



中藥新發現 4

與未經加工的中藥材不同，中藥濃縮顆粒是通過現代濃縮技術精製而成。不過，這種失去原本藥物模樣的顆粒若不小心與其他中藥顆粒混合，即使是中醫師亦難以辨別及重新分類，一旦病人錯誤服用藥物，後果難料。

香港都會大學科技學院應用及科學系課程主任黃詩韻博士及其團隊，最近研發出單味中藥濃縮顆粒新型檢測方法，利用FTIR-ATR技術及機器學習的方式，通過判斷其特殊光譜峰片段，僅用現有方法1%的時間即可快速「驗明真身」，檢測成功率達98%。

黃詩韻博士形容這個「認藥」過程有點像「親子認證」，目前該檢測方法已獲香港專利。該研究團隊下一步將擴充檢測範圍，為投入市場做準備。

大公報記者 魏溶、湯嘉平(文) 何嘉駿(圖)



黃詩韻博士及其團隊研發單味中藥濃縮顆粒新型檢測方法，可以快速識別中藥顆粒，「認藥」成功率高達98%。

都大研製光譜圖識別藥材

中藥顆粒難辨認

「親子認證」驗真身

傳統中藥飲品在煲藥過程中往往需要經歷浸泡、二次煲煮等程序，程序較繁瑣，中藥濃縮顆粒(CCMG)由中藥飲片經過高溫高壓、提取等步驟製成顆粒狀大小，在使用時可直接沖泡熱水飲用。

獲取表面化學成分信息

香港都會大學科技學院應用及科學系課程主任黃詩韻博士不僅是研究人員，亦是一位註冊中醫師。她表示，CCMG和傳統中藥飲片在臨床中的功效非常類似，CCMG可以說給了病人一個既方便又有療效的中藥新選擇。但與此同時，由於CCMG經過加工，大部分藥物特徵消失，即使是專業人士，如沒有檢測工具亦難以區分。黃詩韻說，如不慎錯誤處方藥物或藥物意外被污染，不但影響藥效，甚至危及病人性命，因此確認CCMG藥物的真正成分很重要。

FTIR-ATR(傅里葉變換紅外衰減全反射光譜法)是紅外光譜儀的主要類型之一，它提供了一種相對快速、簡便的方法去檢測液體或固體樣品中的內含物，在西藥、傳統中藥飲片的檢測中已得到應用。黃詩韻團隊把這項檢測技術首次運用到CCMG中。黃詩韻介紹，CCMG含有不同的化學結構，FTIR-ATR基於光內反射技術，可把樣品表面不同化學成分的化學鍵反射出不同的光譜峰，以此獲得樣品表面的化學成分信息。

研究團隊通過早前實驗，證實利用FTIR-ATR進行檢測時，選取未經提取的CCMG樣本並使用1700至1150cm⁻¹的光譜範圍為最佳檢測方式。黃詩韻介紹，目前該項目正處於研發階段，以人參的CCMG為例，團隊會首先通過例如高效液相層析(HPLC)等傳統驗證方式確認人參的成分，隨後通過FTIR-ATR試驗獲取人參的完整光譜圖，並利用化學計量學中的主成分分析(PCA)方式，選定屬於人參CCMG的特定片段，再經由現已較為成熟的機器學習技術令電腦認證人參的光譜，最後將其儲存在資料庫內。「我們如果再用FTIR-ATR檢測一隻未經確認的CCMG，電腦就可以確認它是否為人參。」

成功率98%

在未來實際應用過程中，將毋須經過HPLC檢測的步驟，可直接通過FTIR-ATR技術獲得光譜圖，由機器學習比對後確定CCMG成分。團隊目前正在建立相應資料庫及完善機器學習技術。

目前機器學習識別CCMG的成功率可達98%左右，黃詩韻形容這個「認藥」過程就像進行「親子認證」，機器學習可以告知研究人員檢測

樣本是某種藥物的可能性，「如同親子認證那樣，機器會告訴你檢測樣本有99%可能性為『父子關係』」。

相比西藥和傳統中藥飲片而言，CCMG的檢測難度更高。黃詩韻表示，一般而言，西藥只有一至兩種主要化學成分，而中藥所含物質複雜，可能有超過200種成分；此外，CCMG在製藥時需加入各類輔料，其中輔料的存在會掩蓋部分中藥本身的特性，因此鑒定更加複雜和細緻。

因此，團隊在鑒別CCMG時，並非通過單一的光譜峰，而是選擇一段光譜圖像進行判斷。黃詩韻表示，即使是同一藥物的不同批次，也可能因為藥材本身、提取方式等原因導致光譜片段有細微的差別，「這也是為什麼我們要使用機器學習進行驗證的原因。」

擴充中成藥光譜庫 供市場應用

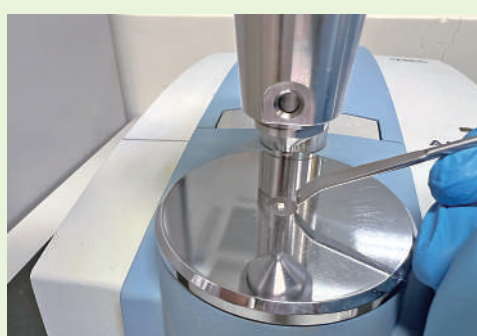
專利技術

黃詩韻團隊研發以FTIR-ATR配合化學計量學為單味中藥濃縮顆粒進行簡易快速認證的新方法，早前已經成功申請專利。目前該項研究進行約兩年，獲得了數十種CCMG特定光譜片段數據。

由於市面上並沒有有關資料，因此黃詩韻團隊目前正在建立資料庫。目前資料庫內已經儲存的數十種CCMG的光譜特定片段，包括了一些容易混淆的藥物，亦有同一藥物的不同批次光譜圖像。

中國藥典內涵蓋了數以萬計的中藥材，目前市場上常用的中藥也大約有三、四百種。黃詩韻表示，團隊下一步計劃向業界尋求更多合作，進

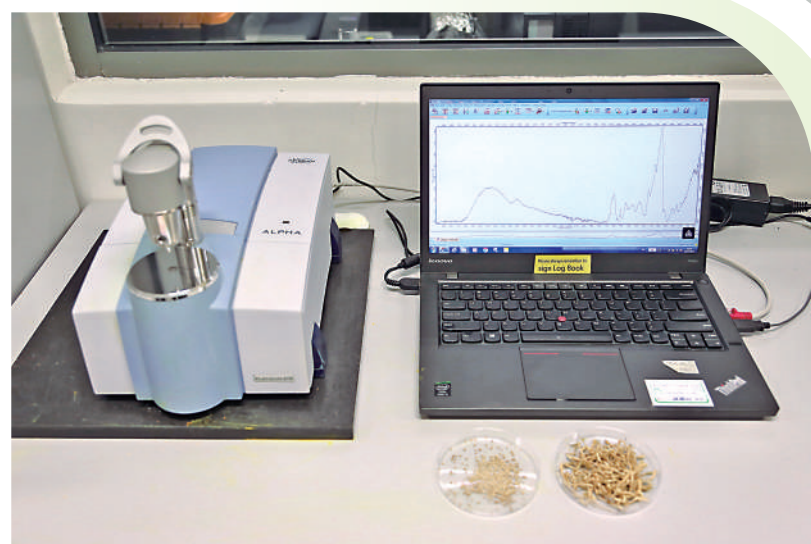
一步擴充CCMG特定光譜的資料庫。團隊希望在覆蓋目前市面常用的數百種常見CCMG後，可以推出市場，相信可在有關檢測機構、中藥廠和中醫院有所運用。



將CCMG研磨成粉末，即可利用FTIR-ATR檢驗。

- 1 以人參為例，先通過傳統驗證方式(如高效液相層析(HPLC)等)確認所認證的CCMG是人參無誤(註：此步驟僅適用於研發階段，未來實際應用則可省去)
- 2 以FTIR-ATR檢測獲取人參的完整光譜圖
- 3 利用化學計量學中的主成分分析(PCA)的方式選定屬於人參CCMG的特定片段
- 4 經由機器學習技術，令電腦認證人參的光譜，並將資料儲存在資料庫
- 5 以FTIR-ATR檢測未經確認的CCMG，取得樣品化學成分光譜峰，電腦可快速確認是否為人參

▲以人參為例，先通過傳統驗證方式(如高效液相層析(HPLC)等)確認所認證的CCMG是人參無誤(註：此步驟僅適用於研發階段，未來實際應用則可省去)



▲FTIR-ATR可為CCMG生成光譜圖，再與資料庫內容比對，鑒別是哪一種藥物。

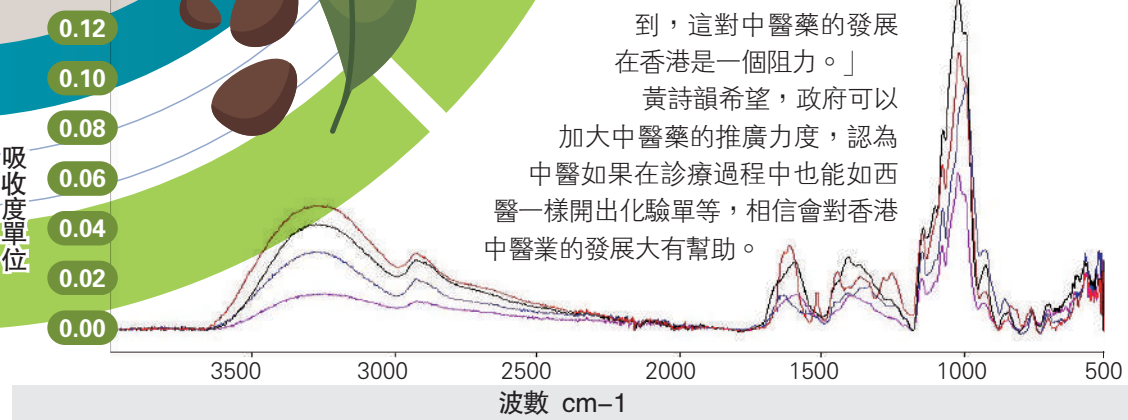
無法開化驗單 未來發展受阻

拆牆鬆綁

除卻在大學任教，黃詩韻亦是一名註冊中醫師，平日需要和病人、中藥打交道。黃詩韻表示，現在大眾對中藥的認可度越來越高，很多病人願意去看中醫，也對中藥的療效頗為信賴。為了讓大眾得益，她希望政府在中西醫的結合上扮演橋樑角色，令兩方專業人士可以朝着共同目標發展和努力。

香港都會大學科技學院應用及科學系課程主任黃詩韻表示，近年政府着力推廣中藥，香港首間中醫院成立在即，已經有很大進步；但作為註冊中醫師，自己依舊見到很多限制。「譬如中醫去醫治病人的時候，我們可能無法開化驗單，即使是很普通的血常規檢測也沒辦法做到，這對中醫藥的發展在香港是一個阻力。」

黃詩韻希望，政府可以加大中醫藥的推廣力度，認為中醫如果在診療過程中也能如西醫一樣開出化驗單等，相信會對香港中醫藥的發展大有幫助。



▲利用FTIR-ATR可獲取CCMG表面化學成分的完整光譜圖，然後比對資料庫鑒別藥物。

受訪者供圖

低成本高效率 助藥廠監控品質

技術優勢

香港衛生署在2002年開展「香港中藥材標準」(「港標」)計劃，當前「港標」已經為330種中藥材制訂了安全性及品質方面的標準。港標包含了包括HPLC(高效液相層析)、TLC(薄層色譜法)及DNA等檢測方式。

黃詩韻介紹，以HPLC為例，在檢測過程中需要使用對照品和檢測樣本進行對比，確認樣本成分；港標已經為涵蓋期中的每一隻中藥，訂立了其需要使用的對照品標準進行檢測。進行試驗時，需購入對應數量的對照品方可完成檢測。

傳統HPLC檢測儀器 索價百萬

黃詩韻續指，HPLC檢測儀器價格高昂，每部需要數十萬甚至上百萬港元；而檢測的運作成本也較貴，一隻對照品往往需要數千元，一項中藥檢測可能需要二至三種對照品；此外一次檢測大約需要24小時左右方可得到結果，且對檢測人員有較高的技術操作要求。

FTIR-ATR試驗的檢測操作則相對簡單，僅需將CCMG研碎，將其鋪平在機器面板中並開機檢測，之後將獲得數據放入機器學習系統中，就可以完成有關認證。

成本方面，黃詩韻說，FTIR-ATR儀器僅需十餘萬港元便可購置，約20分鐘即可得到檢測結果，耗時約為HPLC方式的1%。「這個方法普通人都可完成，這個認證方法有利普及化。」

該項新檢測技術可以在不同層面得到運用。黃詩韻表示，譬如中藥廠製藥過程中，一般會以GMP(生產治理管理規範標準)作為準則，另外也常常會遵循例如HACCP(危害分析於關鍵控制點)等檢測標準，通過多個檢查點以確保在生產的流程中，這些藥物的半成品及最終成品的品質。

黃詩韻表示，這項新技術可以運用在藥廠的不同生產點及生產線中，幫助完成檢查點的快速檢測；如果生產過程中有任何吸收污染等情況，這個快速的檢測方式都可以幫藥廠將損失降至最低。

新技術可在中醫院及藥房應用

黃詩韻認為這項新檢測技術也可以在未來香港的中醫院及一些大型的中藥房得到應用，中醫院和中藥房都涉及大量CCMG的運用，當中醫師對成分存疑時，只需要利用FTIR-ATR儀器及配套數據庫即可快速驗證，「中醫院可以確保到所出售藥物的品質，對其聲譽或者大眾信賴度都會增加很多。」

此外，目前普通公眾如果對CCMG成分存疑，並無有效方式驗證藥物成分，未來該項技術推出市場後，病人可以有檢測服務的公司或藥房進行求證，相信檢測成本並不昂貴。「這項新技術的優勢就是快速、準確，並且價錢相對便宜。」