

中药化学辅导：中药化学成分结构测定一般程序和方法 PDF
转换可能丢失图片或格式，建议阅读原文

https://www.100test.com/kao_ti2020/19/2021_2022__E4_B8_AD_E8_8D_AF_E5_8C_96_E5_c23_19189.htm 中药化学成分特别是

有效成分的结构鉴定（测定）是中药成分研究的重要步骤。如果不能鉴定结构，说明研究中药化学成分没有结果，更谈不上更进一步的研究，如药代动力学研究、结构改造等。

中药化学成分鉴定的方法 中药化学成分结构测定一般程序和方法

中药化学成分的鉴定程序 中药化学成分鉴定的方法 要进行中药化学成分结构鉴定，首先要保证样品的纯度，如果被测样品达不到一定纯度，则无法鉴定结构式。鉴定结构式采用的方法有化学法（利用化学反应等）、波谱法等。波谱法是非常准确的先进方法，包括紫外光谱（UV）、红外光谱（IR）、核磁共振法（ $^1\text{H-NMR}$ 、 $^{13}\text{C-NMR}$ ）、质谱法（MS）等。如果被测成分是已知化合物，在确定纯度后，不必作很多鉴定工作，选择其中几种即可。如果能得到已知物的标准品或对照品，将被测定成分和标准品进行色谱分析（TLC或HPLC）， R_f 值或保留时间一致，混熔点不下降，红外光谱完全一致，分子量一致，就可说明被测成分和对照品一致。如果得不到标准品，则和文献中已知物的红外光谱（最好是已知物图谱）、质谱数据进行对照，有时还需和已知物的NMR谱数据进行对照，如果一致则说明被测成分和文献报道成分一致。如果被测成分为未知物，则要做很多工作。对未知成分的结构测定，也要注意文献工作，注意该中药的来源，注意同种属植物中化学成分的研究情况，收集信息，对结构鉴定很有益处。未知物的鉴定基本有二种情况，一

种是全新结构的化合物，一种是基本骨架已知，而只是取代基种类不同或位置不同，对后一种情况，收集文献资料对鉴定结构非常有用。中药化学成分的鉴定程序对一个化合物，一般按下列步骤进行鉴定：纯度的确定（1）首先观察外形、颜色是否单一纯正，晶形是否一致。（2）色谱分析：薄层色谱结果为单一斑点，应注意点样量不可太小，展开剂不可只选一种。有时可用气相色谱和高效液相色谱法，结果为单一色谱峰。（3）熔点测定：熔点距一般应小于2。物理常数的测定 物理常数固体样品包括熔点、比旋度等；液体样品包括沸点、折光率、比旋度等。分子式测定 采用高分辨质谱法得到分子离子峰，可直接得出分子式。如无高分辨质谱则可先测出分子量（一般用质谱），再进行元素分析测出所含元素及百分含量，求出实验式，最后计算出分子式，实验值与理论值应非常接近。化合物功能团和分子骨架的推定 采用的方法有计算不饱和度、化学反应、IR光谱、UV光谱、NMR谱、MS数据，综合分析，有时与已知物进行比较，以确定被测样品的基本骨架与功能团（取代基）。化学结构的确定 通过综合分析所有波谱数据，必要时作一些特殊的测试，如NMR中的一些新方法，甚至作 射线衍射等测试，确定化学结构式。如果有可能，进行人工合成，将从中药中提取分离所得样品与人工合成品进行全面比较来证明结构式的正确性。100Test 下载频道开通，各类考试题目直接下载。详细请访问 www.100test.com