



“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

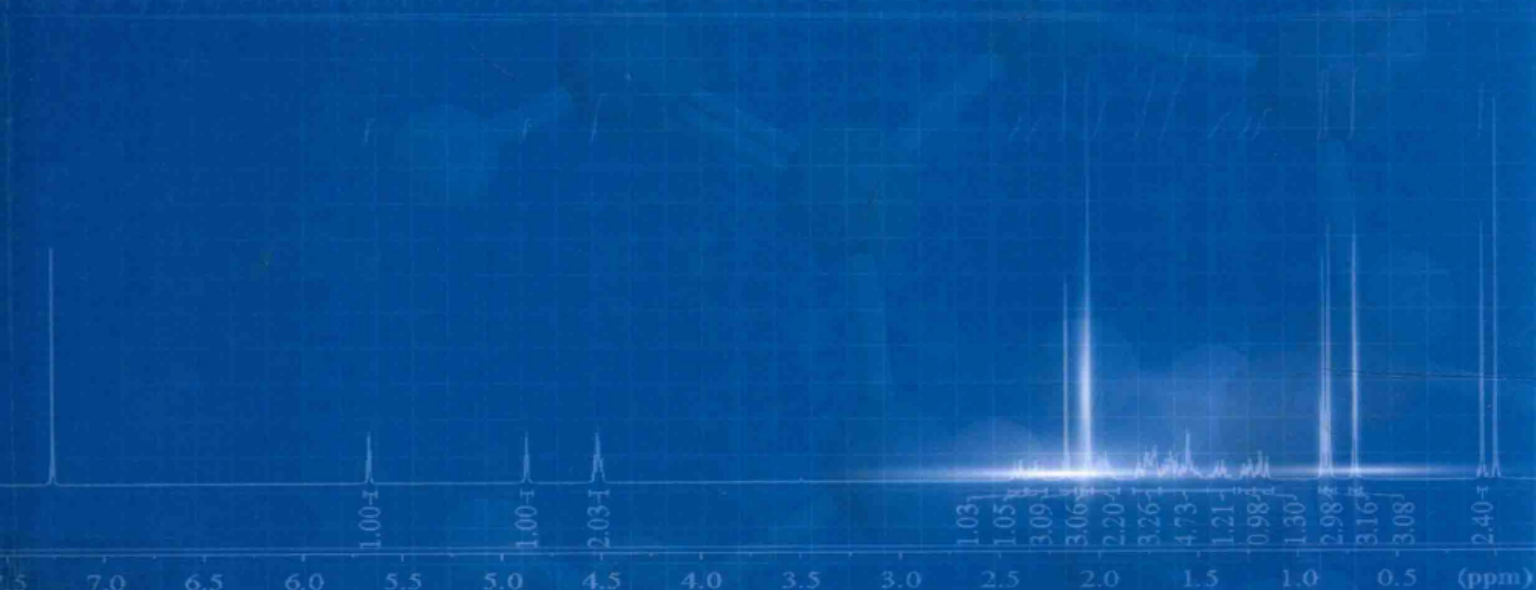
国家出版基金项目

中药化学对照品 波谱图集

第 四 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
THE STRAITS PUBLISHING & DISTRIBUTING GROUP

福建科学技术出版社
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

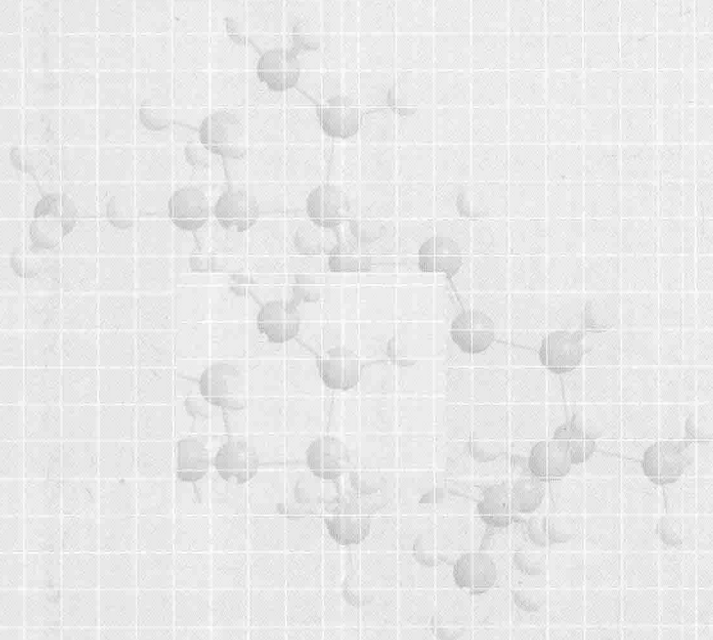
国家出版基金项目

Spectral Atlas of Chemical Reference Substances of Chinese Medicines

中药化学对照品波谱图集

第四册

王峥涛 俞桂新 主 编



海峡出版发行集团
THE STRAITS PUBLISHING & DISTRIBUTING GROUP

福建科学技术出版社
FUJIAN SCIENCE & TECHNOLOGY PUBLISHING HOUSE

目 录

第四册

苯丙酸类 Phenylpropionic acids

咖啡酸 caffeic acid	1634
咖啡酸乙酯 caffeoyl acetate	1638
绿原酸 chlorogenic acid	1642
菊苣酸 chicoric acid	1646
桂皮醛 cinnamaldehyde	1650
肉桂酸 cinnamic acid	1654
1, 3- <i>O</i> -二咖啡酰奎宁酸 1, 3- <i>O</i> -dicaffeoylquinic acid	1658
3, 5-二- <i>O</i> -咖啡酰奎宁酸 3, 5-di- <i>O</i> -caffeoylquinic acid	1662
4, 5-二- <i>O</i> -咖啡酰奎宁酸 4, 5-di- <i>O</i> -caffeoylquinic acid	1666
(-)-3, 5-二- <i>O</i> -咖啡酰奎宁酸 (-)-3, 5- <i>O</i> -dicaffeoylquinic acid	1670
对甲氧基桂皮酸乙酯 ethyl- <i>p</i> -methoxycinnamate	1674
阿魏酸 ferulic acid	1678
异阿魏酸 isoferulic acid	1682
2-甲氧基桂皮醛 2-methoxycinnamaldehyde	1686
丹参素钠 salvianic acid A sodium	1689
紫丁香苷 syringin	1693

酚类 Phenols

乙酰白藜芦醇 acetyl-trans-resveratrol	1698
仙鹤草酚 B agrimol B	1702
熊果苷 arbutin	1706
岩白菜素 bergenin	1710
双去甲氧基姜黄素 bisdemethoxycurcumin	1714
柯里拉京 corilagin	1718
仙茅苷 curculigoside	1722

姜黄素 curcumin	1726
去氢二异丁香酚 dehydrodiisoeugenol.....	1730
去甲氧基姜黄素 demethoxycurcumin	1734
鞣花酸 ellagic acid	1738
毛兰素 erianin	1742
没食子酸 gallic acid	1746
白果新酸 ginkgoneolic acid.....	1750
亥茅酚苷 glucosylhamaudol	1754
愈创木酚 guaiacol	1758
高香草酸 homovanillic acid	1761
对羟基苯乙酮 4'-hydroxyacetophenone	1765
丹皮酚 paeonol	1769
根皮素 phloretin	1773
根皮苷 phloridzin	1777
虎杖苷 polydatin.....	1781
原儿茶酸 protocatechuic acid	1785
原儿茶醛 protocatechuic aldehyde.....	1789
紫檀芪 pterostilbene.....	1793
覆盆子酮 raspberry ketone.....	1797
白藜芦醇 resveratrol.....	1801
土大黄苷 rhaponticin	1805
迷迭香酸 rosmarinic acid	1809
水杨苷 salicin	1813
水杨酸 salicylic acid.....	1817
丹酚酸 B salvianolic acid B.....	1821
芝麻酚 sesamol	1826
莽草酸 shikimic acid	1830
麝香草酚 thymol.....	1834
香草酸 vanillic acid	1838
黄腐酚 xanthohumol	1842

苯乙醇苷类 Phenylethanoid glycosides

alyssonoside.....	1848
海胆苷 echinacoside.....	1852
ferruginoside C	1857
异阿克苷 isoacteoside	1861
异毛蕊花苷 isoverbacoside.....	1865

焦地黄苯乙醇苷 D jionoside D.....	1870
天人草苷 A leucosceptoside A.....	1874
天人草苷 B leucosceptoside B.....	1878
马蒂罗苷 martynoside.....	1882
毛蕊花糖苷 verbascoside.....	1886

有机酸类 Organic acids

马兜铃酸 A aristolochic acid A.....	1892
藜芦酸 veratric acid.....	1896
硫辛酸 lipoic acid.....	1900

其他类 Other classes

L-丙氨酸 L-alanine.....	1906
蒜氨酸 alliin.....	1909
精氨酸 arginine.....	1912
α -细辛脑 α -asarone.....	1915
细辛醛 asarylaldehyde.....	1919
苍术素 atractylodin.....	1922
瓜氨酸 citrulline.....	1926
1,5-二羟基-2,3-二甲氧基口山酮 1,5-dihydroxy-2,3-dimethoxyxanthone.....	1930
二苯基庚烷 A diphenylheptane A.....	1934
卫矛醇 dulcitol.....	1938
枹酮 fraxinellone.....	1942
天麻素 gastrodin.....	1946
冬绿苷 gaultherin.....	1950
5-O-甲基维斯阿米醇苷 4'-O- β -D-glucopyranosyl-5-O-methylvisamminol.....	1954
格列风内酯 griffonilide.....	1958
鸟苷 guanosine.....	1961
1-羟基-3,4,5-三甲氧基口山酮 1-hydroxy-3,4,5-trimethoxyxanthone.....	1965
肌苷 inosine.....	1969
欧当归内酯 A levistilide A.....	1973
紫草氰苷 lithospermoside.....	1977
党参炔苷 lobetyolin.....	1981
甲基丁香酚 methyleugenol.....	1985
麝香酮 muscone.....	1989
去甲斑蝥素 norcantharidin.....	1993
黄柏酮 obacunone.....	1997

酸浆苦味素 L physalin L	2001
远志口山酮Ⅲ polygalaxanthone Ⅲ	2006
1-甲基-2-十一烷基-奎诺酮 1-methyl-2-undecyl-4(1H)-quinolone	2010
络塞维 rosavin	2014
(4E, 6E, 12E)-十四癸三烯-8, 10-二炔-1, 3-二乙酸酯 (4E, 6E, 12E)-tetradecatriene-8, 10 -diyne-1, 3-diyl diacetate	2018
1-羟基-2, 3, 5-三甲氧基口山酮 1-hydroxy-2, 3, 5-trimethoxyxanthone	2022
1, 5-二羟基-2, 3, 7-三甲氧基口山酮 1, 5-dihydroxy-2, 3, 7-trimethoxyxanthone	2026

附录 Appendixes

《中国药典》(2015年版)中药化学对照品相关应用表

The related application table of chemical reference substances of Chinese medicines listed in *Chinese*

Pharmacopoeia (2015 Edition) 2032

中药化学对照品中文名索引

Chinese name index of chemical reference substances of Chinese medicines 2058

中药化学对照品英文名索引

English name index of chemical reference substances of Chinese medicines 2066

苯丙酸类

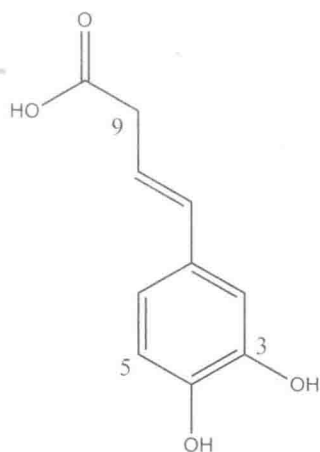
Phenylpropionic acids



咖啡酸

caffeic acid

结构式 Structural Formula



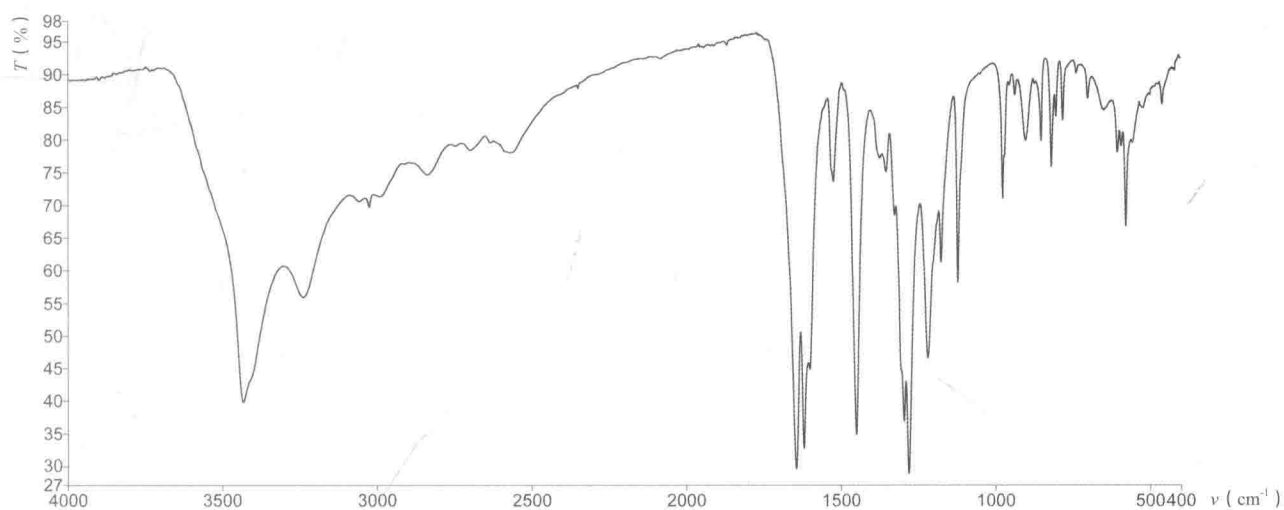
CAS 号	331-39-5。	CAS No.	331-39-5.
分子式	C ₉ H ₈ O ₄ 。	Molecular Formula	C ₉ H ₈ O ₄ .
分子量	180。	Molecular Weight	180.
结构类型	苯丙酸类。	Type of Structure	Phenylpropionic acids.
主要来源	菊科植物蒲公英 <i>Taraxacum mongolicum</i> Hand. -Mazz.、碱地蒲公英 <i>Taraxacum borealisinense</i> Kitam. 或同属数种植物的干燥全草。	Main Source	The dried whole herb of <i>Taraxacum mongolicum</i> Hand.-Mazz., <i>Taraxacum borealisinense</i> Kitam. and other species of <i>Taraxacum</i> (Fam. Asteraceae).
主要用途	主要用于冬葵果、杠板归、牵牛子、蒲公英的定性、定量分析。	Main Application	Mainly used for the qualitative and quantitative analysis of <i>Malvae Fructus</i> , <i>Polygoni Perfoliati Herba</i> , <i>Pharbitidis Semen</i> and <i>Taraxaci Herba</i> .

物理性质

Physical Properties

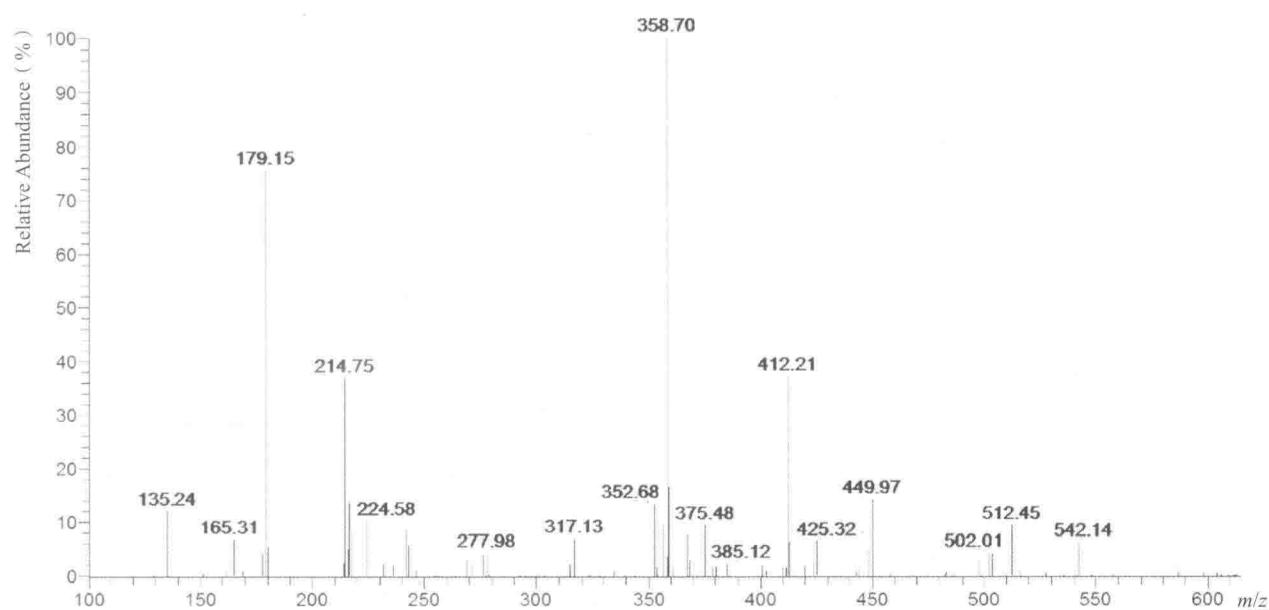
性 状	黄色针状结晶（乙醇）。	Macroscopic Feature	Yellow needle crystal (ethanol).
熔 点	222~224 ℃。	Melting Point	222~224 ℃ .
溶解性	溶于甲醇、乙酸乙酯。	Solubility	Soluble in methanol and ethyl acetate.

红外吸收光谱 IR Spectrum



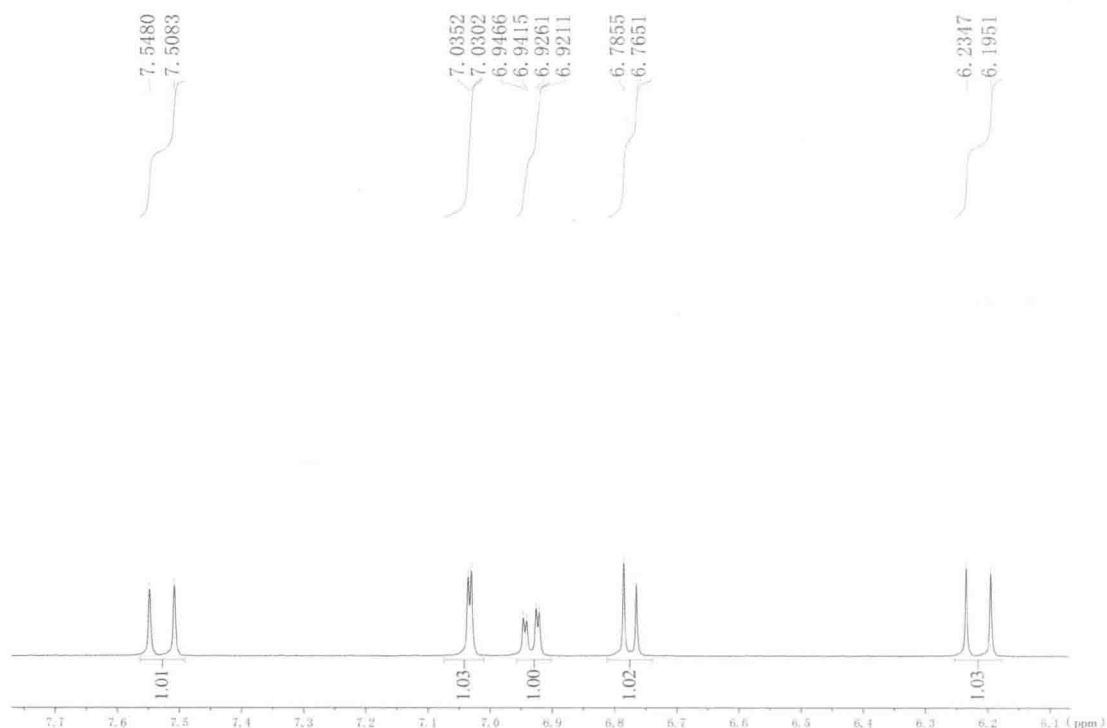
咖啡酸红外吸收光谱
IR spectrum of caffeic acid

质谱 Mass Spectrum



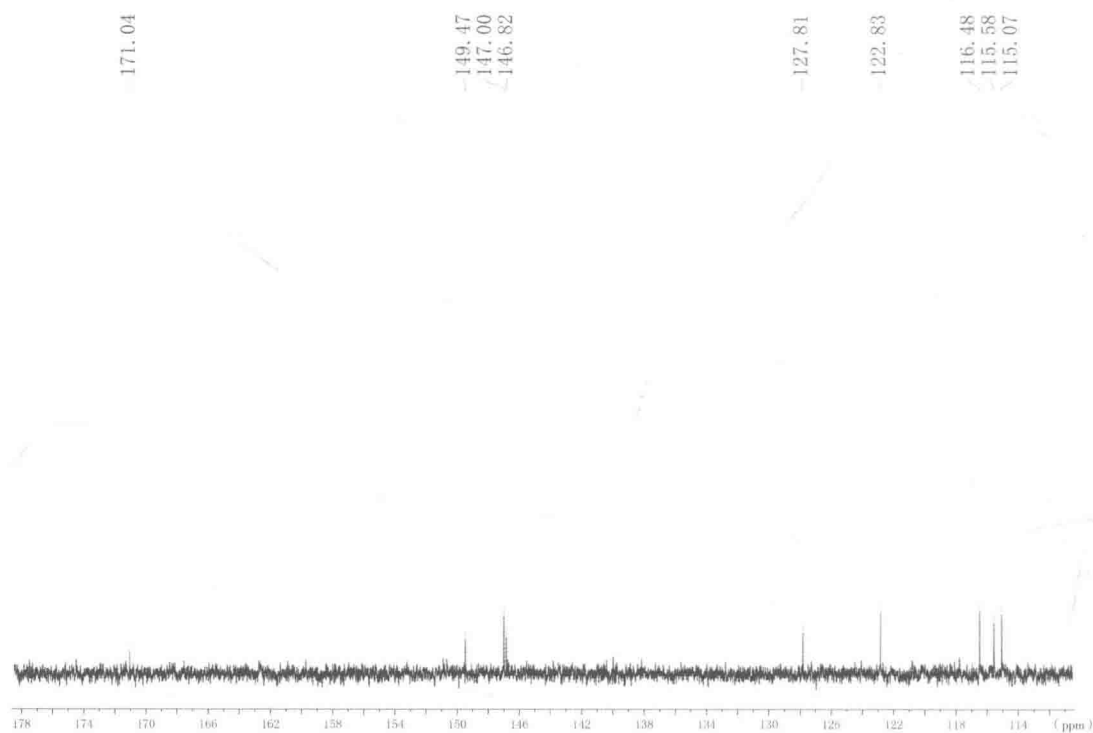
咖啡酸质谱
Mass spectrum of caffeic acid

核磁共振图谱及数据 NMR Spectra & Data



咖啡酸氢谱 (CD₃OD, 400 MHz)

¹H-NMR spectrum of caffeic acid (CD₃OD, 400 MHz)



咖啡酸碳谱 (CD₃OD, 100 MHz)

¹³C-NMR spectrum of caffeic acid (CD₃OD, 100 MHz)

咖啡酸碳、氢谱数据
 ^{13}C -NMR and ^1H -NMR of caffeic acid

No.	^{13}C -NMR	^1H -NMR (J/Hz)
1	127.8	—
2	115.1	7.03 (1H, d, $J=2.0$)
3	146.8	—
4	149.4	—
5	116.5	6.78 (1H, d, $J=8.0$)
6	122.8	6.94 (1H, dd, $J=2.0, 8.0$)
7	147.0	7.54 (1H, d, $J=16.0$)
8	115.6	6.22 (1H, d, $J=16.0$)
9	171.0	—

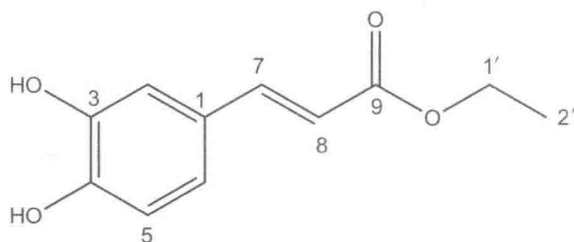
参考文献 References

- [1] 凌云, 郑俊华. 蒲公英化学成分的研究 [J]. 中国药学杂志, 1997, 32 (10) : 584-586.
- [2] 陶鑫, 许枏, 王秀兰, 等. 兴安毛连菜中有机酸化学成分及其抗氧化活性的研究 [J]. 中草药, 2016, 47 (4) : 544-548.

咖啡酸乙酯

caffeoyl acetate

结构式 Structural Formula



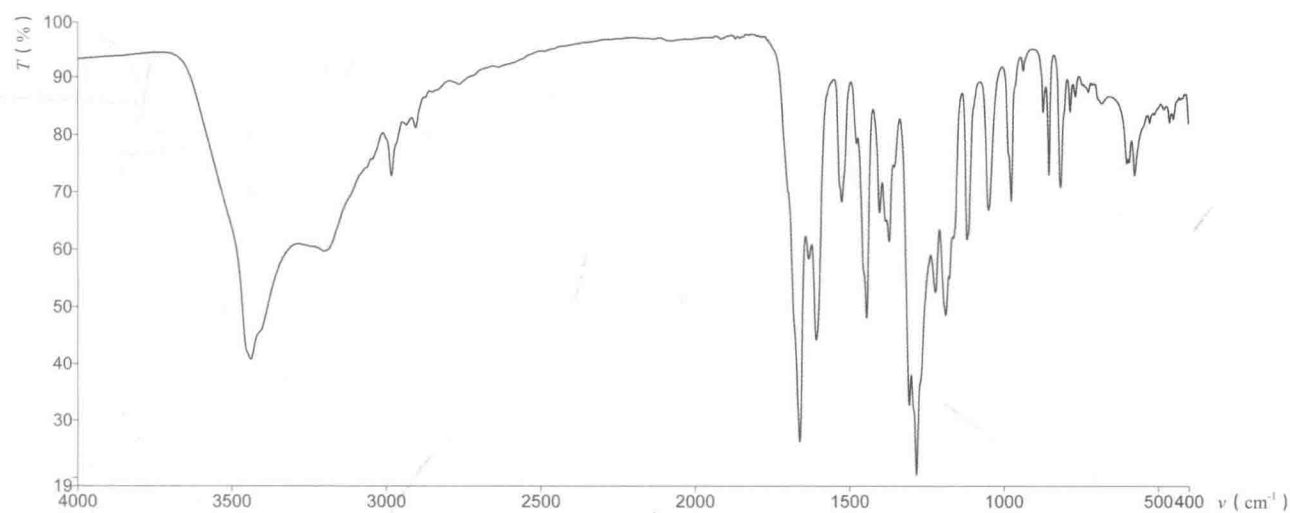
CAS 号	102-37-4。	CAS No.	102-37-4.
分子式	C ₁₁ H ₁₂ O ₄ 。	Molecular Formula	C ₁₁ H ₁₂ O ₄ .
分子量	208。	Molecular Weight	208.
结构类型	苯丙酸类。	Type of Structure	Phenylpropionic acids.
主要来源	菊科植物短葶飞蓬 <i>Erigeron breviscapus</i> (Vant.) Hand. - Mazz. 的干燥全草。	Main Source	The dried whole herb of <i>Erigeron breviscapus</i> (Vant.) Hand. - Mazz. (Fam. Asteraceae).
主要用途	主要用于灯盏花的定性、定量分析。	Main Application	Mainly used for the qualitative and quantitative analysis of <i>Erigerontis Herba</i> .

物理性质

Physical Properties

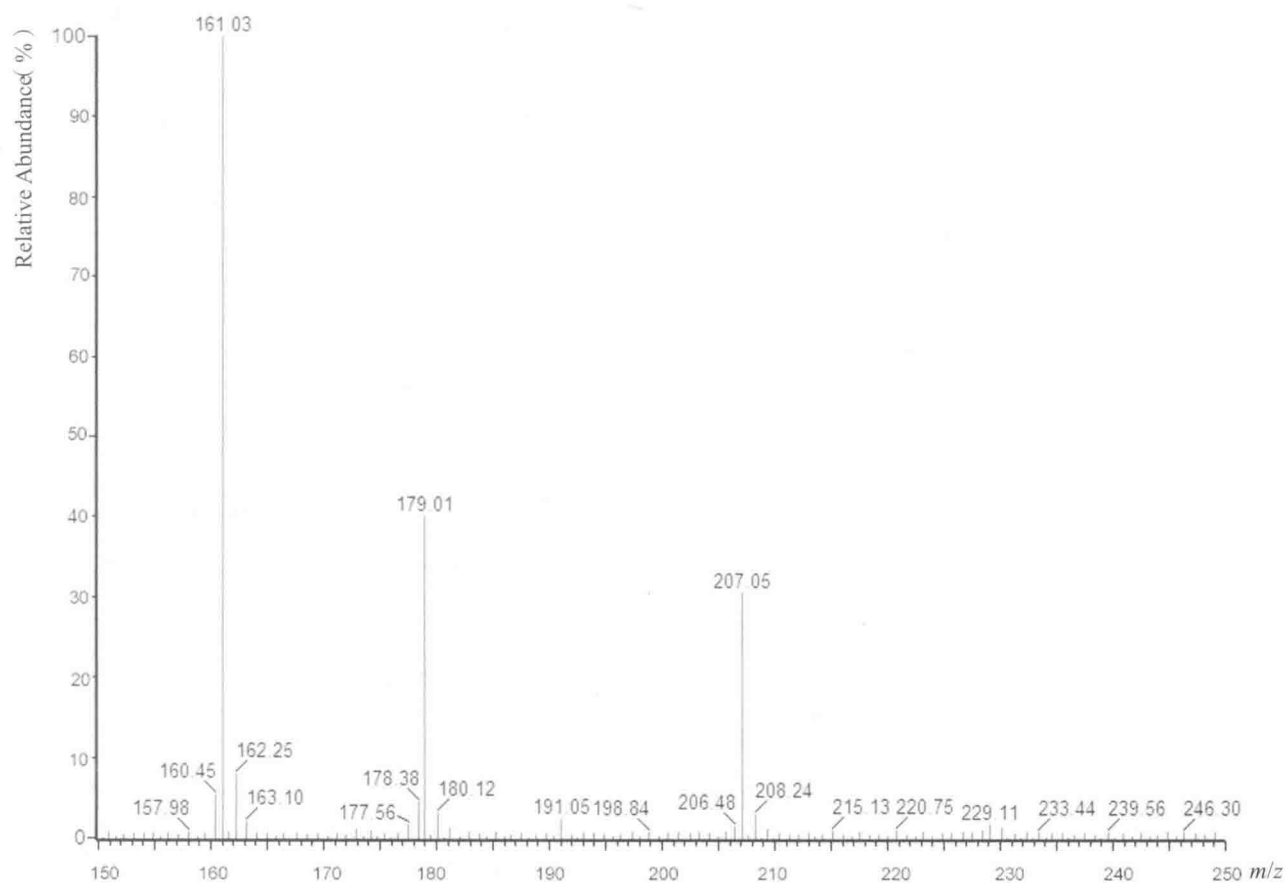
性 状	白色方晶。	Macroscopic Feature	White prismatic crystal.
熔 点	149.5 °C。	Melting Point	149.5 °C .

红外吸收光谱 IR Spectrum



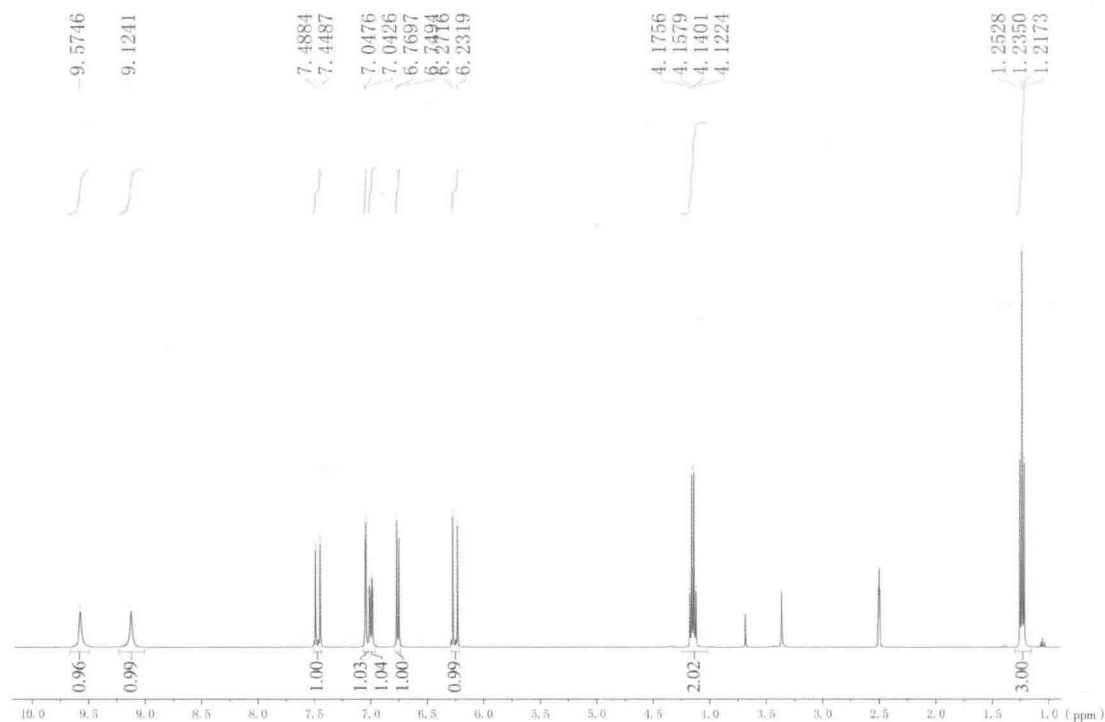
咖啡酸乙酯红外吸收光谱
IR spectrum of caffeoyl acetate

质谱 Mass Spectrum



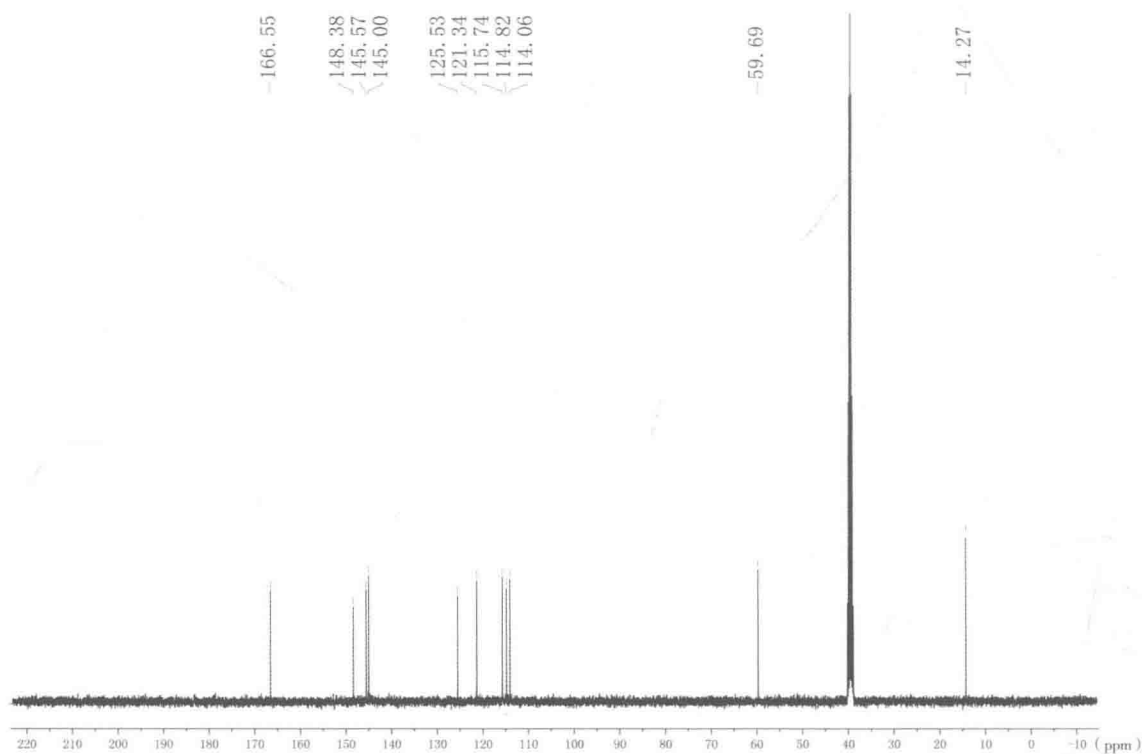
咖啡酸乙酯质谱
Mass spectrum of caffeoyl acetate

核磁共振图谱及数据 NMR Spectra & Data



咖啡酸乙酯氢谱 (DMSO- d_6 , 400 MHz)

^1H -NMR spectrum of caffeoyl acetate (DMSO- d_6 , 400 MHz)



咖啡酸乙酯碳谱 (DMSO- d_6 , 100 MHz)

^{13}C -NMR spectrum of caffeoyl acetate (DMSO- d_6 , 100 MHz)

咖啡酸乙酯碳、氢谱数据

 ^{13}C -NMR and ^1H -NMR of caffeoyl acetate

No.	^{13}C -NMR	^1H -NMR (J/Hz)
1	125.5	—
2	114.1	7.04 (1H, d, $J=2.0$)
3	145.0	—
4	148.4	—
5	115.7	6.77 (1H, d, $J=8.0$)
6	121.3	6.98 (1H, dd, $J=2.0, 8.0$)
7	145.6	7.49 (1H, d, $J=16.0$)
8	114.8	6.27 (1H, d, $J=16.0$)
9	166.6	—
1'	59.7	4.18 (2H, q, $J=6.8$)
2'	14.3	1.24 (3H, t, $J=6.8$)

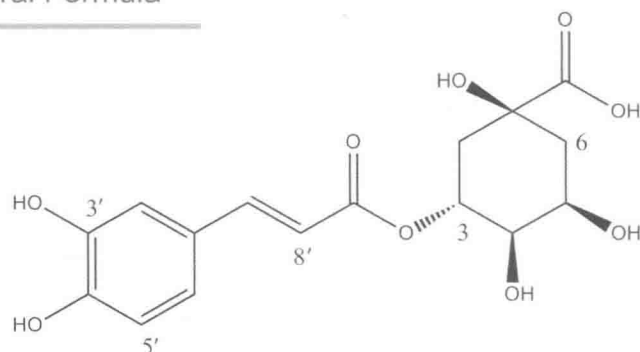
参考文献 References

- [1] 张卫东, 孔德云, 李惠庭, 等. 灯盏花的化学成分研究 (I) [J]. 中国医药工业杂志, 1998, 31 (11) : 347-348.
- [2] 朱虹, 唐生安, 秦楠, 等. 旋覆花中化学成分及其活性研究 [J]. 中国中药杂志, 2014, 39 (1) : 83-88.

绿原酸

chlorogenic acid

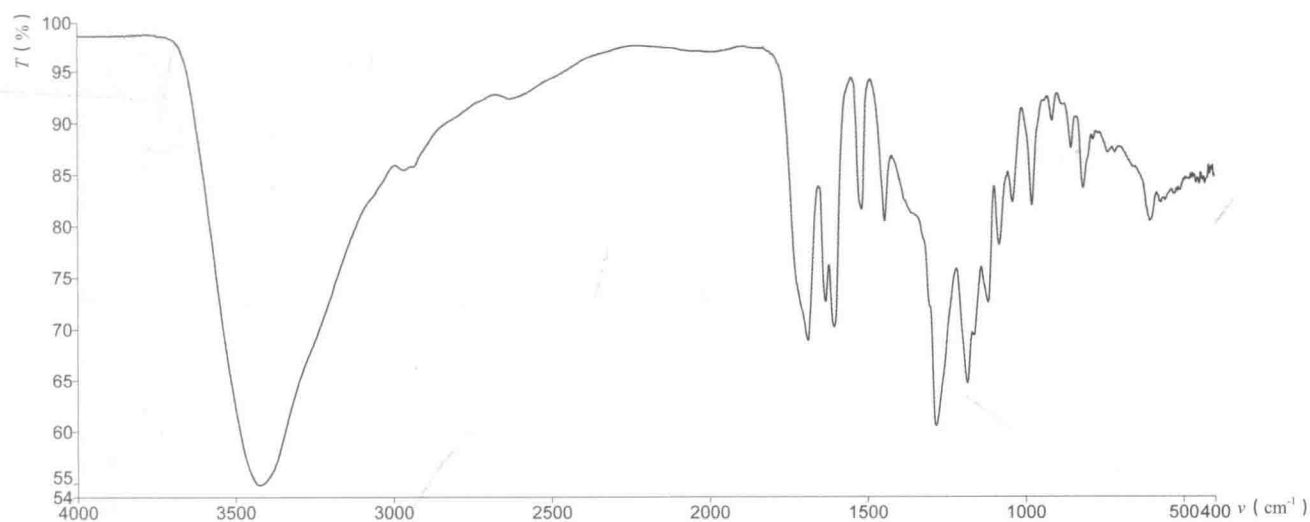
结构式 Structural Formula



CAS 号	327-97-9。	CAS No.	327-97-9.
分子式	$C_{16}H_{18}O_9$ 。	Molecular Formula	$C_{16}H_{18}O_9$.
分子量	354。	Molecular Weight	354.
结构类型	苯丙酸类。	Type of Structure	Phenylpropionic acids.
主要来源	忍冬科植物忍冬 <i>Lonicera japonica</i> Thunb. 的干燥花蕾或带初开的花。	Main Source	The dried flower bud and opening flower of <i>Lonicera japonica</i> Thunb. (Fam. Caprifoliaceae).
主要用途	主要用于山银花、天山雪莲、石韦、苍耳子、杜仲叶、忍冬藤、金银花、茵陈、菊花、梅花、蓍草等的定性、定量分析。	Main Application	Mainly used for the qualitative and quantitative analysis of <i>Lonicerae Flos</i> , <i>Saussureae Involucratae Herba</i> , <i>Pyrrrosiae Folium</i> , <i>Xanthii Fructus</i> , <i>Eucommiae Folium</i> , <i>Lonicerae Japonicae Caulis</i> , <i>Lonicerae Japonicae Flos</i> , <i>Artemisiae Scopariae Herba</i> , <i>Chrysanthemi Flos</i> , <i>Mume Flos</i> , <i>Achilleae Herba</i> , etc.

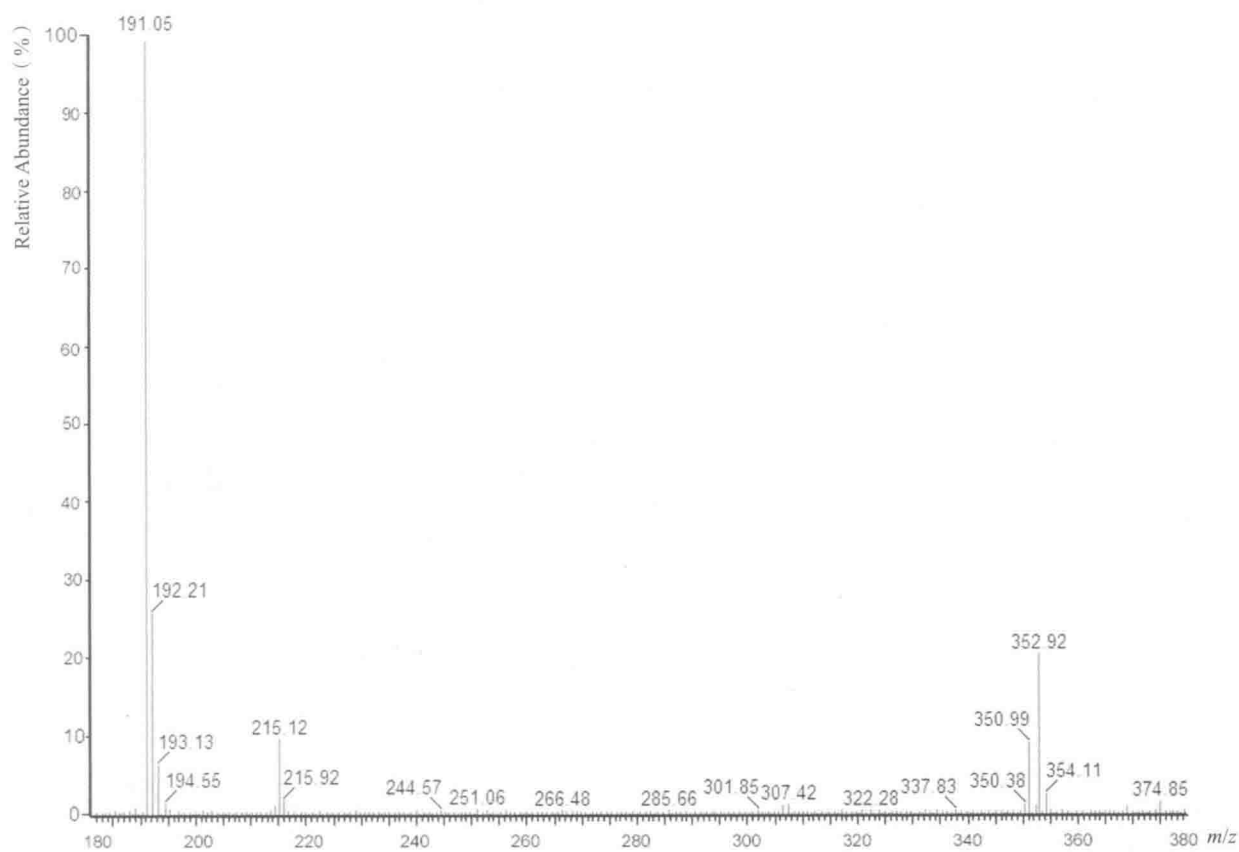
物理性质		Physical Properties	
性 状	针晶。	Macroscopic Feature	Needle crystal.
熔 点	208 ℃。	Melting Point	208 ℃ .
溶解性	溶于水。	Solubility	Soluble in water.

红外吸收光谱 IR Spectrum



绿原酸红外吸收光谱
IR spectrum of chlorogenic acid

质谱 Mass Spectrum



绿原酸质谱
Mass spectrum of chlorogenic acid