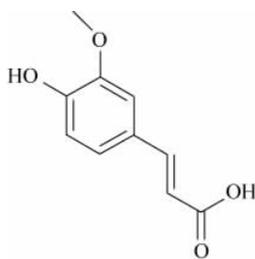


# 第 1 章 苯丙素和鞣质类

## 阿魏酸 Ferulic acid

### 【化学结构】



【主要来源】 来源于伞形科藁本属川芎(*Ligusticum chuanxiong* Hort.)根茎。

【理化性质】 本品顺式为黄色油状物，反式为正方形结晶或纤维结晶，熔点为 174.00℃，溶于热水、乙醇和乙酸乙酯，微溶于乙醚，难溶于苯和石油醚。

【类药五原则数据】 相对分子质量 194.2，脂水分配系数 1.669，可旋转键数 3，氢键受体数 4，氢键给体数 2。

【药物动力学数据】 阿魏酸的吸收、分布、代谢、排泄、毒性(absorption, distribution, metabolism, excretion, toxicity, ADMET)数据见图 1.1、表 1.1。

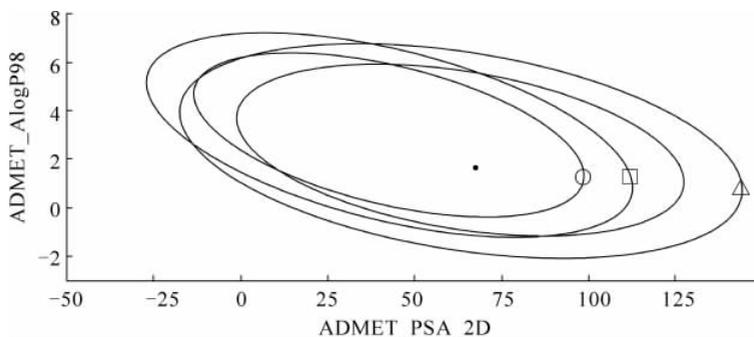


图 1.1 阿魏酸 ADMET 范围图

表 1.1 阿魏酸的吸收、分布、代谢、排泄、毒性数据表

25℃下水溶解度水平	4
血脑屏障通透水平	3
人类肠道吸收性水平	0
肝毒性(马氏距离)	9.679
细胞色素 P450 2D6 抑制性(马氏距离)	11.80
血浆蛋白结合率(马氏距离)	11.94

【毒性】 阿魏酸毒理学概率数据见表 1.2。

表 1.2 阿魏酸毒理学概率表

毒理学性质	发生概率
致突变性	0.989
好氧生物降解性能	1.000
潜在发育毒性	0.211
皮肤刺激性	0.528
NTP 致癌性(雄大鼠)	0.725
NTP 致癌性(雌大鼠)	1.000
NTP 致癌性(雄小鼠)	0.227
NTP 致癌性(雌小鼠)	0.940

【药理】 阿魏酸药理模型数据见表 1.3。

表 1.3 阿魏酸药理模型数据表

模型 1	大鼠口服半数致死量
LD <sub>50</sub>	651.1mg/kg
95%的置信限下最小 LD <sub>50</sub>	136.9mg/kg
95%的置信限下最大 LD <sub>50</sub>	3.100g/kg
模型 2	大鼠吸入半数致死浓度
LC <sub>50</sub>	1.500g/(m <sup>3</sup> ·h)
低于 95%置信限下的限量	97.80mg/(m <sup>3</sup> ·h)
高于 95%置信限下的限量	10.00g/(m <sup>3</sup> ·h)

【阿魏酸与抗肿瘤靶点 Bax 蛋白作用的二维图】 阿魏酸与抗肿瘤靶点 Bax 蛋白作用的二维图见图 1.2。

【药理或临床作用】 本品可用于抗菌、抗肿瘤、清除自由基、抗凝、抗强直性脊柱炎(AS),临床用于治疗脑血栓形成、偏头痛、急性肾功能衰竭,可预防缺血性脑血管病。

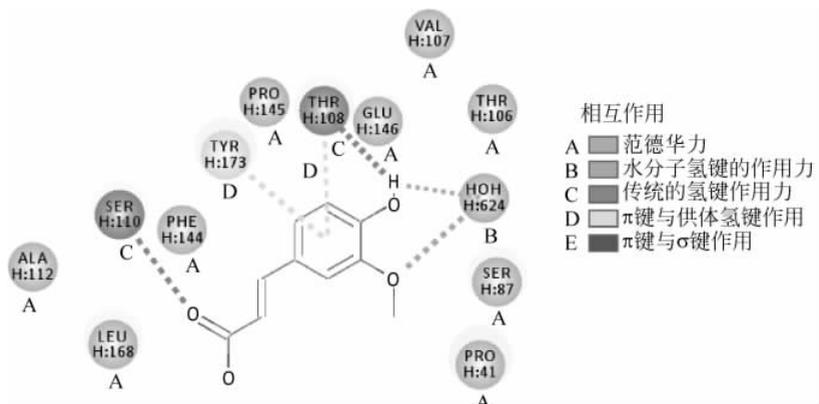
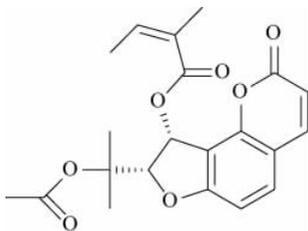


图 1.2 阿魏酸与抗肿瘤靶点 Bax 蛋白作用的二维图

## 爱得尔亭 Edultin

### 【化学结构】



【主要来源】 来源于伞形科当归属植物当归 [*Angelica sinensis* (Oliv.) Diels] 的果实。

【理化性质】 本品为无色针晶,熔点为 155.00~157.00℃(分解)。

【类药五原则数据】 相对分子质量 386.4,脂水分配系数 3.502,可旋转键数 6,氢键受体数 7,氢键给体数 0。

【药物动力学数据】 爱得尔亭的吸收、分布、代谢、排泄、毒性数据见表 1.4、图 1.3。

表 1.4 爱得尔亭的吸收、分布、代谢、排泄、毒性数据表

25℃下水溶解度水平	2
血脑屏障通透水平	2
人类肠道吸收性水平	0
肝毒性(马氏距离)	13.69
细胞色素 P450 2D6 抑制性(马氏距离)	14.60
血浆蛋白结合率(马氏距离)	13.67

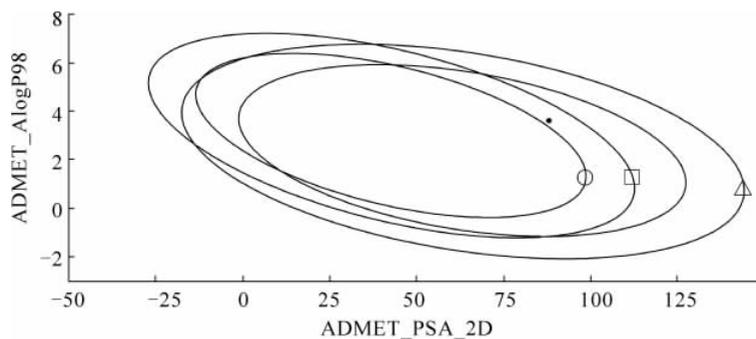


图 1.3 爱得尔亭 ADMET 范围图

**【毒性】** 爱得尔亭毒理学概率数据见表 1.5。

表 1.5 爱得尔亭毒理学概率表

毒理学性质	发生概率
致突变性	0
好氧生物降解性能	0
潜在发育毒性	0.001
皮肤刺激性	0.002
NTP 致癌性(雄大鼠)	0.905
NTP 致癌性(雌大鼠)	0.960
NTP 致癌性(雄小鼠)	1.000
NTP 致癌性(雌小鼠)	0

**【药理】** 爱得尔亭药理模型数据见表 1.6。

表 1.6 爱得尔亭药理模型数据表

模型 1	大鼠口服半数致死量
LD <sub>50</sub>	10.00g/kg
95%的置信限下最小 LD <sub>50</sub>	10.00g/kg
95%的置信限下最大 LD <sub>50</sub>	10.00g/kg
模型 2	大鼠吸入半数致死浓度
LC <sub>50</sub>	10.00g/(m <sup>3</sup> ·h)
低于 95%置信限下的限量	10.00g/(m <sup>3</sup> ·h)
高于 95%置信限下的限量	10.00g/(m <sup>3</sup> ·h)

**【爱得尔亭与表皮生长因子受体(EGFR)作用的二维图】** 爱得尔亭与抗肿瘤靶点表皮生长因子受体作用的二维图见图 1.4。

**【药理或临床作用】** 本品具有抗肿瘤、温肾助阳、祛风、燥湿、杀虫的作用。

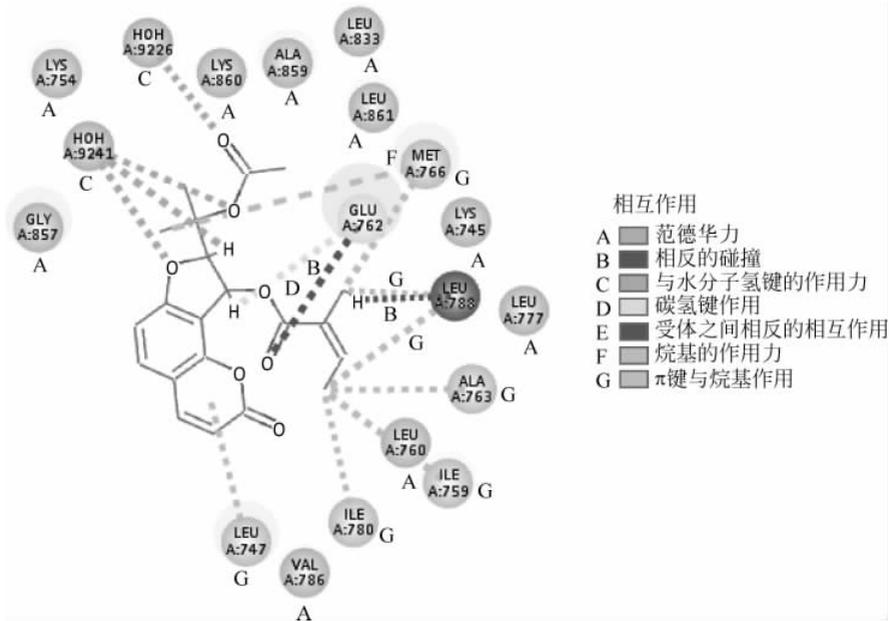
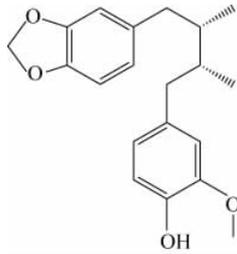


图 1.4 爱得尔亭与表皮生长因子受体作用的二维图

## 安五脂素 Anwuligan

### 【化学结构】



**【主要来源】** 来源于木兰科南五味子属植物南五味子(*Kadsura longipedunculata*)的根或根皮。

**【理化性质】** 本品为白色结晶粉末,可溶于甲醇、乙醇等有机溶剂。

**【类药五原则数据】** 相对分子质量 328.4,脂水分配系数 5.186,可旋转键数 6,氢键受体数 4,氢键给体数 1。

**【药物动力学数据】** 安五脂素的吸收、分布、代谢、排泄、毒性数据见表 1.7、图 1.5。

表 1.7 安五脂素的吸收、分布、代谢、排泄、毒性数据表

25℃下水溶解度水平	2
血脑屏障通透水平	1
人类肠道吸收性水平	0

续表

肝毒性(马氏距离)	9.274
细胞色素 P450 2D6 抑制性(马氏距离)	14.22
血浆蛋白结合率(马氏距离)	8.892

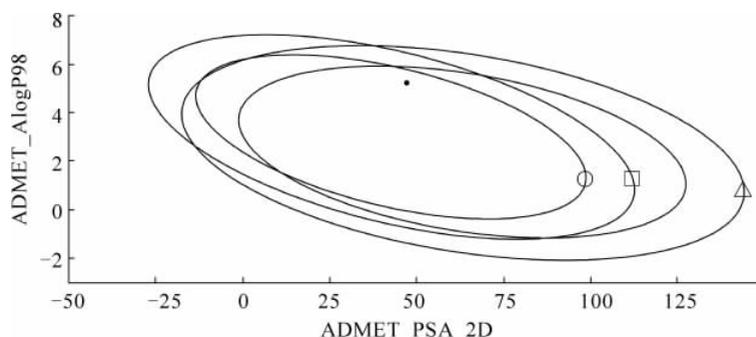


图 1.5 安五脂素 ADMET 范围图

【毒性】 安五脂素毒理学概率数据见表 1.8。

表 1.8 安五脂素毒理学概率表

毒理学性质	发生概率
致突变性	0
好氧生物降解性能	1.000
潜在发育毒性	0.605
皮肤刺激性	0
NTP 致癌性(雄大鼠)	0.664
NTP 致癌性(雌大鼠)	1.000
NTP 致癌性(雄小鼠)	0.199
NTP 致癌性(雌小鼠)	0.174

【药理】 安五脂素药理模型数据见表 1.9。

表 1.9 安五脂素药理模型数据表

模型 1	大鼠口服半数致死量
LD <sub>50</sub>	3.500g/kg
95%的置信限下最小 LD <sub>50</sub>	517.8 mg/kg
95%的置信限下最大 LD <sub>50</sub>	10.00g/kg
模型 2	大鼠吸入半数致死浓度
LC <sub>50</sub>	10.00g/(m <sup>3</sup> ·h)
低于 95%置信限下的限量	10.00g/(m <sup>3</sup> ·h)
高于 95%置信限下的限量	10.00g/(m <sup>3</sup> ·h)

【安五脂素与抗血栓酶作用的二维图】 安五脂素与抗血栓酶作用的二维图见图 1.6。

【药理或临床作用】 本品具有抗肿瘤、凝血的作用。

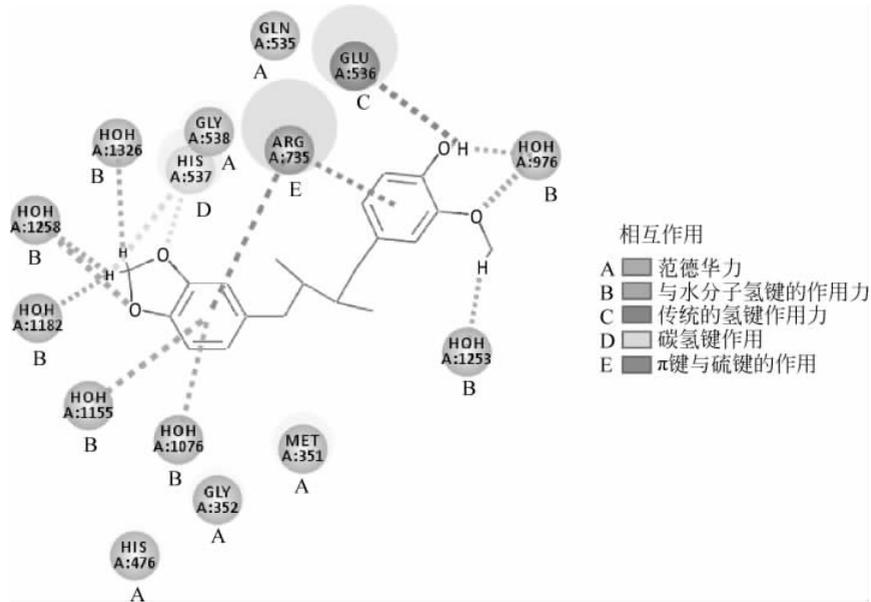
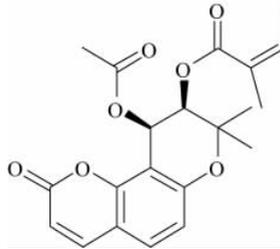


图 1.6 安五脂素与抗血栓酶作用的二维图

## 白花前胡丙素 Praeruptorin C

### 【化学结构】



【主要来源】 来源于伞形科前胡属植物白花前胡(*Peucedanum praeruptorum* Dunn.) 的根。

【理化性质】 本品为白色块状结晶,溶于甲醇、乙醇、乙酸乙酯,微溶于石油醚,不溶于水。熔点 155.00~156.00℃,沸点 516.50℃,密度 1.22g/cm<sup>3</sup>。

【类药五原则数据】 相对分子质量 414.4,脂水分配系数 3.502,可旋转键数 5,氢键受体数 7,氢键给体数 0。

【药物动力学数据】 白花前胡丙素吸收、分布、代谢、排泄、毒性数据见表 1.10、图 1.7。

【毒性】 白花前胡丙素毒理学概率数据见表 1.11。

【药理】 白花前胡丙素药理模型数据见表 1.12。

表 1.10 白花前胡丙素吸收、分布、代谢、排泄、毒性数据表

25℃下水溶解度水平	2
血脑屏障通透水平	2
人类肠道吸收性水平	0
肝毒性(马氏距离)	13.64
细胞色素 P450 2D6 抑制性(马氏距离)	14.31
血浆蛋白结合率(马氏距离)	13.73

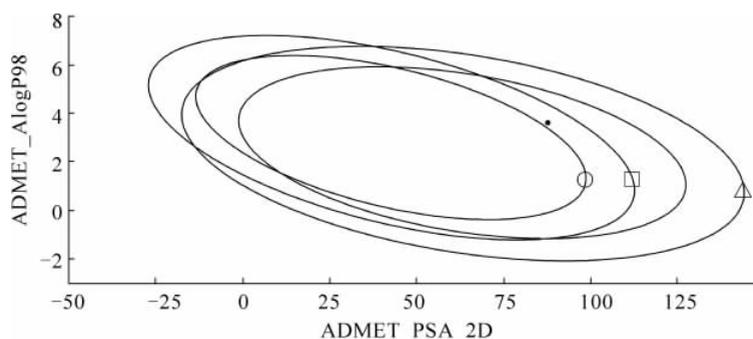


图 1.7 白花前胡丙素 ADMET 范围图

表 1.11 白花前胡丙素毒理学概率表

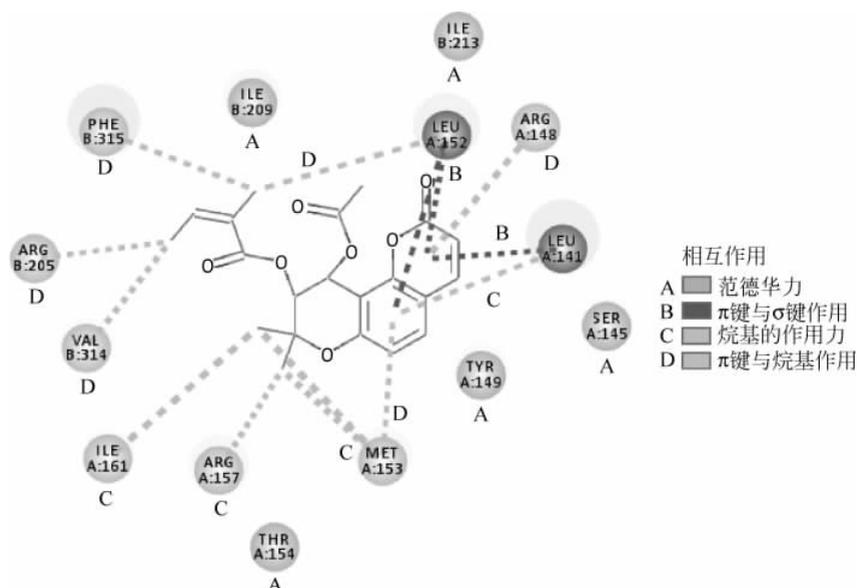
毒理学性质	发生概率
致突变性	0
好氧生物降解性能	0
潜在发育毒性	0
皮肤刺激性	0.014
NTP 致癌性(雄大鼠)	0.997
NTP 致癌性(雌大鼠)	1.000
NTP 致癌性(雄小鼠)	1.000
NTP 致癌性(雌小鼠)	0

表 1.12 白花前胡丙素药理模型数据表

模型 1	大鼠口服半数致死量
LD <sub>50</sub>	10.00g/kg
95%的置信限下最小 LD <sub>50</sub>	10.00g/kg
95%的置信限下最大 LD <sub>50</sub>	10.00g/kg
模型 2	大鼠吸入半数致死浓度
LC <sub>50</sub>	10.00g/(m <sup>3</sup> ·h)
低于 95%置信限下的限量	1.600g/(m <sup>3</sup> ·h)
高于 95%置信限下的限量	10.00g/(m <sup>3</sup> ·h)

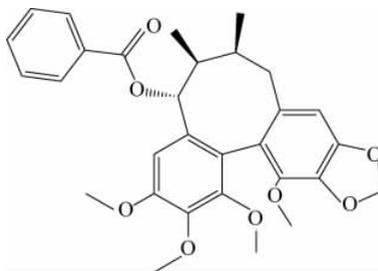
【白花前胡丙素与  $\beta_2$  受体作用的二维图】 白花前胡丙素与  $\beta_2$  受体作用的二维图见图 1.8。

【药理或临床作用】 本品可用于感冒、头痛、咳嗽、哮喘、胸闷的治疗。

图 1.8 白花前胡丙素与  $\beta_2$  受体作用的二维图

## 苯甲酰基戈米辛 O Benzoylgomisin O

### 【化学结构】



【主要来源】 来源于木兰科五味子属植物五味子(*Schisandra chinensis*)的果实。

【理化性质】 本品为无色或白色晶体粉末,沸点 645.10℃。

【类药五原则数据】 相对分子质量 520.6,脂水分配系数 6.076,可旋转键数 7,氢键受体数 8,氢键给体数 0。

【药物动力学数据】 苯甲酰基戈米辛 O 吸收、分布、代谢、排泄、毒性数据见表 1.13、图 1.9。

表 1.13 苯甲酰基戈米辛 O 吸收、分布、代谢、排泄、毒性数据表

25℃下水溶解度水平	1
血脑屏障通透水平	4
人类肠道吸收性水平	1
肝毒性(马氏距离)	12.02
细胞色素 P450 2D6 抑制性(马氏距离)	13.77
血浆蛋白结合率(马氏距离)	12.63

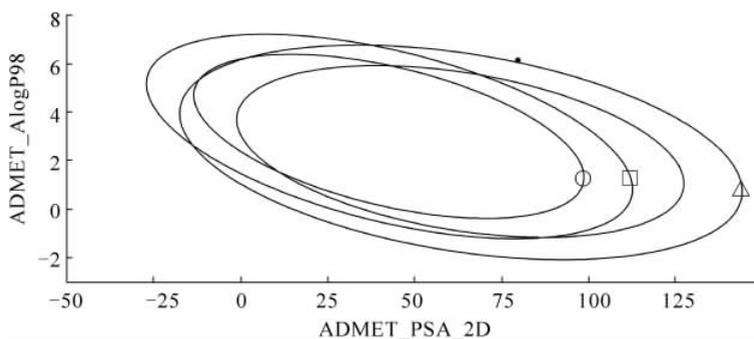


图 1.9 苯甲酰基戈米辛 O ADMET 范围图

【毒性】 苯甲酰基戈米辛 O 毒理学概率数据见表 1.14。

表 1.14 苯甲酰基戈米辛 O 毒理学概率表

毒理学性质	发生概率
致突变性	0
好氧生物降解性能	1.000
潜在发育毒性	0.996
皮肤刺激性	0
NTP 致癌性(雄大鼠)	1.000
NTP 致癌性(雌大鼠)	0
NTP 致癌性(雄小鼠)	1.000
NTP 致癌性(雌小鼠)	0

【药理】 苯甲酰基戈米辛 O 药理模型数据见表 1.15。

表 1.15 苯甲酰基戈米辛 O 药理模型数据表

模型 1	大鼠口服半数致死量
LD <sub>50</sub>	970.6mg/kg
95%的置信限下最小 LD <sub>50</sub>	127.3mg/kg
95%的置信限下最大 LD <sub>50</sub>	7.400g/kg
模型 2	大鼠吸入半数致死浓度
LC <sub>50</sub>	10.00g/(m <sup>3</sup> ·h)
低于 95%置信限下的限量	7.200g/(m <sup>3</sup> ·h)
高于 95%置信限下的限量	10.00g/(m <sup>3</sup> ·h)

【苯甲酰基戈米辛 O 与抗病毒蛋白 NF-p30 作用的二维图】 苯甲酰基戈米辛 O 与抗病毒蛋白 NF-p30 作用的二维图见图 1.10。