

# 中药成分的 吸收、分布、代谢、排泄、 毒性与药效 (上册)

ABSORPTION

DISTRIBUTION

METABOLISM

EXCRETION

TOXICITY

ACTIVITY

ABSORPTION、DISTRIBUTION、 编著 杨秀伟  
METABOLISM、EXCRETION、TOXICITY AND  
ACTIVITY OF THE CHEMICAL CONSTITUENTS  
IN TRADITIONAL CHINESE MEDICINES

中国医药科技出版社

# 中药成分的 吸收、分布、代谢、排泄、 毒性与药效（上册）

ABSORPTION

DISTRIBUTION

METABOLISM

EXCRETION

TOXICITY

ACTIVITY

ABSORPTION、DISTRIBUTION、 编著 杨秀伟  
METABOLISM、EXCRETION、TOXICITY AND  
ACTIVITY OF THE CHEMICAL CONSTITUENTS  
IN TRADITIONAL CHINESE MEDICINES

中国医药科技出版社

## 内 容 提 要

本书为上、下册，研究中药的吸收、分布、代谢、排泄、毒性与药效（ADME/Tox. Act.）过程的各种机制和理论、研究各种剂型因素和生物因素对药效的影响，对控制药物制剂的内在质量、确保最终药品的安全和有效、为新药开发和临床用药提供严格的评价指标，具有十分重要的理论意义和现实意义。基于中药的复杂性，以有效成分或有毒成分为观察指标的中药药物动力学研究和以药效或毒效为指标的中药药物动力学研究对于中医药理论的继承、现代化地研究中医药和中医药的现代化研究有着非常重要的意义。本书总结了中药成分的吸收、分布、代谢、排泄和毒性（ADME/Tox.）以及相关药效的研究成果，全书分上、下两篇。上篇为总论；下篇为各论，分八章，按中药化学成分结构类型分类，收载中药成分 475 个，全书 280 余万字。每个中药化学成分条目包括：【化学名】、【英文名】、【异名】、【结构式】、【分子式及分子量】、【来源】、【ADME/Tox.】、【生物活性】、【分析方法】、【化学结构谱学数据】、【附记】和【参考文献】等十二个部分。内容丰富、文图翔实、科学性强，可供活跃在中药现代化研究的科研工作者和广大中医药及中西医结合工作者以及相关硕士、博士研究生参考。

### 图书在版编目（CIP）数据

中药成分的吸收、分布、代谢、排泄、毒性与药效. 上册：

杨秀伟编著. —北京：中国医药科技出版社，2006.1

ISBN 7-5067-3337-4

I. 中… II. 杨… III. 中药化学成分－研究 IV. R284

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2005）第 155790 号

**美术编辑** 陈君杞

**责任校对** 张学军

**版式设计** 郭小平

**出版** 中国医药科技出版社

**地址** 北京市海淀区文慧园北路甲 22 号

**邮编** 100088

**电话** 010-62244206

**网址** www.cspyp.cn www.mpsky.com.cn

**规格** 787×1092mm<sup>1/16</sup>

**印张** 78<sup>1/4</sup>

**字数** 1820 千字

**印数** 1—3000

**版次** 2006 年 8 月第 1 版

**印次** 2006 年 8 月第 1 次印刷

**印刷** 三河富华印刷包装有限公司

**经销** 全国各地新华书店

**书号** ISBN 7-5067-3337-4/R·2767

**定价** 160.00 元

本社图书如存在印装质量问题请与本社联系调换

# 前　　言

中药作为中华民族的瑰宝，正日益得到世界的关注。中药领域作为我国少数具有国际比较优势的领域之一，正面临着新的发展机遇和来自全球化竞争的严峻挑战。如何抓住机遇、应对挑战、制定对策，推动我国中药领域健康、与时俱进、可持续性发展，提高中药领域整体素质和国际竞争力，已成为业界共同瞩目的问题。但目前中医药基础理论的研究和创新相对滞后，制约了中药优势的发挥和发展；由于缺乏具有中医药特色的研方法学体系，制约了中医药理论现代科学意义上的诠释和中药创新药物的发现。经过半个世纪的不懈努力，虽在中医药理论的继承、现代化地研究中医药和中医药的现代化研究上，国人取得了令世人瞩目的成就，但就其方法学上来说，尚未建立。借鉴现代科学技术手段，“中药化学”和“中药药理”的研究虽已有了相当的成果沉淀，但与中医药所独具的特色和优势比较还相差甚远。近年来，植物化学意义上的“中药化学”研究与中药复方化学研究、生命科学的研究的融合，使人们深刻认识到中药的体内过程（即吸收 absorption、分布 distribution、代谢 metabolism、排泄 excretion 和毒性 toxicity，简称 ADME/Tox.）研究是中医药理论的继承、现代化地研究中医药和中医药的现代化研究中不可或缺的重要组成部分。近年的研究发现单体中药化学成分的药代动力学行为受复方中共存其他成分的影响，同时由于中药的 ADME/Tox. 过程与其作用 (activity) 相联，因此，中药的 ADME/Tox. /Act. 系统性研究是非常必要的，它是中医药理论的继承、现代化地研究中医药和中医药的现代化研究的策略之一。

广义的药物代谢研究可追溯到 19 世纪上半叶，那时没有理论指导。所谓的“代谢”一词仅仅局限于药物。19 世纪下半叶，药物代谢研究有了进步，发现了许多代谢途径，并开始考虑代谢的生理学意义。Baumann 于 1876 年发现有毒的酚烃代谢可转化为无毒的酚酸苯酯，Nencki 和 Boutmy 于 1892 年通过实验证明芳香族化合物经氧化可转化为羧酸代谢产物，其毒性则大大降低。Neumeister 于 1893 年提出了“解毒 (detoxication)”的概念，Trefouel 的实验证实了磺胺的活性代谢产物和生物激活 (bioactivation)。到了 20 世纪 50 年代，正式提出了药物代谢 (drug metabolism) 的概念。其后，药物代谢的内涵和外延皆有了扩展，不仅指治疗药物，亦包括所有外源性化学物质 (xenobiotics)；研究内容亦不仅包括化学物质的生物转化 (biotransformation) 过程，还包括药

物及其代谢产物的性质和量变规律，涉及吸收、分布、代谢和排泄等过程。随着科学技术的长足进步，又有了预测药物相互作用和环境因素对药物代谢的影响以及利用这些影响提高治疗效果和用药安全性等更丰富的内容。晚近发展起来的药物动力学（pharmacokinetics）亦研究药物的吸收、分布、代谢和排泄，主要侧重于用数学模型来定量描述药物在体内的动态过程。测定体液和组织内不同时间药物浓度变化，建立浓度变化的数学表达式，进而推算出各种动力学参数。药物浓度-时间曲线反映血药浓度的变化情况和维持时间，用以判断药物的疗效和毒性，确定最小有效浓度阈、最大安全浓度阈和药物的有效作用时间。根据药物浓度-时间曲线选择合适的数学模型进行数据拟合。另一方面，同一种药物处方组成、制剂工艺和剂型等不同时药效可以相去甚远，某些制剂可能无效，而另一些可能引起中毒反应。据文献调查，中止开发的药物中40%是由于不合适的药代动力学性质造成的。而对于抗感染药物，不合适的药代动力学性质几乎是中止开发的惟一因素。了解这些性质对于药物的发现和开发非常必要。因此，研究药物的吸收、分布、代谢、排泄、毒性和药效过程的各种机制和理论、研究各种剂型因素和生物因素对药效的影响，对控制药物制剂的内在质量、确保最终药品的安全和有效、为新药开发和临床用药提供严格的评价指标，具有十分重要的理论意义和现实意义。

中药药代动力学是在西药药物动力学研究基础上发展的、以中医药基本理论为指导、用药物动力学的方法研究中药在动物或人体内的吸收、分布、代谢、排泄和毒性过程的一门新兴边缘学科，在近20年来有了长足进步，逐渐形成了有自己特色的理论研究和临床实践。主要方法包括：①以有效成分为观察指标的中药药代动力学研究：该研究方法以一种或几种药理作用明确、结构已知的有效成分作为观察指标，测定该成分在血液或其他生物组织中的浓度随时间变化的过程，求出药物动力学参数。该方法比较精确、严谨，理论上也已成熟。目前积累的许多中药成分的药物动力学研究成果是按此研究方法得到的。②以药效为指标的中药药物动力学研究：该研究方法亦称生物效应法，绝大多数中药制剂成分复杂，目前尚不能用理化分析方法测定体液浓度以了解其在体内的变化过程和规律。因此，对于有效成分复杂或不明确或无合适含量测定方法的中药材及其制剂可采用此法。生物效应法包括：①药理效应法，以药物的药理效应强度为测定指标，通过将剂量-效应关系和时间-效应关系转换为时间-剂量关系，从而求出药物动力学参数。药理效应法以能定量并可逆地反映出药物在体内的动态变化药理效应为指标，不需要考虑中药复杂的化学成分，并且其测定的药物动力学参数对临床更具有参考价值。

考价值；②药物累积法，又称毒理效应法，其主要利用动物急性累积死亡率来求算药物动力学参数。该法具有非特异性，只要能致动物急性致死的药物都可采用此法。近年来，在中药药物动力学研究中出现了一些新概念，如：中药胃肠药物动力学、证治药物动力学、中药血清药理学、时辰药物动力学等等，国外又提出药物动力学与毒理学结合和互为拓展的相伴毒代药物动力学（concomitant toxicokinetics）的概念。这些方法在中药研究领域中的应用，已经取得了一定的成果，大大提高了我国中药新药研制水平，加快了中药新药研制与国际接轨的进程，并对指导中药的安全、有效、合理应用具有重要意义。

中药有效成分和有毒成分的研究，在中药复杂体系科学问题研究中占有举足轻重的地位，是基础科学问题，亦是核心问题。它的研究和最终阐明，对于中药原药材的野生抚育、新品种选育和培育及创造、规范化种植（养殖）、加工（如炮制）、储藏、运输、复方配伍、临床应用、新药研究与开发、合成药物意义上的先导化合物的寻找和新药发现皆有决定性的指导作用。但是，直至今日依然没有寻找到一条比较好的方法来确定中药的有效成分和有毒成分。

围绕中药有效成分和有毒成分的研究，在国家“九五”科技攻关计划中列进了“中药成分的人肠内厌氧性细菌代谢活性物质”课题，在“十五”期间国家“863”计划中列进了“与筛选、分离一体化的Act/ADME/Tox. 研究平台”课题，在教育振兴计划“211”工程项目中列进了“基于结构性质与ADME/Tox. 表现关系的创新药物设计和发现毒理学评价”课题，中药成分在动物或人体内过程的研究已成为确定中药有效成分和/或有毒成分的一条有效途径。

绝大部分中药是口服用药，在人体包含了：①在肠内的行为（包括对肠系膜受体等的刺激）；②跨肠系膜行为；③肝内行为等诸方面。中药成分的血清药物化学和血清药理学是这些方面的总体表现。药物的ADME包含了药物的动力学性质，Tox. 和 Act. 体现了药物的实用价值，药物ADME/Tox. /Act. 性质的综合评判决定了其临床应用。因此，通过中药ADME/Tox. /Act. 的研究，有可能为中药有效成分和有毒成分的研究和确定提供方法学，以推进中药现代化进程中科学问题的解决。同时，要缩短中药新药开发的时间，还必须有吸收、代谢的评价方法，需发展体外方法学和计算机、理化方法，以预测药物吸收性质和代谢。这些体外方法包括膜通透性和代谢或生物转化的快速评价，识别和确定药物转运的代谢机制和途径的能力及增加药物透过、降低代谢的方法，减少动物研究的应用，增加人的而不是动物的细胞或组织

的应用。又由于单体中药化学成分的药代动力学行为受复方中共存其他成分的影响，为此，有必要系统总结中药成分体内外行为的研究成果。本书正是在这些历史背景下编写完成的。

全书共分上、下两篇，由于复方中药的 ADME/Tox. /Act. 系统性研究不多，方法还不成熟，安排在上篇介绍。下篇有八章，按中药化学成分结构类型分类，收载中药成分 475 个，兼有个别中药复方的药代动力学数据。全书 260 余万字。每个中药化学成分条目包括：【化学名】、【英文名】、【异名】、【结构式】、【分子式及分子量】、【来源】、【ADME/Tox.】、【生物活性】、【分析方法】、【化学结构谱学数据】、【附记】和【参考文献】等十二个部分。内容丰富、文图翔实、科学性强，可供活跃在中药现代化研究的科研工作者和广大中医药及中西医结合工作者以及相关硕士、博士研究生参考。

在本书的编著过程中，中科院院士王夔教授给予了指导，王莹和徐嵬老师，博士研究生郭庆梅、韩美华、刘玉峰、滕杰、郑艳，硕士研究生桂方晋、郭杰、田莉、闫静等同学在生物碱文献查阅方面给予了大力协助，徐嵬老师编写了索引，在此深表谢意。感谢辛勤工作在中药 ADME/Tox. /Act. 领域的专家和学者报道了他（她）们在中药 ADME/Tox. /Act. 研究方面的研究成果，为本书增添了素材。本书是国家“九五”科技攻关计划“中药成分的人肠内厌氧性细菌代谢活性物质”课题（96-C02-03-06），国家“863”计划“与筛选、分离一体化的 Act. /ADME/Tox. 研究平台”课题（2002AA2Z343C），教育振兴计划“211”工程项目“基于结构性质与 ADME/Tox. 表现关系的创新药物设计和发现毒理学评价”课题和北京市科委科技计划基础研究专项“先导物和中药的 ADMET 性质快速集成评价实验平台 Z0004105040311”课题和国家自然科学基金课题 29972004、20272006、20572007 的一部分；在此对项目资助部门一并表示感谢。同时，本书的编写得到了中国医药科技出版社的大力支持，在此表示感谢。

由于编著者水平有限和时间仓促，错误和疏漏之处在所难免，敬请同仁、专家及读者指正。

杨秀伟

北京 大 学 药 学 院

天然药物及仿生药物国家重点实验室

北京大学 医药卫生分析中心

2005 年 8 月

# 目 录

## 上篇 总 论

第一章 绪论 .....	( 3 )
第二章 体内药物浓度法 .....	( 6 )
第三章 生物效应法 .....	( 12 )
第一节 药物累积法 .....	( 12 )
第二节 药理效应法 .....	( 14 )
第三节 微生物法 .....	( 17 )
第四节 效量半衰期法 .....	( 18 )
第五节 效应半衰期法 .....	( 19 )
第六节 生理药物动力学模型 .....	( 19 )
第四章 药动学和药效学结合模型 .....	( 27 )
第五章 中药药代动力学的新学说和新方法 .....	( 32 )
第一节 证治药代动力学 .....	( 32 )
第二节 时辰药代动力学 .....	( 33 )
第三节 中药胃肠动力学 .....	( 35 )
第四节 中药血清药理学 .....	( 37 )
第五节 相伴毒代动力学 .....	( 40 )
第六节 遗传药代动力学 .....	( 41 )
第七节 手性药物动力学 .....	( 45 )
第八节 群体药物动力学 .....	( 50 )
第六章 中药药代动力学的难点、热点和对策 .....	( 56 )
第一节 开展中药药代动力学研究的难点 .....	( 56 )
第二节 开展中药药代动力学研究的热点 .....	( 59 )
第三节 开展中药药代动力学研究的对策 .....	( 61 )
第四节 中药药代动力学研究的应用拓展 .....	( 67 )

下篇 各 论

<b>第一章 脂肪族化合物</b> .....	( 73 )		
鱼腥草素 ( 73 )	丹参素 ( 74 )	10 - 羟基癸烯酸 ( 77 )	
$\gamma$ - 亚麻酸 ( 79 )	亚油酸 ( 80 )	13 - 甲基豆蔻酸 ( 81 )	
蒜素 ( 84 )	牛磺酸 ( 85 )	薏苡仁油 ( 87 )	
<b>第二章 芳香族化合物</b> .....	( 90 )		
第一节 碳氢化合物 .....	( 90 )		
二聚细辛醚 ( 90 )	<i>p</i> - 伞花烃 ( 91 )	苯乙烯 ( 92 )	
苏合香烯氧化物 ( 94 )			
第二节 酚及其苷 .....	( 96 )		
熊果苷 ( 96 )	天麻素 ( 99 )	砂钻苔草酚 A ( 104 )	桑苷 A ( 108 )
白藜芦醇苷 ( 113 )	鹿蹄草素 ( 118 )	2,3,5,4' - 四羟基二苯乙烯 - 2 -	
$O - \beta - D -$ 葡萄糖苷 ( 122 )	土大黄苷 ( 126 )	白藜芦醇 ( 128 )	
第三节 苯丙素 .....	( 136 )		
茴香脑 ( 136 )	$\beta$ - 细辛醚 ( 139 )	$\alpha$ - 细辛醚 ( 142 )	丁香酚 ( 146 )
甲基丁香酚 ( 149 )		异丁香酚 ( 153 )	黄樟醚 ( 154 )
异黄樟醚 ( 158 )	爱草脑 ( 158 )	肉豆蔻醚 ( 162 )	榄香素 ( 164 )
异榄香素 ( 166 )	松果菊苷 ( 167 )		
第四节 醇 .....	( 170 )		
隐丹参酮 ( 170 )	马蔺子甲素 ( 174 )	紫草素 ( 178 )	
丹参酮 II <sub>A</sub> ( 183 )	番泻苷 A 和 B ( 186 )	番泻苷 C ( 194 )	
大黄酸 ( 196 )	芦荟大黄素 ( 204 )	大黄素 ( 206 )	
大黄素甲醚 ( 212 )	大黄酚 ( 217 )	芦荟大黄素苷 ( 219 )	
第五节 醛 .....	( 223 )		
桂皮醇 ( 223 )			
第六节 醚 .....	( 224 )		
桂皮醛 ( 224 )	枯醛 ( 226 )	棉酚 ( 227 )	
第七节 酮 .....	( 230 )		
仙鹤草酚 ( 230 )	姜黄素 ( 232 )	青心酮 ( 239 )	
[6] - 姜烯酚 ( 243 )	卡枯醇 ( 248 )	牡丹酚 ( 249 )	
第八节 酸和酯 .....	( 254 )		
咖啡酸 ( 254 )	丁基苯酞 ( 260 )	桂皮酸 ( 264 )	对香豆酸 ( 267 )
阿魏酸 ( 270 )	丁香酸 ( 275 )	绿原酸 ( 278 )	迷迭香酸 ( 284 )
紫草酸镁 B ( 290 )	丹参酚酸 A ( 298 )		
第九节 木脂素类 .....	( 301 )		

牛蒡子苷元 (301)	牛蒡子苷 (303)	五味子素 A (308)	
五味子乙素 (317)	五味子醇甲 (322)	和厚朴酚 (332)	
7-羟基罗汉松脂素 (336)	异落叶松脂醇 (339)	海风藤酮 (341)	
落叶松脂醇 (344)	厚朴酚 (346)	罗汉松脂素 (352)	
松脂醇 (355)	松脂醇双葡萄糖苷 (357)	鬼臼毒素 (365)	
裂环异落叶松脂素 (374)	裂环异落叶松脂素双糖苷 (377)		
丁香树脂酚 (382)	络石藤苷 (385)		
第十节 菲		(387)	
金丝桃素 (387)	伪金丝桃素 (395)		
第十一节 间苯三酚衍生物		(397)	
贯叶金丝桃素 (397)			
第三章 氧化杂环化合物		(406)	
第一节 吡喃酮类		(406)	
麦芽酚 (406)			
第二节 色原烷类		(408)	
大麻酚 (408)	大麻二酚 (412)	$\Delta^9$ -四氢大麻酚 (416)	
$\Delta^8$ -四氢大麻酚 (422)	大麻萜酚 (427)		
第三节 苯并- $\alpha$ -吡喃酮类		(428)	
秦皮乙素 (428)	秦皮甲素 (434)	亮菌甲素 (437)	
短叶苏木酚 (439)	瑞香素 (441)	脱肠草素 (443)	
滨蒿内酯 (444)	伞形花内酯 (448)	甲氧基欧芹素 (450)	
异补骨脂内酯 (455)	补骨脂内酯 (458)	花椒毒素 (462)	
岩白菜素 (466)			
第四节 吲酮类		(468)	
藤黄酸 (468)	芒果苷 (471)		
第五节 黄酮类		(476)	
一、黄酮类		(476)	
相思子素 2"-O- $\beta$ -D-芹菜糖苷 (476)		刺槐素 (479)	
芹菜素 (481)	芹菜苷 (484)	黄芩苷元 (486)	黄芩苷 (492)
白杨素 (502)	芹菜素 7-O- $\beta$ -D-葡萄糖苷 (504)	异荭草素 (507)	
木犀草素 (510)	石吊兰素 (518)	相思子素 II (521)	
灯盏花乙素 (523)	棘昔 (530)	红橘素 (532)	小麦黄素 (539)
汉黄芩素 (541)	汉黄芩素苷 (547)		
二、黄酮醇类化合物		(549)	
金丝桃苷 (549)	淫羊藿苷 (553)	芦丁 (563)	刺槐苷 (571)
槲皮苷 (573)	杨梅黄素 (575)	杨梅苷 (577)	山柰酚 (579)
山柰素 (581)	山柰苷 (582)	槲皮素 (587)	高良姜素 (594)
三、二氢黄酮类化合物		(597)	

## 4 目 录

圣草次苷 (597)	橙皮苷 (601)	柚皮苷 (603)	
四、二氢黄酮醇类化合物 .....	(606)		
蛇葡萄素 (606)	紫杉叶素 (613)		
五、异黄酮类化合物 .....	(618)		
葛根素 (618)	染料木素 (628)	大豆黄苷 (637)	大豆黄素 (641)
鹰嘴豆芽素 A (649)	刺芒柄花素 (654)	黄豆黄素 (659)	
樱黄素 (664)	槐苷 (667)		
六、黄烷类化合物 .....	(671)		
(+)-儿茶精 (671)	(-)-表儿茶精 (676)	(-)-表儿茶精	
3-O-没食子酸酯 (684)	(-)-表没食子酰儿茶精 (693)		
(-)-表没食子酰儿茶精 3-O-没食子酸酯 (695)	原矢车菊苷元 B2 (705)		
七、花青素类化合物 .....	(709)		
矢车菊苷元 3-O- $\beta$ -D-葡萄糖苷 (709)	矢车菊苷元 3-O- $\beta$ -D-芸香糖苷 (716)	矢车菊苷元 3-O- $\beta$ -D-芸香糖苷 (716)	
矢车菊苷元 3,5-二葡萄糖苷 (717)	翠雀花素 (720)		
翠雀花素 3-O- $\beta$ -D-葡萄糖苷 (722)			
翠雀花素 3-O- $\beta$ -芸香糖苷 (725)	锦葵花苷 (728)		
八、查耳酮类化合物 .....	(729)		
红花黄素 A (729)	红花黄素 B (734)	羟基红花黄素 A (739)	
蛇麻醇 (742)			
九、鱼藤酮类 .....	(756)		
鱼藤素 (756)	鱼藤酮 (759)		
第六节 单宁类 Tannins .....	(765)		
没食子酸 (765)	并没食子酸 (769)		
第四章 脂环族化合物 .....	(772)		
第一节 单萜类 .....	(772)		
白芍苷 (772)	龙脑 (774)	樟烯 (777)	斑蝥素 (779)
(+)-3-蒈烯 (780)	柠檬醛 (781)	(-)-香茅醛 (782)	
桉油精 (783)	7-羟基香茅醛 (785)	柠檬烯 (786)	
桃金娘醛 (788)	香叶烯 (789)	芍药苷 (791)	紫苏醛 (804)
$\alpha$ -蒎烯 (805)	$\beta$ -蒎烯 (806)	左旋马鞭草烯酮 (807)	
桃叶珊瑚苷 (809)	8-O-p-香豆酰基爪钩草苷 (813)		
梔子苷 (814)	京尼平苷 (818)	龙胆苦苷 (822)	哈巴苷 (830)
爪钩草苷 (838)	马钱素 (840)	莫诺苷 (843)	
胡黄连苦苷 I (846)	胡黄连苦苷 II (849)	獐牙菜苦素 (850)	
獐牙菜苷 (855)			
第二节 倍半萜类 .....	(858)		
青蒿素 (858)	丁香烯 (869)	莪术醇 (873)	$\beta$ -榄香烯 (875)
白果内酯 A (881)	白果内酯 B (885)	银杏内酯 (889)	伞菌醇 (892)

# 目 录 5

右旋长松叶烯 (895)	广藿香醇 (897)	11 $\alpha$ , 13-二氢堆心菊内酯 (899)
第三节 二萜类 ..... (901)		
松香酸 (901)	穿心莲内酯 (903)	八厘麻毒素 (912)
(+)-去氢松香酸 (913)	脱水穿心莲内酯 (917)	穿心莲新苷 (920)
佛波醇 (924)	甜菊苷 A (930)	冬凌草甲素 (934)
冬凌草乙素 (939)	甜叶菊苷 (942)	雷公藤甲素 (947)
雷公藤内酯酮 (953)	芫花酯甲 (957)	
第四节 三萜类 ..... (959)		
黄芪皂苷甲 (959)	白桦脂醇 (963)	白桦脂酸 (965)
23-羟基白桦脂酸 (967)	白果五加苷 (968)	葫芦素 B (971)
去氢土莫酸 (975)	人参皂苷-Rb <sub>1</sub> (978)	人参皂苷-Rb <sub>2</sub> (991)
人参皂苷-Rc (999)	人参皂苷-Rd (1002)	人参皂苷-Re (1004)
人参皂苷-Rg <sub>1</sub> (1010)	人参皂苷-Rg <sub>2</sub> (1020)	人参皂苷-Rg <sub>3</sub> (1030)
人参皂苷-Rh <sub>1</sub> (1040)	人参皂苷-Rh <sub>2</sub> (1044)	伪人参皂苷-F <sub>11</sub> (1049)
川楝素 (1052)	槐木皂苷 A (1055)	七叶树皂苷 Ia (1057)
甘草酸 (1075)	毛冬青甲素 (1104)	刺楸皂苷 B (1107)
刺楸皂苷 H (1112)	马缨丹烯 A (1116)	柿叶草皂苷 C (1118)
柴胡皂苷-a (1125)	柴胡皂苷-b <sub>1</sub> (1130)	柴胡皂苷-b <sub>2</sub> (1134)
柴胡皂苷-c (1136)	柴胡皂苷-d (1142)	大豆皂苷 I (1146)
第五节 鞣类 ..... (1149)		
蟾蜍灵 (1149)	鹅去氧胆酸 (1153)	胆酸 (1155)
羟基华蟾毒精 (1165)	洋地黄毒苷 (1168)	地高辛 (1172)
薯蓣皂苷 (1176)	钉头果苷 (1186)	猪去氧胆酸 (1189)
黄花夹竹桃次苷乙 (1193)	欧夹竹桃苷 (1196)	麦冬皂苷 D' (1199)
杠柳苷 (1203)	黄花夹竹桃次苷甲 (1205)	脂蟾毒配基 (1208)
牛磺胆酸 (1210)	熊去氧胆酸 (1213)	
第六节 胡萝卜素类 ..... (1217)		
西红花酸 (1217)	西红花苷-1 (1221)	全反式维 A 酸 (1225)
第七节 大环类 ..... (1232)		
麝香酮 (1232)		

# **CONTENTS**

## **Part I : Pandect**

### **FOREWORD**

Introduction

### **CHAPTER 1 THE DETERMINATION METHODS IN BODY CONCENTRATION OF TRADITION CHINESE MEDICINE CONSTITUENTS**

### **CHAPTER 2 BIOLOGICALLY BASED PHARMACODYNAMICS MODEL**

- Section 1 Acute Cumulative Death Rates Method
- Section 2 Pharmacological Method
- Section 3 Guide - line Method by Microorganism
- Section 4 Effect - dose Half - life Method
- Section 5 Drug - effect Half - life Method
- Section 6 Physiologically Based Pharmacokinetics Models

### **CHAPTER 3 PHARMACOKINETICS - PHARMACODYNAMICS MODEL**

### **CHAPTER 4 SOME NEW LYSenkoISM AND METHODS IN PHARMACOKINETICS OF TRADITIONAL CHINESE MEDICINE**

- Section 1 Syndrome and Treatment Pharmacokinetics
- Section 2 Chronopharmacokinetics
- Section 3 Gastroenterous Pharmacokinetics Studies of Traditional Chinese Medicine
- Section 4 Serum Pharmacology of Traditional Chinese Medicine
- Section 5 Concomitant Toxicokinetics
- Section 6 Genetopharmacokinetics
- Section 7 Chiral Drug Pharmacokinetics
- Section 8 Population Pharmacokinetics

### **CHAPTER 5 DIFFICULTY, HOT - POINTS AND COUNTERMEASURE**

- Section 1 Difficulty Problem on Pharmacokinetics Studies of Traditional Chinese Medicine
- Section 2 Hot - points Problem on Pharmacokinetics Studies of Traditional Chinese Medicine
- Section 3 Countermeasure on Pharmacokinetics Studies of Traditional Chinese Medicine
- Section 4 Colonization Using Pharmacokinetics Studies of Traditional Chinese Medicines

### **CHAPTER 6 GLOSSARY IN THE ADME/Tox. /Act. STUDIES**

## PART II

### CHAPTER 1 ALIPHATIC COMPOUNDS

Houttuyninum Danshensu 10 - Hydroxydecenoic acid  $\gamma$  - Linolenic acid Linoleic acid  
 13 - Methyltetradecanoic acid Allicin Taurine Coix Seed Oil

### CHAPTER 2 AROMATIC COMPOUNDS

#### Section 1 Hydrocarbons

Bisarcin *p* - Cymene Styrene Styrene oxide

#### Section 2 Phenols and Its Glycosides

Arbutin Gastrodin Kobophenol A Mulberroside A Polydatin Pyroline 2,3,5,  
 4' - Tetrahydroxystilbene - 2 - O -  $\beta$  - D - glucopyranoside Rhaponticin Resveratrol

#### Section 3 Phenylpropanoids

*trans* - Anethole  $\beta$  - Asarone  $\alpha$  - Asarone Eugenol Methyleugenol Isoeugenol  
 Safrole Isosafrole Estragole Myristicin Elemicin Isoelemicin Echinacoside

#### Section 4 Quinones

Cryptotanshinone Irisquinone A Shikonin Tanshinone II<sub>A</sub> Sennoside A and Sennoside B  
 Sennoside C Rhein Aloe - emodin Emodin Physcion Chrysophanol Aloin

#### Section 5 Alcohols

Cinnamyl alcohol

#### Section 6 Aldehydes

Cinnamaldehyde Cumaldehyde Gossypol

#### Section 7 Ketones

Agrimophol Curcumin 3,4 - Dihydroxyacetophenone [6] - Gingerol Kakurool  
 Paeonol

#### Section 8 Acids and Esters

Caffeic acid Butylphthalide Cinnamic acid *p* - Coumaric acid Ferulic acid Syringic acid Chlorogenic acid Rosmarinic acid Magnesium lithospermate B Salvianolic acid A

#### Section 9 Lignans

Arctigenin Arctiin Gomisin A Schisandrin B Wuweizi alcohol A Honokiol 7 - Hydroxymatairesinol Isolariciresinol Kadsurenone Lariciresinol Magnolol Mataresinol Pinoresinol (+) - Pinoresinol - di - O -  $\beta$  - D - glucoside Podophyllotoxin Secoisolariciresinol Secoisolariciresinol Diglucoside Syringaresinol Tracheloside

#### Section 10 Phenanthrines

Hypericin Pseudohypericin

#### Section 11 Phloroglucinol Derivatives

Hyperforin

## 8 CONTENTS

### CHAPTER 3 OXYGEN - HETEROCYCLIC COMPOUNDS

#### Section 1 Pyrone Derivatives

Maltool

#### Section 2 Chroman Derivatives

Cannabinol Cannabidiol delta - 9 - Tetrahydrocannabinol delta - 8 - Tetrahydrocannabinol Cannabigerol

#### Section 3 Benzö - α - pyrone Derivatives

Aesculetin Aesculin Armillarisin A Brevifolin Daphnetin Herniarin Scoparone Umbelliferone Osthol Isopsoralen Psoralen Xanthotoxin Bergenin

#### Section 4 Xanthone Derivatives

Gambogic acid Mangiferin

#### Section 5 Flavonoid Compounds

##### Sub - section 1 Flavonoids

Abrusin 2" - O - β - D - Apioside Acacetin Apigenin Apiin Baicalein Baicalin Chrysin Apigetin Homoorientin Luteolin Lysionotin Precatorin II Scutellarin Spinosin tangeretin Tricin Wogonin Wogonoside

##### Sub - section 2 Flavonols

Hyperoside Icariin Rutin Robinin Quercitrin Myricetin Myricitrin Kaempferol Kaempferide Kaempferitrin Quercetin Galangin

##### Sub - section 3 Dihydroflavonoids

Eriocitrin Hesperidin Naringin

##### Sub - section 4 Dihydroflavonols

Ampelopsin Taxifolin

##### Sub - section 5 Isoflavonoids

Puerarin Genistein Daidzin Daidzein Biochanin A Formononetin Glycitein Prunetin Sophoricoside

##### Sub - section 6 Flavans

( + ) - Catechin ( - ) - Epicatechin ( - ) - Epicatechin 3 - O - gallate  
( - ) - Epigallocatechin ( - ) - Epigallocatechin - 3 - gallate Procyanidin B2

##### Sub - section 7 Anthocyanidins

Cyanidin 3 - glucoside Cyanidin 3 - O - β - rutinoside Cyanidin 3, 5 - diglucoside Delphinidin Delphinidin 3 - O - β - D - glucopyranoside Delphinidin 3 - O - β - rutinoside Malvin

##### Sub - section 8 Chalcones

Safflor yellow A Safflor Yellow B Hydroxysafflor yellow A Xanthohumol

##### Sub - section 9 Rotenoids

Deguelin Rotenone

#### Section 6 Tannin Compounds

Gallic acid Ellagic acid

## CHAPTER 4 ALICYCLIC COMPOUNDS

### Section 1 Monoterpene Compounds

Albiflorin Borneol Camphene Cantharidin (+) -3-Carene Citral (-) -Citronellal Eucalyptol ( $\pm$ ) -7-Hydroxycitronellal Limonene (-) -Myrtenal Myrcene Paeoniflorin (-) -Perillaldehyde  $\alpha$ -Pinene  $\beta$ -Pinene (-) -Verbenone Aucubin 8-O-p-Coumaroylharpagide Gardenoside Geniposide Gentiopicrin Harpagoside Harpagide Loganin Morroniside Picroside-I Picroside II Swertiamarin Sweroside

### Section 2 Sesquiterpenoid Compounds

Artemisinin (Artesunate, Artemether, Artelanic acid) Caryophyllene Curcumol  $\beta$ -Elemene Ginkgolide A Ginkgolide B Bilobalide Lampterol (+) -Longifolene Patchouli alcohol 11 $\alpha$ , 13-Dihydrohelenalin

### Section 3 Diterpenoid Compounds

Abietic acid Andrographolide (Potassium Dehydroandrographolide Succinate, Andrographolide sodium bisulphite) Andromedotoxin (+) -Dehydroabietic acid Dehydroandrographolide Neoandrographolide Phorbol Rebaudioside A Rubesecensine A Rubesecensine B Stevioside Triptolide Triptonide Yuanhuacin

### Section 4 Triterpenoid Compounds

Astragaloside IV Betulin Betulinic acid 23-Hydroxybetulinic acid Chiisanoside Cucurbitacin B Dehydrotumulosic acid Ginsenoside-Rb<sub>1</sub> Ginsenoside-Rb<sub>2</sub> Ginsenoside-Rc Ginsenoside-Rd Ginsenoside-Re Ginsenoside-Rg<sub>1</sub> Ginsenoside-Rg<sub>2</sub> [20(S)-Ginsenoside-Rg<sub>2</sub> and 20(R)-Ginsenoside-Rg<sub>2</sub>] Ginsenoside-Rg<sub>3</sub> [20(S)-Ginsenoside-Rg<sub>3</sub> and 20(R)-Ginsenoside-Rg<sub>3</sub>] Ginsenoside-Rh<sub>1</sub> Ginsenoside-Rh<sub>2</sub> Pseudo-ginsenoside-F<sub>11</sub> Toosendanin Araloside A Escin Ia Glycyrrhetic acid (Glycyrrhizin) Ilexonin A Kalopanaxsaponin B Kalopanaxsaponin H Lantadene A Reinioside C Saikosaponin a Saikosaponin b<sub>1</sub> Saikosaponin b<sub>2</sub> Saikosaponin c Saikosaponin d Soyasaponin I

### Section 5 Steroid Compounds

Bufalin Chenodeoxycholic acid Cholic acid Cinobufagin Cinobufotalin Digitoxin Digoxin Dioscin Comphoside Hyodeoxycholic acid Neriifolin Oleandrin Ophiopognin saponin D' Periplocin Peruvoside Resibufogenin Taurocholic acid Ursodeoxycholic acid (Tauroursodeoxycholic acid)

### Section 6 Carotenoid Compounds

Crocetin Crocin-1 all-trans-Retinoic acid A

### Section 7 Macroyclic Compounds

Muscone

# 上篇 总 论