (甲醇-d_4, 400 MHz) δ 1.42 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.05 - 2.18 (2H, m), 2.79 (2H, t, J = 7.1 Hz), 3.17 (3H, s), 3.27 -3.29 (2H, m), 3.32 - 3.35 (2H, m), 4.17 (2H, t, J = 6.8 Hz), 4.43 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.29 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.40 - 7.50 (3H, m),7.53 - 7.60 (2H, m), 7.68 - 7.72 (1H, m)

1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-4,5-二氫-3H-2-苯并氮雜卓-8-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸

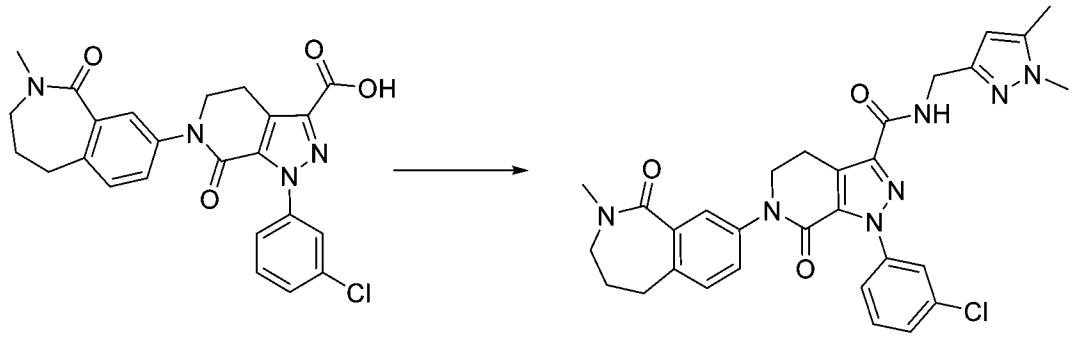


【1507】 將LiOH.H_2O (29 mg，0.69 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-4,5-二氫-3H-2-苯并氮雜卓-8-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸酯(195 mg，0.34 mmol)於THF (2 mL)及水(1 mL)之混合物中之溶液中。在rt下2 h後，添加1M HCl (aq) (1 mL)且使溶劑蒸發，得到產物(179 mg)。

【1508】 $[M+H]^+$ = 465.2/467.2

【1509】 ^{1}H NMR (DMSO-d6 400 MHz) δ 1.91 - 2.04 (2H, m), 2.63 - 2.72 (2H, m), 3.05 (3H, s), 3.12 - 3.23 (4H, m), 4.08 (2H, t, J = 6.6Hz), 7.19 - 7.30 (1H, m), 7.39 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.45 - 7.49 (1H, m), 7.49 -7.56 (2H, m), 7.57 - 7.62 (1H, m), 7.73 - 7.77 (1H, m), 13.33 (1H, br. s)。

1-(3-氯苯基)-N-[(1,5-二甲基吡唑-3-基)甲基]-6-(2-甲基-1-側氧基-4,5-二氫-3H-2-苯并氮雜卓-8-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



【1510】 向1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-4,5-二氫-3H-2-苯并氮雜卓-8-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(60 mg，0.11 mmol)於DMF (1.3 mL)中之溶液中添加(1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲胺(0.013 mL，0.11 mmol)、DIPEA

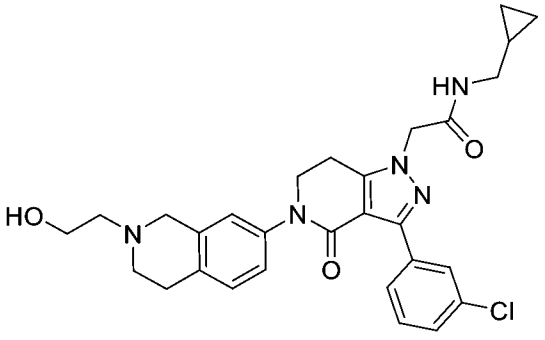
(0.099 mL，0.57 mmol)及COMU (73 mg，0.17 mmol)。在rt下20 h後，添加EtOAc (25 mL)且用飽和$NaHCO_3$ (aq) (1 x 20 mL)及鹽水(3 × 50 mL)洗滌該溶液，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。藉由製備型HPLC (C18，42.0-46.4% [MeCN + 0.1% NH_3]/含NH_4CO_3之H_2O + 0.1% NH_3])純化，得到產物(6.0 mg，9%產率)。

【1511】 $[M+H]^+$ = 572.3/574.2

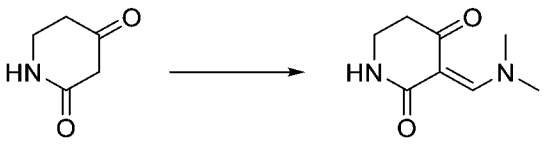
【1512】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.93 - 2.02 (2H, m), 2.19 (3H, d, J = 0.7 Hz), 2.69 (2H, t, J = 7.1 Hz), 3.05 (3H, s), 3.16 (2H, t, J= 6.3 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.64 (3H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 5.93 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.26 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.39 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.48 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.49 - 7.54 (2H, m), 7.61 - 7.67 (1H, m), 7.76 - 7.82 (1H, m), 8.68 (1H, t, J = 6.1 Hz)

實例編號4002

2-[3-(3-氯苯基)-5-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-4-側氧基-6,7-二氫吡唑并[4,3-c]吡啶-1-基]-N-(環丙基甲基)乙醯胺



3-(二甲基胺基亞甲基)哌啶-2,4-二酮

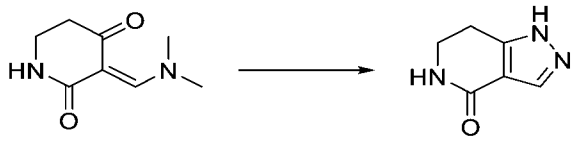


【1513】 用N,N-二甲基甲醯胺二甲基縮醛(3.59 g，30.1 mmol)處理含2,4-哌啶二酮(3.10 g，27.4 mmol)之DMF (90 mL)且在90℃下加熱18 h。使混合物蒸發，得到產物(5.72 g，100%產率)。

【1514】 $[M+H]^+$ = 169.1

【1515】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.27 – 2.32 (2H, m), 3.05 (3H, d, J=0.6Hz), 3.13 – 3.19 (2H, m), 3.29 (3H, d, J=0.5 Hz), 7.15 (1H, s), 7.83 (1H, s) δ 1.68 - 1.78 (2H, m), 2.57 - 2.71 (4H, m), 7.16 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.42 (1H, dd, J = 8.2, 2.2 Hz),7.91 - 7.95 (1H, m), 11.30 (1H, s)

1,5,6,7-四氫吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮

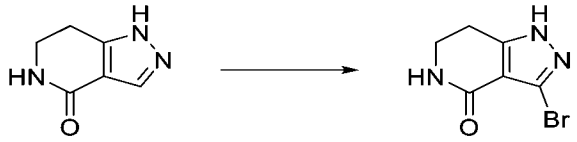


【1516】 用水合肼(1.2 mL，24.1 mmol)處理3-(二甲基胺基亞甲基)哌啶-2,4-二酮(5.72 g，24.1 mmol)於EtOH (60 mL)中之溶液且在100℃下加熱18 h。使混合物蒸發。層析(矽石，0 - 15% MeOH/DCM)得到產物(2.57 g，78%產率)。

【1517】 $[M+H]^+$ = 138.1

【1518】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.73 – 2.83 (2H, m), 3.33 – 3.40 (2H, m), 7.29 (1H, s), 7.63 – 8.20 (1H, br s), 13.02 (1H, s)

3-溴-1,5,6,7-四氫吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮



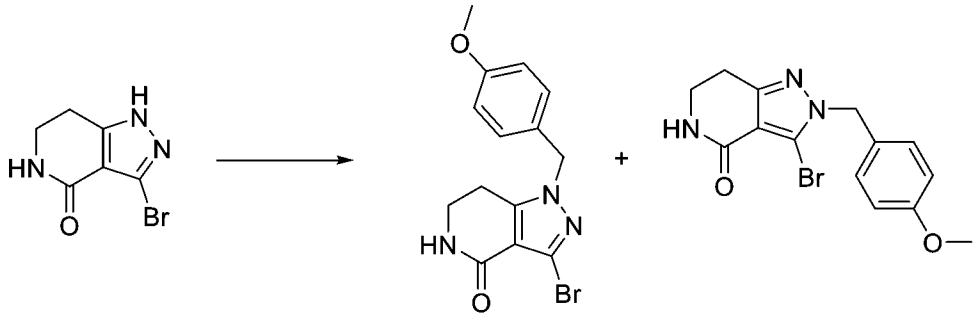
【1519】 在0℃下用乙酸鉀(7.36 g，75.0 mmol)及Br_2 (l) (1.9 mL，37.5 mmol)處理1,5,6,7-四氫吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮(2.57 g，18.7 mmol)於EtOH (90 mL)及水(60

mL)之混合物中之溶液且使其攪拌22 h。添加硫代硫酸鈉(aq) (50 mL)且經由Celite®過濾混合物。用水(20 mL)及鹽水(20 mL)洗滌濾液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0 - 15% MeOH/$CHCl_3$)得到產物(2.94 g，73%產率)。

【1520】 $[M+H]^+$ = 216.1/218.1

【1521】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.86 (2H, t, J=6.8 Hz), 3.36 – 3.40 (2H, m), 7.34 (1H, s), 13.39 (1H, s)

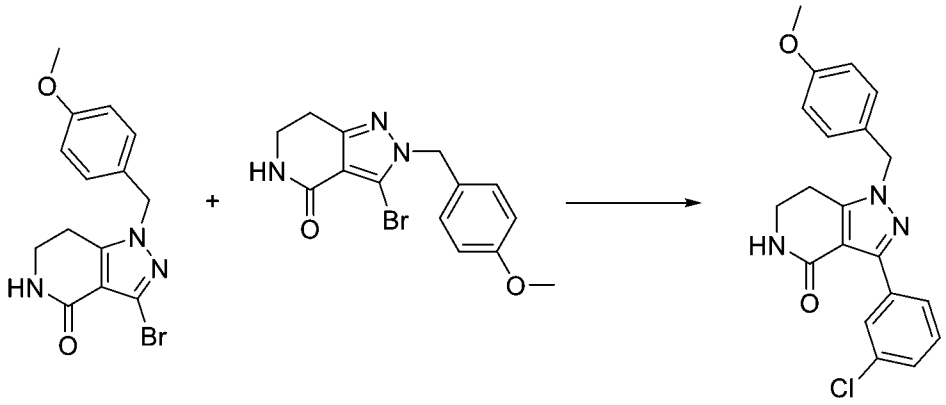
【1522】 3-溴-1-[(4-甲氧基苯基)甲基]-6,7-二氫-5H-吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮



【1523】 用K_2CO_3 (5.64 g，40.8 mmol)及4-甲氧基苄基氯(2.56 g，16.3 mmol)處理3-溴-1,5,6,7-四氫吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮(2.94 g，13.6 mmol)於丙酮(105 mL)中之懸浮液。在60℃下18 h後，用EtOAc (150 mL)稀釋混合物，用水(20 mL)及鹽水(20 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發，得到3-溴-1-[(4-甲氧基苯基)甲基]-6,7-二氫-5H-吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮及3-溴-2-[(4-甲氧基苯基)甲基]-6,7-二氫-5H-吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮之混合物(總計2.73 g，39%產率)。

【1524】 $[M+H]^+$ = 336.0/337.9

3-(3-氯苯基)-1-[(4-甲氧基苯基)甲基]-6,7-二氫-5H-吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮

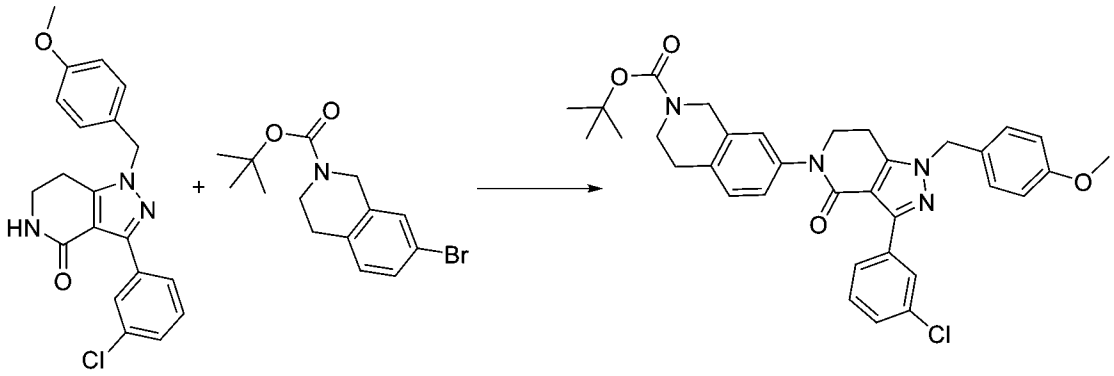


【1525】 使3-溴-2-[(4-甲氧基苯基)甲基]-6,7-二氫-5H-吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮及3-溴-1-[(4-甲氧基苯基)甲基]-6,7-二氫-5H-吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮之混合物(2.73 g，7.47 mmol)、3-氯苯硼酸(1.40 g，8.97 mmol)及Na_2CO_3 (2.38 g，22.4 mmol)懸浮於1,4-二噁烷(120 mL)及水(60 mL)中，用N_2 (g)吹掃，且添加肆(三苯基膦)鈀(0) (1.73 g，1.49 mmol)。在100℃下18 h後，用EtOAc (150 mL)稀釋混合物，用水(80 mL)及鹽水(80 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0 - 100% EtOAc/異己烷)得到產物(1.77 g，43%產率)。

【1526】 $[M+H]^+$ = 368.1/370.1

【1527】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.92 (2H, t, J=6.8 Hz), 3.37 – 3.44 (2H,m), 3.72 (3H, s), 5.32 (2H, s), 6.86 – 6.98 (2H, m), 7.16 – 7.27 (2H, m), 7.37 – 7.44 (2H, m), 7.45 – 7.49 (1H, m), 8.09 – 8.22(1H, m), 8.28 – 8.38 (1H, m)

7-[3-(3-氯苯基)-1-[(4-甲氧基苯基)甲基]-4-側氧基-6,7-二氫吡唑并[4,3-c]吡啶-5-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

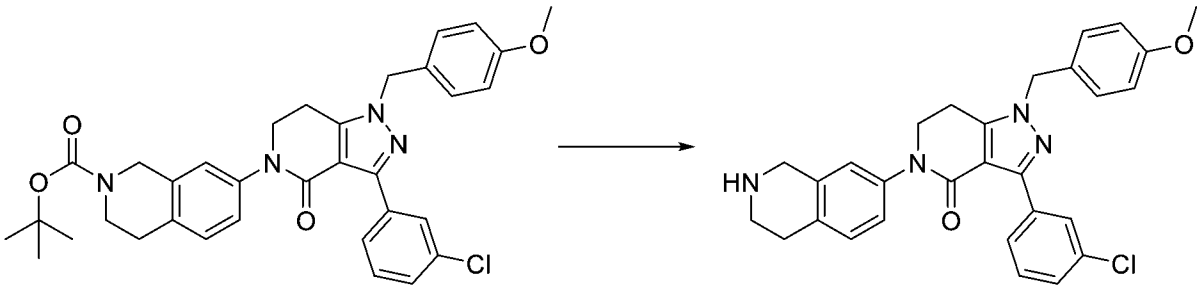


【1528】 用N_2 (g)吹掃3-(3-氯苯基)-1-[(4-甲氧基苯基)甲基]-6,7-二氫-5H-吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮(1.50 g，4.08 mmol)及2-boc-7-溴-1,2,3,4-四氫異喹啉(1.53 g，4.89 mmol)於無水1,4-二噁烷(40 mL)中之溶液。依序添加磷酸三鉀(260 g，12.2 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷二胺(464 mg，3.26 mmol)及Cu(I)I (311 mg，1.63 mmol)。在密封管中於110℃下加熱20 h後，經由Celite®過濾混合物且用EtOAc (120 mL)洗滌。用飽和$NaHCO_3$ (aq) (1 x 50 mL)、鹽水(3 × 50 mL)洗滌合併之濾液，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，2-60% EtOAc/第三丁基異己烷)得到產物(1.33 g，54%產率)。

【1529】 $[M+H]^+$ = 599.4/601.4

【1530】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.43 (9H, s), 2.77 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.14 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.74 (3H,s), 3.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.46 - 4.52 (2H, m), 5.37 (2H, s), 6.91 - 6.97 (2H, m), 7.11 - 7.19 (3H, m), 7.24 - 7.31 (2H, m), 7.37 -7.42 (2H, m), 8.01 - 8.09 (1H, m), 8.21 - 8.26 (1H, m)

3-(3-氯苯基)-1-[(4-甲氧基苯基)甲基]-5-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-6,7-二氫吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮鹽酸鹽

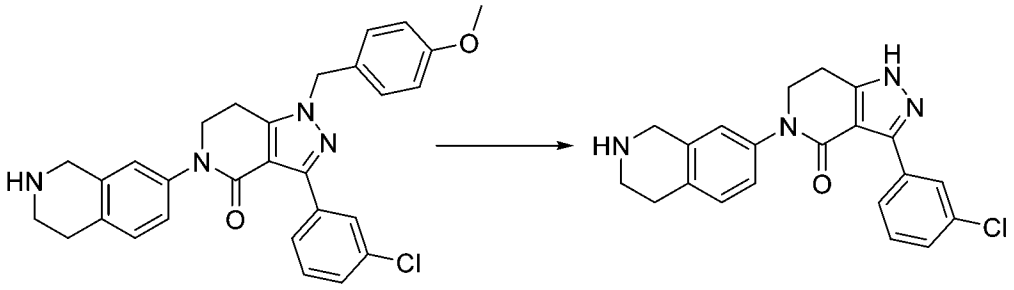


【1531】 向7-[3-(3-氯苯基)-1-[(4-甲氧基苯基)甲基]-4-側氧基-6,7-二氫吡唑并[4,3-c]吡啶-5-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(1.33 g，2.21 mmol)於1,4-二噁烷(5 mL)中之溶液添加含4M HCl之1,4-二噁烷(15 mL，60.0 mmol)。在rt下60 h後，使溶劑蒸發，得到產物(1.15 g，97%產率)。

【1532】 $[M+H]^+$ = 499.3/501.3

【1533】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 3.00 (2H, t, J = 6.3 Hz), 3.16 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.74 (3H, s), 3.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.22 -4.28 (2H, m), 5.38 (2H, s), 6.90 - 6.98 (2H, m), 7.19 - 7.31 (5H, m), 7.37 - 7.42 (2H, m), 8.00 - 8.07 (1H, m), 8.22 - 8.25 (1H, m),9.29 (2H, br s)

3-(3-氯苯基)-5-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮

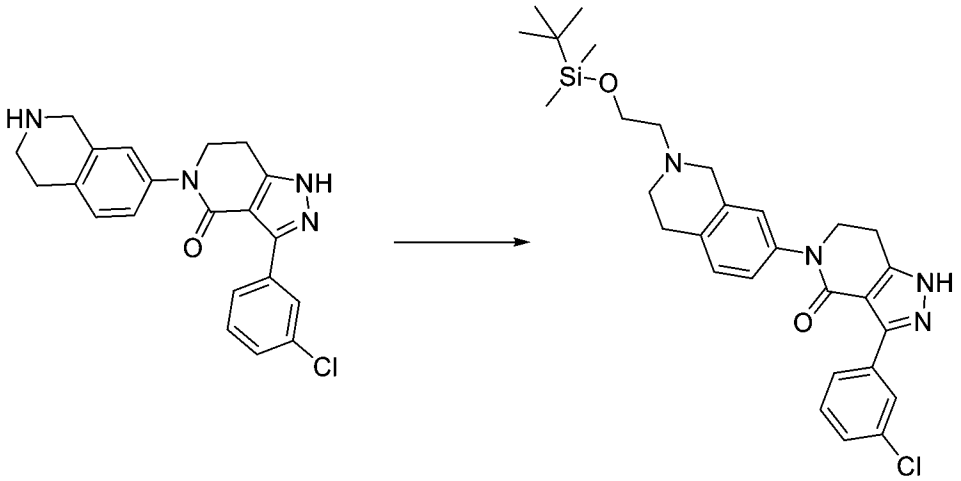


【1534】 向3-(3-氯苯基)-1-[(4-甲氧基苯基)甲基]-5-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-6,7-二氫吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮鹽酸鹽(1.0 g，1.87 mmol)於DCE (12 mL)中之懸浮液中添加TFA (8.0 mL，104 mmol)。在70℃下6 h後，使溶劑蒸發且將殘餘物溶解於EtOAc (100 mL)中。此溶液用飽和$NaHCO_3$ (aq) (2 x 50 mL)、鹽水(3 x 50 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發，得到產物。(525 mg，74%產率)。

【1535】 $[M+H]^+$ = 379.2/381.2

【1536】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.70 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.97 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.86 (2H, s), 3.95 (2H,t, J = 6.6 Hz), 6.92 - 7.03 (1H, m), 7.03 - 7.13 (2H, m), 7.37 - 7.50 (2H, m), 7.98 - 8.06 (1H, m), 8.22 - 8.29 (1H, m)

5-[2-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-3-(3-氯苯基)-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮



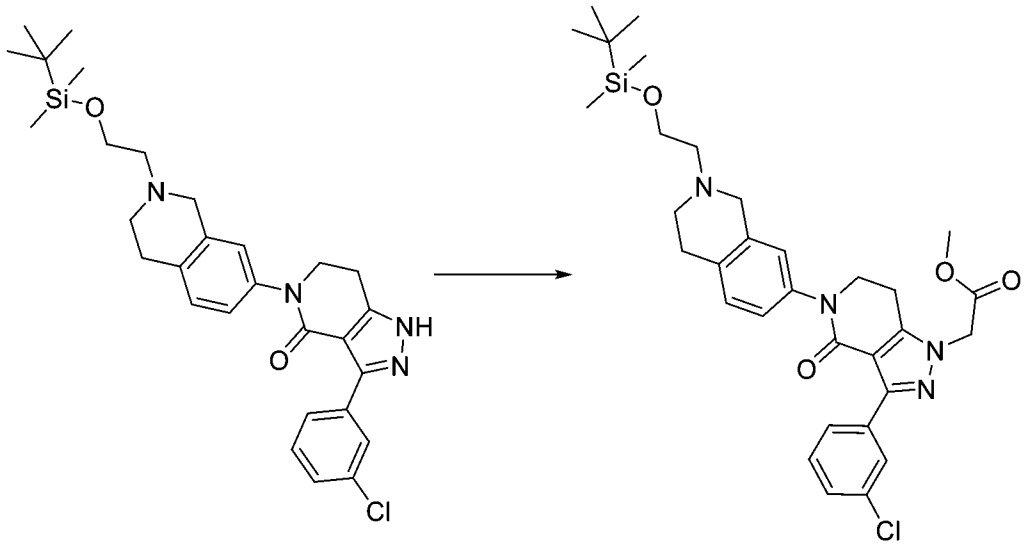
【1537】 向3-(3-氯苯基)-5-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮(500 mg，1.32 mmol)於DMF (12 mL)中之溶液中添加TEA (0.92 mL，6.60 mmol)及2-溴乙氧基-第三丁基二甲基矽烷(0.57 mL，2.64 mmol)。在rt下40 h後，用EtOAc (75 mL)稀釋混合物，用飽和$NaHCO_3$ (aq) (2 x 50 mL)、鹽水(3 x 50 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，0-10% MeOH/DCM)得到產物(263 mg，37%產率)。

【1538】 $[M+H]^+$ = 537.2/539.1

【1539】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.05 (6H, s), 0.87 (9H, s), 2.60 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.70 - 2.77 (2H, m), 2.77 - 2.83 (2H, m), 2.98- 3.19 (H, m), 3.61 (2H, s), 3.77 (2H, t, J = 6.1 Hz), 3.95 (2H, t, J = 6.4 Hz), 6.99 (1H, s), 7.05 - 7.17 (2H, m), 7.33 -

7.46 (1H, m),7.44 - 7.52 (1H, m), 7.84 - 8.11 (1H, m), 8.15 - 8.35 (1H, m), 13.36 - 13.62 (1H, m)

2-[5-[2-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-3-(3-氯苯基)-4-側氧基-6,7-二氫吡唑并[4,3-c]吡啶-1-基]乙酸甲酯

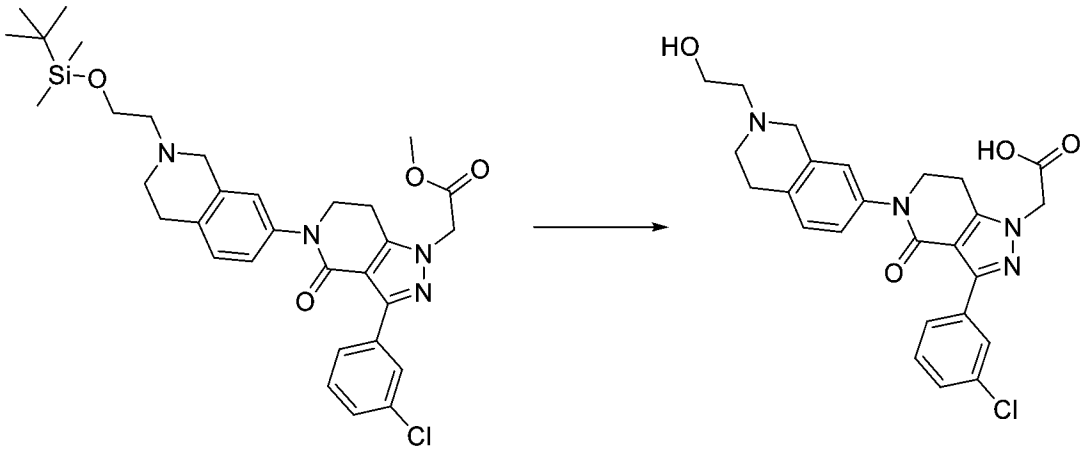


【1540】 向5-[2-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-3-(3-氯苯基)-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-c]吡啶-4-酮(150 mg，0.28 mmol)於DMF (3 mL)中之溶液中添加Cs_2CO_3 (136 mg，0.42 mmol)及乙酸2-溴甲酯(0.034 mL，0.36 mmol)。在rt下4 h後，用EtOAc (50 mL)稀釋混合物且用飽和$NaHCO_3$ (aq) (2 x 20 mL)、鹽水(3 × 20 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，0-5% MeOH/DCM)得到產物(144 mg，84%產率)。

【1541】 $[M+H]^+$ = 609.2/611.3

【1542】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.05 (6H, s), 0.87 (9H, s), 2.57 - 2.64 (2H, m), 2.72 - 2.76 (2H, m), 2.78 - 2.81 (2H, m), 3.10(2H, t, J = 6.6 Hz), 3.58 - 3.64 (2H, m), 3.74 (3H, s), 3.78 (2H, t, J = 6.3 Hz), 3.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 5.26 (2H, s), 7.02 (1H, s),7.11 (2H, s), 7.33 - 7.47 (2H, m), 8.00 - 8.08 (1H, m), 8.18 - 8.28 (1H, m)

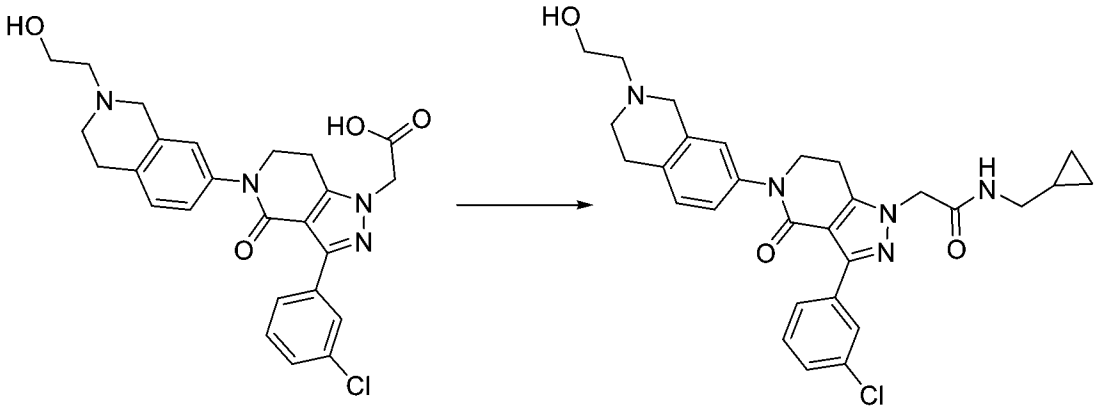
2-[3-(3-氯苯基)-5-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-4-側氧基-6,7-二氫吡唑并[4,3-c]吡啶-1-基]乙酸鹽酸鹽



【1543】 向2-[5-[2-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-3-(3-氯苯基)-4-側氧基-6,7-二氫吡唑并[4,3-c]吡啶-1-基]乙酸甲酯(140 mg，0.23 mmol)於THF (3 mL)及水(1 mL)之混合物中之溶液中添加$LiOH.H_2O$ (24 mg，0.57mmol)。在rt下20 h後，添加含4M HCl之1,4-二噁烷(0.50 mL，2.00 mmol)且在rt下再過1 h後，使混合物蒸發，得到產物(163 mg)。

【1544】 $[M+H]^+$ = 481.1/483.1

2-[3-(3-氯苯基)-5-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-4-側氧基-6,7-二氫吡唑并[4,3-c]吡啶-1-基]-N-(環丙基甲基)乙醯胺



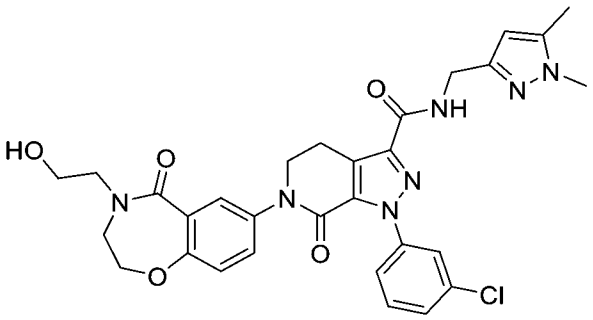
【1545】 向2-[3-(3-氯苯基)-5-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-4-側氧基-6,7-二氫吡唑并[4,3-c]吡啶-1-基]乙酸鹽酸鹽(60 mg，0.12 mmol)於DMF (2 mL)中之溶液中添加胺基甲基環丙烷(0.015 mL，0.17 mmol)、DIPEA (0.10 mL，0.58 mmol)及COMU (74 mg，0.17 mmol)。在rt下2 h後，用EtOAc (50 mL)稀釋混合物且用飽和$NaHCO_3$ (aq) (2 x 15 mL)、鹽水(3 × 15 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。藉由製備型HPLC (C_{18}，40-57% [MeCN + 0.1% NH_3]/[含10 mM NH_4CO_3之H_2O + 0.1% NH_3])純化，得到產物(24 mg，37%產率)。

【1546】 $[M+H]^+$ = 534.2/536.1

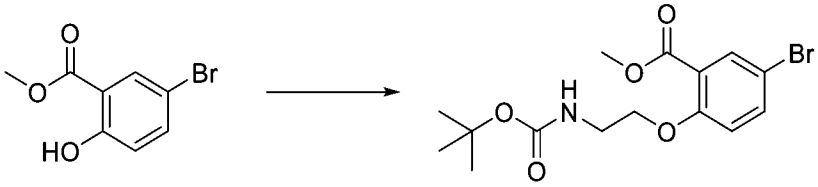
【1547】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.15 - 0.22 (2H, m), 0.40 - 0.48 (2H, m), 0.88 - 0.99 (1H, m), 2.54 - 2.62 (2H, m), 2.69 - 2.76 (2H, m), 2.77 - 2.85 (2H, m), 3.00 (2H, dd, J = 6.9, 5.5 Hz), 3.11 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.55 - 3.63 (4H, m), 3.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.46 - 4.53 (1H, m), 4.93 (2H, s), 7.04 (1H, s), 7.08 - 7.13 (2H, m), 7.38 - 7.43 (2H, m), 7.99 - 8.06 (1H, m), 8.21 - 8.25 (1H, m), 8.42 (1H, t, J = 5.6 Hz)

實例編號1288

1-(3-氯苯基)-N-[(1,5-二甲基吡唑-3-基)甲基]-6-[4-(2-羥基乙基)-5-側氧基-2,3-二氫-1,4-苯并氧氮雜卓-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



5-溴-2-[2-(第三丁氧羰基胺基)乙氧基]苯甲酸乙酯

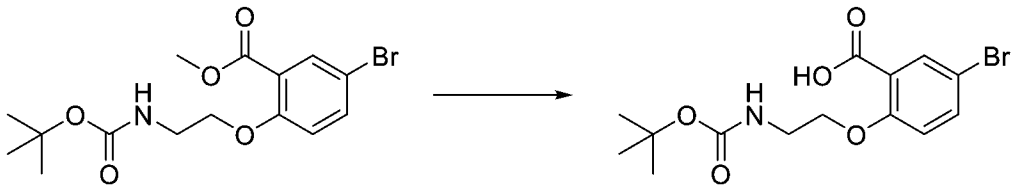


【1548】 在0℃下向5-溴水楊酸甲酯(1.0 g，4.3 mmol)及N-boc-乙醇胺(1.0 mL，6.5 mmol)於THF (30 mL)中之溶液中添加PPh_3(1.70 g，6.49 mmol)及DIAD (1.3 mL，6.49 mmol)。在rt下3 h後，用EtOAc (100 mL)稀釋混合物且用飽和$NaHCO_3$ (aq) (1 x 50 mL)、鹽水(3 × 50 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，2-50% EtOAc/異己烷)得到產物(2.13 g，100%產率)。

【1549】 $[M\text{-}Boc+H]^+$ = 273.9/275.9

【1550】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.37 (9H, s), 3.29 (2H, q, J = 5.9 Hz), 3.80 (3H, s), 3.95 - 4.07 (2H, m), 6.85 (1H, t, J = 5.5 Hz), 7.14 (1H, d, J = 8.9 Hz), 7.68 (1H, dd, J = 8.9, 2.6 Hz), 7.75 (1H, d, J = 2.6 Hz)

5-溴-2-[2-(第三丁氧羰基胺基)乙氧基]苯甲酸

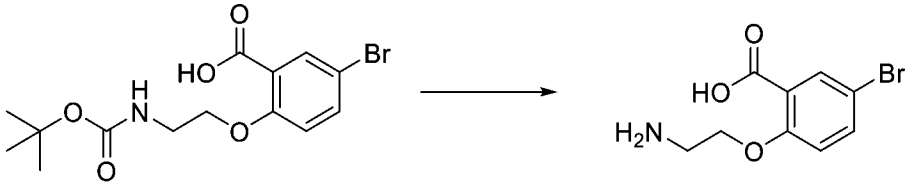


【1551】 向5-溴-2-[2-(第三丁氧羰基胺基)乙氧基]苯甲酸甲酯(1.60 g，4.28 mmol)於THF (30 mL)及水(10 mL)之混合物中之溶液中添加$LiOH.H_2O$ (448 mg，10.7 mmol)。在rt下3 h後，添加水(30 mL)且用EtOAc (50 mL)洗滌混合物。用1M HCl (aq)酸化水相直至pH~2-3且用EtOAc (2 x 50 mL)萃取。用鹽水(3 × 50 mL)洗滌合併之有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發，得到產物(1.22 g，79%產率)。

【1552】 $[M\text{-}Boc+H]^+$ = 259.9/261.9

【1553】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.37 (9H, s), 3.28 (2H, q, J = 6.0 Hz), 4.04 (2H, t, J = 6.1 Hz), 6.83 (1H, t, J = 5.7 Hz), 7.12 (1H, d, J = 8.9 Hz), 7.65 (1H, dd, J = 8.9, 2.7 Hz), 7.73 (1H, d, J = 2.6 Hz), 12.88 (1H, s br)。

2-(2-胺基乙氧基)-5-溴-苯甲酸鹽酸鹽

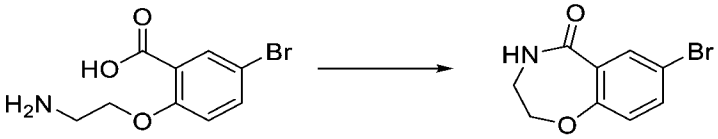


【1554】 向5-溴-2-[2-(第三丁氧羰基胺基)乙氧基]苯甲酸(1.22 g，3.39 mmol)於1,4-二噁烷(10 mL)中之溶液中添加含4M HCl之1,4-二噁烷(20 mL，80.0 mmol)。在rt下20 h後，使溶劑蒸發，得到產物(1.01 g，100%產率)

【1555】 $[M+H]^+$ = 260.0/262.0

【1556】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 3.08 - 3.29 (2H, m), 4.27 (2H, t, J = 5.3 Hz), 7.21 (1H, d, J = 8.9 Hz), 7.72 (1H, dd, J = 8.8, 2.6 Hz), 7.80 (1H, d, J = 2.6 Hz), 8.10 (3H, s, br), 13.14 (1H, s, br)

7-溴-3,4-二氫-2H-1,4-苯并氧氮雜卓-5-酮

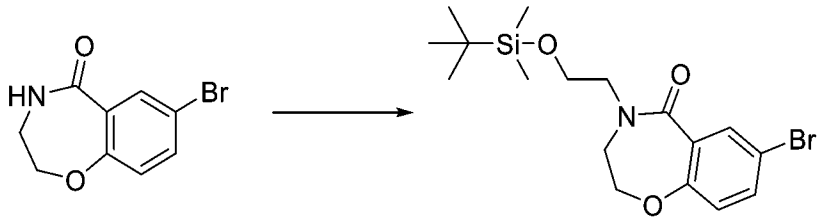


【1557】 向2-(2-胺基乙氧基)-5-溴-苯甲酸鹽酸鹽(1.0 g，3.37 mmol)於MeCN (150 mL)中之懸浮液中添加1-甲基咪唑(1.3 mL，16.9 mmol)及TCFH (1.23 g，4.38 mmol)。在rt下2 h後，添加水(10 mL)及EtOAc (100 mL)。用飽和$NaHCO_3$ (aq) (1 x 50 mL)、鹽水(3 × 50 mL)洗滌有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，0-8% MeOH/DCM)得到產物(782 mg，96%產率)。

【1558】 $[M+H]^+$ = 240.0/242.0

【1559】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 3.33 - 3.39 (2H, m), 4.27 - 4.33 (2H, m), 6.98 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.61 (1H, dd, J = 8.7, 2.7 Hz),7.88 (1H, d, J = 2.7 Hz), 8.43 - 8.51 (1H, m)

7-溴-4-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-2,3-二氫-1,4-苯并氧氮雜卓-5-酮

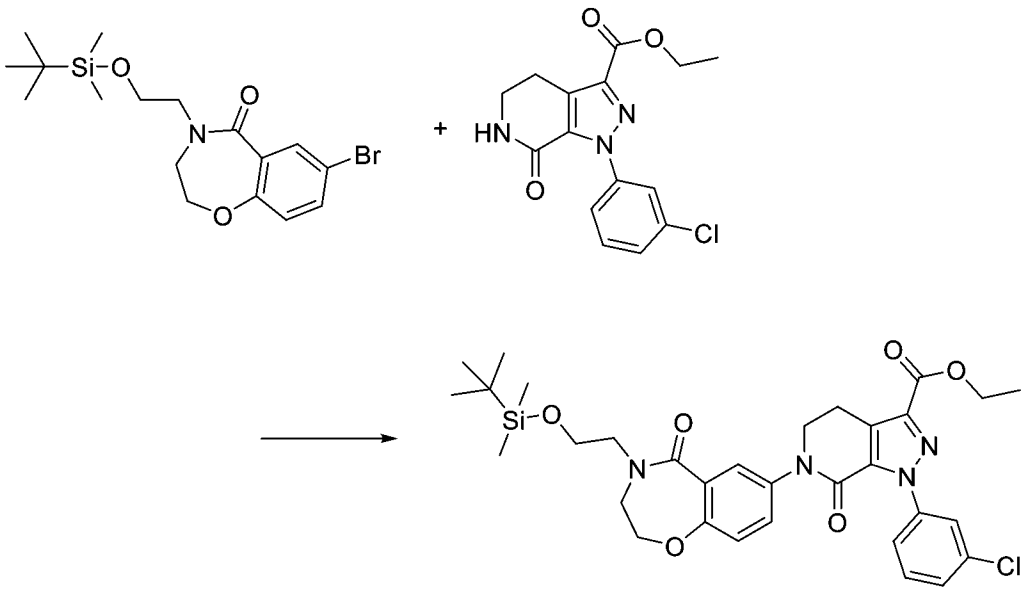


【1560】 向7-溴-3,4-二氫-2H-1,4-苯并氧氮雜卓-5-酮(780 mg，3.22 mmol)於DMF (20 mL)中之溶液中添加NaH (60%油分散液，168 mg，4.19 mmol)。在rt下1 h後，逐滴添加2-溴乙氧基-第三丁基二甲基矽烷(0.90 mL，4.19 mmol)。再過2 h後，添加飽和NH_4Cl (aq) (25 mL)且用EtOAc (125 mL)萃取混合物。用鹽水(3 × 50 mL)洗滌有機萃取物，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，2-50% EtOAc/異己烷)得到產物(980 mg，76%產率)。

【1561】 $[M+H]^+$ = 400.1/402.1

【1562】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.04 (6H, s), 0.85 (9H, s), 3.56 - 3.66 (4H, m), 3.76 (2H, t, J = 5.6 Hz), 4.37 (2H, dd, J = 5.4, 4.4Hz), 6.99 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.62 (1H, dd, J = 8.6, 2.6 Hz), 7.72 (1H, d, J = 2.6 Hz)

6-[4-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-5-側氧基-2,3-二氫-1,4-苯并氧氮雜卓-7-基]-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯

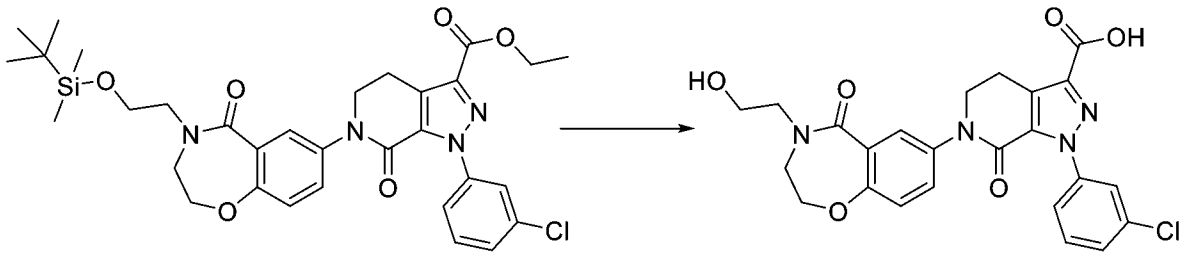


【1563】 用N_2 (g)吹掃1-(3-氯苯基)-7-側氧基-5,6-二氫-4H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(335 mg，1.05 mmol)及7-溴-4-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-2,3-二氫-1,4-苯并氧氮雜卓-5-酮(350 mg，0.874 mmol)於1,4-二噁烷(8 mL)及DMF (0.8 mL)中之懸浮液。依序添加磷酸三鉀(557 mg，2.62 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環已烷二胺(50 mg，0.350 mmol)及Cu(I)I (33 mg，0.175 mmol)。在密封管中於100℃下加熱20 h後，經由Celite®過濾混合物且用EtOAc (75 mL)洗滌。用飽和$NaHCO_3$ (aq) (1 x 50 mL)、鹽水(3 × 50 mL)洗滌合併之濾液，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，2-60% EtOAc /異已烷)得到產物(416 mg，74%產率)。

【1564】 $[M+H]^+$ = 639.0/641.0

【1565】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.04 (6H, s), 0.86 (9H, s), 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.58 (2H, t, J = 5.1Hz), 3.62 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.76 (2H, t, J = 5.6 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 - 4.40 (4H, m), 7.04 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.45(1H, dd, J = 8.6, 2.7 Hz), 7.49 - 7.58 (2H, m), 7.58 - 7.65 (2H, m), 7.73 - 7.77 (1H, m)

1-(3-氯苯基)-6-[4-(2-羥基乙基)-5-側氧基-2,3-二氫-1,4-苯并氧氮雜卓-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸

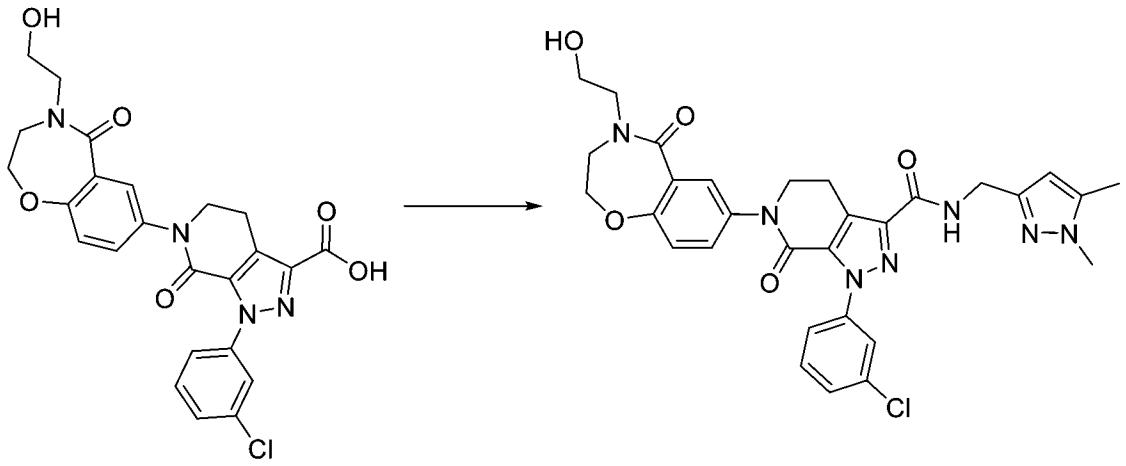


【1566】 向6-[4-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-5-側氧基-2,3-二氫-1,4-苯并氧氮雜卓-7-基]-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯(416 mg，0.65 mmol)於THF (6 mL)及水(2 mL)中之溶液中添加LiOH.H_2O (68 mg，1.63 mmol)。在rt下20 h後，添加含4M HCl之1,4-二噁烷(3 mL)。再過1 h後，使溶劑蒸發，得到產物(328 mg，100%產率)。

【1567】 $[M+H]^+$ 496.9/498.8

【1568】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.04 (6H, s), 0.86 (9H, s), 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.58 (2H, t, J = 5.1Hz), 3.62 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.76 (2H, t, J = 5.6 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 - 4.40 (4H, m), 7.04 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.45(1H, dd, J = 8.6, 2.7 Hz), 7.49 - 7.58 (2H, m), 7.58 - 7.65 (2H, m), 7.73 - 7.77 (1H, m)

1-(3-氯苯基)-N-[(1,5-二甲基吡唑-3-基)甲基]-6-[4-(2-羥基乙基)-5-側氧基-2,3-二氫-1,4-苯并氧氮雜卓-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



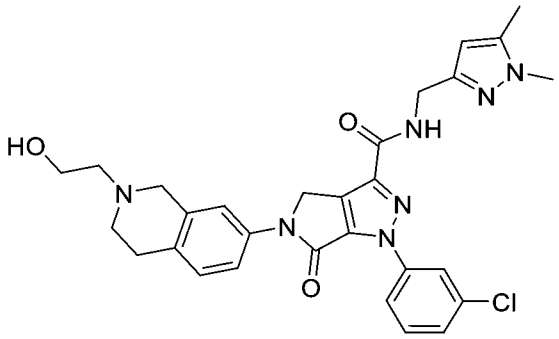
【1569】 向1-(3-氯苯基)-6-[4-(2-羥基乙基)-5-側氧基-2,3-二氫-1,4-苯并氧氮雜卓-7-基]-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(60 mg，0.12 mmol)於DMF (1.2 mL)中之溶液中添加(1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲胺(20 μL，0.18 mmol)、DIPEA (0.084 mL，0.48 mmol)及COMU (78 mg，0.18 mmol)。在rt下2 h後，用EtOAc (50 mL)稀釋混合物且用飽和$NaHCO_3$ (aq) (2 x 15 mL)、鹽水(3 × 15 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。藉由製備型HPLC (C18，40-57% [MeCN + 0.1% NH_3]/[含10 mM NH_4CO_3之H_2O + 0.1% NH_3])純化，得到產物(50 mg，68%產率)。

【1570】 $[M+H]^+$ 603.8/605.8

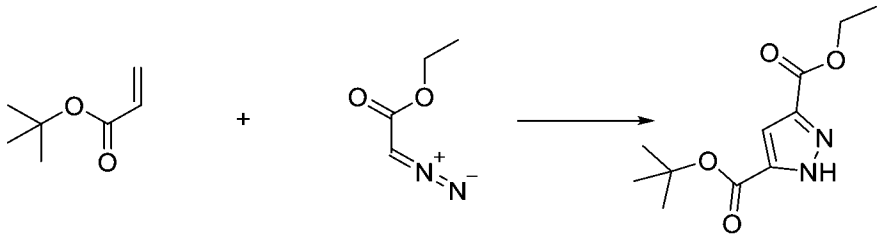
【1571】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.19 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 - 3.62 (6H, m), 3.64 (3H, s), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.37 (2H, t, J = 5.0 Hz), 4.81 - 4.85 (1H, m), 5.93 (1H, s), 7.04 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.6,2.7 Hz), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.57 - 7.69 (2H, m), 7.80 (1H, d, J = 1.1 Hz), 8.68 (1H, t, J = 6.1 Hz)

實例編號4001

1-(3-氯苯基)-N-[(1,5-二甲基吡唑-3-基)甲基]-5-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-6-側氧基-4H-吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲醯胺



1H-吡唑-3,5-二甲酸O-5-第三丁基O-3-乙酯

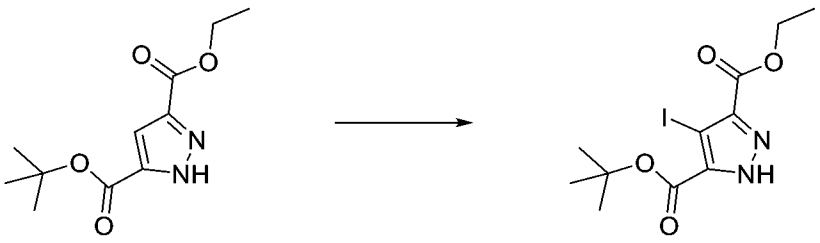


【1572】 向丙烯酸第三丁酯(2.0 mL，13.7 mmol)於MeCN (30 mL)中之溶液中添加重氮乙酸乙酯(2.6 mL，21.8 mmol)、第三丁基過氧化氫溶液(Luperox® TBH70X) (70 wt%於水中) (3.8 mL，27.3 mmol)及四丁基碘化銨(504 mg，1.37 mmol)。將混合物在40℃下攪拌20 h。用飽和$Na_2S_2O_3$ (aq) (50 mL)淬滅該溶液且用EtOAc (150 ml)稀釋。分離有機層，用飽和$NaHCO_3$ (aq) (50 ml)及鹽水(50 ml)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，2-50% EtOAc/異己烷)得到產物(3.10 g，94%產率)。

【1573】 $[M-^tBu+H]^+$ = 185.1

【1574】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.29 (3H, t, J = 6.8 Hz), 1.53 (9H, s), 4.23 - 4.39 (2H, m), 7.10 (1H, s)

4-碘-1H-吡唑-3,5-二甲酸O-5-第三丁基O-3-乙酯

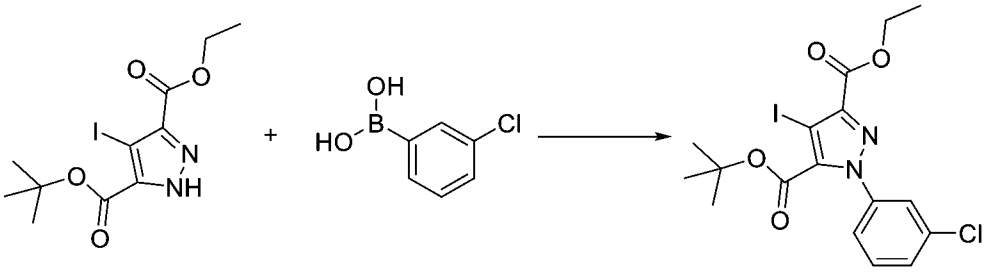


【1575】 向1H-吡唑-3,5-二甲酸O-5-第三丁基O-3-乙酯(2.75 g，11.4 mmol)於$CHCl_3$ (100 mL)中之溶液中添加N-碘代琥珀醯亞胺(3.86 g，17.2mmol)且將混合物在60℃下攪拌60 h。用DCM (100 mL)稀釋該溶液且用飽和$Na_2S_2O_3$ (aq) (50 mL)、飽和$NaHCO_3$ (aq) (50 mL)及鹽水(50 mL)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，1-50% EtOAc/異己烷)得到產物(3.21 g，77%產率)。

【1576】 $[M-{}^tBu+H]^+ = 310.9$

【1577】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.24 - 1.41 (3H, m), 1.56 (9H, s), 4.21 - 4.38 (2H, m)。

1-(3-氯苯基)-4-碘-吡唑-3,5-二甲酸O-5-第三丁基O-3-乙酯

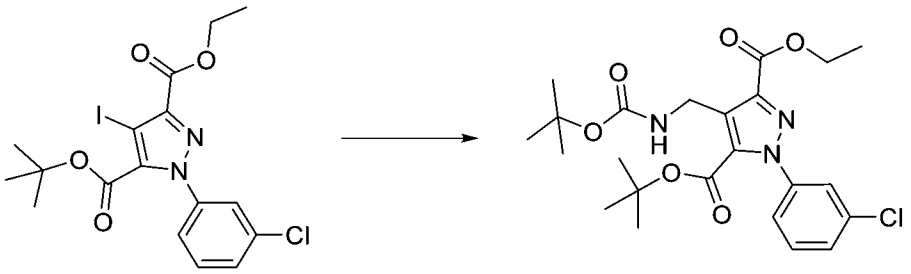


【1578】 向4-碘-1H-吡唑-3,5-二甲酸O-5-第三丁基O-3-乙酯(3.20 g，8.74 mmol)於DCM (60 mL)中之溶液中添加3-氯苯硼酸(2.73 g，17.5 mmol)、吡啶(4.2 mL，52.4 mmol)、乙酸銅(II) (2.06 g，11.4 mmol)及4Å分子篩(1.5 g，50% w/w)，且將混合物在空氣下在rt下攪拌80 h。此後，再添加3-氯苯硼酸(500 mg，3.15 mmol)、吡啶(2 mL，26 mmol)、乙酸銅(II)(500 m g，2.85 mmol)及4Å分子篩(1 g，33% w/w)，且將混合物在rt下再攪拌24 h。經由Celite®過濾該懸浮液且用DCM (150 mL)洗滌。用飽和$NaHCO_3$ (aq) (2 x 50 mL)、1M HCl (aq) (50 mL)及鹽水(50 mL)洗滌合併之濾液，乾燥(Na_2SO_4)，過濾且蒸發。急驟層析(矽石，0-30% EtOAc/異己烷)得到產物(4.12 g，99%產率)。

【1579】 $[M+H]^+$ = 477.0/479.0

【1580】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.07及1.30 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.30及1.56 (9H, s), 4.19及4.33 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.47 - 7.53 (1H, m), 7.55 - 7.60 (1H, m), 7.61 - 7.66 (1H, m), 7.68 - 7.76 (1H, m)

4-[(第三丁氧羰基胺基)甲基]-1-(3-氯苯基)吡唑-3,5-二甲酸O-5-第三丁基O-3-乙酯

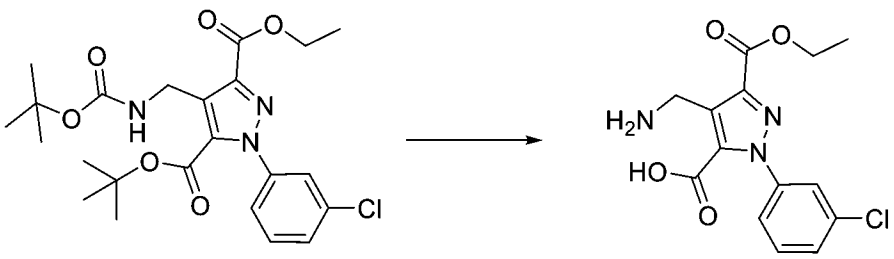


【1581】 用N_2 (g)吹掃1-(3-氯苯基)-4-碘-吡唑-3,5-二甲酸O-5-第三丁基O-3-乙酯(2.00 g，4.20 mmol)及(((第三丁氧羰基)胺基)甲基)三氟硼酸鉀(1.49 g，6.29 mmol)於1,4-二噁烷(32 mL)及水(8 mL)之混合物中之溶液持續5 min。此後，依序添加Cs_2CO_3 (2.73 g，8.39 mmol)、二(1-金剛烷基)-正丁基膦(cataCXium A) (301 mg，0.84 mmol)及最終CataCXium A Pd G3 (306 mg，0.42 mmol)。將混合物在90℃下攪拌20 h。經由Celite®過濾該懸浮液且用EtOAc (150 mL)洗滌。用飽和$NaHCO_3$ (aq) (50 ml)及鹽水(50 ml)洗滌濾液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-20% EtOAc/異己烷)得到產物(775 mg，38%產率)。

【1582】 $[M\text{-}Boc\text{-}^tBu+H]^+$ = 324.1/326.1

【1583】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.30 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.34及1.54 (9H, s), 1.37 (9H, s), 4.18及4.32 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.49 - 4.53 (2H, m), 6.74 (1H, s br), 7.42 - 7.48 (1H, m), 7.53 - 7.66 (3H, m)

4-(胺基甲基)-2-(3-氯苯基)-5-乙氧羰基-吡唑-3-甲酸鹽酸鹽

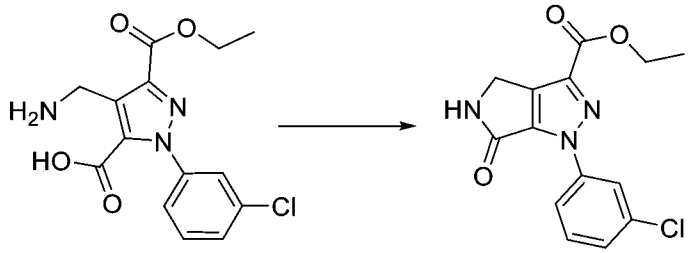


【1584】 向4-[(第三丁氧羰基胺基)甲基]-1-(3-氯苯基)吡唑-3,5-二甲酸O-5-第三丁基O-3-乙酯(770 mg，1.60 mmol)於1,4-二噁烷(4 mL)中之溶液中添加含4M HCl之1,4-二噁烷(12 mL，48.0 mmol)。在rt下攪拌48 h後，使溶劑蒸發，得到產物(600 mg，100%產率)。

【1585】 $[M+H]^+$ = 324.2/326。

【1586】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.14及1.34 (3H, t, J = 7.1 Hz), 4.22及4.36 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.41 - 4.48 (2H, m), 7.43 - 7.50 (1H, m), 7.54 - 7.61 (1H, m), 7.60 - 7.63 (1H, m), 7.64 -7.68 (1H, m), 8.20 - 8.25 (3H, m)

1-(3-氯苯基)-6-側氧基-4,5-二氫吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲酸乙酯



【1587】 向4-(胺基甲基)-2-(3-氯苯基)-5-乙氧羰基-吡唑-3-甲酸鹽酸鹽(560 mg，1.55 mmol)於無水MeCN (70 mL)中之懸浮液中添加1-甲基咪唑(0.62 mL，7.77 mmol)及TCFH (567 mg，2.02 mmol)，且將混合物在rt下攪拌3 h。使溶劑蒸發且將殘餘物溶解於EtOAc (70 mL)中。此溶液用飽和$NaHCO_3$ (aq) (50 ml)及鹽水(50 ml)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，5-100% EtOAc/異己烷)得到1-(3-氯苯基)-6-側氧基-4,5-二氫吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲酸乙酯(372 mg)，以及已攜帶之非

所需區域異構物2-(3-氯苯基)-6-側氧基-4,5-二氫吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲酸乙酯(176 mg)。

1-(3-氯苯基)-6-側氧基-4,5-二氫吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲酸乙酯

【1588】 $[M+H]^+$ = 306.2/308.2。

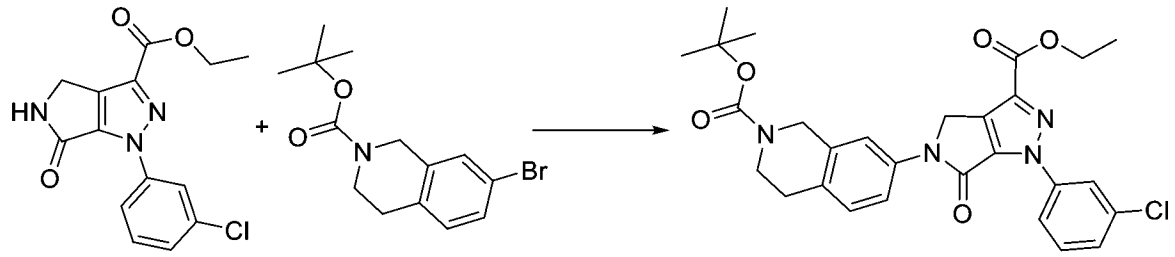
【1589】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 4.35 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.41 (2H, d, J = 1.2 Hz), 7.49 (1H, m), 7.61 (1H, t, J = 8.1 Hz), 8.24 (1H, m), 8.45 (1H, t, J = 2.0 Hz), 9.04 (1H, s)

2-(3-氯苯基)-6-側氧基-4,5-二氫吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲酸乙酯

【1590】 $[M+H]^+$ = 306.1/308.0

【1591】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.20 (3H, t, J = 7.1 Hz), 4.20 (2H, q, J = 7.1 Hz), 4.43 (2H, d, J = 1.1 Hz), 7.55 - 7.59 (2H, m) ,7.60 - 7.64 (1H, m), 7.76 - 7.78 (1H, m), 8.77 (1H, s)

7-[2-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-6-側氧基-4H-吡咯并[3,4-c]吡唑-5-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯



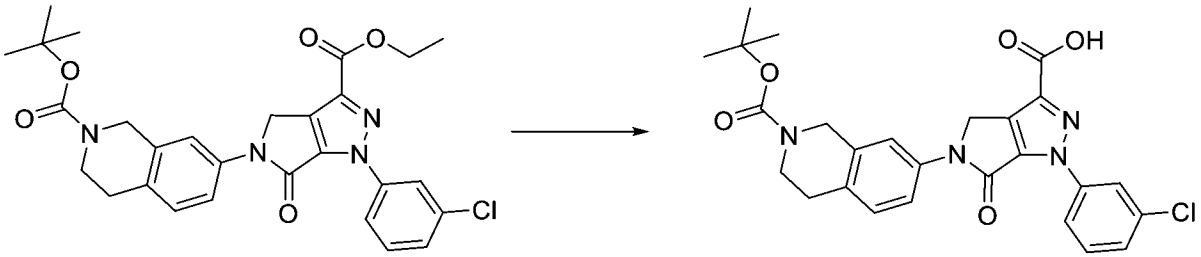
【1592】 用N_2 (g)吹掃1-(3-氯苯基)-6-側氧基-4,5-二氫吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲酸乙酯(175 mg，0.572 mmol)及7-溴-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(250 mg，0.801 mmol)於無水1,4-二噁烷(5.5 mL)中之溶液持續5 min。添加磷酸三鉀(365 mg，1.72 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷二胺(33 mg，0.23 mmol)及最終Cu(I)I (22 mg，0.11 mmol)。關閉系統且在100℃下攪拌20 h。經由Celite®過濾該懸

浮液且用EtOAc (150 mL)洗滌。用飽和$NaHCO_3$ (aq) (50 ml)及鹽水(50 ml)洗滌合併之濾液，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，10-60% EtOAc/第三丁基異己烷)得到產物(185 mg，60%產率)。

【1593】 $[M-^tBu+H]^+$ = 481.1/483

【1594】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.24 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.44 (9H, s), 2.78 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.57 (2H, t, J = 5.8 Hz), 4.25 (2H,q, J = 7.1 Hz), 4.55 (2H, s br), 5.07 (2H, s), 7.24 (1H, d, J = 8.5 Hz), 7.55 - 7.66 (4H, m), 7.70 - 7.75 (1H, m), 7.80 - 7.82 (1H, m)

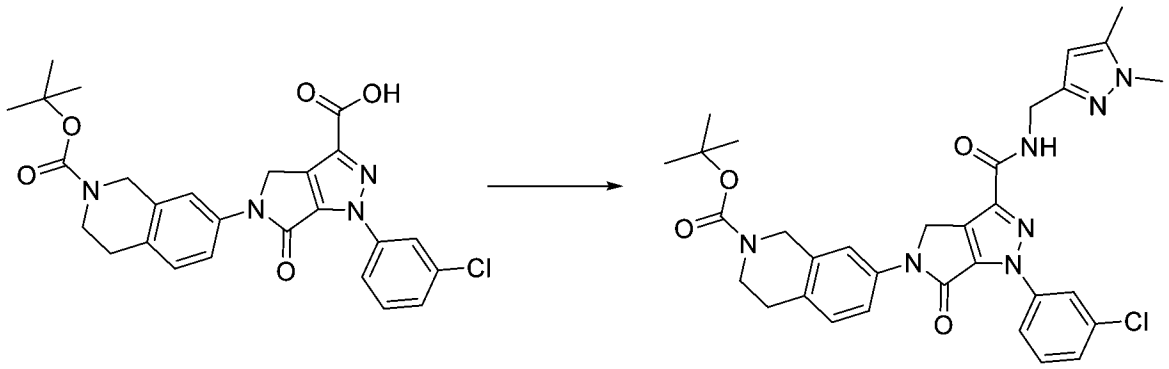
5-(2-第三丁氧羰基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-2-(3-氯苯基)-6-側氧基-4H-吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲酸



【1595】 將7-[2-(3-氯苯基)-3-乙氧羰基-6-側氧基-4H-吡咯并[3,4-c]吡唑-5-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸酯(180 mg，0.33 mmol)溶解於THF (3 mL)及水(1.5 mL)之混合物中。添加$LiOH.H_2O$ (35 mg，0.84 mmol)且將混合物在rt下攪拌18 h。藉由添加1M HCl (aq) (0.9 mL)中和混合物且蒸發，得到產物(228 mg，100%產率)。

【1596】 $[M-^tBu+H]^+$ = 453.1/455.1

7-[2-(3-氯苯基)-3-[(1,5-二甲基吡唑-3-基)甲基胺甲醯基]-6-側氧基-4H-吡咯并[3,4-c]吡唑-5-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯

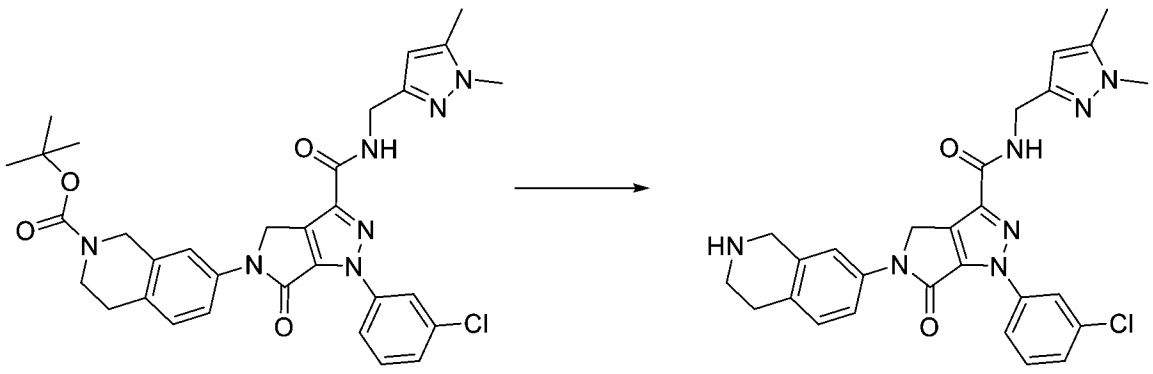


【1597】 向5-(2-第三丁氧羰基-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基)-2-(3-氯苯基)-6-側氧基-4H-吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲酸(170 mg，0.33 mmol)於MeCN (5 mL)中之懸浮液中添加(1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲胺(0.056 mL，0.50 mmol)、1-甲基咪唑(0.19 mL，2.34 mmol)及TCFH (141 mg，0.50 mmol)。在rt下攪拌20 h後，用EtOAc (50 mL)稀釋該溶液，用飽和$NaHCO_3$ (aq) (15 ml)及鹽水(15 ml)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-20% MeOH/DCM)得到產物(142 mg，69%產率)。

【1598】 $[M-^tBu+H]^+$ = 560.1/562.2

【1599】 ^1H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.44 (9H, s), 2.22 (3H, d, J = 0.7 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.57 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.67 (3H,s), 4.30 (2H, d, J = 5.9 Hz), 4.52 - 4.56 (2H, m), 5.09 (2H, s), 5.92 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.24 (1H, d, J = 8.4 Hz), 7.52 - 7.62 (5H,m), 7.69 (1H, dd, J = 8.4, 2.3 Hz), 9.12 (1H, t, J = 5.9 Hz)

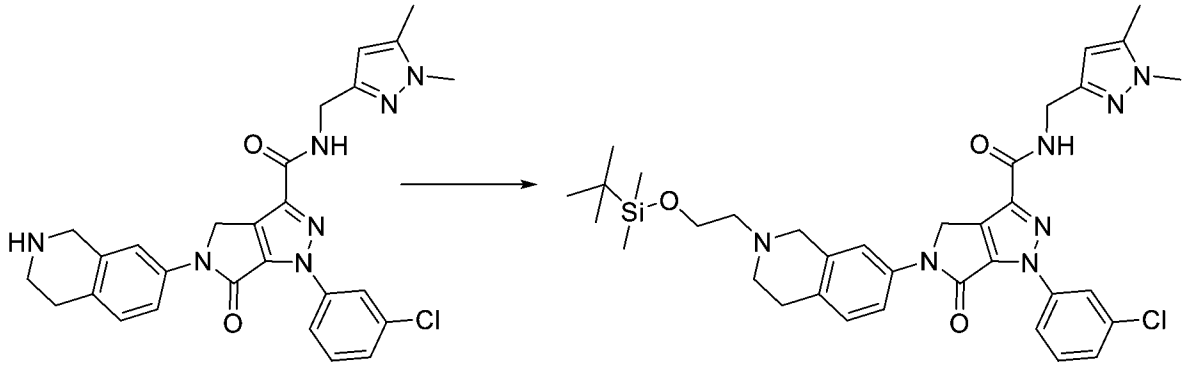
2-(3-氯苯基)-N-[(1,5-二甲基吡唑-3-基)甲基]-6-側氧基-5-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4H-吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲醯胺鹽酸鹽



【1600】 向7-[2-(3-氯苯基)-3-[(1,5-二甲基吡唑-3-基)甲基胺甲醯基]-6-側氧基-4H-吡咯并[3,4-c]吡唑-5-基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-2-甲酸第三丁酯(140 mg，0.23 mmol)於1,4-二噁烷(1.5 mL)中之懸浮液中添加含4M HCl之1,4-二噁烷(1.5 mL，6.00 mmol)。將混合物在rt下攪拌20 h。使溶劑蒸發，得到產物(130 mg，100%產率)。

【1601】 $[M+H]^+$ = 516.2/518.2

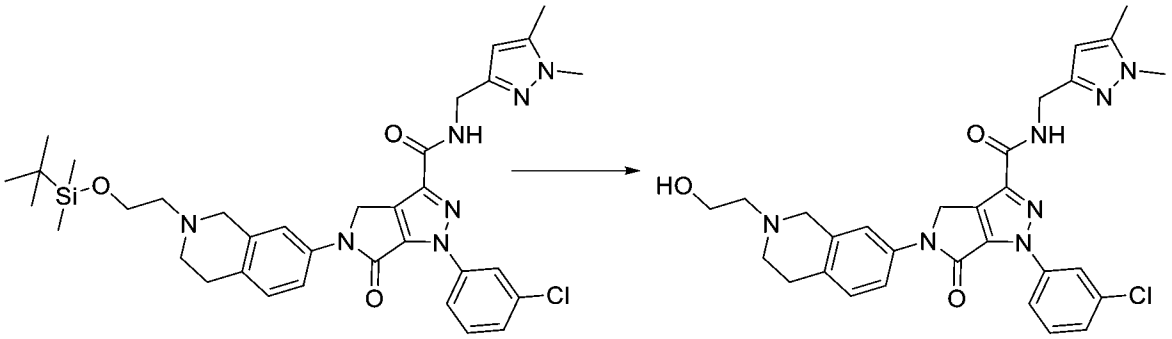
5-[2-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-1-(3-氯苯基)-N-[(1,5-二甲基吡唑-3-基)甲基]-6-側氧基-4H-吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲醯胺



【1602】 向1-(3-氯苯基)-N-[(1,5-二甲基吡唑-3-基)甲基]-6-側氧基-5-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4H-吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲醯胺鹽酸鹽(85 mg，0.16 mmol)於DCM (2 mL)及MeOH (0.50 mL)之混合物中之溶液中添加TEA (0.092 mL，0.66 mmol)及(第三丁基二甲基矽烷氧基)乙醛(0.07 mL，0.33 mmol)且將混合物在rt下攪拌1 h。逐份添加STAB (52 mg，0.25 mmol)且將混合物再攪拌20 h。用DCM (50 mL)稀釋該溶液，用飽和$NaHCO_3$ (aq) (15 ml)及鹽水(15 ml)洗滌，乾燥(Na_2SO_4)且蒸發。急驟層析(矽石，0-20% MeOH/DCM)得到產物(61 mg，55%產率)。

【1603】 $[M+H]^+$ = 674.4/676.6

1-(3-氯苯基)-N-[(1,5-二甲基吡唑-3-基)甲基]-5-[2-(2-羥基乙基)-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-6-側氧基-4H-吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲醯胺



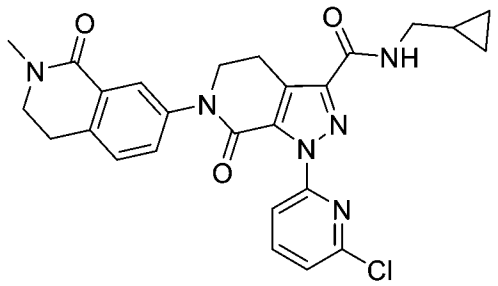
【1604】 向5-[2-[2-[第三丁基(二甲基)矽烷基]氧基乙基]-3,4-二氫-1H-異喹啉-7-基]-1-(3-氯苯基)-N-[(1,5-二甲基吡唑-3-基)甲基]-6-側氧基-4H-吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲醯胺(60 mg，0.0890 mmol)於1,4-二噁烷(1 mL)中之懸浮液中添加含4M HCl之1,4-二噁烷(0.56 mL，2.22 mmol)。在rt下攪拌20 h後，使溶劑蒸發且藉由將殘餘物裝載至離子交換SCX-2管柱上、用MeOH (10 mL)洗滌且用含3M NH_3之MeOH (10 mL)溶離來純化殘餘物。藉由製備型HPLC純化(C18，47-48.4% [MeCN + 0.1% NH_3]/[含10 mM NH_4CO_3之H2O + 0.1% NH_3)進一步純化此殘餘物且凍乾，得到產物(11 mg，21%產率)。

【1605】 $[M+H]^+$ = 560.3/562.3

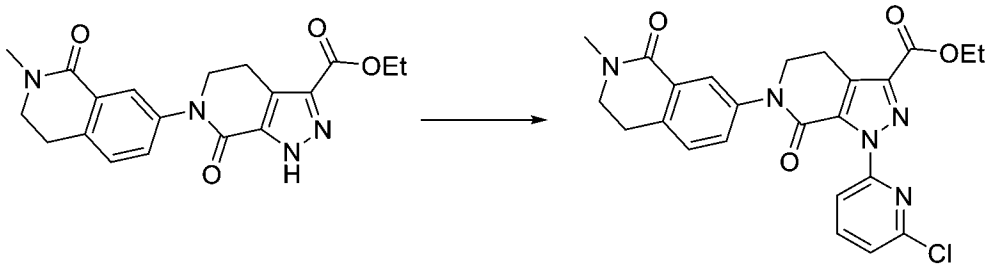
【1606】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.20 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.67 - 2.75 (2H, m), 2.77 - 2.83 (2H, m), 3.58 - 3.64 (4H, m), 3.66 (3H, s), 4.36 (2H, d, J = 6.1 Hz), 4.46 - 4.54 (1H, m), 5.01 (2H, s), 5.96 (1H, s), 7.16 (1H, d, J = 8.4 Hz), 7.46 - 7.55 (2H, m), 7.56 - 7.66 (2H, m), 8.40 - 8.43 (1H, m), 8.53 (1H, t, J = 2.1 Hz), 9.06 (1H, t, J = 6.1 Hz)

實例編號2020

1-(6-氯吡啶-2-基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



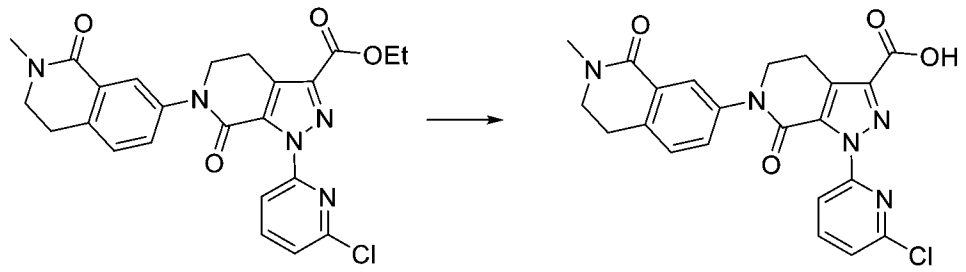
1-(6-氯吡啶-2-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



【1607】 將6-(2-甲基-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯 (100 mg，0.27 mmol)、Cu(I)I (5 mg，0.03 mmol)、K_2CO_3 (79 mg，0.57 mmol)、(1S,2S)-N,N'-二甲基-1,2-環己烷-二胺 (15 mg，0.11 mmol)及3-溴-5-氯吡啶 (500 mg，2.6 mmol)添加至螺旋蓋壓力瓶中。將反應容器密封且用N_2 (g)沖洗且將混合物在110℃下攪拌3天。將反應混合物冷卻至rt，用EtOAc (50 mL)稀釋且經由Celite®過濾，用EtOAc (3 x 10 mL)洗滌。濃縮濾液且經由急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/Pet. 醚，接著0-20% MeOH/EtOAc)純化，得到產物 (77 mg，59%產率)。

【1608】 $[M+H]^+$ = 480.1

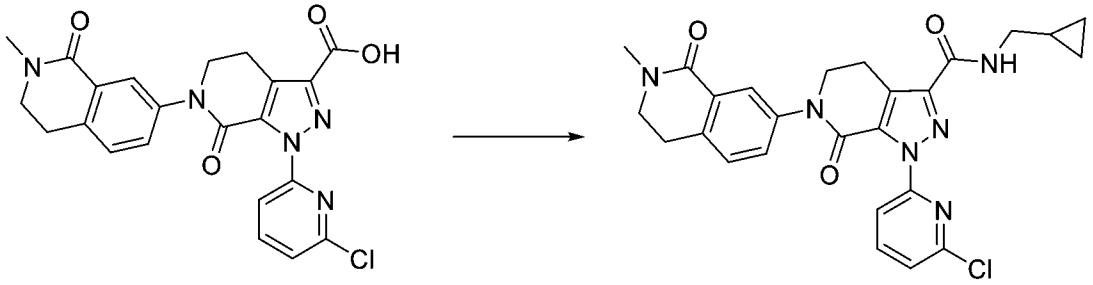
1-(6-氯吡啶-2-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸



【1609】 將1-(6-氯吡啶-2-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯 (77 mg，0.12 mmol) 溶解於THF (10 mL) 及水 (1 mL) 中且用LiOH.H_2O (21 mg，0.36 mmol)處理。將混合物在rt下攪拌隔夜且濃縮，且將殘留物溶解於水(15 mL)中。使用2M HCl (aq.)將該溶液調節至pH 4~5且用4:1 CHCl3/IPA (3 x 20 mL)萃取產物。用鹽水洗滌合併之有機層，乾燥($MgSO_4$)，且濃縮，得到產物(73 mg，100%產率)。

【1610】 $[M+H]^+$ = 452.1

1-(6-氯吡啶-2-基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



【1611】 將HBTU (74 mg，0.19 mmol)及1-(6-氯吡啶-2-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(73 mg，0.16 mmol) 溶解於DCM (5 mL)及TEA (68 μL，0.48 mmol)之混合物中。20 min後，添加環丙基甲胺 (15 μL，0.18 mmol)。將混合物在rt下攪拌隔夜，用DCM (50 mL)稀釋且用飽和$NaHCO_3$ (aq) (30 mL)及水(30 mL)洗滌。用DCM (2 x 50 mL)反向萃取合併之水層。合併有機層，用鹽水(1 x 30 mL)洗滌，乾燥($MgSO_4$)且濃縮。

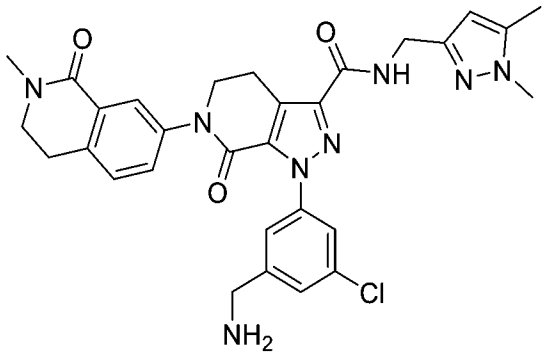
經由製備型HPLC (質量導向，鹼性移動相中之2-60% MeCN/水)純化殘餘物且經由製備型HPLC (質量導向，酸性移動相中之2-60% MeCN/水)進一步純化，得到產物(13 mg，16%產率)。

【1612】 $[M+H]^+$ = 505.1

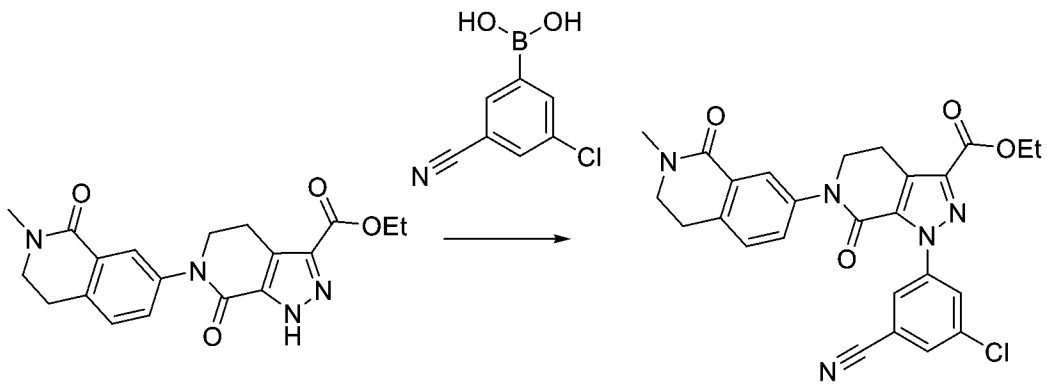
【1613】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.19 - 0.28 (2H, m), 0.35 - 0.46 (2H, m), 0.98 - 1.11 (1H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.02 (3H, s), 3.11 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.10 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.70 (1H, dd, J = 7.9, 0.7 Hz), 7.76 (1H, dd, J = 7.9, 0.7 Hz), 7.82 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.10 (1H, t, J = 7.9 Hz), 8.58 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例2017

1-(3-(胺基甲基)-5-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



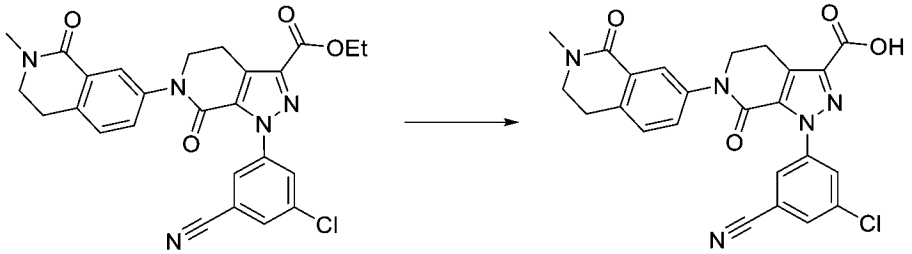
1-(3-氯-5-氰基苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯



【1614】 將6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯 (300 mg，0.81 mmol)及(3-氯-5-氰基苯基)硼酸 (162 mg，0.9 mmol)溶解於DCM (10 mL)中。添加吡啶 (66 μL，0.81 mmol)及 $Cu(II)(OAc)_2.H_2O$ (179 mg，0.9 mmol)且將混合物在40℃下攪拌4天。將混合物冷卻至rt，用EtOAc (50 mL)稀釋且經由Celite®過濾，用EtOAc (3 x 10 mL)洗滌。濃縮濾液，且經由急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/Pet. 醚，接著0-20% MeOH/EtOAc)純化殘餘物，得到產物 (159 mg，39%產率)。

【1615】 $[M+H]^+ = 504.1$

1-(3-氯-5-氰基苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸

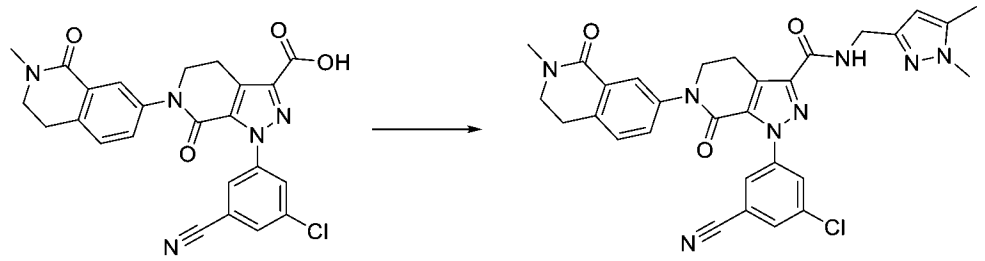


【1616】 將1-(3-氯-5-氰基苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯 (159 mg，0.32 mmol)溶解於THF (10 mL)及水 (1 mL)中且用$LiOH.H_2O$ (54 mg，0.95 mmol)處理。將混合物在rt下攪拌隔夜，濃縮且溶解於水(15 mL)中。使用2M HCl (aq)將混合物調節至

pH 4-5且用4:1 $CHCl_3$/IPA (3 x 20 mL)萃取產物。用鹽水洗滌合併之有機層，乾燥($MgSO_4$)且濃縮，得到產物 (147 mg，98%產率)。

【1617】 $[M+H]^+$ = 476.0

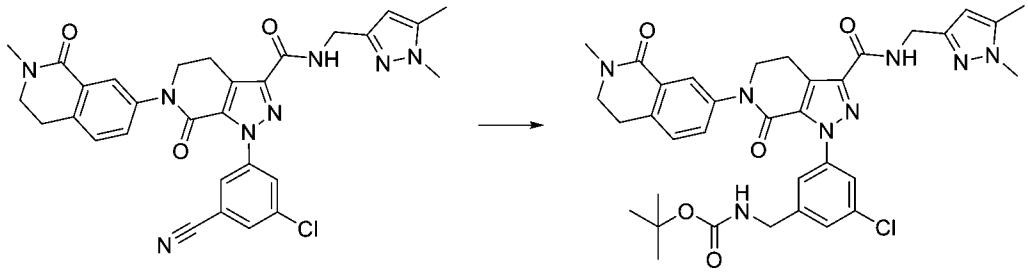
1-(3-氯-5-氰基苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



【1618】 將1-(3-氯-5-氰基苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸 (74 mg，0.16 mmol) 及HBTU (71 mg，0.19 mmol) 溶解於DCM (5 mL) 及TEA (65 μL，0.47 mmol)之混合物中。20 min後，添加(1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲胺 (21 mg，0.17 mmol)，將混合物在rt下攪拌隔夜，用DCM (50 mL)稀釋且用飽和$NaHCO_3$ (30 mL)及水(30 mL)洗滌。用DCM (2 x 50 mL)反向萃取合併之水層。合併有機層，用鹽水(30 mL)洗滌，乾燥($MgSO_4$)，濃縮且經由急驟層析(矽石，0-100% EtOAc/Pet. 醚，接著0-20% MeOH/EtOAc)純化，得到產物(49 mg，54%產率)。

【1619】 [M+H]+ = 583.2

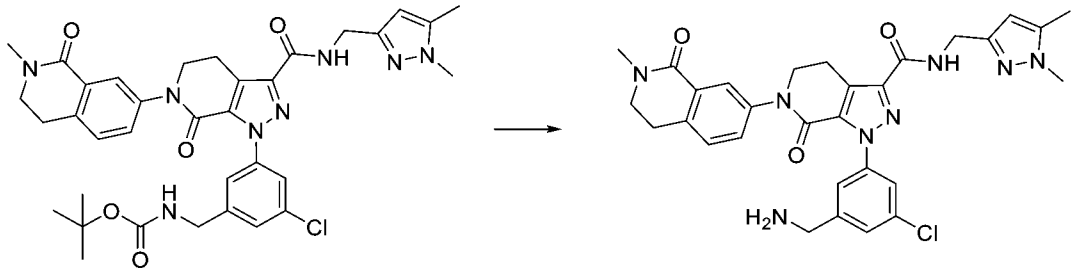
(3-氯-5-(3-(((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)胺甲醯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-1-基)苄基)胺基甲酸第三丁酯



【1620】 將1-(3-氯-5-氰基苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺(49 mg，0.08 mmol)溶解於MeOH (10 mL)中且在冰/水浴中冷卻。添加Boc_2O (37 mg，0.17 mmol)及$NiCl_2.6H_20$ (2 mg)且將混合物攪拌10 min。逐份添加$NaBH_4$ (16 mg，0.42 mmol)，同時繼續在冰/水浴中冷卻。將混合物加溫至rt且攪拌隔夜，之後將混合物在冰/水浴中冷卻且用$NiCl_2.6H_20$ (2 mg)及$NaBH_4$ (6 mg，0.17 mmol)再處理。將混合物在rt下攪拌4 h，接著添加二伸乙基三胺 (9 μL，0.08 mmol)。將混合物攪拌30 min，濃縮且用EtOAc (20 mL)、水(10 mL)及飽和$NaHCO_3$ (aq) (10 mL)稀釋。分離各層且用EtOAc (2 x 20 mL)反向萃取水層。用鹽水(10 mL)洗滌合併之有機層，乾燥($MgSO_4$)且濃縮，得到產物(36 mg，31%產率)。

【1621】 $[M+H]^+ = 688.1$

1-(3-(胺基甲基)-5-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



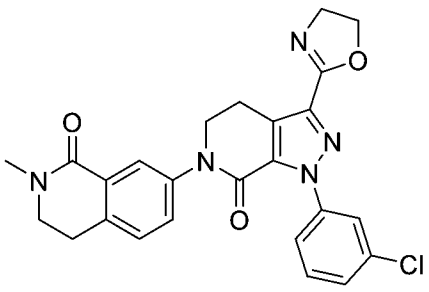
【1622】 將(3-氯-5-(3-(((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)胺甲醯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-1-基)苄基)胺基甲酸第三丁酯(36 mg，0.03 mmol)溶解於DCM (2 mL)中。添加TFA (1 mL，13.1 mmol)且將混合物在rt下攪拌30 min，濃縮，溶解於MeOH (2 mL)中且裝載至SCX樹脂上。用MeOH (30 mL)洗滌樹脂且用含2M NH_3之MeOH (30 mL)溶離產物。濃縮該溶液，經由製備型HPLC (質量導向，鹼性移動相中之2-60% MeCN/H2O)純化且接著經由製備型HPLC (質量導向，酸性移動相中之2-60% MeCN/H2O)進一步純化，得到產物之甲酸鹽(14 mg，83%產率)。

【1623】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 2.19 (3H, s), 2.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.02 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.64 (3H, s), 3.80 (2H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.1 Hz), 5.94 (1H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.52 (1H, t, J = 1.8 Hz), 7.59 (1H, t, J = 1.7 Hz), 7.64 (1H, t, J = 2.0 Hz), 7.82 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.31 (1H, s), 8.64 (1H, t, J = 6.1 Hz) 未觀察到2個NH及1個甲酸OH質子

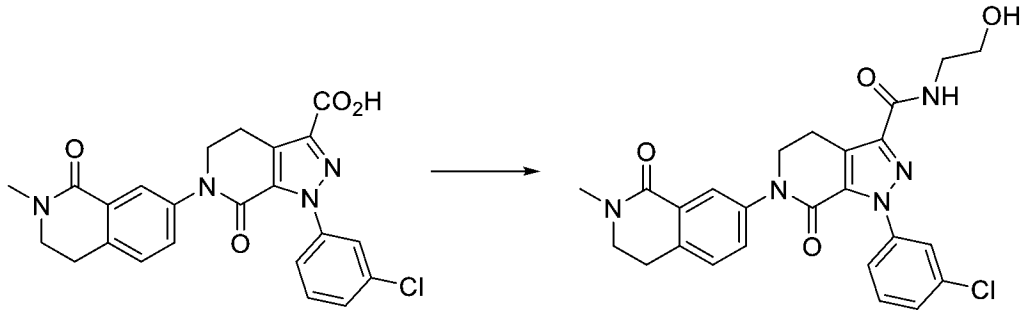
【1624】 $[M+H]^+$ = 587.2

實例編號1353

7-(1-(3-氯苯基)-3-(4,5-二氫噁唑-2-基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮



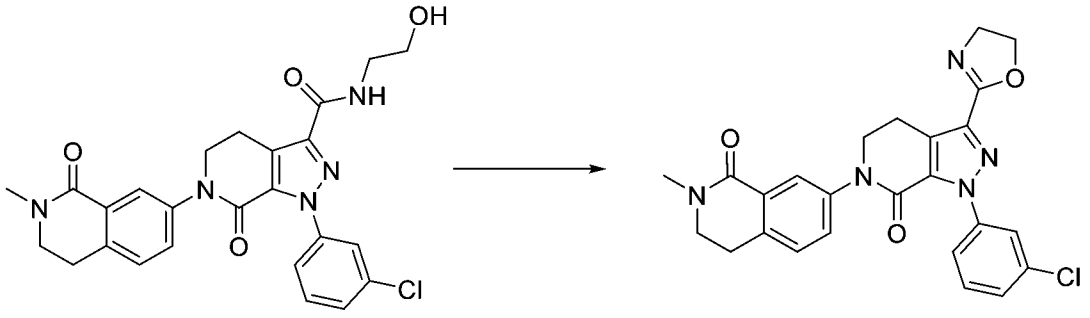
1-(3-氯苯基)-N-(2-羥基乙基)-6-(2-甲基-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-3a,4,5,7a-四氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



【1625】 在0℃下將氯甲酸異丁酯(20 μL，0.152 mmol)添加至1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-3a,4,5,7a-四氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(60 mg，0.132 mmol)及4-甲基嗎啉(22 μL，0.200 mmol)於DCM (1.5 mL)中之混合物中。添加 2-胺基乙醇(9 μL，0.15 mmol)且將混合物升至rt且攪拌2 h且用水(2 mL)稀釋。濃縮混合物且藉由急驟管柱層析(矽石，0-30 % MeOH/EtOAc)純化以提供產物(60 mg，91%)。

【1626】 $[M+H]^+$ = 497.0

7-[1-(3-氯苯基)-3-(4,5-二氫噁唑-2-基)-7-側氧基-3a,4,5,7a四氫吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1-酮



【1627】 在0℃下將TEA (72 μL，0.52 mmol)添加至4-甲基苯磺醯氯(30 mg，0.157 mmol)及DMAP (12 mg，0.098 mmol)於DCE (1.5 mL)中之混合物中，且攪拌10 min。添加含1-(3-氯苯基)-N-(2-羥基乙基)-6-(2-甲基-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-

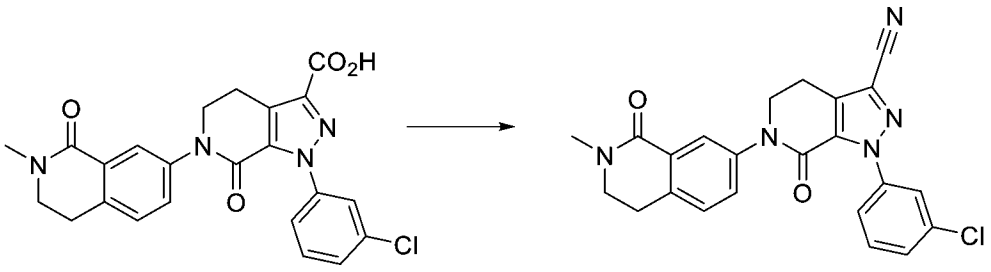
基)-7-側氧基-3a,4,5,7a-四氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺(60 mg，0.12 mmol)之DCE (1.5 mL)且將混合物升至rt且攪拌24 h。將混合物在60℃下攪拌2 h且用水(2 mL)稀釋。用9:1 DCM/MeOH (3 x 15 mL)萃取水相，乾燥($MgSO_4$)，過濾，且濃縮。藉由製備型HPLC (UV導向，34-44% MeCN/10 mM $(NH_4)HCO_3$ (aq)，歷經12 min)純化且凍乾，提供產物(11.5 mg，20%)。

【1628】 $[M+H]^+$ = 476.5

【1629】 ^{1}H NMR (500 MHz, DMSO-d6) δ 2.98 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 3.03 (s, 3H), 3.20 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.55 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 4.00 (t, J = 9.6 Hz, 2H), 4.08 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 4.40 (t, J = 9.5 Hz, 2H), 7.32 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.46 (dd, J = 8.0, 2.4 Hz, 1H), 7.48 – 7.53 (m, 2H), 7.57 – 7.61 (m, 1H), 7.72 – 7.76 (m, 1H), 7.83 (d, J = 2.4 Hz, 1H)

實例編號1388

1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲腈



【1630】 在rt下將T3P (267 μL，0.0998 mmol)添加至含1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸(40 mg，0.089 mmol)、2-甲基丙-2-胺(28 μL，0.27 mmol)及TEA (37 μL，0.27 mmol)之EtOAc (3 mL)中。將混合物在65℃下攪拌30 min且濃縮。將殘餘物溶解於$POCl_3$

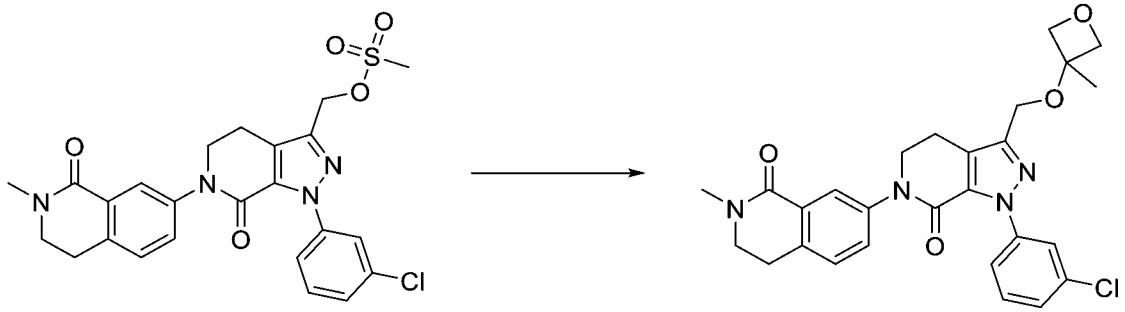
(700 μL，0.749 mmol)中，在70℃下攪拌1 h且濃縮。藉由逆相層析(C18，10-15% MeCN/10 mM $(NH_4)HCO_3$(aq))，接著藉由自動化製備型HPLC (UV導向，67-77% MeCN/10 mM $(NH_4)HCO_3$(aq)，歷經11 min)純化此殘餘物，得到產物(10.6 mg，28%)。

【1631】 $[M+H]^+$ = 432.5

【1632】 ^{1}H NMR (400 MHz, DMSO-d6) δ 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.16 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.10 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.41 – 7.48 (1H, m), 7.51 – 7.61 (2H, m), 7.61 – 7.67 (1H, m), 7.77 – 7.86 (2H, m)

實例編號1354

7-(1-(3-氯苯基)-3-(((3-甲基氧雜環丁烷-3-基)氧基)甲基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮



【1633】 在rt下將NaH (60%分散於油中，23 mg，0.58 mmol)添加至含3-甲基氧雜環丁烷-3-醇(52 mg，0.58 mmol)之無水DMF (2 mL)中且在80℃下攪拌1 h。同時，在rt下攪拌TBAI (43 mg，0.12 mmol)及甲烷磺酸(1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-基)甲酯(30 mg，0.058 mmol)於DMF (2 mL)中之混合物持續1 h。合併該等溶液且在80℃下攪拌10 min且接著冷卻至0℃。添加水(3 mL)且濃縮混合物。藉由急驟層析

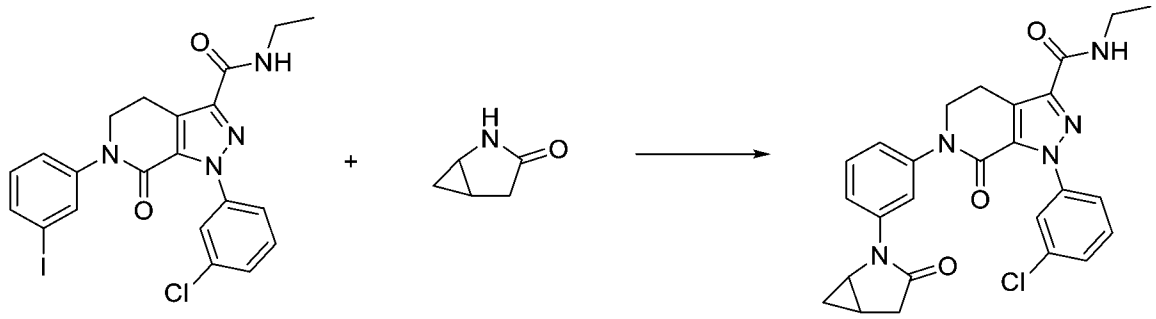
(矽石，0-30% MeOH/EtOAc)，接著藉由自動化製備型HPLC (UV導向，39-49% MeCN/10 mM $(NH_4)HCO_3$ (aq))純化且凍乾，得到產物(3.62 mg，12%產率)。

【1634】 $[M+H]^+$ = 507.5

【1635】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 500 MHz) δ 1.57 (3H, s), 2.98 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.02 – 3.06 (5H, m), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.33 (2H, d, J = 6.8 Hz), 4.56 (2H, s), 4.59 (2H, d, J = 6.5 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.43 – 7.50 (3H, m), 7.53 – 7.57 (1H, m), 7.65 – 7.69 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz)

實例編號1367

1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-(3-側氧基-2-氮雜雙環[3.1.0]己-2-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



【1636】 用N_2 (g)吹掃具有Cu(I)I (11 mg，0.06 mmol)、K_3PO_4 (248 mg，1.15 mmol)、1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-碘苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺(150 mg，0.29 mmol)、2-氮雜雙環[3.1.0]己-3-酮(70 mg，0.72 mmol)及1,4-二噁烷(5 mL)之壓力瓶持續5 min。添加N,N'-二甲基乙二胺(16 uL，0.12 mmol)，在rt下用N_2 (g)吹掃該反應持續5 min，接著在110℃下攪拌4 h。將混合物冷卻且經由Celite®過濾，相繼用EtOAc (3 x 15 mL)、DCM (3 x 15 mL)洗滌。濃縮濾液，且藉由自動化製備型HPLC (質量導向，在2.5%甲酸/水之酸性移動相中5-95% MeCN/水)純化殘餘物，得到產物(100 mg，71%產率)。

【1637】 [M+H]+ = 490.1

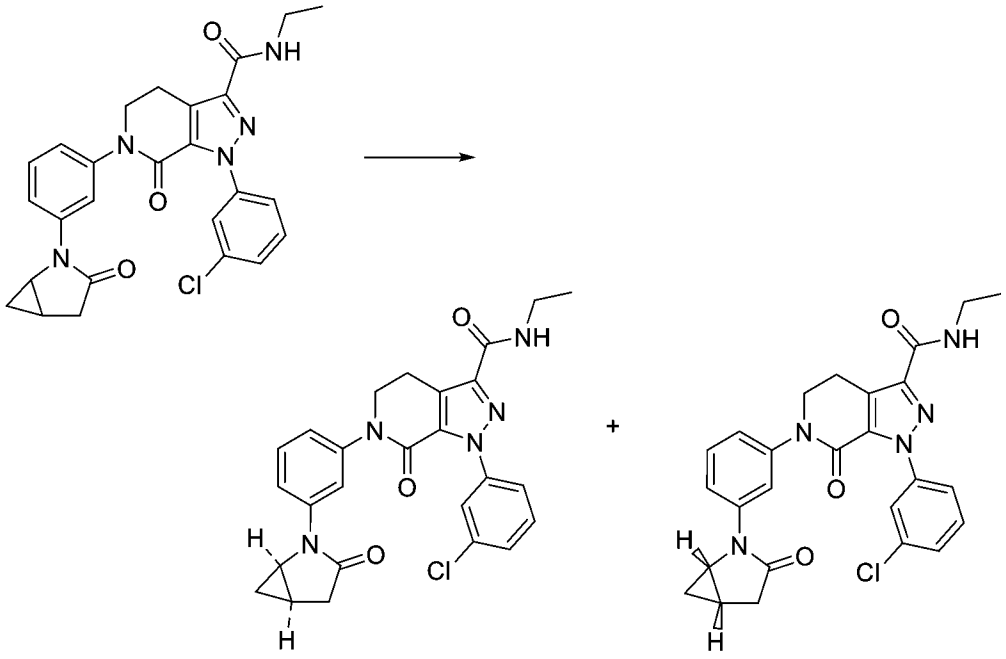
【1638】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.47 (1H, td, J = 5.3, 2.3 Hz), 1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.55 - 1.62 (1H, m), 2.97 (1H, dd, J = 18.2, 7.3 Hz), 3.25 (4H, dt, J = 26.8, 6.7 Hz), 3.55 (1H, t, J = 6.0 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.15 (1H, ddd, J = 8.0, 2.1, 1.0 Hz), 7.41 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.46 - 7.58 (3H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.69 (1H, t, J = 2.0 Hz), 7.79 (1H, dt, J = 2.4, 1.2 Hz), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz) 2H由DMSO峰遮蔽

實例編號1407及1408

1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-((1R*,5R*)-3-側氧基-2-氮雜雙環[3.1.0]己-2-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺(實例1407)

及

1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-((1S*,5S*)-3-側氧基-2-氮雜雙環[3.1.0]己-2-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺(實例1408)



【1639】 將1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-(3-側氧基-2-氮雜雙環[3.1.0]己-2-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺(95 mg，0.19 mmol)溶解於EtOH中至12.5 mg/mL且藉由Phenomenex Lux Cellulose-1管柱上之SFC (25:75 EtOH:CO_2 (0.2% v/v NH_3))純化。接著使每種鏡像異構物之合併部分蒸發且凍乾，得到任意指派之鏡像異構物：

【1640】 1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-((1R*,5R*)-3-側氧基-2-氮雜雙環[3.1.0]己-2-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺(22 mg，23%產率，98% ee)。

【1641】 $[M+H]^+$= 490.1

【1642】 ^{1}H NMR (DMSO-d_6, 400 MHz) δ 0.46 (1H, td, J = 5.3, 2.3 Hz), 1.04 - 1.08 (1H, m), 1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.54 - 1.61 (1H, m), 2.46 (1H, d, J = 18.2 Hz), 2.96 (1H, dd, J = 18.2, 7.3 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.28 (2H, dd, J = 7.3, 6.0 Hz), 3.54 (1H, t, J = 6.0 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.13 - 7.17 (1H, m), 7.41 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.46 - 7.57 (3H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.69 (1H, t, J = 2.1 Hz), 7.77 - 7.80 (1H, m), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)

【1643】 1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-((1S*,5S*)-3-側氧基-2-氮雜雙環[3.1.0]己-2-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺(26 mg，27%產率，95.3% ee)。

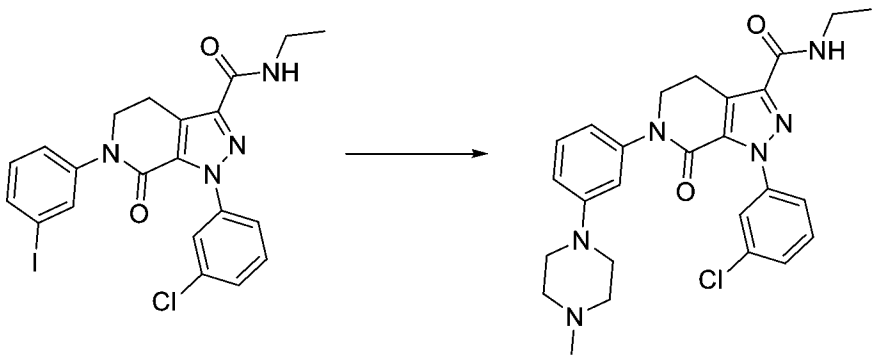
【1644】 $[M+H]^+$= 490.1

【1645】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 0.46 (1H, td, J = 5.2, 2.2 Hz), 1.03 - 1.08 (1H, m), 1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.53 - 1.63 (1H, m), 2.46 (1H, d, J = 18.1 Hz), 2.96 (1H, dd, J = 18.2, 7.3 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.28 (2H, dd, J = 7.4, 6.1 Hz), 3.55

(1H, t, J = 6.0 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.12 - 7.17 (1H, m), 7.41 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.47 - 7.57 (3H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.69 (1H, t, J = 2.1 Hz), 7.79 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.46 (1H, t, J = 6.0 Hz)

實例編號1423

1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-(4-甲基哌嗪-1-基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺



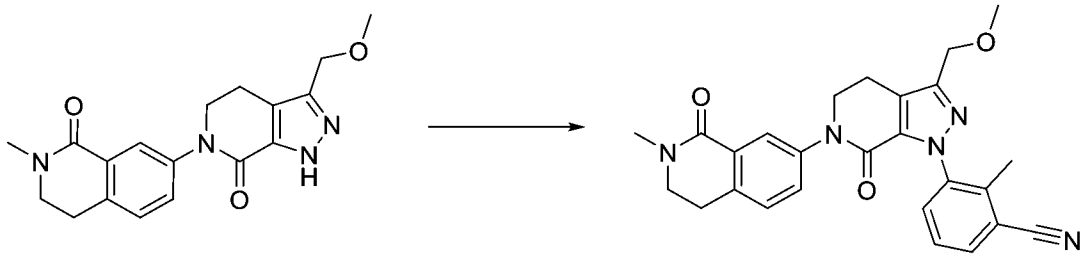
【1646】 將1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-碘苯基)-7-側氧基-4,5-二氫吡唑并[5,4-c]吡啶-3-甲醯胺(50 mg，0.08 mmol)、1-甲基哌嗪(12 mg，0.12 mmol)及NaO^{t}Bu (22 mg，0.23 mmol)懸浮於1,4-二噁烷(2 mL)中。用N_2 (g)吹掃混合物持續5 min，接著添加RuPhos (7 mg，0.02 mmol)及RuPhos Pd G4 (7 mg，0.01 mmol)。用N_2 (g)再吹掃混合物持續5 min且在110℃下加熱18 h。將混合物冷卻至rt，用EtOAc (30 mL)及水(30 mL)稀釋。用EtOAc (3 x 20 mL)再萃取水層且用鹽水(10 mL)洗滌合併之有機物，過濾且濃縮。藉由自動化製備型HPLC (質量導向，在2.5%甲酸/水之酸性移動相中5-95% MeCN/水)進行純化。將產物溶解於MeOH (5 mL)中，傳遞通過固體支撐之HCO_3樹脂濾筒，且用MeOH (3 x 5 mL)沖洗，得到產物(19 mg，50%產率)。

【1647】 [M+H]+ = 493.4

【1648】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 400 MHz) δ 1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.21 (3H, s), 2.43 (4H, t, J = 5.0 Hz), 3.12 (4H, dd, J = 5.1, 5.1 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.23 - 3.30 (2H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.73 – 6.76 (1H, m), 6.83 (1H, dd, J = 8.2, 2.4 Hz), 6.90 (1H, dd, J = 2.2, 2.2 Hz), 7.21 (1H, dd, J = 8.1, 8.1 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.60 - 7.63 (1H, m), 7.74 - 7.80 (1H, m), 8.45 (1H, t, J = 5.9 Hz)

實例編號2038

3-(3-(甲氧基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-1-基)-2-甲基苯甲腈



【1649】 在rt下將3-碘-2-甲基-苯甲腈(97.1 mg，0.280 mmol)添加至7-[3-(甲氧基甲基)-7-側氧基-4,5-二氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基]-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1-酮(40 mg，0.112 mmol)、K_3PO_4 (54 mg，0.249 mmol)、BFMO (9.7 mg，0.038 mmol)及Cu_2O (8.6 mg，0.059 mmol)於DMSO (2 mL)中之混合物中。將混合物密封且在130℃下攪拌16 h。過濾混合物且濃縮。藉由自動化製備型HPLC (UV導向，30-40% MeCN/10 mM $(NH_4)HCO_3$(aq)，歷經8 min)純化且凍乾，得到產物(25 mg，49%產率)。

【1650】 $[M+H]^+$ = 456.7

【1651】 ^{1}H NMR (DMSO-d6, 500 MHz) δ 2.19 (3H, s), 2.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.04 (2H, d, J = 6.7 Hz), 3.32 (3H, s), 3.53 (2H, t , J = 7.1, 6.2 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.8 Hz), 4.52 (2H, s), 7.29 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.41 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.49

(1H, t, J = 7.9), 7.67 (1H, dd, J = 8.0, 1.3 Hz), 7.77 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.91 (1H, dd, J = 7.8, 1.3 Hz)

實例

表5：化合物名稱

實例編號	名稱
1001	N-苄基-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1002	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1003	1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-N-(吡啶-3-基甲基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1004	N-苄基-1-(3-氯苯基)-N-甲基-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1005	N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1006	1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸苄酯
1007	1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯
1008	(S)-1-(3-氯苯基)-N-(2-羥基-1-苯基乙基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1009	1-(3-氯苯基)-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-3-(吡咯啶-1-羰基)-1,4,5,6-四氫-7H-吡唑并[3,4-c]吡啶-7-酮
1010	1-(3-氯苯基)-N-環己基-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1011	1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1012	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1013	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯
1014	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1015	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(吡啶-3-基甲基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1016	N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-((1-甲基哌啶-4-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1017	N-苄基-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-(3-(吡咯啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1018	N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-(3-(嗎啉基甲基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑

	并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1019	N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-(2-(環丙基甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1020	N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-(2-(環戊基甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1021	N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-(2-乙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1022	N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-(2-異丙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1023	1-(3-氯苯基)-N-(環己基甲基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1024	(S)-1-(3-氯苯基)-N-(2-羥基-1-苯基乙基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1025	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-((四氫呋喃-2-基)甲基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1026	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-((四氫呋喃-3-基)甲基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1027	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-((四氫-2H-哌喃-4-基)甲基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1028	N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基異吲哚啉-5-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1029	N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-(2-環丙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1030	N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-2,3,4,5-四氫-1H-苯并[c]氮雜卓-8-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1031	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-乙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1032	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(氧雜環丁烷-3-基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1033	6-(2-(2-胺基-2-側氧基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1034	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(7-甲基-5,6,7,8-四氫-1,7-萘啶-2-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1035	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-異丙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1036	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(環丙基甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1037	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-甲氧基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1038	N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-(3-((3-甲基吡咯啶-1-基)甲基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1039	N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-(3-((2-甲基吡咯啶-1-基)甲基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1040	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(6-甲基-5,6,7,8-四氫-1,6-萘啶-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

1041	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(氧雜環丁烷-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1042	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(四氫呋喃-3-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1043	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(四氫-2H-哌喃-4-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1044	1-(3-氯苯基)-N-環戊基-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1045	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(氧雜環丁烷-2-基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1046	1-(3-氯苯基)-N-((5-(羥基甲基)-2-氧雜雙環[3.1.1]庚-1-基)甲基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1047	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(氧雜環丁烷-3-基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1048	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2,5-二甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1049	1-(3-氯苯基)-N-((1-(羥基甲基)環丁基)甲基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1050	1-(3-氯苯基)-N-((1-(羥基甲基)-2-氧雜雙環[2.1.1]己-4-基)甲基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1051	(S)-1-(3-氯苯基)-6-(2-乙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(2-羥基-1-苯基乙基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1052	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(2-丙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1053	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(3-甲氧基丙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1054	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-乙基-6-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1055	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1056	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(7-乙基-5,6,7,8-四氫吡啶并[3,4-d]嘧啶-2-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1057	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(2-側氧基哌啶-4-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1058	1-(3-氯苯基)-N-(2-環丙基-2-羥基乙基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1059	6-(2-(第二丁基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1060	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(1-甲氧基丙-2-基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1061	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-乙氧基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1063	(R)-1-(3-氯苯基)-N-(2-羥基-1-苯基乙基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-

	基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1064	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(4-甲基四氫-2H-哌喃-4-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1065	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((3-甲基-1H-吡唑-5-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1066	1-(3-氯苯基)-3-(甲氧基甲基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1,4,5,6-四氫-7H-吡唑并[3,4-c]吡啶-7-酮
1067	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-3-(嗎啉-4-羰基)-1,4,5,6-四氫-7H-吡唑并[3,4-c]吡啶-7-酮
1068	1-(3-氯苯基)-N-(呋喃-3-基甲基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1069	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-3-(甲氧基甲基)-1,4,5,6-四氫-7H-吡唑并[3,4-c]吡啶-7-酮
1070	(S)-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基丙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1071	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(2-(2,2,2-三氟乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1072	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(3-(吡咯啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1073	6-(3-((3-氮雜雙環[3.1.0]己-3-基)甲基)苯基)-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1074	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1075	N-(7-氧雜雙環[2.2.1]庚-2-基)-1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1076	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(四氫-2H-哌喃-4-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1077	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((3-甲基-1H-吡唑-5-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1078	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(吡啶-3-基甲基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1079	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-乙基-6-氟-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1080	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(3-氟丙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1081	6-(2-(2-乙醯胺基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1082	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-乙基-4,4-二甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1083	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-(甲基磺醯胺基)乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1084	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-(3-甲基脲基)乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1085	1-(3-氯苯基)-6-(2-乙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(四氫-2H-哌喃-4-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

1086	1-(3-氯苯基)-6-(2-乙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((3-甲基-1H-吡唑-5-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1087	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(3-羥基丙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1088	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((1-甲基-1H-吡唑-5-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1089	N-((1H-吡唑-5-基)甲基)-1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1090	(S)-1-(3-氯苯基)-6-(2-乙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(四氫呋喃-3-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1091	(R)-1-(3-氯苯基)-6-(2-乙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(四氫呋喃-3-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1092	1-(3-氯苯基)-N-(4,4-二甲基四氫呋喃-3-基)-6-(2-乙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1093	N-(3-氧雜雙環[3.1.0]己-6-基)-1-(3-氯苯基)-6-(2-乙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1094	2-(7-(1-(3-氯苯基)-3-((環丙基甲基)胺甲醯基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-3,4-二氫異喹啉-2(1H)-基)乙酸甲酯
1095	2-(7-(1-(3-氯苯基)-3-((環丙基甲基)胺甲醯基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-3,4-二氫異喹啉-2(1H)-基)乙酸
1096	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基-2-甲基丙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1097	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-((2,2-二氟環丙基)甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1098	6-(2-(2-胺基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1099	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2'-乙基-2',3'-二氫-1'H-螺[環丙烷-1,4'-異喹啉]-7'-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1100	1-(3-氯苯基)-6-(2-(氰基甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1101	(R)-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基丙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1102	1-(3-氯苯基)-6-(2-(環戊基甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1103	1-(3-氯苯基)-6-(2-環丁基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1104	6-(2-((1H-吡唑-5-基)甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1105	1-(3-氯苯基)-N-(呋喃-3-基甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1106	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-((四氫呋喃-3-基)甲基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1107	N-苄基-1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1108	(R)-1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(四

	氫呋喃-3-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1109	1-(3-氯苯基)-N-(呋喃-2-基甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1110	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1111	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((2-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1112	1-(3-氯苯基)-N-(2,2-二甲基四氫呋喃-3-基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1113	(S)-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(1-羥基丙-2-基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1114	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基乙醯基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1115	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(2-(四氫呋喃-3-基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1116	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(2-((四氫呋喃-3-基)甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1117	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(6-乙基-5,6,7,8-四氫-2,6-萘啶-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1118	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(6-(2-羥基乙基)-5,6,7,8-四氫-2,6-萘啶-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1119	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基環戊基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1120	(R)-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(2-((5-側氧基吡咯啶-2-基)甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1121	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-乙基-5-氟-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1122	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(5-氟-2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1123	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(6-氟-2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1124	(S)-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(2-((5-側氧基吡咯啶-2-基)甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1125	1-(3-氯苯基)-6-(6-氟-2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((3-甲基-1H-吡唑-5-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1126	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((5-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1127	1-(3-氯苯基)-N-((3-環丙基-1H-吡唑-5-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1128	1-(3-氯苯基)-N-((4,6-二甲基吡啶-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1129	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1130	1-(3-氯苯基)-N-((3-氟吡啶-2-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

1131	(S)-1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(1-(吡啶-3-基)乙基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1132	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((1-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1133	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((1-甲基-1H-吡唑-4-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1134	1-(3-氯苯基)-6-(6-氟-2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1135	1-(3-氯苯基)-N-((6-甲氧基吡啶-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1136	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((3-甲基吡啶-2-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1137	1-(3-氯苯基)-N-((5-氟吡啶-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1138	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((6-甲氧基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1139	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((6-甲基吡啶-2-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1140	1-(3-氯苯基)-6-(2-乙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1141	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((5-甲氧基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1142	1-(3-氯苯基)-N-((2,2-二氟環丙基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1143	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2'-(2-羥基乙基)-2',3'-二氫-1'H-螺[環丙烷-1,4'-異喹啉]-7'-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1144	1-(3-氯苯基)-6-(2'-(2-羥基乙基)-2',3'-二氫-1'H-螺[環丙烷-1,4'-異喹啉]-7'-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1145	(R)-1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(1-(吡啶-3-基)乙基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1146	1-(3-氯苯基)-N-((1-環丙基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1147	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((6-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1148	(R)-1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-4-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1149	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1150	1-(3-氯苯基)-N-((3-環丙基-1H-吡唑-5-基)甲基)-6-(2-乙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1151	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(噁唑-2-基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1152	(R)-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-4-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

1153	(R)-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-乙基-4-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1154	1-(3-氯苯基)-N-((4-氯吡啶-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1155	N-((4-氯-1-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1156	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((3-(甲氧基甲基)-1H-吡唑-5-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1157	1-(3-氯苯基)-N-((1,4-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1158	(R)-1-(3-氯苯基)-6-(2-乙基-4-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1159	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1160	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((3-甲氧基吡啶-2-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1161	1-(3-氯苯基)-N-((3-氟吡啶-4-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1162	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-((4-(三氟甲基)吡啶-3-基)甲基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1163	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((3-甲基吡啶-4-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1164	1-(3-氯苯基)-N-(2,2-二甲基四氫呋喃-3-基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1165	1-(3-氯苯基)-N-(4-羥基雙環[1.1.1]戊-2-基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1166	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1167	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(異噁唑-4-基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1168	1-(3-氯苯基)-N-((3-甲基-1H-吡唑-5-基)甲基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1169	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-乙基-5-(甲氧基甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1170	1-(3-氯苯基)-N-((3-氯吡啶-2-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1171	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((2-甲基吡啶-4-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1172	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((3-甲氧基吡啶-4-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1173	1-(3-氯苯基)-N-((6-甲氧基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1174	1-(3-氯苯基)-N-((4-氯吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

1175	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-氟乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1176	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-(甲基磺醯基)乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1177	1-(3-氯苯基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1178	1-(3-氯苯基)-N-((1,4-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1179	1-(3-氯苯基)-N-(4-羥基四氫呋喃-3-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1180	1-(3-氯苯基)-N-(2-羥基-1-(四氫呋喃-3-基)乙基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1181	1-(3-氯苯基)-N-((5-甲基-1,3,4-噻二唑-2-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1182	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸
1183	7-(1-(3-氯苯基)-3-(羥基甲基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮
1184	7-(1-(3-氯苯基)-3-(甲氧基甲基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮
1185	1-(3-氯苯基)-N-((3,5-二甲基異噁唑-4-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1186	1-(3-氯苯基)-N-((5-甲氧基-1-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1187	1-(3-氯苯基)-N-(2-羥基-1-(吡啶-3-基)乙基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1188	6-(1-乙醯基吲哚啉-6-基)-1-(3-氯苯基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1189	1-(3-氯苯基)-N-((4,6-二甲基吡啶-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1190	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-6-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1191	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-4-甲氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1192	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-3-側氧基異吲哚啉-5-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1193	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((2-甲基噻唑-5-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1194	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((2-甲基噁唑-5-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1195	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(3-(二甲基胺甲醯基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1196	1-(3-氯苯基)-6-(3-(二甲基胺甲醯基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯

1197	1-(3-氯苯基)-N-(2,2-二甲基四氫呋喃-3-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1198	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-((四氫呋喃-3-基)甲基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1199	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1200	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((5-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1201	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((5-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1202	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(噻嗪-3-基甲基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1203	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(四氫-2H-哌喃-4-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1204	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(噻嗪-3-基甲基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1205	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-6-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1206	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-甲基-3-側氧基異吲哚啉-5-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1207	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(1-甲基-2-側氧基-1,2,3,4-四氫喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1208	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-2H-吡唑-3-基)甲基)-6-(1-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1209	1-(3-氯苯基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-6-(1-側氧基-2-丙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1210	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-6-(1-側氧基-2-丙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1211	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(1-側氧基-2-丙基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1212	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2-二氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1213	1-(3-氯苯基)-N-((5-甲氧基吡啶-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1214	(R)-1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(1-(吡啶-3-基)乙基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1215	(S)-1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(1-(吡啶-3-基)乙基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1216	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1217	1-(3-氯苯基)-N-((1,4-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1218	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(噻嗪-4-基甲基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

1219	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-乙基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1220	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(6-(2-羥基乙基)-5,6,7,8-四氫-2,6-萘啶-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1221	1-(3-氯苯基)-6-(6-(2-羥基乙基)-5,6,7,8-四氫-2,6-萘啶-3-基)-N-((3-甲氧基吡啶-2-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1222	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1223	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(噁唑-4-基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1224	1-(3-氯苯基)-N-((1,4-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-乙基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1225	1-(3-氯苯基)-N-((1,4-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1226	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-5-甲氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1227	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(6-(2-羥基乙基)-5,6,7,8-四氫吡啶并[4,3-c]噠嗪-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1229	1-(3-氯苯基)-6-(6-(2-羥基乙基)-5,6,7,8-四氫吡啶并[4,3-c]噠嗪-3-基)-N-((3-甲氧基吡啶- 2-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1230	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲氧基吡啶-2-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1231	1-(3-氯苯基)-N-((3-環丙基-1H-吡唑-5-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1232	1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸
1233	1-(3-氯苯基)-N-((3-甲氧基吡啶-2-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1234	1-(3-氯苯基)-N-((3-環丙基-1H-吡唑-5-基)甲基)-6-(2-乙基-6-氟-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1235	1-(3-氯苯基)-N-((6-甲氧基吡啶-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1236	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1237	1-(3-氯苯基)-N-((3-環丙基-1H-吡唑-5-基)甲基)-7-側氧基-6-(3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1238	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-2,3,4,5-四氫-1H-苯并[c]氮雜卓-8-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1239	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-2,3,4,5-四氫-1H-苯并[c]氮雜卓-8-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1240	1-(3-氯苯基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-6-(1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

1241	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(1-甲基-2-側氧基-2,3,4,5-四氫-1H-苯并[b]氮雜卓-8-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1242	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(1-甲基-2-側氧基-2,3,4,5-四氫-1H-苯并[b]氮雜卓-8-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1243	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(3-((3-氟吡咯啶-1-基)甲基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1244	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(3-(二甲基胺甲醯基)-4-甲基苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1245	N-((1H-吡唑-3-基)甲基)-1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1246	(S)-N-((1,4-二噁烷-2-基)甲基)-1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1247	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((5-甲基-1H-1,2,4-三唑-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1248	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1249	(R)-N-((1,4-二噁烷-2-基)甲基)-1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1250	1-(3-氯苯基)-N-((1-(羥基甲基)環丙基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1251	1-(3-氯苯基)-N-(4-(羥基甲基)四氫呋喃-3-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1252	1-(3-氯苯基)-N-((3-(羥基甲基)氧雜環丁烷-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1253	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-氟乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1254	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-(2-氟乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1255	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((5-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1256	1-(3-氯苯基)-N-((4,6-二甲基吡啶-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1257	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(1-側氧基-2-((四氫呋喃-3-基)甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1258	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-6-(1-側氧基-2-((四氫呋喃-3-基)甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1259	1-(3-氯苯基)-N-((5-環丙基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲

	醯胺
1260	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-((四氫呋喃-3-基)甲基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1261	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-甲氧基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1262	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-(2-甲氧基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1263	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(3-(吡咯啶-1-羰基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1264	1-(3-氯苯基)-N-((1,3-二甲基-1H-吡唑-5-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1265	1-(3-氯苯基)-N-((3R,4S)-4-甲氧基四氫-2H-哌喃-3-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1266	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(4-甲基四氫-2H-哌喃-4-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1267	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((6-甲基噠嗪-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1268	1-(3-氯苯基)-N-((3,5-二甲基-1H-吡唑-4-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1269	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(3-(N-甲基乙醯胺基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1270	1-(3-氯苯基)-6-(3-(環丙基(甲基)胺甲醯基)苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1271	1-(3-氯苯基)-N-((4-甲氧基吡啶-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1272	7-(1-(3-氯苯基)-3-(嗎啉-4-羰基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮
1273	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(4-(二甲基胺甲醯基)吡啶-2-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1274	1-(3-氯苯基)-N-(((1r,3r)-3-羥基環丁基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1275	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-(3-羥基丙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1276	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-6-(1,3,3-三甲基-2-側氧基吲哚啉-6-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1277	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(1,3,3-三甲基-2-側氧基吲哚啉-6-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1278	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(二甲基胺甲醯基)吡啶-4-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1279	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(5-(二甲基胺甲醯基)吡啶-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1280	1-(3-氯苯基)-N-((4-(羥基甲基)-5-氧雜雙環[2.1.1]己-1-基)甲基)-6-(2-甲基-1-

	側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1281	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(3-(二甲基胺甲醯基)-4-氟苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1282	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((5-甲基噻嗪-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1283	1-(3-氯苯基)-N-((5-(羥基甲基)-2-氧雜雙環[3.1.1]庚-1-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1284	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯
1285	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(3-(2-側氧基哌啶-1-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1286	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(3-(二乙基胺甲醯基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1287	1-(3-氯苯基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-6-(3-(2-側氧基哌啶-1-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1288	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(4-(2-羥基乙基)-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1289	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(4-(2-羥基乙基)-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1290	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-(氧雜環丁烷-3-基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1292	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(1-側氧基-2-((四氫呋喃-2-基)甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1293	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-6-(1-側氧基-2-((四氫呋喃-2-基)甲基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1294	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-2,3,4,5-四氫-1H-苯并[c]氮雜卓-8-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1295	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(4-(二甲基胺甲醯基)噻吩-2-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1296	1-(3-氯苯基)-N-((1-異丙基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1297	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1298	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(5-(二甲基胺甲醯基)噻嗪-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1299	1-(3-氯苯基)-6-(4-(2-羥基乙基)-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1300	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(4,4-二氟-2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

1301	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(6-甲基-5-側氧基-5,6,7,8-四氫-1,6-萘啶-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1302	1-(3-氯苯基)-6-(6-甲基-5-側氧基-5,6,7,8-四氫-1,6-萘啶-3-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1303	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(6-甲基-5-側氧基-5,6,7,8-四氫-1,6-萘啶-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1304	6-(1-乙醯基吲哚啉-6-基)-1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1305	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-2,3,4,5-四氫-1H-苯并[c]氮雜卓-8-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1306	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-2,3,4,5-四氫-1H-苯并[c]氮雜卓-8-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1307	(S)-1-(3-氯苯基)-N-(2-羥基-1-苯基乙基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1308	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((3-甲基吡啶-2-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1309	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((2-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1310	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基噠嗪-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1311	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(3-((2-甲氧基乙基)(甲基)胺甲醯基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1312	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(3-((2-羥基乙基)(甲基)胺甲醯基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1313	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(3-(3-側氧基嗎啉基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1314	6-(1-乙醯基-1,2,3,4-四氫喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1316	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-6-(3-((2-側氧基噁唑啶-3-基)甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1317	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(4-乙基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1318	1-(3-氯苯基)-6-(4-乙基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1319	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(4-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1320	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(4-異丙基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1321	6-(2-(2-胺基-2-側氧基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯

	基)-N-((5-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1322	1-(3-氯苯基)-6-(3-((2-羥基-N-甲基乙醯胺基)甲基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯
1323	1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-(3-(2-側氧基吡咯啶-1-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯
1324	1-(3-氯苯基)-6-(3-(二甲基胺甲醯基)-4-甲氧基苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯
1325	2-(1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺基)-2-(吡啶-3-基)乙酸甲酯
1326	1-(3-氯苯基)-N-((2,4-二甲基吡啶-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1327	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(1-(4-甲基吡啶-3-基)乙基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1328	2-(1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺基)-2-(吡啶-3-基)乙酸
1329	(R)-1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(4-(2-羥基乙基)-3-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1330	2-(7-(1-(3-氯苯基)-3-((環丙基甲基)胺甲醯基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-2(1H)-基)乙酸
1331	2-(7-(1-(3-氯苯基)-3-(((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)胺甲醯基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-2(1H)-基)乙酸
1332	2-(7-(1-(3-氯苯基)-3-(((5-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)胺甲醯基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-1-側氧基-3,4-二氫異喹啉-2(1H)-基)乙酸
1333	6-(2-(2-胺基-2-側氧基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1334	1-(3-氯苯基)-N-甲基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1335	7-(3-(氮雜環丁烷-1-羰基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮
1336	(S)-1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(四氫呋喃-3-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1337	(R)-1-(3-氯苯基)-N-(1-羥基丙-2-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1338	(R)-1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(四氫呋喃-3-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1339	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(氧雜環丁烷-3-基甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1340	1-(3-氯苯基)-N-(2-羥基乙基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1341	(1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-

	四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-羰基)甘胺酸
1342	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(氧雜環丁烷-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1343	7-(1-(3-氯苯基)-3-(異噁唑啶-2-羰基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮
1344	(S)-1-(3-氯苯基)-N-(1-羥基丙-2-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1345	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(甲基磺醯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1346	1-(3-氯苯基)-N-環丁基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1347	1-(3-氯苯基)-N-羥基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1350	1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-(3-(2-側氧基吡啶-1(2H)-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯
1351	(R)-1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(3-(羥基甲基)-4-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1352	1-(3-氯苯基)-6-(4-乙基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-N-((5-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1353	7-(1-(3-氯苯基)-3-(4,5-二氫噁唑-2-基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮
1354	7-(1-(3-氯苯基)-3-(((3-甲基氧雜環丁烷-3-基)氧基)甲基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮
1355	1-(3-氯苯基)-N-((1-環丙基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1356	7-(1-(3-氯苯基)-3-(((4-甲基吡啶-3-基)甲氧基)甲基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮
1357	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((3-甲基吡啶-4-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1358	2-((1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-基)甲氧基)乙酸
1359	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-(1-甲基環丙基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1360	1-(3-氯苯基)-N-(1-(羥基甲基)環丙基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1361	1-(1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺基)環丙烷-1-甲酸
1362	1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-(2-側氧基噁唑啶-3-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1363	1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-(2-側氧基-1,3-氧氮雜己烷-3-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1364	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-(3-甲基-2-側氧基咪唑啶-1-基)苯基)-7-側氧基

	-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1365	1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-(2-側氧基吡咯啶-1-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1366	1-(3-氯苯基)-6-(3-(1,1-二氧橋異噻唑啶-2-基)苯基)-N-乙基-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1367	1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-(3-側氧基-2-氮雜雙環[3.1.0]己-2-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1368	1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-(2-側氧基-3-氮雜雙環[3.1.0]己-3-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1369	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-(4-甲基-5-側氧基-4,6-二氮雜螺[2.4]庚-6-基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1370	1-(3-氯苯基)-6-(1,4-二甲基-2,5-二側氧基-2,3,4,5-四氫-1H-苯并[e][1,4]二氮雜卓-7-基)-N-((5-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1371	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(4-乙基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1372	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(1,4-二甲基-2,5-二側氧基-2,3,4,5-四氫-1H-苯并[e][1,4]二氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1373	(R)-1-(3-氯苯基)-6-(4-(2-羥基乙基)-3-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧雜氮卓-7-基)-N-((5-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1374	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(4-乙基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1375	1-(3-氯苯基)-6-(1,4-二甲基-2,5-二側氧基-2,3,4,5-四氫-1H-苯并[e][1,4]二氮雜卓-7-基)-N-乙基-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1376	1-(3-氯苯基)-6-(4-(3-羥基丙基)-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1377	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(4-(3-羥基丙基)-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1378	1-(3-氯苯基)-N-((5-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-6-(5-側氧基-4-(2,2,2-三氟乙基)-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1379	(S)-1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(4-(2-羥基乙基)-3-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1380	(S)-1-(3-氯苯基)-6-(4-(2-羥基乙基)-3-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧雜氮卓-7-基)-N-((5-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1381	(S)-1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(4-(2-羥基乙基)-3-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧雜氮卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1382	1-(3-氯苯基)-6-(4-(2,2-二氟乙基)-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓

	-7-基)-N-((5-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1383	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(4-(2-(((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)胺基)-2-側氧基乙基)-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1384	1-(3-氯苯基)-N-(2-氟乙基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1385	N-((1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-基)甲基)乙醯胺
1386	3-(1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺基)丙酸
1387	(1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-羰基)-D-丙胺酸
1388	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲腈
1389	1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-(6-側氧基-5-氮雜螺[2.4]庚-5-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1390	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-(3-甲基-2-側氧基四氫嘧啶-1(2H)-基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1391	(1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-羰基)-L-丙胺酸
1392	(R)-1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(4-(2-羥基乙基)-3-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧雜氮卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1393	6-(4-(2-胺基-2-側氧基乙基)-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1394	6-(4-(2-胺基-2-側氧基乙基)-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-N-((4-氯-1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-1-(3-氯苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1395	(S)-1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(3-(羥基甲基)-4-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1396	(S)-1-(3-氯苯基)-6-(3-(羥基甲基)-4-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f] [1,4]氧氮雜卓-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1397	(R)-1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-(2-甲基-5-側氧基吡咯啶-1-基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1398	(S)-1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-(2-甲基-5-側氧基吡咯啶-1-基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1399	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-(3-甲基-2-側氧基-2,3-二氫-1H-咪唑-1-基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1400	1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-(4-側氧基-5-氮雜螺[2.4]庚-5-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1401	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(4-甲氧基-3-(2-側氧基吡咯啶-1-基)苯基)-7-側氧基

	-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1402	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(4-甲氧基-3-(3-側氧基-2-氮雜雙環[3.1.0]己-2-基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1403	N-((1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-基)甲基)甲烷磺醯胺
1404	(R)-1-(3-氯苯基)-N-(1-環丙基-2-羥基乙基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1405	1-(3-氯苯基)-7-側氧基-6-(3-(2-側氧基-4-(三氟甲基)吡咯啶-1-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯
1406	(S)-1-(3-氯苯基)-N-(1-環丙基-2-羥基乙基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1407	1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-((1R*,5R*)-3-側氧基-2-氮雜雙環[3.1.0]己-2-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1408	1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-((1S*,5S*)-3-側氧基-2-氮雜雙環[3.1.0]己-2-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1409	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-(3-異丙基-2-側氧基咪唑啶-1-基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1410	1-(3-氯苯基)-N-(2-甲氧基乙基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1411	1-(3-氯苯基)-N-((3R,4S)-4-羥基四氫呋喃-3-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1412	1-(3-氯苯基)-N-((3R,4R)-4-羥基四氫呋喃-3-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1413	1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-((3aR,6aR)-2-側氧基六氫環戊二烯并[b]吡咯-1(2H)-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1414	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((6-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1415	1-(3-氯苯基)-N-((3S,4R)-4-羥基四氫呋喃-3-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1416	1-(3-氯苯基)-N-((3S,4S)-4-羥基四氫呋喃-3-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1417	1-(3-氯苯基)-N-(3-羥基丙基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1418	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(4-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫吡啶并[4,3-f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1419	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(4-甲氧基-3-(哌啶-1-基甲基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1420	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-(4-甲基-2-側氧基哌嗪-1-基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1421	1-(3-氯苯基)-N-((1-羥基環丙基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1422	1-(3-氯苯基)-6-(3,4-二氫-2H-苯并[b][1,4]噁嗪-6-基)-N-乙基-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1423	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-(4-甲基哌嗪-1-基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

1424	1-(3-氯苯基)-N-(3,3-二氟哌啶-4-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1425	1-(3-氯苯基)-N-(4,4-二氟吡咯啶-3-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1426	1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-(3-側氧基嗎啉基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1427	N-((1-胺基環丙基)甲基)-1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1428	1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-6-(3-(7-側氧基-2-氧雜-6-氮雜螺[3.4]辛-6-基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1429	6-(1'-乙醯基螺[環丙烷-1,3'-吲哚啉]-6'-基)-1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1430	6-(3-(5-氮雜螺[2.4]庚-5-基)苯基)-1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1431	6-(3-(3-氮雜雙環[3.1.0]己-3-基)苯基)-1-(3-氯苯基)-N-乙基-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1432	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-(4-甲基-3-側氧基哌嗪-1-基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1433	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(2-氟-5-(3-側氧基-2-氮雜雙環[3.1.0]己-2-基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1434	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-2,3,4,5-四氫-1H-3,5-甲橋苯并[c]氮雜卓-8-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1435	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(8-氟-4-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1436	1-(3-氯苯基)-N-乙基-6-(3-(3-甲基-3,8-二氮雜雙環[3.2.1]辛-8-基)苯基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1437	1-(3-氯苯基)-N-(3-羥基雙環[1.1.1]戊-1-基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
1438	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(5-氧雜螺[2.4]庚-7-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2001	(S)-1-(3-氯-2-氟苯基)-N-(2-羥基-1-苯基乙基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2002	1-(3-氯-2-氟苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2003	6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1-(4-甲氧基苯基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2004	1-(3-氯-2-氟苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2005	1-(3-氰基苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2006	1-(3-胺甲醯基苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2007	1-(3-氯-4-甲基苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2008	6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側

	氧基-1-(間甲苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2009	6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-1-(3-(三氟甲基)苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2010	1-(3-氰基苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2011	N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-1-(間甲苯基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2012	1-(3-氰基苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2013	1-(3-氯-5-氰基苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2014	1-(3-胺甲醯基-5-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2015	1-(5-氯噻吩-3-基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2016	1-(4-氯吡啶-2-基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2017	1-(3-(胺基甲基)-5-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2018	1-(3-(胺基甲基)-5-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2019	1-(3-(胺基甲基)苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2020	1-(6-氯吡啶-2-基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2021	1-(5-氯吡啶-3-基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2022	1-(3-(胺基甲基)-5-甲基苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯
2023	6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1-(6-甲基吡啶-2-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸乙酯
2024	1-(3-(胺基甲基)-5-甲基苯基)-N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2025	1-(3-(胺基甲基)-5-甲基苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲酸
2027	N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1-(5-甲基吡啶-3-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2028	N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1-(5-甲基吡啶-2-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2029	1-(5-氯-2-甲基苯基)-N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2030	1-(5-氯-2-氟苯基)-N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

2031	1-(6-胺基-5-氯吡啶-3-基)-N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2032	N-乙基-1-(2-氟-3-甲基苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2033	1-(3-氯-5-(羥基甲基)苯基)-N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2034	N-乙基-1-(2-氟-4-甲基苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2035	N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1-(4-甲基吡啶-2-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2036	1-(3-氯-2-甲基苯基)-N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2037	N-乙基-1-(6-甲氧基吡啶-2-基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2038	3-(3-(甲氧基甲基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-1-基)-2-甲基苯甲腈
2039	(R)-1-(3-氯-2-氟苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-N-(四氫呋喃-3-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2040	1-(3-氯-2-氟苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((5-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2041	7-(1-(3-(胺基甲基)-5-氯苯基)-3-(甲氧基甲基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮
2042	1-(3-氰基-2-甲基苯基)-N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2043	(R)-1-(3-氯-2-氟苯基)-N-(1-環丙基-2-羥基乙基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2044	1-(3-氯-2-氟苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((6-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2045	N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-1-(4-甲基噻吩-2-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2046	1-(3-氯-2-氟苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(4-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2047	7-(1-(3-(胺基甲基)-5-氯苯基)-7-側氧基-1,4,5,7-四氫-6H-吡唑并[3,4-c]吡啶-6-基)-2-甲基-3,4-二氫異喹啉-1(2H)-酮
2048	(R)-1-(3-氯-2-氟苯基)-6-(4-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-N-(四氫呋喃-3-基)-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2049	(R)-1-(3-氯-2-氟苯基)-N-(1-環丙基-2-羥基乙基)-6-(4-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2050	1-(3-氯-2-氟苯基)-N-(3-羥基雙環[1.1.1]戊-1-基)-6-(4-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2051	1-(3-氯-5-甲基苯基)-N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺

2052	1-(3-氯-2-(羥基甲基)苯基)-N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2053	(S)-1-(3-氯-2-氟苯基)-N-(1-環丙基-2-羥基乙基)-6-(4-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2054	1-(3-氯-4-羥基苯基)-N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2056	(1-(3-(胺基甲基)-5-氯苯基)-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-羰基)甘胺酸
2057	1-(4-氯-3-甲基苯基)-N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
2058	1-(3-氯-5-(甲氧基甲基)苯基)-N-乙基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[3,4-c]吡啶-3-甲醯胺
3001	1-(3-氯苯基)-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲腈
3002	1-(3-氯苯基)-5-甲基-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲腈
3003	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-5-甲基-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺
3004	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-5-甲基-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺
3005	1-(3-氯苯基)-N-((1,4-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-5-甲基-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺
3006	1-(3-氯苯基)-N-((1,4-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-5-甲基-6-(2-甲基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺
3007	N-((1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-5-甲基-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-基)甲基)環丙烷磺醯胺
3008	N-((1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-5-甲基-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-基)甲基)環丙烷甲醯胺
3009	N-((1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-5-甲基-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-基)甲基)-1,4-二甲基-1H-吡唑-3-甲醯胺
3010	N-((1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-5-甲基-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-基)甲基)-4-甲基菸鹼醯胺
3011	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-5-甲基-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺
3012	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-5-甲基-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲腈
3013	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲腈
3014	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-5-甲基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺
3015	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-5-甲基-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺
3016	1-(3-氯苯基)-N-(環丙基甲基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹

	啉-7-基)-5-甲基-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺
3017	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-5-甲基-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺
3018	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-5-甲基-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲酸
3019	1-(3-氯苯基)-6-(2-(2-羥基乙基)-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-5-甲基-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲酸乙酯
3020	1-(3-氯苯基)-5-甲基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((5-甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺
3021	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-5-甲基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺
3022	1-(3-氯苯基)-N-乙基-5-甲基-6-(2-甲基-1-側氧基-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺
3023	1-(3-氯-2-氟苯基)-N-(環丙基甲基)-5-甲基-6-(4-甲基-5-側氧基-2,3,4,5-四氫苯并[f][1,4]氧氮雜卓-7-基)-7-側氧基-6,7-二氫-1H-吡唑并[4,3-d]嘧啶-3-甲醯胺
4001	1-(3-氯苯基)-N-((1,5-二甲基-1H-吡唑-3-基)甲基)-5-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-6-側氧基-1,4,5,6-四氫吡咯并[3,4-c]吡唑-3-甲醯胺
4002	2-(3-(3-氯苯基)-5-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[4,3-c]吡啶-1-基)-N-(環丙基甲基)乙醯胺
4003	3-(3-氯苯基)-5-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-N-((4-甲基吡啶-3-基)甲基)-4-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[4,3-c]吡啶-1-甲醯胺
4004	2-(3-(3-氯苯基)-5-(2-(2-羥基乙基)-1,2,3,4-四氫異喹啉-7-基)-4-側氧基-4,5,6,7-四氫-1H-吡唑并[4,3-c]吡啶-1-基)-N-環丙基乙醯胺

表6：實例之^{1}H NMR資料(溶劑DMSO-d6，除非另外指示)

實例編號	NMR記錄
1001	1.32 - 1.42 (2H, m), 1.44 - 1.54 (4H, m), 2.21 - 2.38 (4H, m), 3.21 (4H, t, J = 6.6 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.45 (2H, d, J = 6.3 Hz), 7.13 - 7.21 (1H, m), 7.21 - 7.28 (3H, m), 7.29 - 7.37 (5H, m), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.75 - 7.83 (1H, m), 8.25 (1H, s), 9.02 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1002	0.23 - 0.27 (2H, m), 0.40 - 0.46 (2H, m), 1.02 - 1.09 (1H, m), 1.15 - 1.24 (1H, m), 1.39 (2H, d, J = 6.9 Hz), 1.48 (4H, q, J = 5.5 Hz), 2.28 - 2.35 (4H, m), 3.13 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (3H, d, J = 6.6 Hz), 4.07 (2H, td, J = 6.7, 2.2 Hz), 6.77 (1H, s), 7.18 (1H, dt, J = 7.5, 1.4 Hz), 7.22 - 7.28 (2H, m), 7.34 (1H, t, J = 7.7 Hz), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.80 (1H, t, J = 2.1 Hz), 8.43 (1H, s), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1003	1.32 - 1.42 (2H, m), 1.41 - 1.52 (4H, m), 2.23 - 2.36 (4H, m), 3.20 (4H, t, J = 6.6 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.46 (2H, d, J = 6.2 Hz), 6.84 (1H, s), 7.17 (1H, d, J = 7.5 Hz), 7.20 - 7.29 (2H, m), 7.28 - 7.40 (2H, m), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 7.1, 2.0 Hz), 7.74 (1H, dt, J = 7.9, 2.1 Hz), 7.77 - 7.81 (1H, m), 8.38 (1H, s), 8.46 (1H, dd, J = 4.8, 1.7 Hz), 8.56 (1H, d, J = 2.2 Hz), 9.14 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1004	1.31 - 1.41 (2H, m), 1.43 - 1.55 (4H, m), 2.22 - 2.38 (4H, m), 2.93 (2H, s), 3.06 - 3.15 (2H, m), 3.30 (3H, s), 4.07 (2H, q, J = 6.6 Hz), 4.72 (1H, s), 4.99 (1H, s), 7.17 (1H, d, J

	= 7.6 Hz), 7.21 - 7.39 (7H, m), 7.39 - 7.63 (4H, m), 7.61 - 7.78 (1H, m)
1005	2.33 (3H, s), 2.59 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.81 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.20 (4H, t, J = 6.6 Hz), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.45 (2H, d, J = 6.2 Hz), 6.74 (1H, s), 7.04 (1H, s), 7.12 (2H, d, J = 2.1 Hz), 7.25 (1H, td, J = 5.5, 2.8 Hz), 7.30 - 7.37 (4H, m), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.79 (1H, d, J = 2.1 Hz), 8.38 (1H, s), 9.03 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1006	1.31 - 1.42 (2H, m), 1.44 - 1.52 (4H, m), 2.21 - 2.38 (4H, m), 3.17 - 3.23 (2H, m), 3.40 (2H, s), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 5.39 (2H, s), 7.13 - 7.20 (1H, m), 7.21 - 7.28 (2H, m), 7.30 - 7.35 (1H, m), 7.35 - 7.39 (1H, m), 7.39 - 7.44 (2H, m), 7.46 - 7.50 (2H, m), 7.50 - 7.61 (3H, m), 7.75 (1H, t, J = 2.0 Hz)
1007	(CDCl3) 1.44 (5H, t, J = 7.1 Hz), 1.57 (4H, s), 2.37 (4H, s), 3.32 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.46 (2H, s), 4.14 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.47 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.21 (2H, d, J = 7.6 Hz), 7.29 - 7.39 (4H, m), 7.48 (1H, dt, J = 7.6, 1.7 Hz), 7.62 (1H, t, J = 2.0 Hz)
1008	1.31 - 1.41 (2H, m), 1.43 - 1.53 (4H, m), 2.21 - 2.38 (4H, m), 3.13 - 3.21 (2H, m), 3.40 (2H, s), 3.62 - 3.81 (2H, m), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.99 (1H, t, J = 5.7 Hz), 5.02 - 5.10 (1H, m), 7.13 - 7.18 (1H, m), 7.21 - 7.27 (3H, m), 7.28 - 7.35 (3H, m), 7.37 - 7.42 (2H, m), 7.50 - 7.57 (2H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.81 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 8.60 (1H, d, J = 8.3 Hz)
1009	1.29 - 1.43 (2H, m), 1.43 - 1.52 (4H, m), 1.74 - 1.98 (4H, m), 2.21 - 2.39 (4H, m), 3.17 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.41 (2H, s), 3.51 (2H, t, J = 6.8 Hz), 3.87 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.12 - 7.19 (1H, m), 7.21 - 7.29 (2H, m), 7.33 (1H, t, J = 7.7 Hz), 7.43 - 7.55 (2H, m), 7.55 - 7.65 (1H, m), 7.70 - 7.81 (1H, m)
1010	1.12 (1H, s), 1.24 - 1.41 (6H, m), 1.48 (4H, t, J = 5.6 Hz), 1.60 (1H, d, J = 12.9 Hz), 1.75 (4H, dd, J = 22.9, 12.2 Hz), 2.32 (4H, d, J = 6.1 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.40 (2H, s), 3.72 - 3.82 (1H, m), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.17 (1H, dt, J = 7.5, 1.4 Hz), 7.21 - 7.27 (2H, m), 7.33 (1H, t, J = 7.7 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.78 (1H, dt, J = 2.4, 1.2 Hz), 8.13 (1H, d, J = 8.4 Hz)
1011	1.11 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.32 - 1.43 (2H, m), 1.41 - 1.54 (4H, m), 2.25 - 2.39 (4H, m), 3.20 (4H, t, J = 6.6 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.17 (1H, s), 7.21 - 7.28 (2H, m), 7.33 (1H, t, J = 7.7 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.7, 2.2 Hz), 7.76 - 7.81 (1H, m), 8.45 (1H, t, J = 5.9 Hz) 2H與水峰重疊
1012	0.23 (2H, dd, J = 4.7, 1.7 Hz), 0.39 - 0.44 (2H, m), 1.00 - 1.09 (1H, m), 2.32 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.11 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.18 (2H, d, J = 6.6 Hz), 3.45 (2H, s), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.91 (1H, s), 7.03 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.10 (2H, d, J = 1.9 Hz), 7.46 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.77 (1H, t, J = 1.7 Hz), 8.42 (1H, s), 8.49 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1013	(CDCl3) 1.44 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.45 (3H, s), 2.69 (2H, s), 2.90 (2H, d, J = 6.1 Hz), 3.31 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.58 (2H, s), 4.09 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.47 (2H, q, J = 7.1 Hz), 6.98 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.07 (1H, dd, J = 8.1, 2.2 Hz), 7.13 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.30 - 7.39 (2H, m), 7.48 (1H, ddd, J = 7.6, 2.1, 1.4 Hz), 7.62 (1H, t, J = 2.0 Hz)
1014	1.12 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.33 (3H, s), 2.59 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.81 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.25 - 3.29 (2H, m), 3.46 (2H, s), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.04 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.12 (2H, t, J = 1.4 Hz), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.78 (1H, dt, J = 2.4, 1.2 Hz), 8.45 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1015	2.33 (3H, s), 2.59 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.81 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz),

	3.46 (2H, s), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.47 (2H, d, J = 6.2 Hz), 7.04 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.08 - 7.15 (2H, m), 7.37 (1H, ddd, J = 7.8, 4.8, 0.9 Hz), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.75 (1H, dt, J = 7.9, 1.9 Hz), 7.79 (1H, dt, J = 2.4, 1.2 Hz), 8.47 (1H, dd, J = 4.8, 1.6 Hz), 8.57 (1H, dd, J = 2.3, 0.9 Hz), 9.11 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1016	0.93 (1H, t, J = 7.1 Hz), 1.09 - 1.21 (2H, m), 1.54 - 1.60 (2H, m), 1.79 (2H, td, J = 11.7, 2.3 Hz), 2.11 (3H, s), 2.71 (2H, dt, J = 11.6, 3.3 Hz), 3.04 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.27 (2H, d,J = 6.6 Hz), 3.65 (2H, d, J = 6.7 Hz), 4.42 (2H, d, J = 6.3 Hz), 7.22 (1H, ddd, J = 8.8, 5.0, 3.8 Hz), 7.31 (3H, d, J = 4.3 Hz), 7.49 - 7.54 (2H, m), 7.58 (1H, dt, J = 6.3, 2.3 Hz), 7.71 - 7.74 (1H, m), 8.42 (3H, s), 8.96 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1017	1.65 - 1.72 (4H, m), 2.40 - 2.44 (4H, m), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.56 (2H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.45 (2H, d, J = 6.3 Hz), 7.15 - 7.24 (1H, m), 7.20 - 7.32 (3H, m), 7.28 - 7.37 (5H, m), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.58 - 7.67 (1H, m), 7.77 - 7.82 (1H, m), 9.05 (1H, t, J = 6.4 Hz)
1018	2.33 - 2.37 (4H, m), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.45 (2H, s), 3.53 - 3.59 (4H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.45 (2H, d, J = 6.3 Hz), 7.19 (1H, d, J = 7.5 Hz), 7.19 - 7.39 (8H, m), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.60 - 7.67 (1H, m), 7.77 - 7.83 (1H, m), 9.05 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1019	0.06 – 0.21 (2H, m), 0.40 – 0.58 (2H, m), 0.86 – 0.95 (1H, m), 2.33 (2H, d, J = 1.9 Hz), 2.70 (2H, s br), 2.80 (2H, s br), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.60 (2H, s br), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.44 (2H, d, J = 6.3 Hz), 7.06 (1H, s), 7.11 (2H, s), 7.21 – 7.28 (1H, m), 7.28 – 7.39 (4H, m), 7.46 – 7.57 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.76 – 7.83 (1H, m), 9.05 (1H, t, J = 6.4 Hz)
1020	1.13 – 1.31 (2H, m), 1.39 – 1.60 (4H, m), 1.65 – 1.79 (2H, m), 2.16 (1H, 五重峰, J = 7.5 Hz), 2.23 – 2.39 (2H, m), 2.59 – 2.73 (2H, m), 2.78 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.51 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.44 (2H, d, J = 6.3 Hz), 7.04 (1H, s), 7.10 (2H, d, J = 1.6 Hz), 7.20 – 7.28 (1H, m), 7.30 – 7.35 (4H, m), 7.46 – 7.56 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.75 – 7.81 (1H, m), 9.05 (1H, t, J = 6.4 Hz)
1021	1.08 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.58 – 2.65 (2H, m), 2.76 – 2.83 (2H, m), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.51 (2H, s br), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.44 (2H, d, J = 6.3 Hz), 7.06 (1H, s), 7.11 (2H, s), 7.20 – 7.27 (1H, m), 7.29 – 7.38 (4H, m), 7.44 – 7.58 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 7.0, 2.1 Hz), 7.74 – 7.81 (1H, m), 9.05 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1022	1.04 (6H, d, J = 6.5 Hz), 2.62 – 2.71 (2H, m), 2.73 – 2.79 (2H, m), 2.84 (1H, heptet, J = 6.5 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.60 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.45 (2H, d, J = 6.3 Hz), 7.05 (1H, s), 7.09 (2H, s), 7.21 – 7.28 (1H, m), 7.28 – 7.38 (4H, m), 7.46 – 7.55 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.76 – 7.83 (1H, m), 9.03 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1023	0.93 (2H, dd, J = 13.8, 9.2 Hz), 1.11 - 1.24 (3H, m), 1.51 - 1.63 (2H, m), 1.68 (4H, q, J = 5.9, 4.7 Hz), 2.33 (3H, s), 2.58 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.09 (2H, d, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.45 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.75 (1H, s), 7.04 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.07 - 7.15 (2H, m), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.78 (1H, t, J = 2.1 Hz), 8.39 (1H, t, J = 6.2 Hz), 8.44 (1H, s)
1024	2.32 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.11 - 3.17 (2H, m), 3.44 (2H, s), 3.64 - 3.81 (2H, m), 4.00 (2H, t, J = 6.6 Hz), 5.00 (1H, t, J = 5.6 Hz), 5.06 (1H, td, J = 7.7, 5.2 Hz), 6.98 - 7.04 (1H, m), 7.07 - 7.13 (2H, m), 7.19 - 7.27 (1H, m), 7.29 -

	7.35 (2H, m), 7.37 - 7.42 (2H, m), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.78 - 7.83 (1H, m), 8.61 (1H, d, J = 8.3 Hz)
1025	0.73 - 0.83 (1H, m), 0.97 - 1.10 (3H, m), 1.50 (3H, s), 1.76 (2H, t, J = 5.9 Hz), 1.98 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.37 (2H, t, J = 6.6 Hz), 2.47 (2H, d, J = 6.2 Hz), 2.63 (2H, s), 2.77 - 2.84 (1H, m), 2.95 (1H, ddd, J = 8.2, 7.0, 5.9 Hz), 3.18 (3H, dt, J = 12.6, 6.5 Hz), 6.21 (1H, d, J = 1.9 Hz), 6.29 (2H, t, J = 1.5 Hz), 6.66 - 6.73 (2H, m), 6.80 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 6.96 (1H, dt, J = 2.4, 1.3 Hz), 7.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1026	1.61 (1H, ddd, J = 11.4, 6.2, 1.4 Hz), 1.86 - 1.97 (1H, m), 2.33 (3H, s), 2.58 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.24 (2H, t, J = 6.8 Hz), 3.45 (2H, d, J = 2.1 Hz), 3.47 - 3.50 (1H, m), 3.56 - 3.77 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.03 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.08 - 7.14 (2H, m), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.77 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.61 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1027	1.15 - 1.24 (2H, m), 1.53 - 1.61 (2H, m), 1.75 - 1.88 (1H, m), 2.33 (3H, s), 2.59 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.81 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.13 - 3.27 (6H, m), 3.46 (2H, s), 3.84 (2H, ddd, J = 11.3, 4.3, 1.9 Hz), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.04 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.09 - 7.15 (2H, m), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.78 (1H, dt, J = 2.3, 1.2 Hz), 8.49 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1028	2.48 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.81 (4H, s), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.45 (2H, d, J = 6.3 Hz), 7.13 - 7.20 (1H, m), 7.20 - 7.28 (3H, m), 7.31 - 7.34 (4H, m), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.58 - 7.68 (1H, m), 7.79 (1H, s), 9.03 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1029	0.34 - 0.42 (2H, m), 0.48 (2H, dt, J = 6.1, 2.9 Hz), 1.78 (1H, tt, J = 6.7, 3.5 Hz), 2.76 (2H, t, J = 5.7 Hz), 2.83 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.68 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.45 (2H, d, J = 6.3 Hz), 7.06 (1H, s), 7.10 (2H, d, J = 1.3 Hz), 7.21 - 7.28 (1H, m), 7.30 - 7.36 (4H, m), 7.46 - 7.55 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.76 - 7.80 (1H, m), 9.03 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1030	1.60 - 1.67 (2H, m), 2.17 (3H, s), 2.78 - 2.85 (2H, m), 2.88 (2H, t, J = 5.2 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.68 (2H, s), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.45 (2H, d, J = 6.3 Hz), 7.07 - 7.18 (3H, m), 7.20 - 7.27 (1H, m), 7.29 - 7.36 (4H, m), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.75 - 7.81 (1H, m), 9.03 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1031	0.21 - 0.26 (2H, m), 0.38 - 0.46 (2H, m), 1.00 - 1.06 (1H, m), 1.08 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.61 - 2.66 (2H, m), 2.79 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.51 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.05 (1H, s), 7.11 (2H, s), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.76 - 7.79 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1032	0.21 - 0.29 (2H, m), 0.38 - 0.46 (2H, m), 1.04 (1H, dddd, J = 12.6, 8.1, 5.1, 2.1 Hz), 2.52 - 2.55 (2H, m), 2.81 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.42 (2H, s), 3.58 (1H, 五重峰, J = 6.3 Hz), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.51 (2H, t, J = 6.1 Hz), 4.61 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.05 (1H, s), 7.13 (2H, s), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1033	0.20 - 0.27 (2H, m), 0.38 - 0.45 (2H, m), 1.04 (1H, dddd, J = 11.6, 8.1, 5.1, 2.1 Hz), 2.72 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.84 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.04 (2H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.62 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.05 (1H, s), 7.13 (2H, s), 7.15 (1H, s br), 7.24 (1H, s br), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.61 - 7.64 (1H, m), 7.76 - 7.80 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1034	0.21 - 0.27 (2H, m), 0.38 - 0.46 (2H, m), 1.04 (1H, dddd, J = 12.7, 8.1, 5.1, 2.1 Hz), 2.37 (3H, s), 2.61 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz),

	3.16 (2H, t, J = 6.9 Hz), 3.50 (2H, s), 4.27 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.46 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.49 - 7.57 (3H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.81 - 7.84 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1035	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.35 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.12 (7H, m), 2.66 - 2.71 (2H, m), 2.76 (2H, t, J = 5.6 Hz), 2.79 - 2.90 (1H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.60 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.02 - 7.14 (3H, m), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.57 - 7.66 (1H, m), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1036	0.05 - 0.13 (2H, m), 0.16 - 0.24 (2H, m), 0.33 - 0.42 (2H, m), 0.42 - 0.50 (2H, m), 0.85 - 0.88 (1H, m), 0.95 - 1.06 (1H, m), 2.27 - 2.33 (2H, m), 2.59 - 2.70 (2H, m), 2.76 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.08 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.15 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.56 (2H, s), 3.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.00 - 7.11 (3H, m), 7.42 - 7.53 (2H, m), 7.53 - 7.62 (1H, m), 7.74 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.47 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1037	0.19 - 0.27 (2H, m), 0.35 - 0.46 (2H, m), 1.04 (1H, s), 2.60 - 2.73 (4H, m), 2.78 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.08 - 3.23 (4H, m), 3.25 (3H, s), 3.51 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.57 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.03 (1H, s), 7.10 (2H, s), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.57 - 7.66 (1H, m), 7.77 (1H, d, J = 2.1 Hz), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1038	0.93 - 0.99 (3H, m), 1.19 - 1.28 (1H, m), 1.89 - 2.01 (2H, m), 2.09 - 2.22 (1H, m), 2.36 - 2.46 (1H, m), 2.50 - 2.60 (1H, m), 2.65 - 2.73 (1H, m), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.56 (1H, d, J = 13.2 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.45 (2H, d, J = 6.3 Hz), 7.16 - 7.29 (5H, m), 7.30 - 7.37 (5H, m), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.58 - 7.67 (1H, m), 7.79 (1H, t, J = 1.9 Hz), 9.03 (1H, t, J = 6.4 Hz)
1039	1.05 - 1.11 (3H, m), 1.21 - 1.39 (1H, m), 1.53 - 1.65 (2H, m), 1.83 - 1.96 (1H, m), 2.02 (1H, q, J = 8.8 Hz), 2.33 - 2.45 (1H, m), 2.73 - 2.83 (1H, m), 3.09 (1H, d, J = 13.2 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.96 (1H, d, J = 13.3 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.45 (2H, d, J = 6.3 Hz), 7.18 (1H, d, J = 7.6 Hz), 7.18 - 7.28 (3H, m), 7.28 - 7.37 (5H, m), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.58 - 7.67 (1H, m), 7.77 - 7.83 (1H, m), 9.05 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1040	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.12 (1H, m), 2.36 (3H, s), 2.69 (2H, t, J = 6.0 Hz), 2.88 (2H, t, J = 6.0 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.50 (2H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.47 - 7.58 (3H, m), 7.58 - 7.67 (1H, m), 7.79 (1H, t, J = 1.7 Hz), 8.37 (1H, d, J = 2.5 Hz), 8.53 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1041	2.32 (3H, s), 2.58 (2H, d, J = 5.9 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.16 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.45 (2H, d, J = 2.2 Hz), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.61 - 4.74 (4H, m), 4.99 - 5.07 (1H, m), 7.01 - 7.04 (1H, m), 7.07 - 7.14 (2H, m), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.79 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 9.20 (1H, d, J = 6.8 Hz)
1042	1.92 - 2.02 (1H, m), 2.09 - 2.21 (1H, m), 2.33 (3H, s), 2.59 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.81 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.46 (2H, s), 3.59 (1H, dd, J = 8.8, 4.9 Hz), 3.66 - 3.76 (1H, m), 3.81 - 3.89 (2H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.42 - 4.53 (1H, m), 7.04 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.12 (2H, d, J = 2.3 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.79 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.52 (1H, d, J = 7.0 Hz)
1043	1.66 (4H, dq, J = 11.3, 4.6 Hz), 2.31 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.17 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.37 (2H, dd, J = 11.3, 3.4 Hz), 3.44 (2H, s), 3.86 (2H, dt,J = 11.7, 3.5 Hz), 4.01 (3H, t, J = 6.5 Hz), 7.00 - 7.04 (1H, m), 7.07 - 7.14 (2H, m), 7.46 - 7.55 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.76 (1H, dt, J = 2.4, 1.2 Hz), 8.33 (1H, d, J = 8.3 Hz)
1044	1.50 - 1.61 (4H, m), 1.64 - 1.73 (2H, m), 1.82 - 1.93 (2H, m), 2.33 (3H, s), 2.58 (2H, t,

	J = 5.9 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.45 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.18 – 4.28 (1H, m, 7.02 - 7.06 (1H, m), 7.11 (2H, t, J = 1.5 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.78 (1H, dt, J = 2.4, 1.2 Hz), 8.24 (1H, d, J = 7.8 Hz)
1045	2.32 (3H, s), 2.38 - 2.46 (1H, m), 2.58 (3H, d, J = 5.7 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.44 (2H, s), 3.51 (2H, d, J = 19.6 Hz), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.37 -4.54 (2H, m), 4.81 (1H, dq, J = 7.4, 5.7 Hz), 7.01 - 7.05 (1H, m), 7.11 (2H, t, J = 1.5 Hz), 7.46 - 7.54 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.77 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 8.47 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1046	1.56 (2H, dd, J = 7.1, 2.6 Hz), 1.72 - 1.83 (4H, m), 2.31 (3H, s), 2.58 (2H, d, J = 5.8 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.15 - 3.20 (4H, m), 3.28 (2H, d, J = 6.3 Hz), 3.44 (2H, s), 3.99 (4H, dt, J = 21.5, 6.7 Hz), 4.52 (1H, t, J = 5.5 Hz), 7.01 - 7.03 (1H, m), 7.07 - 7.14 (2H, m), 7.47 - 7.54 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.6, 2.1 Hz), 7.77 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.11 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1047	2.34 (3H, s), 2.60 (2H, d, J = 5.8 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.19 (3H, t, J = 6.7 Hz), 3.45 - 3.56 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.35 (2H, t, J = 6.0 Hz), 4.62 (2H, dd, J = 7.8, 6.0 Hz), 7.04 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.08 - 7.15 (2H, m), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 7.1, 1.9 Hz), 7.77 (1H, t, J = 1.7 Hz), 8.68 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1048	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.35 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.12 (1H, m), 2.16 (3H, s), 2.32 (3H, s), 2.59 - 2.68 (4H, m), 3.11 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.43 (2H, s), 4.00 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.84 - 6.89 (1H, m), 6.96 - 7.01 (1H, m), 7.45 - 7.56 (2H, m), 7.56 - 7.65 (1H, m), 7.74 - 7.79 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1049	1.67 - 1.83 (6H, m), 2.32 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.38 (4H, dd, J = 6.0, 3.5 Hz), 3.44 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.74 (1H, t, J = 5.7 Hz), 7.01 - 7.04 (1H, m), 7.06 - 7.15 (2H, m), 7.47 - 7.54 (2H, m), 7.60 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.76 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 8.37 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1050	1.35 (2H, dd, J = 4.5, 1.8 Hz), 1.60 (2H, dd, J = 4.5, 1.8 Hz), 2.31 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.17 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.44 (2H, s), 3.49 - 3.59 (6H, m), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.64 (1H, t, J = 5.9 Hz), 7.02 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.06 - 7.17 (2H, m), 7.46 - 7.55 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.77 (1H, dt, J = 2.3, 1.2 Hz), 8.61 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1051	1.07 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.45 (2H, d, J = 7.1 Hz), 2.62 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.13 - 3.17 (2H, m), 3.50 (2H, s), 3.65 - 3.78 (2H, m), 4.00 (2H, t, J = 6.6 Hz), 5.05 (2H, td, J = 7.8, 5.2 Hz), 6.86 (1H, s), 7.04 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.09 (2H, d, J = 1.9 Hz), 7.21 - 7.25 (1H, m), 7.32 (2H, t, J = 7.5 Hz), 7.37 - 7.41 (2H, m), 7.48 - 7.57 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.79 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.43 (1H, s), 8.61 (1H, d, J = 8.3 Hz)
1052	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 0.88 (3H, t, J = 7.4 Hz), 1.00 - 1.10 (1H, m), 1.45 - 1.59 (2H, m), 2.35 - 2.42 (2H, m), 2.63 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.28 - 3.32 (1H, m), 3.50 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.05 (1H, s), 7.10 (2H, d, J = 1.5 Hz), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.57 - 7.66 (1H, m), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1053	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.35 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.12 (1H, m), 1.68 - 1.79 (2H, m), 2.43 - 2.50 (2H, m), 2.63 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.15 - 3.24 (5H, m), 3.37 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.51 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz),

	7.04 (1H, d, J = 1.7 Hz), 7.10 (2H, d, J = 1.4 Hz), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.77 (1H, t, J = 1.7 Hz), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1054	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.46 (2H, m), 0.99 - 1.14 (4H, m), 2.10 (3H, s), 2.47 (2H, t, J = 7.1 Hz), 2.55 - 2.68 (2H, m), 2.76 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.13 - 3.32 (2H, m), 3.42 - 3.55 (2H, m), 3.68 - 3.78 (1H, m), 3.97 - 4.08 (1H, m), 6.99 (2H, d, J = 7.4 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.57 - 7.67 (1H, m), 7.74 - 7.80 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1055	0.21 - 0.28 (2H, m), 0.38 - 0.45 (2H, m), 1.00 - 1.10 (1H, m), 2.55 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.69 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 - 3.61 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.47 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.04 (1H, s), 7.11 (2H, s), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.76 - 7.80 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1056	0.21 - 0.27 (2H, m), 0.38 - 0.45 (2H, m), 1.00 - 1.06 (1H, m), 1.08 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.54 (2H, q, J = 7.3 Hz), 2.70 (2H, t, J = 5.7 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.11 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.53 (2H, s), 4.19 (2H, t, J 6.5 Hz), 7.49 - 7.58 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 7.3, 1.8 Hz), 7.79 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.52 (1H, t, J = 6.1 Hz), 8.54 (1H, s)
1057	1.68 - 1.83 (1H, m), 1.90 (1H, dq, J = 10.6, 3.8 Hz), 2.38 (2H, d, J = 8.0 Hz), 2.85 (3H, s), 3.14 - 3.25 (5H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.16 - 4.31 (3H, m), 7.19 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.27 (2H, s), 7.41 - 7.57 (4H, m), 7.62 (1H, dt, J = 7.1, 2.0 Hz), 7.78 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.47 (1H, d, J = 8.0 Hz), 9.22 (2H, s)
1058	0.13 - 0.30 (2H, m), 0.30 - 0.43 (2H, m), 0.83 (1H, ddd, J = 12.8, 7.9, 3.1 Hz), 2.33 (3H, s), 2.58 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.16 - 3.31 (4H, m), 3.41 - 3.52 (3H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.83 (1H, s), 7.02 - 7.05 (1H, m), 7.11 (2H, t, J = 1.4 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.77 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.13 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1059	0.21 - 0.26 (2H, m), 0.39 - 0.45 (2H, m), 0.87 (3H, t, J = 7.4 Hz), 0.98 (3H, d, J = 6.5 Hz), 1.01 - 1.11 (1H, m), 1.34 (1H, dt, J = 14.0, 7.2 Hz), 1.56 (1H, dt, J = 13.9, 6.9 Hz), 2.61 (2H, q, J = 6.8 Hz), 2.71 - 2.78 (3H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.56 (1H, d, J = 15.1 Hz), 3.65 (1H, d, J = 15.1 Hz), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.04 (1H, s), 7.09 (2H, d, J = 1.9 Hz), 7.48 - 7.57 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.76 - 7.79 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1060	0.21 - 0.27 (2H, m), 0.39 - 0.45 (2H, m), 1.02 (3H, d, J = 6.7 Hz), 1.04 - 1.10 (1H, m), 2.72 - 2.79 (4H, m), 2.92 (1H, q, J = 6.3 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.25 (3H, s), 3.30 (1H, dd, J = 9.7, 6.1 Hz), 3.48 (1H, dd, J = 9.7, 5.8 Hz), 3.69 (2H, s), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.03 (1H, s), 7.09 (2H, s), 7.48 - 7.54 (2H, m), 7.60 -7.64 (1H, m), 7.76 - 7.80 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1061	0.21 - 0.26 (2H, m), 0.39 - 0.45 (2H, m), 1.00 - 1.07 (1H, m), 1.10 (3H, t, J = 7.0 Hz), 2.63 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.70 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.77 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.43 (2H, q, J = 7.0 Hz), 3.54 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.58 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.03 (1H, s), 7.10 (2H, d, J = 1.3 Hz), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.77 - 7.78 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1063	2.31 (3H, s), 2.56 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.11 - 3.18 (2H, m), 3.40 - 3.45 (2H, m), 3.64 - 3.78 (2H, m), 3.99 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.97 - 5.09 (2H, m), 7.00 - 7.04 (1H, m), 7.06 - 7.13 (2H, m), 7.21 - 7.26 (1H, m), 7.31 (2H, ddd, J = 7.7, 6.8, 1.2

	Hz), 7.36 - 7.41 (2H, m), 7.50 - 7.56 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.79 (1H, td, J = 2.0, 0.6 Hz), 8.61 (1H, d, J = 8.3 Hz)
1064	1.42 (3H, s), 1.59 (2H, ddd, J = 13.6, 9.3, 4.3 Hz), 2.22 (2H, dd, J = 10.3, 6.8 Hz), 2.32 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.17 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.44 (2H, s), 3.50 - 3.66 (4H, m), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.02 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.07 - 7.13 (2H, m), 7.49 - 7.54 (3H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.78 (1H, dt, J = 2.4, 1.3 Hz)
1065	2.15 - 2.20 (3H, m), 2.33 (3H, s), 2.58 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.46 (2H, s), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.36 (2H, s), 5.83 - 5.97 (1H, m), 7.04 (1H, dd, J = 1.8, 0.9 Hz), 7.12 (2H, d, J = 1.8 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.78 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.65 (1H, s), 12.21 (1H, s)
1066	2.33 (3H, s), 2.58 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.80 (2H, s), 2.96 (2H, s), 3.32 (3H, s), 3.45 (2H, s), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.51 (2H, s), 7.04 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.11 (2H, d, J = 1.8 Hz), 7.46 - 7.48 (2H, m), 7.51 - 7.56 (1H, m), 7.66 (1H, dt, J = 2.5, 1.0 Hz)
1067	2.32 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.44 (2H, s), 3.64 (6H, d, J = 17.9 Hz), 3.92 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.02 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.08 - 7.14 (2H, m), 7.48 - 7.53 (2H, m), 7.55 - 7.60 (1H, m), 7.73 (1H, dt, J = 2.5, 1.3 Hz)
1068	2.31 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.44 (2H, s), 4.01 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.27 (2H, d, J = 6.1 Hz), 6.47 (1H, dd, J = 1.8, 0.9 Hz), 7.02 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.10 (2H, t, J = 1.4 Hz), 7.48 - 7.52 (2H, m), 7.55 - 7.58 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.74 - 7.82 (1H, m), 8.81 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1070	0.21 - 0.28 (2H, m), 0.39 - 0.45 (2H, m), 1.01 - 1.06 (1H, m), 1.07 (3H, d, J = 6.1 Hz), 2.30 - 2.37 (1H, m), 2.39 - 2.46 (1H, m), 2.69 - 2.73 (2H, m), 2.77 - 2.83 (2H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.59 (2H, s br), 3.82 - 3.88 (1H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.38 (1H, s br), 7.04 (1H, s), 7.11 (2H, d, J = 1.3 Hz), 7.46 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.3 Hz), 7.76 - 7.80 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1071	0.21 - 0.27 (2H, m), 0.38 - 0.45 (2H, m), 0.99 - 1.10 (1H, m), 2.81 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.92 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.37 (2H, q, J = 10.1 Hz), 3.79 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.06 (1H, s), 7.13 (2H, d, J = 1.3 Hz), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.76 - 7.79 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1072	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 1.00 - 1.09 (1H, m), 1.65 - 1.73 (4H, m), 2.38 - 2.44 (4H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.56 (2H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.15 - 7.26 (2H, m), 7.26 - 7.37 (2H, m), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.59 - 7.66 (1H, m), 7.76 - 7.81 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1073	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.25 - 0.35 (1H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 0.63 - 0.70 (1H, m), 0.98 - 1.12 (1H, m), 1.30 - 1.38 (2H, m), 2.26 - 2.32 (2H, m), 2.83 - 2.89 (2H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.56 (2H, s), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.10 - 7.17 (1H, m), 7.19 - 7.25 (2H, m), 7.28 - 7.36 (1H, m), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.58 - 7.67 (1H, m), 7.76 - 7.82 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1074	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 0.99 - 1.10 (1H, m), 2.98 (2H, t, J = 6.2 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.33 - 3.42 (2H, m), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.24 (2H, s), 7.22 - 7.31 (3H, m), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.59 - 7.66 (1H, m), 7.75 - 7.81 (1H, m), 8.53 (1H, t, J = 6.0 Hz), 9.04 (1H, s)

1075	1.41 - 1.58 (4H, m), 1.76 (1H, d, J = 12.4 Hz), 1.89 (1H, dd, J = 12.5, 8.1 Hz), 2.33 (3H, s), 2.58 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.14 - 3.22 (2H, m), 3.45 (2H, s), 3.94 - 4.06 (3H, m), 4.39 (1H, d, J = 5.0 Hz), 4.56 (1H, t, J = 4.7 Hz), 7.04 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.11 (2H, d, J = 2.1 Hz), 7.48 - 7.54 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.80 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.01 (1H, d, J = 6.8 Hz)
1076	1.59 - 1.75 (4H, m), 2.54 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.64 - 2.71 (2H, m), 2.77 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.17 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.37 (1H, dd, J = 11.2, 3.3 Hz), 3.51 - 3.60 (4H, m), 3.86 (2H, dt, J = 11.6, 3.4 Hz), 4.00 (4H, t, J = 6.7 Hz), 4.45 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.02 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.09 (2H, d, J = 1.8 Hz), 7.46 - 7.55 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.76 (1H, dt, J = 2.3, 1.2 Hz), 8.32 (1H, d, J = 8.3 Hz)
1077	2.17 (3H, s), 2.54 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.68 (2H, dd, J = 7.6, 4.1 Hz), 2.77 (2H, d, J = 5.8 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 - 3.60 (4H, m), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.35 (2H, s), 4.45 (1H, t, J = 5.4 Hz), 5.90 (1H, s), 7.03 (1H, t, J = 1.3 Hz), 7.10 (2H, d, J = 1.3 Hz), 7.46 - 7.52 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.6, 2.2 Hz), 7.77 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.65 (1H, s), 12.20 (1H, s)
1078	2.55 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.67 - 2.73 (2H, m), 2.79 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.17 - 3.23 (2H, m), 3.54 - 3.62 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.44 - 4.50 (3H, m), 7.02 - 7.06 (1H, m),7.11 (2H, d, J = 1.7 Hz), 7.37 (1H, ddd, J = 7.9, 4.8, 0.9 Hz), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.72 - 7.81 (2H, m), 8.47 (1H, dd, J = 4.8, 1.7 Hz), 8.56 (1H, dd, J = 2.3, 0.8 Hz), 9.12 (1H, t, J = 6.3Hz)
1079	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 1.02 - 1.12 (4H, m), 2.61 - 2.66 (2H, m), 2.78 - 2.83 (2H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.26 - 3.31 (2H, m), 3.45 - 3.52 (2H, m), 3.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.04 (1H, d, J = 10.9 Hz), 7.16 (1H, d, J = 7.7 Hz), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.58 - 7.65 (1H, m), 7.77 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1080	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 1.02 - 1.07 (1H, m), 1.80 - 1.95 (2H, m), 2.52 - 2.56 (2H, m), 2.64 - 2.69 (2H, m), 2.77 - 2.82 (2H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.51 - 3.56 (2H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.51 (2H, dt, J = 47.5, 6.0 Hz), 7.05 (1H, s), 7.09 - 7.14 (2H, m), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.58 - 7.65 (1H, m), 7.77 (1H, d, J = 2.6 Hz), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1081	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 0.98 - 1.12 (1H, m), 1.79 (3H, s), 2.65 - 2.70 (2H, m), 2.77 - 2.82 (2H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.16 - 3.26 (4H, m), 3.28 - 3.31 (2H, m), 3.54 - 3.58 (2H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.06 (1H, s), 7.09 - 7.14 (2H, m), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.58 - 7.66 (1H, m), 7.75 - 7.82 (2H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1082	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 1.02 - 1.12 (4H, m), 1.24 (6H, s), 2.34 - 2.39 (2H, m), 2.42 - 2.49 (2H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.47 - 3.51 (2H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.01 (1H, s), 7.14 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.35 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.58 - 7.65 (1H, m), 7.77 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.50 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1083	0.21 - 0.27 (2H, m), 0.39 - 0.46 (2H, m), 1.00 - 1.11 (1H, m), 2.58 (2H, t, J = 6.6 Hz), 2.68 - 2.72 (2H, m), 2.79 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.92 (3H, s), 3.10 - 3.16 (4H, m), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.58 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.93 (1H, t, J = 5.9 Hz), 7.05 (1H, s), 7.12 (2H, d, J = 1.7 Hz), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.75 - 7.79 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1084	0.21 - 0.27 (2H, m), 0.38 - 0.44 (2H, m), 0.99 - 1.09 (1H, m), 2.44 - 2.49 (2H, m), 2.51

	(3H, s), 2.63 - 2.71 (2H, m), 2.76 - 2.82 (2H, m), 3.11 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.15 - 3.22 (4H, m), 3.52 - 3.58 (2H, m), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 5.75 - 5.80 (1H, m), 5.84 (1H, q, J = 4.7 Hz), 7.05 (1H, s), 7.11 (2H, s), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.60 - 7.65 (1H, m), 7.76 -7.78 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1085	1.08 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.67 (4H, tq, J = 12.9, 8.2, 6.6 Hz), 2.46 (2H, d, J = 7.1 Hz), 2.63 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.35 - 3.41 (2H, m), 3.51 (2H, s), 3.87 (2H, dt, J = 11.5, 3.4 Hz), 4.02 (3H, t, J = 6.5 Hz), 7.05 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.10 (2H, d, J = 1.9 Hz), 7.46 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.75 - 7.79 (1H, m), 8.33 (1H, d, J = 8.3 Hz)
1086	1.07 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.15 (3H, s), 2.46 (2H, d, J = 7.1 Hz), 2.63 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.50 (2H, s), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.35 (2H, d, J = 6.0 Hz), 5.90 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.04 (1H, t, J = 1.3 Hz), 7.10 (2H, d, J = 1.4 Hz), 7.46 - 7.53 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.77 (1H, dt, J = 2.4, 1.3 Hz), 8.69 (1H, t, J = 6.0 Hz), 12.18 (1H, s)
1087	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.35 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.11 (1H, m), 1.60 - 1.71 (2H, m), 2.44 - 2.49 (2H, m), 2.62 - 2.68 (2H, m), 2.78 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.11 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.46 (2H, t, J = 6.2 Hz), 3.47 - 3.54 (2H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (1H, s), 7.03 - 7.09 (1H, m), 7.06 - 7.17 (2H, m), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.57 - 7.67 (1H, m), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1088	(CDCl3) 2.71 (2H, t, J = 5.3 Hz), 2.78 - 2.92 (5H, m), 3.38 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.66 - 3.71 (4H, m), 3.90 (3H, s), 4.08 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.68 (2H, d, J = 5.9 Hz), 6.25 (1H, d, J = 1.9 Hz), 6.98 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.06 - 7.15 (2H, m), 7.18 (1H, t, J = 5.9 Hz), 7.31 - 7.39 (2H, m), 7.41 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.45 (1H, dt, J = 7.6, 1.7 Hz), 7.56 (1H, t, J = 2.0 Hz)
1089	2.56 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.67 - 2.73 (2H, m), 2.79 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 - 3.61 (4H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.46 (3H, q, J = 4.2, 3.0 Hz), 6.18 (1H, s), 7.05 (1H, d, J = 1.7 Hz), 7.11 (2H, d, J = 1.4 Hz), 7.50 - 7.54 (2H, m), 7.63 (2H, dt, J = 6.6, 2.2 Hz), 7.79 (1H, t, J = 1.6 Hz), 8.73 (1H, s), 12.58 (1H, s)
1090	1.07 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.86 - 2.01 (2H, m), 2.13 (2H, dtd, J = 12.4, 8.0, 6.5 Hz), 2.60 - 2.67 (2H, m), 2.78 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.15 - 3.20 (2H, m), 3.50 (2H, qqd, J = 1.8, 0.8 Hz), 3.56 - 3.60 (1H, m), 3.70 (1H, td, J = 8.1, 6.0 Hz), 3.84 (2H, ddt, J = 7.8, 6.3, 3.7 Hz), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.40 - 4.53 (1H, m), 7.04 (1H, s), 7.09 (2H, d, J = 1.7 Hz), 7.46 - 7.54 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.77 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 8.49 (1H, d, J = 7.0 Hz)
1091	1.09 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.97 (1H, dddd, J = 12.5, 7.7, 6.1, 4.9 Hz), 2.15 (1H, dtd, J = 12.5, 8.0, 6.5 Hz), 2.47 (2H, d, J = 7.1 Hz), 2.65 (2H, q, J = 7.0, 6.0 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.52 (2H, s), 3.59 (1H, dd, J = 8.8, 4.9 Hz), 3.72 (1H, td, J = 8.1, 6.0 Hz), 3.86 (2H, ddt, J = 7.9, 6.4, 3.6 Hz), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.42 - 4.55 (1H, m), 7.04 - 7.07 (1H, m), 7.11 (2H, d, J = 1.6 Hz), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.79 (1H, td, J = 2.0, 0.6 Hz), 8.51 (1H, d, J = 7.0 Hz)
1092	0.96 (3H, s), 1.05 - 1.12 (6H, m), 2.47 (1H, d, J = 7.2 Hz), 2.65 (2H, q, J = 6.0 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.14 - 3.23 (2H, m), 3.45 - 3.56 (4H, m), 3.72 (1H, dd, J = 8.9, 6.5 Hz), 3.97 - 4.09 (4H, m), 4.34 (1H, ddd, J = 9.0, 7.8, 6.5 Hz), 7.04 - 7.07 (1H, m), 7.11 (2H, d, J = 1.9 Hz), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.79 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.24 (1H, d, J = 9.0 Hz)

1093	1.07 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.92 - 1.98 (2H, m), 2.46 (2H, d, J = 7.2 Hz), 2.57 - 2.66 (3H, m), 2.78 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.50 (2H, s), 3.60 - 3.64 (2H, m), 3.84 (2H, d, J = 8.4 Hz), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.03 - 7.06 (1H, m), 7.10 (2H, d, J = 1.8 Hz), 7.49 - 7.54 (2H, m), 7.60 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.75 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 8.53 (1H, d, J = 4.5 Hz)
1094	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.35 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.12 (1H, m), 2.77 - 2.82 (4H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.43 (2H, s), 3.64 (3H, s), 3.67 - 3.69 (2H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.03 (1H, d, J = 1.7 Hz), 7.12 (2H, d, J = 2.0 Hz), 7.46 - 7.58 (2H, m), 7.58 - 7.66 (1H, m), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1095	0.19 - 0.27 (2H, m), 0.35 - 0.46 (2H, m), 0.96 - 1.11 (1H, m), 2.99 (2H, t, J = 6.0 Hz), 3.11 (2H, d, J = 6.9 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.25 - 3.29 (2H, m), 3.77 - 3.82 (2H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.16 (2H, s), 7.15 (1H, d, J = 1.6 Hz), 7.22 (2H, d, J = 1.4 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.56 - 7.67 (1H, m), 7.73 - 7.79 (1H, m)
1096	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.10 (1H, m), 1.11 (6H, s), 2.34 - 2.38 (2H, m), 2.77 - 2.81 (4H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.68 (2H, s), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.16 (1H, s), 7.01 (1H, s), 7.10 (2H, s), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.57 - 7.66 (1H, m), 7.74 - 7.80 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1097	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.12 (1H, m), 1.12 - 1.28 (1H, m), 1.55 - 1.68 (1H, m), 1.83 - 1.99 (1H, m), 2.65 - 2.78 (4H, m), 2.81 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.59 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.03 - 7.07 (1H, m), 7.12 (2H, d, J = 1.8 Hz), 7.46 - 7.58 (2H, m), 7.58 - 7.66 (1H, m), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1098	0.20 - 0.27 (2H, m), 0.39 - 0.45 (2H, m), 1.00 - 1.10 (1H, m), 2.46 (2H, t, J = 6.5 Hz), 2.66 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.70 (2H, t, J = 6.4 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.8 Hz), 3.53 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.05 (1H, s), 7.11 (2H, s), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.76 - 7.79 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1099	0.21 - 0.26 (2H, m), 0.39 - 0.45 (2H, m), 0.83 - 0.88 (2H, m), 0.89 - 0.94 (2H, m), 0.98 - 1.04 (1H, m), 1.06 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.42 - 2.49 (4H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.62 (2H, s), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.71 (1H, d, J = 8.5 Hz), 7.04 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.08 (1H, dd, J = 8.3, 2.3 Hz), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1100	0.21 - 0.28 (2H, m), 0.39 - 0.46 (2H, m), 0.98 - 1.12 (1H, m), 2.75 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.85 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.65 (2H, s), 3.91 (2H, s), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.10 (1H, s), 7.15 (2H, d, J = 1.3 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.7, 2.2 Hz), 7.77 - 7.80 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1101	0.21 - 0.26 (2H, m), 0.39 - 0.45 (2H, m), 0.99 - 1.06 (1H, m), 1.07 (3H, d, J = 6.2 Hz), 2.29 - 2.37 (1H, m), 2.41 (1H, dd, J = 12.3, 6.8 Hz), 2.71 (2H, t, J = 5.6 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.58 (2H, s), 3.79 - 3.90 (1H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.37 (1H, d, J = 4.0 Hz), 7.03 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.10 (2H, d, J = 1.4 Hz), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.7, 2.2 Hz), 7.76 - 7.79 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1102	0.18 - 0.28 (2H, m), 0.34 - 0.48 (2H, m), 0.96 - 1.13 (1H, m), 1.13 - 1.30 (2H, m), 1.41 - 1.63 (4H, m), 1.70 (2H, dq, J = 11.3, 6.3 Hz), 2.17 (1H, 五重峰, J = 7.5 Hz), 2.34 (2H, d, J = 7.6 Hz), 2.64 (2H, t, J = 5.7 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.12 (2H, t, J =

	6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.52 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.04 (1H, s), 7.10 (2H, s), 7.45 - 7.57 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.77 (1H, dt, J = 2.3, 1.3 Hz), 8.49 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1103	0.16 - 0.30 (2H, m), 0.36 - 0.51 (2H, m), 0.97 - 1.16 (1H, m), 1.67 (2H, m), 1.77 - 1.94 (2H, m), 1.96 - 2.15 (2H, m), 2.78 (3H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.38 (2H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.07 (1H, s), 7.12 (2H, s), 7.45 - 7.58 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.77 (1H, t, J = 1.9 Hz), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1104	0.12 - 0.30 (2H, m), 0.36 - 0.52 (2H, m), 1.04 (1H, ddd, J = 12.8, 7.9, 5.4 Hz), 2.64 - 2.72 (2H, m), 2.79 (2H, d, J = 5.3 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.52 (2H, s), 3.67 (2H, s), 4.00 (2H, t, J = 6.7 Hz), 6.19 (1H, d, J = 1.5 Hz), 7.02 (1H, s), 7.11 (2H, s), 7.45 - 7.57 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.7, 2.2 Hz), 7.70 - 7.93 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz), 12.37 - 12.78 (1H, m)
1105	2.52 - 2.58 (2H, m), 2.66 - 2.72 (2H, m), 2.74 - 2.81 (3H, m), 3.15 - 3.22 (2H, m), 3.54 - 3.61 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.28 (1H, d, J = 6.1 Hz), 4.45 (1H, t, J = 5.3 Hz), 6.48 (1H, dd, J = 1.8, 0.9 Hz), 7.00 - 7.05 (1H, m), 7.11 (2H, dd, J = 7.8, 2.1 Hz), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.55 - 7.59 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.75 - 7.79 (1H, m), 8.81 (1H, s)
1106	1.57 - 1.66 (1H, m), 1.87 - 1.98 (2H, m), 2.71 (2H, d, J = 5.5 Hz), 2.79 (3H, d, J = 5.9 Hz), 3.16 - 3.27 (5H, m), 3.48 (1H, dd, J = 8.6, 5.2 Hz), 3.57 - 3.61 (4H, m), 3.64 - 3.70 (2H, m), 3.74 (1H, td, J = 8.0, 5.7 Hz), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.46 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.04 (1H, d, J = 1.7 Hz), 7.11 (2H, d, J = 1.6 Hz), 7.50 - 7.54 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.78 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.59 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1107	2.53 (3H, ddd, J = 6.3, 4.3, 2.0 Hz), 2.66 - 2.69 (3H, m), 2.72 - 2.79 (4H, m), 3.19 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.01 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.44 (3H, d, J = 6.1 Hz), 7.01 - 7.03 (1H, m), 7.08 - 7.13 (3H, m), 7.21 - 7.27 (1H, m), 7.31 - 7.33 (3H, m), 7.49 - 7.52 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.76 - 7.78 (1H, m), 9.01 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1108	1.97 (1H, dddd, J = 12.5, 7.8, 6.0, 4.9 Hz), 2.15 (1H, dtd, J = 12.5, 8.0, 6.5 Hz), 2.56 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.67 - 2.73 (2H, m), 2.79 (2H, d, J = 7.2 Hz), 3.17 - 3.21 (2H, m), 3.55 - 3.61 (5H, m), 3.68 - 3.75 (1H, m), 3.83 - 3.89 (2H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (2H, dt, J = 10.9, 6.6 Hz), 7.04 (1H, d, J = 1.7 Hz), 7.11 (2H, d, J = 1.7 Hz), 7.50 - 7.53 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.79 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.51 (1H, d, J = 7.0 Hz)
1109	2.52 - 2.57 (2H, m), 2.68 (2H, dd, J = 7.6, 4.2 Hz), 2.77 (2H, d, J = 5.7 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.53 - 3.59 (4H, m), 4.01 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.41 - 4.46 (3H, m), 6.23 - 6.27 (1H, m), 6.38 (1H, dd, J = 3.2, 1.8 Hz), 7.03 (1H, t, J = 1.3 Hz), 7.09 (2H, d, J = 1.4 Hz), 7.48 - 7.52 (2H, m), 7.55 - 7.58 (1H, m), 7.60 - 7.64 (1H, m), 7.77 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.88 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1110	2.33 - 2.36 (3H, m), 2.51 - 2.56 (2H, m), 2.66 - 2.71 (2H, m), 2.75 - 2.80 (2H, m), 3.16 - 3.20 (2H, m), 3.53 - 3.60 (4H, m), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.42 - 4.49 (3H, m), 7.01 - 7.03 (1H, m), 7.09 (2H, d, J = 1.8 Hz), 7.18 (1H, dt, J = 5.1, 0.8 Hz), 7.48 - 7.52 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.77 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 8.31 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.42 (1H, s), 8.97 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1111	2.53 (3H, s), 2.56 (2H, d, J = 6.3 Hz), 2.66 - 2.72 (2H, m), 2.78 (2H, d, J = 5.7 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.54 - 3.60 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.46 (3H, dt, J = 5.4, 2.3Hz), 7.02 - 7.06 (1H, m), 7.11 (2H, d, J = 1.6 Hz), 7.20 (1H, dd, J = 7.7, 4.8

	Hz), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.59 - 7.66 (2H, m), 7.79 (1H, td, J = 1.8, 0.7 Hz), 8.32 (1H, dd, J = 4.8, 1.7 Hz), 9.03 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1112	1.07 (3H, s), 1.23 (3H, s), 2.07 - 2.14 (1H, m), 2.22 (1H, ddt, J = 11.2, 5.8, 3.3 Hz), 2.55 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.67 - 2.72 (2H, m), 2.75 - 2.82 (2H, m), 3.15 - 3.22 (2H, m), 3.55 - 3.61 (4H, m), 3.66 - 3.73 (1H, m), 3.84 (1H, td, J = 8.5, 4.7 Hz), 4.03 (2H, dp, J = 9.8, 6.1 Hz), 4.31 (1H, td, J = 8.5, 7.3 Hz), 4.45 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.02 - 7.05 (1H, m), 7.10 (2H, d, J = 1.8 Hz), 7.50 - 7.53 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.79 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.24 (1H, d, J = 8.8 Hz)
1113	0.19 - 0.33 (2H, m), 0.35 - 0.47 (2H, m), 0.99 (3H, d, J = 6.7 Hz), 1.02 - 1.10 (1H, m), 2.50 - 2.58 (2H, m), 2.69 - 2.83 (4H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.48 - 3.62 (1H, m), 3.68 (2H, d, J = 3.0 Hz), 4.01 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.34 (1H, t, J = 5.2 Hz), 7.04 (1H, s), 7.09 (2H, s), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.77 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1114	0.18 - 0.28 (2H, m), 0.38 - 0.47 (2H, m), 1.05 (1H, ddd, J = 12.8, 8.0, 4.9 Hz), 2.78 (1H, d, J = 5.7 Hz), 2.85 (1H, t, J = 5.8 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.57 (1H, t, J = 5.8 Hz), 3.69 (1H, t, J = 6.0 Hz), 4.00 - 4.07 (2H, m), 4.16 (2H, t, J = 6.0 Hz), 4.50 - 4.77 (3H, m), 7.11 - 7.31 (3H, m), 7.41 - 7.58 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.6, 2.2 Hz), 7.78 (1H, d, J = 1.9 Hz), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1115	0.15 - 0.32 (2H, m), 0.36 - 0.50 (2H, m), 0.97 - 1.13 (1H, m), 1.71 - 1.89 (1H, m), 2.06 (1H, dd, J = 11.1, 3.8 Hz), 2.54 - 2.77 (2H, m), 2.78 (2H, t, J = 5.5 Hz), 3.00 - 3.09 (1H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.48 - 3.64 (3H, m), 3.67 (1H, q, J = 8.0 Hz), 3.78 - 3.91 (2H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.05 (1H, s), 7.11 (2H, d, J = 1.2 Hz), 7.45 - 7.57 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.77 (1H, dt, J = 2.0, 1.2 Hz), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1116	0.17 - 0.31 (2H, m), 0.36 - 0.50 (2H, m), 0.97 - 1.10 (1H, m), 1.45 - 1.62 (1H, m), 1.95 (1H, s), 2.42 (2H, m), 2.52 - 2.57 (1H, m), 2.67 (2H, br s), 2.79 (2H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.40 (1H, dd, J = 8.3, 5.9 Hz), 3.54 (2H, d, J = 6.5 Hz), 3.62 (1H, q, J = 7.6 Hz), 3.66 - 3.81 (2H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.05 (1H, s), 7.11 (2H, s), 7.45 - 7.57 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.72 - 7.86 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1117	0.15 - 0.28 (2H, m), 0.34 - 0.56 (2H, m), 0.98 - 1.15 (4H, m), 2.67 (2H, s), 2.80 (2H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.16 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.52 (2H, s), 4.29 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.40 (1H, s), 7.47 - 7.59 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.81 (1H, d, J = 2.2 Hz), 8.23 (1H, s), 8.51 (1H, t, J = 6.1 Hz) 2H由DMSO峰遮蔽
1118	0.21 - 0.25 (2H, m), 0.34 - 0.49 (2H, m), 1.03 (1H, m), 2.54 (2H, m), 2.74 (2H, br s), 2.80 (2H, br s), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.16 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.58 (4H, br s), 4.29 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.48 (1H, br s), 7.39 (1H, s), 7.47 - 7.59 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.81 (1H, d, J = 2.1 Hz), 8.23 (1H, s), 8.51 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1119	0.20 - 0.30 (2H, m), 0.38 - 0.48 (2H, m), 1.00 - 1.10 (1H, m), 1.39 - 1.68 (4H, m), 1.78 (1H, dt, J = 12.1, 7.3 Hz), 1.87 (1H, dd, J = 11.7, 6.9 Hz), 2.52 - 2.58 (1H, m), 2.62 - 2.69 (1H, m), 2.77 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.83 - 2.92 (1H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.64 (2H, s), 3.96 - 4.06 (3H, m), 4.63 (1H, d, J = 5.0 Hz), 7.04 (1H, s), 7.09 (2H, d, J = 1.3 Hz), 7.46 - 7.58 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1120	0.19 - 0.29 (2H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 0.99 - 1.11 (1H, m), 1.68 - 1.79 (1H, m), 2.03

	- 2.23 (3H, m), 2.41 (1H, dd, J = 12.3, 6.6 Hz), 2.46 - 2.49 (1H, m), 2.65 - 2.77 (2H, m), 2.79 (2H, t, J = 6.2 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.59 (2H, s), 3.78 (1H, 五重峰, J = 6.3 Hz), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.04 (1H, s), 7.11 (2H, d, J = 1.7 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.60 - 7.64 (2H, m), 7.75 - 7.81 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1121	0.24 (2H, dt, J = 6.1, 4.3 Hz), 0.39 - 0.46 (2H, m), 1.00 - 1.06 (1H, m), 1.08 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.45 - 2.48 (2H, m), 2.67 (2H, dt, J = 5.9, 1.8 Hz), 2.71 (2H, d, J = 5.4 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.53 (2H, s), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.96 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.06 (1H, dd, J = 10.7, 2.0 Hz), 7.48 - 7.57 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.7, 2.2 Hz), 7.75 - 7.81 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1122	0.24 (2H, dt, J = 6.1, 4.3 Hz), 0.39 - 0.46 (2H, m), 0.99 - 1.11 (1H, m), 2.56 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.69 - 2.76 (4H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.53 - 3.64 (4H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.49 (1H, t, J = 5.4 Hz), 6.95 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.06 (1H, dd, J = 10.8, 2.0 Hz), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.58 - 7.67 (1H, m), 7.76 - 7.81 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1123	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.46 (2H, m), 0.99 - 1.09 (1H, m), 2.52 - 2.59 (2H, m), 2.68 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.53 - 3.61 (4H, m), 3.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.47 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.03 (1H, d, J = 11.0 Hz), 7.14 (1H, d, J = 7.7 Hz), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.56 - 7.65 (1H, m), 7.74 - 7.80 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1124	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 0.99 - 1.10 (1H, m), 1.67 - 1.79 (1H, m), 2.03 - 2.16 (2H, m), 2.36 - 2.45 (1H, m), 2.45 - 2.49 (1H, m), 2.50 - 2.57 (1H, m), 2.63 - 2.81 (2H, m), 2.78 - 2.82 (2H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.59 (2H, s), 3.73 - 3.81 (1H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.04 (1H, s), 7.11 (2H, s), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.57 - 7.66 (2H, m), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1125	2.17 (3H, s), 2.69 (2H, s), 2.80 (2H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.35 - 3.42 (2H, m), 3.54 - 3.59 (4H, m), 3.96 (2H, t, J = 6.2 Hz), 4.36 (2H, s), 4.47 (1H, s), 5.91 (1H, s), 7.03 (1H, d, J = 10.8 Hz), 7.15 (1H, d, J = 7.7 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.57 - 7.65 (1H, m), 7.77 (1H, s), 8.68 (1H, s), 12.21 (1H, s)
1126	2.28 (3H, s), 2.55 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.70 (2H, d, J = 5.4 Hz), 2.78 (2H, t, J = 6.0 Hz), 3.20 (2H, q, J = 6.7, 6.2 Hz), 3.57 (3H, t, J = 2.7 Hz), 3.66 (1H, s), 4.02 (2H, s), 4.44 (3H, dd, J = 7.5, 5.8 Hz), 7.03 (1H, d, J = 1.7 Hz), 7.10 (1H, d, J = 1.6 Hz), 7.49 - 7.57 (3H, m), 7.60 - 7.65 (1H, m), 7.76 - 7.79 (1H, m), 8.26 - 8.33 (2H, m), 8.36 (1H, d, J = 2.1 Hz), 9.06 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1127	0.61 (2H, s), 0.84 (2H, d, J = 6.6 Hz), 1.82 (1H, d, J = 8.5 Hz), 2.54 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.66 - 2.72 (3H, m), 2.76 - 2.81 (2H, m), 3.17 - 3.20 (2H, m), 3.55 - 3.59 (3H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.35 (2H, s), 4.44 (1H, t, J = 5.4 Hz), 5.82 (1H, s), 7.03 (1H, s), 7.10 (2H, d, J = 1.5 Hz), 7.46 - 7.53 (2H, m), 7.59 - 7.63 (1H, m), 7.77 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.64 (1H, s), 12.26 (1H, s)
1128	2.31 (3H, s), 2.38 (3H, s), 2.54 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.65 - 2.73 (2H, m), 2.75 - 2.82 (2H, m), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.51 - 3.61 (4H, m), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.43 (2H, d, J = 5.9 Hz), 4.46 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.03 (1H, s), 7.04 (1H, s), 7.07 - 7.13 (2H, m), 7.47 - 7.54 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.73 - 7.82 (1H, m), 8.30 (1H, s), 8.92 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1129	2.31 (3H, s), 2.35 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.79 (2H, t, J = 4.6 Hz), 3.18 (2H, t,

	J = 6.6 Hz), 3.44 (2H, s), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.47 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.02 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.10 (2H, t, J = 1.6 Hz), 7.18 (1H, d, J = 4.9 Hz), 7.47 - 7.53 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.77 (1H, t, J = 1.7 Hz), 8.31 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.42 (1H, s), 8.97 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1130	2.53 - 2.57 (2H, m), 2.67 - 2.72 (2H, m), 2.79 (2H, d, J = 5.9 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 - 3.61 (4H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (1H, t, J = 5.4 Hz), 4.65 (2H, dd, J = 5.7, 1.8 Hz), 7.05 (1H, d, J = 1.5 Hz), 7.11 (2H, d, J = 1.3 Hz), 7.41 (1H, dt, J = 8.6, 4.4 Hz), 7.51 - 7.55 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.7, 2.2 Hz), 7.71 (1H, ddd, J = 10.3, 8.4, 1.3 Hz), 7.80 (1H, td, J = 1.8, 0.7 Hz), 8.40 (1H, dt, J = 4.7, 1.5 Hz), 8.84 (1H, t, J = 5.7 Hz)
1131	1.54 (3H, d, J = 7.0 Hz), 2.52 - 2.58 (2H, m), 2.69 (2H, dd, J = 7.6, 4.6 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.5 Hz), 3.11 - 3.22 (3H, m), 3.58 (3H, d, J = 5.0 Hz), 4.00 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.48 (1H, t, J = 5.4 Hz), 5.18 - 5.26 (1H, m), 7.03 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.10 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.37 (1H, ddd, J = 7.9, 4.8, 0.9 Hz), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 7.1, 2.0 Hz), 7.77 - 7.88 (2H, m), 8.46 (1H, dd, J = 4.8, 1.7 Hz), 8.64 (1H, d, J = 2.1 Hz), 8.95 (1H, dd, J = 8.5, 3.3 Hz) (未見一個質子)
1132	2.54 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.65 - 2.71 (2H, m), 2.77 (2H, d, J = 5.7 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.53 - 3.59 (4H, m), 3.77 (3H, s), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.37 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.44 (1H, t, J = 5.4 Hz), 6.12 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.03 (1H, d, J = 1.7 Hz), 7.09 (2H, d, J = 1.4 Hz), 7.48 - 7.51 (2H, m), 7.56 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.61 (1H, dt, J = 6.6, 2.2 Hz), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.71 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1133	2.55 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.69 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.76 - 2.82 (2H, m), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 - 3.61 (4H, m), 3.84 (3H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.48 (3H, dd, J = 7.6, 5.7 Hz), 6.16 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.02 - 7.05 (1H, m), 7.10 (2H, d, J = 1.7 Hz), 7.30 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.78 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 9.01 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1134	2.36 (3H, s), 2.45 - 2.57 (2H, m), 2.68 - 2.73 (1H, m), 2.79 - 2.84 (2H, m), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.26 - 3.37 (2H, m), 3.56 - 3.60 (4H, m), 3.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.05 (1H, d, J = 11.0 Hz), 7.12 - 7.22 (2H, m), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.57 - 7.65 (1H, m), 7.74 - 7.80 (1H, m), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.44 (1H, s), 9.01 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1135	2.32 (3H, d, J = 3.1 Hz), 2.58 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.77 - 2.83 (2H, m), 3.03 (1H, d, J = 1.6 Hz), 3.20 (2H, q, J = 6.7, 6.0 Hz), 3.45 (2H, d, J = 2.6 Hz), 3.83 (3H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.38 (2H, d, J = 6.2 Hz), 6.77 - 6.81 (1H, m), 7.03 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.11 (1H, q, J = 2.1 Hz), 7.50 - 7.54 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.69 (1H, dt, J = 8.5, 2.0 Hz), 7.77 (1H, t, J = 2.1 Hz), 8.13 (1H, dd, J = 2.5, 0.9 Hz), 8.99 - 9.04 (1H, m)
1136	2.33 (3H, s), 2.55 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.65 - 2.72 (2H, m), 2.78 (2H, d, J = 5.9 Hz), 3.22 (3H, q, J = 6.5 Hz), 3.57 (4H, q, J = 5.7, 4.1 Hz), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.59 (2H, d, J = 5.2 Hz), 7.04 (1H, t, J = 1.3 Hz), 7.11 (1H, d, J = 1.3 Hz), 7.23 (1H, dd, J = 7.5, 5.0 Hz), 7.49 - 7.57 (3H, m), 7.58 - 7.66 (2H, m), 7.79 (1H, dt, J = 2.3, 1.2 Hz), 8.36 - 8.40 (1H, m), 8.70 - 8.76 (1H, m)
1137	2.54 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.69 (2H, t, J = 5.7 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.52 - 3.61 (4H, m), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.44 (1H, t, J = 5.4 Hz), 4.50 (2H, d, J = 6.2 Hz), 7.03 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.09 (2H, d, J = 1.8 Hz), 7.47 - 7.55 (2H,

	m), 7.63 (2H, ddt, J = 9.2, 7.0, 2.0 Hz), 7.78 (1H, dt, J = 2.3, 1.2 Hz), 8.43 - 8.49 (2H, m), 9.13 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1138	2.52 - 2.58 (2H, m), 2.66 - 2.72 (2H, m), 2.78 (2H, d, J = 5.9 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 - 3.61 (4H, m), 3.83 (3H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.38 (2H, d, J = 6.2 Hz), 4.45 (1H, t, J = 5.4 Hz), 6.79 (1H, dd, J = 8.5, 0.8 Hz), 7.02 - 7.05 (1H, m), 7.10 (2H, d, J = 1.7 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.69 (1H, dd, J = 8.5, 2.5 Hz), 7.77 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 8.13 (1H, dd, J = 2.4, 0.8 Hz), 9.01 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1139	2.45 (3H, d, J = 1.8 Hz), 2.54 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.65 - 2.71 (2H, m), 2.78 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.13 - 3.24 (3H, m), 3.52 - 3.61 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.44 (1H, q, J = 4.7, 3.9 Hz), 4.50 (2H, d, J = 6.2 Hz), 7.03 (1H, d, J = 1.5 Hz), 7.10 (2H, t, J = 1.2 Hz), 7.12 (1H, s), 7.49 - 7.53 (2H, m), 7.61 - 7.66 (2H, m), 7.79 (1H, td, J = 2.2, 0.8 Hz), 9.01 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1140	1.09 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.36 - 2.38 (3H, m), 2.47 (2H, d, J = 7.2 Hz), 2.61 - 2.69 (2H, m), 2.80 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.20 (3H, t, J = 6.6 Hz), 3.52 (2H, s), 4.03 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.06 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.11 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.20 (1H, dt, J = 5.0, 0.8 Hz), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.79 (1H, td, J = 2.0, 0.6 Hz), 8.33 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.44 (1H, s), 8.99 (1H, s)
1141	2.55 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.70 (2H, t, J = 5.7 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.53 - 3.62 (4H, m), 3.82 (3H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.47 (3H, d, J = 6.2 Hz), 7.04 (1H, d, J = 1.7 Hz), 7.11 (2H, d, J = 1.8 Hz), 7.34 (1H, dd, J = 2.9, 1.7 Hz), 7.47 - 7.58 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.79 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 8.18 (2H, dd, J = 9.3, 2.3 Hz), 9.09 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1142	1.32 (1H, ddt, J = 15.6, 7.6, 3.9 Hz), 1.57 (1H, tdd, J = 12.1, 7.7, 4.5 Hz), 1.96 - 2.07 (1H, m), 2.54 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.68 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.77 (2H, d, J = 5.8 Hz), 3.19 (3H, t, J = 6.7 Hz), 3.41 - 3.50 (1H, m), 3.54 - 3.59 (4H, m), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.44 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.03 (1H, t, J = 1.3 Hz), 7.09 (2H, d, J = 1.5 Hz), 7.49 - 7.53 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.76 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 8.69 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1143	0.21 - 0.28 (2H, m), 0.38 - 0.46 (2H, m), 0.83 - 0.90 (2H, m), 0.90 - 0.95 (2H, m), 0.99 - 1.11 (1H, m), 2.53 - 2.62 (4H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.56 (2H, q, J = 6.0 Hz), 3.70 (2H, s br), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.46 (1H, s br), 6.72 (1H, d, J = 8.5 Hz), 7.02 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.08 (1H, dd, J = 8.4, 2.2 Hz), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.57 - 7.66 (1H, m), 7.75 - 7.79 (1H, m), 8.49 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1144	0.86 (2H, t, J = 4.1 Hz), 0.91 (2H, t, J = 4.3 Hz), 2.36 (3H, s), 2.52 - 2.58 (4H, m), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.56 (2H, q, J = 6.0 Hz), 3.69 (2H, s), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.44 (1H, t, J = 5.4 Hz), 4.47 (2H, d, J = 6.0 Hz), 6.71 (1H, d, J = 8.5 Hz), 7.02 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.08 (1H, dd, J = 8.3, 2.2 Hz), 7.18 (1H, d, J = 4.9 Hz), 7.45 - 7.58 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 8.98 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1145	1.53 (3H, d, J = 7.1 Hz), 2.54 (2H, t, J = 6.3 Hz), 2.66 - 2.72 (2H, m), 2.78 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.10 - 3.21 (3H, m), 3.57 (4H, d, J = 4.6 Hz), 4.00 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.45 (1H, t, J = 5.4 Hz), 5.22 (1H, 五重峰, J = 7.2 Hz), 7.02 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.09 (1H, d, J = 1.8 Hz), 7.36 (1H, ddd, J = 7.9, 4.8, 0.9 Hz), 7.50 - 7.55 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.77 - 7.85 (2H, m), 8.45 (1H, dd, J = 4.8, 1.6 Hz), 8.63 (1H, d, J = 2.3

	Hz), 8.91 (1H, d, J = 8.3 Hz)
1146	(CD_3OD) 1.01 - 1.07 (4H, m), 1.92 (1H, s), 2.33 - 2.54 (2H, m), 2.77 (2H, t, J = 6.0 Hz), 2.89 - 2.98 (4H, m), 3.56 - 3.62 (1H, m), 3.76 - 3.83 (3H, m), 4.10 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.54 (2H, s), 6.24 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.10 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.14 - 7.20 (2H, m), 7.23 - 7.38 (2H, m), 7.43 - 7.47 (2H, m), 7.57 - 7.61 (2H, m), 7.73 (1H, qd, J = 2.3, 1.0 Hz)
1147	2.42 (3H, s), 2.54 (2H, t, J = 6.3 Hz), 2.68 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.57 (4H, d, J = 4.4 Hz), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.40 (2H, d, J = 6.2 Hz), 4.47 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.01 - 7.04 (1H, m), 7.09 (2H, d, J = 1.8 Hz), 7.20 (1H, d, J = 8.0 Hz), 7.48 - 7.54 (2H, m), 7.59 - 7.64 (2H, m), 7.76 - 7.78 (1H, m), 8.41 (1H, dd, J = 2.3, 0.8 Hz), 9.06 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1148	1.23 (3H, d, J = 6.9 Hz), 2.36 (3H, s), 2.37 - 2.41 (1H, m), 2.52 - 2.57 (2H, m), 2.74 - 2.82 (1H, m), 2.89 - 2.97 (1H, m), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 - 3.61 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.44 (1H, s br), 4.47 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.02 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.13 (1H, dd, J = 8.2, 2.2 Hz), 7.19 (1H, d, J = 5.0 Hz), 7.24 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 8.99 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1149	0.21 - 0.27 (2H, m), 0.38 - 0.45 (2H, m), 1.00 - 1.10 (1H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, dd, J = 7.1, 6.2 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.61 - 7.68 (1H, m), 7.79 - 7.81 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1150	0.62 (2H, s), 0.86 (2H, s), 1.09 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.84 (1H, s), 2.47 (2H, d, J = 7.1 Hz), 2.62 - 2.68 (2H, m), 2.80 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.52 (2H, s), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.36 (2H, s), 5.83 (1H, s), 7.06 (1H, s), 7.12 (2H, d, J = 1.6 Hz), 7.50 - 7.55 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.79 (1H, dt, J = 2.3, 1.2 Hz), 8.68 (1H, s), 12.23 (1H, d, J = 47.5 Hz)
1151	2.54 (1H, t, J = 6.2 Hz), 2.66 - 2.72 (2H, m), 2.75 - 2.81 (2H, m), 3.17 - 3.21 (2H, m), 3.54 - 3.60 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.47 (1H, t, J = 5.4 Hz), 4.55 (2H, d, J = 6.1 Hz), 7.04 (1H, s), 7.11 (2H, d, J = 1.4 Hz), 7.16 (1H, d, J = 0.9 Hz), 7.49 - 7.56 (3H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.79 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.05 (1H, d, J = 0.8 Hz), 9.10 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1152	0.21 - 0.27 (2H, m), 0.39 - 0.45 (2H, m), 1.01 - 1.10 (1H, m), 1.23 (3H, d, J = 6.9 Hz), 2.39 (1H, dd, J = 11.4, 6.5 Hz), 2.52 - 2.59 (2H, m), 2.79 (1H, dd, J = 11.3, 5.0 Hz), 2.94 (1H, q, J = 6.3 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 - 3.61 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.45 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.02 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.13 (1H, dd, J = 8.2, 2.2 Hz), 7.24 (1H, d, J = 8.4 Hz), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.75 - 7.79 (1H, m), 8.49 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1153	0.21 - 0.27 (2H, m), 0.39 - 0.45 (2H, m), 1.00 - 1.05 (1H, m), 1.08 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.23 (3H, d, J = 6.9 Hz), 2.33 (1H, dd, J = 11.4, 6.2 Hz), 2.40 - 2.47 (2H, m), 2.70 (1H, dd, J = 11.4, 5.1 Hz), 2.93 (1H, heptet, J = 6.3 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.49 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.04 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.13 (1H, dd, J = 8.3, 2.2 Hz), 7.24 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1154	2.57 (2H, d, J = 6.1 Hz), 2.70 (2H, d, J = 11.9 Hz), 2.79 (2H, d, J = 5.8 Hz), 3.20 (2H, t,

	J = 6.6 Hz), 3.58 (4H, q, J = 6.1 Hz), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.49 (1H, s), 4.58 (2H, d, J = 5.9 Hz), 7.05 (1H, s), 7.11 (2H, d, J = 1.4 Hz), 7.50 - 7.58 (3H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.80 (1H, td, J = 2.0, 0.6 Hz), 8.46 (1H, d, J = 5.3 Hz), 8.56 (1H, s), 9.11 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1155	2.54 (2H, d, J = 6.2 Hz), 2.68 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.77 (2H, d, J = 5.8 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.56 (4H, t, J = 2.8 Hz), 3.76 (3H, d, J = 2.2 Hz), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.40 (2H, d, J = 5.8 Hz), 4.46 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.03 (1H, s), 7.10 (2H, d, J = 1.3 Hz), 7.48 - 7.52 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.6, 2.2 Hz), 7.78 (1H, dt, J = 2.4, 1.3 Hz), 7.87 (1H, d, J = 5.4 Hz), 8.64 (1H, t, J = 5.8 Hz)
1156	2.54 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.67 - 2.70 (2H, m), 2.78 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.18 - 3.20 (1H, m), 3.21 - 3.23 (3H, m), 3.54 - 3.58 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.24 - 4.42 (4H, m), 4.47 (2H, t, J = 5.4 Hz), 6.12 (1H, s), 7.03 (1H, d, J = 1.7 Hz), 7.10 (2H, d, J = 1.5 Hz), 7.46 - 7.54 (3H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.78 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.83 (1H, d, J = 60.1 Hz)
1157	1.97 (3H, d, J = 0.9 Hz), 2.53 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.65 - 2.71 (2H, m), 2.77 (2H, t, J = 5.6 Hz), 3.16 - 3.20 (2H, m), 3.53 - 3.59 (4H, m), 3.70 (3H, s), 4.01 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.36 (2H, d, J = 5.9 Hz), 4.46 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.03 (1H, t, J = 1.3 Hz), 7.09 (2H, d, J = 1.5 Hz), 7.36 (1H, d, J = 0.9 Hz), 7.47 - 7.52 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.7, 2.2 Hz), 7.77 (1H, td, J = 1.8, 0.7 Hz), 8.52 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1158	1.07 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.23 (3H, d, J = 6.9 Hz), 2.30 - 2.35 (1H, m), 2.36 (3H, s), 2.40 - 2.48 (2H, m), 2.70 (1H, dd, J = 11.5, 5.1 Hz), 2.93 (1H, q, J = 6.3 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.49 (2H, s), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.03 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.13 (1H, dd, J = 8.2, 2.3 Hz), 7.19 (1H, d, J = 4.9 Hz), 7.23 (1H, d, J = 8.4 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.78 (1H, dt, J = 2.4, 1.2 Hz), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 8.99 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1159	2.36 (3H, s), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.19 (1H, d, J = 5.0 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.47 - 7.54 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.6, 2.1 Hz), 7.76 - 7.85 (2H, m), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.44 (1H, s), 8.99 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1160	2.52 - 2.60 (2H, m), 2.69 (2H, t, J = 5.7 Hz), 2.78 (2H, d, J = 5.7 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.52 - 3.68 (4H, m), 3.88 (3H, s), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.46 (1H, t, J = 5.5 Hz), 4.57 (2H, d, J = 5.4 Hz), 7.04 (1H, s), 7.11 (2H, s), 7.31 (1H, dd, J = 8.3, 4.7 Hz), 7.44 (1H, d, J = 7.4 Hz), 7.47 - 7.59 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.6, 2.1 Hz), 7.78 (1H, d, J = 2.2 Hz), 8.07 - 8.15 (1H, m), 8.56 (1H, t, J = 5.3 Hz)
1161	2.52 (2H, d, J = 1.8 Hz), 2.68 (2H, s), 2.79 (2H, s), 3.19 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.58 (4H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.47 (1H, s), 4.54 (2H, d, J = 6.1 Hz), 7.05 (1H, s), 7.11 (2H, s), 7.31 - 7.42 (1H, m), 7.45 - 7.59 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.80 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.39 (1H, dd, J = 4.8, 1.1 Hz), 8.52 (1H, d, J = 1.7 Hz), 9.15 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1162	2.27 - 2.30 (1H, m), 2.59 - 2.71 (3H, m), 2.74 (2H, d, J = 5.8 Hz), 3.15 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (4H, q, J = 6.2 Hz), 3.99 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.42 (1H, s), 4.64 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.00 (1H, s), 7.07 (2H, d, J = 1.3 Hz), 7.44 - 7.52 (2H, m), 7.60 - 7.63 (1H, m), 7.70 (1H, d, J = 5.1 Hz), 7.76 (1H, d, J = 2.0 Hz), 8.72 (1H, d, J = 5.0 Hz), 8.76 (1H, s), 9.15 (1H, t, J = 6.0 Hz)

1163	2.27 (3H, s), 2.48 - 2.54 (2H, m), 2.66 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.75 (2H t, J = 5.7 Hz), 3.15 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.52 - 3.55 (4H, m), 3.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.40 (2H, d, J = 6.1 Hz), 7.00 (1H, s), 7.07 (2H, d, J = 1.3 Hz), 7.16 (1H, d, J = 5.0 Hz), 7.45 - 7.52 (2H m), 7.61 (1H, dt, J = 6.6, 2.2 Hz), 7.76 (1H, t, J = 2.1 Hz), 8.31 (2H, d, J = 5.0 Hz), 9.03 (1H, t, J = 6.1 Hz)。
1164	1.07 (3H, s), 1.22 (3H, s), 1.38 (2H, s), 1.48 (4H, s), 2.06 - 2.24 (2H, m), 2.31 (4H, s), 3.19 (2H, q, J = 6.5 Hz), 3.41 (2H, s), 3.70 (1H, dt, J = 8.5, 7.6 Hz), 3.84 (1H, td, J = 8.5, 4.7 Hz), 4.00 – 4.13 (2H, m), 4.27 - 4.36 (1H, m), 7.17 (1H, d, J = 7.5 Hz), 7.21 - 7.28 (2H, m), 7.33 (1H, t, J = 7.7 Hz), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.80 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 8.27 (1H, d, J = 8.8 Hz)
1166	2.19 (3H, d, J = 0.8 Hz), 2.55 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.70 (2H, t, J = 5.7 Hz), 2.78 (2H, d, J = 5.8 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 - 3.60 (4H, m), 3.65 (3H, s), 4.00 - 4.05 (2H, m), 4.31 (2H, d, J = 6.1 Hz), 4.48 (1H, t, J = 5.4 Hz), 5.94 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.04 (1H, d, J = 1.7 Hz), 7.11 (2H, d, J = 1.3 Hz), 7.49 - 7.54 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.7, 2.2 Hz), 7.79 (1H, td, J = 1.8, 0.7 Hz), 8.69 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1167	2.55 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.68 - 2.72 (2H, m), 2.78 (2H, d, J = 5.9 Hz), 3.21 (2H, d, J = 6.5 Hz), 3.56 - 3.59 (4H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.33 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.48 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.04 (1H, s), 7.11 (2H, d, J = 1.7 Hz), 7.50 - 7.54 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.78 (1H, dt, J = 2.4, 1.2 Hz), 8.57 (1H, s), 8.86 (1H, d, J = 0.8 Hz), 8.97 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1168	1.38 (2H, s), 1.48 (4H, s), 2.18 (3H, s), 2.32 (4H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.40 (2H, d, J = 8.3 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.36 (2H, s), 5.91 (1H, s), 7.18 (1H, d, J = 7.5 Hz), 7.22 - 7.30 (2H, m), 7.34 (1H, t, J = 7.7 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.80 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.68 (1H, s), 12.22 (1H, s)
1169	0.21 - 0.27 (2H, m), 0.39 - 0.45 (2H, m), 1.00 - 1.05 (1H, m), 1.08 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.46 (2H, q, J = 7.2 Hz), 2.62 - 2.67 (2H, m), 2.71 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.31 (3H, s), 3.51 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.36 (2H, s), 7.00 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.13 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.77 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.49 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1170	2.49 - 2.56 (2H, m), 2.63 - 2.73 (2H, m), 2.74 - 2.84 (2H, m), 3.20 (3H, t, J = 6.5 Hz), 3.58 (3H, s), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.41 - 4.49 (1H, m), 4.68 (2H, d, J = 5.6 Hz), 7.12 (2H, s), 7.38 (1H, dd, J = 8.1, 4.7 Hz), 7.48 - 7.58 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.5, 2.1 Hz), 7.79 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.94 (1H, dd, J = 8.1, 1.5 Hz), 8.51 (1H, dd, J = 4.7, 1.4 Hz), 8.76 (1H, d, J = 5.7 Hz)。
1171	2.44 (3H, s), 2.53 - 2.57 (2H, m), 2.70 (2H, t, J = 5.7 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.6 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.53 - 3.61 (5H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.42 (2H, d, J = 6.2 Hz), 7.00 - 7.20 (4H, m), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.59 - 7.68 (1H, m), 7.77 - 7.81 (1H, m), 8.28 (1H, s), 8.36 (1H, dd, J = 5.1, 0.8 Hz), 9.09 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1172	2.53 - 2.57 (2H, m), 2.70 (2H, d, J = 5.5 Hz), 2.79 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 - 3.60 (5H, m), 3.95 (3H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.43 (2H, d, J = 6.2 Hz), 7.04 (1H, s), 7.08 - 7.13 (2H, m), 7.16 (1H, d, J = 4.7 Hz), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.63 - 7.68 (1H, m), 7.79 - 7.83 (1H, m), 8.17 (1H, d, J = 4.8 Hz), 8.32 (1H, s), 8.98 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1173	1.37 (2H, s), 1.48 (4H, t, J = 5.6 Hz), 2.31 (4H, s), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.40 (2H, s), 3.82 (3H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.37 (2H, d, J = 6.2 Hz), 6.79 (1H, d, J = 8.5

	Hz), 7.17 (1H, d, J = 7.5 Hz), 7.20 - 7.28 (2H, m), 7.33 (1H, t, J = 7.7 Hz), 7.45 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.69 (1H, dd, J = 8.6, 2.5 Hz), 7.78 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.13 (1H, d, J = 2.4 Hz), 9.03 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1174	1.37 (2H, t, J = 7.0 Hz), 1.45 - 1.53 (4H, m), 2.31 (4H, s), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.40 (2H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.57 (2H, d, J = 5.9 Hz), 7.17 (1H, dt, J = 7.7, 1.4 Hz), 7.20 - 7.28 (2H, m), 7.33 (1H, t, J = 7.7 Hz), 7.48 - 7.58 (3H, m), 7.65 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.81 (1H, dt, J = 2.4, 1.2 Hz), 8.45 (1H, d, J = 5.3 Hz), 8.55 (1H, d, J = 0.6 Hz), 9.11 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1175	0.20 - 0.29 (2H, m), 0.38 - 0.46 (2H, m), 1.00 - 1.10 (1H, m), 2.72 - 2.78 (3H, m), 2.77 - 2.84 (3H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.62 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.62 (2H, dt, J = 48 (H-F), 4.9 Hz), 7.05 (1H, s), 7.12 (2H, d, J = 1.3 Hz), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.60 - 7.64 (1H, m), 7.76 - 7.80 (1H, m), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1176	0.24 (2H, q, J = 4.4 Hz), 0.32 - 0.52 (2H, m), 1.05 (1H, s), 2.73 (2H, d, J = 4.8 Hz), 2.79 (2H, d, J = 5.4 Hz), 2.88 (2H, t, J = 6.8 Hz), 3.01 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.38 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.61 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.05 (1H, s), 7.12 (2H, s), 7.41 - 7.57 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.77 (1H, d, J = 2.2 Hz), 8.50 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1177	1.38 (2H, s), 1.48 (4H, t, J = 5.3 Hz), 2.31 (4H, d, J = 8.0 Hz), 2.36 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.41 (2H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.18 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.21 - 7.28 (2H, m), 7.33 (1H, t, J = 7.7 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.80 (1H, dt, J = 2.4, 1.2 Hz), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.44 (1H, s), 9.02 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1178	1.38 (2H, s), 1.48 (4H, t, J = 5.7 Hz), 1.98 (3H, d, J = 0.9 Hz), 2.31 (4H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.41 (2H, s), 3.72 (3H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.37 (2H, d, J = 5.8 Hz), 7.17 (1H, d, J = 7.5 Hz), 7.20 - 7.28 (2H, m), 7.33 (1H, t, J = 7.7 Hz), 7.38 (1H, s), 7.46 - 7.55 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.7, 2.2 Hz), 7.80 (1H, d, J = 2.0 Hz), 8.53 (1H, t, J = 5.8 Hz)
1179	2.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.16 - 3.24 (2H, m), 3.48 - 3.56 (3H, m), 3.62 (1H, dd, J = 8.9, 4.1 Hz), 3.90 (1H, dd, J = 9.3, 4.9 Hz), 3.97 (1H, dd, J = 9.0, 6.1 Hz), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.16 - 4.30 (2H, m), 5.29 (1H, d, J = 4.3 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.53 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.7, 2.2 Hz), 7.80 (1H, td, J = 1.8, 0.7 Hz), 7.82 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.47 (1H, d, J = 7.1 Hz)
1180	1.64 (1H, m), 1.80 - 2.01 (1H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.18 - 3.25 (2H, m), 3.38 - 3.49 (2H, m), 3.51 - 3.61 (4H, m), 3.62 - 3.85 (2H, m), 3.96 (1H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.80 (1H, t, J = 5.6 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.54 (2H, m), 7.64 (1H, m), 7.80 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.82 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.09 (1H, dd, J = 27.9, 9.3 Hz) 未見1 X H
1181	2.49 (3H, s), 2.79 (2H, t, J = 6.6 Hz), 2.84 (3H, s), 3.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.36 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.88 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.58 (2H, d, J = 6.1 Hz), 7.13 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.27 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.30 - 7.37 (2H, m), 7.46 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.61 - 7.65 (2H, m), 9.23 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1182	2.97 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.03 (s, 3H), 3.20 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.55 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 4.08 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 7.32 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 7.45 (dd, J = 8.1, 2.3 Hz, 1H), 7.48 (m, 2H), 7.48-7.56 (m, 2H), 7.60 (dt, J = 6.8, 2.1 Hz, 1H), 7.75 (t, J = 2.0 Hz, 1H), 7.83 (d, J = 2.3 Hz, 1H)

1183	2.90 – 3.08 (7H, m), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz,), 4.57 (2H, s), 5.26 (1H, s), 7.31 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.40 – 7.49 (3H, m), 7.54 (1H, dt, J = 7.3, 2.0 Hz), 7.66 (1H, t, J = 1.9 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz)
1184	2.99 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 3.07 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 3.15 (s, 3H), 3.44 (s, 3H), 3.55 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 4.13 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 4.59 (s, 2H), 7.17 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.29-7.32 (m, 2H), 7.42-7.49 (m, 2H), 7.60 (dt, J = 2.0, 1.0 Hz, 1H), 7.96 (d, J = 2.4 Hz, 1H)
1185	2.21 (3H, s), 2.39 (3H, s), 2.94 - 2.98 (2H, m), 3.02 (3H, s), 3.18 - 3.22 (2H, m), 3.51 - 3.56 (2H, m), 4.05 (2H, q, J = 6.5 Hz), 4.19 (2H, d, J = 5.9 Hz), 7.28 - 7.32 (1H, m), 7.43 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.48 - 7.54 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.75 - 7.79 (1H, m), 7.82 (1H, dd, J = 4.5, 2.3 Hz), 8.89 (1H, t, J = 5.8 Hz)
1186	2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.04 (3H, s), 3.23 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.49 (3H, s), 3.56 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.82 (3H, s), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.29 (2H, d, J = 6.1 Hz), 5.58 (1H, s), 7.33 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.50 - 7.55 (2H, m), 7.64 - 7.68 (1H, m), 7.81 - 7.85 (2H, m), 8.74 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1187	2.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.01 (3H, s), 3.15 - 3.19 (2H, m), 3.51 - 3.56 (2H, m), 3.70 - 3.81 (2H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 5.04 - 5.17 (2H, m), 7.30 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.35 (1H,ddd, J = 7.8, 4.8, 0.8 Hz), 7.43 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.50 - 7.55 (2H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.79 - 7.83 (3H, m), 8.45 (1H, dd, J = 4.8, 1.6 Hz), 8.60 (1H, q, J = 0.8 Hz), 8.74 (1H, d, J = 8.2 Hz)
1188	2.15 (3H, s), 2.36 (3H, d, J = 0.7 Hz), 3.12 (2H, t, J = 8.5 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.00 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.12 (2H, t, J = 8.5 Hz), 4.47 (2H, d, J = 5.9 Hz), 6.95 (1H, dd, J = 7.9, 2.0 Hz), 7.19 (1H, d, J = 4.9 Hz), 7.23 (1H, d, J = 8.0 Hz), 7.46 - 7.55 (2H, m), 7.59 - 7.66 (1H, m), 7.78 - 7.80 (1H, m), 7.99 (1H, d, J = 2.1 Hz), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 8.99 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1189	2.31 (3H, s), 2.38 (3H, s), 2.97 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.21 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.50 – 3.59 (2H, m), 4.06 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.39 – 4.46 (2H, m), 7.02 – 7.07 (1H, m), 7.32 (1H, d, J=8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J=8.1, 2.3 Hz), 7.47 – 7.54 (2H, m), 7.60 – 7.68 (1H, m), 7.78 – 7.81 (1H, m), 7.82 (1H, d, J=2.3 Hz), 8.30 (1H, s), 8.94 (1H, t, J=6.0 Hz)。
1190	0.21 – 0.26 (2H, m), 0.39 – 0.44 (2H, m), 0.99 – 1.10 (1H, m), 2.96 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.10 – 3.14 (2H, m), 3.21 (2H, t, J=6.5 Hz), 3.54 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.11 (2H, t, J=6.6 Hz), 7.30 – 7.35 (2H, m), 7.49 – 7.56 (2H, m), 7.61 – 7.66 (1H, m), 7.77 – 7.81 (1H, m), 7.86 (1H, d, J=8.2 Hz), 8.54 (1H, t, J=6.0 Hz)
1191	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.12 (1H, m), 2.53 - 2.64 (2H, m), 2.61 - 2.72 (1H, m), 2.92 - 3.01 (1H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.39 (3H, s), 3.54 - 3.64 (4H, m), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.32 - 4.40 (1H, m), 4.48 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.09 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.19 (1H, dd, J = 8.3, 2.2 Hz), 7.37 (1H, d, J = 8.4 Hz), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.57 - 7.67 (1H, m), 7.75 - 7.81 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)。
1192	0.17 – 0.27 (2H, m), 0.35 – 0.44 (2H, m), 0.96 – 1.06 (1H, m), 3.04 (3H, s), 3.08 (2H, t, J=6.4 Hz), 3.20 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.06 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.43 (2H, s), 7.45 – 7.51 (2H, m), 7.52 – 7.58 (2H, m), 7.60 – 7.65 (2H, m), 7.76 – 7.79 (1H, m), 8.50 (1H, t, J=6.0 Hz)
1193	2.59 (3H, s), 2.98 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.04 (3H, s), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.56 (2H, d, J = 6.1 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.1 Hz),

	7.44 -7.51 (3H, m), 7.52 - 7.53 (1H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.80 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 7.84 (1H, d, J = 2.3 Hz), 9.12 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1194	2.38 (3H, s), 2.98 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.04 (3H, s), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, q, J = 7.0 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.46 (2H, d, J = 5.9 Hz), 6.86 (1H, d, J = 1.0 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.50 - 7.55 (2H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.6, 2.2 Hz), 7.80 - 7.85 (2H, m), 8.97 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1195	0.19 - 0.26 (2H, m), 0.34 - 0.48 (2H, m), 0.98 - 1.10 (1H, m), 2.92 (3H, s), 2.97 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.09 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.26 - 7.31 (1H, m), 7.40 - 7.50 (3H, m), 7.50 - 7.56 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.79 - 7.82 (1H, m), 8.56 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1196	1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.92 (3H, s), 2.97 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.12 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.36 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.25 - 7.30 (1H, m), 7.40 - 7.49 (3H, m), 7.50 - 7.55 (1H, m), 7.56 (1H, dt, J = 8.0, 1.7 Hz), 7.61 (1H, dt, J = 7.4, 1.8 Hz), 7.76 - 7.79 (1H, m)
1197	1.07 (3H, s), 1.22 (3H, s), 2.05 - 2.15 (1H, m), 2.17 - 2.27 (1H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.17 - 3.25 (2H, m), 3.54 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.66 - 3.74 (1H, m), 3.80 - 3.87 (1H, m), 4.01 - 4.12 (2H, m), 4.27 - 4.35 (1H, m), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.63 - 7.68 (1H, m), 7.80 - 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.27 (1H, d, J = 8.8 Hz)
1198	1.56 - 1.66 (1H, m), 1.85 - 1.97 (1H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.19 - 3.26 (4H, m), 3.44 - 3.50 (1H, m), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.57 - 3.69 (2H, m), 3.70 - 3.78 (1H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.62 - 7.66 (1H, m), 7.79 - 7.80 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.62 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1199	2.19 (3H, d, J = 0.7 Hz), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.50 - 3.59 (2H, m), 3.64 (3H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.1 Hz), 5.94 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.62 - 7.68 (1H, m), 7.79 - 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.70 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1200	2.16 (3H, s), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.36 (2H, d, J = 5.9 Hz), 5.91 (1H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.54 (2H, m), 7.62 - 7.67 (1H, m), 7.80 - 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.59 - 8.83 (1H, m), 12.22 (1H, s)
1201	2.26 - 2.31 (3H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.43 (2H, d, J = 6.2 Hz), 7.32 (1H, d, J = 7.9 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.48 - 7.55 (3H, m), 7.63 - 7.67 (1H, m), 7.79 - 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.4 Hz), 8.27 - 8.32 (1H, m), 8.34 - 8.38 (1H, m), 9.10 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1202	2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.76 (2H, d, J = 6.1 Hz), 7.32 (1H, d, J = 7.9 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.61 - 7.71 (3H, m), 7.81 - 7.85 (2H, m), 9.14 (1H, dd, J = 4.7, 1.8 Hz), 9.22 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1203	1.60 - 1.74 (4H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.35 - 3.41 (2H, m), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.83 - 3.92 (2H, m), 4.06 (3H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.0, 2.3 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.62 - 7.66

	(1H, m), 7.78 - 7.81 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.35 (1H, d, J = 8.4 Hz)
1204	2.52 - 2.57 (2H, m), 2.66 - 2.72 (2H, m), 2.75 - 2.82 (2H, m), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.53 - 3.61 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.44 - 4.50 (1H, m), 4.76 (2H, d, J = 5.8 Hz), 7.04 (1H, s), 7.08 - 7.14 (2H, m), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.61 - 7.70 (3H, m), 7.78 - 7.83 (1H, m), 9.14 (1H, m), 9.21 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1205	2.19 (3H, d, J=0.7 Hz), 2.96 (2H, t, J=6.7 Hz), 3.02 (3H, s), 3.21 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J=6.7 Hz), 3.64 (3H, s), 4.11 (2H, t, J=6.5 Hz), 4.29 – 4.33 (2H, m), 5.93 (1H, d, J=0.9 Hz), 7.30 – 7.35 (2H, m), 7.48 – 7.55 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J=6.8, 2.1 Hz), 7.80 (1H, dt, J=2.3, 1.2 Hz), 7.86 (1H, d, J=8.3 Hz), 8.71 (1H, t, J=6.1 Hz)。
1206	2.19 (3H, s), 3.08 (3H, s), 3.24 (2H, t, J=6.3 Hz), 3.65 (4H, s), 4.10 (3H, t, J=6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J=5.9 Hz), 4.47 (3H, s), 5.94 (1H, s), 7.47 – 7.55 (2H, m), 7.55 – 7.63 (2H, m), 7.63 – 7.70 (2H, m), 7.79 – 7.84 (1H, m), 8.71 (1H, t, J=6.0 Hz)
1207	0.14 – 0.28 (2H, m), 0.31 – 0.48 (2H, m), 0.94 – 1.09 (1H, m), 2.48 – 2.53 (2H, m), 2.79 – 2.85 (2H, m), 3.05 – 3.11 (2H, m), 3.15 – 3.20 (5H, m), 4.03 (2H, t, J=6.6 Hz), 6.94 – 6.98 (1H, m), 7.05 (1H, d, J=2.0 Hz), 7.17 – 7.22 (1H, m), 7.42 – 7.55 (2H, m), 7.57 – 7.62 (1H, m), 7.73 – 7.77 (1H, m), 8.50 (1H, t, J=6.0 Hz)
1208	2.17 – 2.20 (3H, m), 2.52 – 2.56 (2H, m), 2.82 – 2.90 (2H, m), 3.18 – 3.24 (5H, m), 3.64 (3H, s), 4.07 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.29 – 4.33 (2H, m), 5.92 – 5.95 (1H, m), 6.97 – 7.02 (1H, m), 7.09 (1H, d, J=2.0 Hz), 7.22 – 7.27 (1H, m), 7.47 – 7.55 (2H, m), 7.61 – 7.66 (1H, m), 7.78 – 7.82 (1H, m), 8.71 (1H, t, J=6.1 Hz)
1209	0.86 (3H, t, J=7.4 Hz), 1.51 – 1.61 (2H, m), 2.36 (3H, d, J=0.6 Hz), 2.95 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.22 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.41 – 3.47 (2H, m), 3.50 – 3.56 (2H, m), 4.06 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.48 (2H, d, J=6.0 Hz), 7.16 – 7.22 (1H, m), 7.32 (1H, d, J=8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J=8.1, 2.3 Hz), 7.47 – 7.54 (2H, m), 7.59 – 7.68 (1H, m), 7.79 – 7.81 (1H, m), 7.82 (1H, d, J=2.4 Hz), 8.32 (1H, d, J=5.0 Hz), 8.43 (1H, s), 9.01 (1H, t, J=6.0 Hz)。
1210	0.87 (3H, t, J=7.4 Hz), 1.51 – 1.61 (2H, m), 2.19 (3H, d, J=0.7 Hz), 2.96 (2H, t, J=6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.40 – 3.47 (2H, m), 3.50 – 3.57 (2H, m), 3.64 (3H, s), 4.06 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J=6.1 Hz), 5.94 (1H, d, J=0.8 Hz), 7.32 (1H, d, J=8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J=8.1, 2.3 Hz), 7.47 – 7.54 (2H, m), 7.61 – 7.68 (1H, m), 7.79 – 7.82 (1H, m), 7.82 – 7.85 (1H, m), 8.70 (1H, t, J=6.1 Hz)
1211	0.21 – 0.26 (2H, m), 0.39 – 0.45 (2H, m), 0.87 (3H, t, J=7.4 Hz), 0.99 – 1.10 (1H, m), 1.51 – 1.62 (2H, m), 2.96 (2H, t, J=6.5 Hz), 3.09 – 3.15 (2H, m), 3.22 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.41 – 3.47 (2H, m), 3.51 – 3.57 (2H, m), 4.06 (2H, t, J=6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J=8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J=8.1, 2.3 Hz), 7.48 – 7.55 (2H, m), 7.61 – 7.68 (1H, m), 7.79 – 7.82 (1H, m), 7.82 – 7.84 (1H, m), 8.52 (1H, t, J=6.0 Hz)。
1212	2.36 (3H, s), 3.19 - 3.28 (2H, m), 3.51 (3H, s), 4.15 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 6.63 (1H, d, J = 7.2 Hz), 7.19 (1H, d, J = 4.9 Hz), 7.43 - 7.56 (3H, m), 7.62 - 7.74 (3H, m), 7.80 - 7.84 (1H, m), 8.16 (1H, d, J = 2.1 Hz), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.44 (1H, s), 9.02 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1213	2.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.80 (3H, s), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.45 (2H, d, J = 6.2 Hz), 7.28 - 7.34 (2H, m), 7.44 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.54 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.81 (2H, dd, J = 6.0, 2.2 Hz), 8.15 (1H, d, J = 1.7 Hz), 8.18 (1H, d, J = 2.8 Hz), 9.12 (1H, t, J = 6.3 Hz)

1214	1.53 (3H, d, J = 7.1 Hz), 2.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.14 - 3.21 (2H, m), 3.54 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.00 - 4.07 (2H, m), 5.22 (1H, p, J = 7.2 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.36 (1H, m), 7.44 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.79 - 7.85 (3H, m), 8.44 (1H, dd, J = 4.8, 1.7 Hz), 8.62 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.95 (1H, d, J = 8.3 Hz)
1215	1.54 (3H, d, J = 7.2 Hz), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.19 (2H, dt, J = 8.1, 3.4 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.01 - 4.07 (2H, m), 5.22 (1H, p, J = 7.2 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.37 (1H, m), 7.44 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.48 - 7.57 (2H, m), 7.66 (1H, dt, J = 6.8, 2.0 Hz), 7.81 - 7.83 (2H, m), 7.85 (1H, t, J = 2.1 Hz), 8.45 (1H, dd, J = 4.8, 1.6 Hz), 8.63 (1H, d, J = 2.2 Hz), 8.96 (1H, d, J = 8.3 Hz)
1216	0.22 – 0.26 (2H, m), 0.39 – 0.44 (2H, m), 0.99 – 1.10 (1H, m), 2.95 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.08 – 3.16 (2H, m), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.52 – 3.64 (6H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.78 (1H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 – 7.55 (2H, m), 7.61 – 7.68 (1H, m), 7.79 – 7.82 (1H, m), 7.82 – 7.84 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)。
1217	1.98 (3H, s), 2.88 – 3.02 (2H, m), 3.17 – 3.26 (2H, m), 3.51 – 3.64 (6H, m), 3.72 (3H, m), 4.00 – 4.15 (2H, m), 4.30 – 4.43 (2H, m), 4.73 – 4.81 (1H, m), 7.30 – 7.34 (1H, m), 7.38 (1H, s), 7.41 – 7.56 (3H, m), 7.61 – 7.69 (1H, m), 7.78 – 7.85 (2H, m), 8.49 – 8.58 (1H, m)。
1218	2.54 (2H, t, J = 6.3 Hz), 2.66 - 2.72 (2H, m), 2.76 - 2.82 (2H, m), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 - 3.60 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.45 - 4.53 (3H, m), 7.02 - 7.04 (1H, m), 7.09 - 7.12 (2H, m), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.56 - 7.59 (1H, m), 7.62 - 7.68 (1H, m), 7.77 - 7.82 (1H, m), 9.16 (1H, dd, J = 5.3, 1.3 Hz), 9.18 - 9.25 (2H, m)
1219	1.10 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.18 - 2.21 (3H, m), 2.96 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.47 - 3.57 (4H, m), 3.64 (3H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.1 Hz), 5.80 - 6.02 (1H, m), 7.29 - 7.35 (1H, m), 7.42 - 7.48 (1H, m), 7.49 - 7.54 (2H, m), 7.61 - 7.68 (1H, m), 7.79 - 7.81 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.70 (1H, t, J = 6.1 Hz)。
1220	2.25 (3H, d, J = 0.7 Hz), 2.71 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.86 (2H, t, J = 5.5 Hz), 2.92 (2H, d, J = 5.5 Hz), 3.12 (1H, m), 3.25 (2H, dd, J = 3.4, 1.8 Hz), 3.47 (1H, m), 3.72 (3H, s), 3.75 (4H, dd, J = 10.3, 4.5 Hz), 4.29 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.47 (2H, s), 6.03 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.36 (1H, s), 7.44 - 7.48 (2H, m), 7.58 (1H, m), 7.72 (1H, dt, J = 2.2, 0.9 Hz), 8.23 (1H, d, J = 0.8 Hz)
1221	2.52 - 2.59 (2H, m), 2.70 - 2.75 (2H, m), 2.77 - 2.83 (2H, m), 3.17 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.53 - 3.60 (4H, m), 3.88 (3H, s), 4.29 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.46 - 4.52 (1H, m), 4.57 (2H, d, J = 5.4 Hz), 7.31 (1H, dd, J = 8.3, 4.8 Hz), 7.37 - 7.39 (1H, m), 7.43 (1H, dd, J = 8.3, 1.3 Hz), 7.52 - 7.60 (2H, m), 7.63 - 7.68 (1H, m), 7.81 - 7.84 (1H, m), 8.10 (1H, dd, J = 4.8, 1.3 Hz), 8.21 - 8.23 (1H, m), 8.57 (1H, t, J = 5.4 Hz)
1222	2.19 (3H, d, J = 0.7 Hz), 2.95 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.52 - 3.59 (4H, m), 3.59 - 3.64 (2H, m), 3.64 (3H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.75 - 4.80 (1H, m), 5.94 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.30 - 7.34 (1H, m), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.53 (2H, m), 7.63 - 7.67 (1H, m), 7.80 - 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.69 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1223	2.55 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.69 (2H, dd, J = 8.6, 3.6 Hz), 2.78 (2H, d, J = 5.9 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.53 - 3.61 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.36 (2H, dd, J = 6.0,

	1.2 Hz), 4.48 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.04 (1H, t, J = 1.3 Hz), 7.11 (2H, d, J = 1.3 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.79 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 7.94 (1H, q, J = 1.1 Hz), 8.32 (1H, d, J = 1.0 Hz), 8.85 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1224	1.10 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.98 (3H, d, J = 0.8 Hz), 2.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.46 - 3.59 (4H, m), 3.72 (3H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.37 (2H, d, J = 5.9 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.38 (1H, d, J = 0.9 Hz), 7.43 - 7.48 (1H, m), 7.48 - 7.53 (2H, m), 7.61 - 7.68 (1H, m), 7.77 - 7.84 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.4 Hz), 8.54 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1225	1.98 (3H, d, J = 0.8 Hz), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.72 (3H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.37 (2H, d, J = 5.9 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.38 (1H, d, J = 0.9 Hz), 7.43 - 7.48 (1H, m), 7.49 - 7.53 (2H, m), 7.61 - 7.67 (1H, m), 7.80 - 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.4 Hz), 8.53 (1H, t, J = 5.8 Hz)
1226	0.18 – 0.30 (m, 2H), 0.35 – 0.52 (m, 2H), 0.97 – 1.13 (m, 1H), 2.49 – 2.57 (m, 2H), 2.57 – 2.64 (m, 2H), 2.64 – 2.74 (m, 3H), 3.12 (t, J = 6.4 Hz, 2H), 3.19 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.48 – 3.62 (m, 4H), 3.74 (s, 3H), 4.03 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 4.47 (t, J = 5.4 Hz, 1H), 6.64 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 6.76 (d, J = 1.9 Hz, 1H), 7.43 – 7.57 (m, 2H), 7.59 – 7.68 (m, 1H), 7.77 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.52 (t, J = 6.0 Hz, 1H)
1227	2.19 (s, 3H), 2.57 (t, J = 6.1 Hz, 2H), 2.86 (t, J = 5.9 Hz, 2H), 3.07 (t, J = 5.9 Hz, 2H), 3.22 (t, J = 6.5 Hz, 2H), 3.56 (q, J = 5.9 Hz, 2H), 3.64 (s, 3H), 3.66 (s, 2H), 4.31 (d, J = 5.8 Hz, 2H), 4.42 (t, J = 6.5 Hz, 2H), 4.51 (t, J = 5.4 Hz, 1H), 5.94 (s, 1H), 7.46 – 7.62 (m, 2H), 7.61 – 7.71 (m, 2H), 7.84 (t, J = 2.0 Hz, 1H), 8.72 (t, J = 6.1 Hz, 1H)。
1229	2.58 (t, J = 6.1 Hz, 2H), 2.86 (t, J = 6.0 Hz, 2H), 3.07 (t, J = 5.8 Hz, 2H), 3.23 (t, J = 6.5 Hz, 2H), 3.56 (q, J = 5.9 Hz, 2H), 3.66 (s, 2H), 3.88 (s, 3H), 4.43 (t, J = 6.5 Hz, 2H), 4.52 (t, J = 5.4 Hz, 1H), 4.57 (d, J = 5.5 Hz, 2H), 7.28 - 7.35 (m, 1H), 7.44 (dd, J = 8.4, 1.3 Hz, 1H), 7.52 - 7.59 (m, 2H), 7.65 (d, J = 0.9 Hz, 1H), 7.65 - 7.69 (m, 1H), 7.85 (td, J = 1.9, 0.7 Hz, 1H), 8.11 (dd, J = 4.8, 1.3 Hz, 1H), 8.60 (t, J = 5.4 Hz, 1H)。
1230	2.53 - 2.59 (m, 2H), 2.67 - 2.73 (m, 2H), 2.78 (d, J = 5.7 Hz, 2H), 3.20 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.54 - 3.61 (m, 4H), 3.80 (s, 3H), 4.03 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 4.51 (d, J = 5.8 Hz, 2H), 6.88 (d, J = 5.4 Hz, 2H), 7.04 (s, 1H), 7.11 (d, J = 1.4 Hz, 2H), 7.46 - 7.60 (m, 2H), 7.64 (dt, J = 6.6, 2.2 Hz, 1H), 7.80 (dt, J = 2.4, 1.3 Hz, 1H), 8.33 (dd, J = 5.3, 1.0 Hz, 1H), 8.96 (t, J = 6.0 Hz, 1H)。
1231	0.58 - 0.64 (2H, m), 0.82 - 0.88 (2H, m), 1.84 (1H, tt, J = 8.4, 5.1 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 7.0 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.36 (2H, d, J = 6.0 Hz), 5.82 (1H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.60 - 7.71 (1H, m), 7.78 - 7.86 (2H, m), 8.71 (1H, s br), 12.21 (1H, s br)
1232	1.41 (2H, d, J = 7.7 Hz), 1.54 (4H, q, J = 5.7 Hz), 3.14 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.59 - 3.63 (2H, m), 4.00 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.20 (1H, d, J = 7.5 Hz), 7.25 - 7.30 (1H, m), 7.33 - 7.39 (2H, m), 7.44 - 7.55 (3H, m), 7.66 (1H, d, J = 2.1 Hz), 8.22 (0H, s)
1233	2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.88 (3H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.57 (2H, d, J = 5.3 Hz), 7.27 - 7.35 (2H, m), 7.40 - 7.48 (2H, m), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.61 - 7.68 (1H, m), 7.79 - 7.85 (2H, m), 8.11 (1H, dd, J = 4.8, 1.3 Hz), 8.58 (1H, t, J = 5.4 Hz)
1234	0.55 - 0.66 (2H, m), 0.78 - 0.90 (2H, m), 1.08 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.83 (1H, td, J = 8.6,

	4.4 Hz), 2.46 - 2.48 (2H, m), 2.62 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.80 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.44 - 3.55 (2H, m), 3.97 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.35 (2H, d, J = 6.0 Hz), 5.82 (1H, s), 7.04 (1H, d, J = 11.0 Hz), 7.16 (1H, d, J = 7.7 Hz), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.76 - 7.78 (1H, m), 8.73 (1H, br.s), 12.24 (1H, br. s)
1235	2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.49 - 3.58 (2H, m), 3.82 (3H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.37 (2H, d, J = 6.1 Hz), 6.75 - 6.82 (1H, m), 7.31 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.43 - 7.56 (3H, m), 7.58 - 7.73 (2H, m), 7.77 - 7.85 (2H, m), 8.10 - 8.16 (1H, m), 9.04 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1236	2.36 (3H, s), 2.95 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.53 - 3.59 (4H, m), 3.61 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.78 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.19 (1H, d, J = 4.9 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.62 - 7.69 (1H, m), 7.79 - 7.85 (2H, m), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 9.01 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1237	0.54 - 0.66 (2H, m), 0.85 (2H, d, J = 8.0 Hz), 1.38 (2H, s), 1.48 (4H, p, J = 5.5 Hz), 1.84 (1H, td, J = 8.4, 4.2 Hz), 2.22 - 2.41 (4H, m), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.42 (3H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.35 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.17 (1H, d, J = 7.5 Hz), 7.21 - 7.29 (2H, m), 7.33 (1H, t, J = 7.7 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.79 (1H, d, J = 2.1 Hz), 8.74 (1H, s), 12.26 (1H, s)
1238	1.93 - 2.02 (2H, m), 2.19 (3H, d, J = 0.7 Hz), 2.69 (2H, t, J = 7.1 Hz), 3.05 (3H, s), 3.16 (2H, t, J = 6.3 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.64 (3H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31(2H, d, J = 6.0 Hz), 5.93 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.26 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.39 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.48 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.49 - 7.54 (2H, m), 7.61 - 7.67 (1H, m), 7.76 - 7.82 (1H, m), 8.68 (1H, t, J = 6.1 Hz)。
1239	0.15 - 0.31 (2H, m), 0.36 - 0.49 (2H, m), 0.95 - 1.12 (1H, m), 1.90 - 2.07 (2H, m), 2.69 (2H, t, J = 7.1 Hz), 3.03 - 3.09 (3H, m), 3.09 - 3.19 (4H, m), 3.19 - 3.25 (2H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.26 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.34 - 7.44 (1H, m), 7.46 - 7.58 (3H, m), 7.59 - 7.68 (1H, m), 7.77 - 7.83 (1H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)。
1240	2.36 (3H, s), 2.90 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.36 - 3.41 (2H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.19 (1H, d, J = 4.9 Hz), 7.34 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.44 - 7.48 (1H, m), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.60 - 7.68 (1H, m), 7.78 - 7.84 (2H, m), 7.96 - 8.03 (1H, m), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.44 (1H, s), 9.01 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1241	2.01 - 2.10 (2H, m), 2.15 (2H, t, J = 7.1 Hz), 2.19 (3H, d, J = 0.7 Hz), 2.64 (2H, t, J = 7.0 Hz), 3.19 - 3.24 (5H, m), 3.64 (3H, s), 4.09 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.1 Hz),5.94 (1H, d, J = 0.9 Hz), 7.18 (1H, dd, J = 8.1, 2.1 Hz), 7.28 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.34 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.60 - 7.67 (1H, m), 7.77 - 7.82 (1H, m), 8.70 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1242	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.38 - 0.46 (2H, m), 0.99 - 1.12 (1H, m), 2.01 - 2.09 (2H, m), 2.15 (2H, t, J = 7.0 Hz), 2.60 - 2.69 (2H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.19 - 3.25 (5H, m), 4.09 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.18 (1H, dd, J = 8.1, 2.1 Hz), 7.28 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.34 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.48 - 7.58 (2H, m), 7.60 - 7.66 (1H, m), 7.76 - 7.81 (1H, m), 8.53 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1243	0.17 - 0.28 (2H, m), 0.37 - 0.45 (2H, m), 1.01 - 1.08 (1H, m), 1.77 - 1.97 (1H, m), 2.04 - 2.23 (1H, m), 2.25 - 2.32 (1H, m), 2.54 - 2.65 (1H, m), 2.71 - 2.83 (2H, m), 3.11 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 - 3.64 (2H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 5.09 - 5.29 (1H, m), 7.19 (1H, d, J = 7.6 Hz), 7.23 - 7.27 (1H, m), 7.29 (1H, d, J = 1.9

	Hz), 7.34 (1H, t, J = 7.8 Hz), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.77 - 7.81 (1H, m), 8.54 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1244	0.19 - 0.27 (2H, m), 0.35 - 0.48 (2H, m), 0.96 - 1.11 (1H, m), 2.17 (3H, s), 2.76 (3H, s), 2.99 (3H, s), 3.11 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.05 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.17 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.24 - 7.34 (2H, m), 7.44 - 7.57 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.76 - 7.82 (1H, m), 8.54 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1245	2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.42 (2H, d, J = 6.0 Hz), 6.17 (1H, s), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.50 (2H, d, J = 6.5 Hz), 7.61 - 7.66 (2H, m), 7.80 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.82 (1H, d, J = 2.4 Hz), 8.75 (1H, t, J = 6.1 Hz), 12.61 (1H, d, J = 33.3 Hz)
1246	2.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.16 - 3.26 (4H, m), 3.26 - 3.30 (1H, m), 3.40 - 3.48 (1H, m), 3.51 - 3.58 (3H, m), 3.59 - 3.75 (4H, m), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.49 - 7.53 (2H, m), 7.60 - 7.66 (1H, m), 7.79 (1H, m), 7.82 (1H, d, J = 2.4 Hz), 8.43 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1247	2.27 (3H, s), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.18 - 3.25 (2H, m), 3.51 - 3.57 (2H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.43 (2H, d, J = 5.9 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.49 - 7.52 (2H, m), 7.65 (1H, ddd, J = 6.1, 2.8, 2.0 Hz), 7.81 (1H, dt, J = 2.1, 1.0 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.74 (1H, br, s), 13.36 (1H, br, s)
1248	2.01 (3H, d, J = 0.7 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.04 (3H, s), 3.23 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.56 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.43 (2H, d, J = 5.8 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.49 - 7.59 (2H, m), 7.63 - 7.68 (1H, m), 7.82 (2H, dd, J = 11.7, 2.2 Hz), 8.14 (1H, ddt, J = 29.5, 8.4, 1.0 Hz), 8.52 (1H, br, s), 12.35 (1H, s)
1249	2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.18 - 3.32 (5H, m), 3.42 - 3.50 (1H, m), 3.51 - 3.59 (3H, m), 3.60 - 3.78 (4H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.50 - 7.55 (2H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.5, 2.2 Hz), 7.81 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.44 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1250	0.29 - 0.39 (2H, m), 0.43 - 0.53 (2H, m), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.04 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.31 (4H, t, J = 5.5 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.67 (1H, t, J = 5.8 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.5, 2.2 Hz), 7.80 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 7.84 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.41 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1251	2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.19 - 3.25 (2H, m), 3.45 - 3.61 (4H, m), 3.65 (1H, dd, J = 8.8, 5.3 Hz), 3.71 (1H, dd, J = 8.6, 7.1 Hz), 3.87 (1H, dd, J = 8.5, 7.7 Hz), 3.94 (1H, dd, J = 8.8, 6.5 Hz), 4.03 - 4.10 (2H, m), 4.59 (1H, qd, J = 7.6, 5.4 Hz), 4.87 (1H, dd, J = 5.1, 4.4 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.50 - 7.55 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.7, 2.2 Hz), 7.80 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.55 (1H, d, J = 7.6 Hz) 未見1 x H
1252	2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.50 - 3.57 (4H, m), 3.60 (2H, d, J = 5.6 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.28 (2H, d, J = 5.9 Hz), 4.41 (2H, d, J = 5.9 Hz), 4.95 (1H, t, J = 5.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.80 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.65 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1253	0.21 - 0.26 (2H, m), 0.39 - 0.44 (2H, m), 1.00 - 1.10 (1H, m), 2.98 (2H, t, J=6.5 Hz),

	3.12 (2H, t, J=6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.62 (2H, t, J=6.5 Hz), 3.80 (2H, dt, J=26.8, 5.0 Hz), 4.07 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.62 (2H, dt, J=47.5, 5.0 Hz), 7.34 (1H, d, J=8.2 Hz), 7.48 (1H, dd, J=8.0, 2.3 Hz), 7.50 - 7.56 (2H, m), 7.62 - 7.67 (1H, m), 7.79 - 7.82 (1H, m), 7.84 (1H, d, J=2.3 Hz), 8.53 (1H, t, J=6.0 Hz)。
1254	2.19 (3H, d, J=0.7 Hz), 2.98 (2H, t, J=6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.59 - 3.67 (5H, m), 3.80 (2H, dt, J=26.7, 5.0 Hz), 4.07 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J=6.1 Hz), 4.62 (2H, dt, J=47.4, 5.0 Hz), 5.94 (1H, d, J=0.8 Hz), 7.34 (1H, d, J=8.1 Hz), 7.45 - 7.54 (3H, m), 7.61 - 7.68 (1H, m), 7.79 - 7.82 (1H, m), 7.84 (1H, d, J=2.3 Hz), 8.70 (1H, t, J=6.1 Hz)。
1255	2.16 (3H, s), 2.95 (2H, t, J=6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.53 - 3.65 (6H, m), 4.07 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.36 (2H, d, J=6.0 Hz), 4.74 - 4.81 (1H, m), 5.91 (1H, d, J=0.7 Hz), 7.32 (1H, d, J=8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J=8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.53 (2H, m), 7.62 - 7.68 (1H, m), 7.79 - 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J=2.4 Hz), 8.71 (1H, s), 12.21 (1H, s)。
1256	2.31 (3H, s), 2.38 (3H, s), 2.95 (2H, t, J=6.5 Hz), 3.21 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.51 - 3.63 (6H, m), 4.06 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.43 (2H, d, J=5.9 Hz), 4.73 - 4.82 (1H, m), 7.05 (1H, d, J=0.8 Hz), 7.32 (1H, d, J=8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J=8.1, 2.3 Hz), 7.47 - 7.54 (2H, m), 7.61 - 7.66 (1H, m), 7.78 - 7.81 (1H, m), 7.82 (1H, d, J=2.3 Hz), 8.30 (1H, s), 8.94 (1H, t, J=6.0 Hz)。
1257	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.48 (2H, m), 0.98 - 1.12 (1H, m), 1.51 - 1.64 (1H, m), 1.86 - 1.99 (1H, m), 2.51 - 2.66 (1H, m), 2.96 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.18 - 3.26 (2H, m), 3.38 - 3.51 (2H, m), 3.49 - 3.67 (4H, m), 3.66 - 3.81 (2H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.0 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.59 - 7.70 (1H, m), 7.77 - 7.86 (2H, m), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1258	1.51 - 1.64 (1H, m), 1.86 - 1.99 (1H, m), 2.15 - 2.21 (3H, m), 2.53 - 2.67 (1H, m), 2.96 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.38 - 3.62 (6H, m), 3.65 (3H, s), 3.67 - 3.82 (2H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.1 Hz), 5.94 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.42 - 7.50 (1H, m), 7.45 - 7.56 (2H, m), 7.60 - 7.70 (1H, m), 7.78 - 7.86 (2H, m), 8.69 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1259	0.53 - 0.68 (2H, m), 0.78 - 0.89 (2H, m), 1.75 - 1.89 (1H, m), 2.95 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.49 - 3.65 (6H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.35 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.77 (1H, s), 5.82 (1H, br.s), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.42 - 7.49 (1H, m), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.59 - 7.69 (1H, m), 7.79 - 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.72 (1H, t, J = 6.0 Hz), 12.14 (1H, br. s)
1260	1.51 - 1.67 (1H, m), 1.79 - 1.98 (1H, m), 2.95 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 - 3.27 (4H, m), 3.43 - 3.78 (11H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.71 - 4.81 (1H, m), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.59 - 7.67 (1H, m), 7.78 - 7.80 (1H, m), 7.82 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.62 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1261	0.21 - 0.27 (2H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 0.98-1.10 (1H, m), 2.94 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.25 (3H, s), 3.51 (2H, t, J = 5.6 Hz), 3.55 - 3.62 (2H, m), 3.65 (2H, t, J = 5.6 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1.4H, d, J = 8.1 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.60 - 7.68 (1H, m), 7.79 - 7.81 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.52 (1H, t, J = 6.1 Hz)。
1262	2.16 - 2.21 (3H, m), 2.94 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.25 (3H, s), 3.51 (2H, t, J = 5.6 Hz), 3.59 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.62 - 3.67 (5H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.1 Hz), 5.90 - 5.95 (1H, m), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.42 - 7.49

	(1H, m), 7.49 - 7.54 (2H, m), 7.61 - 7.68 (1H, m), 7.79 - 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.70 (1H, t, J = 6.1 Hz)。
1263	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.47 (2H, m), 0.98 - 1.12 (1H, m), 1.77 - 1.92 (4H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.38 - 3.49 (4H, m), 4.09 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.34 - 7.42 (1H, m), 7.42 - 7.48 (2H, m), 7.48 - 7.59 (3H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.78 - 7.84 (1H, m), 8.54 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1264	2.08 (3H, s), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.74 (3H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.42 (2H, d, J = 6.0 Hz), 5.93 (1H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.80 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.97 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1265	1.64 - 1.81 (2H, m), 2.95 - 3.02 (3H, m), 3.03 (4H, s), 3.22 (2H, td, J = 6.4, 1.9 Hz), 3.31 (3H, s), 3.41 (1H, td, J = 9.8, 4.7 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.75 - 3.84 (1H, m), 3.97 (1H, ddd, J = 13.3, 5.5, 3.1 Hz), 4.02 - 4.11 (3H, m), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.7, 2.2 Hz), 7.80 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.46 (1H, d, J = 8.8 Hz)
1266	1.43 (3H, s), 1.61 (2H, m), 2.21 - 2.28 (2H, m), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.04 (3H, s), 3.17 - 3.25 (2H, m), 3.52 - 3.60 (4H, m), 3.60 - 3.69 (2H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.50 - 7.56 (3H, m), 7.64 - 7.68 (1H, m), 7.82 (1H, td, J = 1.8, 0.8 Hz), 7.84 (1H, d, J = 2.3 Hz)
1267	2.59 (3H, s), 2.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.02 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.70 (2H, d, J = 6.1 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.48 - 7.58 (4H, m), 7.63 - 7.68 (1H, m), 7.80 - 7.85 (2H, m), 9.17 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1268	2.08 - 2.23 (6H, m), 2.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.19 (2H, d, J = 5.8 Hz), 7.30 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.40 - 7.46 (1H, m), 7.46 - 7.52 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.77 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 7.81 (1H, d, J = 2.4 Hz), 8.54 (1H, t, J = 5.8 Hz), 11.98 (1H, s)
1269	0.18 - 0.29 (2H, m), 0.36 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.12 (1H, m), 1.80 (3H, s), 3.05 - 3.19 (5H, m), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.10 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.22 (1H, d, J = 7.8 Hz), 7.30 - 7.48 (3H, m), 7.48 - 7.59 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.77 - 7.83 (1H, m), 8.54 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1270	0.18 - 0.30 (2H, m), 0.34 - 0.47 (4H, m), 0.54 (2H, s), 1.01 - 1.10 (1H, m), 2.93 (4H, d, J = 23.2 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.37 (1H, s), 7.41 - 7.45 (2H, m), 7.48 - 7.55 (3H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.6, 2.2 Hz), 7.80 (1H, t, J = 1.6 Hz), 8.53 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1271	2.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.02 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.88 (3H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.43 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.04 (1H, d, J = 5.7 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.48 - 7.54 (2H, m), 7.62 - 7.68 (1H, m), 7.79 - 7.83 (2H, m), 8.26 (1H, s), 8.36 (1H, d, J = 5.7 Hz), 8.85 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1272	2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.11 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.62 (2H, d, J = 4.9 Hz), 3.66 (4H, s), 3.93 (2H, t, J = 4.9 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.50 (2H, dd, J = 5.0, 1.9 Hz), 7.57 - 7.62 (1H, m), 7.76 (1H, q, J = 1.5 Hz), 7.82 (1H, d, J = 2.4 Hz)

1273	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.12 (1H, m), 2.86 (3H, s), 2.96 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.38 (2H, t, J = 6.4 Hz), 7.22 (1H, dd, J = 5.0, 1.4 Hz), 7.48 - 7.60 (2H, m), 7.61 - 7.72 (2H, m), 7.81 - 7.86 (1H, m), 8.47 - 8.59 (2H, m)
1274	1.86 (2H, m), 1.98 - 2.08 (2H, m), 2.26 - 2.35 (1H, m), 2.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.17 - 3.23 (2H, m), 3.25 - 3.31 (2H, m), 3.51 - 3.57 (2H, m), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.15 - 4.25 (1H, m), 4.93 (1H, dd, J = 6.4, 4.2 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.48 - 7.53 (2H, m), 7.60 - 7.64 (1H, m), 7.78 (1H, td, J = 1.8, 0.7 Hz), 7.82 (1H, d, J = 2.4 Hz), 8.47 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1275	1.70 (2H, p, J = 6.6 Hz), 2.19 (3H, s), 2.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.40 - 3.48 (2H, m), 3.48 - 3.58 (4H, m), 3.65 (3H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.48 (1H, t, J = 5.2 Hz), 5.83 - 5.99 (1H, m), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.43 - 7.48 (1H, m), 7.49 - 7.54 (2H, m), 7.60 - 7.67 (1H, m), 7.79 - 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.67 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1276	1.27 (6H, s), 2.19 (3H, s), 3.11 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.65 (3H, s), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.2 Hz), 5.94 (1H, s), 7.00 - 7.06 (2H, m), 7.37 (1H, d, J = 7.8 Hz), 7.47 - 7.54 (2H, m), 7.59 - 7.66 (1H, m), 7.77 - 7.82 (1H, m), 8.69 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1277	0.19 - 0.26 (2H, m), 0.39 - 0.45 (2H, m), 0.99 - 1.11 (1H, m), 1.27 (6H, s), 3.09 - 3.15 (5H, m), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.00 - 7.06 (2H, m), 7.37 (1H, d, J = 7.8 Hz), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.60 - 7.66 (1H, m), 7.79 (1H, t, J = 2.1 Hz), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1278	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.12 (1H, m), 2.95 (3H, s), 3.00 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.23 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.18 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.47 - 7.60 (4H, m), 7.62 - 7.72 (1H, m), 7.79 - 7.84 (1H, m), 8.51 - 8.59 (2H, m)
1279	0.18 - 0.32 (2H, m), 0.37 - 0.50 (2H, m), 0.97 - 1.11 (1H, m), 2.94 (3H, s), 3.00 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.24 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.14 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.48 - 7.58 (2H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.6, 2.2 Hz), 7.79 - 7.84 (1H, m), 7.88 (1H, t, J = 2.2 Hz), 8.47 (1H, d, J = 1.9 Hz), 8.55 (1H, t, J = 6.0 Hz), 8.69 (1H, d, J = 2.4 Hz)
1280	1.37 (2H, dd, J = 4.5, 1.7 Hz), 1.61 (2H, dd, J = 4.6, 1.7 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.50 - 3.60 (8H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.65 (1H, t, J = 5.9 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.61 - 7.67 (1H, m), 7.77 - 7.85 (2H, m), 8.63 (1H, t, J = 6.3 Hz)
1281	0.18 - 0.30 (2H, m), 0.35 - 0.50 (2H, m), 0.97 - 1.13 (1H, m), 2.86 (3H, d, J = 1.2 Hz), 3.00 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.34 (1H, t, J = 9.0 Hz), 7.41 (1H, dd, J = 6.0, 2.7 Hz), 7.45 - 7.57 (3H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.6, 2.2 Hz), 7.80 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.53 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1282	2.32 (3H, t, J = 0.7 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.9 Hz), 3.03 (3H, s), 3.20 - 3.27 (2H, m), 3.55 (2H, dd, J = 7.2, 6.2 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.72 (2H, d, J = 6.1 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.43 - 7.48 (2H, m), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.64 - 7.70 (1H, m), 7.81 - 7.85 (2H, m), 9.01 (1H, dd, J = 2.1, 0.7 Hz), 9.17 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1283	1.57 (2H, dd, J = 7.1, 2.6 Hz), 1.73 - 1.85 (4H, m), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.21 (4H, dd, J = 7.9, 5.9 Hz), 3.29 (2H, d, J = 6.3 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.97 (2H, t, J = 6.8 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.55 (1H, t, J = 5.5 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.50 - 7.55 (2H, m), 7.63 - 7.67 (1H, m), 7.80 -

	7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.4 Hz), 8.16 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1284	($CDCl_3$) 1.44 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.99 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.15 (3H, s), 3.33 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.15 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.47 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.17 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.29 – 7.38 (2H, m), 7.41 - 7.52 (2H, m), 7.62 (1H, t, J = 1.9 Hz), 7.97 (1H, d, J = 2.3 Hz)
1285	0.17 - 0.30 (2H, m), 0.30 - 0.52 (2H, m), 1.05 (1H, td, J = 8.7, 4.6 Hz), 1.84 (4H, q, J = 9.9 Hz), 2.38 (2H, t, J = 6.2 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.59 (2H, t, J = 5.6 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.10 - 7.19 (1H, m), 7.20 - 7.28 (1H, m), 7.30 (1H, t, J = 2.1 Hz), 7.39 (1H, t, J = 8.0 Hz), 7.47 - 7.58 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.79 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.54 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1286	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.38 - 0.46 (2H, m), 1.02 - 1.19 (7H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (4H, t, J = 6.6 Hz), 3.38 - 3.46 (2H, m), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.22 (1H, dt, J = 6.9, 1.7 Hz), 7.36 (1H, td, J = 1.7, 0.7 Hz), 7.41 - 7.46 (2H, m), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.81 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 8.54 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1287	1.84 (4H, dt, J = 10.0, 6.6 Hz), 2.34 - 2.41 (5H, m), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.59 (2H, t, J = 5.4 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.47 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.15 (1H, ddd, J = 7.9, 2.0, 1.0 Hz), 7.19 (1H, dt, J = 4.9, 0.8 Hz), 7.25 (1H, ddd, J = 8.0, 2.1, 1.0 Hz), 7.29 (1H, t, J = 2.0 Hz), 7.39 (1H, t, J = 8.0 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 7.2, 1.9 Hz), 7.80 (1H, dt, J = 2.4, 1.2 Hz), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.44 (1H, s), 9.03 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1288	2.19 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 - 3.62 (6H, m), 3.64 (3H, s), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.37 (2H, t, J = 5.0 Hz), 4.81 - 4.85 (1H, m), 5.93 (1H, s), 7.04 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.6, 2.7 Hz), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.57 - 7.69 (2H, m), 7.80 (1H, d, J = 1.1 Hz), 8.68 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1289	0.21 - 0.28 (2H, m), 0.38 - 0.45 (2H, m), 0.99 - 1.11 (1H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 - 3.63 (6H, m), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.33 - 4.39 (2H, m), 4.81 - 4.86 (1H, m), 7.04 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.7, 2.8 Hz), 7.48 - 7.57 (2H, m), 7.60 - 7.68 (2H, m), 7.77 - 7.81 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1290	2.19 (3H, s), 3.04 (2H, t, J=6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.64 (3H, s), 3.71 (2H, t, J=6.4 Hz), 4.06 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J=6.0 Hz), 4.67 – 4.79 (4H, m), 5.43 – 5.53 (1H, m), 5.94 (1H, s), 7.36 (1H, d, J=8.2 Hz), 7.47 – 7.54 (3H, m), 7.61 – 7.68 (1H, m), 7.78 – 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J=2.3 Hz), 8.68 (1H, t, J=6.1 Hz)。
1292	0.20 – 0.27 (m, 2H), 0.39 – 0.45 (m, 2H), 0.99 – 1.11 (m, 1H), 1.49 – 1.61 (m, 1H), 1.73 – 1.97 (m, 3H), 2.94 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.12 (t, J = 6.4 Hz, 2H), 3.22 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.42 – 3.50 (m, 1H), 3.56 – 3.69 (m, 4H), 3.74 – 3.81 (m, 1H), 4.01 – 4.10 (m, 3H), 7.32 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 7.46 (dd, J = 8.1, 2.4 Hz, 1H), 7.48 – 7.55 (m, 2H), 7.60 – 7.68 (m, 1H), 7.77 – 7.81 (m, 1H), 7.83 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 8.51 (t, J = 6.0 Hz, 1H)。
1293	1.49 – 1.60 (1H, m), 1.73 – 1.96 (3H, m), 2.19 (3H, s), 2.94 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.22 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.43 – 3.50 (1H, m), 3.56 – 3.70 (7H, m), 3.72 – 3.82 (1H, m), 4.01 – 4.10 (3H, m), 4.31 (2H, d, J=6.0 Hz), 5.94 (1H, s), 7.32 (1H, d, J=8.2 Hz), 7.46 (1H, dd, J=8.1, 2.4 Hz), 7.47 – 7.54 (2H, m), 7.59 – 7.70 (1H, m), 7.78 – 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J=2.3 Hz), 8.68 (1H, t, J=6.1 Hz)。
1294	0.16 - 0.28 (2H, m), 0.34 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.10 (1H, m), 1.91 - 2.02 (2H, m), 2.71 (2H, t, J = 7.0 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.16 - 3.26 (4H, m), 3.50 - 3.62 (4H, m),

	4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.74 - 4.83 (1H, m), 7.26 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.39 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.46 - 7.55 (3H, m), 7.61 - 7.66 (1H, m), 7.77 - 7.81 (1H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1295	0.18 - 0.29 (2H, m), 0.37 - 0.49 (2H, m), 1.04 (1H, ddd, J = 12.6, 7.8, 5.0 Hz), 2.98 - 3.20 (8H, m), 3.27 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.34 (2H, t, J = 6.8 Hz), 6.97 (1H, d, J = 4.4 Hz), 7.37 (1H, d, J = 4.3 Hz), 7.53 - 7.62 (2H, m), 7.67 (1H, dt, J = 6.4, 2.3 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.2 Hz), 8.58 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1296	1.38 (6H, d, J = 6.7 Hz), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.40 (2H, dd, J = 6.4, 2.9 Hz), 4.42 - 4.47 (1H, m), 6.14 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.43 - 7.48 (1H, m), 7.49 - 7.52 (2H, m), 7.63 - 7.67 (2H, m), 7.81 (1H, dt, J = 2.1, 1.0 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.80 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1297	1.12 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.04 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.26 - 3.31 (2H, m), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.50 - 7.54 (2H, m), 7.62 - 7.66 (1H, m), 7.80 (1H, td, J = 1.8, 0.7 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.48 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1298	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.47 (2H, m), 0.98 - 1.11 (1H, m), 2.89 (3H, s), 2.98 (3H, s), 3.13 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.25 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.51 (2H, t, J = 6.4 Hz), 7.50 - 7.59 (2H, m), 7.68 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.86 (1H, dt, J = 2.3, 1.2 Hz), 7.96 (1H, d, J = 1.8 Hz), 8.57 (1H, t, J = 6.1 Hz), 9.10 (1H, d, J = 1.8 Hz)
1299	2.36 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.56 - 3.61 (6H, m), 4.04 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.37 (2H, t, J = 5.0 Hz), 4.48 (2H, d, J = 5.9 Hz), 4.81 - 4.85 (1H, m), 7.03 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.15 - 7.22 (1H, m), 7.44 (1H, dd, J = 8.7, 2.9 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.60 - 7.68 (2H, m), 7.77 - 7.82 (1H, m), 8.29 - 8.37 (1H, m), 8.44 (1H, s), 9.00 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1300	0.21 – 0.26 (2H, m), 0.39 – 0.44 (2H, m), 1.01 – 1.09 (1H, m), 2.67 (2H, t, J=5.9 Hz), 3.12 (2H, t, J=6.5 Hz), 3.14 – 3.25 (4H, m), 3.54 – 3.65 (2H, m), 3.73 (2H, s), 4.09 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.54 – 4.65 (1H, m), 7.28 (1H, s), 7.39 (1H, dd, J=8.4, 2.1 Hz), 7.49 – 7.55 (2H, m), 7.61 – 7.65 (2H, m), 7.77 – 7.80 (1H, m), 8.52 (1H, t, J=6.0 Hz)。
1301	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.47 (2H, m), 0.99 - 1.10 (1H, m), 3.05 (3H, s), 3.09 - 3.16 (4H, m), 3.24 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.65 (2H, t, J = 6.8 Hz), 4.11 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.47 - 7.57 (2H, m), 7.61 - 7.71 (1H, m), 7.79 - 7.84 (1H, m), 8.18 (1H, d, J = 2.5 Hz), 8.53 (1H, t, J = 6.0 Hz), 8.64 (1H, d, J = 2.6 Hz)
1302	2.36 (3H, s), 3.05 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.8 Hz), 3.24 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.64 (2H, t, J = 6.8 Hz), 4.11 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.19 (1H, d, J = 5.0 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.61 - 7.70 (1H, m), 7.79 - 7.85 (1H, m), 8.17 (1H, d, J = 2.5 Hz), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.44 (1H, s), 8.63 (1H, d, J = 2.5 Hz), 9.02 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1303	2.17 - 2.21 (3H, m), 3.05 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.8 Hz), 3.24 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.62 - 3.67 (5H, m), 4.11 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.1 Hz), 5.92 - 5.96 (1H, m), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.61 - 7.71 (1H, m), 7.79 - 7.85 (1H, m), 8.18 (1H, d, J = 2.5 Hz), 8.64 (1H, d, J = 2.6 Hz), 8.70 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1304	2.15 (3H, s), 2.19 (3H, s), 3.13 (2H, t, J = 8.5 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.64 (3H, s), 4.00 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.12 (2H, t, J = 8.5 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 5.94 (1H, s), 6.96 (1H, dd, J = 7.9, 2.1 Hz), 7.23 (1H, d, J = 8.0 Hz), 7.45 - 7.54 (2H, m), 7.59 - 7.65 (1H, m), 7.77 - 7.81 (1H, m), 8.00 (1H, d, J = 2.0 Hz), 8.66 (1H, t, J = 6.1 Hz)

1305	1.82-2.04 (2H, m), 2.19 (3H, d, J = 0.7 Hz), 2.71 (2H, t, J = 7.0 Hz), 3.14 - 3.26 (4H, m), 3.48-3.61 (4H, m), 3.64 (3H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.80 (1H, s), 5.93 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.26 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.39 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.47 - 7.54 (3H, m), 7.62 - 7.66 (1H, m), 7.77 - 7.82 (1H, m), 8.69 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1306	1.91 - 2.02 (2H, m), 2.36 (3H, s), 2.70 (2H, t, J = 7.0 Hz), 3.11 - 3.25 (4H, m), 3.48 - 3.62 (4H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.80 (1H, s), 7.16 - 7.21 (1H, m), 7.26 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.39 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.46 - 7.55 (3H, m), 7.62 - 7.66 (1H, m), 7.75 - 7.82 (1H, m), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 9.01 (1H, t, J = 6.0 Hz)。
1307	2.94 - 2.99 (2H, m), 3.01 (3H, s), 3.14 - 3.21 (2H, m), 3.50 - 3.56 (2H, m), 3.65 - 3.79 (2H, m), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.99 (1H, t, J = 5.6 Hz), 5.02 - 5.09 (1H, m), 7.20 - 7.26 (1H, m), 7.31 (3H, td, J = 8.0, 1.1 Hz), 7.37 - 7.41 (2H, m), 7.43 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.63 - 7.68 (1H, m), 7.79 - 7.84 (2H, m), 8.61 (1H, d, J = 8.3 Hz)
1308	2.34 (3H, s), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.25 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.60 (2H, d, J = 5.1 Hz), 7.24 (1H, dd, J = 7.5, 4.8 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.50 - 7.57 (2H, m), 7.60 - 7.64 (1H, m), 7.64 - 7.70 (1H, m), 7.81 - 7.86 (2H, m), 8.38 (1H, ddd, J = 4.9, 1.8, 0.8 Hz), 8.75 (1H, t, J = 5.1 Hz)
1309	2.50 (3H, s), 2.93 - 2.98 (2H, m), 3.00 (3H, s), 3.14 - 3.24 (2H, m), 3.50 - 3.55 (2H, m), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.43 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.17 (1H, ddd, J = 7.7, 4.8, 0.6 Hz), 7.29 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.43 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.47 - 7.52 (2H, m), 7.58 (1H, dd, J = 7.8, 1.7 Hz), 7.61 - 7.65 (1H, m), 7.78 - 7.82 (2H, m), 8.30 (1H, dd, J = 4.9, 1.7 Hz), 9.03 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1310	2.36 (3H, d, J = 0.9 Hz), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.77 (2H, d, J = 5.4 Hz), 7.32 (1H, s), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.47 - 7.54 (3H, m), 7.63 - 7.67 (1H, m), 7.80 - 7.84 (2H, m), 8.95 (1H, t, J = 5.5 Hz), 9.00 (1H, d, J = 5.0 Hz)
1311	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.38 - 0.46 (2H, m), 0.98 - 1.10 (1H, m), 2.95 (3H, d, J = 8.4 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.16 (1H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.29 (1H, s), 3.40 (2H, dd, J = 16.2, 8.1 Hz), 3.57 (2H, d, J = 16.0 Hz), 4.09 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.21 - 7.30 (1H, m), 7.40 (1H, dt, J = 2.6, 1.1 Hz), 7.42 - 7.48 (2H, m), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.80 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 8.53 (1H, t, J = 6.1 Hz) 一個H隱藏在水峰下
1312	0.21 - 0.26 (2H, m), 0.38 - 0.44 (2H, m), 0.98 - 1.10 (1H, m), 2.96 (3H, d, J = 8.5 Hz), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.17 - 3.24 (2H, m), 3.44 - 3.53 (2H, m), 3.61 (1H, d, J = 6.6 Hz), 4.09 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.80 (1H, d, J = 5.5 Hz), 7.25 - 7.31 (1H, m), 7.38 - 7.46 (3H, m), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.80 (1H, dt, J = 2.1, 1.1 Hz), 8.53 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1313	0.19 - 0.30 (2H, m), 0.35 - 0.48 (2H, m), 0.98 - 1.11 (1H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.73 (2H, dd, J = 6.0, 4.1 Hz), 3.96 (2H, dd, J = 6.0, 4.0 Hz), 4.09 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.20 (2H, s), 7.25 - 7.32 (2H, m), 7.40 - 7.46 (2H, m), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.79 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.53 (1H, t, J = 6.0 Hz)

1314	1.81 - 1.91 (2H, m), 2.16 (3H, s), 2.36 (3H, s), 2.70 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.67 (2H, t, J = 6.3 Hz), 4.04 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.48 (2H, d, J = 5.9 Hz), 7.08 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.19 (2H, d, J = 5.2 Hz), 7.44 - 7.55 (3H, m), 7.60 - 7.67 (1H, m), 7.77 - 7.83 (1H, m), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 8.99 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1316	0.21 - 0.27 (2H, m), 0.35 - 0.49 (2H, m), 0.98 - 1.14 (1H, m), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.38 - 3.48 (2H, m), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.22 - 4.31 (2H, m), 4.35 (2H, s), 7.16 (1H, dt, J = 7.6, 1.4 Hz), 7.26 - 7.34 (2H, m), 7.40 (1H, t, J = 7.7 Hz), 7.48 - 7.57 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.79 (1H, dt, J = 2.3, 1.2 Hz), 8.52 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1317	1.13 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.17 - 2.25 (3H, m), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.45 - 3.61 (4H, m), 3.64 (3H, s), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.26 - 4.37 (4H, m), 5.91 - 5.96 (1H, m), 7.04 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.41 - 7.48 (1H, m), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.59 - 7.68 (2H, m), 7.77 - 7.83 (1H, m), 8.68 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1318	1.13 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.36 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.49 - 3.59 (4H, m), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.30 - 4.37 (2H, m), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 7.04 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.19 (1H, d, J = 4.9 Hz), 7.42 - 7.46 (1H, m), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.59 - 7.69 (2H, m), 7.77 - 7.82 (1H, m), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 9.00 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1319	2.15 - 2.21 (3H, m), 3.09 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 5.1 Hz), 3.64 (3H, s), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.34 - 4.39 (2H, m), 5.85 - 6.01 (1H, m), 7.04 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.41 - 7.48 (1H, m), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.56 - 7.69 (2H, m), 7.78 - 7.83 (1H, m), 8.68 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1320	1.15 (6H, d, J = 6.8 Hz), 2.19 (3H, d, J = 0.7 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.44 (2H, t, J = 5.3 Hz), 3.64 (3H, s), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.27 (2H, t, J = 5.2 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.1 Hz), 4.79 (1H, 七重峰, J = 6.8 Hz), 5.93 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.05 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.6, 2.7 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.61 (1H, d, J = 2.8 Hz), 7.62 - 7.66 (1H, m), 7.79 - 7.81 (1H, m), 8.68 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1321	2.13 - 2.20 (3H, m), 2.99 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.59 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.03 - 4.10 (4H, m), 4.32 - 4.39 (2H, m), 5.91 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.07 (1H, s br), 7.33 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.44 (1H, s br), 7.46 - 7.55 (3H, m), 7.61 - 7.68 (1H, m), 7.78 - 7.86 (2H, m), 8.68 (1H, s br), 12.21 (1H, s br)
1322	1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.23 (3H, s), 3.01 (2H, s), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.65 (2H, s), 4.09 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.35 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.16 - 7.28 (2H, m), 7.29 - 7.38 (2H, m), 7.47 - 7.65 (3H, m), 7.73 - 7.78 (1H, m)
1323	1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.00 - 2.11 (2H, m), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.82 (2H, t, J = 7.0 Hz), 4.09 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.36 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.09 - 7.16 (1H, m), 7.39 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.47 - 7.63 (4H, m), 7.68 - 7.78 (2H, m)
1324	1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.77 (3H, s), 2.95 (3H, s), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.80 (3H, s), 4.00 - 4.09 (2H, m), 4.35 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.10 (1H, d, J = 9.0 Hz), 7.19 (1H, d, J = 2.6 Hz), 7.38 (1H, dd, J = 8.9, 2.7 Hz), 7.48 - 7.63 (3H, m), 7.72 - 7.78 (1H, m)
1325	2.98 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.21 (2H, dd, J = 6.4, 3.2 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.70 (3H, s), 4.05 - 4.08 (2H, m), 5.83 (1H, d, J = 7.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.40 - 7.43 (1H, m), 7.45 (1H, dt, J = 8.0, 2.0 Hz), 7.50 - 7.55 (2H, m), 7.66 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.83 (2H, ddt, J = 2.8, 2.0, 1.2 Hz), 7.89 - 7.93 (1H, m), 8.54 (1H, dd, J = 4.8, 1.6 Hz), 8.68 (1H, dd, J = 2.4, 0.9 Hz), 9.32 (1H, d, J = 7.6 Hz)
1326	2.38 (3H, s), 2.55 (3H, s), 2.94 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.49 - 3.63

	(4H, m), 3.66 (1H, t, J = 5.7 Hz), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.50 (2H, d, J = 5.4 Hz), 4.74 - 4.79 (1H, m), 7.03 (1H, d, J = 5.0 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.43 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.46 - 7.52 (3H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.76 (1H, q, J = 1.4 Hz), 7.81 (1H, dd, J = 4.0, 2.2 Hz), 8.19 (1H, d, J = 5.0 Hz), 8.67 (1H, t, J = 5.4 Hz)
1327	1.52 (3H, d, J = 7.0 Hz), 2.40 (3H, s), 2.95 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.17 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.51 - 3.64 (5H, m), 4.04 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.54 (1H, s), 4.77 (1H, t, J = 5.2 Hz), 5.36 (1H, q, J = 7.3 Hz), 7.16 (1H, d, J = 5.0 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.66 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.82 (2H, td, J = 3.2, 2.1 Hz), 8.30 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.64 (1H, s), 8.98 (1H, d, J = 8.1 Hz)
1328	4.12 (3H, td, J = 6.7, 2.7 Hz), 4.17 (4H, d, J = 2.1 Hz), 4.28 - 4.37 (2H, m), 4.69 (2H, td, J = 6.6, 2.4 Hz), 5.19 (2H, q, J = 7.0 Hz),, 8.45 (2H, dq, J = 8.6, 4.7 Hz), 8.56 - 8.60 (1H, m), 8.63 - 8.71 (2H, m), 8.80 (1H, dt, J = 6.4, 2.2 Hz), 8.84 (1H, dd, J = 6.0, 4.0 Hz), 8.93 - 9.00 (2H, m), 9.53 (1H, d, J = 4.3 Hz), 9.71 (1H, s), 9.87 (1H, d, J = 5.7 Hz)
1329	1.15 (3H, d, J = 6.9 Hz), 2.16 - 2.21 (3H, m), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.46 - 3.63 (4H, m), 3.64 (3H, s), 3.90 - 4.00 (1H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.14 - 4.22 (1H, m), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.45 (1H, dd, J = 12.2, 6.2 Hz), 4.81 (1H, t, J = 4.7 Hz), 5.91 - 5.96 (1H, m), 7.03 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.42 (1H, dd, J = 8.7, 2.7 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.58 - 7.68 (1H, m), 7.77 - 7.83 (1H, m), 7.96 (1H, d, J = 2.7 Hz), 8.69 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1330	0.20 – 0.27 (2H, m), 0.39 – 0.45 (2H, m), 1.00 – 1.10 (1H, m), 2.99 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.12 (2H, t, J=6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.62 (2H, t, J=6.5 Hz), 4.07 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.19 (2H, s), 7.34 (1H, d, J=8.2 Hz), 7.45 – 7.57 (3H, m), 7.61 – 7.68 (1H, m), 7.80 (1H, t, J=1.5 Hz), 7.83 (1H, d, J=2.3 Hz), 8.52 (1H, t, J=6.0 Hz), 12.88 (1H, s, br)
1331	2.19 (3H, d, J = 0.6 Hz), 2.99 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.61 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.64 (3H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.19 (2H, s), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 5.94 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.34 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.46 - 7.58 (3H, m), 7.61 - 7.69 (1H, m), 7.76 - 7.82 (1H, m), 7.82 - 7.87 (1H, m), 8.69 (1H, t, J = 6.1 Hz), 12.83 (1H, s br)
1332	2.16 (3H, s), 2.99 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.22 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.62 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.08 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.18 (2H, s), 4.36 (2H, d, J=6.1 Hz), 5.91 (1H, s), 7.34 (1H, d, J=8.2 Hz), 7.47 – 7.53 (3H, m), 7.61 – 7.69 (1H, m), 7.78 – 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J=2.3 Hz), 8.73 (1H, t, J=6.0 Hz), 12.51 (1H, s) 未見1個可交換質子
1333	0.21 – 0.26 (2H, m), 0.39 – 0.45 (2H, m), 1.01 – 1.09 (1H, m), 2.99 (2H, t, J=6.7 Hz), 3.12 (2H, t, J=6.4 Hz), 3.22 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.59 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.04 – 4.12 (4H, m), 7.04 – 7.11 (1H, m), 7.33 (1H, d, J=8.2 Hz), 7.42 – 7.46 (1H, m), 7.47 (1H, dd, J=8.1, 2.4 Hz), 7.49 – 7.53 (2H, m), 7.63 – 7.67 (1H, m), 7.78 – 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J=2.3 Hz), 8.52 (1H, t, J=6.0 Hz)
1334	2.77 (3H, d, J = 4.8 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.59 - 7.67 (1H, m), 7.76 - 7.85 (2H, m), 8.42 (1H, t, J = 4.7 Hz
1335	2.29 (2H, p, J = 7.7 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (4H, q, J = 6.8 Hz), 4.54 (2H, t, J = 7.7 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.61 (1H, ddd, J = 5.3, 3.5, 2.0 Hz), 7.76 (1H, dd, J = 2.4, 1.0 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz)

1336	1.92 - 2.04 (1H, m), 2.14 (1H, dtd, J = 12.5, 8.0, 6.5 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.59 (1H, dd, J = 8.8, 4.9 Hz), 3.71 (1H, td, J = 8.1, 6.0 Hz), 3.79 - 3.89 (2H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (1H, ddt, J = 11.7, 6.8, 3.5 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.56 - 7.71 (1H, m), 7.77 - 7.92 (2H, m), 8.49 (1H, d, J = 7.0 Hz)
1337	1.14 (3H, d, J = 6.7 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.19 - 3.25 (2H, m), 3.39 (1H, dt, J = 10.6, 5.9 Hz), 3.46 (1H, dt, J = 11.0, 5.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.99 - 4.09 (3H, m), 4.77 (1H, t, J = 5.7 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.47 - 7.56 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.79 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.96 (1H, d, J = 8.4 Hz)
1338	1.92 - 2.02 (1H, m), 2.07 - 2.19 (1H, m), 2.98 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.59 (1H, dd, J = 8.8, 4.9 Hz), 3.71 (1H, td, J = 8.1, 6.0 Hz), 3.81 - 3.89 (2H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.43 - 4.53 (1H, m), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.8, 2.0 Hz), 7.80 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.50 (1H, d, J = 7.1 Hz)
1339	2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.14 - 3.19 (1H, m), 3.22 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.50 - 3.58 (4H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.35 (2H, t, J = 6.0 Hz), 4.62 (2H, dd, J = 7.8, 6.0 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.78 (1H, td, J = 2.0, 0.6 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.64 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1340	2.98 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.34 (2H, q, J = 6.2 Hz), 3.48 - 3.53 (2H, m), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.74 (1H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.60 - 7.67 (1H, m), 7.79 (1H, td, J = 1.9, 0.7 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.27 (1H, t, J = 5.9 Hz)。
1341	2.98 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.53 (2H, s), 3.60 (2H, d, J = 4.8 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.59 - 7.66 (1H, m), 7.75 - 7.80 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.13 (1H, s)。未觀察到一個可交換質子。
1342	2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.66 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.72 (2H, dd, J = 7.6, 6.5 Hz), 5.04 (1H, td, J = 7.4, 6.5 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.63 - 7.72 (1H, m), 7.78 - 7.85 (2H, m), 9.16 (1H, d, J = 6.8 Hz)。
1343	2.29 - 2.38 (2H, m), 2.98 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.15 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.55 (2H, dd, J = 7.2, 6.2 Hz), 4.00 (4H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.53 (2H, m), 7.58 - 7.65 (1H, m), 7.75 - 7.78 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz)。
1344	1.15 (d, J = 6.7 Hz, 3H), 2.98 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.04 (s, 3H), 3.23 (dd, J = 7.2, 6.1 Hz, 2H), 3.39 (dt, J = 10.7, 5.9 Hz, 1H), 3.47 (dt, J = 11.2, 5.6 Hz, 1H), 3.55 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 4.06 (dt, J = 14.1, 7.3 Hz, 3H), 4.78 (t, J = 5.7 Hz, 1H), 7.32 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.46 (dd, J = 8.1, 2.4 Hz, 1H), 7.48 – 7.56 (m, 2H), 7.64 (dt, J = 6.8, 2.0 Hz, 1H), 7.80 (td, J = 2.0, 0.6 Hz, 1H), 7.84 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 7.96 (d, J = 8.4 Hz, 1H)。
1345	1.18 (d, J = 7.4 Hz, 3H), 2.91 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 2.96 (s, 3H), 3.07 (d, J = 7.3 Hz, 1H), 3.15 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.48 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 3.99 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 7.25 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.39 (dd, J = 8.0, 2.4 Hz, 1H), 7.41 – 7.44 (m, 2H), 7.57 (d, J = 5.3 Hz,

	1H), 7.72 (s, 1H), 7.77 (d, J = 2.3 Hz, 1H)。
1346	1.56 – 1.69 (m, 2H), 2.14 (t, J = 9.3 Hz, 4H), 2.94 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 2.99 (s, 3H), 3.17 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.51 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 4.02 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 4.41 (q, J = 8.3 Hz, 1H), 7.28 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.42 (dd, J = 8.1, 2.3 Hz, 1H), 7.46 – 7.52 (m, 2H), 7.59 – 7.65 (m, 1H), 7.75 – 7.81 (m, 2H), 8.57 (d, J = 8.2 Hz, 1H)。
1347	2.98 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.03 (s, 3H), 3.19 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.55 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 4.06 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 7.32 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 7.45 (dd, J = 8.0, 2.4 Hz, 1H), 7.49 – 7.53 (m, 2H), 7.63 (ddd, J = 5.3, 3.5, 2.0 Hz, 1H), 7.79 (dt, J = 2.1, 0.9 Hz, 1H), 7.83 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 9.09 (s, 1H), 11.17 (s, 1H)。
1350	1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.15 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.36 (2H, q, J = 7.1 Hz), 6.32 (1H, td, J = 6.7, 1.4 Hz), 6.45 - 6.52 (1H, m), 7.27 - 7.34 (1H, m), 7.44 - 7.47 (1H, m), 7.47 - 7.58 (5H, m), 7.59 - 7.67 (2H, m), 7.73 - 7.79 (1H, m)
1351	2.19 (3H, d, J = 0.6 Hz), 3.12 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.45 - 3.57 (2H, m), 3.64 (3H, s), 3.70 - 3.78 (1H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.16 (1H, dd, J = 12.4, 1.5 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.1 Hz), 4.59 (1H, dd, J = 12.4, 6.2 Hz), 5.01 - 5.07 (1H, m), 5.93 (1H, s), 7.02 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.42 (1H, dd, J = 8.7, 2.7 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.61 - 7.67 (1H, m), 7.77 - 7.82 (1H, m), 7.98 (1H, d, J = 2.8 Hz), 8.68 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1352	1.13 (3H, t, J=7.1 Hz), 2.06 – 2.23 (3H, m), 3.21 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.50 – 3.58 (4H, m), 4.05 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.31 – 4.44 (4H, m), 5.91 (1H, s), 7.04 (1H, d, J=8.6 Hz), 7.45 (1H, dd, J=8.6, 2.7 Hz), 7.47 – 7.56 (2H, m), 7.59 – 7.69 (2H, m), 7.78 – 7.82 (1H, m), 8.67 (1H, s), 12.21 (1H, s)。
1353	2.98 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 3.03 (s, 3H), 3.20 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.55 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 4.00 (t, J = 9.6 Hz, 2H), 4.08 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 4.40 (t, J = 9.5 Hz, 2H), 7.32 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.46 (dd, J = 8.0, 2.4 Hz, 1H), 7.48 – 7.53 (m, 2H), 7.57 – 7.61 (m, 1H), 7.72 – 7.76 (m, 1H), 7.83 (d, J = 2.4 Hz, 1H)。
1354	1.57 (s, 3H), 2.98 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 3.02 – 3.06 (m, 5H), 3.55 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 4.07 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 4.33 (d, J = 6.8 Hz, 2H), 4.56 (s, 2H), 4.59 (d, J = 6.5 Hz, 2H), 7.32 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 7.43 – 7.50 (m, 3H), 7.53 – 7.57 (m, 1H), 7.65 – 7.69 (m, 1H), 7.83 (d, J = 2.3 Hz, 1H)。
1355	0.89 - 1.03 (4H, m), 2.96 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.53 - 3.69 (7H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.38 (2H, d, J = 6.1 Hz), 4.78 (1H, s), 6.14 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.50 - 7.53 (2H, m), 7.65 (2H, dd, J = 6.3, 2.2 Hz), 7.80 - 7.83 (1H, m), 7.84 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.79 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1356	2.32 (3H, d, J = 0.7 Hz), 2.98 (4H, dt, J = 6.8, 3.3 Hz), 3.02 (3H, s), 3.52 - 3.57 (2H, m), 4.02 - 4.08 (2H, m), 4.62 (2H, s), 4.65 (2H, s), 7.22 (1H, dt, J = 4.9, 0.8 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.42 - 7.48 (3H, m), 7.56 (1H, ddd, J = 6.7, 2.7, 2.0 Hz), 7.67 - 7.70 (1H, m), 7.82 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.38 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.45 (1H, s)
1357	2.32 (3H, s), 2.96 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.50 - 3.66 (6H, m), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.45 (2H, d, J = 6.1 Hz), 4.75 - 4.80 (1H, m), 7.21 (1H, d, J = 5.0 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.0, 2.3 Hz), 7.50 - 7.56 (2H, m), 7.66 - 7.70 (1H, m), 7.82 - 7.85 (2H, m), 8.33 - 8.37 (2H, m), 9.10 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1358	2.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.04 (2H, d, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.91 (2H, s), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.63 (2H, s), 7.31 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.41 - 7.50 (3H, m), 7.55 (1H, dt, J = 7.2, 2.1 Hz), 7.65 - 7.70 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz)。

1359	0.57 - 0.63 (2H, m), 0.74 - 0.80 (2H, m), 1.37 (3H, s), 2.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.42 - 7.47 (1H, m), 7.48 - 7.53 (2H, m), 7.61 - 7.65 (1H, m), 7.78 - 7.81 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.56 (1H, s)
1360	0.71 - 0.81 (4H, m), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.48 - 3.59 (4H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.70 (1H, t, J = 5.8 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.42 - 7.54 (3H, m), 7.60 - 7.68 (1H, m), 7.80 (1H, dt, J = 2.0, 1.0 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.45 (1H, s)
1361	1.20 (q, J = 4.2 Hz, 2H), 1.31 (s, 2H), 2.98 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.03 (s, 3H), 3.21 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.55 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 4.07 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 7.32 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 7.46 (dd, J = 8.0, 2.4 Hz, 1H), 7.49 – 7.56 (m, 2H), 7.65 (dt, J = 6.6, 2.2 Hz, 1H), 7.80 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 7.84 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 8.88 (s, 1H)
1362	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.28 (2H, dd, J = 7.3, 6.0 Hz), 4.03 - 4.10 (4H, m), 4.40 - 4.46 (2H, m), 7.10 - 7.14 (1H, m), 7.40 - 7.43 (2H, m), 7.50 - 7.53 (2H, m), 7.58 - 7.65 (2H, m), 7.77 - 7.80 (1H, m), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1363	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.05 - 2.13 (2H, m), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.25 - 3.30 (2H, m), 3.65 (2H, t, J = 6.1 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.33 (2H, d, J = 5.3 Hz), 7.20 - 7.28 (2H, m), 7.36 - 7.41 (2H, m), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.60 - 7.65 (1H, m), 7.78 (1H, t, J = 1.8 Hz), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1364	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.75 (3H, s), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.25 - 3.29 (2H, m), 3.40 - 3.46 (2H, m), 3.73 - 3.81 (2H, m), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.98 (1H, ddd, J = 7.9, 2.0, 1.0 Hz), 7.32 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.38 - 7.43 (1H, m), 7.49 - 7.53 (2H, m), 7.59 - 7.65 (2H, m), 7.76 - 7.80 (1H, m), 8.45 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1365	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.99 - 2.11 (2H, m), 3.17 - 3.32 (4H, m), 3.82 (2H, t, J = 7.0 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.13 (1H, ddd, J = 8.0, 2.0, 1.0 Hz), 7.39 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.46 - 7.57 (3H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.69 (1H, t, J = 2.1 Hz), 7.79 (1H, dt, J = 2.2, 1.1 Hz), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz) 2H由DMSO峰遮蔽
1366	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.39 (2H, p, J = 6.9 Hz), 3.17 - 3.32 (4H, m), 3.51 (2H, t, J = 7.4 Hz), 3.73 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.07 - 7.15 (2H, m), 7.17 (1H, t, J = 2.1 Hz), 7.39 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.0 Hz), 7.79 (1H, dt, J = 2.4, 1.3 Hz), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1367	0.47 (1H, td, J = 5.3, 2.3 Hz), 1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.55 - 1.62 (1H, m), 2.97 (1H, dd, J = 18.2, 7.3 Hz), 3.25 (4H, dt, J = 26.8, 6.7 Hz), 3.55 (1H, t, J = 6.0 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.15 (1H, ddd, J = 8.0, 2.1, 1.0 Hz), 7.41 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.46 - 7.58 (3H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.69 (1H, t, J = 2.0 Hz), 7.79 (1H, dt, J = 2.4, 1.2 Hz), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz) 2H由DMSO峰遮蔽
1368	0.71 (1H, q, J = 4.0 Hz), 1.07 - 1.20 (4H, m), 1.99 - 2.09 (2H, m), 3.16 - 3.32 (4H, m), 3.72 (1H, d, J = 10.3 Hz), 3.97 - 4.08 (3H, m), 7.08 (1H, ddd, J = 7.8, 2.1, 1.1 Hz), 7.35 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.41 (1H, ddd, J = 8.3, 2.2, 1.1 Hz), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.58 - 7.66 (2H, m), 7.78 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1369	0.63 - 0.68 (2H, m), 1.12 (5H, td, J = 7.0, 3.0 Hz), 2.49 (3H, s), 3.16 - 3.32 (4H, m), 3.85 (2H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.99 (1H, ddd, J = 7.9, 2.0, 1.0 Hz), 7.33 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.43 (1H, ddd, J = 8.4, 2.2, 1.0 Hz), 7.46 - 7.59 (3H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.78 (1H, dt, J = 2.3, 1.2 Hz), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1370	2.17 (3H, s), 3.11 (3H, s), 3.23 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.30 (3H, s), 3.72 (1H, d, J=15.0 Hz),

	4.04 - 4.15 (3H, m), 4.30 - 4.44 (2H, m), 5.91 (1H, s), 7.44 (1H, d, J=8.9 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.60 (1H, dd, J=8.8, 2.7 Hz), 7.63 - 7.68 (1H, m), 7.69 (1H, d, J=2.6 Hz), 7.79 - 7.84 (1H, m), 8.61 - 8.97 (1H, m), 12.22 (1H, br s)。
1371	1.09 - 1.15 (6H, m), 3.21 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.24 - 3.31 (2H, m), 3.51 - 3.57 (4H, m), 4.04 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.33 (2H, t, J=4.6 Hz), 7.04 (1H, d, J=8.6 Hz), 7.44 (1H, dd, J=8.6, 2.8 Hz), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.60 - 7.66 (2H, m), 7.77 - 7.80 (1H, m), 8.46 (1H, t, J=5.9 Hz)。
1372	2.18 - 2.20 (3H, m), 3.11 (3H, s), 3.23 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.30 (3H, s), 3.65 (3H, s), 3.72 (1H, d, J=15.0 Hz), 4.02 - 4.17 (3H, m), 4.31 (2H, d, J=6.0 Hz), 5.92 - 5.95 (1H, m), 7.44 (1H, d, J=8.8 Hz), 7.48 - 7.54 (2H, m), 7.60 (1H, dd, J=8.8, 2.6 Hz), 7.63 - 7.68 (1H, m), 7.69 (1H, d, J=2.6 Hz), 7.80 - 7.83 (1H, m), 8.70 (1H, t, J=6.1 Hz)。
1373	1.15 (3H, d, J = 6.9 Hz), 2.16 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.44 - 3.68 (4H, m), 3.90 - 4.00 (1H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.15 - 4.22 (1H, m), 4.36 (2H, d, J = 5.9 Hz), 4.45 (1H, dd, J = 12.2, 6.2 Hz), 4.80 (1H, t, J = 4.7 Hz), 5.91 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.03 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.42 (1H, dd, J = 8.7, 2.8 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.58 - 7.68 (1H, m), 7.77 - 7.83 (1H, m), 7.96 (1H, d, J = 2.8 Hz), 8.70 (1H, s), 12.21 (1H, s)
1374	0.22 - 0.26 (2H, m), 0.39 - 0.44 (2H, m), 0.99 - 1.10 (1H, m), 1.13 (3H, t, J=7.1 Hz), 3.12 (2H, t, J=6.5 Hz), 3.21 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.51 - 3.57 (4H, m), 4.04 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.33 (2H, t, J=5.1 Hz), 7.04 (1H, d, J=8.6 Hz), 7.44 (1H, dd, J=8.6, 2.8 Hz), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.61 - 7.65 (2H, m), 7.78 - 7.81 (1H, m), 8.51 (1H, t, J=6.0 Hz)。
1375	1.11 (3H, t, J=7.2 Hz), 3.11 (3H, s), 3.22 (2H, t, J=6.7 Hz), 3.26 - 3.30 (5H, m), 3.72 (1H, d, J=15.0 Hz), 4.05 - 4.13 (3H, m), 7.44 (1H, d, J=8.8 Hz), 7.49 - 7.54 (2H, m), 7.60 (1H, dd, J=8.8, 2.6 Hz), 7.62 - 7.66 (1H, m), 7.68 (1H, d, J=2.6 Hz), 7.78 - 7.81 (1H, m), 8.47 (1H, t, J=5.9 Hz)。
1376	1.67 - 1.75 (2H, m), 2.36 (3H, s), 3.21 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.44 (2H, q, J=6.1 Hz), 3.51 - 3.59 (4H, m), 4.04 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.34 (2H, t, J=5.1 Hz), 4.48 (2H, d, J=6.0 Hz), 4.50 (1H, t, J=5.2 Hz), 7.04 (1H, d, J=8.7 Hz), 7.19 (1H, d, J=5.0 Hz), 7.44 (1H, dd, J=8.6, 2.7 Hz), 7.48 - 7.54 (2H, m), 7.61 (1H, d, J=2.8 Hz), 7.62 - 7.66 (1H, m), 7.78 - 7.81 (1H, m), 8.32 (1H, d, J=4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 9.00 (1H, t, J=6.0 Hz)。
1377	1.67 - 1.75 (2H, m), 2.19 (3H, d, J=0.7 Hz), 3.21 (2H, t, J=6.6 Hz), 3.44 (2H, q, J=5.1 Hz), 3.52 - 3.59 (4H, m), 3.64 (3H, s), 4.04 (2H, t, J=6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J=6.1 Hz), 4.34 (2H, t, J=4.6 Hz), 4.50 (1H, t, J=5.2 Hz), 5.92 - 5.95 (1H, m), 7.04 (1H, d, J=8.6 Hz), 7.45 (1H, dd, J=8.6, 2.7 Hz), 7.47 - 7.54 (2H, m), 7.61 (1H, d, J=2.7 Hz), 7.62 - 7.66 (1H, m), 7.79 - 7.81 (1H, m), 8.68 (1H, t, J=6.1 Hz)。
1378	2.16 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.70 (2H, t, J = 5.1 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.30 - 4.39 (4H, m), 4.44 (2H, q, J = 9.5 Hz), 5.91 (1H, s), 7.09 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.47 -7.55 (3H, m), 7.61 - 7.67 (2H, m), 7.78 - 7.81 (1H, m), 8.72 (1H, t, J = 6.0 Hz) 12.06 (1H, br.s)。
1379	1.15 (3H, d, J = 7.0 Hz), 2.19 (3H, d, J = 0.7 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.46 - 3.63 (4H, m), 3.64 (3H, s), 3.92 - 4.00 (1H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.18 (1H, d, J = 10.8 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.45 (1H, dd, J = 12.2, 6.2 Hz), 4.80 (1H, t, J = 4.9 Hz), 5.93 (1H, d, J = 0.9 Hz), 7.03 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.42 (1H, dd, J = 8.7, 2.8 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.60 - 7.67 (1H, m), 7.76 - 7.81 (1H, m), 7.96 (1H, d, J = 2.8 Hz), 8.68 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1380	1.15 (3H, d, J = 7.0 Hz), 2.18 (3H, d, J = 10.2 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.45 - 3.66

	(4H, m), 3.96 (1H, q, J = 6.8 Hz), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.11 - 4.23 (1H, m), 4.29 - 4.40 (2H, m), 4.45 (1H, dd, J = 12.2, 6.2 Hz), 4.73 - 4.84 (1H, m), 5.91 (1H, s), 7.03 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.38 - 7.46 (1H, m), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.58 - 7.66 (1H, m), 7.77 - 7.82 (1H, m), 7.96 (1H, d, J = 2.8 Hz), 8.69 (1H, br.s), 12.20 (1H, br.s)
1381	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.14 (3H, d, J = 7.0 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.24 - 3.30 (2H, m), 3.47 - 3.55 (1H, m), 3.55 - 3.64 (3H, m), 3.91 - 3.99 (1H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.18(1H, d, J = 11.5 Hz), 4.45 (1H, dd, J = 12.2, 6.2 Hz), 4.76 - 4.83 (1H, m), 7.03 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.42 (1H, dd, J = 8.7, 2.8 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.60 - 7.65 (1H, m), 7.76 - 7.80 (1H, m), 7.96 (1H, d, J = 2.8 Hz), 8.45(1H, t, J = 5.9 Hz)
1382	2.16 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.65 (2H, t, J = 5.1 Hz), 3.93 - 4.02 (2H, m), 4.05 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.31 - 4.40 (4H, m), 5.91 (1H, s), 6.23 (1H, tt, J = 55.6 (H-F), 4.0 Hz), 7.07 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.46 - 7.55 (3H, m), 7.61 - 7.68 (2H, m), 7.77 - 7.83 (1H, m), 8.72 (1H, t, J = 5.9 Hz), 12.19 (1H, s br)
1383	2.09 - 2.26 (6H, m), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.60 (2H, t, J = 5.1 Hz), 3.62 - 3.66 (6H, m), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.13 (2H, d, J = 5.7 Hz), 4.19 (2H, s), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.42 (2H, t, J = 4.9 Hz), 5.90 (1H, s), 5.93 (1H, s), 7.05 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.7, 2.8 Hz), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.61 - 7.68 (2H, m), 7.78 - 7.82 (1H, m), 8.34 (1H, t, J = 5.7 Hz), 8.69 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1384	2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.49 - 3.64 (4H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.48 (1H, t, J = 5.2 Hz), 4.60 (1H, t, J = 5.2 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.61 - 7.68 (1H, m), 7.77 - 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.60 (1H, t, J = 5.8 Hz)
1385	1.86 (s, 3H), 2.96 (dt, J = 13.3, 6.6 Hz, 4H), 3.03 (s, 3H), 3.55 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 4.04 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 4.34 (d, J = 5.8 Hz, 2H), 7.31 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.41 – 7.50 (m, 3H), 7.54 (dt, J = 7.5, 1.9 Hz, 1H), 7.66 (t, J = 1.8 Hz, 1H), 7.82 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 8.37 (t, J = 5.8 Hz, 1H)
1386	2.44 (2H, d, J = 7.1 Hz), 2.94 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.00 (3H, s), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.42 (2H, q, J = 6.8 Hz), 3.51 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.28 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.42 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.47 - 7.51 (2H, m), 7.59 (1H, dt, J = 6.4, 2.2 Hz), 7.73 - 7.76 (1H, m), 7.80 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.43 (1H, t, J = 5.9 Hz) 未見可交換質子
1387	1.33 (3H, d, J = 7.0 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.96 - 4.15 (3H, m), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.49 - 7.56 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.3, 2.3 Hz), 7.78 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.37 (1H, d, J = 6.5 Hz) 未見可交換質子
1388	2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.16 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.10 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.41 – 7.48 (1H, m), 7.51 – 7.61 (2H, m), 7.61 – 7.67 (1H, m), 7.77 – 7.86 (2H, m)
1389	0.69 (4H, q, J = 2.1 Hz), 1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.56 (2H, s), 3.17 - 3.34 (4H, m), 3.74 (2H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.14 (1H, ddd, J = 8.0, 2.1, 1.0 Hz), 7.39 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.46 - 7.57 (3H, m), 7.57 - 7.68 (2H, m), 7.78 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1390	1.11 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.02 (2H, p, J = 5.9 Hz), 2.84 (3H, s), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.28 (2H, dd, J = 7.3, 6.0 Hz), 3.60 - 3.67 (2H, m), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.07 - 7.16 (2H, m), 7.24 - 7.34 (2H, m), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.78

	(1H, t, J = 1.6 Hz), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz) 2H與水峰重疊
1391	1.36 (3H, d, J = 7.1 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (2H, td, J = 7.1, 2.6 Hz), 4.21 (1H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.6, 2.2 Hz), 7.76 - 7.85 (2H, m), 8.42 (1H, s)
1392	1.11 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.15 (3H, d, J = 6.9 Hz), 3.16 - 3.31 (4H, m), 3.44 - 3.64 (4H, m), 3.95 (1H, h, J = 6.5 Hz), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.15 - 4.22 (1H, m), 4.40 - 4.49 (1H, m), 4.80 (1H, t, J = 4.9 Hz), 7.03 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.38 - 7.46 (1H, m), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.58 - 7.66 (1H, m), 7.76 - 7.81 (1H, m), 7.96 (1H, d, J = 2.7 Hz), 8.45 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1393	2.19 (3H, d, J = 0.7 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.56 - 3.61 (2H, m), 3.64 (3H, s), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.14 (2H, s), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.41 (2H, dd, J = 5.5, 4.3 Hz), 5.93 (1H, d, J = 0.9 Hz), 7.04 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.09 (1H, s br), 7.43 - 7.50 (2H, m), 7.49 - 7.55 (2H, m), 7.62 - 7.68 (2H, m), 7.76 - 7.83 (1H, m), 8.68 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1394	2.20 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.59 (2H, t, J = 4.8 Hz), 3.70 (3H, s), 4.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.14 (2H, s), 4.37 - 4.45 (4H, m), 7.04 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.09 (1H, s br), 7.43 - 7.48 (2H, m), 7.49 - 7.54 (2H, m), 7.61 - 7.68 (2H, m), 7.78 - 7.83 (1H, m), 8.58 (1H, t, J = 5.8 Hz)
1395	2.19 (3H, s), 3.12 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.45 - 3.56 (2H, m), 3.64 (3H, s), 3.70 - 3.77 (1H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.16 (1H, dd, J = 12.3, 1.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.59 (1H, dd, J = 12.4, 6.2 Hz), 5.02 - 5.06 (1H, m), 5.93 (1H, s), 7.02 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.42 (1H, dd, J = 8.7, 2.8 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.61 - 7.67 (1H, m), 7.78 - 7.82 (1H, m), 7.98 (1H, d, J = 2.8 Hz), 8.68 (1H, t, J = 6.1 Hz)
1396	2.36 (3H, s), 3.12 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.45 - 3.57 (2H, m), 3.69 - 3.78 (1H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.16 (1H, dd, J = 12.4, 1.5 Hz), 4.48 (2H, d, J = 6.0 Hz), 4.59 (1H, dd, J = 12.4, 6.2 Hz), 4.99 - 5.07 (1H, m), 7.02 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.19 (1H, d, J = 5.0 Hz), 7.41 (1H, dd, J = 8.7, 2.8 Hz), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.61 - 7.67 (1H, m), 7.77 - 7.82 (1H, m), 7.97 (1H, d, J = 2.7 Hz), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 9.00 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1397	1.08 - 1.16 (6H, m), 1.61 - 1.71 (1H, m), 2.23 - 2.33 (1H, m), 2.35 - 2.44 (1H, m), 2.51 - 2.59 (1H, m), 3.18 - 3.30 (4H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 - 4.43 (1H, m), 7.16 - 7.21 (1H, m), 7.30 - 7.35 (1H, m), 7.40 (1H, t, J = 8.0 Hz), 7.47 - 7.54 (3H, m), 7.60 - 7.65 (1H, m), 7.77 - 7.80 (1H, m), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1398	1.06 - 1.18 (6H, m), 1.59 - 1.71 (1H, m), 2.23 - 2.33 (1H, m), 2.35 - 2.45 (1H, m), 2.51 - 2.59 (1H, m), 3.17 - 3.31 (4H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.32 - 4.43 (1H, m), 7.16 - 7.21 (1H, m), 7.30 - 7.35 (1H, m), 7.40 (1H, t, J = 8.0 Hz), 7.47 - 7.55 (3H, m), 7.61 - 7.65 (1H, m), 7.76 - 7.80 (1H, m), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1399	1.12 (3H, t, J = 7.2 Hz), 3.18 (3H, s), 3.20 - 3.32 (4H, m), 4.10 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.74 (1H, d, J = 3.1 Hz), 7.03 (1H, d, J = 3.2 Hz), 7.23 (1H, ddd, J = 8.0, 2.0, 1.0 Hz), 7.45 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.48 - 7.57 (2H, m), 7.57 - 7.67 (2H, m), 7.73 - 7.81 (2H, m), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1400	0.84 - 0.90 (2H, m), 0.93 - 0.99 (2H, m), 1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.19 (2H, d, J = 7.4 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.26 - 3.30 (2H, m), 3.87 - 3.94 (2H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.12 (1H, ddd, J = 7.9, 2.0, 1.0 Hz), 7.39 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.47 - 7.55 (3H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.72 - 7.80 (2H, m), 8.45 (1H, t, J = 5.9 Hz)

1401	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.01 – 2.13 (2H, m), 2.37 (2H, t, J = 8.0 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.23 - 3.30 (2H, m), 3.65 (2H, t, J = 7.0 Hz), 3.80 (3H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.11 (1H, d, J = 8.9 Hz), 7.24 (1H, d, J = 2.7 Hz), 7.29 (1H, dd, J = 8.8, 2.7 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.45 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1402	0.57 (1H, td, J = 5.3, 2.2 Hz), 0.87 (1H, dt, J = 8.4, 5.4 Hz), 1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.54 - 1.65 (1H, m), 2.36 (1H, d, J = 18.1 Hz), 2.80 (1H, dd, J = 18.0, 7.3 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.24 - 3.30 (2H, m), 3.38 - 3.46 (1H, m), 3.81 (3H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.13 (1H, d, J = 8.9 Hz), 7.24 (1H, d, J = 2.6 Hz), 7.31 (1H, dd, J = 8.9, 2.6 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.6, 2.1 Hz), 7.75 - 7.81 (1H, m), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1403	2.94 (3H, s), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.52 - 3.58 (2H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.27 (2H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.43 - 7.50 (3H, m), 7.55 (1H, dt, J = 7.3, 2.0 Hz), 7.58 (1H, s), 7.65 - 7.70 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz)
1404	0.19 - 0.54 (4H, m), 1.04 (1H, dt, J = 8.8, 4.6 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.18 - 3.25 (2H, m), 3.34 - 3.44 (1H, m), 3.46 - 3.66 (4H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.73(1H, t, J = 5.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.50 - 7.56 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.5, 2.2 Hz), 7.78 - 7.86 (2H, m), 8.03 (1H, d, J = 9.0 Hz)
1405	1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.63 (1H, dd, J = 17.4, 6.2 Hz), 2.92 (1H, dd, J = 17.4, 9.9 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.49 - 3.62 (1H, m), 3.87 - 3.94 (1H, m), 4.07 - 4.16 (3H, m), 4.36 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.16 - 7.20 (1H, m), 7.41 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.49 - 7.61 (4H, m), 7.70 (1H, t, J = 2.1 Hz), 7.75 (1H, t, J = 1.9 Hz)
1406	0.22 - 0.40 (3H, m), 0.42 - 0.51 (1H, m), 0.99 - 1.10 (1H, m), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.15 - 3.27 (2H, m), 3.34 - 3.43 (1H, m), 3.50 - 3.68 (4H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.73 (1H, t, J = 5.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.64 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.80 (1H, dt, J = 2.4, 1.2 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.4 Hz), 8.02 (1H, d, J = 9.0 Hz)
1407	0.46 (1H, td, J = 5.3, 2.3 Hz), 1.04 - 1.08 (1H, m), 1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.54 - 1.61 (1H, m), 2.46 (1H, d, J = 18.2 Hz), 2.96 (1H, dd, J = 18.2, 7.3 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.28 (2H, dd, J = 7.3, 6.0 Hz), 3.54 (1H, t, J = 6.0 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.13 - 7.17 (1H, m), 7.41 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.46 - 7.57 (3H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.69 (1H, t, J = 2.1 Hz), 7.77 - 7.80 (1H, m), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1408	0.46 (1H, td, J = 5.2, 2.2 Hz), 1.03 - 1.08 (1H, m), 1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.53 - 1.63 (1H, m), 2.46 (1H, d, J = 18.1 Hz), 2.96 (1H, dd, J = 18.2, 7.3 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.28 (2H, dd, J = 7.4, 6.1 Hz), 3.55 (1H, t, J = 6.0 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.12 - 7.17 (1H, m), 7.41 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.47 - 7.57 (3H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.69 (1H, t, J = 2.1 Hz), 7.79 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.46 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1409	1.07 – 1.15 (9H, m), 3.16 – 3.34 (4H, m) , 3.35 – 3.44 (2H, m) , 3.72 – 3.81 (2H, m) , 3.96 – 4.09 (3H, m) , 6.97 (1H, d, J = 7.7 Hz), 7.32 (1H, t, J = 8.0 Hz), 7.37 (1H, d, J = 8.5 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.57 - 7.67 (2H, m), 7.78 (1H, t, J = 2.1 Hz), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1410	2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.26 (3H, s), 3.39 - 3.49 (4H, m), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45

	(1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.61 - 7.67 (1H, m), 7.79 (1H, dt, J = 2.0, 1.0 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.36 (1H, t, J = 5.5 Hz)
1411	2.98 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.49 - 3.58 (3H, m), 3.63 (1H, dd, J = 8.9, 4.1 Hz), 3.91 (1H, dd, J = 9.3, 5.0 Hz), 3.99 (1H, dd, J = 9.0, 6.1 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.19 - 4.26 (1H, m), 4.28 (1H, s), 5.28 (1H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.48 - 7.54 (2H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.5, 2.2 Hz), 7.80 (1H, t, J = 1.5 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.44 (1H, d, J = 7.1 Hz)
1412	2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.50 - 3.58 (3H, m), 3.62 (1H, dd, J = 9.6, 2.3 Hz), 3.90 - 4.00 (2H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.27 (1H, td, J = 5.2, 2.3 Hz), 4.28 - 4.37 (1H, m), 5.58 - 5.62 (1H, m), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.48 - 7.57 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 7.0, 2.0 Hz), 7.76 - 7.82 (2H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz)
1413	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.44 - 1.60 (4H, m), 1.71-1.88 (2H, m), 2.19 - 2.31 (1H, m), 2.71 - 2.83 (2H, m), 3.17 - 3.34 (4H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.68 (1H, t, J = 6.2 Hz), 7.12 - 7.22 (1H, m), 7.35 - 7.45 (2H, m), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.57 - 7.67 (2H, m), 7.78-7.80 (1H, m), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1414	2.43 (3H, s), 2.95 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.50 - 3.64 (6H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.41 (2H, d, J = 6.2 Hz), 4.77 (1H, d, J = 5.0 Hz), 7.21 (1H, d, J = 7.9 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.41 - 7.55 (3H, m), 7.59 - 7.67 (2H, m), 7.77 - 7.85 (2H, m), 8.41 (1H, d, J = 2.3 Hz), 9.07 (1H, t, J = 6.2 Hz)
1415	2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.49 - 3.58 (3H, m), 3.63 (1H, dd, J = 8.9, 4.1 Hz), 3.91 (1H, dd, J = 9.3, 5.0 Hz), 3.99 (1H, dd, J = 9.0, 6.1 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.21 - 4.30 (2H, m), 5.27 (1H, d, J = 4.3 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.65 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.77 - 7.85 (2H, m), 8.43 (1H, d, J = 7.1 Hz)
1416	2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.50 - 3.58 (3H, m), 3.62 (1H, dd, J = 9.6, 2.3 Hz), 3.93 (1H, dd, J = 8.8, 3.7 Hz), 3.97 (1H, dd, J = 7.3, 6.3 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.24 - 4.37 (2H, m), 5.60 (1H, d, J = 3.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.48 - 7.56 (2H, m), 7.62 (1H, dt, J = 6.7, 2.1 Hz), 7.76 - 7.86 (3H, m)
1417	1.67 (2H, p, J = 6.6 Hz), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.28 - 3.36 (2H, m), 3.46 (2H, td, J = 6.2, 5.1 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.49 (1H, t, J = 5.2 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.61 - 7.66 (1H, m), 7.79 (1H, dt, J = 2.1, 1.0 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.41 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1418	1.11 (3H, t, J = 7.1 Hz), 3.09 (3H, s), 3.18 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.25 - 3.29 (2H, m), 3.61 (2H, t, J = 4.8 Hz), 4.28 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.41 - 4.47 (2H, m), 6.68 (1H, s), 7.53 - 7.55 (1H, m), 7.63 - 7.66 (1H, m), 7.79 - 7.84 (1H, m), 7.91 (1H, s), 8.25 (1H, s), 8.47 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1419	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.32 - 1.40 (2H, m), 1.44 - 1.52 (4H, m), 2.27 - 2.40 (4H, m), 3.19 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.26 - 3.28 (2H, m), 3.40 (2H, s), 3.77 (3H, s), 4.00 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.57 (1H, s), 6.98 (1H, d, J = 8.9 Hz), 7.20 (1H, dd, J = 8.7, 2.7 Hz), 7.27 (1H, d, J = 2.7 Hz), 7.50 - 7.52 (1H, m), 7.60 - 7.65 (1H, m), 7.75 - 7.81 (1H, m), 8.44 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1420	1.11 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.27 (3H, s), 2.68 - 2.74 (2H, m), 3.10 (2H, s), 3.21 (2H, t, J =

	6.6 Hz), 3.26 - 3.28 (2H, m), 3.65 (2H, dd, J = 6.3, 4.5 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.19 - 7.23 (1H, m), 7.24 - 7.31 (1H, m), 7.36 (1H, t, J = 2.1 Hz), 7.41 (1H, t, J = 8.0 Hz), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.60 - 7.65 (1H, m), 7.78 (1H, t, J = 2.0 Hz), 8.45 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1421	0.56 (4H, s), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.42 (2H, d, J = 5.9 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 5.47 (1H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.0, 2.3 Hz), 7.48 - 7.55 (2H, m), 7.61 - 7.68 (1H, m), 7.79 - 7.82 (1H, m), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.21 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1422	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 3.16 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.22 - 3.33 (4H, m), 3.93 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.10 (2H, t, J = 4.4 Hz), 5.85 (1H, s), 6.42 (1H, dd, J = 8.4, 2.4 Hz), 6.53 (1H, d, J = 2.5 Hz), 6.63 (1H, d, J = 8.4 Hz), 7.45 - 7.56 (2H, m), 7.61 (1H, m), 7.74 - 7.79 (1H, m), 8.43 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1423	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.21 (3H, s), 2.43 (4H, t, J = 5.0 Hz), 3.12 (4H, dd, J = 5.1, 5.1 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.23 - 3.30 (2H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.73 – 6.76 (1H, m), 6.83 (1H, dd, J = 8.2, 2.4 Hz), 6.90 (1H, dd, J = 2.2, 2.2 Hz), 7.21 (1H, dd, J = 8.1, 8.1 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.60 - 7.63 (1H, m), 7.74 - 7.80 (1H, m), 8.45 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1424	1.69 (1H, s), 1.70 - 1.78 (2H, m), 2.33 (1H, s), 2.53 (1H, d, J = 11.1 Hz), 2.68 - 2.82 (2H, m), 2.91 (2H, t, J = 6.6 Hz), 2.96 (3H, s), 3.04 (1H, s), 3.09 - 3.23 (2H, m), 3.48 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.00 (2H, dd, J = 10.3, 6.4 Hz), 4.38 (1H, s), 7.25 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.38 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.41 - 7.49 (2H, m), 7.60 (1H, dt, J = 6.9, 2.0 Hz), 7.74 - 7.79 (2H, m), 8.18 (1H, d, J = 9.3 Hz)
1425	2.98 (3H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.15 - 3.29 (4H, m), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.01 - 4.14 (2H, m), 4.59 (1H, dt, J = 16.1, 7.9 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 - 7.57 (2H, m), 7.64 – 7.69 (1H, m), 7.78 - 7.85 (2H, m), 8.52 (1H, d, J = 9.0 Hz)
1426	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 3.18 - 3.30 (4H, m), 3.70 - 3.76 (2H, m), 3.92 - 4.00 (2H, m), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.19 (2H, s), 7.24 - 7.32 (2H, m), 7.39 - 7.45 (2H, m), 7.47 - 7.55 (2H, m), 7.60 - 7.65 (1H, m), 7.76 - 7.80 (1H, m), 8.46 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1427	0.39 – 0.44 (2H, m), 0.49 – 0.55 (2H, m), 2.08 (2H, 寬s), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.29 (2H, d, J = 6.0 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.48 – 7.56 (2H, m), 7.63 – 7.68 (1H, m), 7.80 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.36 (1H, t, J = 6.0 Hz)
1428	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.91 (2H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.27 - 3.30 (2H, m), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.12 (2H, s), 4.55 - 4.64 (4H, m), 7.11 - 7.16 (1H, m), 7.39 (1H, dd, J = 8.1, 8.1 Hz), 7.47 - 7.54 (3H, m), 7.60 - 7.64 (1H, m), 7.66 (1H, dd, J = 2.1, 2.1 Hz), 7.76 - 7.80 (1H, m), 8.45 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1429	1.01 - 1.07 (2H, m), 1.09 - 1.13 (5H, m), 2.12 (3H, s), 3.19 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.26 - 3.28 (2H, m), 3.99 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.13 (2H, s), 6.80 (1H, d, J = 8.0 Hz), 6.93 (1H, dd, J = 8.0, 2.0 Hz), 7.46 - 7.54 (2H, m), 7.59 - 7.64 (1H, m), 7.77 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.98 (1H, d, J = 2.0 Hz), 8.43 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1430	0.57 - 0.65 (4H, m), 1.11 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.89 (2H, t, J = 6.8 Hz), 3.13 (2H, s), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.25 - 3.40 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.37 - 6.43 (1H, m), 6.45 (1H, t, J = 2.1 Hz), 6.53 - 6.59 (1H, m), 7.16 (1H, t, J = 8.0 Hz), 7.48 - 7.54 (2H,

	m), 7.58 - 7.64 (1H, m), 7.74 - 7.79 (1H, m), 8.44 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1431	0.24 (1H, q, J = 4.1 Hz), 0.69 (1H, dt, J = 7.7, 4.3 Hz), 1.11 (3H, t, J = 7.1 Hz), 1.64 - 1.70 (2H, m), 3.11 - 3.22 (4H, m), 3.45 (2H, d, J = 9.2 Hz), 4.00 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.40 - 6.47 (1H, m), 6.47 - 6.52 (1H, m), 6.54 - 6.61 (1H, m), 7.14 (1H, t, J = 8.0 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.56 - 7.65 (1H, m), 7.74 - 7.79 (1H, m), 8.43 (1H, t, J = 5.9 Hz)。未解析與水峰重疊之2H
1432	1.12 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.89 (3H, s), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.37 - 3.51 (4H, m), 3.76 (2H, s), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.75 - 6.81 (1H, m), 6.81 - 6.88 (1H, m), 6.91 - 6.96 (1H, m), 7.24 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.57 - 7.66 (1H, m), 7.75 - 7.80 (1H, m), 8.45 (1H, t, J = 5.9 Hz)。未解析與水峰重疊之2H
1433	0.49 (1H, td, J = 5.2, 2.2 Hz), 1.03 - 1.09 (1H, m), 1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.54 - 1.64 (1H, m), 2.96 (1H, dd, J = 18.3, 7.3 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.26 - 3.30 (3H, m), 3.54 - 3.58 (1H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.34 (1H, t, J = 9.0 Hz), 7.50 - 7.56 (2H, m), 7.59 - 7.65 (2H, m), 7.75 - 7.81 (2H, m), 8.47 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1434	1.12 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.57 - 1.64 (2H, m), 2.84 - 2.95 (2H, m), 3.14 (3H, s), 3.20 - 3.28 (4H, m), 3.47 - 3.55 (1H, m), 4.02 - 4.15 (3H, m), 7.25 - 7.31 (1H, m), 7.37 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.49 - 7.52 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.5, 2.3 Hz), 7.78 - 7.80 (1H, m), 8.39 (1H, d, J = 2.4 Hz), 8.44 (1H, t, J = 5.9 Hz)
1435	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 3.08 (3H, s), 3.20 (2H, d, J = 6.7 Hz), 3.27 (2H, s), 3.60 (2H, t, J = 5.0 Hz), 3.98 (2H, s), 4.42 (2H, t, J = 4.8 Hz), 7.00 (1H, d, J = 11.0 Hz), 7.52 (2H, d, J = 6.5 Hz), 7.59 - 7.66 (1H, m), 7.80 (2H, d, J = 9.0 Hz), 8.42 - 8.50 (1H, m)
1436	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 1.77 - 1.93 (4H, m), 2.06 (3H, s), 2.26 (2H, d, J = 10.6 Hz), 2.44 (2H, dd, J = 10.9, 2.4 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.22 - 3.32 (2H, m), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.19 (2H, s), 6.59 (1H, dd, J = 7.5, 1.8 Hz), 6.70 (1H, dd, J = 8.2, 2.3 Hz), 6.74 - 6.80 (1H, m), 7.15 (1H, t, J = 8.1 Hz), 7.46 - 7.56 (2H, m), 7.61 (1H, dt, J = 6.6, 2.1 Hz), 7.74 - 7.80 (1H, m), 8.44 (1H, t, J = 5.9)
1437	2.12 (6H, s), 2.33 (3H, s), 2.59 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.80 (2H, t, J = 4.8 Hz), 3.17 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.46 (2H, s), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.22 (1H, s), 7.02 - 7.06 (1H, m), 7.12 (2H, d, J = 1.8 Hz), 7.49 - 7.54 (2H, m), 7.63 (1H, dt, J = 6.9, 2.1 Hz), 7.78 (1H, td, J = 1.9, 0.6 Hz), 8.89 (1H, s)
1438	0.55 (1H, dd, J = 8.2, 3.0 Hz), 0.64 - 0.72 (1H, m), 0.76 (2H, t, J = 2.3 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6Hz), 3.03 (3H, s), 3.19 (2H, tt, J = 7.0, 3.2 Hz), 3.50 - 3.58 (3H, m), 3.83 (1H, dd, J = 9.0, 4.7 Hz), 3.89 (1H, d, J = 8.1 Hz), 4.03 - 4.09 (2H, m), 4.11 (1H, dd, J = 8.9, 6.6 Hz), 4.32 (1H, ddd, J = 8.4, 6.5, 4.7 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3Hz), 7.48 - 7.57 (2H, m), 7.67 (1H, dt, J = 6.8, 2.1 Hz), 7.80 - 7.85 (2H, m), 8.36 (1H, d, J = 8.3 Hz) 未觀察到與水峰重疊之1H
2001	(CD_3OD) 2.47 (3H, s), 2.79 (2H, t, J = 6.1 Hz), 2.95 (2H, t, J = 6.0 Hz), 3.65 (2H, s), 3.86 (2H, d, J = 6.2 Hz), 4.09 (2H, t, J = 6.8 Hz), 5.18 (1H, t, J = 6.1 Hz), 7.05 - 7.10 (1H, m), 7.13 (1H, dd, J = 8.2, 2.2 Hz), 7.18 (1H, s), 7.23 - 7.29 (1H, m), 7.30 - 7.38 (3H, m), 7.38 - 7.45 (2H, m), 7.59 (1H, ddd, J = 8.1, 6.5, 1.6 Hz), 7.64 (1H, ddd, J = 8.3, 6.8, 1.6 Hz) 2個質子由CD_3OD峰遮蔽
2002	2.34 (3H, s), 2.51 - 2.55 (2H, m), 2.65 - 2.70 (2H, m), 2.76 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.55 (4H, d, J = 5.4 Hz), 4.03 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.45 (3H, d, J = 6.2 Hz), 7.00 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.03 - 7.11 (2H, m), 7.16 - 7.19 (1H, m), 7.37 (1H, td, J = 8.2, 1.4 Hz), 7.65 (1H, ddd, J = 8.3, 6.7, 1.6 Hz), 7.76 (1H, ddd, J = 8.4, 6.8, 1.6

	Hz), 8.29 - 8.31 (1H, m), 8.41 (1H, s), 9.03 (1H, t, J = 6.0 Hz)
2004	0.17 (s, 2H), 0.35 – 0.45 (m, 2H), 1.00 – 1.10 (m, 1H), 2.96 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 3.02 (s, 3H), 3.10 (t, J = 6.5 Hz, 2H), 3.25 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 3.53 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 4.09 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 7.31 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 7.39 (td, J = 8.1, 1.4 Hz, 1H), 7.43 (dd, J = 8.1, 2.4 Hz, 1H), 7.67 (ddd, J = 8.2, 6.7, 1.7 Hz, 1H), 7.74 – 7.83 (m, 2H), 8.57 (t, J = 6.0 Hz, 1H)。
2005	0.15 - 0.30 (2H, m), 0.35 - 0.50 (2H, m), 0.98 - 1.15 (1H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.02 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.70 (1H, t, J = 8.0 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.93 (1H, dt, J = 7.8, 1.2 Hz), 8.04 (1H, ddd, J = 8.2, 2.2, 1.1 Hz), 8.24 (1H, t, J = 2.3 Hz), 8.58 (1H, t, J = 6.0 Hz)
2006	0.17 - 0.30 (2H, m), 0.33 - 0.49 (2H, m), 0.98 - 1.13 (1H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.3 Hz), 3.24 (2H, t, J = 6.3 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.50 - 7.61 (2H, m), 7.75 - 7.80 (1H, m), 7.81 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.95 (1H, d, J = 8.0 Hz), 8.05 - 8.14 (2H, m), 8.52 (1H, t, J = 5.4 Hz)
2007	2.36 (3H, s), 2.37 (3H, s), 2.54 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.69 (2H, t, J = 5.7 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.18 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.53 - 3.62 (4H, m), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.42 - 4.50 (3H, m), 7.02 (1H, s), 7.09 (2H, s), 7.18 (1H, d, J = 4.9 Hz), 7.44 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.52 (1H, dd, J = 8.2, 2.2 Hz), 7.74 (1H, d, J = 2.2 Hz), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 8.96 (1H, t, J = 6.0 Hz)
2008	2.34 (3H, s), 2.36 (3H, s), 2.54 (2H, t, J = 6.9 Hz), 2.69 (2H, t, J = 5.7 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.19 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.49 - 3.66 (4H, m), 4.01 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.40 - 4.53 (3H, m), 7.02 (1H, s), 7.09 (2H, s), 7.18 (1H, d, J = 4.9 Hz), 7.23 - 7.29 (1H, m), 7.31 - 7.42 (3H, m), 8.31 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 8.93 (1H, t, J = 6.0 Hz)
2009	2.36 (3H, s), 2.54 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.69 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.77 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.52 - 3.61 (4H, m), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.41 - 4.51 (3H, m), 7.03 (1H, s), 7.10 (2H, s), 7.19 (1H, d, J = 4.9 Hz), 7.72 (1H, t, J = 7.9 Hz), 7.82 (1H, d, J = 7.6 Hz), 7.96 (1H, d, J = 8.3 Hz), 8.04 (1H, s), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.43 (1H, s), 9.01 (1H, t, J = 6.0 Hz)
2010	2.36 (3H, s), 2.52 - 2.59 (2H, m), 2.69 (2H, t, J = 5.5 Hz), 2.78 (2H, t, J = 5.7 Hz), 3.20 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 - 3.59 (4H, m), 4.02 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.43 - 4.51 (3H, m), 7.03 (1H, s), 7.11 (2H, s), 7.19 (1H, d, J = 5.0 Hz), 7.69 (1H, t, J = 8.0 Hz), 7.92 (1H, dt, J = 7.8, 1.4 Hz), 8.01 (1H, ddd, J = 8.2, 2.2, 1.1 Hz), 8.21 (1H, t, J = 1.9 Hz), 8.32 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.44 (1H, s), 9.00 (1H, t, J = 6.0 Hz)
2011	0.19 - 0.27 (2H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 0.99 - 1.10 (1H, m), 2.35 (3H, s), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.11 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.22 - 7.48 (6H, m), 7.81 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.47 (1H, t, J = 6.0 Hz)
2012	2.19 (3H, s), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.65 (3H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.0 Hz), 5.94 (1H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.69 (1H, t, J = 8.0 Hz), 7.84 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.92 (1H, dt, J = 7.8, 1.2 Hz), 8.04 (1H, ddd, J = 8.2, 2.2, 1.1 Hz), 8.24 (1H, t, J = 1.8 Hz), 8.72 (1H, t, J = 6.1 Hz)
2013	0.16 - 0.32 (2H, m), 0.38 - 0.47 (2H, m), 0.98 - 1.10 (1H, m), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz),

	3.03 (3H, s), 3.13 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.85 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.16 (1H, t, J = 1.7 Hz), 8.27 (2H, dt, J = 13.3, 1.9 Hz), 8.60 (1H, t, J = 6.0 Hz)
2014	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.37 - 0.46 (2H, m), 0.98 - 1.14 (1H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.69 (1H, s), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.00 (2H, d, J = 1.7 Hz), 8.12 (1H, t, J = 1.7 Hz), 8.19 (1H, s), 8.57 (1H, t, J = 6.0 Hz)
2015	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.36 - 0.47 (2H, m), 0.97 - 1.11 (1H, m), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.47 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.54 (1H, d, J = 1.9 Hz), 7.80 - 7.86 (2H, m), 8.51 (1H, t, J = 6.1 Hz)
2016	0.16 - 0.30 (2H, m), 0.35 - 0.46 (2H, m), 0.97 - 1.11 (1H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.22 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.09 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.71 (1H, dd, J = 5.4, 1.9 Hz), 7.82 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.98 (1H, d, J = 1.8 Hz), 8.55 (2H, dd, J = 10.5, 5.7 Hz)
2017	2.19 (3H, s), 2.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.02 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.64 (3H, s), 3.80 (2H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.31 (2H, d, J = 6.1 Hz), 5.94 (1H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.52 (1H, t, J = 1.8 Hz), 7.59 (1H, t, J = 1.7 Hz), 7.64 (1H, t, J = 2.0 Hz), 7.82 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.31 (1H, s), 8.64 (1H, t, J = 6.1 Hz) 未觀察到2個NH及1個甲酸OH質子
2018	0.20 - 0.28 (2H, m), 0.34 - 0.46 (2H, m), 0.99 - 1.14 (1H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, , J = 6.7 Hz), 3.79 (2H, s), 4.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.52 (1H, s), 7.58 (1H, s), 7.62 (1H, t, J = 2.0 Hz), 7.82 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.35 (1H, s), 8.50 (1H, t, J = 6.0 Hz) NH_2由水峰遮蔽
2019	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.33 - 0.46 (2H, m), 0.98 - 1.12 (1H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.12 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.82 (2H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.36 - 7.49 (4H, m), 7.59 (1H, s), 7.81 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.36 (1H, s), 8.45 (1H, t, J = 6.0 Hz) NH_2由水峰遮蔽
2020	0.19 - 0.28 (2H, m), 0.35 - 0.46 (2H, m), 0.98 - 1.11 (1H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.02 (3H, s), 3.11 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.10 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.70 (1H, dd, J = 7.9, 0.7 Hz), 7.76 (1H, dd, J = 7.9, 0.7 Hz), 7.82 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.10 (1H, t, J = 7.9 Hz), 8.58 (1H, t, J = 6.0 Hz)
2021	0.18 - 0.30 (2H, m), 0.35 - 0.49 (2H, m), 0.94 - 1.14 (1H, m), 2.98 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.13 (2H, t, J = 6.4 Hz), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.33 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.46 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.84 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.40 (1H, t, J = 2.2 Hz), 8.59 (1H, t, J = 6.0 Hz), 8.72 (1H, d, J = 2.2 Hz), 8.89 (1H, d, J = 2.1 Hz)
2022	1.33 (3H, t, J = 7.9 Hz), 2.32 (3H, s), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.74 (2H, s), 4.10 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.35 (2H, q,

	J = 7.1 Hz), 7.23 (2H, d, J = 9.6 Hz), 7.28 - 7.37 (2H, m), 7.44 (1H, dd, J = 8.0, 2.3 Hz), 7.81 (1H, d, J = 2.3 Hz) NH_2由水峰遮蔽
2023	1.33 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.48 (3H, s), 2.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.53 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.11 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.35 (2H, q, J = 7.1 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.38 - 7.49 (3H, m), 7.80 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.89 (1H, t, J = 7.8 Hz)
2024	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.33 (3H, s), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.24 - 3.31 (2H, m), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.82 (2H, s), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.21 - 7.34 (3H, m), 7.39 (1H, s), 7.44 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.80 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.32 (1H, s), 8.38 (1H, t, J = 5.9 Hz) 未觀察到NH_2
2025	2.26 (3H, s), 2.94 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.01 (3H, s), 3.15 (2H, s), 3.52 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.96 - 4.13 (4H, m), 6.82 (1H, s), 7.09 (1H, s), 7.21 - 7.31 (2H, m), 7.39 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.76 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.92 (1H, s) 未觀察到NH_2
2027	1.12 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.36 (3H, d, J = 0.8 Hz), 2.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.25 – 3.30 (2H, m), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.91 (1H, s), 8.44 (1H, t, J = 6.0 Hz), 8.47 (1H, dd, J = 1.9, 0.9 Hz), 8.63 – 8.67 (1H, m)
2028	1.11 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.38 (3H, s), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.15 - 3.29 (4H, m), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.09 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.56 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.75 - 7.94 (2H, m), 8.36 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.41 (1H, t, J = 5.9 Hz) 未解析與水峰重疊之2H。
2029	1.10 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.03 (3H, s), 2.96 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.02 (3H, s), 3.22 - 3.29 (4H, m), 3.53 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.30 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.37 - 7.40 (1H, m), 7.42 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.48 (1H, dd, J = 8.2, 2.2 Hz), 7.52 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.78 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.41 (1H, t, J = 5.9 Hz)
2030	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.26 (4H, m), 3.54 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.49 (1H, t, J = 9.3 Hz), 7.65 (1H, m), 7.79 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.84 (1H, dd, J = 6.4, 2.8 Hz), 8.48 (1H, t, J = 5.9 Hz)。未解析與水峰重疊之2H
2031	1.12 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.99 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.04 (3H s), 3.20 (2H, q, J = 7.4 Hz), 3.28 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.56 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.67 (2H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (1H, d, J = 7.1 Hz), 7.82 (1H, d, J = 2.4 Hz), 7.92 (1H, s), 8.15 (1H, s), 8.40 (1H, t, J = 6.0 Hz)。未解析與水峰重疊之2H
2032	1.11 (2H, t, J = 7.2 Hz), 1.29 (1H, t, J = 7.0 Hz), 2.24 - 2.31 (2H, m), 2.90 - 3.09 (6H, m), 3.22 - 3.29 (2H, m), 3.37 (1H, t, J = 6.5 Hz), 3.49 - 3.63 (2H, m), 4.04 - 4.12 (2H, m), 4.27 - 4.37 (1H, m), 7.19 - 7.39 (2H, m), 7.40 - 7.45 (2H, m), 7.46 - 7.62 (1H, m), 7.77 - 7.91 (1H, m), 8.42 (1H, t, J = 5.9 Hz)。存在分裂峰
2033	1.12 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.04 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.26 – 3.31 (2H, m), 3.56 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.56 (2H, br s), 5.47 (1H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.1 H,), 7.44 – 7.47 (2H, m), 7.55 (1H, t, J = 1.6 Hz), 7.65 (1H, t, J = 2.0 Hz), 7.83 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.44 (1H, t, J = 5.9 Hz)
2034	1.10 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.38 (3H, s), 2.96 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.02 (3H, s), 3.20 - 3.30 (4H, m), 3.53 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.13 (1H, d, J = 7.3 Hz), 7.22 (1H, d, J = 12.4 Hz), 7.30 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.42 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.48

	(1H, t, J = 8.0 Hz), 7.78 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.41 (1H, t, J = 6.0 Hz)
2035	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.40 (3H, s), 2.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.02 (3H, s), 3.22 (2H), 3.27 (2H, d, J = 6.7 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.5 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.37 (1H, d, J = 5.1 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.52 (1H, s), 7.80 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.37 (1H, d, J = 5.0 Hz), 8.41 (1H, t, J = 5.9 Hz)。未解析與水峰重疊之2H。
2036	1.10 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.02 (3H, s), 2.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.26 (4H, m), 3.53 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.29 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.34 (1H, td, J = 7.9, 0.7 Hz), 7.39 (1H, dd, J = 8.0, 1.5 Hz), 7.42 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.60 (1H, dd, J = 7.9, 1.4 Hz), 7.77 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.41 (1H, t, J = 5.9 Hz)
2037	1.11 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.02 (3H, s), 3.23 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.28 (2H, t, J = 7.3, 6.1 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.82 (3H, s), 4.08 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.96 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.25 (1H, d, J = 7.4 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.81 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.88 - 7.93 (1H, m), 8.42 (1H, t, J = 5.9 Hz)
2038	2.19 (3H, s), 2.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.04 (2H, d, J = 6.7 Hz), 3.32 (3H, s), 3.53 (2H, t, J = 7.1, 6.2 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.8 Hz), 4.52 (2H, s), 7.29 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.41 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.49 (1H, t, J = 7.9), 7.67 (1H, dd, J = 8.0, 1.3 Hz), 7.77 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.91 (1H, dd, J = 7.8, 1.3 Hz)
2039	1.91 - 2.02 (1H, m), 2.08 - 2.18 (1H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.24 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.58 (1H, dd, J = 8.7, 4.9 Hz), 3.66 - 3.74 (1H, m), 3.78 - 3.88 (2H, m), 4.09 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.41 - 4.52 (1H, m), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.38 (1H, td, J = 8.2, 1.4 Hz), 7.43 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.67 (1H, ddd, J = 8.2, 6.7, 1.6 Hz), 7.74-7.78 (1H, m), 7.79 (1H, d, J = 2.2 Hz), 8.57 (1H, d, J = 7.0 Hz)
2040	2.16 (3H, s), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.25 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.09 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.35 (2H, d, J = 6.0 Hz), 5.91 (1H, s), 7.29 - 7.33 (1H, m), 7.38 (1H, td, J = 8.2, 1.5 Hz), 7.42 - 7.45 (1H, m), 7.66 (1H, ddd, J = 8.2, 6.7, 1.7 Hz), 7.73 - 7.80 (2H, m), 8.71 (1H, s), 12.21 (1H, s)
2041	2.98 (4H, m), 3.03 (3H, s), 3.24 (2H, d, J = 6.1 Hz), 3.32 (3H, s), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.5 Hz), 4.51 (2H, s), 7.31 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.45 (4H, m), 7.82 (1H, s) 未觀察到NH_2
2042	1.10 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.21 (3H, s), 2.96 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.02 (3H, s), 3.26 (4H, d, J = 7.0 Hz), 3.53 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.08 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.29 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.42 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz), 7.53 (1H, t, J = 7.9 Hz), 7.73 - 7.80 (2H, m), 7.96 (1H, d, J = 7.8 Hz), 8.42 (1H, s)
2043	0.22 - 0.51 (4H, m), 0.96 – 1.09 (1H, m), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.20 - 3.32 (2H, m), 3.35 - 3.46 (1H, m), 3.49 (4H, m), 4.09 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.73 (1H, t, J = 5.5 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.39 (1H, dd, J = 8.2, 1.5 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.0, 2.4 Hz) , 7.68 (1H, ddd, J = 8.2, 6.7, 1.6 Hz), 7.73 - 7.82 (2H, m), 8.07 (1H, d, J = 9.0 Hz)
2044	2.43 (3H, s), 2.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.02 (3H, s), 3.24 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.09 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.40 (2H, d, J = 6.2 Hz), 7.20 (1H, d, J = 8.0 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.38 (1H, td, J = 8.2, 1.4 Hz), 7.43 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.62 (1H, dd, J = 7.9, J = 2.3 Hz), 7.64 – 7.69 (1H, m) , 7.73 - 7.83 (2H, m), 8.41 (1H,

	d, J = 2.5 Hz), 9.10 (1H, t, J = 6.3 Hz)
2045	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.20 (3H, s), 2.98 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.21 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.27 (2H, dd, J = 7.2, 5.9 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.03 (2H, t, J = 6.7 Hz), 7.10 (1H, s), 7.26 - 7.37 (2H, m), 7.45 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.82 (1H, s), 8.39 (1H, t, J = 5.9 Hz)
2046	0.18 - 0.27 (2H, m), 0.33 - 0.47 (2H, m), 0.96 - 1.12 (1H, m), 3.08 (3H, s), 3.11 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.24 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.54 (2H, t, J = 5.0 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.36 (2H, t , J = 5.4 Hz), 7.02 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.35 – 7.41 (1H, m), 7.42 (1H, dd, J = 8.6, 2.8 Hz), 7.58 (1H, d, J = 2.8 Hz), 7.66 (1H, ddd, J = 8.2, 6.7, 1.6 Hz), 7.77 (1H, ddd, J = 8.3, 6.8, 1.6 Hz), 8.53 (1H, t, J = 6.0 Hz)
2047	2.90 - 3.19 (7H, m), 3.57 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.86 (2H, s), 4.01 (2H, t, J = 6.4 Hz), 7.16 - 7.62 (3H, m), 7.62 - 7.99 (2H, m), 8.26 (1H, s), 8.56 (1H, s) 未觀察到NH_2
2048	1.90 - 2.02 (1H, m), 2.05 - 2.19 (1H, m), 3.08 (3H, s), 3.23 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.54 (2H, t, J = 5.1 Hz), 3.57 (1H, dd, J = 8.8, 4.9 Hz), 3.65 - 3.76 (1H, m), 3.77 - 3.90 (2H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.36 (2H, dd, J = 5.5, 4.5 Hz), 4.41 - 4.54 (1H, m), 7.03 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.34 - 7.45 (2H, m), 7.58 (1H, d, J = 2.7 Hz), 7.62 - 7.70 (1H, m), 7.73 - 7.82 (1H, m), 8.56 (1H, d, J = 7.0 Hz)
2049	0.22 - 0.41 (3H, m), 0.41 - 0.50 (1H, m), 0.97 - 1.08 (1H, m), 3.08 (3H, s), 3.24 (2H, td, J = 6.7, 3.3 Hz), 3.35 - 3.43 (1H, m), 3.49 - 3.64 (4H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.8 Hz), 4.36 (2H, dd, J = 5.5, 4.4 Hz), 4.73 (1H, t, J = 5.5 Hz), 7.03 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.36 - 7.41 (1H, m), 7.42 (1H, dd, J = 8.7, 2.8 Hz), 7.59 (1H, d, J = 2.7 Hz), 7.64 - 7.71 (1H, m), 7.73 - 7.82 (1H, m), 8.06 (1H, d, J = 8.9 Hz)
2050	2.10 (6H, s), 3.08 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.54 (2H, t, J = 5.1 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.36 (2H, t, J = 4.5 Hz), 6.21 (1H, s), 7.02 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.38 (1H, td, J = 8.2, 1.5 Hz), 7.42 (1H, dd, J = 8.7, 2.8 Hz), 7.58 (1H, d, J = 2.8 Hz), 7.60 - 7.68 (1H, m), 7.71 - 7.82 (1H, m), 8.92 (1H, s)
2051	1.08 (3H, t, J = 7.0 Hz), 2.33 (3H, s), 2.95 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.00 (3H, s), 3.18 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.24 (2H, q, J = 7.1 Hz), 3.52 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.03 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.29 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.34 (1H, d, J = 1.6 Hz), 7.39 - 7.46 (2H, m), 7.55 (1H, d, J = 2.0 Hz), 7.80 (1H, d, J = 2.4 Hz), 8.43 (1H, t, J = 6.0 Hz)
2052	1.10 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.96 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.02 (3H, s), 3.22 – 3.30 (4H, m), 3.53 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.06 (2H, t, J = 6.8 Hz), 4.30 (2H, d, J = 5.7 Hz), 4.77 (1H, t, J = 5.7 Hz), 7.29 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.38 – 7.46 (3H, m), 7.58 – 7.65 (1H, m), 7.77 (1H, d, J = 2.4 Hz), 8.43 (1H, t, J = 5.9 Hz)
2053	0.18 - 0.55 (3H, m), 0.96 - 1.09 (1H, m), 3.08 (3H, s), 3.20 – 3.28 (2H, m), 3.50 - 3.61 (4H, m), 4.07 (2H, t, J = 6.8 Hz), 4.36 (2H, dd, J = 5.5, 4.5 Hz), 4.73 (1H, t, J = 5.6 Hz), 7.03 (1H, d, J = 8.6 Hz), 7.34 - 7.46 (2H, m), 7.58 (1H, d, J = 2.7 Hz), 7.63 - 7.72 (1H, m), 7.73 - 7.82 (1H, m), 8.05 (1H, d, J = 9.0 Hz) 未觀察到一個可交換質子且未解析與水峰重疊之1H
2054	1.11 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.97 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.03 (3H, s), 3.11 - 3.30 (4H, m), 3.54 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.04 (2H, t, J = 6.6 Hz), 6.99 (1H, d, J = 8.7 Hz), 7.31 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.37 (1H, dd, J = 8.7, 2.6 Hz), 7.43 (1H, dd, J = 8.1, 2.3 Hz), 7.62 (1H, d, J = 2.6 Hz), 7.81 (1H, d, J = 2.3 Hz), 8.38 (1H, t, J = 5.9 Hz), 10.70 (1H, s)
2056	2.99 (4H, t, J = 6.7 Hz), 3.05 (4H, s), 3.26 (3H, t, J = 6.6 Hz), 3.56 (3H, t, J = 6.7 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.29 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.44 (1H, dd, J = 8.1, 2.4 Hz), 7.49

	(1H, s), 7.55 (2H, d, J = 6.8 Hz), 7.86 (1H, d, J = 2.3 Hz) 未觀察到三個可交換質子
2057	1.12 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.37 (3H, s), 2.98 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.03 (3H, s), 3.22 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.28 (2H, d, J = 6.9 Hz), 3.55 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.07 (2H, t, J = 6.6 Hz), 7.32 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.42 – 7.55 (3H, m), 7.64 (1H, d, J = 2.3 Hz), 7.82 (1H, d, J = 2.4 Hz), 8.41 (1H, s)
2058	1.12 (3H, t, J = 7.3 Hz), 2.98 (2H, s), 3.03 (3H, s), 3.22 (7H, s), 3.55 (2H, s), 4.07 (2H, s), 4.47 (2H, s), 7.32 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.46 (2H, s), 7.57 (1H, s), 7.72 (1H, s), 7.83 (1H, s), 8.46 (1H, s)。
3001	2.35 (3H, s), 2.62 (2H, t, J = 5.9 Hz), 2.88 (2H, t, J = 5.9 Hz), 3.52 (2H, s), 7.18 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.21 - 7.33 (2H, m), 7.55 - 7.68 (2H, m), 7.72 - 7.79 (1H, m), 7.87 - 7.93 (1H, m), 8.49 (1H, s)
3002	2.21 (3H, s), 2.35 (3H, s), 2.55 - 2.72 (2H, m), 2.89 (2H, s), 3.34 - 3.61 (2H, m), 7.09 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.15 (1H, dd, J = 8.0, 2.2 Hz), 7.30 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.54 - 7.66 (2H, m), 7.69 - 7.76 (1H, m), 7.87 (1H, t, J = 1.9 Hz)
3003	0.27 – 0.32 (2H, m), 0.46 – 0.52 (2H, m), 1.04 – 1.15 (1H, m), 2.23 (3H, s), 2.58 (2H, t, J=6.2 Hz), 2.68 – 2.75 (1H, m), 2.76 – 2.83 (1H, m), 2.85 – 2.94 (2H, m), 3.28 – 3.31 (2H, m), 3.55 – 3.63 (3H, m), 3.68 (1H, d, J=15.4 Hz), 4.50 (1H, t, J=5.4 Hz), 7.09 – 7.13 (1H, m), 7.17 (1H, dd, J=8.0, 2.2 Hz), 7.29 (1H, d, J=8.1 Hz), 7.53 – 7.59 (2H, m), 7.69 – 7.76 (1H, m), 7.84 – 7.88 (1H, m), 8.68 (1H, t, J=5.8 Hz)
3004	0.27 – 0.32 (2H, m), 0.46 – 0.51 (2H, m), 1.04 – 1.15 (1H, m), 2.22 (3H, s), 2.35 (3H, s), 2.56 – 2.63 (1H, m), 2.64 – 2.71 (1H, m), 2.85 – 2.94 (2H, m), 3.27 – 3.31 (2H, m), 3.45 (1H, d, J=15.3 Hz), 3.56 (1H, d, J=15.3 Hz), 7.11 (1H, d, J=2.1 Hz), 7.17 (1H, dd, J=8.0, 2.2 Hz), 7.30 (1H, d, J=8.1 Hz), 7.53 – 7.59 (2H, m), 7.68 – 7.77 (1H, m), 7.84 – 7.87 (1H, m), 8.68 (1H, t, J=5.8 Hz)。
3005	2.00 - 2.05 (3H, m), 2.20 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.66 - 2.83 (2H, m), 2.84 - 2.90 (2H, m), 3.53 - 3.66 (4H, m), 3.74 (3H, s), 4.47 - 4.54 (3H, m), 7.10 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.16 (1H, dd, J = 8.1, 2.2 Hz), 7.28 (1H, d, J = 8.2 Hz), 7.43 (1H, d, J = 0.9 Hz), 7.51 - 7.60 (2H, m), 7.68 - 7.77 (1H, m), 7.83 - 7.89 (1H, m), 8.91 (1H, t, J = 5.3 Hz)
3006	2.00 - 2.06 (3H, m), 2.19 (3H, s), 2.35 (3H, s), 2.54 - 2.72 (2H, m), 2.85 - 2.91 (2H, m), 3.40 - 3.59 (2H, m), 3.74 (3H, s), 4.51 (2H, d, J = 5.3 Hz), 7.11 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.17 (1H, dd, J = 8.0, 2.2 Hz), 7.30 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.41 - 7.46 (1H, m), 7.51 - 7.60 (2H, m), 7.68 - 7.78 (1H, m), 7.83 - 7.89 (1H, m), 8.90 (1H, t, J = 5.3 Hz)
3007	0.85 - 0.99 (4H, m), 2.17 (3H, s), 2.54 - 2.83 (5H, m), 2.86 - 2.90 (2H, m), 3.54 - 3.73 (4H, m), 4.49 - 4.55 (3H, m), 7.08 - 7.12 (1H, m), 7.12 - 7.19 (1H, m), 7.28 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.46 - 7.57 (2H, m), 7.62 - 7.76 (2H, m), 7.79 - 7.85 (1H, m)
3008	0.61 - 0.74 (4H, m), 1.60 - 1.71 (1H, m), 2.16 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.66 - 2.89 (2H, m), 2.86 - 2.90 (2H, m), 3.54 - 3.70 (4H, m), 4.50 (1H, t, J = 5.4 Hz), 4.61 (2H, d, J = 5.4 Hz), 7.06 - 7.11 (1H, m), 7.11 - 7.18 (1H, m), 7.28 (1H, d, J = 8.3 Hz), 7.43 - 7.56 (2H, m), 7.63 - 7.72 (1H, m), 7.77 - 7.83 (1H, m), 8.63 (1H, t, J = 5.4 Hz)
3009	2.17 (3H, s), 2.18 - 2.21 (3H, m), 2.57 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.65 - 2.84 (2H, m), 2.84 - 2.90 (2H, m), 3.54 - 3.72 (4H, m), 3.82 (3H, s), 4.50 (1H, t, J = 5.4 Hz), 4.76 (2H, d, J = 5.8 Hz), 7.07 - 7.12 (1H, m), 7.12 - 7.18 (1H, m), 7.28 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.42 - 7.54 (2H, m), 7.54 - 7.59 (1H, m), 7.62 - 7.69 (1H, m), 7.74 - 7.80 (1H, m), 8.31 (1H, t, J = 5.7 Hz)

3010	2.17 (3H, s), 2.42 (3H, s), 2.55 - 2.64 (2H, m), 2.69 - 2.83 (2H, m), 2.86 - 2.91 (2H, m), 3.55 - 3.63 (2H, m), 3.61 - 3.72 (2H, m), 4.50 (1H, s), 4.81 (2H, d, J = 5.6 Hz), 7.09 - 7.19 (2H, m), 7.25 - 7.34 (2H, m), 7.43 - 7.56 (2H, m), 7.63 - 7.73 (1H, m), 7.77 - 7.83 (1H, m), 8.47 (1H, d, J = 5.1 Hz), 8.57 - 8.62 (1H, m), 9.12 (1H, t, J = 5.6 Hz)
3011	2.19 (3H, s), 2.41 (3H, s), 2.52 - 2.61 (2H, m), 2.65 - 2.83 (2H, m), 2.84 - 2.90 (2H, m), 3.47 - 3.71 (4H, m), 4.50 (1H, t, J = 5.4 Hz), 4.64 (2H, d, J = 5.9 Hz), 7.07 - 7.19 (2H, m), 7.21 - 7.31 (2H, m), 7.51 - 7.60 (2H, m), 7.68 - 7.77 (1H, m), 7.83 - 7.89 (1H, m), 8.36 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.49 (1H, s), 9.03 (1H, t, J = 6.0 Hz)
3012	2.21 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 6.1 Hz), 2.67 - 2.84 (2H, m), 2.85 - 2.90 (2H, m), 3.55 - 3.72 (4H, m), 4.50 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.08 (1H, d, J = 2.1 Hz), 7.11 - 7.17 (1H, m), 7.29 (1H, d, J = 8.1 Hz), 7.53 - 7.62 (1H, m), 7.59 - 7.66 (1H, m), 7.68 - 7.76 (1H, m), 7.84 - 7.90 (1H, m)
3013	2.52 - 2.61 (2H, m), 2.74 (2H, t, J = 5.8 Hz), 2.87 (2H, t, J = 5.8 Hz), 3.59 (2H, q, J = 6.0 Hz), 3.64 (2H, s), 4.50 (1H, t, J = 5.4 Hz), 7.18 (1H, d, J = 2.2 Hz), 7.21 - 7.32 (2H, m), 7.55 - 7.65 (1H, m), 7.61 - 7.68 (1H, m), 7.71 - 7.79 (1H, m), 7.88 - 7.93 (1H, m), 8.49 (1H, s)
3014	0.26 - 0.34 (2H, m), 0.43 - 0.55 (2H, m), 1.03 - 1.18 (1H, m), 2.21 (3H, s), 3.05 (3H, s), 3.08 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.22 - 3.37 (2H, m), 3.56 - 3.67 (2H, m), 7.47 - 7.62 (4H, m), 7.69 - 7.79 (1H, m), 7.84 - 7.94 (2H, m), 8.68 (1H, t, J = 5.8 Hz)
3015	2.19 (3H, s), 2.21 (3H, d, J = 0.7 Hz), 3.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.52 - 3.61 (4H, m), 3.64 - 3.72 (5H, m), 4.48 (2H, d, J = 5.7 Hz), 4.79 (1H, br s), 6.00 (1H, d, J = 0.8 Hz), 7.47 - 7.60 (4H, m), 7.69 - 7.79 (1H, m), 7.85 - 7.87 (1H, m), 7.90-7.92 (1H, m),8.94 (1H, t, J = 5.6 Hz)
3016	0.26 - 0.34 (2H, m), 0.43 - 0.55 (2H, m), 1.04 - 1.17 (1H, m), 2.21 (3H, s), 3.06 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.23 - 3.31 (2H, m), 3.47 - 3.64 (4H, m), 3.68 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.80 (1H, br s), 7.47 - 7.60 (4H, m), 7.67 - 7.79 (1H, m), 7.85 - 7.89 (1H, m), 7.92 (1H, d, J = 2.0 Hz), 8.68 (1H, t, J = 5.8 Hz)
3017	2.17 (3H, s), 2.41 (3H, d, J = 0.7 Hz), 3.05 (2H, t, J = 6.6 Hz), 3.52 - 3.61 (4H, m), 3.67 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.62 - 4.72 (2H, m), 4.77 - 4.81 (1H, m), 7.23 (1H, dt, J = 5.0, 0.7 Hz), 7.46 - 7.55 (2H, m), 7.51 - 7.60 (2H, m), 7.69 - 7.79 (1H, m), 7.87 - 7.89 (1H, m), 7.89 - 7.93 (1H, m), 8.36 (1H, d, J = 4.9 Hz), 8.50 (1H, s), 9.02 (1H, t, J = 5.9 Hz)
3018	2.16 (3H, s), 3.01 - 3.09 (2H, m), 3.49 - 3.63 (4H, m), 3.67 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.76 - 4.84 (1H, m), 7.46 - 7.60 (4H, m), 7.65 - 7.74 (1H, m), 7.80 - 7.86 (1H, m), 7.86 - 7.91 (1H, m), 13.41 (1H, s)
3019	1.36 (3H, t, J = 7.1 Hz), 2.17 (3H, s), 3.01 - 3.09 (2H, m), 3.49 - 3.61 (4H, m), 3.67 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.36 - 4.48 (2H, m), 4.80 (1H, t, J = 5.1 Hz), 7.46 - 7.61 (4H, m), 7.65 - 7.75 (1H, m), 7.81 - 7.86 (1H, m), 7.88 - 7.91 (1H, m)
3020	2.13 - 2.21 (6H, m), 3.05 (3H, s), 3.07 - 3.11 (2H, m), 3.61 (2H, t, J = 6.6 Hz), 4.52 (2H, d, J = 5.6 Hz), 5.97 (1H, s), 7.49 - 7.58 (4H, m), 7.71 - 7.78 (1H, m), 7.87 - 7.89 (1H, m), 7.90 - 7.92 (1H, m), 8.86 - 8.99 (1H, m), 12.29 (1H, s)
3021	2.15 - 2.19 (3H, m), 2.20 - 2.22 (3H, m), 3.05 (3H, s), 3.07 - 3.10 (2H, m), 3.61 (2H, t, J = 6.5 Hz), 3.67 (3H, s), 4.48 (2H, d, J = 5.6 Hz), 6.00 (1H, s), 7.47 - 7.60 (4H, m), 7.70 - 7.77 (1H, m), 7.87 - 7.89 (1H, m), 7.91 (1H, d, J = 2.1 Hz), 8.94 (1H, t, J = 5.7 Hz)
3022	1.19 (3H, t, J = 7.2 Hz), 2.20 (3H, s), 3.05 (3H, s), 3.08 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.36 - 3.48

	(2H, m), 3.57 - 3.65 (2H, m), 7.47 - 7.61 (4H, m), 7.69 - 7.79 (1H, m), 7.86 - 7.88 (1H, m), 7.91 (1H, d, J = 2.0 Hz), 8.58 (1H, t, J = 5.8 Hz)
3023	0.24 - 0.34 (2H, m), 0.44 - 0.54 (2H, m), 1.04 - 1.15 (1H, m), 2.25 (3H, s), 2.89 (3H, s), 3.27 - 3.30 (2H, m), 3.43 - 3.60 (2H, m), 4.38 - 4.49 (2H, m), 7.05 (1H, d, J = 8.9 Hz), 7.43 (1H, td, J = 8.2, 1.5 Hz), 7.51 (1H, dd, J = 8.8, 2.6 Hz), 7.58 (1H, d, J = 2.6 Hz), 7.69 (1H, ddd, J = 8.3, 6.7, 1.6 Hz), 7.81 (1H, ddd, J = 8.3, 6.8, 1.6 Hz), 8.61 (1H, t, J = 5.8 Hz)
4001	2.20 (3H, s), 2.57 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.67 - 2.75 (2H, m), 2.77 - 2.83 (2H, m), 3.58 - 3.64 (4H, m), 3.66 (3H, s), 4.36 (2H, d, J = 6.1 Hz), 4.46 - 4.54 (1H, m), 5.01 (2H, s), 5.96 (1H, s), 7.16 (1H, d, J = 8.4 Hz), 7.46 - 7.55 (2H, m), 7.56 - 7.66 (2H, m), 8.40 - 8.43 (1H, m), 8.53 (1H, t, J = 2.1 Hz), 9.06 (1H, t, J = 6.1 Hz)
4002	0.15 - 0.22 (2H, m), 0.40 - 0.48 (2H, m), 0.88 - 0.99 (1H, m), 2.54 - 2.62 (2H, m), 2.69 - 2.76 (2H, m), 2.77 - 2.85 (2H, m), 3.00 (2H, dd, J = 6.9, 5.5 Hz), 3.11 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.55 - 3.63 (4H, m), 3.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.46 - 4.53 (1H, m), 4.93 (2H, s), 7.04 (1H, s), 7.08 - 7.13 (2H, m), 7.38 - 7.43 (2H, m), 7.99 - 8.06 (1H, m), 8.21 - 8.25 (1H, m), 8.42 (1H, t, J = 5.6 Hz)
4003	2.39 (3H, s), 2.56 (2H, t, J = 6.3 Hz), 2.68 - 2.74 (2H, m), 2.76 - 2.82 (2H, m), 3.51 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.56 - 3.62 (4H, m), 3.99 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.47 (1H, s br), 4.53 (2H, d, J = 6.0 Hz), 6.95 - 7.06 (1H, m), 7.07 - 7.16 (2H, m), 7.22 (1H, d, J = 4.9 Hz), 7.38 - 7.61 (2H, m), 8.18 (1H, d, J = 7.2 Hz), 8.26 - 8.40 (2H, m), 8.43 - 8.56 (1H, m), 9.30 (1H, t, J = 6.0 Hz)
4004	0.42 - 0.49 (2H, m), 0.62 - 0.69 (2H, m), 2.56 (2H, t, J = 6.2 Hz), 2.65 - 2.74 (3H, m), 2.77 - 2.82 (2H, m), 3.10 (2H, t, J = 6.7 Hz), 3.54 - 3.64 (4H, m), 3.97 (2H, t, J = 6.7 Hz), 4.47 (1H, t, J = 5.4 Hz), 4.86 (2H, s), 7.00 - 7.05 (1H, m), 7.07 - 7.14 (2H, m), 7.38 - 7.43 (2H, m), 8.00 - 8.06 (1H, m), 8.20 - 8.24 (1H, m), 8.44 (1H, d, J = 4.2 Hz)

生物學方法

確定人類因子XIIa (hFXIIa)抑制作用

【1652】使用基於標準文獻方法之IC_{50}分析來確定hFXIIa之活體外抑制作用(參見例如Duckworth等人, Clinical and Experimental Allergy 52 (2022)；Baeriswyl等人, ACS Chem. Biol., 2015, 10 (8) 1861；Bouckaert等人, European Journal of Medicinal Chemistry 110 (2016) 181)。在25℃下用螢光受質H-DPro-Phe-Arg-AFC (Peptide Protein Science)及各種濃度之測試化合物培育hFXIIa (Enzyme Research Laboratories)。藉由監測在25℃下歷經5 min自裂解受質發出之螢光來量測蛋白酶活性。將每分鐘螢光增加之線性速率表述為活性百分比(%)。藉由Michaelis-Menten等式之標準轉換確定hFXIIa使受質裂解之Km，隨後在受質Km濃度下進行抑制作

用分析。IC_{50}值係計算為對未抑制之酶活性產生50%抑制作用之抑制劑濃度。由此分析獲得之資料顯示於下表7中，其中使用以下標度：

類別	IC_{50} (nM)
AA	1 - 10
A	10 - 100
B	100 - 300
C	300 - 1,000
D	1,000 - 3,000
E	3,000 - 10,000
F	10,000 - 40,000
G0	>4,000

表7：人類FXIIa資料、分子量及LCMS資料

實例編號	人類FXIIa IC50 (nM)	平均分子量	LCMS分子離子
1001	B	554.1	554.3
1002	C	518.1	518.2
1003	C	555.1	555.2
1004	D	568.1	568.2
1005	A	526.0	526.2
1006	C	555.1	555.2
1007	B	493.0	493.2
1008	C	584.1	584.3
1009	E	518.1	518.2
1010	C	546.1	546.3
1011	E	492.0	492.2
1012	C	490.0	490.2
1013	B	464.9	465.1
1014	C	464.0	464.2
1015	B	527.0	527.3
1016	F	492.0	492.2
1017	C	540.1	540.1
1018	D	556.1	556.1
1019	B	566.1	566.2
1020	C	594.2	594.3
1021	A	540.1	540.2
1022	A	554.1	554.2
1023	B	532.1	532.3
1024	B	556.1	556.2
1025	C	520.0	520.2
1026	C	520.0	520.2
1027	C	534.1	534.2
1028	C	512.0	512.1

1029	C	552.1	552.1
1030	B	540.1	540.1
1031	B	504.0	504.1
1032	C	532.0	532.1
1033	D	533.0	533.1
1034	C	491.0	491.1
1035	B	518.1	518.2
1036	C	530.1	530.2
1037	A	534.1	534.2
1038	C	554.1	554.2
1039	C	554.1	554.1
1040	D	491.0	491.2
1041	C	492.0	492.2
1042	C	506.0	506.2
1043	C	520.0	520.2
1044	B	504.0	504.1
1045	C	506.0	506.2
1046	C	576.1	576.2
1047	C	506.0	506.2
1048	C	504.0	504.1
1049	B	534.1	534.3
1050	C	562.1	562.3
1051	A	570.1	570.3
1052	B	518.1	518.2
1053	B	548.1	548.2
1054	B	518.1	518.2
1055	A	520.0	520.2
1056	C	506.0	506.1
1057	C	533.0	533.2
1058	C	520.0	520.2
1059	B	532.1	532.3
1060	B	548.1	548.3
1061	B	548.1	548.4
1063	B	556.1	556.2
1064	C	534.1	534.3
1065	A	530.0	530.3
1066	D	436.9	437.1
1067	D	506.0	506.2
1068	B	516.0	516.2
1069	C	467.0	467.1
1070	B	534.1	534.2
1071	D	558.0	558.2
1072	D	504.0	504.1
1073	D	516.0	516.2

1074	D	476.0	476.2
1075	B	532.0	532.2
1076	B	550.1	550.2
1077	A	560.1	560.2
1078	A	557.0	557.2
1079	A	522.0	522.3
1080	B	536.0	536.4
1081	C	561.1	561.4
1082	C	532.1	532.4
1083	B	597.1	597.4
1084	B	576.1	576.5
1085	B	534.1	534.2
1086	B	544.1	544.2
1087	B	534.1	534.4
1088	B	560.1	560.2
1089	A	546.0	546.1
1090	B	520.0	520.2
1091	B	520.0	520.2
1092	B	548.1	548.2
1093	B	532.0	532.2
1094	D	548.0	548.3
1095	D	534.0	534.3
1096	C	548.1	548.2
1097	D	566.0	566.4
1098	B	519.0	519.3
1099	A	530.1	530.3
1100	D	515.0	515.2
1101	C	534.1	534.3
1102	C	558.1	558.4
1103	B	530.1	530.2
1104	C	556.1	556.3
1105	B	546.0	546.2
1106	B	550.1	550.2
1107	A	556.1	556.2
1108	B	536.0	536.2
1109	A	546.0	546.2
1110	A	571.1	571.3
1111	A	571.1	571.2
1112	B	564.1	564.2
1113	C	534.1	534.3
1114	E	534.0	534.3
1115	C	546.1	546.3
1116	C	560.1	560.3
1117	B	505.0	505.3

1118	B	521.0	521.3
1119	C	560.1	560.2
1120	C	573.1	573.3
1121	B	522.0	522.3
1122	B	538.0	538.3
1123	B	538.0	538.4
1124	C	573.1	573.5
1125	A	578.0	578.4
1126	A	571.1	571.2
1127	A	586.1	586.3
1128	A	585.1	585.3
1129	A	541.0	541.2
1130	A	575.0	575.2
1131	B	571.1	571.2
1132	A	560.1	560.2
1133	B	560.1	560.3
1134	A	589.1	589.3
1135	A	557.0	557.2
1136	A	571.1	571.2
1137	A	575.0	575.2
1138	A	587.1	587.3
1139	A	571.1	571.2
1140	A	555.1	555.3
1141	A	587.1	587.3
1142	B	556.0	556.2
1143	B	546.1	546.4
1144	A	597.1	597.3
1145	B	571.1	571.2
1146	A	586.1	586.2
1147	A	571.1	571.2
1148	B	585.1	585.3
1149	C	504.0	504.1
1150	A	570.1	570.3
1151	B	547.0	547.2
1152	C	534.1	534.2
1153	C	518.1	518.2
1154	A	591.5	591.1
1155	A	594.5	594.2
1156	B	590.1	590.3
1157	A	574.1	570.3
1158	A	569.1	569.4
1159	A	555.0	555.3
1160	A	587.1	585.4
1161	A	575.0	575.3

1162	A	625.0	625.2
1163	A	571.1	571.4
1164	C	562.1	562.2
1166	A	574.1	574.3
1167	B	547.0	547.2
1168	A	558.1	558.3
1169	B	548.1	548.3
1170	A	591.5	591.2
1171	A	571.1	571.2
1172	A	587.1	587.2
1173	B	585.1	585.2
1174	B	589.5	589.2
1175	B	522.0	522.3
1176	C	582.1	582.3
1177	A	569.1	569.2
1178	B	572.1	572.3
1179	C	536.0	536.2
1180	C	564.0	564.2
1181	C	562.0	562.4
1182	E	450.9	450.0
1183	D	436.9	436.0
1184	D	450.9	450.0
1185	C	559.0	559.2
1186	B	574.0	574.2
1187	C	571.0	571.5
1188	B	555.0	555.3
1189	A	569.1	569.3
1190	F	504.0	504.2
1191	C	550.1	550.2
1192	E	490.0	490.2
1193	B	561.1	561.2
1194	C	545.0	545.5
1195	E	492.0	492.1
1196	E	466.9	467.1
1197	C	548.0	548.3
1198	C	534.0	534.2
1199	B	558.0	558.2
1200	B	544.0	544.3
1201	B	555.0	555.3
1202	C	542.0	542.2
1203	B	534.0	534.2
1204	B	558.0	558.2
1205	F	558.0	558.3
1206	D	544.0	544.2

1207	E	504.0	504.2
1208	D	558.0	558.3
1209	B	583.1	583.4
1210	B	586.1	586.3
1211	C	532.0	532.3
1212	D	553.0	553.2
1213	B	571.0	571.4
1214	C	555.0	555.4
1215	B	555.0	555.4
1216	B	534.0	534.2
1217	A	588.1	588.2
1218	B	558.0	558.3
1219	A	572.1	572.4
1220	A	575.1	575.2
1221	A	588.1	588.3
1222	A	588.1	588.3
1223	B	547.0	547.1
1224	B	572.1	572.2
1225	B	558.0	558.2
1226	B	550.1	550.2
1227	B	576.1	576.2
1229	B	589.0	589.3
1230	A	587.1	587.2
1231	B	570.0	570.3
1232	D	464.9	465.2
1233	B	571.0	571.3
1234	A	588.1	588.5
1235	B	571.0	571.2
1236	A	585.1	585.3
1237	B	584.1	584.3
1238	B	572.1	572.3
1239	B	518.0	518.2
1240	C	541.0	541.1
1241	D	572.1	572.3
1242	E	518.0	518.3
1243	D	522.0	522.2
1244	E	506.0	506.1
1245	B	530.0	530.4
1246	C	550.0	550.2
1247	B	545.0	545.5
1248	B	544.0	544.6
1249	C	550.0	550.2
1250	C	534.0	534.2
1251	C	550.0	550.2

1252	C	550.0	550.1
1253	B	536.0	536.1
1254	A	590.1	590.3
1255	B	574.0	574.3
1256	A	599.1	599.5
1257	C	574.1	574.2
1258	B	628.1	628.3
1259	B	600.1	600.3
1260	C	564.0	564.2
1261	C	548.0	548.2
1262	B	602.1	602.2
1263	F	518.0	518.1
1264	C	558.0	558.6
1265	C	564.0	564.2
1266	C	548.0	548.2
1267	C	556.0	556.2
1268	C	558.0	558.3
1269	F	493.0	493.1
1270	F	518.0	518.1
1271	B	571.0	571.2
1272	E	520.0	520.1
1273	E	493.0	493.1
1274	C	534.0	534.2
1275	A	602.1	602.2
1276	E	572.1	572.4
1277	F	518.0	518.2
1278	E	493.0	493.1
1279	F	493.0	493.1
1280	C	576.0	576.2
1281	E	510.0	510.1
1282	C	556.0	556.2
1283	C	590.1	590.2
1284	C	478.9	478.0
1285	D	518.0	518.2
1286	F	520.0	520.2
1287	C	569.1	569.6
1288	A	604.1	603.8
1289	B	550.0	549.9
1290	B	600.1	600.2
1292	C	574.1	574.3
1293	B	628.1	628.5
1294	B	548.0	547.9
1295	F	498.0	498.0
1296	B	572.1	572.2

1297	C	477.9	478.1
1298	E	494.0	494.1
1299	A	601.1	601.2
1300	E	556.0	556.3
1301	D	505.0	505.3
1302	C	556.0	556.3
1303	C	559.0	559.4
1304	C	558.0	558.4
1305	A	602.1	602.4
1306	A	599.1	599.4
1307	B	570.1	570.2
1308	C	555.0	555.2
1309	B	555.0	555.3
1310	C	556.0	556.4
1311	E	536.0	536.2
1312	E	522.0	522.1
1313	E	520.0	520.1
1314	B	569.1	569.4
1316	F	520.0	520.1
1317	A	588.1	588.2
1318	A	585.1	585.4
1319	A	574.0	574.2
1320	B	602.1	602.2
1321	A	587.0	587.4
1322	F	497.0	497.1
1323	D	478.9	479.1
1324	D	497.0	497.1
1325	B	599.0	599.3
1326	B	599.1	599.3
1327	B	599.1	599.4
1328	C	585.0	585.4
1329	C	618.1	618.4
1330	D	548.0	548.2
1331	C	602.1	602.3
1332	C	588.0	588.4
1333	C	547.0	547.2
1334	C	463.9	464.1
1335	D	490.0	490.1
1336	C	520.0	519.98
1337	C	508.0	508.5
1338	C	520.0	520.5
1339	C	520.0	520.5
1340	C	494.0	493.99
1341	C	507.9	507.94

1342	C	506.0	506.4
1343	D	506.0	506.0
1344	C	508.0	507.8
1345	E	528.0	527.8
1346	C	504.0	504.5
1347	C	465.9	466.5
1350	E	488.9	489.1
1351	E	604.1	604.3
1352	A	574.0	574.3
1353	C	475.9	478.5
1354	D	507.0	507.2
1355	B	600.1	600.2
1356	D	542.0	542.2
1357	C	585.1	585.3
1358	D	494.9	495.2
1359	C	504.0	504.5
1360	C	520.0	520.5
1361	D	534.0	534.2
1362	E	479.9	480.1
1363	E	494.0	494.1
1364	D	493.0	493.2
1365	D	478.0	478.1
1366	E	514.0	514.1
1367	C	490.0	490.1
1368	D	490.0	490.1
1369	E	519.0	519.2
1370	C	587.0	587.4
1371	B	508.0	508.2
1372	C	601.1	601.3
1373	C	604.1	604.33
1374	B	534.0	534.3
1375	E	521.0	521.3
1376	A	615.1	615.3
1377	A	618.1	618.3
1378	A	628.0	628.2
1379	C	618.1	618.3
1380	C	604.1	604.3
1381	D	538.0	538.3
1382	A	610.0	610.3
1383	A	725.2	725.4
1384	C	495.9	496.5
1385	D	478.0	477.9
1386	D	522.0	522.5
1387	D	522.0	522.9

1388	C	431.9	432.9
1389	F	504.0	504.1
1390	D	507.0	507.2
1391	C	522.0	521.9
1392	E	538.0	538.1
1393	A	617.1	617.2
1394	A	651.5	651.2
1395	D	604.1	604.2
1396	C	601.1	601.2
1397	F	492.0	492.1
1398	F	492.0	492.1
1399	D	491.0	491.1
1400	D	504.0	504.2
1401	D	508.0	508.1
1402	E	520.0	520.1
1403	D	514.0	514.0
1404	B	534.0	534.0
1405	F	546.9	547.1
1406	B	534.0	534.0
1407	F	490.0	490.1
1408	C	490.0	490.1
1409	E	521.0	521.2
1410	C	508.0	508.6
1411	C	536.0	536.6
1412	C	536.0	536.6
1413	F	518.0	518.2
1414	B	585.1	585.2
1415	B	536.0	536.6
1416	B	536.0	536.6
1417	C	508.0	508.6
1418	C	494.9	495.1
1419	D	522.1	522.2
1420	E	507.0	507.2
1421	C	520.0	520.6
1422	F	451.9	452.3
1423	D	493.0	493.4
1424	B	569.0	569.6
1425	C	555.0	555.5
1426	F	494.0	494.3
1427	C	519.0	519.7
1428	F	520.0	520.1
1429	C	504.0	504.1
1430	E	490.0	490.1
1431	F	476.0	476.1

1432	D	507.0	507.1
1433	C	508.0	508.2
1434	D	504.0	504.2
1435	B	512.0	512.2
1436	E	519.0	519.2
1437	B	518.0	518.2
1438	B	546.0	546.1
2001	A	574.1	574.2
2002	A	589.1	589.3
2003	C	566.7	567.3
2004	B	522.0	522.1
2005	C	494.5	495.1
2006	F	512.6	513.1
2007	B	585.1	585.3
2008	A	550.7	551.3
2009	B	604.6	605.3
2010	B	561.6	562.3
2011	C	483.6	484.3
2012	C	548.6	549.2
2013	E	529.0	529.1
2014	C	547.0	547.1
2015	D	510.0	510.1
2016	E	505.0	505.2
2017	AA	587.1	587.2
2018	A	533.0	533.2
2019	B	498.6	499.2
2020	B	505.0	505.1
2021	E	505.0	505.1
2022	A	487.6	488.2
2023	C	459.5	460.1
2024	A	486.6	487.2
2025	A	459.5	460.1
2027	E	458.5	459.0
2028	F	458.5	459.3
2029	F	492.0	492.1
2030	E	495.9	496.0
2031	G0	494.0	494.0
2032	C	475.5	476.0
2033	C	508.0	508.0
2034	F	475.5	475.9
2035	E	458.5	459.4
2036	D	492.0	492.6
2037	F	474.5	475.1
2038	F	455.5	456.7

2039	B	538.0	538.2
2040	A	562.0	562.5
2041	A	480.0	480.3
2042	F	482.5	483.6
2043	A	552.0	552.2
2044	A	573.0	573.2
2045	E	463.6	464.6
2046	A	538.0	538.3
2047	F	435.9	436.4
2048	A	554.0	554.3
2049	A	568.0	568.3
2050	A	566.0	566.1
2051	C	492.0	492.1
2052	F	508.0	508.0
2053	A	568.0	568.1
2054	E	494.0	494.6
2056	A	537.0	537.0
2057	D	492.0	492.0
2058	E	522.0	522.0
3001	C	416.9	417.2
3002	B	430.9	431.1
3003	B	533.0	533.32
3004	B	503.0	503.3
3005	A	587.1	587.3
3006	A	557.1	557.3
3007	C	569.1	569.3
3008	C	533.0	533.2
3009	C	587.1	587.2
3010	C	584.1	584.2
3011	A	584.1	584.3
3012	B	460.9	461.2
3013	B	446.9	447.1
3014	B	517.0	517.2
3015	A	601.1	601.2
3016	B	547.0	547.2
3017	A	598.1	598.2
3018	D	493.9	494.1
3019	B	522.0	522.1
3020	B	557.0	557.3
3021	B	571.0	571.3
3022	C	491.0	491.1
3023	C	551.0	551.2
4001	E	560.1	560.1
4002	D	534.1	534.2

4003	B	571.1	571.2
4004	D	520.0	520.2

確定相關蛋白酶抑制作用

【1653】 使用相關酶之單一濃度%抑制篩選及/或IC_{50}確定來確定相關蛋白酶之活體外抑制作用。分析係基於標準文獻方法(參見例如Shori等人, Biochem. Pharmacol., 1992,43, 1209；Bouckaert等人, European Journal of Medicinal Chemistry 110 (2016) 181)。使用Km濃度之適當螢光受質、100 μM之固定受質濃度的FXIa及不同濃度之測試化合物來分析人類絲胺酸蛋白酶血漿激肽釋放酶、KLK1、FXa、纖溶酶、凝血酶及胰蛋白酶之酶活性。藉由監測在25℃下歷經5 min自裂解受質發出之螢光來量測蛋白酶活性。將每分鐘螢光增加之線性速率表述為活性百分比(%)。IC_{50}值係計算為對未抑制之酶活性(100%)產生50%抑制作用之抑制劑濃度。

【1654】 由此分析獲得之資料顯示於表8中，其中使用表9中所示之標度。

表8：酶選擇性資料

實例編號	IC_{50} (人類PKal) nM	IC_{50} (人類KLK1) nM	IC_{50} (人類纖溶酶) nM	IC_{50} (人類FXa) nM	IC_{50} (人類FXIa) nM	IC_{50} (人類凝血酶) nM	IC_{50} (人類胰蛋白酶) nM
1001				G3			
1002				G1			
1003				G4			
1004				G3			
1005				E			
1006				F			
1007				F			
1008				G4			
1009				G4			
1010				G4			
1011				G4			
1012				F			
1013				C			
1014				F			
1015				F			
1019				G3			

1021				E			
1022				E			
1023				E			
1024				D			
1025				E			
1026				F			
1027	G4	G4	G4	E		G4	
1029				G4			
1030				E			
1031				F			
1032				G3			
1035	G4	G3	G4	F		G4	
1036				G3			
1037	G4	G4	G4	G4		G4	
1043				E			
1044	G4	G3	G4	E		G4	
1051				E			
1055	G3	G3	G3	G3	G3		
1074				F			
1076				F			
1077				E			
1078				E			
1079				F			
1085				G3			
1089				F			
1092	G3	G3	G3	G3	G3		
1099				E			
1106				G3			
1109				G3			
1110	G3	F	G3	F	G3		
1111				F			
1112	G3	G3	G3	G3	G3		
1114				G3			
1117				F			
1118				G3			
1121				G3			
1122				G3			
1123				G3			
1125	G3	G3	G3	F	G3		
1126				F			
1127				F			
1128				F			
1129	G3	E	G3	E	G3		
1130				F			

1132				F			
1134				F			
1135				D			
1137				F			
1138				E			
1139				F			
1140				E			
1141				E			
1142				G3			
1143				E			
1144				D			
1145				F			
1146				F			
1147				F			
1148				F			
1149				G3			
1150				E			
1151				F			
1152				G3			
1153				F			
1154				F			
1155				F			
1156				F			
1157				F			
1158				F			
1159				G3			
1160				G3			
1161				G3			
1176				G3			
1177				G3			
1179		G3		G3			
1180		G3		G3			
1181		G3		G3			
1182		G3					
1183		G3					
1184		G3					
1185				G3			
1186				F			
1187				G3			
1188		G0		G3			
1189		D		G3			
1190		G3					
1191		G0					
1192		G3					

1193		G0		G3			
1194		G0		G3			
1195		F		G3			
1196		G3					
1197		G0		G3			
1198		G0		G3			
1199		G0		F			
1200		G0		F			
1201		G0		F			
1202		G0		G3			
1203		G0		G3			
1204		G0		G3			
1205		F		G3			
1206		G3		G3			
1207		G3		G3			
1208		G3		F			
1209		G0		G3			
1210		G3		G3			
1211		G3		G3			
1212		G3		G3			
1213		F		E			
1216				G3			
1217				F			
1218				G3			
1220				F			
1223				F			
1224				G3			
1225				F			
1226				G3			
1227				F			
1229				F			
1230				F			
1231				G3			
1232				G3			
1233				G3			
1234				E			
1235	G3	E	G3	G3	G3		G3
1236				G3			
1237				G3			
1238		G3		E			
1239		G3		F			
1240		F					
1241		F					
1242		G3					

1243		G3					
1244		F					
1245		F		G3			
1246		G3					
1247		F		G3			
1248		F		F			
1249		G3					
1250		G3		G3			
1251		G3					
1252		G3		G3			
1253		G3		G3			
1254		F		F			
1255		F					
1256		D		G3			
1257		G3		G3			
1258		G3		G3			
1259		F					
1260		G3		G3			
1261		G3		G3			
1262		G3		F			
1263		F					
1264		E		F			
1265		G3		G3			
1266		G3		G3			
1267		F		G3			
1268		F					
1269		F					
1270		F					
1271		G3		G3			
1272		G3					
1273		G3					
1274		G3					
1275				F			
1282				G3			
1285		F		G3			
1286		E					
1287				F			
1299				F	G3		
1304				G3			
1305				E	G3		
1306				F	G3		
1307				G3			
1308				G3			
1309				G3			

1310				F			
1314				F	G3		
1317		G3		E	G3		
1318		F		E			
1319		G3		D	G3		
1320		G3		G3			
1321		G3		D			
1322		G3					
1323		G3					
1324		G3					
1325		G3		D			
1326		G3		G3			
1327		G3		G3			
1328		G3		E			
1329		G3		G0			
1330		G3		G3			
1331		G3		G0			
1332		G3		G0			
1333		G3		G0			
1334		G3		G3			
1335				G3			
1336				G3			
1337				G3			
1338				G3			
1339				G3			
1340				G3			
1341				F			
1342				G3			
1343				F			
1344				F			
1345				G3			
1346				G3			
1347				E			
1350				E			
1351				G3			
1352				E			
1353				E			
1354				F			
1355				G3			
1356				E			
1357				G3			
1358				E			
1359				G3			
1360				F			

1361				F			
1362				G3			
1363				G3			
1364				G3			
1365				G3			
1366				F			
1367				F			
1368				G3			
1369				G3			
1370				F			
1371				F			
1372				F			
1373				G3			
1374				F			
1375				G3			
1376				E			
1377				E			
1378				F		F	
1379				E			
1380				F			
1381				G3			
1382				E			
1383				E			
1384				G3			
1385				E			
1386				G3			
1387				F			
1388				D			
1389				G3			
1390				G3			
1391				G3			
1392				G3			
1393				D			
1394				C			
1395				G3			
1396				G3			
1397				G3			
1398				G3			
1399				G3			
1400				G3			
1401				G3			
1402				G3			
1403				E			
1404				G3			

1406		H3		H3		H2	H2
1408		H1	H3	F		H2	H2
1409		H2		H3		H3	H3
1410		H3	H3	H2		H1	H2
1411		H3	H3	H3		H3	H2
1412		H3	H3	H2		H2	H2
1413		D		H3		H2	H3
1414		H1		H2		H2	H2
1415		H3	H3	H3		H3	H2
1416		H3	H3	H2		H2	H1
1417		H3	H3	H2		H2	H2
1418		H3	H3	H2		H3	H2
1419		H2	H3	H2		H2	H2
1420		H2	H3	H3		H3	H3
1421		H3	H3	H3		H3	H2
1422		H1	H2	H2		H2	H1
1423		H1	H2	H2		H2	H1
1424		H3	H3	H2		H3	H2
1425		H3	H3	H3		H3	H2
1426		H1	H3	H2		H2	H2
1427		H3	H3	H3		H3	H3
1428		H3	H3	H3		H3	H3
1429		H1	H3	H2		H2	H2
1430		H2	H3	H3		H3	H3
1431		H1	H2	H1		H2	H2
1432		H1	H2	H2		H1	H1
1433		H2	H3	H2		H3	H2
1434		H2	H3	H2		H2	H2
1435		H3	H3	H3		H3	H2
1436		H3	H3	H3		H3	H3
1438		H3	H3	H3		H3	H2
2002				G3			
2004				G3			
2005		G0		G3			
2006		G3		G3			
2007				G3			
2008				E			
2009				G3			
2010				G3			
2011		G3					
2012		G3		G3			
2013		G3		G3			
2017	G0	G3	D	F	F	D	AA
2018	G3	G3	C	G3	G3	F	AA

2019	F	F	B	F	G3	F	AA
2020				G3	G3		
2021		G3					
2022		G3					
2023		G3					
2024				G3			
2025				F			
2027				G3			
2028				G3			
2029				G3			
2030				F			
2032				G3			
2033				G3			
2035				F			
2036				G3			
2037		H3		H3		H3	H3
2038		H3		H3		H3	H3
2039				G3			
2040				F			
2041		H3		H2		H2	H1
2042		H2	H3	H3		H2	H3
2043		H2		H2		H2	H1
2044		D		H3		H2	H1
2045		H2	H3	H2		H2	H2
2046		H2	H3	H3		H3	H3
2047		H3	H3	H3		H3	H2
2048		H3	H2	H2		H3	H1
2049		H2	H2	H1		H3	H1
2050		H3	H3	H2		H2	H1
2051		H2	H3	H2		H3	H1
2052		H3	H3	H3		H3	H3
2053		H2	H2	H2		H3	H1
2054		H1	H3	H3		H3	H2
2056		H3	H1	H2		H3	H1
2057		E	H3	H2		H2	H3
2058				G3		G3	
3003		G0		G3			
3004		G0		E			
3005		G0		F			
3006		G0		D			
3007				E			
3008				E			
3009				E			
3010				E			

3011				F			
3012				D			
3013				C			
3014				G3			
3015				G3	G3		
3016				G3	G3		
3017				F			
3018		G3		F			
3019		G3		E			
3020				F			
3021				F			
3022				F			
4001				G3			
4002		G3		G3			

表9：用於呈遞酶選擇性資料之標度

類別	IC50 (nM)
AA	1 - 10
A	10 - 100
B	100 - 300
C	300 – 1,000
D	1,000 – 3,000
E	3,000 – 10,000
F	10,000 – 40,000
G0	>4,000
G1	>10,000
G2	>20,000
G3	>40,000
G4	>100,000
H1	在40 μM下<20%活性
H2	在40 μM下20% - 80%活性
H3	在40 μM下>80%活性

藥物動力學

【1655】 對表10中之化合物進行藥物動力學研究以評估雄性Sprague-Dawley大鼠在單次靜脈內劑量及單次經口劑量後之藥物動力學。對兩隻大鼠給予1 mL/kg之單次靜脈內劑量的測試化合物於10% DMSO / 10% Cremophor EL / 80% SWFI媒劑中之標稱1 mg/mL (1 mg/kg)組合物。對兩隻大鼠給予5 mL/kg

之單次經口劑量的測試化合物於10% DMSO / 10% Cremophor EL / 80% SWFI媒劑中之標稱1 mg/mL (5 mg/kg)組合物。

【1656】 在靜脈內給藥後，歷經12 h時期收集血液樣品。取樣時間為2、5、15及30 min，接著1、2、4、6及12 h。在經口給藥後，歷經24 h時期收集血液樣品。取樣時間為5、15及30 min，接著1、2、4、6、8、12及24 h。

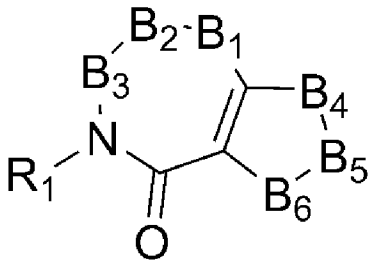
【1657】 在收集後，使血液樣品離心且藉由LCMS分析血漿部分之測試化合物濃度。使用Phoenix WinNonlin (v8.0)獲得此等研究之經口生物可用性及半衰期計算且顯示如下：

表10：藥物動力學資料

實例編號	iv劑量(mg/kg)	經口劑量(mg/kg)	F%	T1/2 (min)
1024	1.1	5.3	36%	328
1055	1.1	5.6	55%	277
1128	0.9	4.5	27%	273
1149	0.9	4.6	56%	133
1220	1.0	2.9	22%	70
1222	1.0	5.3	5%	35
2039	1.2	6.0	27%	45
2048	1.0	5.0	57%	49
2049	1.0	4.6	28%	85

【發明申請專利範圍】

【請求項1】一種式(I)化合物，



式(I)，

其中：

B_1為碳中心或氮中心；且：

(i) B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，或

(ii) B_2為碳中心或氮中心，且B_3為B_2與R_1所連接之氮原子之間之單鍵，

其中，當B_2為碳中心或氮中心時，B_1經由單鍵或雙鍵連接至B_2；

其中在可能之情況下，B_1可視情況經以下取代：選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基，或1個側氧基取代基，或2個取代基，該等取代基與其同時連接之B_1一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O；

其中，當B_2為碳中心時，B_2可視情況經選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、CF_3、CN及鹵基之1或2個取代基或1個側氧基取代基取代；

且：

(i) B_4為N(R_2)，B_5為N，且B_6為C(R_3)，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；

(ii) B_4為C(R_2)，B_5為N，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；或

(iii) B_4為C(R_2)，B_5為C(H)，且B_6為N(R_3)，且B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接；

R_2選自H、-$(CH_2)_{0-3}$-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-C(=O)-O-R_6、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{14}-C(=O)R_{15}、-$(CH_2)_{0-3}$-NR_{34}-$S(=O)_2R_{35}$、烷基、環烷基、雜環烷基、烷氧基、-OH、-CF_3、鹵基、芳基、雜芳基、-CH_2-O-R_{16}及-CN；

其中R_4為H、烷基、環烷基及雜環烷基，且

R_5選自烷基、-OH、-$S(=O)_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OR_{33}、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-N(R_{36})(R_{37})、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OR_{38}、-(C(H)(烷基))-(C=O)-N(R_{39})(R_{40})、-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-N(R_{41})(R_{42})；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員、6員或7員雜環，該雜環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，視情況含有一個或兩個選自N、O及S之額外雜原子，其中該環可視情況經1、2或3個選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基取代；

R_{28}、R_{33} R_{36}、R_{37}、R_{38}、R_{39}、R_{40}、R_{41}及R_{42}各自獨立地選自H及小烷基；

R_6選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{14}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{15}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

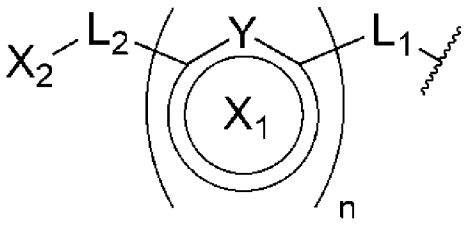
R_{16}選自H、烷基、環烷基、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OH、雜環烷基及-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

R_{34}選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

R_{35}選自H、烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-$(CH_2)_{0-3}$雜芳基[a]及-(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_1為：

(i) 式(II)，其中式(II)由式(IIb)表示，



式(IIb)，

其中：

n為1；

L_1為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

Y選自C、N、O及S；

X_1為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中X_1可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

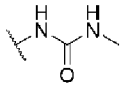
L_2為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-、-C(烷基)(烷基)-、-C(=O)-及-SO_2-之連接基；且

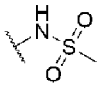
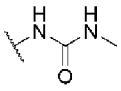
X_2為：

(a) -$NR_{20}R_{21}$，

其中R_{20}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{22}；

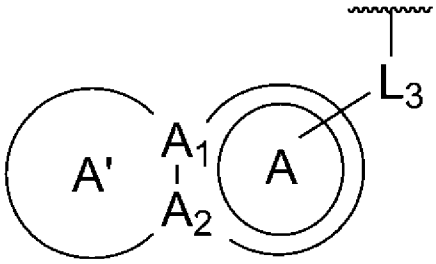
其中R_{21}選自H、烷基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_{23}；

其中R_{22}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；

其中R_{23}選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  、  、  、  ；或

(b) 2-吡啶酮、4-吡啶酮或含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O，該單環或雙環可為飽和的，或為不飽和的，具有1或2個雙鍵，其可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基；或者，

(ii) 式(III)，其包含與非芳族環A'稠合之芳族環A，



式(III)，

其中：

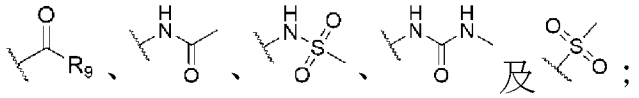
L_3為選自單鍵、-$(CH_2)_{1-3}$-、-(CH)(烷基)-及-C(烷基)(烷基)-之連接基；

A_1及A_2均為碳；

A為苯基或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；

其中A可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、O(環丙基)、CF_3及鹵基之取代基取代；

A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中A'可視情況經一個R_7取代，其中R_7選自烷基、烷氧基及-$(CH_2)_{0-3}$-R_8，其中R_8選自環烷基、雜環烷基、芳基、雜芳基、  ；

其中R_9選自H、烷基、OH、N(R_{31})(R_{32})及烷氧基；

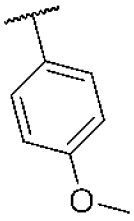
其中R_{31}為H或小烷基；

其中R_{32}選自H、小烷基及－$(CH_2)_{0-3}$雜芳基；

其中A'可視情況經1、2或3個其他取代基R_{10}、R_{11}及R_{17}取代，其中R_{10}、R_{11}及R_{17}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他

取代基R_{24}及R_{27}以及2個其他取代基R_{25}及R_{26}取代，其中R_{25}及R_{26}與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，

或其中A'可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基之其他取代基R_{43}及R_{44}取代，且A'內之兩個不同碳環成員由橋接-CH_2-基團連接；且

R_3為苯基，或含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環，其中R_3經1、2或3個獨立地選自小烷基^b、小烷氧基、環丙基、OH、NH_2、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2、-C(=O)-N(H)(小烷基)、-C(=O)-N(小烷基)(小烷基)及CN之取代基取代；其中R_3不為  ；且

烷基為具有至多10個碳原子(C_1-C_{10})之直鏈飽和烴或具有3至10個碳原子(C_3-C_{10})之分支鏈飽和烴；烷基可視情況經1、2或3個獨立地選自環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、-$NR_{12}R_{13}$、-C(=O)$NR_{12}R_{13}$、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷基為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

小烷基^{b}為具有至多4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈飽和烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈飽和烴；小烷基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、OMe、

OEt、O^{i}Pr、O^{n}Pr、O(環丙基)、OCF_3、$OCHF_2$、CN、CF_3、NH_2、-C(=O)NH_2及鹵基之取代基取代；

烷氧基為OCF_3、O(環丙基)、具有1至6個碳原子(C_1-C_6)之直鏈O-連接烴或具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之分支鏈O-連接烴；烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

小烷氧基為OCF_3、O(環丙基)、具有1至4個碳原子(C_1-C_4)之直鏈O-連接烴或具有3至4個碳原子(C_3-C_4)之分支鏈O-連接烴；小烷氧基可視情況經1或2個獨立地選自環丙基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

芳基為苯基、聯苯基或萘基；芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、亞甲基二氧基、伸乙基二氧基、OH、鹵基、CN、-$(CH_2)_{0-3}$-$NR_{12}R_{13}$、OCF_3及CF_3之取代基取代；

多環烷基為具有5至8個碳原子(C_5-C_8)之雙環飽和烴環系統，其中該雙環為橋接的，或為金剛烷基；多環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3及鹵基之取代基取代；

環烷基^{a}為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

環烷基[b]為具有3至6個碳原子(C_3-C_6)之單環飽和烴環；環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、NH_2、NH(小烷基)、CN、CF_3、鹵基及－(C=O)-OH之取代基取代；

鹵基為F、Cl、Br或I；

雜芳基為含有1、2或3個選自N、S及O之環成員的5員或6員含碳芳族環；其中雜芳基可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜芳基[a]為5員、6員、9員或10員單環或雙環芳族環，該芳族環在可能之情況下含有1、2、3或4個獨立地選自N、S及O之環成員；其中雜芳基[a]可視情況經1、2或3個獨立地選自烷基、烷氧基、環丙基、OH、鹵基、CN及CF_3之取代基取代；

雜環烷基為含有3、4、5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；雜環烷基可視情況經1或2個獨立地選自烷基、環丙基、(C_1-C_6)烷氧基、OH、CN、CF_3、側氧基及鹵基之取代基取代；其中當雜環烷基為雙環系統時，該雙環系統為稠合、橋接或螺環的；

每個R_{12}及R_{13}獨立地選自H、烷基、環烷基及雜環烷基；

及其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物。

【請求項2】 如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

(i) B_1為碳中心，且B_2及B_3一起在B_1與R_1所連接之氮原子之間形成單鍵，

(ii) B_1為碳中心且B_2為碳中心，且B_1經由單鍵與B_2連接，或

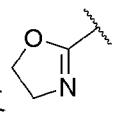
(iii) B_1為氮中心且B_2為碳中心，且B_1經由雙鍵與B_2連接。

【請求項3】如請求項2之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中B_1為碳中心且B_2為碳中心，且B_1經由單鍵與B_2連接，或其中B_1為氮中心且B_2為碳中心且B_1經由雙鍵與B_2連接。

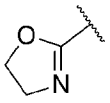
【請求項4】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

(i) B_4為$N(R_2)$，B_5為N，且B_6為$C(R_3)$，且B_4經由單鍵與B_5連接且B_5經由雙鍵與B_6連接；或

(ii) B_4為$C(R_2)$，B_5為N，且B_6為$N(R_3)$，且其中B_4經由雙鍵與B_5連接且B_5經由單鍵與B_6連接。

【請求項5】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自$-C(=O)-N(R_4)(R_5)$、$-C(=O)-O-R_6$、$-CH_2-NH-C(=O)CH_3$、$-CH_2-NH-S(=O)_2R_{35}$、$-CH_2-O-R_{16}$、$-CH_2-OH$、-CN及  。

【請求項6】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化

化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2選自-C(=O)-N(R_4)(R_5)、-CH_2-NH-C(=O)CH_3、-CH_2-NH-S(=O)$_2R_{35}$、-CH_2-O-R_{16}、-CH_2-OH及  。

【請求項7】 如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_2為-C(=O)-N(R_4)(R_5)。

【請求項8】 如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中：

R_4為H或小烷基，且

R_5選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-(CH_2)$_{1-3}$-(C=O)-OH、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基[b]、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基[a]、-(C(H)(雜芳基))-烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OH及-(C(H)(雜芳基))-(C=O)-OR_{28}；

或其中R_4及R_5與其所連接之氮原子一起形成含碳4員、5員或6員飽和雜環，視情況含有選自N及O之額外雜原子，該雜環可視情況經選自側氧基、烷基、烷氧基、OH、鹵基及CF_3之取代基單取代或二取代；

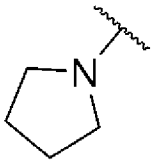
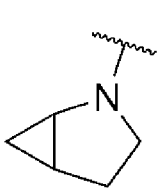
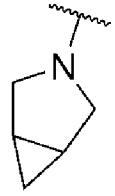
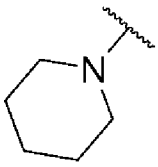
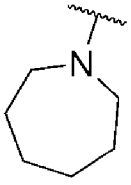
R_6當存在時選自H、烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-多環烷基、-(CH_2)$_{0-3}$-芳基、-(C(H)(苯基))-烷基、-(CH_2)$_{0-3}$雜芳基及－(C(H)(雜芳基))-烷基；

R_{16}選自H、小烷基、-(CH_2)-(C=O)-OH、雜環烷基及-(CH_2)-雜芳基；且

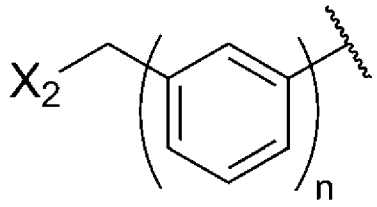
R_{35}選自H、小烷基及環丙基。

【請求項9】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_5選自烷基、-OH、-S(=O)$_2$-(小烷基)、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-OR_{33}、-$(CH_2)_{1-3}$-(C=O)-$N(R_{36})(R_{37})$、-$(CH_2)_{0-3}$-環烷基[b]、-$(CH_2)_{0-3}$-雜環烷基、-(CH(烷基))-雜環烷基、-$(CH_2)_{0-3}$-多環烷基、-(C(H)(烷基))-(C=O)-OR_{38}及-(C(H)(烷基))-(C=O)-$N(R_{39})(R_{40})$。

【請求項10】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_1選自苯基及吡啶基。

【請求項11】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中X_2選自結構  、  、  、  及  ，其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O，且X_2可進一步視情況經1或2個取代基R_{29}及R_{30}取代，其中R_{29}及R_{30}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基。

【請求項12】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中式(II)由式(IIa)表示，



式(IIa)，

其中：

n為1；

X_2為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環或雙環，其中至少一個環成員獨立地選自N、S及O；

其中X_2可視情況經1或2個取代基R_{18}及R_{19}取代，其中R_{18}及R_{19}獨立地選自烷基、環烷基、烷氧基、OH、側氧基、CF_3及鹵基，或其中R_{18}及R_{19}在可能之情況下與其同時連接之碳原子一起形成3員、4員或5員非芳族單環含碳環，視情況其中一個或兩個環成員選自N、S及O。

【請求項13】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A為苯基或含有1、2或3個氮環成員之6員含碳芳族環。

【請求項14】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘

化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中A'為含有5、6或7個環成員之非芳族含碳單環，其中至少一個環成員為N。

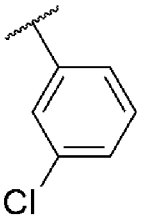
【請求項15】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_1為式(III)。

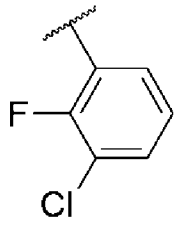
【請求項16】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_7為(C_1-C_3)烷基且經由N環成員鍵結至A'。

【請求項17】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中，當R_3為經取代之6員環時，R_3在與B_6連接之對位處不經甲氧基取代。

【請求項18】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3選自經取代之苯基、經取代之吡啶基及經取代之噻吩。

【請求項19】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3經1或2個獨立地選自小烷基[b]、小烷氧基、CF_3、鹵基、-C(=O)-NH_2及CN之取代基取代。

【請求項20】如前述請求項中任一項之化合物，或其互變異構物、異構物、立體異構物(包括鏡像異構物、非鏡像異構物及其外消旋及非外消旋混合物)、氘化類似物以及醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，其中R_3選自： 

及 

。

【請求項21】一種選自表1a、表1b、表1c、表1d、表2a、表2b、表2c、表2d、表3a、表3b、表3c、表3d及表4之化合物，或其醫藥學上可接受之鹽、溶劑合物或鹽之溶劑合物。

【請求項22】一種醫藥組合物，其包含：如前述請求項中任一項之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物，及至少一種醫藥學上可接受之賦形劑。

【請求項23】如請求項1至21中任一項之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或如請求項22之醫藥組合物，用於藥物中。

【請求項24】如請求項1至21中任一項之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或如請求項22之醫藥組合物，用於治療牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患的方法中；其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為緩激肽介導之血管性水腫；其中該緩激肽介導之血管性水腫為遺傳性血管性水腫。

【請求項25】如請求項1至21中任一項之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或如請求項22之醫藥組合物，用於治療牽涉因子XIIa活性之疾病或疾

患的方法中；其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為緩激肽介導之血管性水腫；其中該緩激肽介導之血管性水腫為非遺傳性的。

【請求項26】 如請求項1至21中任一項之化合物或其醫藥學上可接受之鹽及/或溶劑合物或如請求項22之醫藥組合物，用於治療牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患的方法中；其中該牽涉因子XIIa活性之疾病或疾患為血栓性病症。