

新编中药成分学

许军 孟繁浩 杨明 主编

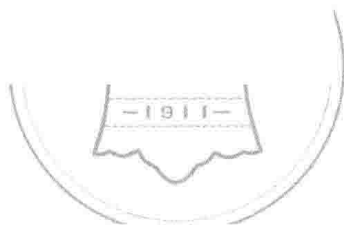


清华大学出版社



新编中药成分学

许军 孟繁浩 杨明 主编



清华大学出版社
北京

内 容 简 介

本书收集了大量苯丙素和鞣质类、苷类、黄酮类、挥发油和萜类、醌类、糖类、生物碱类中药成分资料,介绍了每种成分的名称、结构式、来源、理化性质、药理作用和主要用途。首次应用计算机软件模拟计算每种中药成分的药五原则数据及其吸收、分布、代谢、排泄、毒性数据,展示了各种中药成分与靶点蛋白作用的具体位点链接二维图。本书可供高等医药院校、科研院所、药厂的药物研发人员参考。

版权所有,侵权必究。侵权举报电话:010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

新编中药成分学/许军,孟繁浩,杨明主编. —北京:清华大学出版社,2018
ISBN 978-7-302-50907-3

I. ①新… II. ①许… ②孟… ③杨… III. ①中药化学成分—研究 IV. ①R284

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 179475 号

责任编辑:罗 健

封面设计:傅瑞学

责任校对:王淑云

责任印制:丛怀宇

出版发行:清华大学出版社

网 址: <http://www.tup.com.cn>, <http://www.wqbook.com>

地 址:北京清华大学学研大厦 A 座

邮 编:100084

社 总 机:010-62770175

邮 购:010-62786544

投稿与读者服务:010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质量反馈:010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

印 装 者:三河市铭诚印务有限公司

经 销:全国新华书店

开 本:185mm×260mm

印 张:49

插 页:2

字 数:1197 千字

版 次:2018 年 11 月第 1 版

印 次:2018 年 11 月第 1 次印刷

定 价:298.00 元

产品编号:077173-01

主编简介

许 军 教授,博士研究生导师,现任江西中医药大学药物设计合成中心主任,江西省新药评审委员,江西省人民政府评标专家,江西省药物化学精品课程负责人,全国高等中医药院校药学类“十三五”规划教材编写委员会委员,江西中医药大学药物化学、药物化学选论精品课程负责人,江西中医药大学药物化学重点学科带头人。



长期从事传统中药成分结构改造研究,近5年来主持完成各级各类课题10余项。设计合成的创新药物氯苯氧酸苯丙烯酸酯化合物已经获得3项国家专利,主持完成社会服务课题5项,取得了较好的社会效益和经济效益。主编出版研究生、本科生“十二五”“十三五”规划教材7本,发表核心期刊和SCI论文30多篇。

近5年来获得国家、省等各级各类奖项10项,是教育部高等教育药学专业实验教学指导委员会教学改革成果奖获得者,江西省高等学校科技成果奖获得者,全省优秀博士、硕士学位论文指导教师,江西省教育厅教学成果奖获得者。

孟繁浩 药学博士,现任中国医科大学药学院教授、博士研究生导师,入选辽宁省特聘教授、辽宁省百千万人才工程百人层次人才和沈阳市领军人才,兼任辽宁省药学会药物化学专业委员会副主任委员、辽宁省生物技术协会理事、辽宁省突发公共卫生事件专家咨询委员会专家等职务。主要从事药物设计、药物开发及药物构效、毒效关系等研究工作,主持国家自然科学基金面上项目3项,主持多项辽宁省科学技术计划项目,已发表学术论文近百篇,获国家新药证书10



余项,国家知识产权局专利授权4项,国家版权局计算机软件著作权登记证书3项,辽宁省科技进步二等奖3项,辽宁省医药科技进步一等奖1项。主编和副主编全国高等医药院校规划教材《药物化学》《药物设计学》10余部。

杨 明 江西中医药大学副校长、首席教授、博士生导师,享受国务院政府津贴专家,国家药典委员会委员。担任创新药物与高效节能降耗制药设备国家重点实验室常务副主任、教育部重点实验室主任、中国中药协会中药精油专业委员会理事长、中国医药工程协会中药设备工程技术专业委员会理事长、世界中医药学会联合会中药新型给药系统专业委员会主任委员、中华中医药学会中药制药工程分会副主任委员与中药制剂分会副主任委员。



担任《中草药》《中国中药杂志》《世界科学技术——中医药现代化》《中国医药工业》等杂志编委。

长期从事传统中药制药体系研究,在中药炮制、制剂、健康产品开发、制药装备等领域尤有特长,应用“辨证施治、随方炮制、以方制药”的原则,提出基于“证-方-剂对应”的中药药剂学理论,研制了系列创新药物和健康产品,创建了国家级中药炮制技术传承基地和中药制药装备研发基地。承担国家“973”计划、“863”计划、支撑计划、重大新药创制专项、行业专项等重大科研项目 30 余项,开发创新药物、健康产品、饮片新产品 30 多种,获省部级科技成果奖 10 余项,发表核心期刊论文 400 多篇。

《新编中药成分学》编委会名单

主 编 许 军 孟繁浩 杨 明

副主编 李豫园 刘燕华 陈 杰 张廷剑 梁经纬

编 委 (以汉语拼音为序)

陈 杰 董开心 黄林峰 梁 妍 梁经纬

李豫园 刘燕华 孟繁浩 孙 琦 田太平

王 琳 许 军 杨 明 杨尊华 易梦娟

张廷剑 赵 楠 钟山裕

前 言

中医药作为中华文明的杰出代表、我国独特的卫生资源、潜力巨大的经济资源、具有原创优势的科技资源、优秀的文化资源和重要的生态资源,在经济社会发展中发挥着日益重要的作用。中医药事业发展的的重要途径之一是中药创新。通过中药成分的结构改造、修饰合成创新,可以获得具有更好的活性以及较小的毒副作用的创新药物。

中药成分的研究蓬勃发展,日新月异,但是存在的问题也不少,如中药成分的活性情况不明,其结构的哪些部位有利于结构修饰,怎么提高中药成分的活性,其结构是怎么和人体靶点蛋白结合而发挥作用的,怎么通过尽可能少的实验来获得中药成分结构改造的结果,怎么有效降低中药成分改造创新的失败率等,这些都是摆在广大药物研发人员面前的难题。为了更好地发挥中医药特色优势,利用现代科学技术,加快中医药自主创新发展的步伐,推动中医药现代化,我们编写了本书。

本书收集了大量苯丙素和鞣质类、苷类、黄酮类、挥发油和萜类、醌类、糖类、生物碱类中药成分资料,介绍了每种成分的名称、结构式、来源、理化性质、药理或临床作用和主要用途。首次应用计算机软件模拟计算每种中药成分的药五原则数据及其吸收、分布、代谢、排泄、毒性数据,并根据各种中药成分的药理作用,将其与相关靶点蛋白进行分子对接,对于作用机理尚不明确成分,根据报道过的该成分的药理作用,尝试使其与相关靶点蛋白对接,并展示其与蛋白质作用的具体位点的链接二维图。

本书可供从事中药成分化合物的药理活性位点及其结构改造与修饰的研发人员参考,可帮助研发人员在研究前对大量的中药成分化合物进行虚拟筛选,节约研发成本,加快研发速度,为研发人员获得自主创新药物提供研究基础,为广大药物研发人员提供便利。

由于编者水平所限,疏漏和不妥之处在所难免,敬请广大读者和同行专家批评指正。

作 者

2018年3月

凡 例

一、类药五原则(rule of five) ①相对分子质量小于 500；②脂水分配系数小于 5；③可旋转键数不超过 10；④氢键受体数小于 10；⑤氢键给体数小于 5。

二、在药代动力学名词 ADMET 中：A(absorption)是指药物在体内吸收的过程；D(distribution)是指药物吸收后通过细胞膜向各组织、器官或者体液转运的过程；M(metabolism)是指药物在体内受酶系统或者肠道菌群作用而发生结构转化的过程；E(excretion)是指药物以原型或者代谢产物的形式排出体外的过程；T(toxicity)是指药物对机体的毒性。ADMET 研究是指对药物的吸收、分布、代谢、排泄和毒性进行全面研究。

三、25℃溶解度水平(aqueous solubility level)

0	非常低(extremely low)
1	很低但能溶(very low, but possible)
2	低(low)
3	溶解性好(good)
4	最佳溶解度(optimal)
5	极易溶(too soluble)

四、血脑屏障通透性水平(blood brain barrier penetration level)

0	血脑屏障通透性非常高(very high)
1	血脑屏障通透性高(high)
2	血脑屏障通透性中等(medium)
3	血脑屏障通透性低(low)
4	无通透性(undefined)
5	分子具有未知的 AlogP98 值

五、人类肠道吸收水平(human intestinal absorption level)

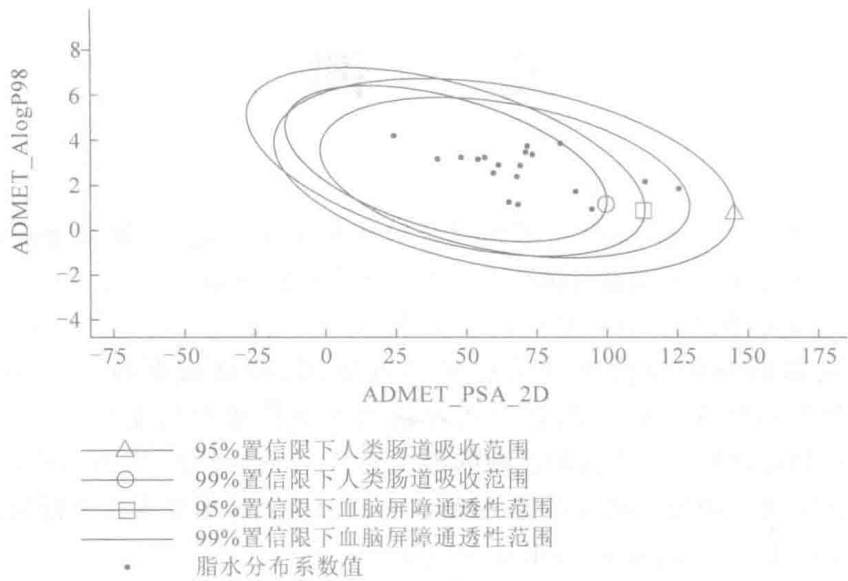
0	吸收性很好(good)
1	吸收性比较好(moderate)
2	吸收性比较差(poor)
3	吸收性非常差(very poor)

六、马氏距离(Mahalanobis distance)是指数据的协方差距离,是一种有效地计算两个未知样本集的相似度的方法。与欧氏距离不同的是,它考虑各种特性之间的联系。马氏距离的值越大,其预测的可信度越低。

七、药物吸收范围图

药物吸收范围图可用于预测化合物口服吸收后的肠道吸收状况以及药物经口服后通过

血脑屏障的难易程度。



八、致突变性概率数值(mutagenicity)

0~0.3	低致突变性
0.3~0.7	不明确
0.7~1	高致突变性

九、好氧生物降解能力概率数值(aerobic biodegradability)

0~0.3	生物降解能力低
0.3~0.7	不明确
0.7~1	生物降解能力高

十、潜在发育毒性概率数值(developmental toxicity potential)

0~0.3	潜在发育毒性低
0.3~0.7	不明确
0.7~1	潜在发育毒性高

十一、皮肤刺激性概率数值(skin irritancy)

0~0.3	不易引起皮肤刺激
0.3~0.7	不确定
0.7~1	容易引起皮肤刺激

十二、致癌性概率数值(carcinogenicity)

0~0.3	低致癌性
0.3~0.7	不明确的
0.7~1	高致癌性

- 十三、半数致死量(lethal dose 50%, LD₅₀) 能够引起一半试验动物死亡的药物剂量。
- 十四、半数致死浓度(lethal concentration 50%, LC₅₀)能够引起一半受试动物死亡的毒物浓度。
- 十五、在药理模型数据中,单位为 g/(m³ · h)、mg/(m³ · h)、μg/(m³ · h)、pg/(m³ · h)。
- 十六、NTP 全称为美国毒理学计划(National Toxicology Program)。该计划于 1979 年 11 月由美国卫生、教育和福利部组织美国癌症研究院、美国环境卫生科学研究所、美国毒理学研究中心和美国职业安全与健康研究所制订。该计划的宗旨是为人们提供不受环境中化学物质损伤的科学研究资料。该计划对啮齿动物致癌性测试有统一的严格的要求。分别采用高、中、低剂量对雄性大鼠、雌性大鼠、雄性小鼠、雌性小鼠进行实验,对实验结果的质量控制比较严格,经过多层次的独立评审,实验结论比较可靠,可作为比较研究的基础。
- 十七、化合物与蛋白质作用的二维图,以图 1.64 菊苣酸与透明质酸酶作用的二维图为例。

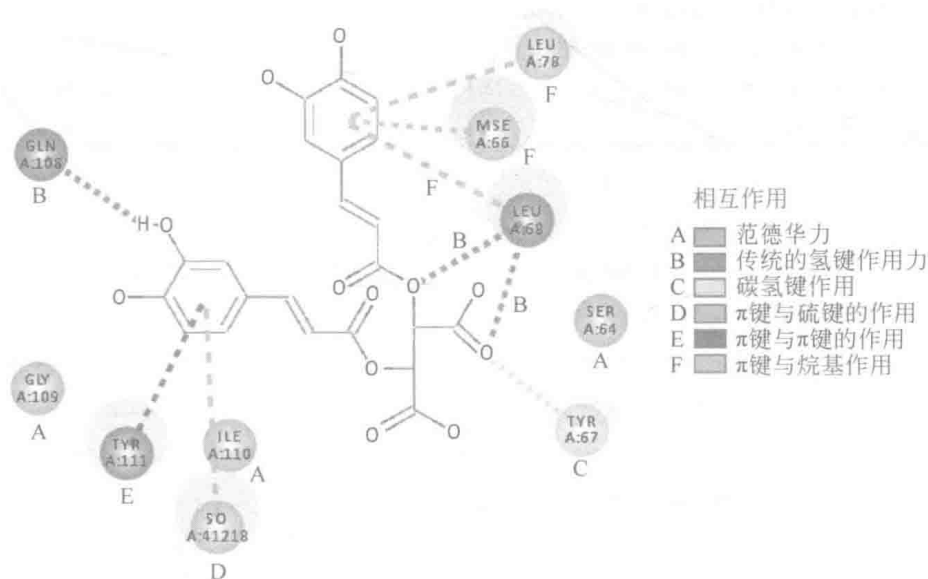


图 1.64 菊苣酸与透明质酸酶作用的二维图

图 1.64 显示化合物结构与受体蛋白和氨基酸存在非键作用,连线部分表示较为重要的作用力。通过该图可观察该化合物与蛋白质相互作用,可获得蛋白质与该化合物结合的位点数、结合位置、作用力类型。圆圈中大多数为蛋白质中的氨基酸,20 种人体必需氨基酸的缩写为:丙氨酸(Ala)、缬氨酸(Val)、亮氨酸(Leu)、异亮氨酸(Ile)、脯氨酸(Pro)、苯丙氨酸(Phe)、色氨酸(Trp)、蛋氨酸(Met)、甘氨酸(Gly)、丝氨酸(Ser)、苏氨酸(Thr)、半胱氨酸(Cys)、酪氨酸(Tyr)、天冬酰胺(Asn)、谷氨酰胺(Gln)、赖氨酸(Lys)、精氨酸(Arg)、组氨酸(His)、天冬氨酸(Asp)、谷氨酸(Glu)。

图 1.64 圆圈旁边标 A 表示该靶点蛋白与化合物之间存在范德华力作用,圆圈旁边标 B 表示该靶点蛋白与化合物之间存在传统的氢键作用力,圆圈旁边标 C 表示该靶点蛋白与化合物之间存在碳氢键作用,圆圈旁边标 D 表示该靶点蛋白与化合物之间存在 π 键与硫键的作用,圆圈旁边标 E 表示该靶点蛋白与化合物之间存在 π 键与 π 键的作用,圆圈旁边标 F 表示该靶点蛋白与化合物之间存在 π 键与烷基的作用。

十八、文中英文缩写介绍

简 称	全 称	中 文
AS	ankylosing spondylitis	强直性脊椎炎
COX-2	cyclooxygenase-2	环加氧酶-2
NTP	National Toxicology Program	美国毒理学计划
TRPV1	transient receptor potential vanilloid 1	辣椒素受体
ACE	angiotensin converting enzyme	血管紧张素转换酶
SOD	superoxide dismutase	超氧化物歧化酶
GABAA	γ -aminobutyric acid type A	γ -氨基丁酸 A 型受体
PAF	platelet activating factor	血小板活化因子
VKORC1	vitamin K epoxide reductase complex(VKORC) subunit 1	维生素 K 还原酶复合体 亚单位 1
COMT	catechol-O-methyltransferase	儿茶酚氧位甲基转移酶
NMDA	N-methyl-D-aspartic acid receptor	N-甲基-D-天冬氨酸受体
EGFR	epidermal growth factor receptor	表皮生长因子受体
MAO	monoamine oxidase	单胺氧化酶
MT	melatonin	褪黑素受体

目 录

第 1 章 苯丙素和鞣质类..... 1

阿魏酸.....	1
爱得尔亭.....	3
安五脂素.....	5
白花前胡丙素.....	7
苯甲酰基戈米辛 O	9
萆澄茄素	11
表鬼臼毒素	13
滨蒿内酯	15
补骨脂素	17
丹酚酸 A	19
丹酚酸 C	21
丹参素	23
丹参酸乙	25
当归内酯	27
丁香酚	29
丁香脂素	31
东莨菪苷	33
对羟基桂皮酸	35
佛手苷内酯	37
盖尔格拉文	39
戈米辛 D	41
戈米辛 O	43
和厚朴酚	45
鹤庆五味子癸素	47
鹤庆五味子辛素	49
花椒毒酚	51
芥子酸	53
旌节花素 A	55
九里香内酯	57
菊苣酸	59

咖啡酸	61
苦鬼臼毒素	63
老鹳草素	65
联苯双酯	67
莨菪亭	69
亮菌甲素	71
猫眼草素	73
美商陆酚 A	75
迷迭香酸	77
木麻黄鞣宁	79
逆没食子酸	81
柠檬油素	83
牛蒡酚 A	85
甲基牛蒡子素	87
欧前胡内酯	89
蟛蜞菊内酯	91
秦皮乙素	93
百花前胡香豆精 I	95
秦皮甲素	97
秦皮乙素	99
维司那定.....	101
去甲二氢愈创木酸.....	103
去氢鬼臼脂素.....	105
肉豆蔻木脂素.....	107
肉桂醇.....	109
7-羟基香豆素	111
山柰酚.....	113
山茱萸素 C	115
双瑞香内酯.....	117
双香豆素.....	119
水飞蓟宾.....	121
松脂醇二葡萄糖苷.....	123

台湾脂素 A	125
台湾脂素 C	127
台湾脂素 E	129
无色飞燕草苷元	131
无色矢车菊苷元	133
五味子丙素	135
五味子醇甲	137
五味子甲素	139
五味子乙素	141
五味子酯甲	143
五味子酯乙	145
西瑞香素	147
细辛脂素	149
仙鹤草内酯	151
香柑内酯	153
邪蒿内酯	155
辛夷脂素	157
新生霉素	159
血竭宁	161
岩白菜素	163
洋蓟素	165
叶下珠脂素	167
异补骨脂内脂	169
异甘草香豆素	171
异虎耳草素	173
异茴芹内酯	175
右旋蛇菰宁	177
异香豆素	179
榆绿木脂素 C	181
原花青定 A2	183
原花青定 B1	185
樟叶素	187
芝麻素	189
芝麻林素	191
紫花前胡素	193
紫苜蓿酚	195
木兰脂素	197
五脂素 A1	199
(+)-五味子乙素	201

珠子草素	203
(+)-表儿茶素	205
(-)-儿茶素	207
(+)-儿茶素	209
3,4-二咖啡酰奎宁酸	211
4'-去甲基表鬼臼毒素	213
4,5-二咖啡酰奎宁酸	215
5-羟基邪蒿内酯	217
7-O-9'型木脂素	219
α -失水苦鬼臼脂素	221
β -盾叶鬼臼脂素	223
γ -失水苦鬼臼脂素	225

第2章 苷类 228

白芥子苷	228
白皮杉醇葡萄糖苷	230
刺五加苷 D	232
丹皮酚苷	234
地高辛	236
毒毛旋花苷元	238
根皮苷	240
哈巴俄苷	242
管花肉苁蓉苷	244
海葱青光苷	246
何首乌苷	248
荷包花苷 A	250
黑芥子硫苷酸钾	252
红景天苷	254
虎杖苷	256
金丝桃苷	258
薤白苷 A	260
熊果苷	262
苦杏仁苷	264
连翘苷	266
芦荟素	270
铃兰苦苷	272
络石苷	274
马钱子苷	276

杧果苷·····	278	后莫弗里素·····	353
毛蕊花苷·····	280	胡麻素·····	355
牛蒡子苷·····	282	胡桃苷·····	357
秦皮苷·····	284	槲皮素·····	359
三叶苷·····	286	花旗松素·····	361
松果菊苷·····	288	槐黄烷酮 G ·····	363
土大黄苷·····	290	环桑色烯·····	365
异槲皮苷·····	292	黄芩苷·····	367
异毛蕊花糖苷·····	294	灰叶素·····	369
柚皮苷·····	296	鸡豆黄素 A ·····	371
原海葱苷 A ·····	298	金圣草素·····	373
梔子苷·····	300	狼毒素·····	375
紫丁香酚苷·····	302	勒奇黄烷酮 G ·····	377
第3章 黄酮类 ·····	305	落新妇苷·····	379
阿福豆苷·····	305	麦冬高异黄酮 A ·····	381
阿亚黄素·····	307	芒柄花素·····	383
艾黄素·····	309	毛蕊异黄酮·····	385
艾纳香素·····	311	毛叶假鹰爪素 A ·····	387
白杨黄素·····	313	绵枣儿素·····	389
宝藿苷 I ·····	315	牡荆素·····	391
草质素·····	317	木犀草苷·····	393
穿心莲黄酮苷 E ·····	319	木犀草素·····	395
刺槐双氢黄酮·····	321	漆树黄酮·····	397
粗毛淫羊藿苷·····	323	羟基鱼藤素·····	399
大波斯菊苷·····	325	芹菜素·····	401
大豆素·····	327	球松素·····	403
灯盏花素·····	329	金雀异黄酮·····	405
短叶松素·····	331	三叶豆苷·····	407
甘草西定·····	333	桑根皮醇·····	409
高良姜素·····	335	桑色素·····	411
葛根素·····	337	桑素·····	413
构酮醇·····	339	桑辛素·····	415
光甘草定·····	341	砂生槐异黄酮 A ·····	417
光甘草宁·····	343	山姜素·····	419
桂木黄素·····	345	圣草酚·····	421
汉黄芩素·····	347	鼠李柠檬素·····	423
红车轴草素·····	349	水飞蓟宾·····	425
红景天素·····	351	苏枋精·····	427
		香叶木素·····	429

小构树醇 B	431	吉马酮	505
新补骨脂异黄酮	433	甲基壬基甲酮	507
蓄苷	435	京尼平苷	509
杨梅素	437	灵芝醇 A	511
洋槐黄素	439	芦竹素	513
异杞果素	441	莽草毒素	515
淫羊藿素	443	柠檬醛	517
樱花亭	445	齐墩果酸	519
鹰嘴豆芽素	447	青蒿琥酯	521
柚木柯因	449	人参炔醇	523
鱼藤酮	451	蛇孢假壳素 A	525
毡毛美洲茶素	453	石松醇	527
紫檀素	455	松香酸	529
2,3-二氢扁柏双黄酮	457	松油烯-4-醇	531
2,3-二氢异银杏双黄酮	459	酸枣仁皂苷元	533
3-O-甲基槲皮素	461	桃叶珊瑚苷	535
5,7-二乙酰氧基黄酮	463	土荆酸丙	537
6,8-二异戊烯基金雀异黄素	465	土荆酸甲	539
6-甲氧基柚皮素	467	乌苏酸	541
8-异桑皮黄素水合物	469	去乙酰西地兰	543
第4章 挥发油和萜类	472	香茶菜甲素 A	545
桉油精	472	香茅醇	547
白桦脂酸	474	熊果酸乙酸酯	549
穿心莲内酯	476	乙酸羽扇豆醇酯	551
大戟醇	478	银杏叶内酯 A	553
大蒜素	480	银杏叶内酯 C	555
当药苦苷	482	银杏叶内酯 J	557
莪术醇	484	银杏叶内酯 M	559
甘草皂苷	486	鹰爪甲素	561
癸醛	488	羽扇豆醇	563
桂皮醛	489	郁金二酮	565
桂皮酸	491	愈创醇	567
胡薄荷酮	493	芫花酯甲	569
胡椒酮	495	圆叶泽兰苦内酯	571
花椒油素	497	泽泻醇 B	573
环黄芪醇	499	樟脑	575
鸡矢藤苷	501	紫苏醛	577
积雪草酸	503	左旋薄荷酮	579
		2,3-环氧鲨烯	581

第5章 醌类..... 584

白花丹醌.....	584
白鹤灵芝素.....	586
橙黄决明素.....	588
大黄酚.....	590
大黄素.....	592
大黄素甲醚.....	594
大黄酸.....	596
丹参酮ⅡA.....	598
甲基异茜草素.....	600
决明蒽醌.....	602
芦荟大黄素.....	603
茜草素.....	605
羟基茜草素.....	607
去氧紫草素.....	609
乙酰紫草素.....	611
翼核果素.....	613
隐丹参酮.....	615
紫草素.....	617

第6章 糖类..... 620

D-甘露糖.....	620
D-木糖.....	622
D-葡萄糖.....	623

第7章 生物碱类..... 626

阿义吗啉.....	626
阿托品.....	628
巴马汀.....	629
白屈菜碱.....	631
白叶藤碱.....	633
蝙蝠葛林.....	635
表千金藤碱.....	637
波尔定碱.....	639
臭梧桐碱.....	641
刺楸碱.....	643
刺凌德草碱.....	645
党参碱.....	647

蒂巴因.....	649
东莨菪碱.....	651
杜宾定.....	653
短颈苔碱.....	655
恩其明.....	657
二氢吴茱萸新碱.....	659
防己诺林碱.....	661
非替定碱.....	663
非洲防己碱.....	665
粉防己碱.....	667
钩藤碱.....	669
海罂粟碱.....	671
轮环藤酚碱.....	673
和乌胺.....	675
褐绿白坚木碱.....	677
厚果唐松草次碱.....	679
花椒碱.....	681
环毛穗胡椒碱.....	683
黄常山碱乙.....	685
黄小檗碱.....	687
黄小檗树碱.....	689
拟芸香定碱.....	691
金鸡宁.....	693
金链花猪屎豆碱.....	695
可待因.....	697
古柯碱.....	699
苦木酮.....	701
蓝刺头碱.....	703
利血平.....	705
莨菪碱.....	707
两面针碱.....	709
骆驼蓬酚.....	711
毛果天芥菜碱.....	713
木兰花碱.....	715
木兰箭毒碱.....	717
南天竹种碱.....	719
尿囊素.....	721
千里光菲灵碱.....	723
千里光碱.....	725

球紫堇碱.....	727	千金藤素.....	749
去甲莨菪碱.....	729	异三叶木防己碱.....	751
去水阿托品.....	731	樟柳碱.....	753
三尖杉碱.....	733	猪毛菜定碱.....	755
高三尖杉酯碱.....	735	猪毛菜酚.....	757
色胺酮.....	737	猪毛菜碱.....	759
山莨菪碱.....	739	延胡索碱甲.....	761
松叶菊碱.....	741	9-甲氧基喜树碱.....	763
唐松草舒平.....	743	10-甲氧基喜树碱.....	765
天芥菜碱.....	745	10-羟基喜树碱.....	767
喜树碱.....	747		