



卫生部“十一五”规划教材
全国高等医药教材建设研究会规划教材

全国高等中医药院校研究生规划教材
供中医药、中西医结合各专业研究生使用

中药化学专论

[主编] 匡海学

用
大
学
人
生
幸
逢
五
十
年
中
华
人
民
出
版
社
为
中
国
人
民
服
务
五
十
年
中
华
人
民
出
版
社
为
中
国
人
民
服
务
五
十
年
中
华
人
民
出
版
社
为
中
国
人
民
服
务

人民卫生出版社





全国高等中医药院校研究生规划教材
供中医药、中西医结合各专业研究生使用

中药化学专论

主 编 匡海学

副主编 周 然 孔令义

编 者 (以姓氏笔画为序)

孔令义 (中国药科大学)	陈建真 (浙江中医药大学)
石任兵 (北京中医药大学)	罗永明 (江西中医学院)
冯卫生 (河南中医学院)	周 然 (山西中医学院)
匡海学 (黑龙江中医药大学)	饶高雄 (云南中医学院)
刘金旗 (安徽中医学院)	祝晨蓀 (广州中医药大学)
李 祥 (南京中医药大学)	崔 健 (长春中医药大学)
杨秀伟 (北京大学)	梁光义 (贵阳中医学院)
杨炳友 (黑龙江中医药大学)	董小萍 (成都中医药大学)
	窦德强 (辽宁中医药大学)

人 民 卫 生 出 版 社

图书在版编目 (CIP) 数据

中药化学专论/匡海学主编. —北京: 人民卫生出版社, 2010. 9

全国高等中医药院校研究生规划教材

ISBN 978-7-117-12605-2

I. ①中… II. ①匡… III. ①中药化学-研究生-教材 IV. ①R284

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2010) 第 060022 号

门户网: www.pmph.com 出版物查询、网上书店
卫人网: www.ipmph.com 护士、医师、药师、中医师、卫生资格考试培训

版权所有, 侵权必究!

本书本印次封底贴有防伪标, 请注意识别。

中药化学专论

主 编: 匡海学

出版发行: 人民卫生出版社 (中继线 010-59780011)

地 址: 北京市朝阳区潘家园南里 19 号

邮 编: 100021

E - mail: pmph@pmph.com

购书热线: 010-67605754 010-65264830

010-59787586 010-59787592

印 刷: 北京人卫印刷厂

经 销: 新华书店

开 本: 850×1168 1/16 印张: 32.5

字 数: 917 千字

版 次: 2010 年 9 月第 1 版 2010 年 9 月第 1 版第 1 次印刷

标准书号: ISBN 978-7-117-12605-2/R · 12606

定 价: 59.00 元

打击盗版举报电话: 010-59787491 E-mail: WQ@pmph.com

(凡属印装质量问题请与本社销售中心联系退换)

全国高等中医药院校研究生教育 卫生部“十一五”规划教材指导委员会名单

主任委员 张伯礼

副主任委员 (以姓氏笔画排序)

王永炎 王庆国 王新陆 匡海学
吴勉华 范昕建 洪 净 徐志伟
曹洪欣 谢建群

委 员 (以姓氏笔画排序)

于 越 王 华 王 键 王之虹
尤昭玲 左铮云 石 岩 尼玛次仁
刘宏岩 刘振民 严世芸 李庆生
李佃贵 李灿东 李金田 李德新
余曙光 苗 茂 范永昇 周 然
周永学 周铭心 郭伟星 唐 农
梁光义 彭 勃 鲁兆麟

秘 书 (以姓氏笔画排序)

孙 勇 呼素华 周桂桐

出版说明

近些年来,随着中医药院校研究生教育规模的不断壮大,中医药研究生培养中硬件及软件水平相对不足与中医药高层次人才需求的矛盾日益突出,如何解决这一矛盾,成为当前中医药研究生培养教育中迫切需要解决的问题。

为了适应新时期中医药研究生教育和教学的需要,全国高等医药教材建设研究会、卫生部教材办公室自2006年开始,对全国各高等中医药院校的研究生院(处)、研究生导师、院士、名老中医、在校和毕业后的研究生,进行了大量、深入的调研和专家论证工作。在深入探讨“研究生规划教材在研究生培养过程中应该发挥的作用;研究生教材与五年制本科教材、七年制教材,以及专著之间的区别与联系;研究生教材与导师个性化培养的关系”的基础上,根据中医研究生教育的实际需要,策划组织了这套全国高等中医药院校研究生规划教材。

本套教材以“提高文化底蕴、加强基础知识;突出中医药经典原著研究;提高临床诊治技能;吸纳现代科技手段与方法”为宗旨,构建了基础、经典、临床、中药4个系列的40种书目。全套教材在内容的组织上,突破传统应试教育教材系统、全面的特点,紧紧围绕研究生的培养目标,着眼于学生进一步获取知识、挖掘知识和实践创新能力的培养;以问题为中心,围绕本学科的重点、难点、热点和疑点进行取材,深入展开某些方面的理论探讨和实践研究,在提高中医药研究生的动手能力、创新能力和思维能力上下功夫。4个系列中,基础系列主要以“够用”、“深度和广度”为基点,从中医研究生文化专业基础到科研能力各个方面可能遇到的实际问题展开。经典系列主要以条文内容为核心,进行勾勒理论、梳理观点、联系临床实际,阐发经典理论精髓,引导学生深入探索和挖掘。临床系列在中医优势病种的基础上,着重学科的重点、难点、热点内容,以问题为中心,深入探讨中医临床预防、诊治的理论与方法,启迪和培养研究生临床思辨能力。中药系列以当前学科领域研究的热点入手设立专题进行展开,深入探索和阐释本专业的理论与技术,启发学生的创新性思维。

本套教材的主编大多为目前各学科内较有影响和威望的资深专家,他们从事研究生教育工作多年,具有丰富的教学经验,并对编写本学科研究生教材有很多独到的见解。教材编写中经过主编人会议、各科目编写会议、审定稿会议、主编及副主编统稿会议,参加编写的各位专家(包括港澳台、境外及其他学科专家)对教材的编写深入研讨,积极探索,确保了教材的科学性、先进性和适用性。

本套教材是自有中医药研究生教育制度以来,首次规划出版。这套教材为研究生基础教育搭建了平台,对开展和促进导师的个性化培养,提高中医药高素质人才的水准,无疑是非常必要的,对推动中医药更大的发展具有重大的现实意义和历史意义!

然而,毕竟是首次组织编写中医药研究生教材,其中不乏有不尽人意之处,或不妥或缺憾,冀海内外专家学者及广大读者朋友提出宝贵意见,以便不断完善和提高。

人民卫生出版社

2008年12月

教材目录

一、基础系列

中国古代哲学与中医学	主编	孙广仁
自然辩证法	主编	张宗明
古代汉语	主编	许敬生
中国传统文化概论	主编	张其成
中医古籍校读法	主编	段逸山
中医各家学说专论	主编	鲁兆麟
医学科研思路方法与程序	主编	贲长恩
中医药文献信息获取与利用	主编	蒋永光
中医临床辨证思维方法	主编	张伯礼
中医药研究常用分子生物学技术	主编	方肇勤
中医基础理论专论	主编	郭霞珍
循证中医药临床研究方法	主编	刘建平
临床医学影像学	主编	周伟生

二、经典系列

黄帝内经理论与实践	主编	王庆其
伤寒论理论与实践	主编	郝万山 李赛美
金匱要略理论与实践	主编	张家礼 陈国权
温病学理论与实践	主编	杨进
难经理论与实践	主编	烟建华
针灸甲乙经理论与实践	主编	李鼎
神农本草经理论与实践	主编	张树生

三、临床系列

中医外感病证临床研究	主编	吴银根 黄永生
中医内伤杂病临床研究	主编	金实
中医急诊临床研究	主编	姜良铎
中医外科临床研究	主编	唐汉钧
中医妇科临床研究	主编	肖承惊
中医儿科临床研究	主编	汪受传 俞景茂
中医骨伤科临床研究	主编	施杞 王和鸣
中医眼科临床研究	主编	段俊国

中医耳鼻咽喉科临床研究	主编	王士贞
针灸学临床研究	主编	王玲玲
推拿学临床研究	主编	严隽陶
中医心理学临床研究	主编	何裕民
中医养生保健研究	主编	谭兴贵

四、中药系列

中药化学专论	主编	匡海学
中药药理学专论	主编	沈映君
中药鉴定学专论	主编	康廷国
中药炮制学专论	主编	蔡宝昌 龚千锋
中药资源学专论	主编	万德光 王文全
中药药剂学专论	主编	张兆旺
中药现代生物技术	主编	胡之璧

前 言

21 世纪初,中医药事业面临重大的发展机遇。伴随着经济社会与科学技术的发展,人们的生活水平提高、生活节奏加快、生活方式和生活环境改变,危害人类生命和生存质量的疾病谱出现了很大的变化,与此同时,医学模式与健康观念等也发生了重大的转变,使得人们更加关注和重视中医药在保障人类健康中的独特的重要作用。另一方面,党和国家对中医药事业给予了前所未有的强力支持。中医药蓬勃发展的春天已经到来,这不仅是中医药工作者的幸事,也为中医药工作者提出了严峻的挑战。

刚刚展开的新世纪,是科学技术日新月异、迅猛发展的新世纪,中医药事业的发展同样要依靠科技创新的推动。在波澜壮阔的中医药现代化和国际化的进程中,处于中药学学科基础地位的中药化学,其基础性地位和引导性作用的重要性与影响力,近年都达到了历史的最高峰。培养造就一支素质优良、业务精湛、勇于创新、有能力承担中医药现代化研究任务,并具备把握学科前沿、参与国际竞争与合作的中药化学高级科研人才队伍,已成为一项十分重要而光荣的任务。

中药化学是一个具有与时俱进特性的学科。本书是集全国各中医药院校、综合性大学和药科大学的多年从事中药化学研究和指导本学科研究生的众多研究生指导教师,在诸位研究生指导教师的讲义和教学参考书的基础上,参考有关专著和文献,并结合各自的教学、科研工作的经验与体会编写而成的。本书不仅可作为中药化学学科研究生以及相关学科研究生的教学用书,也可供高等学校师生、有关机构的科研工作者参考。

本书分九章编写而成,并力求更多地体现先进性,突出本学科国内外前沿成果新进展的介绍,力求与国际本专业领域水平接轨;突出实用性,密切结合研究生研究需求,加强新理论、新方法、新技术等在本学科应用的介绍,着力培养研究生的创新思维和提高研究生的科研能力。第二章和第三章对在本科学习阶段涉及的现代提取分离方法、现代波谱技术在中药有效成分研究中的应用,进行了更加深入的介绍,特别是对近年快速发展的 2D-NMR 谱的应用进行了重点介绍。第八章对生物碱、三萜类、甾体类、黄酮类、木脂素类、香豆素类、环烯醚萜类和鞣质类等重要结构类型的中药化学成分的研究进展,分别进行了介绍。根据中药化学学科发展的趋势,为了扩展研究生的研究思路,更准确地把握学科发展的前沿和动态,满足目前与未来多学科相互交叉、相互渗透而对研究者提出的更高要求,从第四章到第七章以及第九章,共用五章的篇幅,对在本科学习阶段较少接触,而在近年得到重视并取得重要进展的中药化学成分的生物合成、结构修饰和改造、生物转化、中药有效成分的 ADME(吸收、分布、代谢与排泄)以及中药复方药

效物质基础研究等分章予以介绍。

在本书的编写过程中,得到了编委所在高校的大力支持。黑龙江中医药大学的关枫博士、孟永海博士、周媛媛博士和夏永刚博士等为本书的编写做了许多重要但默默无闻的工作,在此一并深表谢忱!

编写研究生教学用书,对我们来说是一个新的尝试。由于我们的水平有限,书中或许存在一些不足或不妥之处,敬请读者批评指正。

匡海学
黑龙江中医药大学
2010年3月

目 录

第一章 绪论	1
第一节 中药有效成分与中药药效物质基础	2
第二节 中药有效成分与中药药效物质基础	4
一、以化学研究为导向的中药有效成分研究方法.....	4
二、基于药效药理学导向的中药有效成分研究方法.....	4
三、基于中药血清药物化学的中药有效成分研究方法.....	5
四、基于高通量筛选的中药有效成分研究方法.....	5
五、基于药味与药量加减拆方的中药有效成分研究方法.....	6
六、基于中药配位化学假说的中药有效成分研究方法.....	6
七、基于生物活性筛选结合化学在线分析的中药有效成分研究方法.....	6
八、基于中药基因组学的中药有效成分研究方法.....	6
第三节 中药有效成分与中药药效物质基础研究现状与发展趋向	7
第二章 中药有效成分的提取分离方法	10
第一节 中药有效成分的提取方法	10
一、经典提取方法评述.....	10
二、中药有效成分提取新技术与新方法.....	12
第二节 中药化学成分的分​​离方法	23
一、普通分离法评述.....	24
二、中药化学成分分离新技术与方法.....	28
第三章 现代波谱技术在中药化学成分结构研究中的应用	62
第一节 常用波谱解析方法概述	62
第二节 核磁共振谱在中药化学成分结构研究中的应用	63
一、 ¹ H-NMR 谱.....	63
二、 ¹³ C-NMR 谱.....	65
三、2D-NMR.....	69
第三节 质谱在中药化学成分结构研究中的应用	80
一、质谱仪.....	80

二、离子源	81
第四节 旋光光谱与圆二色谱在中药化学成分结构研究中的应用	87
一、旋光光谱	87
二、圆二色谱	87
三、Cotton 效应的应用	88
第五节 X 射线衍射技术基本原理及应用	92
一、概述	92
二、X 射线衍射基本原理	93
三、单晶 X 射线衍射技术在中药研究中的应用	95
第六节 综合解析	101
一、综合解析的一般程序	101
二、综合解析实例	102
第四章 中药化学成分生物合成的研究	115
第一节 中药化学成分生物合成概述	115
一、生物合成的概述	115
二、中药化学成分与二次代谢的关系	116
第二节 中药化学成分生物合成在中药化学研究中的应用	119
一、中药化学成分的主要生物合成途径	119
二、黄酮类化合物的生物合成研究	125
三、生物碱类化合物的生物合成研究	127
四、萜类化合物的生物合成研究	129
五、木质素的生物合成研究	131
第三节 中药化学成分生物合成研究展望	132
第五章 中药有效成分的结构修饰和改造	135
第一节 中药有效成分的结构修饰和改造的意义	135
第二节 中药有效成分的结构修饰和改造的方法	137
一、氧化反应	137
二、还原反应	143
三、各种 C—C 键连接的反应	147
四、重排反应	150
第三节 复杂分子结构改造的策略与实例	151
一、先导化合物的结构修饰与改造方法	152
二、中药活性成分结构修饰与改造实例	164
第六章 中药化学成分的生物转化	173
第一节 中药化学成分生物转化概述	173
一、羟基化反应	174
二、苷化反应	176
三、水解反应	176
四、氧化反应	178

五、甲基化反应·····	179
第二节 中药化学成分生物转化主要研究方法及其应用·····	180
一、微生物转化·····	180
二、植物培养生物转化·····	184
三、酶生物转化·····	187
第三节 中药化学成分生物转化研究展望·····	188
一、中药化学成分生物转化在中药研究中的应用·····	188
二、中药化学成分生物转化研究现状及发展趋势·····	192
第七章 中药有效成分的代谢·····	196
第一节 中药代谢研究的意义·····	196
一、药物生物转化和(或)代谢研究与新药设计·····	197
二、药物生物转化和(或)代谢研究促进了新种细菌的发现·····	198
三、药物生物转化和(或)代谢研究促进了新酶的发现·····	198
四、药物生物转化和(或)代谢新酶的发现促进了器官或组织生化特性的研究·····	198
五、药物生物转化和(或)代谢研究促进了对肝脏 CYP 的认识·····	198
六、中药成分的肠内菌转化研究加深了对中医“证”的认识·····	199
七、中药成分的肠内菌生物转化研究是中医药现代化研究的切入点之一·····	199
八、药物生物转化和(或)代谢研究促进形成新的交叉学科增长点·····	200
九、中药成分生物转化和(或)代谢研究与药物原始创新·····	201
十、药物代谢研究与药效结构优化·····	201
十一、新药开发·····	201
第二节 中药成分肠内菌生物转化和(或)代谢·····	202
一、中药成分肠内菌生物转化和(或)代谢的生物学基础·····	202
二、肠内菌与中药成分结构的生物转化·····	205
第三节 中药化学成分肠吸收研究·····	213
一、Caco-2 细胞单层模型简介·····	213
二、Caco-2 细胞单层模型的评价·····	214
三、应用·····	215
四、研究实例·····	217
第四节 中药成分的肝脏生物转化和(或)代谢·····	218
一、肝脏药物代谢的生化基础·····	218
二、肝脏药物代谢酶系统·····	219
三、肝脏呼吸链——电子传递系统·····	220
四、药物代谢与 CYP·····	220
五、天然化合物肝脏代谢反应类型和特点·····	221
六、肝脏药物代谢的结合反应·····	231
七、影响肝脏药物代谢的因素·····	238
八、研究实例——肉豆蔻木脂素的肝微粒体生物转化·····	242
第五节 中药成分体内代谢研究与有效成分发现·····	244
一、芍药的研究·····	244
二、人参的研究·····	247

三、大黄和番泻叶的研究	249
第八章 中药主要化学成分的研究进展	255
第一节 生物碱类化合物	255
一、生物碱类化合物成分研究进展	255
二、生物碱类化合物的提取与分离	261
三、生物碱类化合物的结构研究进展	268
四、结构研究实例	280
第二节 三萜类化合物	287
一、三萜类化合物研究进展	287
二、三萜类化合物的提取与分离	294
三、三萜类化合物的结构研究进展	296
四、三萜类化合物的结构研究实例	303
第三节 甾体类化合物	314
一、甾体类化合物研究进展	314
二、甾体类化合物的提取与分离	322
三、甾体类化合物的结构研究进展	324
四、结构研究实例	330
第四节 黄酮类化合物	339
一、黄酮类化合物成分研究进展	340
二、黄酮类化合物的提取与分离	345
三、黄酮类化合物的结构研究进展	349
四、结构研究实例	361
第五节 木脂素类化合物	370
一、木脂素类化合物成分研究进展	370
二、木脂素类化合物的提取与分离	383
三、木脂素类化合物的结构研究进展	384
四、结构研究实例	390
第六节 香豆素类化合物	406
一、概述	406
二、香豆素类化合物成分研究进展	410
三、香豆素类化合物的结构研究进展	414
四、结构研究实例	422
第七节 环烯醚萜类化合物	430
一、环烯醚萜类化合物成分研究进展	430
二、环烯醚萜类化合物的提取与分离	438
三、环烯醚萜类化合物的结构研究进展	438
四、结构研究实例	440
第八节 鞣质类化合物	452
一、鞣质类化合物成分研究进展	452
二、鞣质类化合物的提取与分离	466
三、鞣质类化合物的结构研究进展	469

四、结构研究实例	471
第九章 中药复方药效物质基础研究	480
第一节 中药复方药效物质基础研究的重要意义	480
一、中药复方药效物质基础研究是中药复方研究的关键科学问题	480
二、对中药复方药效物质基础研究有利于阐释中医药理论	481
三、中药复方药效物质基础研究可促进中西医结合	482
四、中药复方药效物质基础研究是中药现代化的必经途径	483
五、中药复方药效物质基础研究可促进中药制剂等相关学科的发展	484
第二节 中药复方药效物质基础化学研究的现状	484
一、通过拆方对中药复方物质基础的研究	484
二、对药的物质基础研究	485
三、中药复方配伍理论的物质基础研究	485
四、中药复方化学成分或有效部位的分离鉴定	486
五、中药复方有效成分配伍和有效组分配伍的研究	487
六、中药复方物质基础定性定量分析研究	487
七、中药复方指纹图谱研究	488
八、中药复方中化学物种形态和生物活性关系的研究	489
九、中药复方提取分离新技术的应用	490
第三节 中药复方药效物质基础研究的主要思路、方法与发展趋势	491
一、坚持化学成分研究和药理研究相结合原则	491
二、中药复方血清靶成分研究	492
三、采用化学计量学的方法进行中药复方药效物质基础研究	493
四、采用组合化学的方法进行中药复方药效物质基础研究	494
五、中药复方药效物质基础体内代谢研究	494
六、应用分子生物学技术与方法进行中药复方药效物质基础研究	495
七、应用系统生物学技术和方法进行中药复方药效物质基础研究	496

绪 论

中药是中医学的重要组成部分,也是我国传统防治疾病的重要武器。除少数品种如青黛、冰片、阿胶等为人工制品外,中药大都是来自于植物、动物、矿物的非人工制品,并以植物来源为主且种类繁多。第三次全国中药资源普查统计结果表明,已经鉴定而有学名的中药约有 12 807 种,其中植物药为 11 146 种,动物药为 1581 种,矿物药约为 80 余种。随着科学技术的进步和医疗实践的发展,陆续还将会发现更多的中药资源。

中药化学(Chemistry of Chinese Medicine)是一门以中医药基本理论为指导、结合临床用药经验、主要运用化学的理论和 method 及其他现代科学理论和技术等研究中药防治疾病的物质基础——化学成分(主要是有效成分)的学科。具体地说,中药化学主要研究中药中有效成分或药效物质基础的化学结构、理化性质、提取分离方法与技术、结构鉴定(或确定)、检识与分析方法以及生物合成途径和必要的化学结构修饰或改造等,同时也涉及有效成分或药效物质基础的结构与药效之间的关系,以及外界条件对这些成分消长的影响等方面的研究内容。中药化学既不同于一般含义的植物化学(Phytochemistry)研究,也不同于现代药学中的天然药物化学(Natural Medicinal Chemistry)研究,尽管它们在研究内容和研究方法上有很大的相近或相同之处^[1]。

从高等学校专业教育来说,《中药化学》是中药学类专业的知识结构体系中一门非常重要的专业课程,其知识内容和其他专业课程和部分专业基础课程不可或缺的基础,且融会贯穿于这些课程之中,具有承上启下、联络贯通的重要作用。因此,它既是一门重要的专业课程,又是一门重要的专业基础课程,对于中药学类专业人才培养目标的实现起着至关重要的作用。从学科体系来说,中药化学是组成中药学一级学科的重要的二级学科。中药化学研究是中药现代化研究的重要内容。通过对中药(及复方)有效成分的研究,不仅可以阐明中药性味及功效,即防治疾病的物质基础,寻找或发现可供创制新药的新的有效物质或提供先导化合物,同时对建立中药及复方的质量评价体系与标准,提高、保证中药材及中药制品的质量和在国际市场上的竞争力,开发新的天然药物资源,探讨中药及复方防治疾病的机制,进而促进和提高中医基础理论研究和临床研究的整体水平,加快整个中医药研究的步伐,都具有极其重要的意义。

中药化学是中医药理论与现代科学如化学、物理学、生物学、植物学、现代医药学等理论和技术相互渗透、相互结合的新兴交叉学科,其学科基本属于应用基础学科。一方面,中医药理论与现代科学、医药学等不断为本学科发展进步提供不竭的营养与动力。另一方面,本学科的进步与发展不仅为中医药的学术进步与发展以及中药现代化研究提供不可或缺的基础,并与中医药其他学科理论与技术相互交叉渗透,不断形成新的学科或研究领域。如中药化学与中药药性理论的结合,形成

中药药性(性味)化学;中药化学与方剂学的结合,形成方剂化学;中药化学与药物代谢动力学的结合,形成中药药代动力学;中药化学与血清药理学的结合,形成中药血清药物化学;中药化学与中药炮制学的结合,形成中药炮制化学;中药化学与中药资源学的结合,形成中药资源化学;中药化学与分析化学的结合,形成中药质量分析学等。由此可见,推动中药化学学科的进步与发展,具有重大的科学意义和应用价值。

与传统中医学不同,《中药化学》是一门时代性非常强的课程或学科,与现代科技发展息息相关。随着时代的发展和科技的飞速进步,中药化学的内容会不断地、快速地得到更新和发展。因此,注重对有关中药现代化研究的新思路、新方法的了解,注重国内外本学科的新成果、新技术、新发展以及相关学科新理论与新技术在本学科中的应用,对于学习、掌握中药化学的知识与技术,从事中药化学研究都是十分重要的。

第一节 中药有效成分与中药药效物质基础

来源各异的中药中的化学成分是十分复杂的。这种复杂性,不仅表现在不同的中药可能含有不同类型的化学成分,且每种类型成分的数目往往也是相当庞大的,也体现在即使同一种中药,也可能含有大量的结构类型各不相同的化学成分。例如,中药人参中就含有人参皂苷 R_o 、 R_{a_1} 、 R_{a_2} 、 R_{b_1} 、 R_{b_2} 、 R_{b_3} 、 R_c 、 R_d 、 R_e 、 R_f 、 R_{g_1} 、 R_{g_2} 、 R_{g_3} 、 R_{h_1} 、 R_{h_2} 及 R_{h_3} 等 30 余种三萜皂苷类成分以及挥发油、甾体化合物、多糖、氨基酸、肽类、蛋白质、炔醇、有机酸、维生素、微量元素等其他各类成分。

中药中化学成分的复杂性,是中药常具有多方面功效或多种药理作用的物质基础。如《本草纲目》记载大黄主治“下瘀血、血闭、寒热,破瘕积聚、留饮宿食,荡涤肠胃,推陈出新,通利水谷,调中化食,安和五脏……,直至于下痢赤白,里急腹痛,小便淋沥,实热燥结,潮热谵语,黄疸诸火疮。”一味大黄能有如此多方面的功效,是与其所含有的多种类型的化学成分直接相关的。现已知大黄中的番泻苷类成分具有泻下作用,游离蒽醌苷元则对多种细菌有抑菌活性,苯丁酮类具有一定的抗炎镇痛作用,大黄鞣质具有明显的降低血清尿素氮的作用,而芪类成分则可能是抗高血脂的有效成分。

在学习中药化学知识、阅读中药化学文献或对中药中复杂的化学成分进行的过程中,经常会碰到诸如中药有效成分、无效成分、有毒成分或毒性成分、生物活性成分、有效部位、有效组分、药效物质基础等概念。这可以看作是研究者从不同的角度,依据中药化学成分对人体或其他生物的作用或影响而对不同层次的中药化学成分进行的分类。这些概念内涵不同,反映了研究者在中药化学研究进程中的积极探索、与时俱进的精神风貌,同时也反映了人们进行中药化学研究时的不同的学术思想与研究追求。

一般而言,有效成分、无效成分、有毒成分或毒性成分是相对平行对应使用的一组概念。把那些能起防病治病作用的成分称为有效成分,这些作用可能与中药传统功效相符,也可能是新发现的药效药理作用。把具有毒副作用的成分称为毒性成分或有毒成分,同样,这些毒副作用可能是传统记载的毒性,也可以是新发现的毒副作用。应指出的是有些有毒成分同时也具有防病治病的作用。把既不产生防病治病作用、又无毒副作用的成分称为无效成分。在这里需要注意的是,这些概念主要是针对中药化学成分在临床上应用出现的反应性质而言的。在这些概念的基础上,相继又延伸出有效部位、有效部位群等概念。含有有效成分的中药材溶剂提取物称为有效部位。在中药化学中,常将含有一种主要有效成分或一组结构相近的有效成分的提取分离部位称为有效部位或有效组分,如人参总皂苷、苦参总生物碱、银杏叶总黄酮等。中药特别是方剂经不同溶剂提取处理后可以得到若干有效部位,几个不同的有效部位可以组成有效部位群。

中药有效成分与无效成分以及毒性成分之间的区分不是一成不变的,只是相对的,有时也会发生相互转变的。一方面,随着科学的发展和人们对客观世界认识的提高,一些过去被认为是无效成分的化合物(如某些多糖、多肽、蛋白质和油脂类成分等),现已被发现具有很好的药效,或已有的有效成分又被发现具有新的药理作用等。另一方面,某些过去被认为是有效成分的化合物,其结论随着中药化学研究的深入而被修改或进一步完善,如近年来的实验证实,麝香的抗炎有效成分是其所含的多肽而不是过去认为的麝香酮,这样的实例不胜枚举。中药中还有一些本身不直接具有防病治病作用的化学成分,但它们受采收、加工、炮制或制剂过程中一些条件的影响而产生的次生产物,或它们口服后经人体胃肠道内的消化液或细菌等的作用后产生的代谢产物,以及它们以原型的形式被吸收入血液或被直接注射入血液后在血液中产生的代谢产物却具有防病治病的作用,这些化学成分理应也是有效成分。还有某些化学成分对健康机体无任何影响,但对病理状态下的机体却有一定的治疗作用,有些化学成分的防治疾病作用只有在方剂配伍的情况下才能体现出来,这样的化学成分无疑也是有效成分。同时,我们还要认识到,所谓的有效成分都是针对一定疾病而言的,某种成分对这种疾病来说是有效成分,但对另一种疾病而言,则可能成为无效成分。甚至某些毒性成分,在一定的剂量内或对一定的疾病来说,可能又会成为有效成分,例如,砒霜的毒性成分是三氧化二砷,但这种有毒物质却是治疗白血病的良药。与此相反,一些有效成分在临床实践中出现毒副作用的报道亦不鲜见。可见,对中药有效成分与无效成分的概念不能以简单机械的态度去理解,在开展中药研究时必须缜密、系统、全面地进行才能真正阐明中药的有效成分。

中药生物活性成分则基本是现代医药学基于更宽泛的生物活性而使用的概念。这一概念可以不考虑中药的传统功效,甚至可以不考虑能否在医药领域中的应用,因而这个概念不仅包括了上述有效成分、毒性成分,甚至也可能包括了一些无效成分。因为一些在临床上的无效成分可能仍然会具有某种生物活性。显然,研究中药或天然药物中的生物活性成分与阐明中药的防治疾病的本体物质有时是会有相当大距离的。

近年来,研究者们也经常使用中药或方剂药效物质基础的概念。这主要是因为有效成分常常是指一种化学单体化合物或一类化合物,而实际上中药及复方的作用特点经常是多成分、多功能、多靶点、多层次,显然仅用一种或少数成分是很难阐明中药及复方的复杂体系与作用机制的。因此,人们着眼于中药或复方的功效,把对中药及复方的功效有贡献的成分统称为中药或复方药效物质基础。例如,对六味地黄丸的血清药物化学研究结果表明^[2],口服六味地黄丸后从血液发现了11个人血成分,其中7个成分为六味地黄丸中原来所含的活性成分(即为其有效成分),而其余4个为新产生的代谢产物,这些原有成分及代谢产物均有体内直接作用,从这种意义上来说,这11个成分均为六味地黄丸的药效物质基础。中药复方的优势在于方中各药配伍后可起到协同或拮抗的作用从而对机体进行整体调节,其化学成分并不等于单味药化学成分的简单相加。在提取过程中,由于温度、pH值、煎煮时间等因素使复方中的某些成分发生溶出率的改变、挥发、水解、氧化甚至产生沉淀等物理的和化学的变化,使原有的某些成分消失或是产生新的化合物,从而使配伍表现出减毒、增效甚至产生单味药不具备的药理作用,在这个过程中所产生的对功效有贡献的化合物都应视为中药药效物质基础。可见,中药药效物质基础是一个更能体现中药整体作用的概念,其研究范围远比单纯的中药有效成分研究更为广泛、深入和细致^[3]。

中药除个别单用外,主要是以复方入药。中药复方配伍是中医用药的特点之一,因此我们不但要研究单味药的有效成分和药效物质基础,还要对中药复方进行深入的化学和药理学研究,继而科学地阐明中药复方配伍规律以及作用机理等问题。中药复方中的化学成分更为众多,相互关系极为复杂,这方面研究工作将更加任重而道远。中药及其复方有效成分和药效物质基础的复杂性虽然增加了中药化学的研究难度,但也使研究工作变得更加富有挑战性和趣味性。