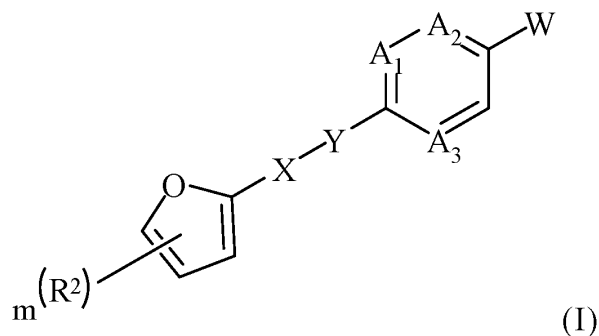
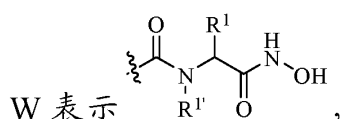


权 利 要 求

1. 通式(I)所示的化合物、其药学上可接受的盐、酯、其前体药物、其溶剂化物、氘代物或其立体异构体:



其中,



R^1 选自 $-(CH_2)_{0-4}C(R^{1a}, R^{1b})(CH_2)_{0-4}OR^3$ 、 $-(CH_2)_{0-4}C(O)NR^4R^5$ 、 $-(CH_2)_{0-4}C(R^{1a}, R^{1b})NR^4R^5$ 、 $-(CH_2)_{0-4}C(R^{1a}, R^{1b})(CH_2)_{0-4}S(O)_{0-2}R^6$ 和 $-(CH_2)_{0-4}C(R^{1a}, R^{1b})(CH_2)_{0-4}SC(O)R^7$,

其中, R^{1a} 、 R^{1b} 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 和 R^7 各自独立地选自 H、 C_{1-6} 烷基和 OH;

$R^{1'}$ 选自氢和 C_{1-6} 烷基;

A_1 、 A_2 、 A_3 各自独立地选自 CH 和杂原子;

X、Y 各自独立地选自苯环基团、3-8 元不饱和杂环基团、烯基、炔基和 $-\text{N}=\text{N}-$;

R^2 为 $-\text{B}-\text{C}-$,

B 不存在或者表示 $-(C_{1-8} \text{ 烷基})-$, 其中所述的 $-(C_{1-8} \text{ 烷基})-$ 的 0-2 个碳原子任选被 -O- 或 $-\text{NR}^8-$ 替代,

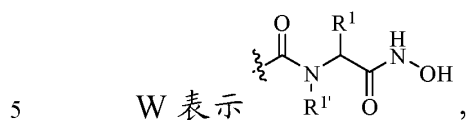
C 选自 C_{1-6} 烷基、 $-\text{OR}^9$ 、 $-\text{NR}^9\text{R}^{9'}$ 、苯基和 3-8 元饱和和/或不饱和的杂环基,

R^8 、 R^9 和 $R^{9'}$ 各自独立的选自氢原子、 C_{1-6} 烷基和 C_{3-6} 环烷基;

m 为 0、1、2 或 3。

2. 如权利要求 1 所述的化合物、其药学上可接受的盐、酯、其前体药物、其溶剂化物、氘代物或其立体异构体:

其中，



R^1 选自 $-C(R^{1a}, R^{1b})OR^3$ 和 $-C(O)NR^4R^5$, 其中, R^{1a} 、 R^{1b} 、 R^3 、 R^4 、 R^5 各自独立地选自氢原子、甲基和羟基;

R^{1'}选自氢和 C₁₋₄ 烷基;

A_1 、 A_2 、 A_3 各自独立地选自 CH 和 N;

10 X、Y 各自独立地选自苯环基团、5-6 元不饱和杂环基团、烯基、

炔基和 $-\text{N}=\text{N}-$
$$R^2 \text{ 为 } \cdot \begin{matrix} \text{---} \end{matrix} \text{B-C},$$

B 不存在或者表示-(C₁₋₄ 烷基)-,

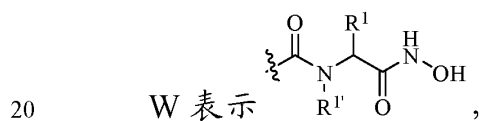
C 选自 $-\text{OR}^9$ 和 $-\text{NR}^9\text{R}^9$,

15 R^9 、 $R^{9'}$ 各自独立的选自氢原子、甲基、乙基、异丙基;

m 为 0、1 或 2。

3. 如权利要求 1 或 2 所述的化合物、其药学上可接受的盐、酯、其前体药物、其溶剂化物、氘代物或其立体异构体:

其中，



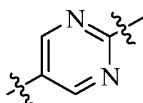
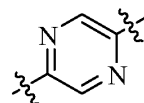
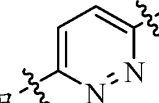
R¹选自-C(H₂CH₃)OH和-C(O)NHCH₃;

R¹选自氢、甲基、乙基;

A_1 、 A_2 、 A_3 各自独立地选自 CH 和 N;

X、Y 各自独立地选自苯环基团、吡咯环基团、咪唑环基团、吡唑
25 环基团、1,2,3-三氮唑环基团、1,2,4-三氮唑环基团、四氮唑环基团、呋

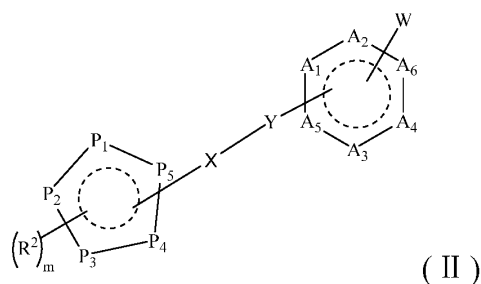
喃环基团、噁唑环基团、异噁唑环基团、1,2,4-噁二唑环基团、吡啶环

基团、烯基、炔基、 $\text{--}\overset{\text{~}}{\text{C}}\text{=N--}\overset{\text{~}}{\text{C}}\text{--}$ 、、 和  ;

R^2 为 $\text{-CH}_2\text{OH}$;

m 为 0 或 1。

- 5 4. 通式(II)所示的化合物、其药学上可接受的盐、酯、其前体药物、其溶剂化物、氘代物或其立体异构体:



其中,

- 10 W 表示 $\text{--}(\text{任选被取代基取代的 } C_{0-8} \text{ 烷基})\text{--C(O)--N(R}^1\text{)--}(\text{任选被 } R^1 \text{ 取代的 } C_{1-8} \text{ 烷基})\text{--C(O)--N(H)--OH}$;

- 15 R^1 各自独立地选自任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基、 $\text{--}(\text{任选被取代基取代的 } C_{0-8} \text{ 烷基})\text{C(O)NR}^4\text{R}^5$ 、 $\text{--}(\text{任选被取代基取代的 } C_{0-8} \text{ 烷基})\text{S(O)}_{1-2}\text{R}^3$ 和 $\text{--}(\text{任选被取代基取代的 } C_{0-8} \text{ 烷基})\text{S(O)}_{1-2}\text{NR}^4\text{R}^5$, 其中, R^3 、 R^4 和 R^5 各自独立地选自氢原子、卤素原子、任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基、
15 任选被取代基取代的 C_{2-8} 烯基和任选被取代基取代的 C_{2-8} 炔基;

- 20 R^1 选自氢原子、羟基、卤素原子、羧基、任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基、任选被取代基取代的 C_{2-8} 烯基和任选被取代基取代的 C_{2-8} 炔基, 或者 R^1 与 W 基团中的任选被取代基取代的 C_{0-8} 烷基上的碳原子相连接与 N 、 $C(O)$ 基团一起形成 5-6 元杂环基团; 优选 R^1 选自氢原子、羟基、卤素原子和 C_{1-8} 烷基, 或者 R^1 与 W 基团中的任选被取代基取代的 C_{0-8} 烷基上的碳原子相连接与 N 、 $C(O)$ 基团一起形成 5-6 元不饱和杂环基团; 更优选 R^1 选自氢原子、甲基、乙基、丙基、异丙基、丁基、仲丁基和叔丁基, 或者 R^1 与 W 基团中的任选被取代基取代的 C_{0-8} 烷基上的碳原子相连接与 N 、 $C(O)$ 基团一起形成 6 元不饱和杂环基团;

A_1 、 A_2 、 A_3 、 A_4 、 A_5 和 A_6 各自独立地选自 CR^aR^a 、 NR^c 、O 和 S;

X、Y 各自独立地选自结合键、任选被取代基取代的 5-14 元杂芳基团、任选被取代基取代的 6-14 元芳族基团、 $-(C=C)-$ 、 $-(C\equiv C)-$ 、 $=N-$ 、 $-C(O)-NR^c-$ ，其中 X 和 Y 中的至少一个不是结合键；优选的是，X 和 Y 不同时为任选被取代基取代的 6-14 元芳族基团；优选的是，当 X 和 Y 的一者表示结合键时，另一者不表示任选被取代基取代的 6-14 元芳族基团；

P_1 、 P_2 、 P_3 、 P_4 和 P_5 各自独立地选自 CR^aR^a 、 NR^c 、O 和 S；优选的是， P_1 、 P_2 、 P_3 、 P_4 和 P_5 中的至少一个是选自 NR^c 、O 和 S 的基团；更优选的是，X 基团键合于五元环的 C 原子上；

m 表示 0-4 的整数，优选为 0、1、2 或 3；

每次出现的 R^2 各自独立地表示 $\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{B}}-C$ ；

每次出现的 B 独立地表示结合键，或者各自独立地选自任选至少一个碳原子被 S、O 和 NR^c 中的至少一个基团替代和/或任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基、任选至少一个碳原子被 S、O 和 NR^c 中的至少一个基团替代和/或任选被取代基取代的 C_{2-8} 烯基和任选至少一个碳原子被 S、O 和 NR^c 中的至少一个基团替代和/或任选被取代基取代的 C_{2-8} 炔基；

每次出现的 C 独立地表示氢原子、氰基、巯基、卤素原子、羧基、硝基、任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基、任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷氧基、 $-OR^c$ 、 $-NR^cR^c$ 、任选被取代基取代的 3-12 元环烷基、任选被取代基取代的 3-12 元杂环基、任选被取代基取代的 5-14 元杂芳基和任选被取代基取代的 6-14 元芳基；

R^a 或者各自不存在，或者在每次出现时，各自独立地选自氢原子、氰基、巯基、卤素原子、羧基、硝基、 $-OR^c$ 、 $-NR^cR^c$ 、 $-N(OH)R^c$ 、 $-C(O)R^d$ 、 $-C(O)OR^c$ 、 $-C(O)NR^cR^c$ 、 $-OC(O)NR^cR^c$ 、 $-NR^cC(O)OR^c$ 、 $-NR^cC(O)R^d$ 、 $-S(O)_{1-2}-NR^cR^c$ 、 $-S(O)_{1-2}R^d$ 、 $-NR^cS(O)_{1-2}R^d$ 、 $-S(O)_{1-2}-OR^c$ 、任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基、 $-($ 任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基 $)OR^c$ 、 $-($ 任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基 $)NR^cR^c$ 、任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷氧基、任选被取代基取代的 C_{2-8} 烯基、任选被取代基取代的 C_{2-8} 炔基、任选被取代基取代的 3-12 元环烷基、任选被取代基取代的 3-12 元杂环基、任选被取代基取代的 6-14 元芳基和任选被取代基取代的 5-14 元杂芳基；

R^c 或者各自不存在, 或者在每次出现时, 各自独立地选自氢原子、卤素原子、羧基、 $-C(O)R^d$ 、 $-C(O)OR^b$ 、 $-C(O)NR^bR^b$ 、 $-S(O)_{1-2}-NR^bR^b$ 、 $-S(O)_{1-2}R^d$ 、 $-S(O)_{1-2}-OR^b$ 、任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基、-(任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基) OR^b 、-(任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基) NR^bR^b 、任
 5 选被取代基取代的 C_{2-8} 烯基、任选被取代基取代的 C_{2-8} 炔基、任选被取代基取代的 3-12 元环烷基、任选被取代基取代的 3-12 元杂环基、任选被取代基取代的 6-14 元芳基和任选被取代基取代的 5-14 元杂芳基; 或者两个 R^c 连接于同一原子的情况下, 两个 R^c 与所连接的原子一起形成任选被取代基取代的 3-12 元杂环;

10 R^b 在每次出现时, 各自独立地选自氢原子、卤素原子、羧基、磺酸基、任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基、任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基磺酰基、任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基亚磺酰基、任选被取代基取代的 3-12 元环烷基、任选被取代基取代的 3-12 元杂环基、任选被取代基取代的 6-14 元芳基和任选被取代基取代的 5-14 元杂芳基; 或者两个
 15 R^b 连接于同一原子的情况下, 两个 R^b 与所连接的原子一起形成任选被取代基取代的 3-12 元杂环;

R^d 在每次出现时, 各自独立地选自氢原子、羟基、巯基、卤素原子、羧基、硝基、氨基、任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基氨基、(任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基) $_2$ 氨基、磺酸基、任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基、
 20 任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷氧基、任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基磺酰基、任选被取代基取代的 C_{1-8} 烷基亚磺酰基、任选被取代基取代的 3-12 元环烷基、任选被取代基取代的 3-12 元杂环基、任选被取代基取代的 6-14 元芳基和任选被取代基取代的 5-14 元杂芳基;

所述“任选被取代基取代”中的取代基各自独立地选自: 羟基、巯基、
 25 羧基、氰基、硝基、氨基、卤素原子、磺酸基、 C_{1-8} 烷基、 C_{1-8} 烷氧基、 C_{1-8} 烷基、羟基 C_{1-8} 烷基、氨基 C_{1-8} 烷基、羧基 C_{1-8} 烷基、酯基 C_{1-8} 烷基、 C_{1-8} 烷氧基、羟基 C_{1-8} 烷氧基、氨基 C_{1-8} 烷氧基、羧基 C_{1-8} 烷氧基、 C_{1-8} 烷基 C_{1-8} 烷氧基、 C_{1-8} 烷氧基 C_{1-8} 烷氧基、酯基 C_{1-8} 烷氧基、 C_{1-8} 烷基氨基、(C_{1-8} 烷基) $_2$ 氨基、氨基 C_{1-8} 烷基氨基、(氨基 C_{1-8} 烷基) $_2$ 氨基、
 30 基、 C_{1-8} 烷基酯基、氨基羰基、 C_{1-8} 烷基氨基羰基、(C_{1-8} 烷基) $_2$ 氨基羰基、 C_{1-8} 烷基羰基、 C_{1-8} 烷基羰基氧基、 C_{1-8} 烷基羰基氨基、 C_{1-8} 烷基磺

酰氨基、卤代 C_{1-8} 烷基、卤代 C_{1-8} 烷氧基、 C_{1-8} 烷基磺酰基、 C_{1-8} 烷基亚磺酰基、 C_{1-8} 烷基硫基、3-12 元环烷基、6-14 元芳基、3-12 元杂环基、5-14 元杂芳基和氧代基，

五元环和六元环中的  表示在环中任选存在的双键；

- 5 条件是， R^1 表示被取代基取代的 C_{1-8} 烷基、且取代基含有羟基时，其中所述 C_{1-8} 烷基的每个碳原子至少携带一个氢；

R^1 表示被取代基取代的 C_{1-8} 烷基、且取代基含有羟基时，五元环不表示咪唑环基团；

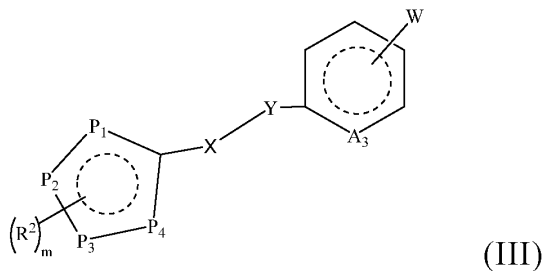
- 10 R^1 表示被取代基取代的 C_{1-8} 烷基、且取代基含有氨基、 C_{1-8} 烷基氨基或 $(C_{1-8} \text{ 烷基})_2$ 氨基时，X 和 Y 的至少一者表示任选被取代基取代的 6-14 元芳族基团；

五元环为噻吩环基团时，m 不为 0；

五元环中含有一个 N 原子时，五元环通过非 N 原子与 X 键合；

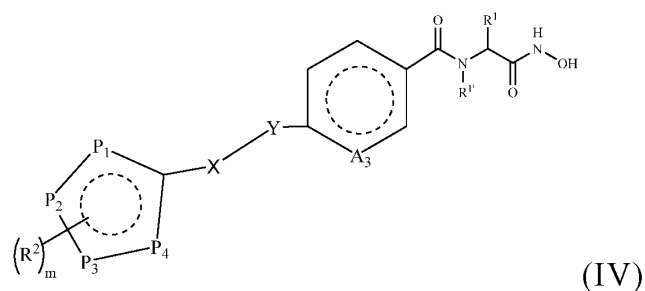
- 15 R^1 表示 -(任选被取代基取代的 C_{0-8} 烷基) $C(O)NR^4R^5$ 时，X 和 Y 两者都不是结合键，五元环表示呋喃环基团、且 m 不为 0。

5. 如权利要求 4 所述的化合物、其药学上可接受的盐、酯、其前体药物、其溶剂化物、氘代物或其立体异构体，其为下述通式(III)所示的化合物：



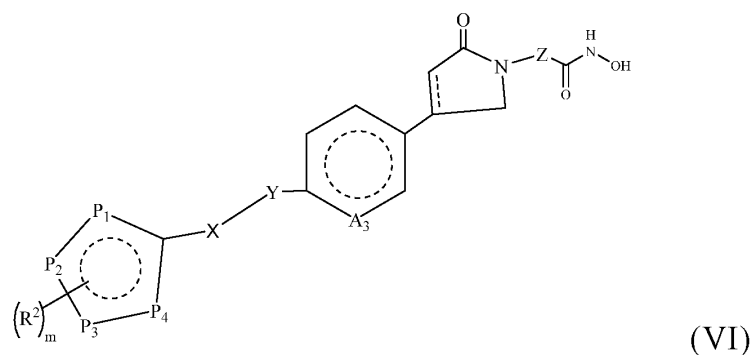
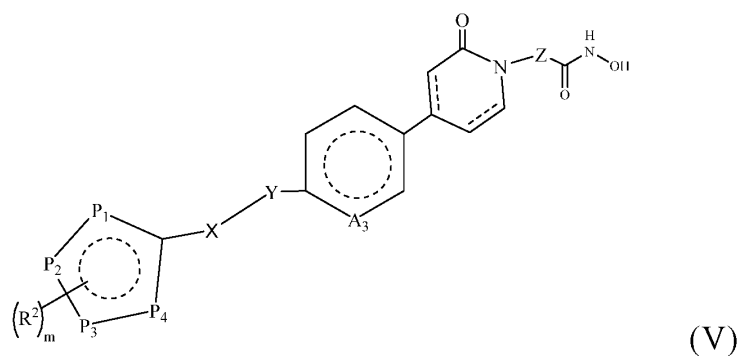
- 20 其中，各基团的定义如权利要求 4 所述。

6. 如权利要求 4-5 任一项所述的化合物、其药学上可接受的盐、酯、其前体药物、其溶剂化物、氘代物或其立体异构体，其为下述通式(IV)所示的化合物：



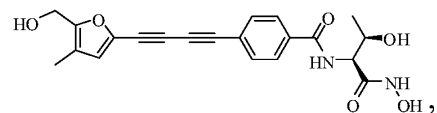
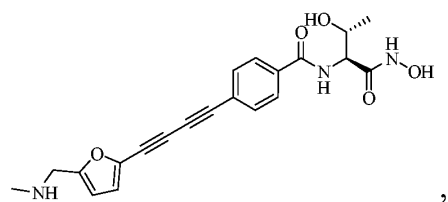
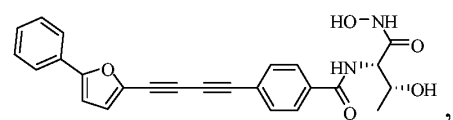
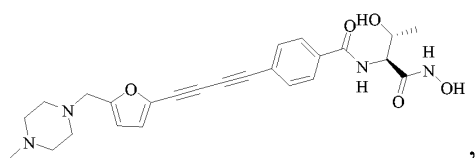
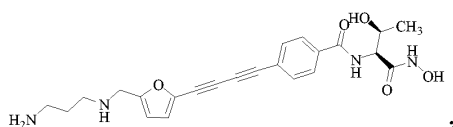
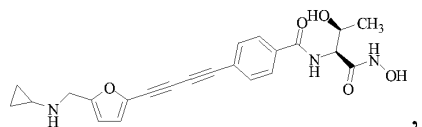
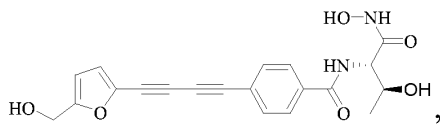
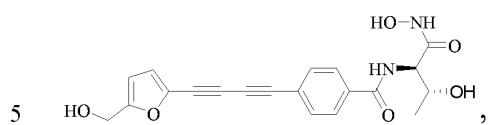
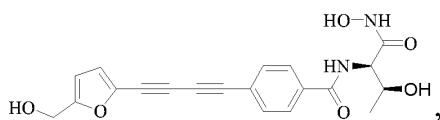
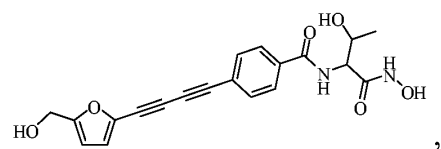
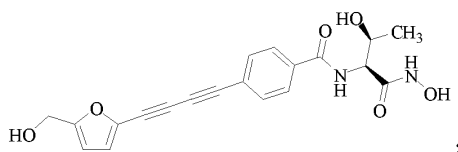
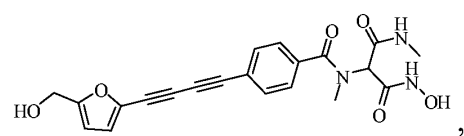
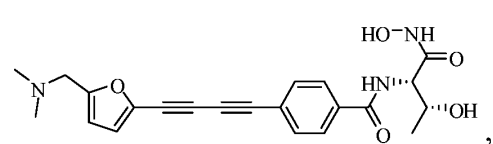
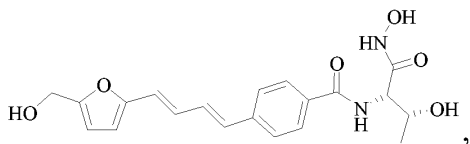
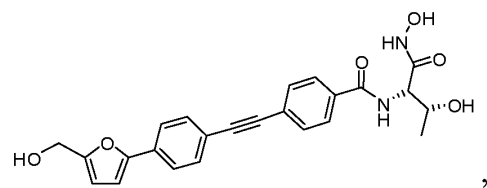
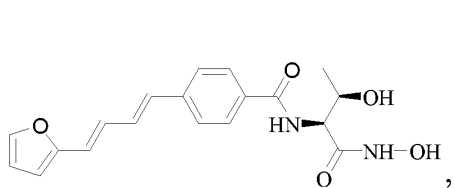
其中, 各基团的定义如权利要求 4 所述。

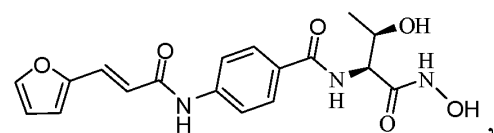
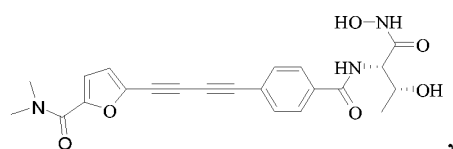
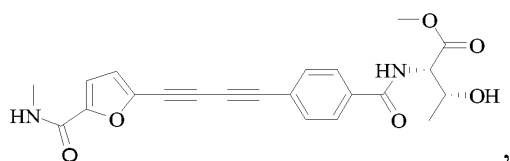
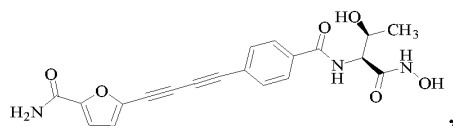
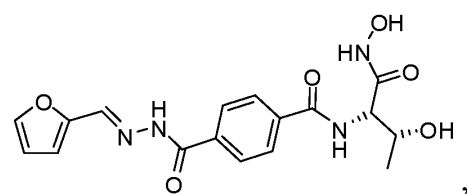
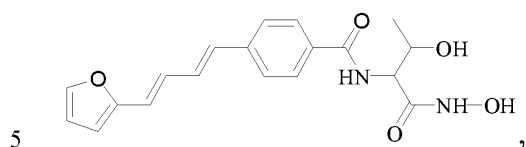
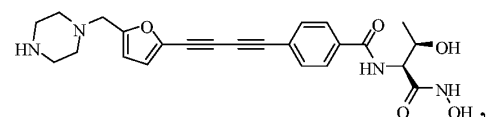
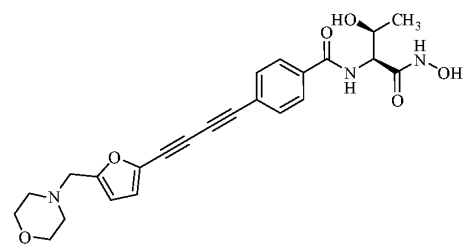
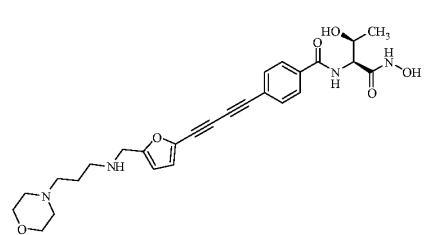
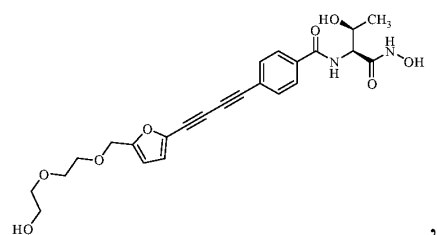
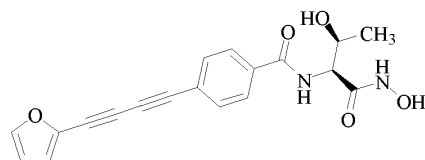
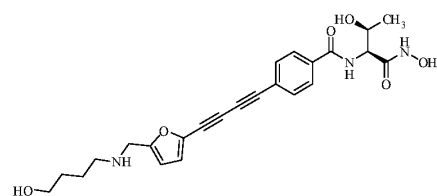
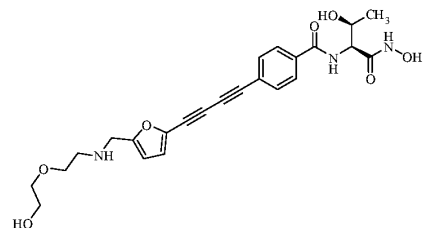
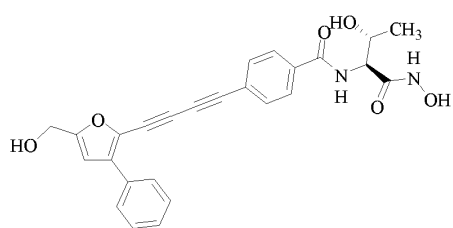
7. 如权利要求 4 所述的化合物、其药学上可接受的盐、酯、其前体药物、其溶剂化物、氘代物或其立体异构体, 其为下述通式(V)或通式(VI)所示的化合物:

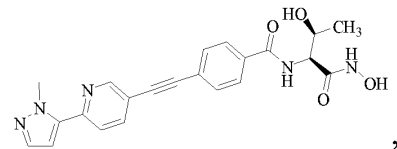
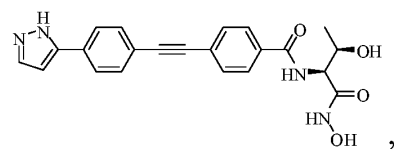
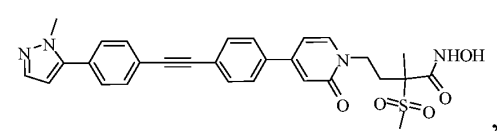
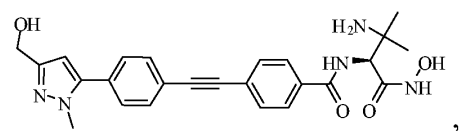
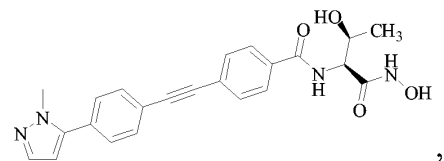
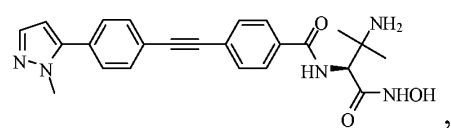
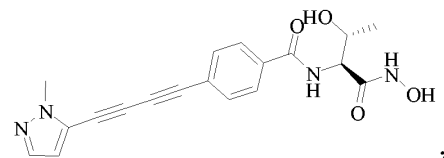
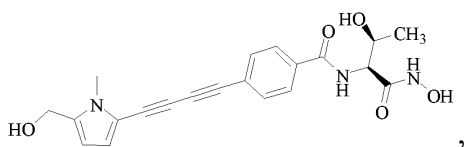
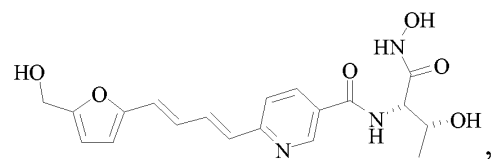
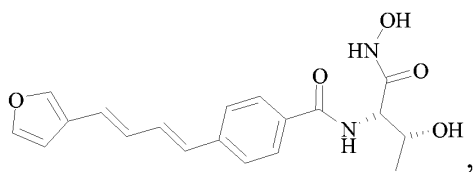


其中, 各基团的定义如权利要求 4 所述, Z 表示任选被 R¹ 取代的 C₁₋₈ 烷基, == 表示单键或双键。

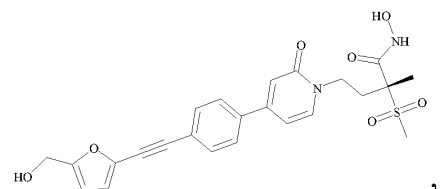
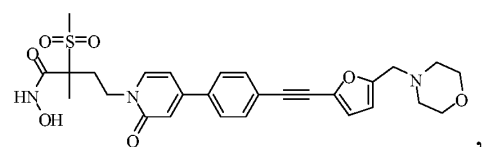
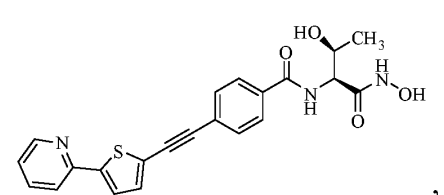
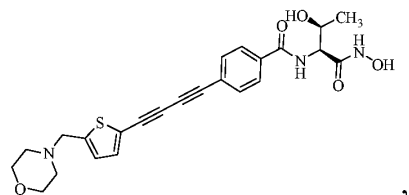
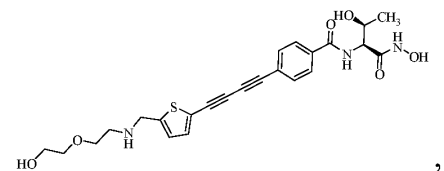
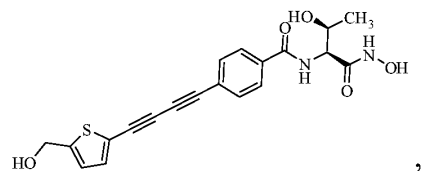
8. 如权利要求 1 或 4 所述的化合物、其药学上可接受的盐、酯、其前体药物、其溶剂化物、氘代物或其立体异构体, 其为选自以下的化合物:

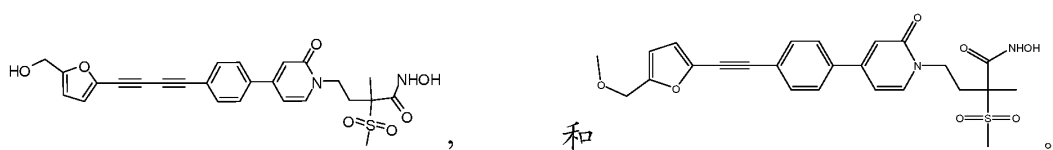






5





9. 药物组合物，其含有权利要求 1-8 任一项所述的化合物、其药学上可接受的盐、酯、其前体药物、其溶剂化物、氘代物或其立体异构体。

- 5 10. 如权利要求 1-8 所述的化合物、其药学上可接受的盐、酯、其前体药物、其溶剂化物、氘代物或其立体异构体、权利要求 9 所述的药物组合物用于治疗和/或预防感染性疾病的用途，优选的是所述感染性疾病是由革兰氏阴性菌引起的感染性疾病。