



植物化学

研究方法选论

● 宋晓凯 编著



化学工业出版社

植物化学研究方法选论

宋晓凯 编著



化学工业出版社

· 北京 ·

图书在版编目 (CIP) 数据

植物化学研究方法选论/宋晓凯编著. —北京: 化学工业出版社, 2008.7

ISBN 978-7-122-03073-3

I. 植… II. 宋… III. 植物学: 生物化学-研究方法
IV. Q946-3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2008) 第 087030 号

责任编辑: 何 丽

文字编辑: 张林爽

责任校对: 徐贞珍

装帧设计: 关 飞

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 装: 化学工业出版社印刷厂

720mm×1000mm 1/16 印张 12 字数 234 千字 2008 年 9 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

定 价: 29.00 元

版权所有 违者必究

前言

随着现代科学技术的发展和人类社会对生活与健康水平要求的不断提高,进入21世纪,世界药品市场对植物药的需求日益扩大。当前,植物药在国际市场上被不断看好,特别是日本、欧洲各国、美国已出现了采用新学科、新技术、新方法进行植物药开发的研究思路,并形成各自特点的方法,在制剂、质量控制等方面有些已走到我国的前面,甚至开始在我国申请专利,对我国中药产业形成了一定的挑战,也对我国中药科技提出了新的课题。

目前,我国在中药活性成分的研究方面已经接近国际先进水平,有些研究领域已经达到国际先进水平。然而,我国的中药生产还处于从经验开发到工程化生产的过渡阶段,中药生产在工艺方法和生产技术上与先进国家还存在很大差距。由此可见,我国中药生产现代化是中国中药产业面临的主要课题。

我国土地辽阔,天然资源十分丰富,尤其是天然植物,种类多、分布广,对它们的提取分离技术、组分结构与生理活性关系的研究以及对药用植物的综合利用是我国中药科技界非常感兴趣的课题,更是提高我国医药科技实力、实现我国中药现代化的需要。

对于植物化学成分的提取、分离和精制,过去主要使用溶剂法和蒸馏法,耗时长、需要的溶剂量大,甚至在加热过程中容易造成植物中活性成分结构的破坏。新的提取分离技术与结构鉴定技术的应用与普及,促进了我国药用植物化学成分研究的发展。从20世纪70年代开始,我国应用了低压柱色谱、高效液相色谱与干柱色谱,并进一步发展起来一系列现代色谱技术。20世纪80年代,应用大孔树脂和制备型高效液相色谱仪分离水溶性成分或难获得结晶的化合物技术迅速在全国范围内推广。20世纪90年代,对植物药有效成分的研究,着重于微量成分和水溶性成分的分离及结构鉴定,新的化合物不断出现,为合成新药提供了大量的先导化合物。

近代分离分析仪器的飞速发展,推动了样品提取分离技术的进步,一些新的、更为环保的提取分离技术得以开发利用,如超临界流体萃取技术、超声波提取技术、微波提取技术、酶技术等各种提取新技术,各种色谱技术,色谱-质谱技术和液相色谱-核磁共振技术等,大大缩短了对植物中生理活性成分的研究周期。

本专著针对当前国内外天然产物研究开发领域的现状,从植物资源化学的角度入手,借助植物化学与天然药物研究的必然联系,并结合现代天然药物化学领域的最新进展以及大量的中药新药研究开发实例,结合著者本人多年的天然药物化学教

学、研究实践，以通俗易懂的方式介绍综合运用植物分类学、天然产物化学、有机化学、药物化学等理论与技术，开展植物中有效成分的提取分离、结构测定（结构修饰或半合成）、理化常数测定、制备工艺、质量检测和质量控制、临床样品的提供、中试生产等研究工作的具体方法，以达到帮助读者解决科研工作和生产中出现的实际问题的目的。

由于编者水平有限加之编写时间仓促，书中疏漏和不妥之处在所难免，敬请广大读者指正，不吝赐教。

宋晓凯
天津理工大学
2008年4月

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 概述	1
1.1.1 植物化学的研究内容及任务	1
1.1.2 我国植物化学研究开发领域的概况	1
1.1.3 植物化学衍生学科	3
1.2 植物化学成分的生源研究	5
1.2.1 植物的新陈代谢及其产物	6
1.2.2 植物中有效成分、辅成分和无效成分	8
1.2.3 药用植物中化学成分预试验	9
1.3 药用植物中化学成分提取和分离方法	10
1.3.1 药用植物原料的干燥程度	10
1.3.2 粉碎度	11
1.3.3 萃取方法	11
1.4 植物化学成分结构研究	17
1.4.1 化学成分结构研究的主要程序	18
1.4.2 化学成分绝对构型测定方法	19
第 2 章 现代工业化技术在植物化学成分提取分离中的应用	26
2.1 大孔吸附树脂技术	26
2.1.1 大孔吸附树脂的性质及分离原理	26
2.1.2 大孔吸附树脂的极性	26
2.1.3 大孔吸附树脂的型号	27
2.1.4 大孔吸附树脂的优点	27
2.1.5 大孔吸附树脂中有机溶剂残留物的检测	27
2.1.6 大孔吸附树脂分离纯化中的影响因素	28
2.1.7 大孔吸附树脂的预处理及再生	31
2.1.8 树脂组合优化技术实现类化合物组分的分离制备	32
2.1.9 大孔吸附树脂技术应用实例	32
2.2 罐组逆流提取技术	34

2.2.1	罐组逆流提取技术基本原理	34
2.2.2	罐组逆流提取技术的特点	35
2.2.3	影响因素	36
2.2.4	罐组逆流提取设备	36
2.2.5	罐组逆流提取技术应用实例介绍	38
2.3	药用植物提取过程中的酶解技术	38
2.3.1	药用植物提取过程中的酶解技术的原理	38
2.3.2	酶解技术的优点及不足	39
2.3.3	酶解技术的影响因素和优化	39
2.3.4	药用植物提取过程中的酶解技术应用实例	40
2.4	膜分离技术	41
2.4.1	膜分离技术的原理	41
2.4.2	膜分离技术的应用	41
2.4.3	药用植物提取过程中的膜蒸馏浓缩技术	41
2.4.4	膜蒸馏所用膜材料	47
2.4.5	膜蒸馏的应用比较	48
2.4.6	药用植物提取过程中的膜蒸馏浓缩技术应用实例	49
2.5	超临界膜流体萃取技术	50
2.5.1	超临界膜流体萃取技术的原理	50
2.5.2	中药超临界 CO ₂ 萃取的几个影响因素	51
2.5.3	超临界流体萃取技术提取中药有效成分的优点	53
2.5.4	超临界流体萃取技术在药用植物有效成分提取中的应用	54
2.5.5	超临界流体萃取技术在中草药除杂及提取物精制中的应用	56
2.5.6	超临界流体萃取技术在中药新药研发过程中的应用局限性	56
2.5.7	今后的主要研究方向	56
2.6	微波辅助萃取技术	57
2.6.1	微波辅助萃取技术的原理	57
2.6.2	影响微波萃取效率的因素	58
2.6.3	微波萃取技术的共同特点	58
2.6.4	微波辅助萃取技术应用实例	58
2.7	超声波提取技术	59
2.7.1	超声波提取技术的原理	59
2.7.2	超声波提取技术应用实例	59
第3章	色谱及结晶技术在植物化学成分分离纯化中的应用	60
3.1	薄层色谱技术与应用	60

3.1.1	吸附色谱	60
3.1.2	分配色谱	62
3.1.3	薄层色谱技术应用实例	63
3.2	柱色谱技术与应用	66
3.2.1	柱色谱的分离原理和流出曲线	66
3.2.2	柱色谱技术在植物化学成分研究中的应用	68
3.3	吸附柱色谱技术	68
3.3.1	吸附柱色谱的基本原理	68
3.3.2	吸附柱色谱的操作技术	69
3.4	高效液相色谱技术与应用	71
3.4.1	制备型高效液相色谱技术概述	72
3.4.2	制备型 HPLC 与分析型 HPLC 区别	73
3.4.3	制备型 HPLC 分类	74
3.4.4	影响制备型 HPLC 分离纯化的因素	74
3.4.5	流动相对色谱柱的损害因素	75
3.4.6	样品对色谱柱的损害因素	76
3.4.7	色谱柱固定相的化学变化	76
3.4.8	高效液相色谱柱的保养	77
3.5	结晶和重结晶技术与应用	78
3.5.1	结晶	78
3.5.2	重结晶与分步结晶	81
3.5.3	结晶纯度的判断	81
第 4 章	化学方法在植物成分结构研究中的应用	83
4.1	常用的化学方法	83
4.1.1	锌粉蒸馏及碱裂解反应	83
4.1.2	霍夫曼降解反应	84
4.1.3	脱氢反应	85
4.1.4	氧化反应	85
4.1.5	还原反应	86
4.1.6	水解反应	87
4.1.7	官能团的保护	88
4.2	常用的化学方法在植物成分研究中的应用	89
4.2.1	苷键裂解(酸/碱/酶水解反应)	89
4.2.2	香豆素的碱水解反应	89
4.2.3	缩合反应在黄酮衍生物合成中的应用	90

第5章 中药化学对照品的制备工艺及质量控制	92
5.1 中药化学对照品的分类及相关概念	92
5.1.1 按检验要求分类	93
5.1.2 按级别分类	93
5.2 天然药物对照品的要求	93
5.3 天然药物对照品的制备及应注意的问题	93
5.3.1 原料的选择	93
5.3.2 几种主要类型化学成分的提取	94
5.3.3 化学成分的分离和精制实例	94
5.4 天然药物对照品的标化	98
5.4.1 纯度分析的含义与内容	98
5.4.2 纯度分析主要采用的方法	98
5.4.3 纯度分析方法的选择及综合运用	99
5.5 天然药物对照品的结构鉴定	100
5.5.1 物理常数的测定及元素分析	100
5.5.2 光谱分析	100
5.6 天然药物的质量控制	102
5.6.1 性状鉴别	102
5.6.2 内在质量标准	104
5.6.3 植物药标准化	105
第6章 基于天然生物活性物质发现先导物	107
6.1 从植物化学成分中发现先导化合物	107
6.1.1 植物活性成分研究的现状	107
6.1.2 从植物药中筛选先导化合物的策略	108
6.2 天然产物中活性化合物的结构修饰方法及构效关系	112
6.2.1 化学法	112
6.2.2 生物转化法	112
6.2.3 组合化学方法	114
6.2.4 紫杉醇的化学结构修饰方法及构效关系	115
6.2.5 川芎嗪的化学结构修饰方法及构效关系	116
第7章 天然药物研究的 GLP 规范	119
7.1 GLP 有关内容	119
7.1.1 中药制备工艺	120
7.1.2 中药质量标准	126
7.1.3 稳定性	131

7.2 中药新药研究的技术要求	133
7.2.1 提取工艺研究	133
7.2.2 分离、纯化、浓缩与干燥工艺研究	134
7.2.3 制剂成型性研究	135
7.2.4 中试工艺研究	135
第8章 中药标准提取物	138
8.1 中药标准提取物的含义及特点	138
8.1.1 中药标准提取物的含义	138
8.1.2 中药标准提取物的特点	140
8.2 中药标准提取物的制备	141
8.2.1 质量标准	142
8.2.2 分析检测技术	144
第9章 天然药物研究开发实例	146
9.1 青蒿素研究开发实例	146
9.2 喜树碱研究开发实例	146
9.2.1 高喜树碱的优点	147
9.2.2 hCPT的合成方法	149
9.3 小白菊内酯研究开发实例	149
9.3.1 观光木化学成分的系统性研究	150
9.3.2 观光木中各萃取部位的体外抑瘤实验研究	151
9.3.3 观光木中几种主要化学成分的体外抑瘤实验研究	152
9.3.4 木香烯内酯的体内抑瘤实验研究	153
9.3.5 小白菊内酯抗肿瘤作用机制研究	153
第10章 植物化学方法学与中药产业现代化	156
10.1 国际创新药物研究呈现新趋势	156
10.1.1 药物作用新靶标的发现	156
10.1.2 新的筛选模型和筛选技术的研究	162
10.1.3 结构生物学、生物信息学和药物分子设计	162
10.2 我国创新药物研究的意义和方向	164
10.2.1 更新观念,用创新思维改革传统天然药物研究模式	164
10.2.2 重要中草药中生物活性成分研究	165
10.2.3 已知结构重要天然产物的结构改造,类似物合成和活性研究	166
10.2.4 代表性常用中药及其复方药效物质和作用机制研究	167
10.3 中国将启动药物创新体系,从天然药库中筛选开发特效药	167
10.4 中药产业现代化的关键科技问题	167

10.4.1	现代中药产业化专项实施方案	167
10.4.2	我国中药产业化的现状	169
10.4.3	实现中药产业化的对策	172
10.4.4	加强中药技术创新,突破“技术性贸易壁垒”	173
10.5	有关中药质量标准中杂质的安全性评价问题	175
10.5.1	原料药的杂质控制指标	175
10.5.2	制剂的杂质控制指标	175
10.5.3	残留溶剂	175
10.5.4	检测方法	176
10.6	植物化学方法学在中药产业现代化中的应用实例	176
参考文献		179

第 1 章

绪 论

1.1 概述

1.1.1 植物化学的研究内容及任务

植物化学主要是研究、发现生物活性成分的化学。植物化学是植物学与有机化学相结合而形成的一门交叉学科，是植物资源合理利用的基础。

植物化学以植物为研究对象，运用有机化学的基础和手段，对植物的化学成分，主要是次生代谢产物，进行提取分离、结构测定、化学修饰与合成，揭示植物次生代谢产物的形成、功能、分布和用途，特别是它们生物活性方面的用途。

植物化学研究对象，通常是一些相对分子质量在 2500 以下的小分子。

植物资源的利用，本质上是植物化学成分及其功能的利用。植物小分子如药物、天然农药、香料、天然色素、功能食品的利用，涉及人类生活的各个方面。

发现植物的次生代谢产物的用途并保持次生代谢产物存在植物的永续利用是植物化学研究的一项重要任务。

因此，植物化学不仅是植物资源开发利用的基础，也是植物多样性保护的一个重要方面。

1.1.2 我国植物化学研究开发领域的概况

中国位于亚欧大陆的东部和中部、太平洋的西岸，处于中纬度和低纬度，大部分地区属亚热带和温带，少部分属于热带。

中国具有山地、丘陵、高原、盆地、平原等多种地貌类型，是一个多山国家，山地、高原和丘陵约占全国土地总面积的 86%。我国气候带类型的多样性可以说在世界上绝无仅有。

我国高等植物近 3 万种，植物种类极其丰富。据统计，仅种子植物就有 24500 种，分属 253 科、3184 属，居世界第三位。

目前，我国药用植物资源有 385 科、2313 属、11148 种。药用植物资源包括藻类、菌类、地衣类、苔藓类、蕨类及种子植物等植物类群。

我国植物的多样化为植物化学研究提供了丰富对象,而且,我国医药的悠久历史和民间丰富的传统经验也为植物化学的发展提供了有利的客观条件。

我国对植物小分子的利用有悠久的历史,在周代和周代以前就有用植物做酒、醋和染料的记载,药用化学成分如樟脑、乌头类型生物碱的分离皆早于欧洲。遗憾的是和其他学科一样没有发展成为近代科学。

植物化学的研究是有机化学发展史的起点。

有机化学发展到今天的辉煌,与天然产物全合成的推动作用密切相关。天然产物为有机合成化学提供了超越人类想象力的绝妙模板。自然界层出不穷的新结构天然产物,为有机化学家提供了无穷的研究思维空间,为有机化学的各分支学科的发展提供了最直接的推动力。

我国近代植物化学研究始于 20 世纪 20 年代末,由赵承嘏开创,先后参加的老一代化学家有黄鸣龙、朱任宏、高怡生、曾广方、朱自清等。

20 世纪 60 年代,梁晓天、蔡宪元、林启寿和周维善等分别将核磁共振谱、玻璃板色谱、柱色谱等近代技术运用于植物成分的结构分析、成分分离,为我国植物化学的发展奠定了一个良好的基础。

1966 年,方起程改进了离子交换树脂技术提取分离生物碱,现仍广泛应用。

近 20 年来,随着分离技术的进步,各种分离材料(如键合硅胶、树脂、凝胶等)和分离手段(如快速色谱、高压液相色谱、离心色谱、逆流滴液分配色谱等)的开发和应用,使植物中含量较微的成分以及过去很难分离的水溶性成分等得以发现。

然而,质谱和核磁共振技术的应用,特别是近年发展起来的核磁共振二维谱技术以及快速原子轰击质谱(FAD-MS)、场解吸质谱(FDMS)、二级电离质谱(SIMS)等技术的应用,配合化学转化及降解反应,以及红外、紫外光谱和 X 衍射技术的应用等,使化学结构研究周期大大缩短,准确性不断提高。

目前,气相色谱-傅里叶变换红外光谱联用技术(GC-IR)、气相色谱-质谱联用技术(GC-MS)、高效液相色谱-傅里叶变换红外光谱联用技术(LC-IR)、高效液相色谱-质谱/质谱联用技术(LC-MS/MS)、高效毛细管电泳与电喷雾电离质谱的在线耦合、高效液相色谱-核磁共振波谱联用技术(LC-NMR)等已在植物化学研究中有了不同程度的应用。这不仅为生理活性物质的发现提供了基础,也为研究植物生命过程中的化学现象创造了条件。

植物化学不仅涉及到植物生物学的各个领域,而且与植物资源多方面的开发利用息息相关。因此,自 20 世纪 30 年代以来一直是国际上很活跃的研究领域之一。

目前,植物来源的功能性成分研究已成为国际热门。从最近 10 年国际植物化学发展趋势看,脱离生物活性的纯植物化学成分研究已经日趋萎缩,而围绕重大疾病寻找生物活性成分是最主要趋势。

在中国,天然药物主要是指中草药。我国为天然药物大国,但在世界植物药市

场所占份额仅为2%左右。发现天然药物特别是传统中药的生物活性成分,仍是我们当前的一个重要使命。

发展我国现代植物化学,要加强国际间合作,不断引进国际新技术、新仪器,如色谱-质谱-核磁联用等,用活性追踪分离,进行先导化合物的结构修饰、合成和仿生合成等。

目前,我国植物化学研究开发工作尚存在一些亟需解决的问题。

(1) 植物化学研究开发缺乏深度和广度。目前研究多数停留在提取分离、结构鉴定阶段,未能展开结构修饰、构效关系及与生命大分子的作用机理等方面的深入研究。研究对象多数局限于陆生植物,而对发现新颖结构、高活性和新作用机制化合物概率高的生物资源如海洋生物、植物,真菌、微生物、有毒生物和濒危生物以及其他天然产物资源(如昆虫、两栖及爬行动物)涉及较少。

(2) 从天然产物中寻找新药先导物,进而开发成为药物,是创新药物研制的突破口。然而,目前过分重视新成分、新结构,不重视天然产物的生物活性及其应用及知识产权的保护,严重阻碍了结构新颖、生物活性显著、有可能开发成为具有自主知识产权新药的天然产物的发现。

(3) 由于天然产物全合成的工作难度高、工作周期长和投资强度大等原因,国内对于天然产物合成研究正日益减少,对于结构复杂的天然产物的分离与全合成更少问津。这与国际上的发展趋势不相符合,严重制约了我国医药及其他涉及有机合成技术领域的发展。

(4) 植物化学研究中多学科交叉和配合没有得到应有的重视。植物化学研究的相关学科(分类、化学、生物、药理和资源等)缺乏相互沟通和协调。

(5) 植物化学研究方法学缺乏重大突破,新技术的应用滞后,研究思路不够开阔。天然产物化学成分的研究速度较慢,效率较低。

1.1.3 植物化学衍生学科

植物化学的发展要与多学科相互渗透、协调、促进发展。这样,一方面可以加快植物化学的发展速度,避免研究过程的各个方面之间脱节,另一方面可以促使新学科的诞生。

科技的发展促进了植物化学研究方法、技术的发展与更新,同时也促进了多学科之间更紧密的联系,使得学科与学科之间相互交融、渗透,从而衍生出许多新的学科,于是植物化学生态学、植物化学分类学和植物化学系统学应运而生。

在植物的研究中,植物小分子的多样性是令人惊奇的。以今天技术而言,用足够量的样品(以千克计)可以从一种植物中分离鉴定数百种小分子。

有人推测,一种植物可能发现2000~3000种小分子。而且,其分布有一定的规律性。这无疑对植物的分类、系统进化和生态学研究有促进作用。

1.1.3.1 植物化学生态学

化学生态学是研究探讨生物和生物、生物和环境间化学作用关系的一门新兴

学科。

1975年美国《化学生态学杂志》创刊,标志“化学生态学”的诞生,W. J. Bell 等的《化学生态学》专著(1984)为植物化学生态学的发展奠定了基础。

植物在生态系统中占有重要的地位,植物和植物、植物和微生物、植物和动物之间普遍存在着通过次生物质为媒介的化学作用关系,探讨发现并充分利用这些自然的化学作用规律对实现 21 世纪的持续发展具有重要价值,因而兴起了一门以研究植物次生物质生态功能为内容的学科——植物化学生态学。

植物化学生态学,不仅对揭示植物与其他有机体之间的化学作用关系和阐明生物共进化原理具有重要的理论价值,而且为符合持续发展策略的植物保护提供了新的机会。

在千姿百态的植物群落中,各种各样植物的组成是有一定规律的。有些植物只生长在特定的某一群落或某些群落中,有些植物则能生长在许多群落中,而有些植物的出现往往会引起其他植物的消退。植物克生作用是造成这些现象的重要因素之一。

近年来,植物和其他有机体通过次生物质为媒介的化学作用关系引人注目,其中植物的诱导化学防御、植物的化学通讯、植物次生物质和进化的关系、植物与人类的化学关系和海洋植物化学生态学是 21 世纪植物化学生态学值得关注的前沿领域。

植物化学生态学前沿领域的进展将为实现 21 世纪的持续发展,尤其是在生态安全条件下提高农业产量,并达到对病虫害的有效控制方面具有重要意义。

1.1.3.2 植物化学分类学

植物化学分类学(Plant Chemotaxonomy)是以植物的化学成分及其生物合成途径为依据,配合经典分类学及有关学科,对植物加以分类和记述,研究各类群间的亲缘关系,是探讨植物界的演化规律的一门科学。

(1) 植物化学分类法 植物化学分类学是经过化学在植物分类学中的应用,使得化学与植物学相互渗透而产生的一门崭新的边缘学科,也可以说是从分子水平上来研究植物的分类和植物界演化规律的科学。

植物的化学组成随种类而异,有些成分在植物中的分布很不均衡,有些成分分布只限于某种或几种植物种,有些则较广泛地分布于有亲缘关系的邻近的属或科中,而有些则可见于关系很疏远的不同植物类群。

但是,植物的亲缘关系和其化学成分之间还是有密切关系的,植物化学成分的存在不是偶然的,有可确定的生源和生态基础。

因此,化学成分可以作为分类的一项重要参考指标来研究生物类群之间的亲缘关系和演化规律,揭示物种在分子水平上所反映出来的特有现象,从而可以探索各种植物之间的关系和起源。

传统分类学以植物外部形态和性状为依据,仅限于区别植物种类的异同和分类

群的鉴定。

自林奈提出“自然系统”的思想以来,人类已给200多万种生物进行了分类命名,但基本上都是依据生物个体的形态结构特征进行的,这种方法有很大的局限性和人为性。

药用植物化学分类学的主要依据是小分子化合物和生物大分子化合物。

随着科学的发展,在形态学方法基础上发展出染色体分类法、DNA分子杂交法、显微分类法、化学分类法等方法。

在化学分类法中,依据药用植物次生代谢产物(如糖类、黄酮类、植物碱、挥发油、鞣质等)以及有生物信息的大分子(如RNA及蛋白质等)在化学性质上的差异,已发展出色谱、光谱、免疫学等技术。

傅里叶变换红外光谱法(FTIR)是目前应用较广的分类法之一。该方法已应用于植物药材的质量控制、种类认定、热稳定性的实时原位跟踪以及细菌的快速鉴别、发育监控和分类。而相应的近红外和傅里叶变换拉曼技术对人参等药用植物的产地(中国、韩国)的鉴别也曾有报道。

(2) 植物化学分类学的意义 植物化学分类学,主要对各级分类群所含的化学成分的特征及其合成途径进行比较研究,探索各类化学成分在植物界的分布规律,研究植物成分本身的进化;根据植物所含的化学成分及其生物合成途径,配合传统分类学及各有关学科,共同研究植物类群的起源和植物系统发育。

植物化学分类学不仅提供分子水平的分类证据,以弥补植物形态分类的不足,还揭示植物系统发育在分子水平上所反映出来的规律。

1.1.3.3 植物化学系统学

植物化学系统学的目的是应用化学的资料去解决系统学的问题。由于用化学成分去解释植物进化及推断系统关系日趋普遍,使得植物化学系统学这门交叉学科有了更广阔的发展余地。

随着分子生物学研究的深入和现代分析技术的兴起,可用于作系统比较的天然植物产物日益增多,从而使植物化学系统学为传统的植物分类学及植物系统进化提供了更多新的证据。

1.2 植物化学成分的生源研究

在植物众多的化学成分中,有许多已被阐明了它们的化学结构和药理作用,其中很多已用于临床。这些成分中有的已可用化学的或生物的方法进行合成。但尚存在的问题是:这些成分在植物体内是怎样形成的?是由何种物质、经过什么新陈代谢途径形成的?

为了解决这些问题,许多植物学、生物学、植物化学、生化学的研究工作者从可能的新陈代谢过程、生物化学反应等多方面进行推测这些成分在植物体内的形成过程,这就是植物化学成分的生源学说(Biogenesis Biogenetic Origin)。

植物化学成分的生源研究，主要是研究各类成分在体内生物合成的途径，各种酶在过程中所起的作用以及过程中所产生的各种中间产物的化学变化并测定它们的结构。

生源的研究有多种设想与途径，因而也形成了多种学说，如异戊二烯法则、醋酸学说等已普遍应用于研究药用植物有效成分的生物合成及其途径。

1.2.1 植物的新陈代谢及其产物

植物为了维持生长、运动、繁殖等生命活动，必须不断地与周围环境进行物质交换，在此过程中所发生的物质合成、转化和分解的化学变化总称为代谢 (metabolism)。

1.2.1.1 植物的初生代谢与次生代谢

绿色植物及藻类因为有叶绿素，可以通过光合作用将二氧化碳和水转化成糖类，并放出氧气，生成的糖则进一步通过不同途径（如磷酸戊糖途径、糖降解途径、三羧酸循环）产生核酸合成的原料如核糖等以及脂类合成的原料如丙二酸单酰辅酶 A (malmyl CoA) 等，并通过固氮反应得到一系列的氨基酸（为合成肽和蛋白质的重要原料）。

一方面，植物从环境中吸收简单无机物，转化为复杂的有机物，综合成自身的一部分，同时把太阳能转化为化学能，贮存于有机物中。这种在合成物质的同时又获得能量的代谢过程，叫做同化作用 (assimilation) 或合成 (anabolism)。

另一方面，植物又将体内复杂的有机物分解成简单的无机物。同时，把贮存在有机物中的能量释放出来，供生命活动。这种在分解物质的同时又释放能量的代谢过程，叫做异化作用 (disassimilation) 或分解 (catabolism)。

有些植物，能直接利用无机碳化合物来合成有机物，这些植物称为自养植物 (autophyte)，如大多数高等植物和少数具有色素的微生物。

另有些植物，只能利用现成的有机物，经代谢转化为自身的生命物质，这些植物称为异养植物 (heterophyte)，如某些微生物和少数缺乏色素的寄生高等植物。

从进化观点来看，异养植物是最先出现的一些比较原始的生物类型，光合细菌是其发展到自养植物的桥梁。而自养植物在植物界最普通且很重要。

自养植物的同化作用又分两种类型。

绿色植物通过光合作用 (photosynthesis) 进行合成，即吸收阳光的能量，同化二氧化碳和水，合成碳水化合物，并释放氧气。此过程可用下列方程式表示：



不具备光合色素的自养型细菌，通过化能合成作用 (chemosynthesis) 来合成，即只能利用无机物氧化分解出的化学能量作为还原二氧化碳的能量来源，它只能在有氧气的环境中进行。

有合成必然有降解，两者构成了植物代谢的过程。各种化合物的合成和降解分别称为合成代谢和降解代谢，在每个合成或降解反应中都由酶进行调节。合成生命