

非专利文献中矿物类药物 结构信息的加工方法

专利检索咨询中心 秘琳

摘要: 本文对中国非专利文献中常见的, 需要进行化合物信息标引的矿物类药物进行了分类和总结。分别列出了常见的各味矿物药的功效、治疗作用、需要标引的化学成分, 对常见情况结合具体案例进行了分析, 并对如何提高矿物药结构信息标引的质量提出了建议。

关键词: 数据深加工 矿物药 方剂信息 结构信息



秘琳: 药学专业, 2008年加入专利检索咨询中心数据加工处, 从事非专利文献深加工工作。

矿物药是指来源于矿物的药物, 包括原矿石经过简单加工而成的矿物药。按矿物药的功能分为清热解毒药、利水通淋药、理血药、潜阳安神药、补阳止泻药、消积药、涌吐药、外用药等, 矿物药可单独应用或组成复方。

在《中国非专利文献标引规则》^[1]中, 规定必须对化合物信息进行标引的情形之一为: 药物组合物中的具有治疗活性的化合物。复方即为一种药物组合物, 当复方中含有的矿物药具有明确单一的化学成分, 或者所含的主要成分即为公认的药效成分, 其他成分可忽略不计时, 就需要对

这些矿物药的化学成分进行结构标引。由于含矿物药的方剂非常之多, 且有些不能直接判断出其对应的化学成分或主要药效成分, 可能会在标引过程中出现一些错标和漏标的现象。本文将需要提交结构信息的矿物类药物进行了总结, 按其所含主要阳离子的种类进行划分, 并分别列出了各味矿物药需要标引的化学成分, 结合具体案例进行了分析。

应提交结构信息的矿物药种类

汞类矿物药

1. 朱砂(硃砂、珠砂、辰砂、丹砂、真朱, 朱丹): 清心镇惊, 安神, 明目, 解毒。化学成分为硫化汞, 应标引的化学结构为

HgS。用于心悸易惊，失眠多梦，癫痫发狂，小儿惊风，视物昏花，口疮，喉痹，疮疡肿毒^[2]。

2. 轻粉（汞粉、峭粉、水银粉）：外用杀虫，攻毒，敛疮、内服祛痰消积，逐水通便。化学成分为氯化亚汞，应标引的化学结构为Hg₂Cl₂。外治用于疥疮，顽癣，糜烂，梅毒，疮疡，湿疹、内服用于痰涎积滞，水肿臃胀，二便不利^[2]。

铁类矿物药

1. 皂矾（青矾、绿矾）：解毒燥湿，杀虫补血。化学成分为七水硫酸亚铁，应标引的化学结构为FeSO₄·7H₂O。用于黄肿胀满，疝积久痢，肠风便血，血虚萎黄，湿疮疥癣，喉痹口疮^[2]。

2. 自然铜（然铜、方块铜）：散瘀止痛，续筋接骨。化学成分为二硫化铁，应标引的化学结构为FeS₂。用于跌打损伤，筋骨折伤，瘀肿疼痛^[2]。

铝类矿物药

1. 白矾（明矾、矾石）：外用解毒杀虫，燥湿止痒、内服止血止泻，祛除风痰。化学成分为十二水合硫酸铝钾，应标引的化学结构为AlK(SO₄)₂·12H₂O。外治用于湿疹，疥癣，脱肛，痔疮，聾耳流脓、内服用于久泻不止，便血，崩漏，癫痫发狂^[2]。

2. 枯矾（枯凡、煨白矾）：为白矾煨失结晶水而成，收湿敛疮，止血化腐。化学成分为硫酸铝钾，应标引的化学结构为AlK(SO₄)₂。用于湿疹湿疮，脱肛，痔疮，聾耳流脓，阴痒带下，鼻衄齿衄，鼻瘖肉^[2]。

铜类矿物药

1. 胆矾（蓝矾）：涌吐风痰，解毒收湿，祛腐蚀疮。化学成分为五水合硫酸铜，应标引的化学结构为CuSO₄·5H₂O。用于风痰壅塞，喉痹咽痛，癫狂烦躁、外治风眼赤烂，口疮牙疳，赘肉，疮疡不溃^[2]。

2. 铜绿（铜青）：退翳，去腐，敛疮，杀虫，吐风痰。化学成分为碱式碳酸铜，应标引的化学结构为Cu₂(OH)₂CO₃。用于目翳，烂弦风眼，疽、痔恶疮，喉痹，牙疳，糜烂，顽癣，风痰卒中^[2]。

砷类矿物药

1. 雄黄（黄金石、石黄）：解毒杀虫，燥湿祛痰，截疟。化学成分为硫化砷，应标引的化学结构为As₂S₂。用于痈肿疔疮，蛇虫咬伤，虫积腹痛，惊痫，疟疾^[2]。

2. 砒霜（白砒）：辛，大热、有大毒。归肺、脾、肝经。外用攻毒杀虫，蚀疮去腐、内用劫痰平喘，攻毒抑癌。化学成分为三氧化二砷，应标引的化学结构为As₂O₃。外治用于恶疮腐肉，瘰疬顽癣，牙疳，痔疮、内用于寒痰哮喘，癌肿^[2]。

钙类矿物药

1. 石膏（生石膏）：清热泻火，除烦止渴。化学成分为含水硫酸钙，应标引的化学结构为CaSO₄·2H₂O。用于外感热病，高热烦渴，肺热喘咳，胃火亢盛，头痛，牙痛等症^[2]。

2. 熟石膏（煨石膏）：收湿，生肌，敛疮，止血。化学成分为硫酸钙，应标引的化学结构为CaSO₄。外治溃疡不敛，湿疹瘙痒，水火烫伤，外伤出血^[2]。

镁类矿物药

1. 滑石(脱石):利尿通淋,清热解暑,外用祛湿敛疮。化学成分为硅酸镁,应标引的化学结构为 $Mg_3[Si_4O_{10}](OH)_2$ 。用于热淋,石淋,尿热涩痛,暑湿烦渴,湿热水泻、外治湿疹,湿疮,痱子^[2]。

钠类矿物药

1. 芒硝(朴硝):泻下通便,润燥软坚,清火消肿。化学成分为十水硫酸钠,应标引的化学结构为 $Na_2SO_4 \cdot 10H_2O$ 。用于实热积滞,腹满胀痛,大便燥结,肠痈肿痛、外治乳痈,痔疮肿痛^[2]。

2. 玄明粉(元明粉、风化硝):泻下通便,润燥软坚,清火消肿。化学成分为硫酸钠,应标引的化学结构为 Na_2SO_4 。用于实热积滞,大便燥结,腹满胀痛、外治咽喉肿痛,口舌生疮,牙龈肿痛,目赤,痈肿,丹毒^[2]。

3. 硼砂(月石、蓬砂):清热解毒,清肺化痰。化学成分为十水四硼酸钠,应标引的化学结构为 $Na_2B_4O_7 \cdot 10H_2O$ 。用于咽喉肿痛,口舌生疮,目赤翳障,痰热咳嗽^[2]。

4. 食盐:涌吐,清火,凉血,解毒,软坚,杀虫,止痒。化学成分为氯化钠,应标引的化学结构为 $NaCl$ 。用于食停上脘,心腹胀痛,脑中痰癖,二便不通,齿龈出血,喉痛,牙痛,目翳,疮疡,毒虫螫伤。

铅类矿物药

1. 铅丹(东丹、樟丹、章丹):外用拔毒生肌,内服坠痰镇惊。化学成分为四氧化三铅,应标引的化学结构为 Pb_3O_4 。外治用于痈疮肿毒,溃瘍不敛,内服用于惊痫癫狂^[2]。

2. 密陀僧(蜜陀僧、没多僧):外用杀虫收敛,内服祛痰镇惊。化学成分为氧化铅,应标引的化学结构为 PbO 。外治用于痔疮,湿疹湿疮,溃瘍不敛,疥癣,狐臭,内服用于风痰惊痫^[2]。

氨类矿物药

硃砂(北庭砂):消积软坚,破瘀散结。化学成分为氯化铵,应标引的化学结构为 NH_4Cl 。用于症瘕痞癖,噎膈反胃,痰饮,喉痹,积痢,经闭,目翳,息肉,疣赘,疔疮,瘰疬,痈肿,恶疮^[2]。

不需要提交结构信息的矿物药

除了标引中常见的一些需要提交化合物信息的矿物类中药,还有一些矿物药,它们一般是以混合物、单质或以含有较多杂质的矿石形态存在,根据化合物标引规则,这类矿物药是不需要提交结构的,除非文章中有明确的提示。这类药物包括白降丹(二氯化汞和氯化亚汞的混合结晶^[3])、寒水石(石膏和方解石的混品^[4])、禹余粮(氢氧化物类矿物褐铁矿,主含碱式氧化铁^[2])。钟乳石(碳酸盐类矿物方解石族方解石,主含碳酸钙^[2])、玄精石(硫酸类矿物石膏族玄精石,主含含水硫酸钙^[5])、无名异(氧化物类矿物软锰矿的矿石,主含二氧化锰^[6])、阳起石(硅酸盐类矿物阳起石或阴起石石棉的矿石^[7])、石灰(石灰岩经高热煅烧而成,主要成分是碳酸钙。加水即为熟石灰^[8])、朴消(单斜晶系矿物芒硝粗加工品,主含含水

硫酸钠^[9]、消石(斜方晶系矿物硝石加工品,主含硝酸钾^[9])、硫黄(自然元素类矿物硫族自然硫^[2])、炉甘石(碳酸盐类矿物方解石族菱锌矿,主含碳酸锌^[2])、白石脂(硅酸铝类矿物白陶土,主含水化硅酸铝^[10])、赤石脂(硅酸盐类矿物多水高岭石族多水高岭石,主含四水硅酸铝^[2])、花蕊石(变质岩类岩石蛇纹大理岩^[2])、水银(单质汞)、磁石(氧化物类矿物尖晶石族磁铁矿,主含四氧化三铁^[2])、白石英(氧化物类矿物石英族石英,主含二氧化硅^[11])、方解石(碳酸盐类矿物方解石族方解石,主含碳酸钙^[11])、紫石英(氟化物类矿物萤石族萤石,主含氟化钙^[2])、代赭石(氧化物类矿物刚玉族赤铁矿,主含三氧化二铁^[12])等。

常见情况及案例

1. 方剂中含有需要提交结构信息的矿物药

这类方剂信息比较简单,需要提交结构信息的矿物药出现在单一的方剂信息中,此时只需要依照原文给予相应矿物药的化合物信息即可。

案例1:增液承气汤治疗阴虚肠燥便秘证46例^[13]

原文:患者均采用增液承气汤治疗:生地30g,元参20g,麦冬20g,生大黄9g(后下),芒硝9g(冲服),每日1剂水煎分2次服,昏迷者鼻饲给药。

分析:该方剂组成中包括芒硝,属于

需要提交结构信息的矿物药,因此在标引方剂信息时,须提交芒硝的化合物信息,应标引的化学结构为 $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$,职能符为K;T;M。

2. 方剂的化裁过程中加入需要提交结构信息的矿物药

这类方剂信息多选用一个方剂作为基本方,根据病情的变化及其所兼症状的不同来选用药物加减,并在方剂的化裁过程中加入了需要提交结构信息的矿物药,此时需要分别标引基本方和加减方的药物组成,并提交相应矿物药的化合物信息。

案例2:补脾固肾法治疗II型糖尿病41例疗效观察^[14]

原文:补脾固肾汤组成:生地30g,淮山药30g,山茱萸10g,石斛15g,枸杞15g,茯苓10g,黄芪15g,丹皮10g,甘草5g,水煎2次,分3次空腹服,每日1剂。多食易饥,大便秘结者加石膏20g、栀子10g、黄连6g。15天为1个疗程。

分析:该方剂随症在基本方的基础上进行了加味,在“多食易饥,大便秘结者”症状下加入了石膏20g、栀子10g、黄连6g,其中石膏属于需要提交结构信息的矿物药,因此,在标引完方剂信息后,还应对石膏进行化合物信息的标引,应标引的化学结构为 $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$,职能符为K;T;M。

3. 一般情况下不需要提交结构,但文中有明确指示需要提交的情况

这类方剂的组成中,包含一般意义上不需要提交结构信息的矿物药,但在文中对该

矿物药有特殊说明，比如列出了其具体组成，或明确说明了该药所含的某种化学成分在文中所述疾病中发挥具体的治疗作用，此时，该化学成分可认为是方剂组方中协同发挥作用的成分，因此，应该进行化合物信息的标引。

案例 3：代赭石的临床应用^[15]

原文：拟“参赭扶正汤”：党参 18g，生赭石 30g，半夏 10g，知母 15g，麦冬 12g，当归 10g，肉苁蓉 12g，炙甘草 6g，并随症加减，一日一剂，水煎分两次服。

分析：该方剂组成中包含的生赭石（代赭石），是氧化物类矿物刚玉族赤铁矿，主含三氧化二铁^[12]，在自然界中以矿石的形态存在，含有较多杂质，非单一化学成分，属于一般情况下不需要提交结构信息的矿物药。但在本篇文献中有这样的叙述：“本品含三氧化二铁，内服吸收后，能促进血细胞的新生而有补血作用。用单方生赭石治疗呃逆、痰憋、便秘之症，或以此药为主的复方来治疗贫血或失血过多的患者，无不收到良好效果。”由此可知，代赭石所含有的三氧化二铁，在本篇文献中被确认为是发挥治疗作用的成分，在化合物信息中，应予以体现，因此须提交三氧化二铁的化合物信息，应标引的化学结构为 Fe_2O_3 ，职能符为 K;T;M。此处应注意，化合物名称即为三氧化二铁，而不应标引为代赭石。

4. 方剂中使用生僻的药物异名，容易忽略应该提交结构信息的矿物药的情况

中药药名有正名、别名、地方名、土名、俗名、原名及处方用名之分，《中药大辞

典》把除了正名以外的名称皆称为异名。中药异名繁多复杂，加之各地用药习惯差异极大，致使非专利文献中中药的名称经常以其异名的形式出现。当所用药物异名比较生僻时，标引员不容易识别，尤其是当方剂中某味应提交结构信息的矿物药出现这种情况时，就会出现将该异名误认为是其他药物，而遗漏提交化合物信息的情况。

案例 4：验方“外冲 I 号”治疗皮肤病 121 例临床报道^[16]

原文：局部渗水：渗水多时用奶癣散（黄柏，扫盆，冰片等）干敷。

分析：该方剂奶癣散中有一味药“扫盆”，是不太常见的药名，其实为轻粉的中文异名，属于应该提交结构信息的矿物药，因此本方剂除冰片外，还应提交扫盆的化合物信息，应标引的化学结构为 Hg_2Cl_2 ，职能符为 K;T;M。

建议

针对医药类非专利文献矿物类药物结构信息标引中容易出现的问题，在深加工此项目时应注意以下几点：

1. 认真阅读文章，对方剂的所有加减化裁过程都要仔细阅读，避免遗漏信息。
2. 注意积累需要提交结构信息的矿物药，并熟记其所对应的化合物。对一般情况下不需要提交结构信息的矿物药，也要了解它们的成分，在遇到特殊情况时，有助于判断。
3. 注意整理常见的需要提交结构信息的

矿物药的同义词,在标引中遇到不熟悉的药物名称时,要勤于检索,总结归纳。

4. 仔细阅读文章开头或结尾讨论对方剂的解析,其中可能涉及组方中矿物药的成分等内容,会对化合物信息的标引起到指导作用。

5. 总结一些常见的含有需要提交结构信息的矿物药的方剂,如白虎汤(生石膏)、安宫牛黄丸(朱砂)、大承气汤(芒硝)等,或治疗某类疾病经常用到某味矿物药,如治疗泌尿系统结石,常用具有利尿通淋作用的滑石、治疗实热积滞类症状,常用具有泻下通

便作用的芒硝或清热泻火的石膏、治疗疮痍疥癣类疾病,常用白矾、雄黄、轻粉等。遇到此类情形时,如果能够主动去寻找相应信息,便会减少遗漏化合物信息的情况。

化合物信息的标引是非专利文献数据加工的重要内容,其目的在于为药化领域非专利文献检索提供一个更高效、准确的检索途径。含有中药方剂信息的非专利文献占药学领域非专利文献的一大部分,因此,将这类文献进行全面、准确的加工,对专利审查中的检索有着非常重要的作用。

参考文献

- [1] 中国非专利文献数据深加工标引规则. 2010.
- [2] 中国药典 2010 版
- [3] 王兆基, 关锡耀. 毒性中药白降丹质量标准研究. 中成药, 2006, 28(1):31-33.
- [4] 陈榆. 寒水石的本草考释 [J]. 中国中药杂志, 1989, 14(12): 7.
- [5] 孟燕. 玄精石质量标准研究. 时珍国医国药, 2004, 15(3):156
- [6] 高小恒, 陈达艳. 无名异本草考证. 实用中医药杂志, 2011, 27(8):555
- [7] 陈秉华. 质疑矿石类药“阳起石”. 陕西中医, 2008, 29(10):1390
- [8] 林玉萍. 石灰炮制中药材经验点滴. 海峡药学, 2000, 12(1):9
- [9] 郑光涛. 朴硝、消石、玄精石辨. 黑龙江中医药, 1989, 6:44-45
- [10] 张连凯, 许丽华. 赤石脂、白石脂、黄石脂辨析. 山东中医杂志, 1990, 9(5):43-44
- [11] 宁显维, 张栓. 矿物药白石英、紫石英与方解石的鉴别. 现代中医药, 2008, 28(5):83-84
- [12] 康莲薇, 熊南燕. 代赭石的化学成分与临床应用概述. 环球中医药, 2009, 2(6):451-453
- [13] 沈雁鹏. 增液承气汤治疗阴虚肠燥便秘证 46 例. 中国民间疗法, 2003, 11(7):40-41
- [14] 曾飞雁, 曹晃林, 李兆兵. 补脾固肾法治疗 II 型糖尿病 41 例疗效观察. 湖南中医杂志, 1998, 14(6):9
- [15] 秦贞仑. 代赭石的临床应用. 中国中药杂志, 1989, 14(11):51
- [16] 郑萍. 验方“外冲 I 号”治疗皮肤病 121 例临床报道. 上海中医药杂志, 1989, 9:23-24

(专利检索咨询中心 杨晓春 审校)