



“十二五”国家重点图书出版规划项目

国家新闻出版改革发展项目

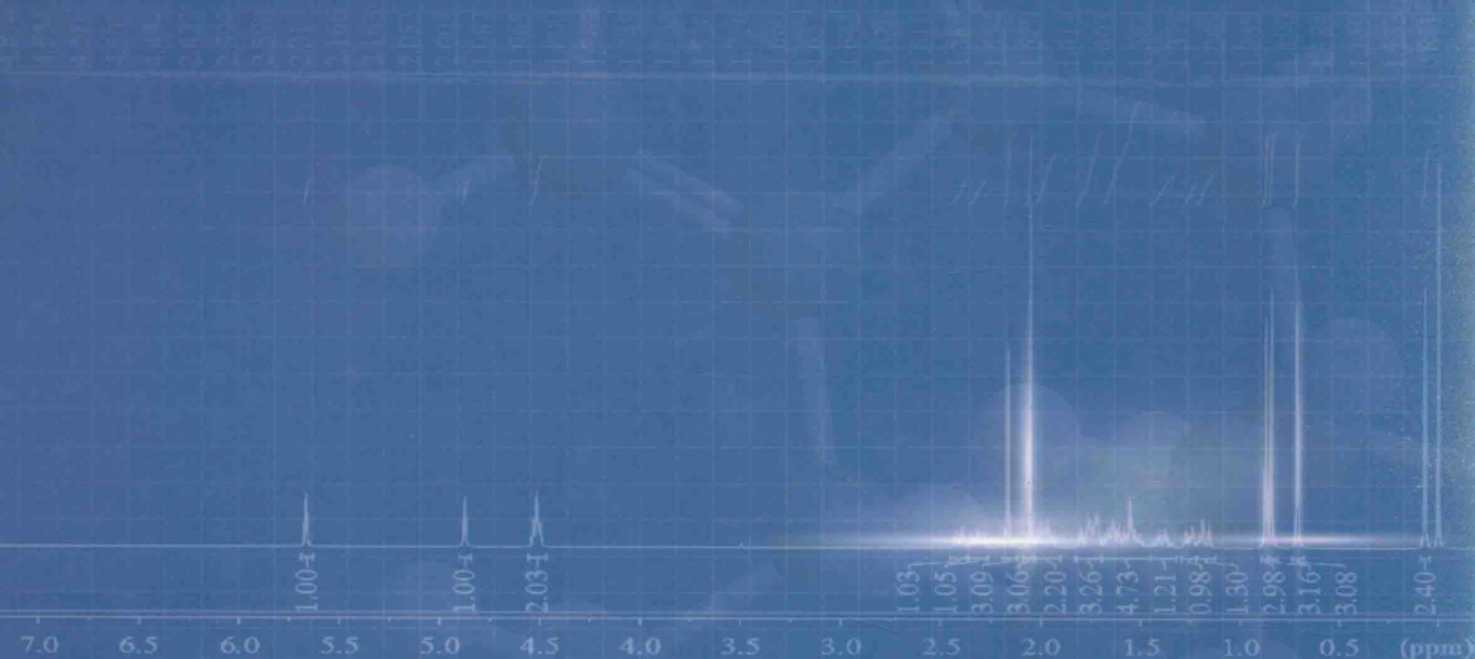
国家出版基金项目

中药化学对照品 波谱图集

第 三 册

Spectral Atlas of
Chemical Reference Substances of
Chinese Medicines

王峥涛 俞桂新 主 编



海峡出版发行集团 | 福建科学技术出版社
THE STRAITS PUBLISHING & DISTRIBUTING GROUP | FUJIAN SCIENCE & TECHNOLOGY PUBLISHING HOUSE



“十二五”国家重点图书出版规划项目

国家新闻出版改革发展项目

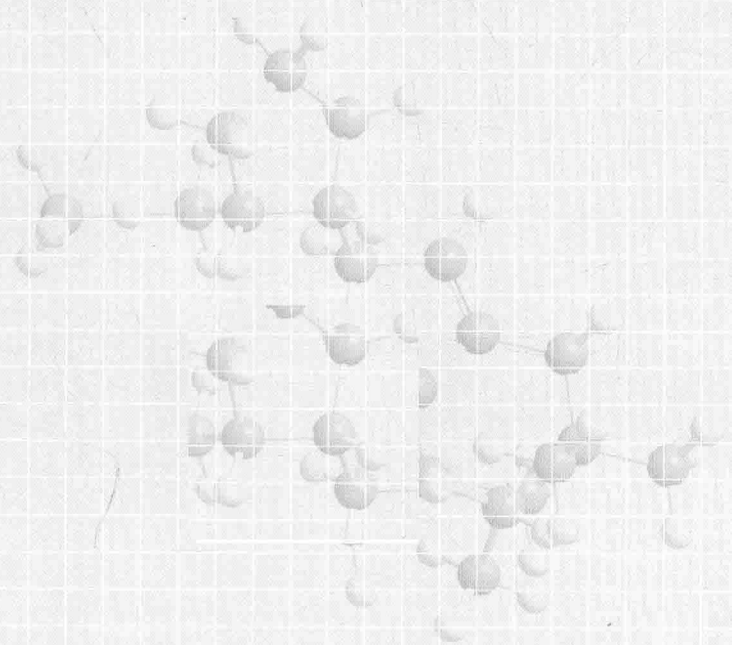
国家出版基金项目

Spectral Atlas of Chemical Reference Substances of Chinese Medicines

中药化学对照品波谱图集

第三册

王峥涛 俞桂新 主 编



海峡出版发行集团 | 福建科学技术出版社
THE STRAITS PUBLISHING & DISTRIBUTING GROUP | FUJIAN SCIENCE & TECHNOLOGY PUBLISHING HOUSE

目 录

第三册

倍半萜类 Sesquiterpenes

土木香内酯 alantolactone	1160
青蒿素 artemisinin.....	1164
白术内酯 I atractylenolide I	1168
白术内酯 II atractylenolide II	1172
白术内酯 III atractylenolide III	1176
蜂斗菜内酯 A bakkenolide A	1180
白果内酯 bilobalide.....	1184
莪术醇 curcumol.....	1188
去氢木香内酯 dehydrocostus lactone	1192
野马追内酯 A eupalinolide A	1196
吉马酮 germacrone	1200
异土木香内酯 isoalantolactone.....	1204
杜松脑 juniper camphor	1208
乌药醚内酯 linderane	1212
甘松新酮 nardosinone	1216
广藿香醇 patchouli alcohol	1220
广藿香酮 pogostone.....	1224
款冬酮 tussilagone.....	1228

环烯醚萜类 Iridoids

8-O-acetyl-6'-O-p-coumaroylharpagide.....	1234
8-O-乙酰山梔苷甲酯 8-O-acetyl shanzhiside methyl ester.....	1238
乙酰哈巴苷 8-acetylharpagide	1242

胡黄连苷 I picroside I 1246

胡黄连苷 II picroside II 1251

桃叶珊瑚苷 aucubin..... 1256

梓醇 catalpol..... 1260

dehydropenstemoside 1264

β -dihydrohastatoside..... 1267

京尼平苷酸 geniposidic acid..... 1270

哈巴苷 harpagide..... 1274

哈巴俄苷 harpagoside 1278

戟叶马鞭草苷 hastatoside..... 1282

6 β -野芝麻新苷 6 β -hydroxyipolamiide 1286

马钱苷酸 loganic acid 1289

马钱苷 loganin 1293

糙苏素 phlomiol..... 1297

phloyoside I 1300

胡麻属苷 sesamoside..... 1303

山梔苷甲酯 shanzhiside methyl ester 1306

特女贞苷 specnuezhenide 1310

当药苷 sweroside..... 1315

獐牙菜苦苷 swertiamarin..... 1319

马鞭草苷 verbenaloside 1323

单萜类 Monoterpenes

乙酸龙脑酯 bornyl acetate 1328

右旋龙脑 (+)-borneol..... 1332

左旋樟脑 (-)-camphor..... 1335

香叶醇 geraniol..... 1339

异龙脑 isoborneol 1342

左旋薄荷酮 (-)-menthone 1346

橙花醇 nerol 1350

芍药苷 paeoniflorin 1353

紫苏醛 perillaldehyde..... 1357

β -蒎烯 β -pinene 1361

胡薄荷酮 pulegone 1364

α -松油醇 α -terpineol..... 1368

香豆素类 Coumarins

秦皮乙素 aesculetin	1374
秦皮甲素 aesculin	1378
佛手柑内酯 bergapten.....	1382
二氢欧山芹醇当归酸酯 columbianadin.....	1385
祖师麻甲素 daphnetin	1389
欧前胡素 imperatorin	1393
异嗟皮啉 isofraxidin.....	1397
异茴芹内酯 isopimpinellin.....	1401
异补骨脂素 isopsoralen	1405
紫花前胡苷 nodakenin.....	1409
羌活醇 notopterol.....	1413
蛇床子素 osthol	1417
氧化前胡素 oxypeucedanin.....	1421
茴芹香豆素 pimpinellin	1425
白花前胡乙素 praeruptorin B.....	1429
白花前胡丁素 praeruptorin D.....	1433
白花前胡素 E praeruptorin E.....	1437
补骨脂素 psoralen	1441
补骨脂定 psoralidin.....	1445
滨蒿内酯 scoparone.....	1449
东莨菪内酯 scopoletin	1453
茵芋苷 skimmin.....	1457
毛两面针素 toddalolactone	1461
花椒毒素 xanthotoxin	1465

木脂素类 Lignans

安五脂素 anwulignan	1470
牛蒡子苷元 arctigenin	1474
牛蒡子苷 arctiin.....	1477
细辛脂素 asarinin.....	1482
表松脂素 (+)-epipinoresinol	1486
连翘苷 forsythin.....	1489
连翘酯苷 A forsythoside A.....	1494
连翘酯苷 B forsythoside B	1498

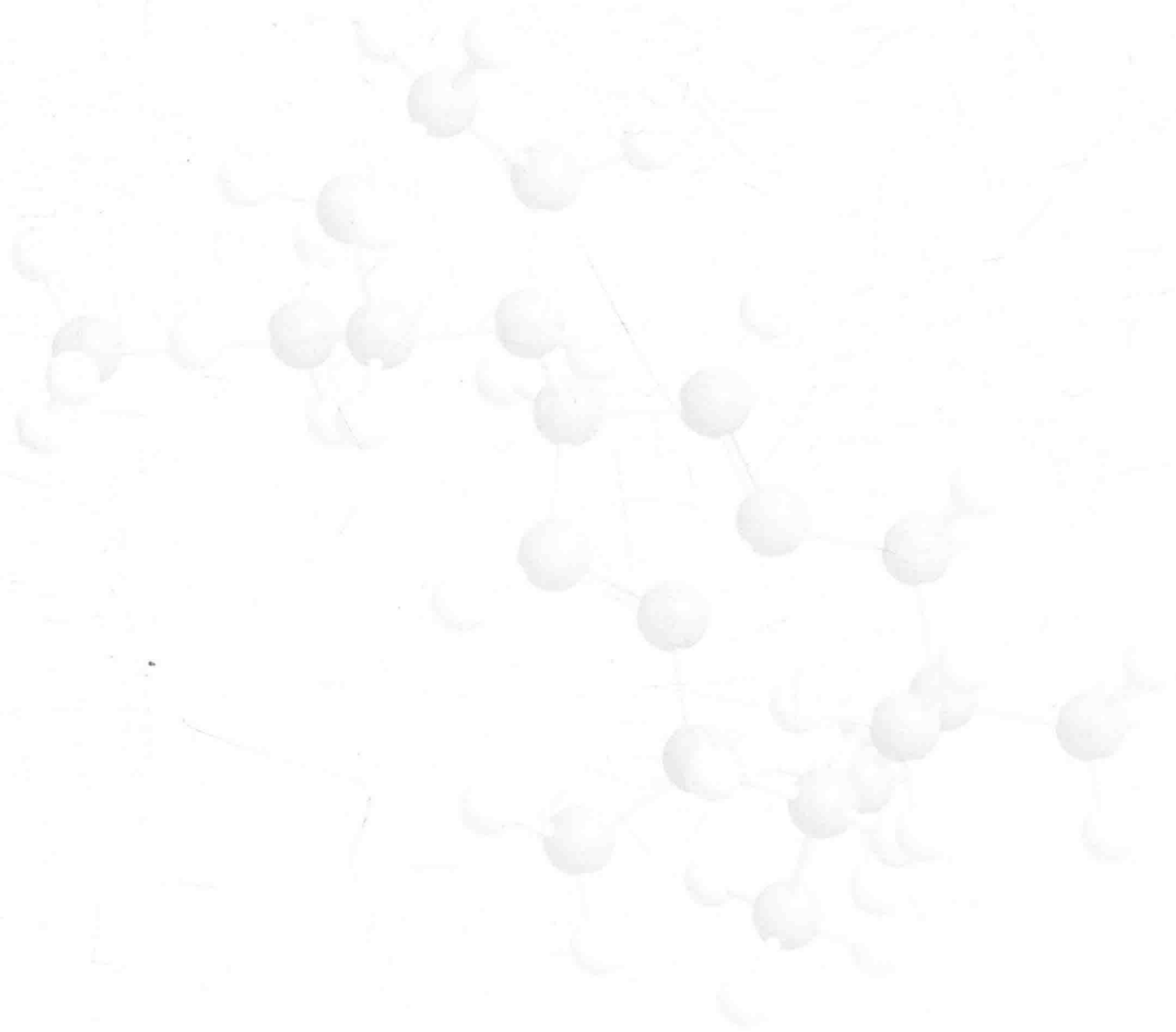
fraxiresinol.....	1502
和厚朴酚 honokiol.....	1505
8-羟基松脂醇 (+)-1-hydroxy-2,6-epi-pinoresinol	1509
8-羟基松脂素 (+)-8-hydroxypinoresinol.....	1512
异落叶松脂醇 isolariciresinol.....	1515
表丁香脂素 lirioresinol-A	1518
木兰脂素 magnolin.....	1521
厚朴酚 magnolol	1525
松脂素单糖苷 (+)-pinoresinol-4-O- β -D-glucopyranoside.....	1529
大车前苷 plantamajoside	1532
鬼臼毒素 podophyllotoxin	1536
金石蚕苷 poliumoside	1540
sanshodiol.....	1544
三白草酮 sauchinone.....	1547
五味子醇甲 schisandrin.....	1551
五味子甲素 schisandrin A	1555
五味子乙素 schisandrin B.....	1559
五味子酯甲 schisantherin A	1563
开环异落叶松脂醇 secoisolariciresinol.....	1568
芝麻素 sesamin.....	1571

醌类 Quinones

芦荟大黄素 aloe-emodin	1576
芦荟苷 barbaloin.....	1580
大黄酚 chrysophanol	1584
隐丹参酮 cryptotanshinone	1588
双醋瑞因 diacerein.....	1592
二氢丹参酮 I dihydrotanshinone I	1596
β, β' -二甲基丙烯酰阿卡宁 β, β' -dimethylacrylalkannin	1600
大黄素 emodin.....	1604
大黄素甲醚 physcion	1608
大黄酸 rhein.....	1612
番泻苷 B sennoside B.....	1616
左旋紫草素 shikonin.....	1620
丹参酮 I tanshinone I	1624
丹参酮 II A tanshinone II A.....	1628

倍半萜类

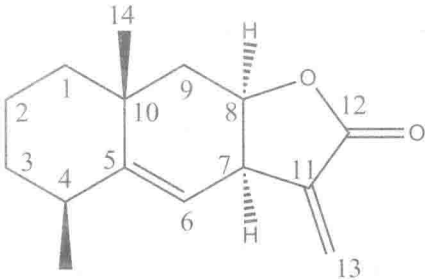
Sesquiterpenes



土木香内酯

alantolactone

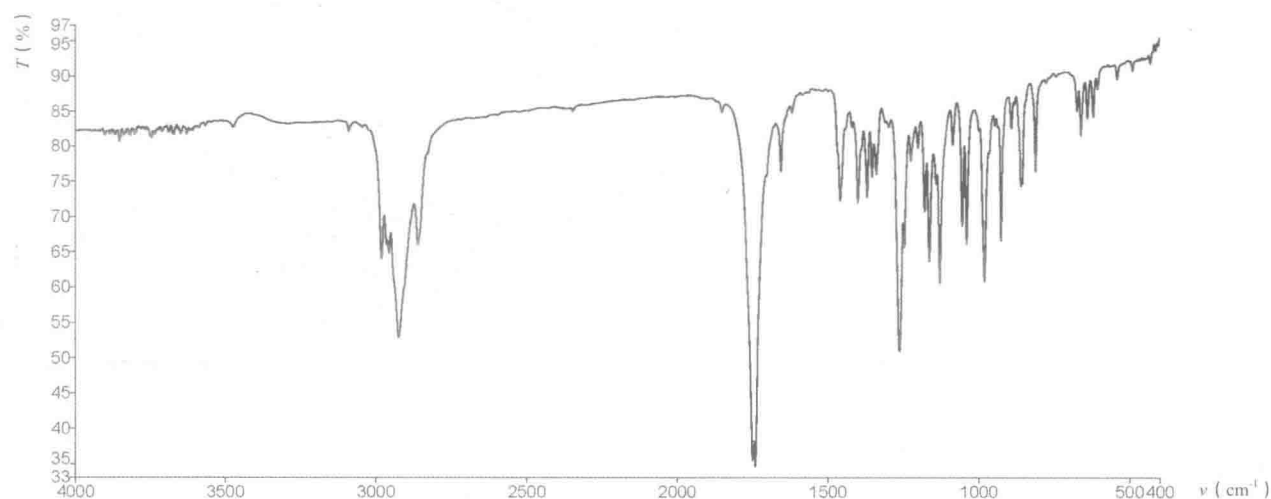
结构式 Structural Formula



CAS 号	546-43-0。	CAS No.	546-43-0.
分子式	C ₁₅ H ₂₀ O ₂ 。	Molecular Formula	C ₁₅ H ₂₀ O ₂ .
分子量	232。	Molecular Weight	232.
结构类型	倍半萜类。	Type of Structure	Sesquiterpenes.
主要来源	菊科植物土木香 <i>Inula helenium</i> L. 的干燥根。	Main Source	The dried root of <i>Inula helenium</i> L. (Fam. Asteraceae).
主要用途	主要用于土木香及其相关制剂的定性、定量分析。	Main Application	Mainly used for the qualitative and quantitative analysis of <i>Inulae Radix</i> and its related preparations.

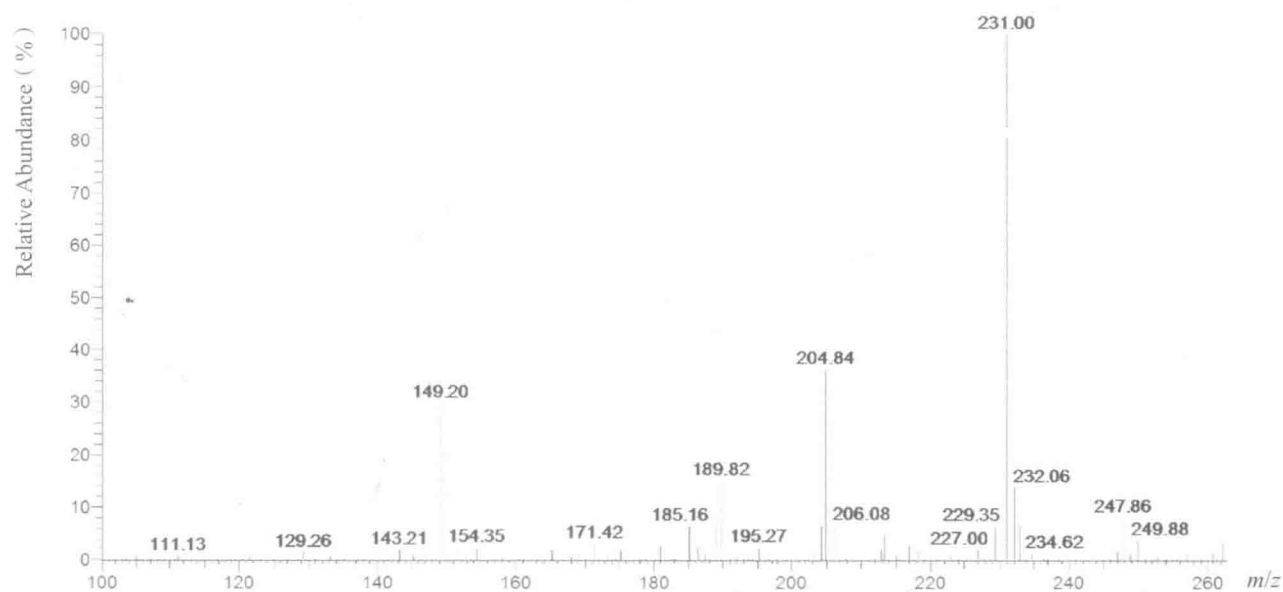
物理性质		Physical Properties	
熔 点	78~80 ℃。	Melting Point	78~80 ℃ .
比旋光度	[α] _D ²⁵ +220 (c1, 甲醇)。	Specific Rotation	[α] _D ²⁵ +220 (c1, methanol).
溶解性	易溶于乙醇、苯、氯仿、乙醚、油，几乎不溶于水。	Solubility	Easily soluble in ethanol, benzene, chloroform, ethyl ether and oil. Almost insoluble in water.

红外吸收光谱 IR Spectrum



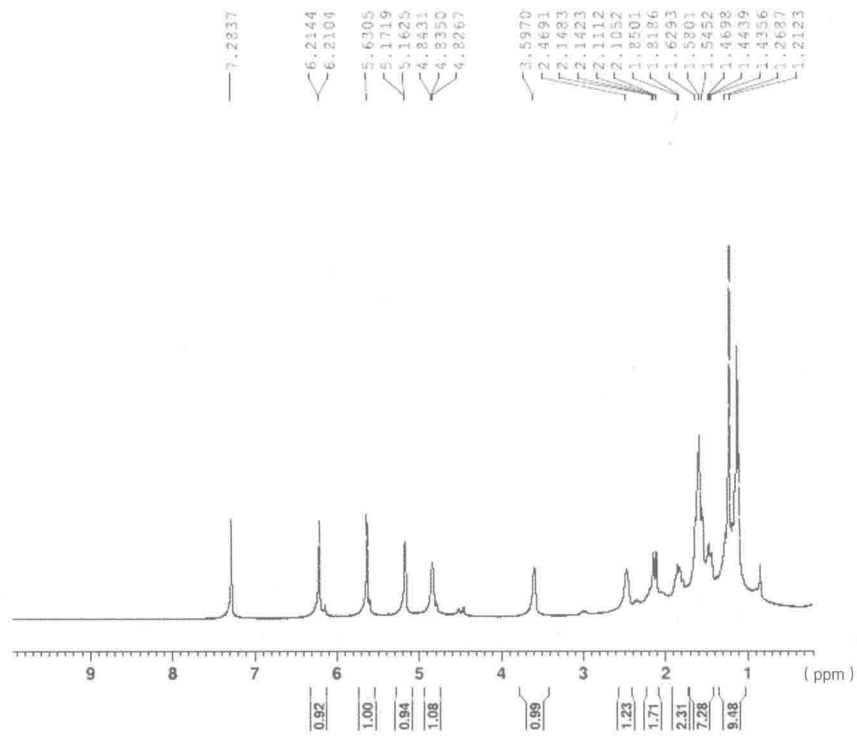
土木香内酯红外吸收光谱
IR spectrum of alantolactone

质谱 Mass Spectrum

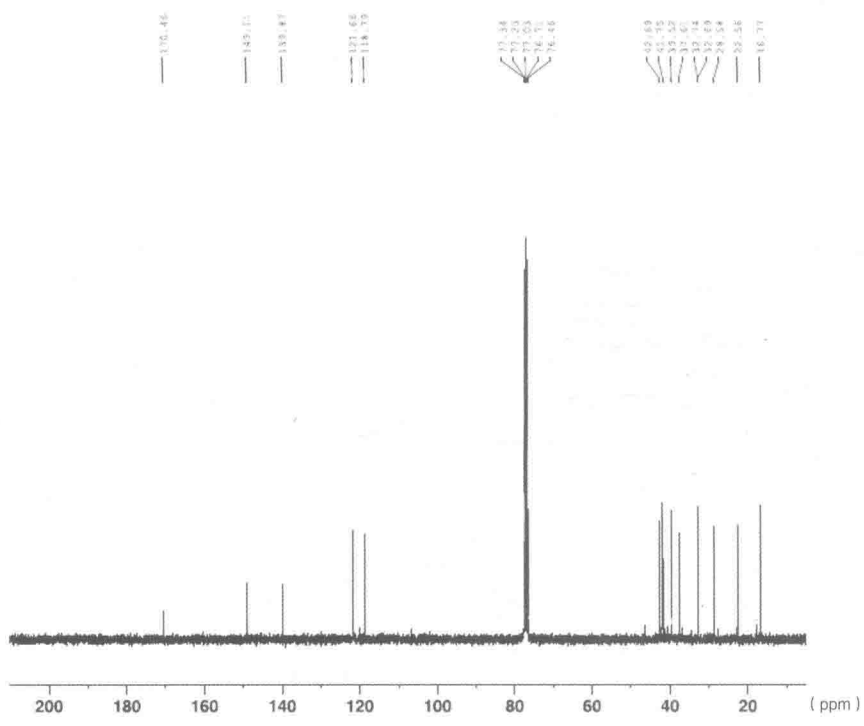


土木香内酯质谱
Mass spectrum of alantolactone

核磁共振图谱及数据 NMR Spectra & Data



土木香内酯氢谱 (CDCl₃, 400 MHz)
¹H-NMR spectrum of alantolactone (CDCl₃, 400 MHz)



土木香内酯碳谱 (CDCl₃, 100 MHz)
¹³C-NMR spectrum of alantolactone (CDCl₃, 100 MHz)

土木香内酯碳、氢谱数据
 ^{13}C -NMR and ^1H -NMR of alantolactone

No.	^{13}C -NMR	^1H -NMR (J/Hz)
1	41.8	—
2	16.8	—
3	32.7	—
4	37.6	—
5	149.1	—
6	118.8	5.17 (1H, d, $J=4.0$)
7	39.5	3.59 (1H, s)
8	76.5	4.84 (1H, m)
9	42.7	2.10 (1H, d, $J=14.8$, H-9a) 1.55 (1H, m, H-9b)
10	32.7	—
11	139.9	—
12	170.5	—
13	121.7	6.21 (1H, d, $J=1.6$, H-13a) 5.63 (1H, s, H-13b)
14	28.6	1.21 (3H, s)
15	22.6	1.11 (3H, d, $J=8.0$)

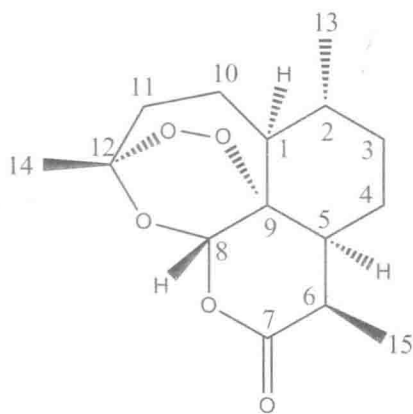
参考文献 Reference

王瑞歌. 土木香中两种土木香内酯的提取与测定方法研究 [D]. 长春: 吉林大学, 2011.

青蒿素

artemisinin

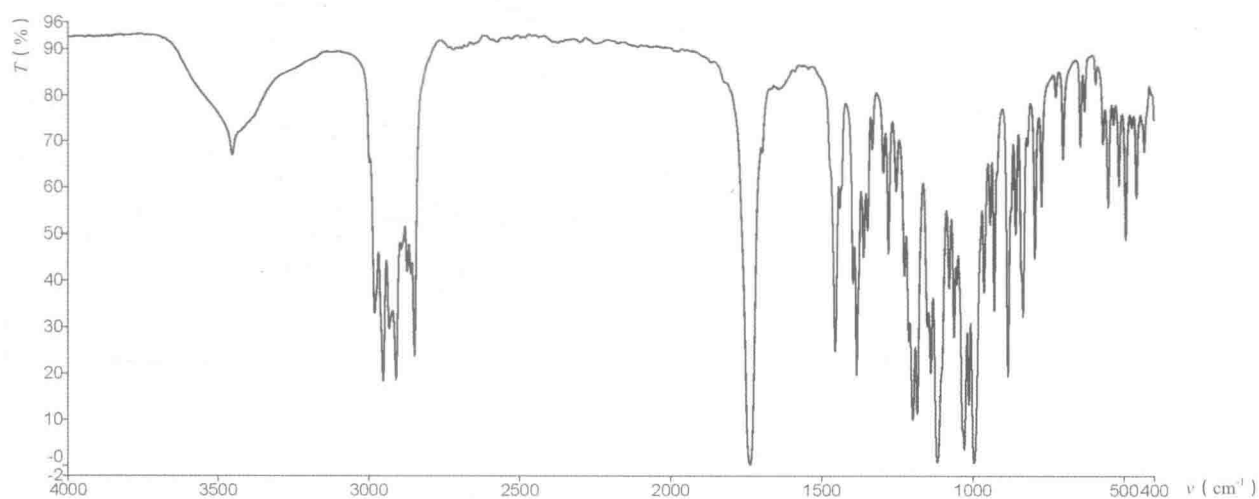
结构式 Structural Formula



CAS 号	63968-64-9。	CAS No.	63968-64-9.
分子式	C ₁₅ H ₂₂ O ₅	Molecular Formula	C ₁₅ H ₂₂ O ₅ .
分子量	282。	Molecular Weight	282.
结构类型	倍半萜类。	Type of Structure	Sesquiterpenes.
主要来源	菊科植物黄花蒿 <i>Artemisia annua</i> L. 的干燥地上部分。	Main Source	The dried aerial part of <i>Artemisia annua</i> L. (Fam. Asteraceae).
主要用途	主要用于青蒿及其相关制剂的定性、定量分析。	Main Application	Mainly used for the qualitative and quantitative analysis of <i>Artemisiae Annuae Herba</i> and its related preparations.

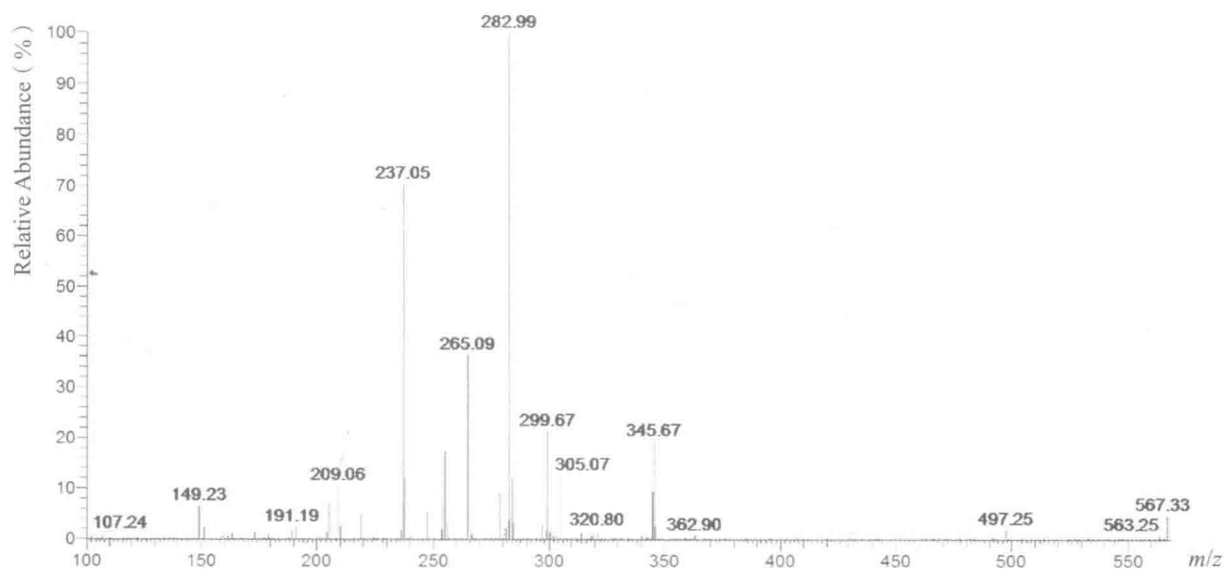
物理性质		Physical Properties	
性 状	无色针状结晶。	Macroscopic Feature	Colorless needle crystal.
熔 点	156~157 ℃。	Melting Point	156~157 ℃ .
比旋光度	[α] _D ¹⁷ +66.3。	Specific Rotation	[α] _D ¹⁷ +66.3.
溶解性	易溶于丙酮、乙酸乙酯、氯仿、苯、冰醋酸，溶于乙醇、甲醇、乙醚，微溶于石油醚、己烷，几乎不溶于水。	Solubility	Easily soluble in acetone, ethyl acetate, chloroform, benzene and glacial acetic acid. Soluble in ethanol, methanol and ethyl ether. Sparingly soluble in petroleum ether and hexane. Almost insoluble in water.

红外吸收光谱 IR Spectrum



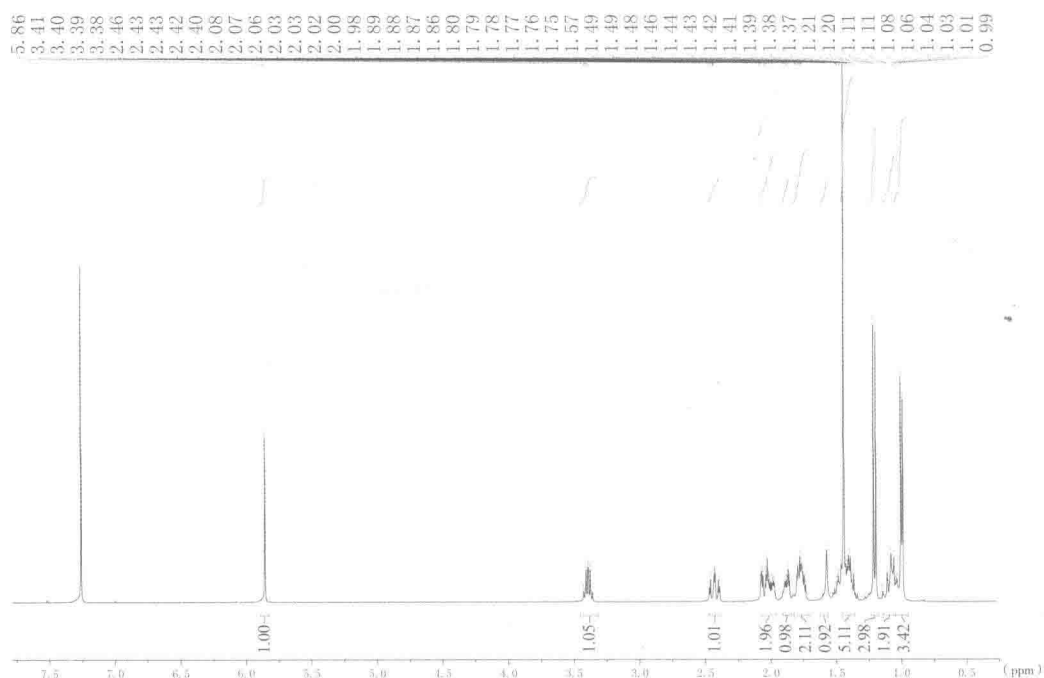
青蒿素红外吸收光谱
IR spectrum of artemisinin

质谱 Mass Spectrum

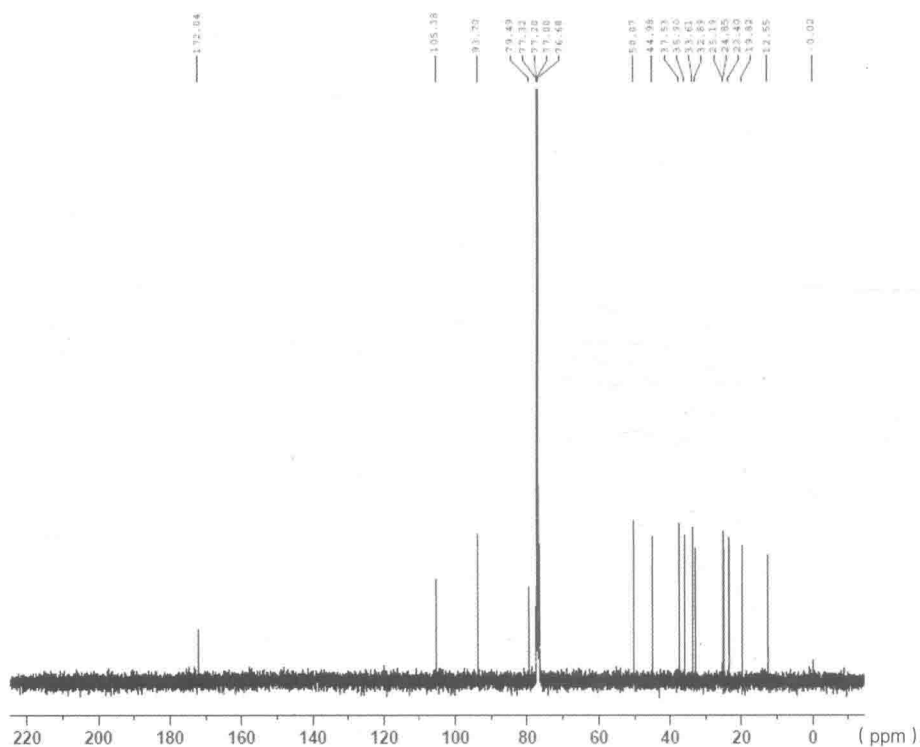


青蒿素质谱
Mass spectrum of artemisinin

核磁共振图谱及数据 NMR Spectra & Data



青蒿素氢谱 (CDCl₃, 400 MHz)
¹H-NMR spectrum of artemisinin (CDCl₃, 400 MHz)



青蒿素碳谱 (CDCl₃, 100 MHz)
¹³C-NMR spectrum of artemisinin (CDCl₃, 100 MHz)

青蒿素碳、氢谱数据

 ^{13}C -NMR and ^1H -NMR of artemisinin

No.	^{13}C -NMR	^1H -NMR (J/Hz)
1	50.1	—
2	37.5	—
3	33.6	—
4	23.4	—
5	45.0	2.43 (1H, m)
6	32.9	3.39 (1H, m)
7	172.0	—
8	79.5	5.86 (1H, s)
9	93.7	—
10	24.8	—
11	35.9	2.05 (2H, m)
12	105.4	—
13	19.8	1.05 (3H, m)
14	25.2	1.49 (3H, m)
15	12.5	1.38 (3H, m)

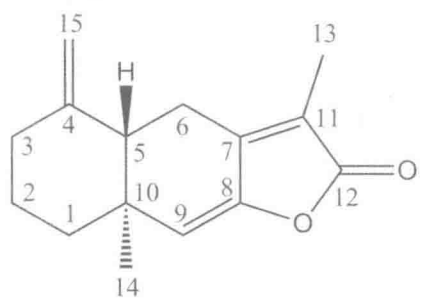
参考文献 Reference

屠呦呦, 倪慕云, 钟裕蓉, 等. 中药青蒿的化学成分和青蒿素衍生物的研究 (简报)
[J]. 中国中药杂志, 1981, 6 (2): 31.

白术内酯 I

atractylenolide I

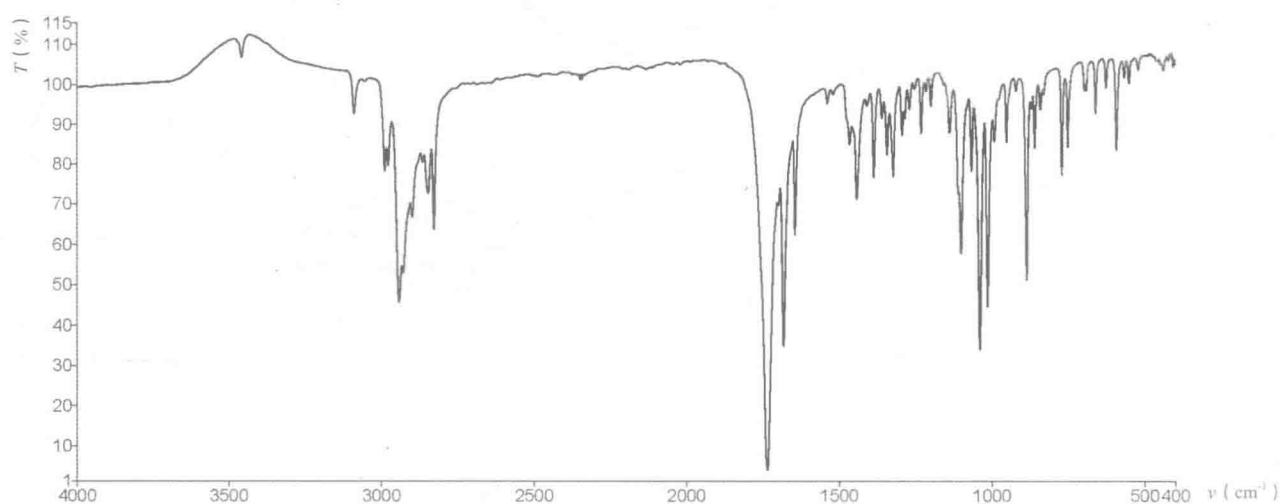
结构式 Structural Formula



CAS 号	73069-13-3。	CAS No.	73069-13-3.
分子式	C ₁₅ H ₁₈ O ₂ 。	Molecular Formula	C ₁₅ H ₁₈ O ₂ .
分子量	230。	Molecular Weight	230.
结构类型	倍半萜类。	Type of Structure	Sesquiterpenes.
主要来源	菊科植物白术 <i>Atractylodes macrocephala</i> Koidz. 的干燥根茎。	Main Source	The dried rhizome of <i>Atractylodes macrocephala</i> Koidz. (Fam. Asteraceae).
主要用途	主要用于白术及其相关制剂的定性、定量分析。	Main Application	Mainly used for the qualitative and quantitative analysis of <i>Atractylodes Macrocephalae</i> Rhizoma and its related preparations.

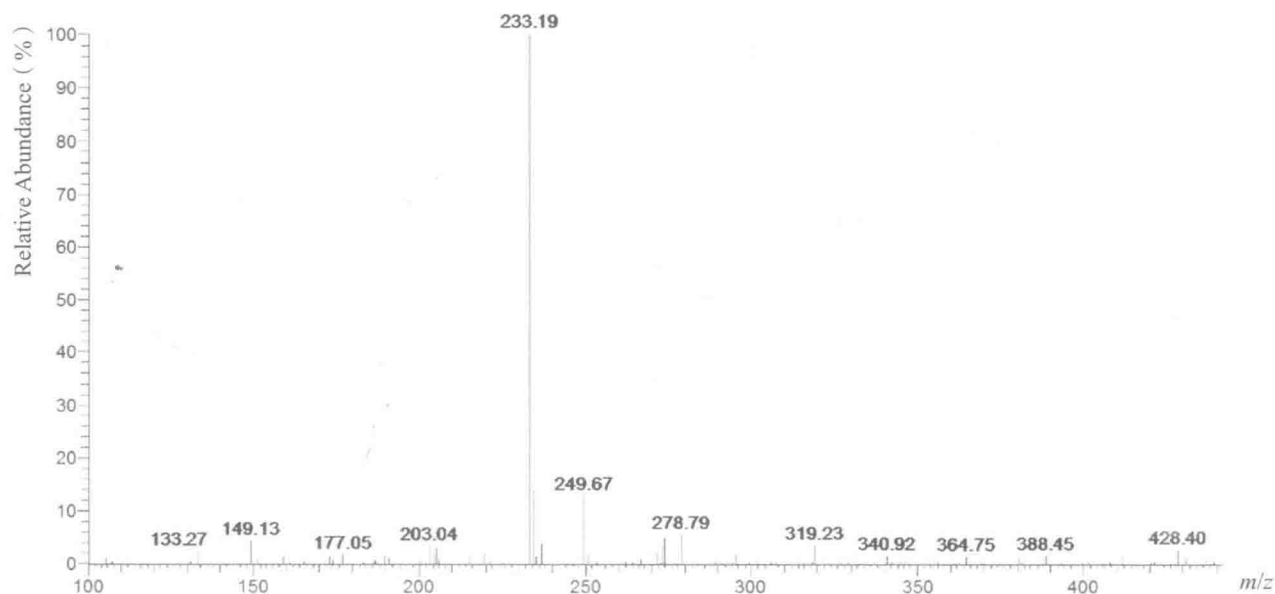
物理性质		Physical Properties	
性 状	结晶（石油醚）。	Macroscopic Feature	Crystal (petroleum ether).
熔 点	109~110.5 ℃。	Melting Point	109~110.5 ℃ .
比旋光度	[α] _D ²⁰ +222 (c0.01, 甲醇)。	Specific Rotation	[α] _D ²⁰ +222 (c0.01, methanol).
溶解性	易溶于氯仿、乙酸乙酯、石油醚。	Solubility	Easily soluble in chloroform, ethyl acetate and petroleum ether.

红外吸收光谱 IR Spectrum



白术内酯 I 红外吸收光谱
IR spectrum of atractylenolide I

质谱 Mass Spectrum



白术内酯 I 质谱
Mass spectrum of atractylenolide I