



基于成分信息的中药标准化方法

—— 构建从检测到生产的全链路体系

 张华俊博士

 2025.5



PART 01

引言：中药标准化的 新时代任务



国家战略支持与中药传承

国家战略层面的中药发展

国家出台多项政策支持中药传承与创新，将其纳入健康中国战略。中药标准化是中药现代化的关键，助力中药走向世界舞台。中药标准化为中医提供标准化药材，协助中医标准化。

中药产业的国际化挑战

中药在国际市场的份额有限，标准化程度低是主要瓶颈。欧美等地区对中药质量标准要求严格，成分明确是准入门槛。中药成分复杂，传统方法难以满足需求。

成分信息的核心地位

成分信息是中药质量控制的基础，决定药效与安全性。现代分析技术推动成分研究，为标准化提供数据支撑。成分信息的精准化是中药产业发展的关键。

PART 02

中药标准化面临的核 心挑战



中药成分的复杂性与波动性

中药成分复杂多变

中药成分多样，受产地、采收时间、炮制方法等因素影响。传统分析方法难以全面检测，导致质量不稳定。成分复杂性增加了标准化难度。

现行药典的局限性

现行药典检测成分有限，无法全面反映中药质量。部分中药标准过于宽泛，难以有效控制质量。药典更新滞后，无法满足现代需求。

成分分析的高成本与低效率

传统成分分析耗时长、成本高，依赖专业设备与专家。不适合大规模商业应用，限制中药标准化推广。高成本与低效率成为标准化的主要障碍。

五位一体的中药标准化



五位一体的中药现代化路径:



中药
全成分分析技术



中药
动态数据库建设



中药
质量标准制定



中药
差异化产品设计



中药
数字化调配生产

构建中药标准化全链路解决方案； 科学、高效、可信的中药产业新范式

PART 3.1

快速全成分分析技术





样品

超高速获得成分信息

实验分析



数据分析

熵最小算法

几天内得到100-300
个成分信息

现有方法需几年和上百万的费用

普通的色质 / 液质联用仪

基于算法的工业软件

量变引起质变

和现有
技术比
较

100 X
分析速度



100 X
灵敏度



10%
人力成本



5%
综合成本



商用

工业分析软件



自动化

操作过程



全适用

各种分析目标



互联网+

数据分析



SmartDalton 软件：基于“熵最小算法”的质谱全成分分析技术

PART 3.2

动态成分数据库：标 准化的基础设施



静态 vs 动态数据库

Part 01

静态数据库的局限

- 静态数据库主要源于文献，信息更新滞后
- 缺乏实时数据，无法反映产品真实成分。
- 传统数据库难以满足现代需求，尤其是商业应用。

Part 02

动态数据库的优势

- 动态数据库基于商用检测数据，实时更新。
- 能全面反映中药产品的真实成分，利于商业应用
- 动态数据为中药标准化提供基础数据和有力支持。

存放大量中药成分数据库的能力。

- 质谱图管理**

选项(O) 搜索(S) 帮助(H)

Citri Grandis Exocarpium 管理

ABC ID ▼ 50

(1aR,4S,4aR,7R,7aS,7bS)-1,1,4,7-Tetramethyldecahydro-
Methyleugenol
(1aR,3aS,7S,7aS,7bR)-1,1,3a,7-Tetramethyldecahydro-
Phenol, 2-methyl-
Caryophyllene oxide
1H-3a,7-Methanoazulen-5-ol, octahydro-3,8,8-trimethoxy-
1,1,7,7a-Tetramethyl-1a,2,6,7,7a,b-hexahydro-1H-C16
Ethanone, 1-(1H-pyrrol-2-yl)-
4-Isopropyl-6-methyl-1-methylene-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene
(3S,3aR,3bR,4S,7R,7aR)-4-Isopropyl-3,7-dimethylcyclopropane
Phenylethyl Alcohol
Bicyclo[3.1.0]hexan-3-ol, 4-methylene-1-(1-methylethyl)-
 α -Calacorene
Butyldated Hydroxytoluene
(3R,3aR,3bR,4S,7R,7aR)-4-Isopropyl-3,7-dimethylcyclopropane
(1S,2R,4R,7R)-4-Isopropyl-7-methyl-3,8-dioxatricyclo[3.3.1.0^{2,6}]nonane
Benzyl alcohol
Cadina-1(10),6,8-triene
Carveol
5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-
1H-Cyclopropa[a]naphthalene, 1a,2,6,7,7a,b-hexahydro-
Benzenemethanol, α,α ,4-trimethyl-

新条目 删除条目

名称: (1aR,4S,4aR,7R,7aS,7bS)-1,1,4,7-Tetramethyldecahydro-1H-cyclopropa[e]azulen-4-ol
项目信息: 化州 (七爪)
分子式: C₁₅H₂₆O
MW: 222
精确质量: 222.198365
CAS#: 88728-58-9
ID#: 50
备注: cp_area= 12350.417043, cp_content= 0.057060
InChIKey: AYXPYQRXGNDJFU-UHFFFAOYSA-N
137个m/z与强度:

50	3	51	27	52	14	53	139	54	24
55	511	56	42	57	113	58	78	59	137
60	8	61	7	62	1	63	8	64	6
65	39	66	31	67	5761	68	67	69	7751
70	63	71	338	72	29	73	73	74	1
75	12	76	5	77	224	78	44	79	455
80	91	81	659	82	8761	83	2431	84	35
85	24	86	27	87	55	88	11	89	67
90	1	91	464	92	84	93	7571	94	172
95	540	96	136	97	72	98	28	99	12
100	2	101	11	102	9	103	52	104	13
105	832	106	1871	107	5991	108	4831	109	999
110	1111	111	1311	112	17	113	9	114	2

添加新项目

m/z 强度 注释

50 72
55 120
90 180

55 120 注释 添加 管理结构

搜索关键词 添加 详细信息 从CAS导入

名称 值

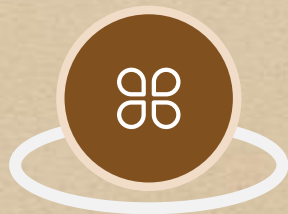
名称 测试手动添加
MW 108
精确质量
备注
分子式 C₇H₈O
CAS# 95-48-7
CAS信息
别名
物理类型
磁矩电压
仪器类型
进样方法
Ionization
离子模式
压强
InChIKey
添加 返回

PART 3.3

基于成分信息的质量 标准体系



全成分质量标准（非真假判断）



多成分指纹图谱

构建多成分指纹图谱，全面反映中药质量。通过成分特征比对，实现质量评价，增强可信度。

指纹图谱为质量评价提供了科学依据。



有效成分群的评估核心

关注与功效相关的“有效成分群”，精准评估药效。通过成分协同作用，确保中药疗效。有效成分群是质量标准的核心。

有效成分群是质量标准的核心。

为中药标准化，科学化提供底层工具



对某一药材的多个样品做分析和建库，基于成分数据库，分析得到该中药材的质量标准。



基于多个中药材的成分数据库，得到某种中药的质量标准



艾条的质量指数



基于对人体有益的成分，
使用36种成分作为指数成分。

<http://bencao.chemopower.com/productdb/moxa/>

分子
测评



太极 艾条

质量指数:



艾然堂 艾条



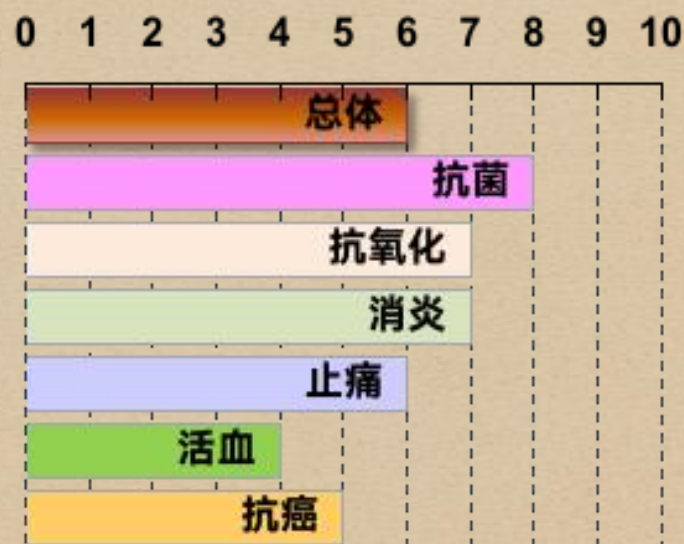
- ❑ 质量指数，表示艾条有益成分总浓度的多寡。
- ❑ 指数越高，有益成分的种类和含量越多。

三七成分质量指数

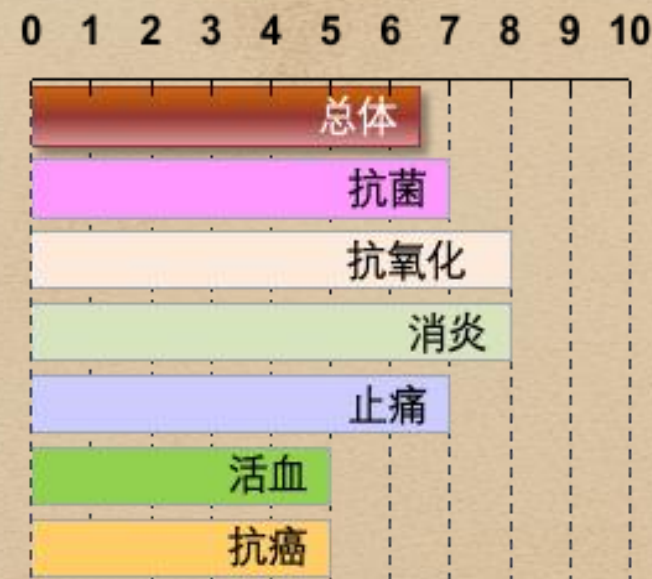


基于对人体有益的活性成分，
使用86个成分作为指数成分。

大三七



中三七



- ❑ 大三七的抗菌指数、中三七的消炎指数较高。
- ❑ 质量指数越大，表示有益成分的种类和信息量越多。

PART 3.4

中药产品功能化，差异化 & 西药中药化



差异化中药产品的标准化路径



成分协同关系与“君臣佐使”原则

依据成分协同关系，体现中药“君臣佐使”配方原则。不同成分组合实现不同功效，满足多样化需求。成分协同关系是差异化产品的基础。

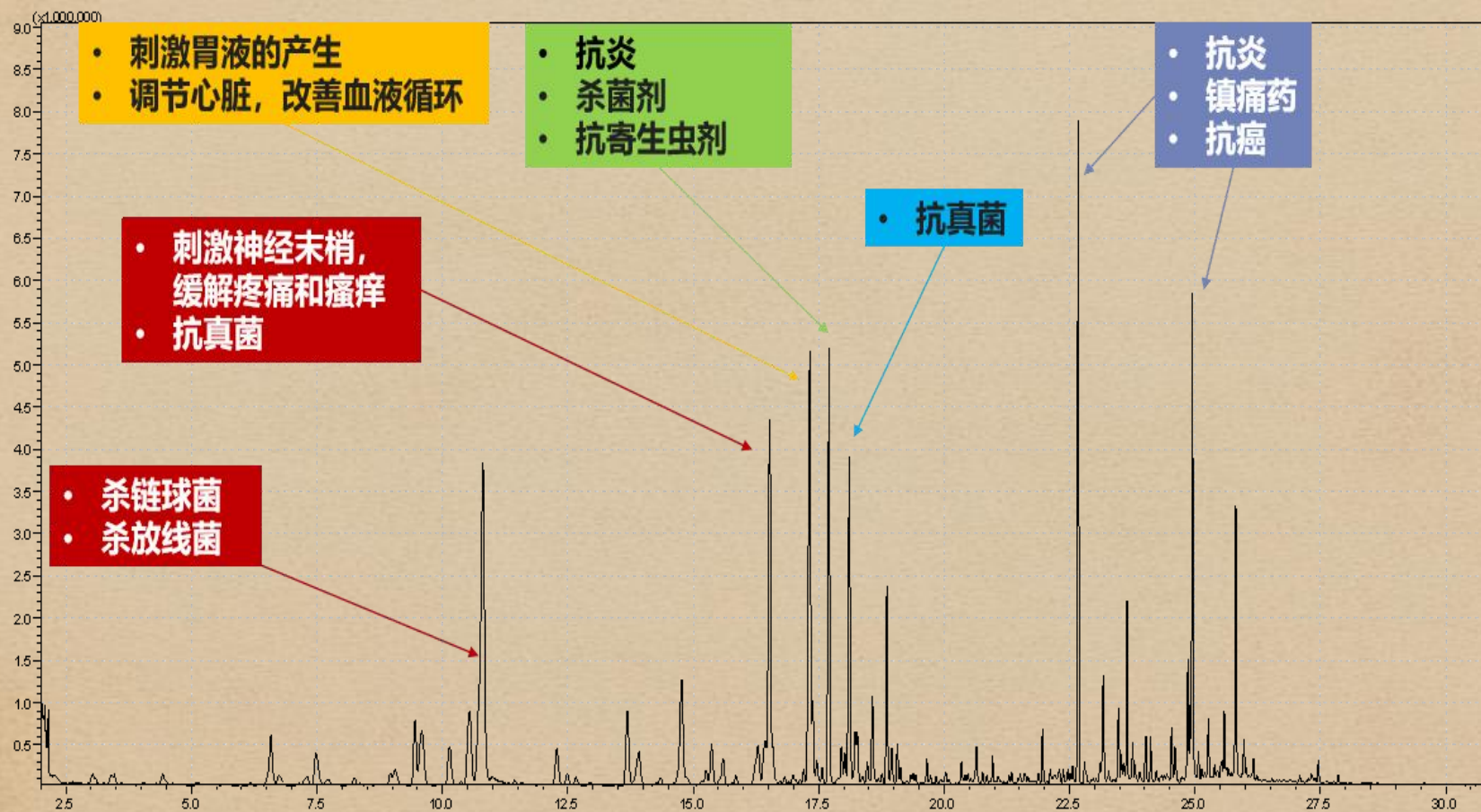


差异化产品与差异化标准体系

根据产品功能差异，制定个性化质量标准。支持差异化中药产品的标准化生产与推广。差异化标准体系满足了多样化市场需求。

单一中药中的成分也有“君臣佐使”的作用，可以突出使用不同的成分组达到不同的功能

某艾草产品化学分析数据和成分的功能



西药中药化:

- 定量侧柏酮的量, 得到**安神的**艾草产品
- 定量其中的抗真菌成分的量, 得到**抗真菌**的产品。
- 提高和定量其中各种抗微生物和真菌的成分, 成为广谱的**防霉剂**等日化成品

YOUR LOGO

PART 3.5

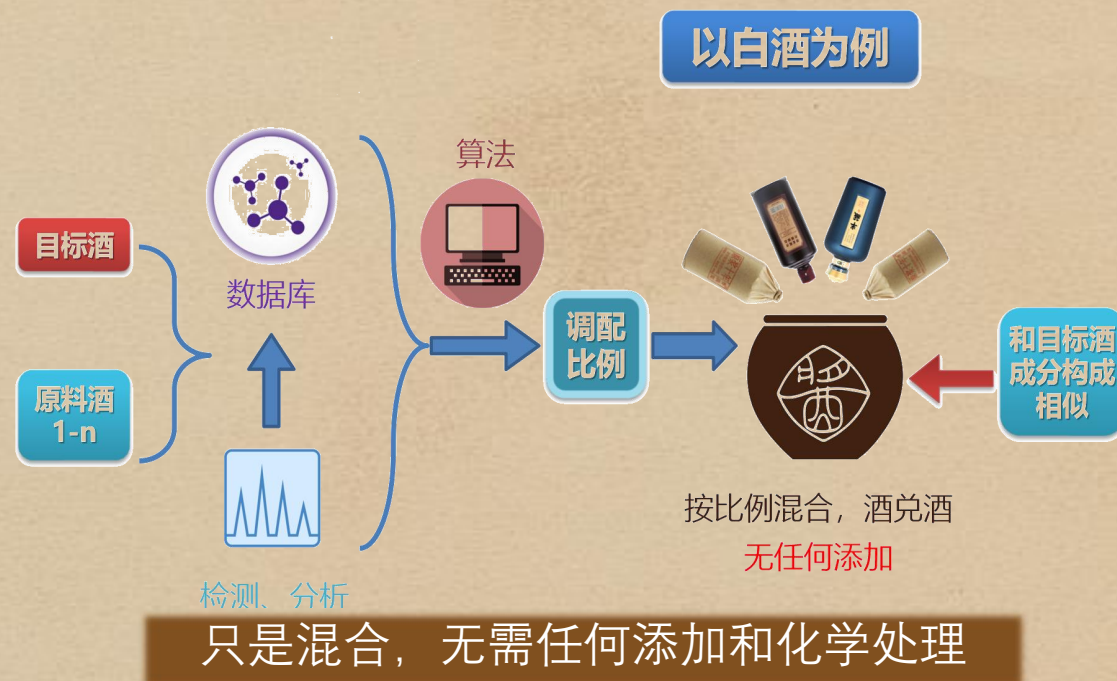
数字化调配技术：连接标准 与生产的桥梁



全成分重组/克隆技术：基本和朴素的原理：

调整分子组成，是产品质量和功效控制的最基础有效方法。

- **基础理论 创新：**在化学的角度上，产品的性质和功效往往取决于分子之间的组合和相互作用。因此，调整产品的分子组成是影响其性质和功效的最基本方法之一。
- **实现方法：**通过同种产品之间的混合，从而精确控制产品的成分和浓度，从而实现对产品性质的精准调控。



效果：已经产业化

- 在全国各地，都能生产茅台同品质酒
- 无需威士忌调酒师，高档威士忌的国产化
- 无需调香师和配方，生产各种高档香水

- 日本汉方产品的国产化
- 高档中药的低成本复刻和大规模生产
- 高档香料，香水的低成本国产替代

成分数据用于生产配方控制

01

精准调配与批次稳定性

利用动态数据库的成分数据，精准调配每种成分浓度。实现批次间稳定性，确保产品质量一致。精准调配是生产稳定性的关键。

02

定制化与功能化产品的快速产业化

支持定制化、功能化中药产品的快速开发。满足不同用户需求，推动中药产品多样化。定制化与功能化产品是市场发展的趋势。

数字化调配与质量标准联动

1 实现“数字中药工厂”模式

将数字化调配技术与质量标准联动。实现生产过程的数字化、智能化，构建“数字中药工厂”。数字化调配技术推动了生产模式的升级。

2 提升生产效率与质量控制

通过数字化手段，优化生产流程，提高生产效率。实现全程质量监控，确保产品质量。数字化手段提升了生产效率与质量控制水平。

PART 04

总结：五位一体的中 药标准化路径



五位一体：中药基于成分信息的标准化，数字化路径：



技术已经在多领域商用，不是实验室的纸上技术。

五位一体的中药现代化路径：

1. 提升中药质量可控性

科学的质量标准：通过全成分分析和多成分指纹图谱，使得中药的质量可以得到量化评估，标准不再依赖主观判断或单一成分，从而保证每批产品的一致性和稳定性。

减少假冒伪劣产品：多成分质量评价体系有效提升中药的鉴别能力，难以造假，增强消费者对中药产品的信任。

2. 高效、低成本的中药标准化

快速、低成本检测：通过颠覆性的分析技术，快速获取中药的全成分信息，几天内可完成大规模的样品检测，相较于传统方法减少了时间和金钱成本。

适应商用环境：简化操作流程，设备通用化，降低了技术对高端人才的依赖，广泛适用于大规模生产和普及化推广。

3. 支持中药差异化与个性化产品

成分配伍精准控制：通过分析“君臣佐使”成分关系，能够根据不同需求调整成分比例，生产出具有差异化功能的中药产品，支持个性化定制。

定制化产品研发：更能满足不同消费者的个性化需求，推动中药产品向功能化、细分化、差异化发展。

构建中药标准化全链路解决方案； 科学、高效、可信的中药产业新范式

○ 五位一体的中药现代化路径：

4. 实现中药生产过程的稳定性与可重复性

数字化调配技术：通过精准的成分调配和浓度控制，确保中药产品在不同生产批次之间保持稳定的质量，解决传统中药生产过程中批次间差异大的问题。

高效生产管理：数字化调配使得生产过程更加精准、高效，减少了人工干预和误差，提高了整体生产效率。

5. 促进中药国际化及全球贸易

国际化标准对接：基于成分信息的标准化技术，可以将中药产品的质量标准与国际标准接轨，为中药走向国际市场提供了重要支持。

推动中药材流通与交易：通过建立数字化、标准化的交易平台和溯源体系，推动中药材的国际贸易，形成全球范围内的中药交易、期货交易市场。

构建中药标准化全链路解决方案； 科学、高效、可信的中药产业新范式

○ 五位一体的中药现代化路径：

6. 加速中药产业化及规模化生产

推动产业升级：中药标准化和数字化调配技术的引入，推动中药产业从手工、传统模式向现代化、规模化的产业链转型，提高了生产效率和市场竞争力。

拓展市场空间：标准化产品的高附加值能够提升中药材的市场价，创造更大市场空间，如高端保健品、药品、功能性产品等。

7. 增强中药的创新能力和研发能力

高效研发支持：系统的成分数据、质量标准和差异化产品设计能力为中药的研发提供了坚实的技术支持，激发创新，推动中药从传统“经验方”向科学、现代化制剂的转型。

快速响应市场需求：灵活的产品调配和快速的成分检测响应，使得中药企业能够更迅速地应对市场变化和消费趋势，实现快速迭代与创新。

构建中药标准化全链路解决方案； 科学、高效、可信的中药产业新范式

PART 07

中药国际化与未来方向



标准化与国际市场准入

成分可量化与产品可控性

成分可量化是中药国际化的关键，确保产品质量可控。满足国际认证要求，推动中药进入国际市场。可量化成分是国际市场的准入门槛。

构建全球信任基础

数字化、平台化、标准化共同构建全球信任基础。提升中药在国际市场的认可度与影响力。
全球信任基础是中药国际化的关键。

未来发展方向展望

STEP. 01

持续技术创新与升级

持续推进分析技术、数字化技术的创新与升级。提高中药标准化水平，引领行业发展。技术创新是中药标准化发展的动力。

STEP. 02

国际合作与标准制定

加强国际合作，参与国际标准制定。推动中药标准化走向全球，提升国际话语权。国际合作是中药标准化走向全球的重要途径。

分子信息技术和张华俊博士



张华俊 博士

- 浙江大学化工90，新加坡国立大学博士。共获有五个专业学位。
- 曾任 新加坡国立大学客座教授，现任博士生导师。
- 曾任 新加坡科学院(A*STAR) 分子信息实验室 主任。
- 新加坡科学院客座高级学科带头人 (Senior PI)。
- 曾任 新加坡中药材标准编纂委员会 主席（制定各种中药材ISO标准）
- 暨南大学兼职研究员，分子信息集团创始人

分子信息技术

- 基于化学分析和算法，低成本获得大量的成分信息。
- 基于产品中综合性成分的质量优劣的标准。
- 基于成分大数据，开发各种用于产品生产的数字化技术。

化学分析
算法

大数据库

产品标准化

各种应用

- 2009年创办ChemoPower企业，推出世界最先进全成分分析软件，获美国国家标准技术研究所NIST的认可支持。
- 2018年获新加坡政府科技大奖，由贸工部长和科研局局长颁奖
- 致力于中药现代化和标准化，提供中药的质量信息和定级。2021年在新加坡设立国家级中药材标准。
- 2020年在广州创立分子信息公司，研发数字调配技术，成功应用于酒、香精香料、药膏等领域，被认为将引发新一轮轻工业革命。



谢谢大家



张华俊 博士



2025.5

