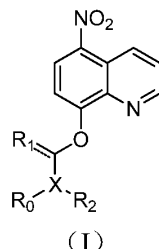


权利要求书:

1. 一种式 (I) 所示的化合物,



或其内消旋体、外消旋体、对映异构体、非对映异构体、或其混合物形式，
或其药学上可接受的盐，

其中 --- 表示单键或双键；

R_1 选自氢、 C_{1-6} 烷基、S 或 O；

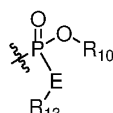
X 选自 O、N、S、 $-(CH_2)_n-$ 、芳基、或杂环基；

其中：

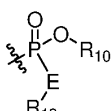
当 X 选自 N 时， R_0 和 R_2 各自独立地选自氢、 C_{1-6} 烷基、芳基、或杂环基；

当 X 选自芳基或杂环基时； R_0 和 R_2 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，其中所述烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

当 X 选自 O、S 或 $-(CH_2)_n-$ 时， R_2 不存在； R_0 选自 C_{1-6} 烷基、环烷基、杂环基、

$-\text{COR}_{11}$ 、 $-\text{C(O)OR}_{12}$ 、 或 ，所述 C_{1-6} 烷基、环烷基、杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

其中，

 时，E 选自 O 或 NR_{14} ； R_{10} 、 R_{13} 、 R_{14} 各自独立地选自氢、 C_{1-6} 烷基、或芳基，所述 C_{1-6} 烷基或芳基任选进一步被选自卤素、羟基、巯基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、环烷基、杂环基、芳基、芳基烷基、杂芳基、杂芳基烷基、 $-\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{COR}_{11}$ 、 $-\text{C(O)OR}_{12}$ 、 $-\text{OC(O)R}_{11}$ 、 $-\text{OC(O)OR}_{12}$ 的一个或多个基团取


 代；当 R_0 选自 $\begin{array}{c} Y \\ \diagup \quad \diagdown \\ R_3 \end{array}$ 时，Y 选自 O、N 或 S， R_3 选自 $\begin{array}{c} R_4 \\ | \\ Z \\ | \\ R_5 \end{array}$ 、 $\begin{array}{c} R_6 \end{array}$ 、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，所述环烷基、杂环基、芳基、杂芳基任选被进一步被选自卤素、羟基、巯基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_{11}$ 的一个或多个基团取代；Z 选自 C、N 或 O；

其中，当 Z 选自 C 时， R_4 、 R_5 和 R_6 各自独立地选自氢、卤素、烷基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基、 $-\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{SR}_{12}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-(\text{CH})_m-\text{C}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-\text{NR}^a\text{R}^b$ 、 $-\text{N}(\text{R}^c)\text{C}(\text{O})\text{R}^d$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^a)(\text{R}^b)$ 、 $-\text{N}(\text{R}^c)\text{S}(\text{O})_p\text{R}^d$ 、 $-\text{S}(\text{O})_p\text{N}(\text{R}^a)(\text{R}^b)$ 、 $-\text{O}(\text{CH}_2)_m\text{O}(\text{CH}_2)_q\text{R}_{12}$ 、 $-\text{N}(\text{R}^c)\text{C}(\text{O})-(\text{CH})_m-\text{N}(\text{R}^c)\text{C}(\text{O})\text{R}^d$ ，其中所述烷基、环烷基、杂环基、芳基或杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、 OR_{12} 、 SR_{12} 、 NR^aR^b 、 $-\text{COR}_{11}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-\text{N}(\text{R}^c)\text{C}(\text{O})\text{R}^d$ 、 $-\text{O}(\text{CH}_2)_m\text{O}(\text{CH}_2)_q\text{R}_{12}$ 、环烷基、杂环基、芳基、芳烷基、杂芳基、杂芳基烷基的一个或多个基团取代，所述芳基、芳烷基、杂芳基或杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基的一个或多个基团取代；或者

R_4 、 R_5 和 R_6 其中之一为氢，其余两者与 Z 一起形成环烷基或杂环基，所述环烷基或杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

当 Z 选自 N 时， R_6 不存在， R_4 和 R_5 各自独立地选自氢、卤素、烷基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基、 $-\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{SR}_{12}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-\text{NR}^a\text{R}^b$ 、 $-\text{N}(\text{R}^c)\text{C}(\text{O})\text{R}^d$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^a)(\text{R}^b)$ 、 $-\text{N}(\text{R}^c)\text{S}(\text{O})_p\text{R}^d$ 、 $-\text{S}(\text{O})_p\text{N}(\text{R}^a)(\text{R}^b)$ 、 $-\text{O}(\text{CH}_2)_m\text{O}(\text{CH}_2)_q\text{R}_{12}$ 、 $-\text{N}(\text{R}^c)\text{C}(\text{O})-(\text{CH})_m-\text{N}(\text{R}^c)\text{C}(\text{O})\text{R}^d$ ，其中所述烷基、环烷基、杂环基、芳基、或杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、 OR_{12} 、 SR_{12} 、 NR^aR^b 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-(\text{CH})_m-\text{OC}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、环烷基、杂环基、芳基、芳烷基、杂芳基、杂芳基烷基的一个或多个基团取代，或者

R_4 、 R_5 和 Z 一起形成环烷基或杂环基，所述环烷基或杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

当 Z 表示 O 时， R_5 和 R_6 不存在， R_4 选自 C_{1-6} 烷基、芳基或杂环基，其中所述 C_{1-6} 烷基、芳基或杂环基任选进一步被一个或多个 $-\text{OH}$ 取代；

或者

当 X 选自 O、N、S、或 $-(\text{CH}_2)_n$ -时， R_2 不存在， R_1 、X 和 R_0 一起形成环烷基

或杂环基, 所述环烷基或杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

R_{11} 和 R_{12} 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基, 其中所述烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、 $-NR^aR^b$ 、 $-OR^d$ 、 $-N(R^c)C(O)R^d$ 、 $-C(O)N(R^a)(R^b)$ 、 $-N(R^c)S(O)_pR^d$ 、 $-S(O)_pN(R^a)(R^b)$ 、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

R^a 和 R^b 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基, 其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

或者 R^a 和 R^b 与他们连接的原子一起形成杂环基, 所述杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、氧代基、羟基、巯基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

R^c 和 R^d 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基, 其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

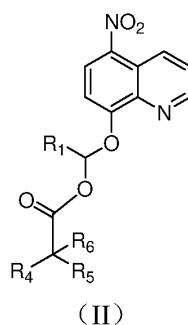
n 选自 1 至 8 的整数;

m 选自 0 至 6 的整数;

p 选自 0、1 或 2;

q 选自 0 至 6 的整数。

2. 根据权利要求 1 所述的式 (I) 所示的化合物, 其为下式 (II) 所示的化合物,



其中,

R_1 选自氢或 C_{1-6} 烷基;

R_4 、 R_5 和 R_6 各自独立地选自氢、卤素、烷基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基、 $-OR_{12}$ 、 $-SR_{12}$ 、 $-C(O)R_{11}$ 、 $-C(O)OR_{12}$ 、 $-C(O)-(CH)_m-C(O)R_{11}$ 、 $-OC(O)R_{11}$ 、 $-NR^aR^b$ 、 $-N(R^c)C(O)R^d$ 、 $-C(O)N(R^a)(R^b)$ 、 $-N(R^c)S(O)_pR^d$ 、 $-S(O)_pN(R^a)(R^b)$ 、 $-O(CH_2)_mO(CH_2)_qR_{12}$ 、 $-N(R^c)C(O)-(CH)_m-N(R^c)C(O)R^d$, 其中所述烷基、环烷基、杂环基、芳基、或杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、 OR_{12} 、 SR_{12} 、 NR^aR^b 、 $-COR_{11}$ 、 $-C(O)OR_{12}$ 、 $-OC(O)R_{11}$ 、 $-N(R^c)C(O)R^d$ 、 $-O(CH_2)_mO(CH_2)_qR_{12}$ 、环烷基、杂环基、芳基、芳烷基、杂芳基、杂芳基烷基的一个或多个基团取代, 所述芳基、芳烷基、杂芳基或杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基的一个或多个基团取代; 或者

R_4 、 R_5 和 R_6 其中之一为氢, 其余两者与 Z 一起形成环烷基或杂环基, 所述环烷基或杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、 $-C(O)R_{11}$ 、 $-C(O)OR_{12}$ 、 $-OC(O)R_{11}$ 、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

R_{11} 和 R_{12} 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基, 其中所述烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、 $-NR^aR^b$ 、 $-OR^d$ 、 $-N(R^c)C(O)R^d$ 、 $-C(O)N(R^a)(R^b)$ 、 $-N(R^c)S(O)_pR^d$ 、 $-S(O)_pN(R^a)(R^b)$ 、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

R^a 和 R^b 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基, 其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

或者 R^a 和 R^b 与他们连接的原子一起形成杂环基, 所述杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、氧代基、羟基、巯基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

R^c 和 R^d 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基, 其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

m 选自 0 至 6 的整数;

p 选自 0、1 或 2;

q 选自 0 至 6 的整数。

3. 根据权利要求 1 或 2 所述的式 (I) 所示的化合物,

其中,

R_4 、 R_5 和 R_6 各自独立地选自氢、烷基、芳基、杂芳基、 $-OR_{12}$ 、 $-SR_{12}$ 、 $-C(O)R_{11}$ 、 $-C(O)OR_{12}$ 、 $-C(O)-(CH)_m-C(O)R_{11}$ 、 $-OC(O)R_{11}$ 、 $-(CH)_m-N(R^c)C(O)R_{11}$ 、 $-NR^aR^b$ 、 $-N(R^c)C(O)R^d$ 、 $-C(O)N(R^a)(R^b)$ 、 $-N(R^c)S(O)_pR^d$ 、 $-S(O)_pN(R^a)(R^b)$ 、 $-O(CH_2)_mO(CH_2)_qR_{12}$ 、 $-N(R^c)C(O)-(CH)_m-N(R^c)C(O)R^d$, 其中所述烷基、芳基或杂芳基任选进一步被选自卤素、羟基、烷基、 OR_{12} 、 SR_{12} 、 NR^aR^b 、 $-COR_{11}$ 、 $-C(O)OR_{12}$ 、 $-O(O)CR_{11}$ 、 $-N(R^c)C(O)R^d$ 、 $-O(CH_2)_mO(CH_2)_qR_{12}$ 、环烷基、杂环基、芳基、芳烷基、杂芳基、杂芳基烷基的一个或多个基团取代, 所述芳基、芳烷基、杂芳基或杂芳基烷基任选进一步被选自卤素、羟基、巯基、烷基、烷氧基的一个或多个基团取代;

R_{11} 和 R_{12} 各自独立地选自氢、卤素、羟基、烷基、烷氧基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基, 其中所述烷基、烷氧基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、羟基、烷基、烷氧基、 $-NR^aR^b$ 、 $-OR^d$ 、 $-N(R^c)C(O)R^d$ 、 $-C(O)N(R^a)(R^b)$ 、 $-N(R^c)S(O)_pR^d$ 、 $-S(O)_pN(R^a)(R^b)$ 、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

R^a 和 R^b 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基, 其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

或者 R^a 和 R^b 与他们连接的原子一起形成杂环基, 所述杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、氧代基、羟基、巯基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

R^c 和 R^d 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基, 其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

m 选自 0 至 6 的整数;

p 选自 0、1 或 2;

q 选自 0 至 6 的整数。

4. 根据权利要求 3 所述的式 (I) 所示的化合物, 其中,

R_4 、 R_5 和 R_6 各自独立地选自氢、烷基、芳基、杂芳基、 $-\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{SR}_{12}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-(\text{CH})_m-\text{C}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-(\text{CH})_m-\text{N}(\text{R}^c)\text{C}(\text{O})\text{R}_{11}$ ，其中所述烷基、芳基或杂芳基任选进一步被选自卤素、羟基、烷基、 OR_{12} 、 SR_{12} 、 NR^aR^b 、 $-\text{COR}_{11}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{O}(\text{O})\text{CR}_{11}$ 、 $-\text{N}(\text{R}^c)\text{C}(\text{O})\text{R}^d$ 、 $-\text{O}(\text{CH}_2)_m\text{O}(\text{CH}_2)_q\text{R}_{12}$ 、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代，所述芳基、芳烷基、杂芳基或杂芳烷基任选进一步被选自卤素、羟基的一个或多个基团取代；

R_{11} 和 R_{12} 各自独立地选自氢、卤素、羟基、烷基、烷氧基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，其中所述烷基、烷氧基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、羟基、烷基、 $-\text{OR}^d$ 、 $-\text{N}(\text{R}^c)\text{C}(\text{O})\text{R}^d$ 、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

R^a 和 R^b 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

或者 R^a 和 R^b 与他们连接的原子一起形成杂环基，所述杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、氧代基、羟基、巯基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

R^c 和 R^d 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

m 选自 0 至 6 的整数；

q 选自 0 至 6 的整数。

5. 根据权利要求 1 或 2 所述的式 (I) 所示的化合物，

其中，

R_4 、 R_5 和 R_6 其中之一为氢，其余两者与所连接的碳原子一起形成环烷基或杂环基，所述环烷基或杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

R_{11} 和 R_{12} 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，其中所述烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、 $-\text{NR}^a\text{R}^b$ 、 $-\text{OR}^d$ 、

$-N(R^c)C(O)R^d$ 、 $-C(O)N(R^a)(R^b)$ 、 $-N(R^c)S(O)_pR^d$ 、 $-S(O)_pN(R^a)(R^b)$ 、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、羟基芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

R^a 和 R^b 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

或者 R^a 和 R^b 与他们连接的原子一起形成杂环基，所述杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、氧代基、羟基、巯基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

R^c 和 R^d 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

p 选自 0、1 或 2。

6. 根据权利要求 5 所述的式 (I) 所示的化合物，

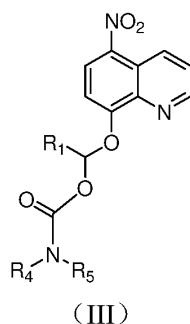
其中，

R_4 、 R_5 和 R_6 其中之一为氢，其余两者与所连接的碳原子一起形成环烷基或杂环基，所述环烷基或杂环基任选进一步被选自 $-C(O)R_{11}$ 、 $-C(O)OR_{12}$ 的一个或多个基团取代；

R_{11} 和 R_{12} 各自独立地选自氢、卤素、羟基、烷基、烷氧基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，其中所述烷基、烷氧基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、羟基、烷基、 $-OR^d$ 、 $-N(R^c)C(O)R^d$ 、芳基、羟基芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

R^c 和 R^d 各自独立地选自氢、烷基、烷氧基、芳基、杂芳基，其中所述烷基、烷氧基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代。

7. 根据权利要求 1 所述的式 (I) 所示的化合物，其为下式 (III) 所示的化合物，



其中,

R_1 选自氢或 C_{1-6} 烷基;

R_4 和 R_5 各自独立地选自氢、卤素、烷基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基、 $-OR_{12}$ 、 $-SR_{12}$ 、 $-C(O)R_{11}$ 、 $-C(O)OR_{12}$ 、 $-OC(O)R_{11}$ 、 $-NR^aR^b$ 、 $-N(R^c)C(O)R^d$ 、 $-C(O)N(R^a)(R^b)$ 、 $-N(R^c)S(O)_pR^d$ 、 $-S(O)_pN(R^a)(R^b)$ 、 $-O(CH_2)_mO(CH_2)_qR_{12}$ 、 $-N(R^c)C(O)-(CH)_m-N(R^c)C(O)R^d$, 其中所述烷基、环烷基、杂环基、芳基、或杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、 OR_{12} 、 SR_{12} 、 NR^aR^b 、 $-C(O)R_{11}$ 、 $-C(O)OR_{12}$ 、 $-O(O)CR_{11}$ 、 $-(CH)_m-OC(O)R_{11}$ 、环烷基、杂环基、芳基、芳烷基、杂芳基、杂芳基烷基的一个或多个基团取代, 或者

R_4 、 R_5 和 N 原子一起形成杂环基, 所述杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、 $-C(O)R_{11}$ 、 $-C(O)OR_{12}$ 、 $-O(O)CR_{11}$ 、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

R_{11} 和 R_{12} 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基, 其中所述烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、 $-NR^aR^b$ 、 $-OR^d$ 、 $-N(R^c)C(O)R^d$ 、 $-C(O)N(R^a)(R^b)$ 、 $-N(R^c)S(O)_pR^d$ 、 $-S(O)_pN(R^a)(R^b)$ 、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

R^a 和 R^b 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基, 其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

或者 R^a 和 R^b 与他们连接的原子一起形成杂环基, 所述杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、氧代基、羟基、巯基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代;

R^c 和 R^d 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基, 其中所述氨基、烷基、

烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

m 选自 0 至 6 的整数；

p 选自 0、1 或 2；

q 选自 0 至 6 的整数。

8. 根据权利要求 7 所述的式 (I) 所示的化合物，

其中，

R_4 和 R_5 各自独立地选自氢、烷基、芳基、杂芳基，其中所述烷基、芳基、或杂芳基任选进一步被选自卤素、羟基、巯基、烷基、 $-C(O)R_{11}$ 、 $-C(O)OR_{12}$ 、 $-O(O)CR_{11}$ 、 $-(CH)_m-OC(O)R_{11}$ 、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

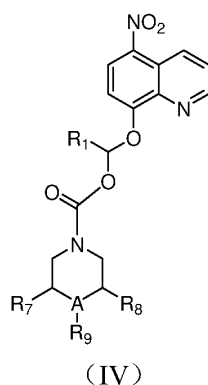
R_{11} 和 R_{12} 各自独立地选自氢、烷基，其中所述烷基任选进一步被选自卤素、 $-OR^d$ 、 $-N(R^c)C(O)R^d$ 的一个或多个基团取代；

R^c 和 R^d 各自独立地选自氢、烷基、芳基、杂芳基，其中所述烷基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

m 选自 0 至 6 的整数；

p 选自 0、1 或 2。

9. 根据权利要求 1 所述的式 (I) 所示的化合物，其为下式 (IV) 所示的化合物，



其中，

R_1 选自氢或 C_{1-6} 烷基；

A 选自 C、O 或 N；

R_7 和 R_8 各自独立地选自氢、卤素、羟基、烷基、烷氧基、卤代烷基、卤代烷氧基；

R_9 选自氢、卤素、氨基、羟基、巯基、烷基、烷氧基、 $-C(O)R_{11}$ 、 $-C(O)OR_{12}$ 、 $-OC(O)R_{11}$ 、环烷基、杂环基；

R_{11} 和 R_{12} 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，其中所述烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、 $-NR^aR^b$ 、 $-OR^d$ 、 $-N(R^c)C(O)R^d$ 、 $-C(O)N(R^a)(R^b)$ 、 $-N(R^c)S(O)_pR^d$ 、 $-S(O)_pN(R^a)(R^b)$ 、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

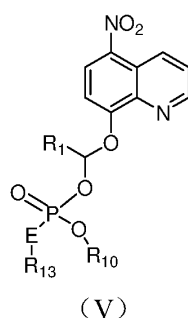
R^a 和 R^b 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

或者 R^a 和 R^b 与他们连接的原子一起形成杂环基，所述杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、氧代基、羟基、巯基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

R^c 和 R^d 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

p 选自 0、1 或 2。

10. 根据权利要求 1 所述的式 (I) 所示的化合物，其为下式 (V) 所示的化合物，



其中，

E 选自 O 或 NR_{14} ；

R_{10} 、 R_{13} 、 R_{14} 各自独立地选自氢、 C_{1-6} 烷基、或芳基，所述 C_{1-6} 烷基或芳基任选进一步被选自卤素、羟基、巯基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、环烷基、杂环

基、芳基、芳基烷基、杂芳基、杂芳基烷基、 $-\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{COR}_{11}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_{11}$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{OR}_{12}$ 的一个或多个取代基取代；

R_{11} 和 R_{12} 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，其中所述烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、 $-\text{NR}^a\text{R}^b$ 、 $-\text{OR}^d$ 、 $-\text{N}(\text{R}^c)\text{C}(\text{O})\text{R}^d$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^a)(\text{R}^b)$ 、 $-\text{N}(\text{R}^c)\text{S}(\text{O})_p\text{R}^d$ 、 $-\text{S}(\text{O})_p\text{N}(\text{R}^a)(\text{R}^b)$ 、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

R^a 和 R^b 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

或者 R^a 和 R^b 与他们连接的原子一起形成杂环基，所述杂环基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、氧代基、羟基、巯基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

R^c 和 R^d 各自独立地选自氢、卤素、羟基、氰基、氨基、羧基、酯基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基，其中所述氨基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、烯基、炔基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代；

p 选自 0、1 或 2。

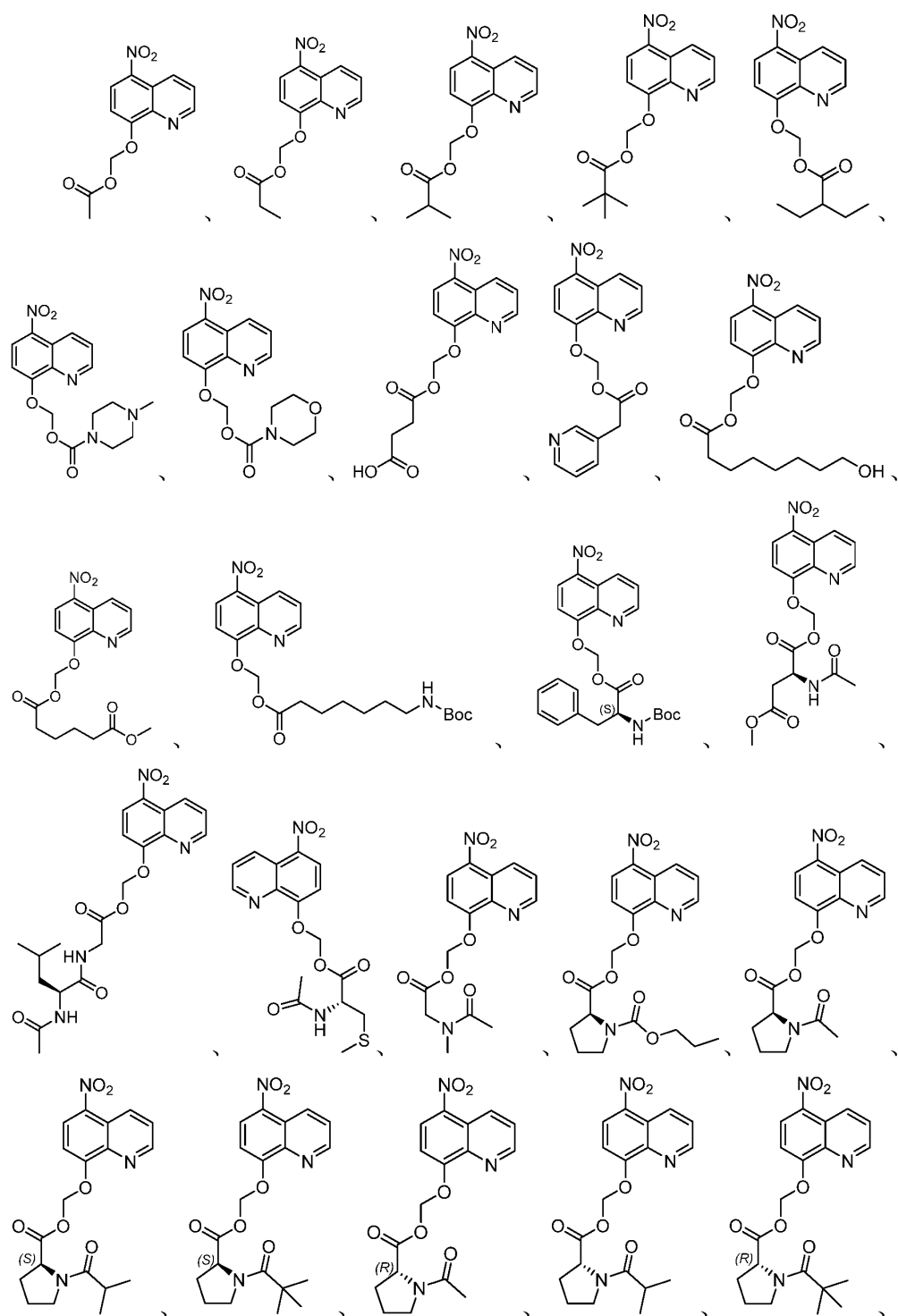
11. 根据权利要求 10 所述的式 (I) 所示的化合物，

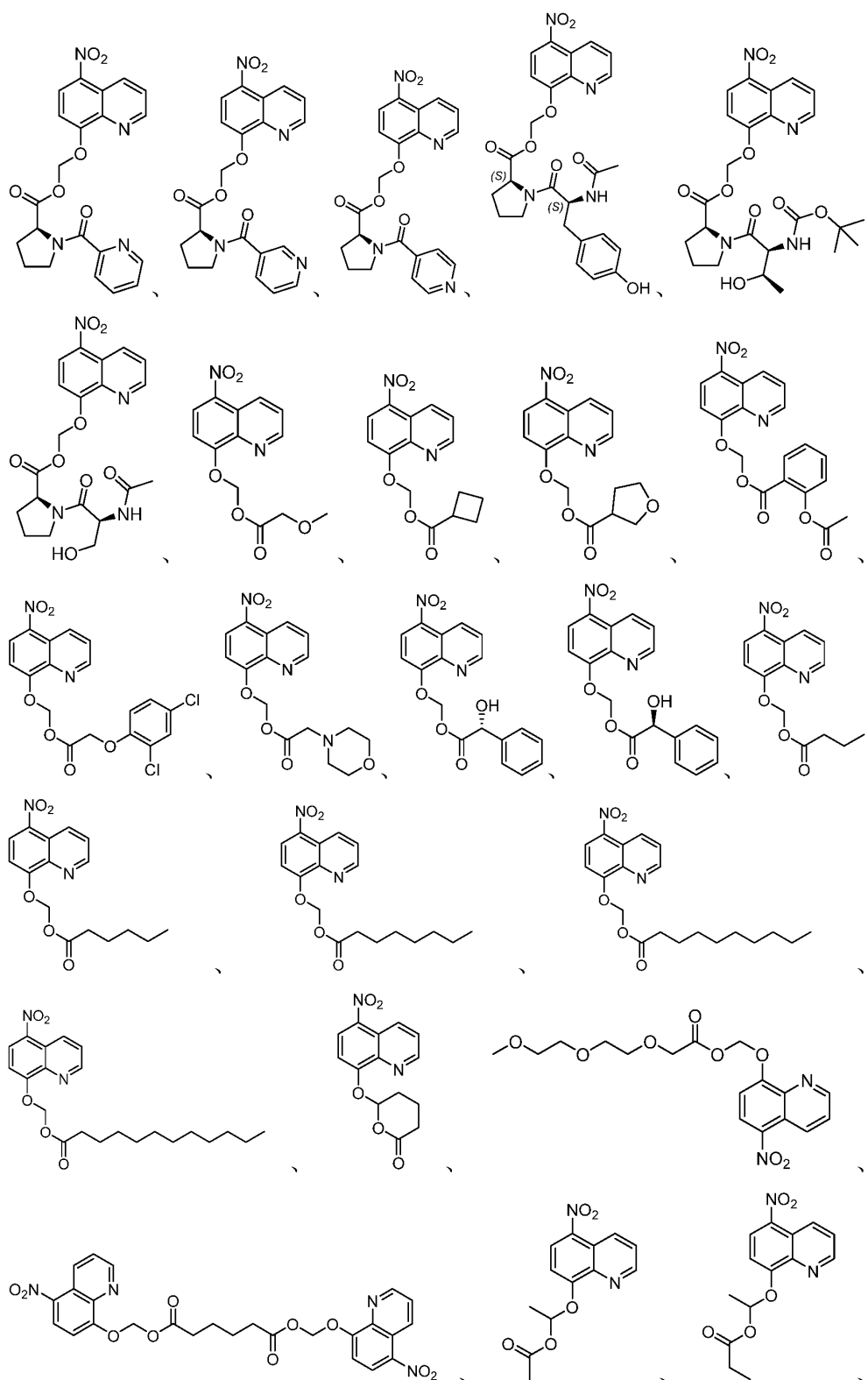
其中，

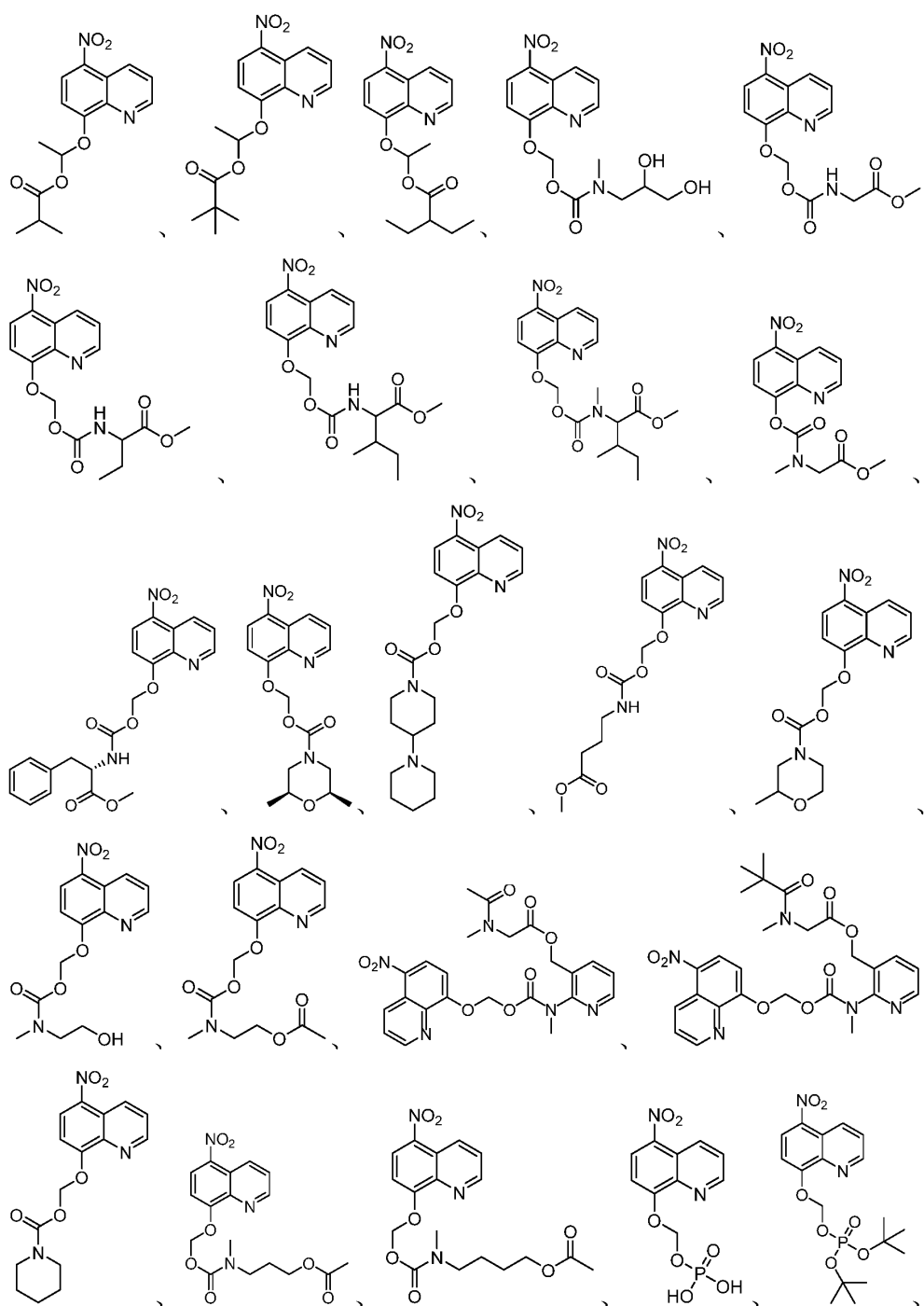
R_{10} 、 R_{13} 、 R_{14} 各自独立地选自氢或 C_{1-6} 烷基，所述 C_{1-6} 烷基任选进一步被选自卤素、羟基、巯基、烷基、烷氧基、芳基、杂芳基、 $-\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{COR}_{11}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}_{12}$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{OR}_{11}$ 的一个或多个取代基取代；

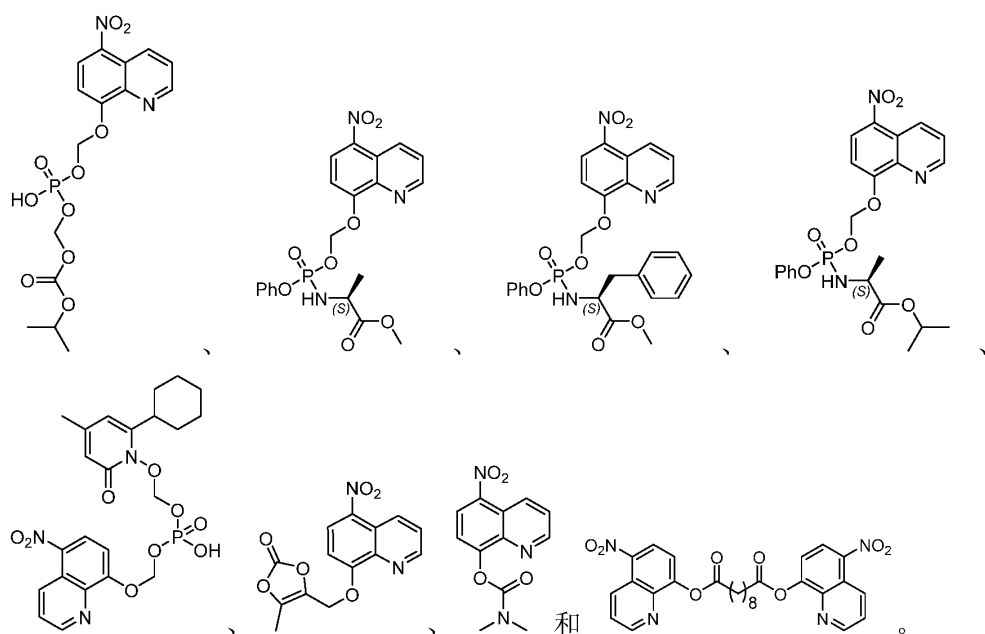
R_{11} 和 R_{12} 各自独立地选自烷基、芳基、杂芳基，其中所述烷基、芳基和杂芳基任选进一步被选自卤素、氨基、硝基、氰基、羟基、巯基、羧基、酯基、氧代基、烷基、烷氧基、环烷基、杂环基、芳基、杂芳基的一个或多个基团取代。

12. 根据权利要求 1 至 10 中任一项所述的式 (I) 所示的化合物，其中所述化合物选自：

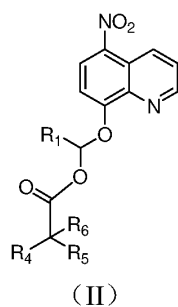




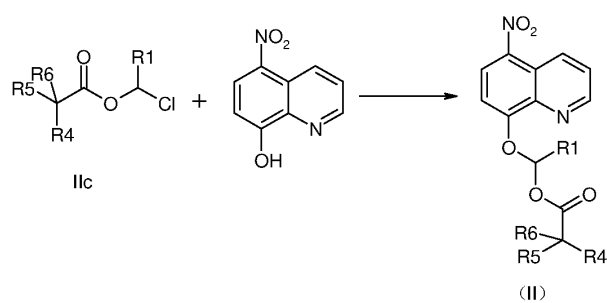




13. 一种用于制备式 (II) 所示的化合物或其内消旋体、外消旋体、对映异构体、非对映异构体、或其混合物形式, 或其药学上可接受的盐的方法,



其包括以下步骤:

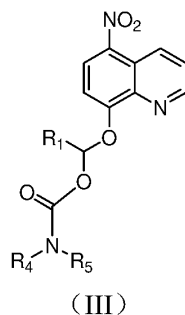


将化合物 IIc 与硝羟喹啉在溶剂中, 在碱的存在下发生亲核反应, 得到通式 (II) 所示的化合物;

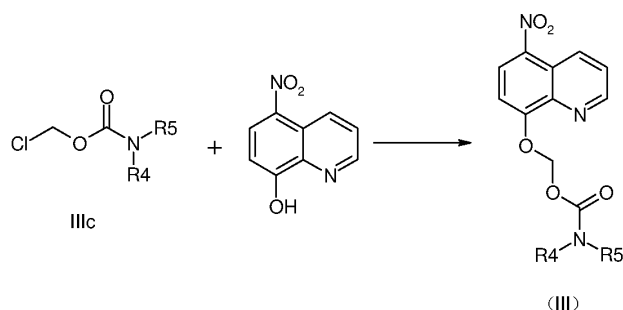
其中所述碱优选碳酸钾、碳酸钠、碳酸氢钾、碳酸氢钠、三乙胺、吡啶; 所述溶剂优选二氯甲烷、N,N-二甲基甲酰胺、四氢呋喃、叔丁醇甲醚;

R₁、R₄、R₅ 和 R₆ 如权利要求 2 中所定义。

14. 一种用于制备式 (III) 所示的化合物或其内消旋体、外消旋体、对映异构体、非对映异构体、或其混合物形式, 或其药学上可接受的盐的方法,



其包括以下步骤:

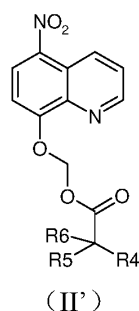


将化合物 IIIc 与硝羟喹啉在溶剂中, 在碱的存在下发生亲核反应, 得到通式 (III) 所示的化合物;

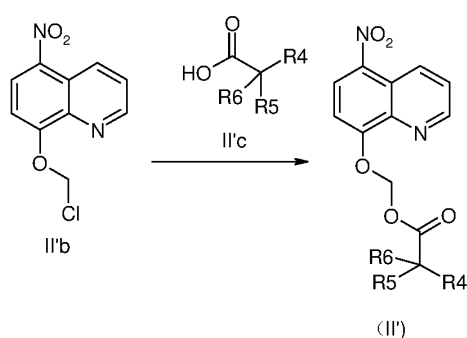
其中所述碱优选碳酸钾、碳酸钠、碳酸氢钾、碳酸氢钠、三乙胺、吡啶; 所述溶剂优选二氯甲烷、N,N-二甲基甲酰胺、四氢呋喃、叔丁醇甲醚;

R₄ 和 R₅ 如权利要求 7 中所定义。

15. 一种用于制备式 (II') 所示的化合物或其内消旋体、外消旋体、对映异构体、非对映异构体、或其混合物形式, 或其药学上可接受的盐的方法:



(II') 其包括以下步骤:

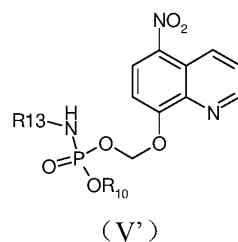


将化合物 II'b 与化合物 II'c 在碱的存在下在溶剂中发生亲核反应,得到式(II')的化合物;

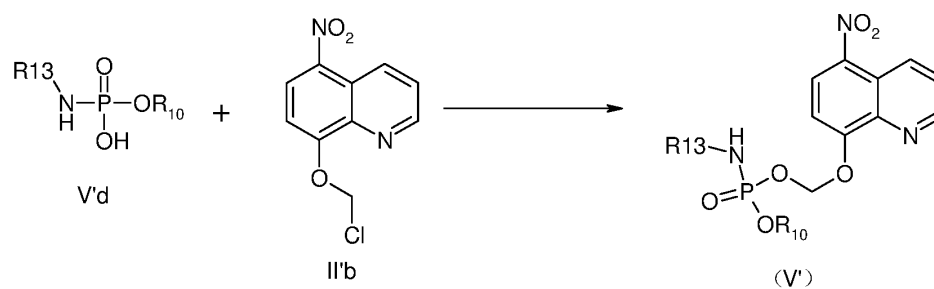
其中所述碱优选碳酸钾、碳酸钠、碳酸氢钾、碳酸氢钠、三乙胺、吡啶;所述溶剂优选二氯甲烷、N,N-二甲基甲酰胺、四氢呋喃和叔丁醇甲醚;

R₄、R₅ 和 R₆ 如权利要求 2 中所定义。

16. 一种用于制备式 (V') 所示的化合物或其内消旋体、外消旋体、对映异构体、非对映异构体、或其混合物形式,或其药学上可接受的盐的方法:



其包括以下步骤:



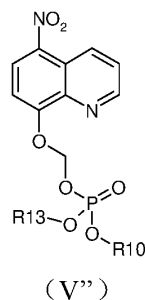
将化合物 V'd 与化合物 II'b 在碱的存在下在溶剂中发生亲核反应,得到式(V')所示的化合物;

其中所述碱优选碳酸钾、碳酸钠、碳酸氢钾、碳酸氢钠、三乙胺、吡啶,所述溶剂优选二氯甲烷、N,N-二甲基甲酰胺、四氢呋喃、叔丁醇甲醚;

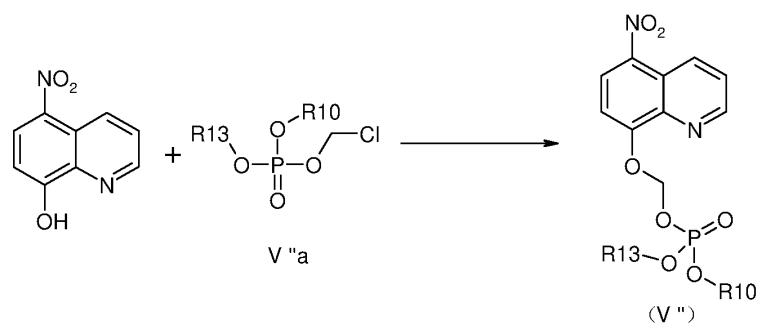
R₁₀ 和 R₁₃ 如权利要求 10 中所定义。

17. 一种用于制备式 (V'') 所示的化合物或其内消旋体、外消旋体、对映异

构体、非对映异构体、或其混合物形式，或其药学上可接受的盐的方法：



其包括以下步骤：



化合物 V''a 与硝羟喹啉在碱的存在下在溶剂中发生亲核反应，得到式 (V'') 所示的化合物；

其中所述碱优选碳酸钾、碳酸钠、碳酸氢钾、碳酸氢钠、三乙胺、吡啶，所述溶剂优选二氯甲烷、N,N-二甲基甲酰胺、四氢呋喃、叔丁醇甲醚；

R₁₀ 和 R₁₃ 如权利要求 10 中所定义。

18. 一种药物组合物，其包含根据权利要求 1 至 12 中任一项所述的式 (I) 所示的化合物或其药学上可接受的盐和至少一种药学上可接受的载体。

19. 根据权利要求 1 至 12 中任一项所述的式 (I) 所示的化合物或其药学上可接受的盐或根据权利要求 18 所述的药物组合物在制备用于抗感染和抗肿瘤的药物中的用途。

20. 根据权利要求 19 所述的用途，其中所述肿瘤选自膀胱癌、前列腺癌和肾癌。