

“指纹图谱”是一个值得商榷的词组

罗 旭

(沈阳药科大学 沈阳 110016)

摘 要 中药包括中药材和中成药, 真伪难鉴别, 质量更难按现代科学方法评定。这是一个亟待解决的中药学难题。受发达国家管理草药经验的影响, 近来国内兴起一个用各种现代分析方法鉴定中药的热潮, 这是必须充分肯定的。在所用的方法中有高效液相色谱法、付立叶变换红外光谱法、高分辨质谱法等, 主要是第一种方法。但随后一些研究人员在实际绘制的图谱名称后面加上词组“指纹图谱”, 形成如“红外光谱指纹图谱”等一些新的词组。这样的措辞至少未能把两个“谱”的关系表达清楚。本文提出用具有切合实际而针对性强、清楚和质朴的优点的词“特征”代替词组“指纹图谱”的建议。继而对近 20 年中药质量控制研究的进步进行了简要分析。

关键词 HPLC 指纹(图谱) 指纹(图谱) 整体特征

“Fingerprint Spectrum” Is A Questionable Word Group

Luo Xu

(Shenyang Pharmaceutical University, Shenyang 110016)

Abstract Traditional Chinese medicines, including the materials and the patent medicines, are difficult to identify and their quality is even more difficult to assess in a modern way. This is an urgent problem in traditional Chinese pharmacology. Influenced by the administrative experience of some developed countries in herbal medicines, an upsurge in using modern analytical methods, such as HPLC, FTIR, HRMS, but mainly the first, to take various spectra for identification of T.C.M. has recently been in the making. This enthusiasm is to be amply affirmed. But soon afterwards some researchers began to add the word group “fingerprint spectrum” to the name of the spectrum actually taken to form another word group, such as “infrared spectrum fingerprint spectrum”. This kind of wording is incoherent. In this paper, a proposal of adopting the word “characteristics”, which has the advantages of being geared to the actual circumstances, clearness and plainness, instead of the word group “fingerprint spectrum” is put forward. And the progress of researches made in the recent 20 years on the quality control of T.C.M. is briefly analyzed.

Key words HPLC fingerprint, Fingerprint, Profile

在国家药品监督管理局“关于印发《中药注射剂指纹图谱研究的技术要求(暂行)》的通知”下达、发表^[1]后, 词组“指纹图谱”在全国中药学学术会议、学术刊物甚至国家自然科学基金的中药鉴定学项目申请书中被迅速使用, 在保证中药用药的安全有效上起到应起的作用。该文件“建议优先考虑色谱方法”也是正确的, 因为色谱方法是中药研究中最常用的分离分析方法。

至于这个文件在中药材的取样、提取、分离、检测和评价等步骤的许多环节上所做的规定，就只能在实践中考察后再修订，以提高它的科学性、先进性和可行性。该文件对此有预见，注明是暂行的，留有余地。随后出现的“高效液相色谱指纹图谱”、“红外光谱指纹图谱”、“质谱指纹图谱”一类词组是否正确地反映了实际事物，则是一个辨正名称的正名问题，应该通过学术讨论的途径解决。本文仅就词组“指纹图谱”是否合理发表一些看法，以寻求共识。

人的指纹是由长短、形状、粗细、结构不同的线纹组成的，具有终身不变、各不相同的特性。换言之，每个人的指纹都是不同的。化合物的红外光谱是由其分子振动产生的。不同化合物的分子结构不同，它们的红外光谱也不同；相同化合物的分子结构相同，它们的红外光谱也相同。只要绘制的条件相同，一种化合物的红外光谱就是一条确定不变、不差分毫的曲线。不同化合物对频率在 $4000\sim 625\text{cm}^{-1}$ 范围的红外光总要有不同的吸收，这种不同特别是在 $1500\sim 625\text{cm}^{-1}$ 区域。所以人们把这个区域叫红外光谱的指纹区。对红外光谱的其它区域不叫指纹区；对 $4000\sim 625\text{cm}^{-1}$ 的红外光谱也不叫指纹红外光谱。此外，在词组“红外光谱指纹图谱”中，也未能把两个“谱”的关系表达清楚。

但一味中药材的色谱与一个人的指纹、一种化合物的红外光谱指纹区不同，即使把它的绘制条件规定得非常严格，也会有明显的变化，不宜叫中药的指纹色谱或色谱指纹图谱。中药材多数来源于植物。来源于植物的中药材，即使该植物的种属用基因芯片技术鉴定过，而且生长地区、采收季节、贮存条件和色谱的绘制条件包括取样、提取、分离、检测、评价等步骤都一定，获得的色谱也只能是大同小异，不能像一个人的指纹、一种化合物的红外光谱指纹区那样不差分毫。其原因在于即使是同一棵植物，它所处的生态环境也是逐年有所不同，更勿论沧海桑田，其代谢所产生的化学成分多少要有变化。这样，用来源于该植物的中药材样品绘制的色谱哪能完全一样？！用来源于同种属植物的中药材样品在严格规定的条件下所绘制的色谱光谱很相似。是否可以借用“指纹”这个词语描述，决定于借用是否适当。如果不适当，而又有适当的词可用，就不借用。在本情况下，由于借用而出现了一些矛盾，如红外光谱指纹区与红外光谱指纹图谱互相抵触，用不变的指纹描述可变的中药色谱不着边际，说明这个借用不适当。

“指纹图谱”这个词组是在什么条件下出现在我国的？这与一些发达国家的草药研究人员和管理人员用 HPLC fingerprint(s) 表示草药的特征以控制其质量有关。在澳大利亚医疗用品管理局的 Larry Kelly 博士一篇题为“药检分析实验室面临草药挑战”的报告^[2]中有 33 张图都是与色谱法有关的，图名用英语，16 张的主词是 fingerprint(s)，7 张的主词是 profile(s)。用 profile(s) 为主词的色谱图中的色谱峰数不一定比用 fingerprint(s) 为主词的少。可见什么图的主词用 fingerprint(s)，什么图的用 profile(s)，著者是比较随便的，有一定的随意性。他更没有意识到用不变的指纹描述可变的中药色谱不适当，而国内的色谱工作者也不一定介意这样做。在上述报告的 33 张图中，以 profile(s) 为图名主词的虽比用 fingerprint(s) 的要少，但它的一个词意“a set of characteristics”即“一组特征”却与我们的原意不谋而合。指纹是不能有丝毫改变的，但特征却可以有微小的改变。不能认为会发生微小变化的就不是特征。这样，“中药的色谱指纹图谱”就成为“中药色谱特征”、“红外光谱指纹图谱”就成为“红外光谱特征”，等等。什么是中药的图谱特征？用一味(副)中药合格样品在一定条件下绘制的图谱中专属峰(线、带；不一定要密集

得像指纹;会比“共有峰”少)的总和,就是该中药的图谱(整体)特征,即所谓“指纹图谱”。这样更改有三个优点:(1)切合实际而针对性强,不仅由“指纹”引起的矛盾不复存在,而且泛泛的“图谱”变为其中的特征;(2)词组中词的关系清楚;(3)用词质朴。

在我国出现词组“指纹图谱”,还与中药质量控制方法的进步长期基本上处于停滞状态有关。这与中国是中药发祥地的地位极不相称。上世纪 80 年代曾引进过经济发达国家的一些新技术。其中,高效液相色谱法引进得非常成功;而为采用双波长薄层扫描法购置了大量专用色谱仪器,发表了一些论文,只热闹了一阵,则不算成功。后一情况是由于引用前对该法缺乏反面的技术性能分析造成的。此外,还出现了一些关于中药鉴定的跨学科研究论文,但这些论文虽有中国特色,却未见在实际工作中采用。其原因涉及这些论文的科学性、先进性和可行性,行业习惯和社会风气等复杂问题,已离开本文的主题,姑且不论。

鉴于中药市场存在真伪难辨、质量不能保证的情况,投入一定的人力、物力从事中药图谱特征研究是非常必要的。与植物形态学、基因芯片技术这两种鉴定植物种属的方法不同,根据图谱特征的中药鉴定法,不仅能通过用中药样品制备的试样溶液中产生该特征的化学成分(不一定要知道化学成分是什么,当然知道得愈多愈好,可标明)鉴定来源植物的种属,而且产生该特征的化学成分的一(几)种与疗效直接相关。但根据图谱特征鉴定中药来源植物的种属毕竟是一种化学鉴定法,它不能确定哪一(几)种化学成分是该中药赖以防治疾病的有效成分,所以不能意义明确地测定其含量而准确评定其质量。若要准确评定中药质量,则要进行反映中药疗效的药理实验取得数据,并经过统计分析与有效成分的含量相关,建立数学模型,再由临床验证。这是中药学发展的需要。这种对中药质量的跨学科探索性研究,似应由国家自然科学基金委或其它部门立项,按合理程序申请、评审、批准、资助、检查。

以上所述旨在抛砖引玉,活跃学术氛围,促进中药学现代化。背谬之处,敬请赐教。

参考文献

- [1] 国家医药管理局. 中成药, 2000, 22(10): 671~675.
- [2] L Kelly. 中药新药与临床药理, 2001, 12(3): 152~159.