

利用化學計量學建立
香港中成藥檢測平台
(ITS/155/13FP)

莫錦華博士
香港理工大學



THE HONG KONG
POLYTECHNIC UNIVERSITY
香港理工大學



香港科技大學
THE HONG KONG UNIVERSITY OF
SCIENCE AND TECHNOLOGY

立項背景

- > 中藥的質量管理是中藥發展其中一個重要方向。
- > 一個優良的分析方法是中成藥質量管理的重要基礎。
- > 制定中成藥分析方法的困難：成份複雜，提高開發成本

項目概要

- > 現時香港藥材標準(港標)為中藥材品質而制定，本項目研究可否應用港標分析方法於中成藥的分析。
- > 發展色譜數據分析方法協助中成藥的化學成份分析，以解決複方化學成份複雜，分析困難的問題，幫助開發複方的分析方法建立質量標準。
- > 兩個複方研究對象：玉屏風散(YPFT) 及逍遙散(XYS)

研究方案

收集YPFT 及 XYS 的藥材

在市場收集YPFS 和 XYS 中成藥

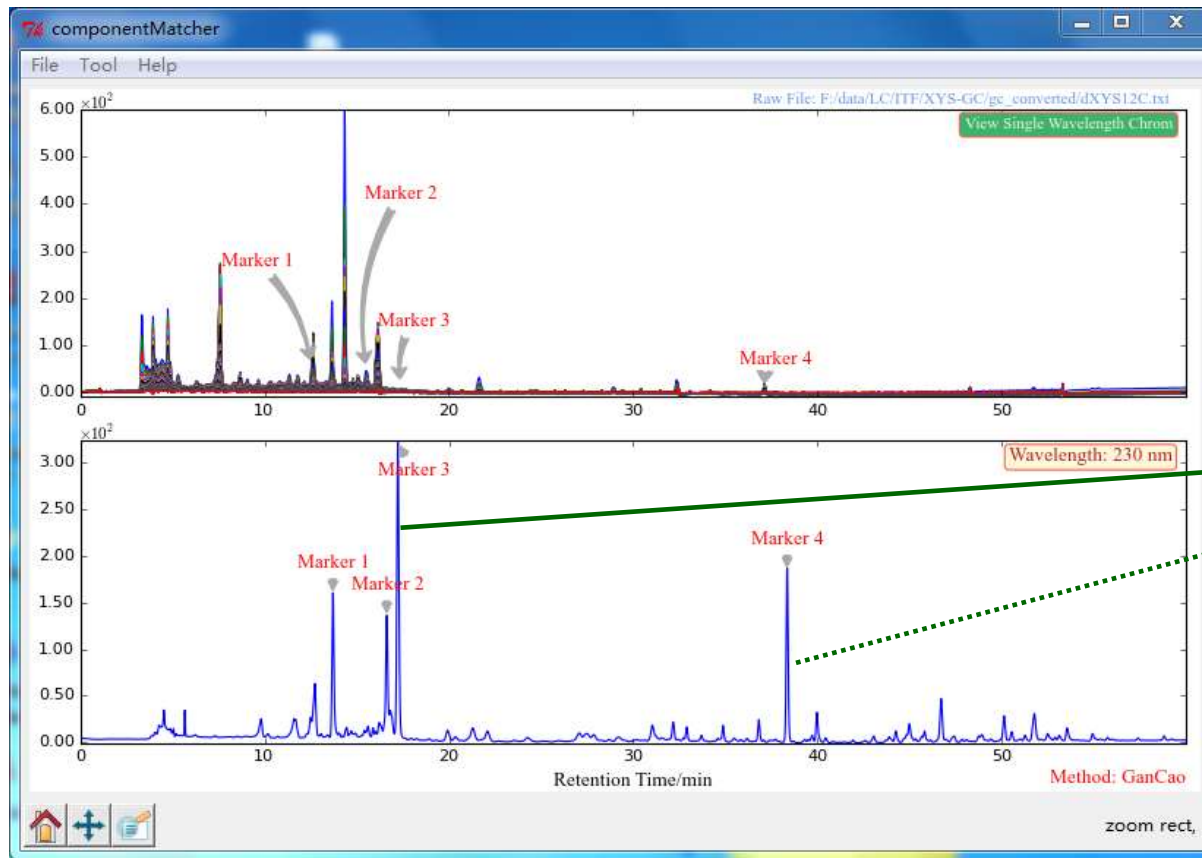
按藥典分量準備複方湯劑

按港標方法分析兩方中主要藥材的
指紋圖譜及指標成份含量測定

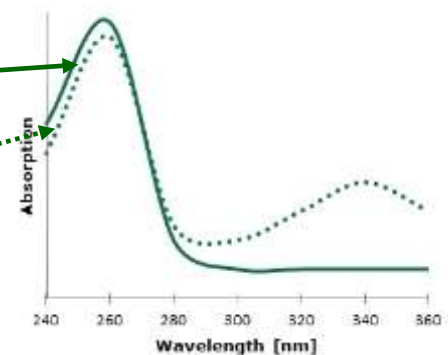
採用化學計量學軟件協助辨別指紋圖譜的共有峰

探討利用港標作為基礎的中成藥化學成份分析方法

化學計量學分析 (componentMatcher)

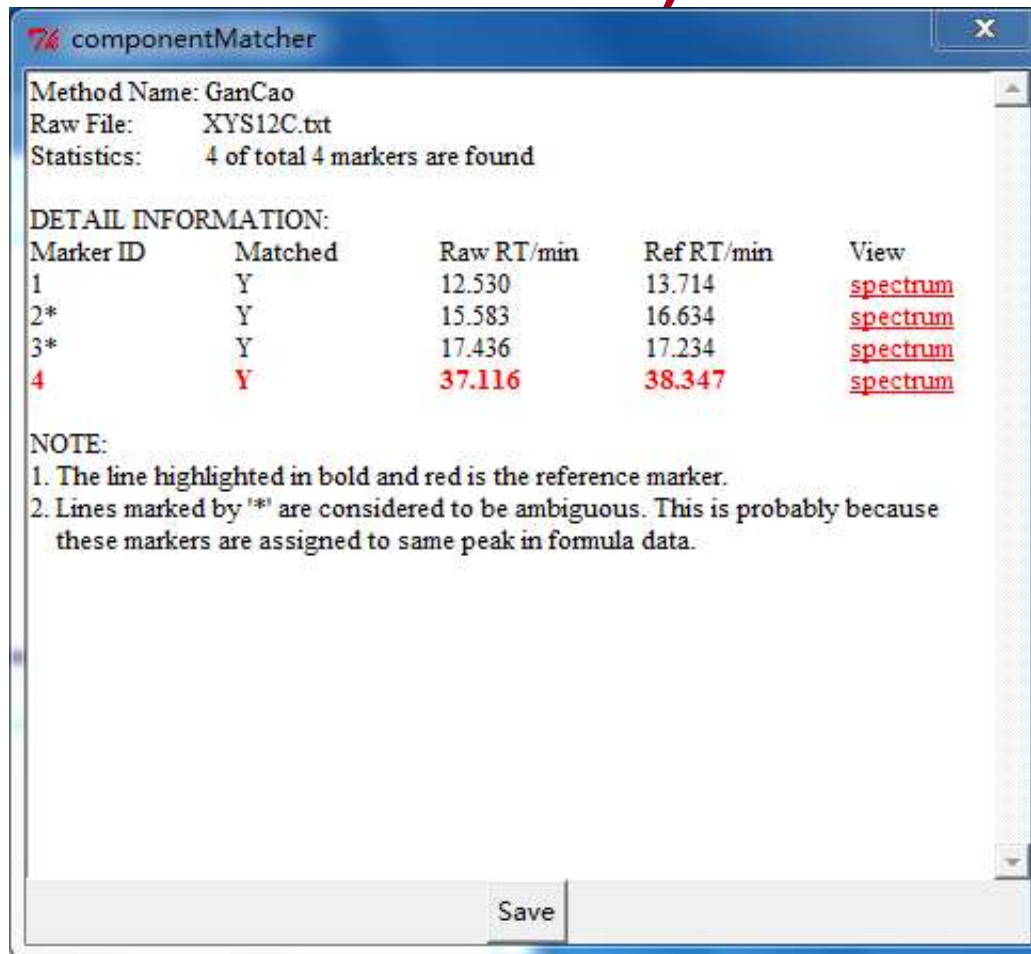


透過軟件比較
UV光譜，自
動找出共有峰
是否存在



Interface of ComponentMatcher

化學計量學分析 (componentMatcher)



Method Name: GanCao
 Raw File: YYS12C.txt
 Statistics: 4 of total 4 markers are found

DETAIL INFORMATION:

Marker ID	Matched	Raw RT/min	Ref RT/min	View
1	Y	12.530	13.714	spectrum
2*	Y	15.583	16.634	spectrum
3*	Y	17.436	17.234	spectrum
4	Y	37.116	38.347	spectrum

NOTE:
 1. The line highlighted in bold and red is the reference marker.
 2. Lines marked by '*' are considered to be ambiguous. This is probably because these markers are assigned to same peak in formula data.

Save

藥材

CMMs		No. of batches collected	
YPFS	Astragali Radix (黃耆) HQ	3 (herbal)	5 (pCM)
	Saposhnikoviae Radix (防風) FF	3 (herbal)	
	Processed Atractylodis Macrocephalae Radix (炒白朮) CBZ	3 (herbal)	
XYS	*Processed Atractylodis Macrocephalae Radix (炒白朮) CBZ	3 (herbal)	5 (pCM)
	*Angelicae Sinensis Radix (當歸) DG	3 (herbal)	
	*Bupleuri Radix (柴胡) CH	3 (herbal)	
	*Paeoniae Alba Radix (白芍) BS	3 (herbal)	
	Glycyrrhizae Radix Praeparata cum Melle (炙甘草) GC	3 (herbal)	
	Poria (茯苓) FL	3 (herbal)	
	Fresh Zingiberis Rhizoma (生薑) SJ	3 (herbal)	
Mentha Herba(薄荷) BH	3 (herbal)		

*major herbs being analyzed using HKCMMS protocol

玉屏風散 (YPFS) 中的共有峰辨別

pCM	CMMs	Fingerprint		
		Common Peaks listed in HKCMMS	Common Peaks Found ⁺	Cal. Common peaks in pCM
YPFS 湯劑 N=3	Astragali Radix (黃耆)	5	4/5	N.A.*
	Saposhnikoviae Radix (防風)	7	4/6	4
	Processed Atractylodis Macrocephalae Radix (炒白朮)	5	4/5	2
YPFS 中成藥 N=5	Astragali Radix (黃耆)	5	5	
	Saposhnikoviae Radix (防風)	7	5	5
	Processed Atractylodis Macrocephalae Radix (炒白朮)	5	5	4

*black: Peak identified by relative retention time in product; red: in herbs

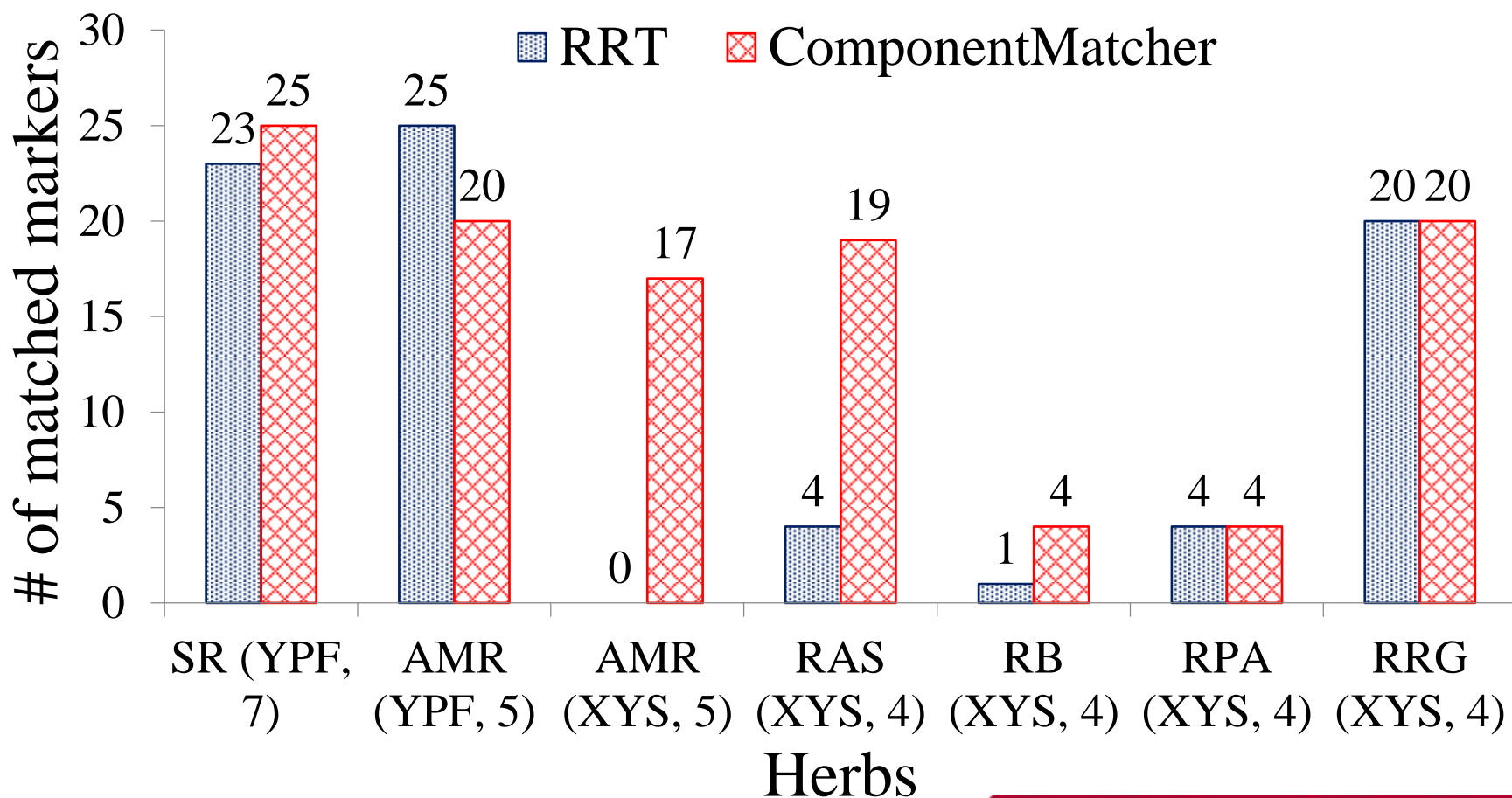
*N.A. because Astragali Radix use ELSD detector, different data format

逍遙散 (XYS) 中的共有峰辨別

pCM	CMMs	Fingerprint		
		Common Peaks	Common Peaks Found ⁺	Cal. Common peaks in pCM
XYS 湯劑 N=3	Processed Atractylodis Macrocephalae Radix (炒白朮)	5	0/5	4
	Angelicae Sinensis Radix (當歸)	4	3/4	4
	Bupleuri Radix (柴胡)	4	0/3	2
	Paeoniae Alba Radix (白芍)	4	1/1	1
	Glycyrrhizae Radix Praeparata cum Melle (炙甘草)	4	4/4	4
XYS 中成藥 N=5	Processed Atractylodis Macrocephalae Radix (炒白朮)	5	0	4
	Angelicae Sinensis Radix (當歸)	4	3	4
	Bupleuri Radix (柴胡)	4	0	2
	Paeoniae Alba Radix (白芍)	4	1	1
	Glycyrrhizae Radix Praeparata cum Melle (炙甘草)	4	4	4

*black: Peak identified by relative retention time in product; red: in herbs

化學計量學與人手辨別比較



項目結論及未來應用

- > 港標是原藥材的標準，但當中的含量測定部份亦普遍適用於項目中兩個方劑的八種藥材的飲片。
- > 港標的含量測定方法很可能用於成方簡單的中成藥上，如玉屏風散(只有3味藥材)，但有關的中成藥有關的標準限度需要修訂
- > 在使用港標方法得出的中成藥化學指紋圖譜中，能辨別的共有峰數量較少，這可能與中成藥圖譜複雜，峰的重疊較多有關
- > 化學計量學方法能更客觀、有效識別圖譜中的共有峰

項目結論及未來應用

- > 以港標指紋圖譜方法分析項目中所用的藥材飲片，與原來的指紋圖譜(以原藥材制定)有差別，這可能與部份成份在炮製過程中消失(如白芍)有關。
- > 另外，部份在港標初期建立的指紋圖譜，如柴胡，未能重覆，這可能與該方法的分辨率不足所致。
- > 在煎煮成湯劑後，圖譜中的共有峰減少(這於分析逍遙散湯劑中的炒白朮相當明顯，項目結果發現在逍遙散中找不到白朮原來的5個共有峰)，這可能與成份在煎煮的過程中流失或改變有關，但需進一步研究。

應用於中成藥分析的前景

- > 港標所載的方法可作為分析中成藥方法的基礎。
- > 軟件有助辨別指紋圖譜的共有峰，加快建立更好的成藥指紋圖方法。
- > 最後優化分析實驗條件，得出可用於分析中成藥的方法。
- > 如分析方法未如理想，可考慮比較市場上的飲片。

Thank You



THE HONG KONG
POLYTECHNIC UNIVERSITY
香港理工大學

Opening Minds • Shaping the Future
啟迪思維 • 成就未來