中药药理作用与靶点分析

贡艳茹

喀喇沁旗中医蒙医医院,内蒙古赤峰市,024400;

摘要:中药作为中国传统医学的重要组成部分,其药理作用机制和靶点分析一直是现代药理学研究的热点领域。 中药药理作用与靶点分析是中医药现代化研究的重要方向,通过揭示活性成分与生物分子的相互作用机制,为 传统功效提供科学依据。未来,随着技术的不断进步和跨学科合作的深入,中药靶点研究将为中药现代化和国 际化提供更坚实的科学基础。

关键词: 中药: 药理作用: 靶点: 分析

Pharmacological Effects and Target Analysis of Traditional Chinese Medicine

Gong Yanru

Karaqin Banner Hospital of Traditional Chinese and Mongolian Medicine, Chifeng City, Inner Mongolia, 024400 **Abstract:** As an important part of traditional Chinese medicine, the research on the pharmacological mechanism and target analysis of traditional Chinese medicine has always been a hot field in modern pharmacology. The pharmacological effects and target analysis of traditional Chinese medicine is a crucial direction in the modernization research of traditional Chinese medicine. By revealing the interaction mechanism between active ingredients and biological molecules, it provides a scientific basis for traditional efficacy. In the future, with the continuous advancement of technology and the deepening of interdisciplinary cooperation, the research on traditional Chinese medicine targets will provide a more solid scientific foundation for the modernization and internationalization of traditional Chinese medicine.

Keywords: Traditional Chinese medicine; Pharmacological effect; Target; Analysis **DOI:** 10. 64216/3104–9656. 25. 01. 025

中药的药理作用具有多成分、多靶点、整体调节的特点,多成分协同作用:一种中药通常含有多种化学成分(如生物碱、黄酮类、挥发油等),这些成分相互协同,共同发挥作用。这种多成分协同作用使得中药的疗效更为全面,副作用相对较小。调节机体平衡:中药在中医理论指导下,通过调节人体的气血、阴阳,改善机体的病理状态,促进健康状态的恢复。中药往往不是针对某一个特定的靶点发挥作用,而是通过多个靶点的协同作用来治疗疾病。

1活性成分的化学分类与功能

1.1 生物碱类

生物碱是一类广泛存在于植物界(少数存在于低等植物)的含氮碱性有机化合物,具有复杂的环状结构且氮原子多位于环内,目前已发现约1万多种。其盐类通常易溶于水或乙醇,但部分如小檗碱盐酸盐难溶于水。主要类型与分布,化学分类,吡啶类(槟榔碱、烟碱)、异喹啉类(吗啡、小啡、小檗碱)、吲哚类(长春新碱)、

莨菪烷类(阿托品)等。特殊类型如嘌呤类(咖啡因)、 甾体类(浙贝母碱)。分布规律,集中于双子叶植物(如 毛茛科、茄科、罂粟科),同科植物常含结构相似的生 物碱。在植物体内多集中于特定部位(如叶、树皮、种 子),药理作用与临床应用,治疗作用,镇痛:吗啡、 可待因用于晚期癌痛,但易成瘾。抗肿瘤:长春新碱干 扰纺锤体形成,抑制细胞分裂。抗菌抗炎:黄连素(小 檗碱)治疗细菌感染。心血管调节:地高辛改善心功能, 奎宁抗疟疾。毒性作用,乌头碱可致心律失常、肝中毒; 烟碱(尼古丁)过量可致死。典型代表药物,天然来源: 麻黄(麻黄碱平喘)、黄连(小檗碱抗菌)、洋金花(莨 菪碱解痉)^[1]。合成衍生物:依托泊苷(鬼臼毒素类抗 肿瘤药)。使用注意事项,需严格遵医嘱控制剂量,避 免毒性或依赖性。例如马钱子(通络止痛)过量可致呼 吸衰竭。

1.2 萜类与挥发油

萜类化合物是天然药物中一类重要的化学成分,其基本结构由异戊二烯单位(C5)构成,根据异戊二烯单

元数量可分为单萜(C10)、倍半萜(C15)、二萜(C2 0) 等类别。这类化合物多具有特殊香气,低分子萜类 常呈油状液体, 而高分子萜类(如二萜、三萜) 多为结 晶性固体。萜类在植物中广泛存在,例如单萜和倍半萜 是挥发油的主要成分,二萜和三萜则常见于树脂、皂苷 等。挥发油(精油)主要由萜类及其含氧衍生物(如醇、 醛、酮)组成,此外还包含芳香族化合物和脂肪族成分。 其特点包括: 抗菌消炎: 如丁香酚、薄荷醇对多种微生 物有抑制作用: 药理活性: 部分挥发油具有镇痛、抗氧 化、调节内分泌等作用;分布特征:广泛存在于菊科、 唇形科等芳香植物中,多储存在油管或分泌细胞中。值 得注意的是, 萜类与挥发油的生物活性与其结构密切相 关。例如单萜醇类(如薄荷醇)具有清凉感,而倍半萜 (如广藿香醇)则常表现出更强的药理活性。在中药应 用中,挥发油的有效性常取决于其主成分的协同作用, 如薄荷油中薄荷醇含量达80%。

1.3 黄酮类

黄酮类是一类具有 C6 -C3 -C6 结构的天然或合成 多酚化合物,广泛存在于植物中,是植物次级代谢产物。 其核心特征包括: 化学结构, 以黄酮为基本骨架, 衍生 出黄酮醇、异黄酮、花青素等多种亚类,常以糖苷形式 存在,糖基类型(如葡萄糖、鼠李糖)影响其水溶性和 生物活性,主要来源,植物:显齿蛇葡萄、黄芩、柑橘 类水果、豆科植物等,食物:苹果、葡萄、洋葱、西兰 花、茶叶及黑巧克力等,药理作用,抗氧化:清除自由 基能力是维生素 E 的 10 倍以上, 抗炎: 抑制炎性介质 释放, 促进伤口愈合心血管保护: 改善血液循环, 降低 胆固醇和动脉硬化风险,其他:抗肿瘤、免疫调节、预 防骨质疏松等,临床应用,药物:地奥司明片(静脉功 能不全)、依普黄酮(骨质疏松)、盐酸黄酮哌酯(泌 尿系统症状) [2] 。保健品:蜂胶(如山川树蜂胶含黄酮 7.65g/100g)。使用注意,孕妇、哺乳期妇女及过敏体 质者需谨慎,食物中的黄酮类仅具辅助作用,不能替代 药物治疗,黄酮类的研究持续深入,尤其在微生物合成 技术领域取得进展, 为规模化生产提供新途径。

1.4 醌类

醌类是一类含有环己二烯二酮或环己二烯二亚甲 基结构的有机化合物,其核心特征为六元环状二酮结构 (含两个羰基),属于芳香族母核的氢原子被氧原子取

代的衍生物。结构与分类,基本结构,醌类多为α,β-不饱和酮,具有高度共轭体系,通常呈现黄色至橙红色。 主要类型, 苯醌类: 如对苯醌(1,4-苯醌)和邻苯醌(1, 2-苯醌),后者稳定性较低。萘醌类:以α-萘醌(1,4 -萘醌)为主,常见于天然色素。蒽醌类:如大黄、番 泻叶中的有效成分,具有显著生物活性。菲醌类:如丹 参中的丹参醌,对心血管疾病有治疗作用。生物活性与 医学应用, 药理作用, 泻下作用: 番泻苷类刺激肠道蠕 动。抗菌止血:大黄中的游离蒽醌可抑制细菌,茜草素 促进凝血。心血管保护: 丹参醌扩张冠状动脉, 改善心 肌缺血。健康风险,长期接触蒽醌可能导致皮肤损伤、 消化系统紊乱及神经系统毒性, 需避免过量暴露。工业 与科研应用,能源材料:石墨烯/醌式席夫碱复合材料 可提升电池电极活性位点,用于锂离子电池。环境降解: 醌还原酶在污染物处理中发挥作用,如偶氮染料脱色。 天然分布, 广泛存在于植物中, 如大黄(蓼科)、决明 子(豆科)、紫草(紫草科)等,部分低等植物和菌类 也含醌类代谢物。醌类化合物的多样性与活性使其在医 药、工业及生态领域具有重要价值,但需注意其潜在毒 性。

2作用靶点类型与机制

2.1 酶类靶点

酶类靶点作为药物开发的核心方向, 在治疗领域占 据重要地位。以下是关键要点:酶的基本特性与可成药 性,酶作为生物催化剂,通过结合底物并加速特定化学 反应参与生命活动。其结构稳定、活性位点明确的特点 使其成为理想的药物靶点。例如乳糖酶通过水解乳糖参 与消化, 其功能异常可导致乳糖不耐受等疾病。目前市 场上约47%的小分子药物以酶为靶点,凸显其重要性。 典型酶靶点及作用机制, HMG-CoA 还原酶: 胆固醇合成 的限速酶,他汀类药物通过抑制其活性降低 LDL 水平[3]。 DPP-4: 降解 GLP-1 的酶,抑制剂(如西格列汀)可延 长 GLP-1 作用时间改善血糖。ACC: 调控脂肪酸合成的 关键酶,其抑制剂可调节脂代谢异常。PCSK9:丝氨酸 蛋白酶,通过促进 LDLR 降解影响胆固醇代谢,成为抗 体药物的唯一靶点。研究前沿与潜力靶点,PLA2G15: 新发现的溶酶体磷脂酶,可降解 BMP 脂质,为神经退行 性疾病提供治疗潜力。SMURF1: E3 泛素连接酶,其抑制 剂通过隐蔽腔体结合,为肺动脉高压等疾病提供新思路。 激酶/磷酸酶:如 Src 激酶和 PKC,其异常磷酸化与癌症、

糖尿病等疾病密切相关。靶点选择与药物设计,酶靶点的选择需基于其代谢通路中的关键性及可干预性。合理化药物设计常依据酶的结构特征或天然底物进行分子优化。例如,GPCR 虽占药物靶点多数,但酶类靶点(如上述案例)在代谢疾病中更具针对性。酶类靶点的研究持续推动创新药物开发,尤其在代谢疾病、神经退行性疾病等领域展现广阔前景。

2.2 受体与通道

受体与通道是细胞信号转导的核心分子机制, 二者 在功能上紧密关联但存在本质差异:基本概念,受体, 受体是能特异性识别配体(如神经递质、激素)并触发 细胞内信号转导的分子,多为糖蛋白或脂蛋白,分布于 细胞膜、胞浆或核内。其作用包括:结合配体后构象改 变,激活下游信号通路,效应可短时(如代谢改变)或 长效(如基因表达调控),离子通道,通道是允许特定 离子跨膜运输的蛋白质孔道,通过门控机制(如配体结 合、电压变化)调控开闭,直接影响膜电位和细胞兴奋 性。例如: 钙离子内流触发肌肉收缩, 钾离子外流导致 膜超极化,特殊类型:离子通道型受体,这类分子兼具 受体与通道功能,如:NMDA 受体:与TRPM4 形成"死亡 复合物"导致神经细胞死亡,乙酰胆碱受体: 五聚体结 构,配体结合后直接开放离子通道。研究进展,疾病机 制,阿尔茨海默病中NMDAR/TRPM4复合物促进神经毒性, P2X7 受体拮抗剂(如 JNJ-47965567)用于炎症治疗, 技术应用,光控药理学通过修饰受体/通道实现时空特 异性调控,冷冻电镜揭示 GPCR 与离子通道的相互作用 机制,受体与通道的协同作用构成了细胞通讯的基础, 其研究为神经退行性疾病、精神药物开发等提供了重要 靶点。

2.3 信号诵路

信号通路是细胞感知并响应外部刺激的核心生物化学过程,指细胞外信号分子(如激素、生长因子等)通过一系列酶促反应传递至细胞内,最终触发特定生物学反应的机制。其研究始于1972年,1980年 M. Rodbel 1提出"信号转导"概念后成为生物学与医学领域的重要研究方向。关键组成与机制,信号分子与受体,配体:包括激素、神经递质等,分为脂溶性(如类固醇激素)和水溶性(如多肽类)。受体:分为膜受体(如G蛋白偶联受体 GPCRs)和胞内受体(如类固醇激素受体),

通过构象变化或直接结合 DNA 传递信号。信号传递层级,第一信使:细胞外信号分子(如 TNF)。第二信使:胞内小分子(如 cAMP、 Ca^{2+}),通过激活蛋白激酶放大信号。第三信使:转录因子(如 NF- κ B),调控基因表达。

3 中药靶点研究的挑战与展望

3.1 靶标识别的复杂性

中药靶点研究面临的核心挑战在于其多成分、多靶 点、多途径的复杂作用机制,这导致靶标识别的难度显 著增加。物质基础复杂性,中药复方在煎煮过程中可能 产生新物质, 且微量活性成分难以通过传统技术识别。 例如,复方中多味药材的相互作用可能生成未知化合物, 这些物质的靶点映射关系尚未明确[4]。技术瓶颈,传统 分离检测手段对低含量药效物质灵敏度不足,间接作用 靶点的识别缺乏有效工具(如 SPR、ITC 等技术尚未完 全适配中药体系),方法论局限,单一靶点研究范式难 以解析中药网络化作用机制,需结合网络药理学与人工 智能技术构建"药物-靶点-疾病"多维模型。未来发展方 向, 技术创新: 开发高通量筛选与 AI 驱动的靶点预测 平台(如 TCMSP 系统),跨学科融合:整合生物信息学、 结构生物学与临床医学数据,标准化建设:建立中药靶 点表征与确证的统一技术规范, 当前研究需突破"组方 合理性"与"毒性药材"等传统桎梏,通过多学科协作实 现从经验医学到精准医学的跨越。

3.2 跨学科合作的必要性

中药靶点研究作为中医药现代化的核心领域,正面临多维度挑战,同时也展现出跨学科融合的广阔前景。核心挑战,复杂作用机制解析,中药复方具有多成分、多靶点特性,传统单靶点药物评价体系难以适用。例如,丹参、青蒿等药材的活性成分虽已明确,但其协同作用网络仍需系统生物学方法进一步揭示。技术瓶颈,验证工具不足:量子意识波等前沿假说缺乏可重复性实验支撑,全球仅少数实验室具备验证条件。数据整合难题:临床疗效评价需构建覆盖全生命周期的证据链,但人用经验的数据标准化程度低。方法论创新,人工智能与机器学习可加速靶点筛选,如Penn State 团队利用可解释 AI 预测神经疾病。器官芯片、纳米技术为中药安全性评价提供新工具。学科协同案例,工程学+医学:3D打印定制鞋垫改善糖尿病患者生活质量。生物信息学+

药学:高通量筛选结合计算模拟提升靶点发现效率。未来展望,监管科学体系构建,需建立符合中药特点的"新工具、新标准、新方法",如国家中医药管理局推动的临床综合评价体系。技术融合方向,基因编辑调控药材有效成分合成。量子物理与中医理论结合需突破哲学范式争议。国际合作与伦理规范,欧盟《量子人权公约》等案例显示,跨学科研究需平衡技术创新与伦理约束。当前,中药靶点研究已从经验传承转向科学验证,但需持续推动药学、生物学、信息学等领域的深度协作,以解决技术壁垒并实现理论突破。

3.3 临床转化的挑战

中药靶点研究的临床转化面临多重挑战,同时也展现出显著的发展机遇。核心挑战,靶点选择与优化,中药多成分、多靶点的特性使得靶点筛选和验证更为复杂,需结合高通量筛选与人工智能技术进行精准预测。此外,靶点相关疾病机制研究不足可能影响后续药物设计。技术转化瓶颈,多组学技术融合:虽然多组学技术(如基因组、代谢组)为靶点发现提供新工具,但数据整合与标准化仍是难点。临床前验证:中药活性成分的作用机制需通过更高效的模型验证,而传统药效学方法可能无法完全适应。政策与伦理合规性,中药审评体系需兼顾传统经验与现代科学证据,如"三结合"审评体系(人用经验、临床研究、实验数据)的落地仍面临执行差异。此外,知识产权保护(如经验方转化)和伦理审查(如真实世界研究)需进一步规范。突破方向与机遇,政策

驱动创新,国家《"十四五"中医药发展规划》等政策推动下,中药新药可基于人用经验简化临床流程,如冬柏通淋合剂等院内制剂的成功转化案例。技术协同应用,AI与大数据:用于靶点预测和临床试验设计,提升效率。医企合作模式:如上海市第七人民医院通过院校、企业联动加速制剂转化。成果转化路径,通过院内制剂备案(如鹿芪益肾颗粒)、区域性专病联盟等方式积累临床数据,逐步向新药转化。

总之,中药的药理作用机制复杂多样,现代研究通过多种技术手段揭示了其作用靶点。从多成分协同作用到具体分子靶点的鉴定,中药研究正逐步从经验医学向精准医学转变。随着化学生物学、蛋白质组学等技术的发展,中药的作用机制将得到更深入的阐明,为中药的现代化应用提供科学依据。

参考文献

- [1] 张华. 浅谈中药药理作用与靶点[J]. 中国药业. 201 9, (20) 122-123.
- [2] 李宏杰. 中药药理作用与靶点分析研究[J]. 中南大学学报(医学版). 2017, (8) 225-227.
- [3] 刘浩宇. 关于中药药理作用与靶点探讨[J]. 动物营养学报. 2016, (6) 166-168.
- [4]王红艳. 关于中药药理作用与靶点分析[J]. 中国中药杂志. 2015, (17) 145-146.
- [5]张小萍. 多组分多靶点中药药理作用机制研究中的问题和解决策略[J]. 药学进展. 2014, (12) 78-80.