传承经典，开创未来：中药化学生物学研究进展与展望

中药作为中华民族的传统瑰宝，凭借其独特的理论体系和丰富的临床实践经验，为现代药物研发提供了宝贵的资源。然而，长期以来，“物质基础不清晰、作用机制不明确”等问题严重制约了中药的现代化与国际化发展。近年来，随着化学生物学、系统生物学及多组学等前沿技术方法的迅速发展，中药研究正逐步从经验性总结向机制性阐明转变，从整体模糊认知向局部精准解析迈进。中药药性理论是中医药理论体系的重要组成部分，集中体现了中医药的特色与核心内涵，其中五味药性理论尤为关键。五味最初源于药物的实际滋味，随后逐渐将其与功效相关联，并以“味”作为归纳和阐释功能属性的重要依据。该理论根植于象思维，通过演绎推理不断发展，其概念与体系在历史演进过程中持续演变。然而，由于缺乏现代科学的系统介入，其理论体系的科学化与标准化仍面临挑战。因此，构建适用于药性理论的现代研究框架与技术方法，对推动中药现代化具有重要意义。基于药物吸收、分布、代谢及作用过程的认识，唯有到达靶器官的成分，才可能构成药性的物质基础。关注药物在组织中的代谢转化与分布规律及其与受体靶点的相互作用机制，是揭示五味药性科学内涵的关键路径。此外，强调在方剂配伍背景下提炼药性特征、阐明配伍规律，要求研究既具备系统论的整体视角，又融合还原论的研究手段。因此，建立科学的药性理论的认知框架，结合系统论与还原论相统一的研究思路，以及“性–效–物”三元关联的研究范式，有望为中药药性理论提供可借鉴的研究方向。本期专栏聚焦于中药化学生物学这一交叉学科领域，从多个维度系统呈现其在中药功效物质发现、靶点识别以及“性–效–物”关联机制解析等方面的最新技术进展与研究成果。

为了让更多读者全面了解化学生物学在中药药性相关理论研究中的研究进展和未来发展趋势前景，本期《药学学报》特别编发了“中药化学生物学研究进展与展望”专栏，收录了当前相关领域内专业科研人员撰写的 7 篇论文，涉及北京大学、南开大学、南方医科大学、上海中医药大学、天津中医药大学、辽宁中医药大学、天津药物研究院、中国中医科学院中药研究所等单位。涵盖了五味药性理论的现代研究策略，药性与药效关联机制的系统解析思路，药味导向的化学生物学研究等研究范式的探讨，以及结合靶点鉴定与配体垂钓技术探讨中药炮制对药性影响的研究案例等内容。在技术层面论述了中药活性成分靶点发现的新技术研究进展，以及基于化学蛋白组学驱动的靶点鉴定新方法，基于生物质谱的靶标发现及作用模式表征新技术的综述。总之，中药化学生物学作为连接传统中药理论与现代科学的重要桥梁，正逐渐成为推动中药研究的核心范式。在此背景下，中药药性理论的现代研究关键在于构建一个既尊重传统内涵又融合现代方法的研究体系。首先，应从历史渊源、动态演变、辨证内涵及系统关联等多维度深入把握药性理论的本质特征与发展脉络，实现理论传承中的去芜存菁。在方法论层面，研究应以系统论为指导，保持中药整体观的优势，同时合理引入还原论的分析手段和技术方法，从化学物质基础与生物效应两个维度解析药性的实质。通过构建“性–效–物”三元联动的研究模式，系统揭示药性、药效与物质基础之间的内在关联规律，为科学阐释中药作用机制奠定基础。同时进一步推动药性理论研究向临床应用转化，深入探索“物质基础–功效–方证”的关联路径，有助于发挥中药药性理论在现代精准用药、新药研发和临床实践中的指导价值。

本专栏所呈现的研究成果，不仅拓展了中药现代化研究的方法论体系，也为中药的临床精准化

应用、药物创新及国际传播提供了科学支撑。未来中药化学生物学研究将更加依赖多学科的交叉技术的融合，尤其在人工智能、类器官芯片、空间组学和单细胞技术等前沿领域的深度整合，有望显著提升药物靶点发现、作用机制解析及药效评价的准确性与效率。其次，应进一步加强中药活性成分转化及其代谢产物作用机制的研究，重视中药炮制过程以及体内代谢产物所表现出的活性增强或新功能特性，系统推进其靶标识别与生物学机制的深入探索，弥补当前代谢产物研究不足的短板，推动研究模式从“黑箱”向“白箱”转变。同时，随着分子成像技术和动态响应探针技术的进步，中药成分在体内的分布、代谢路径及其与靶点的相互作用过程可实现动态可视化监测，为“归经”“引经”等传统中医理论提供直观且科学的实验依据。此外，基于“性–效–物”关联分析框架，整合化学物质组、生物效应组及多组学数据，构建具有更高临床相关性的基于“中药质量标志物”的质量评价体系，推动中药质量标准由“指标性控制”向“功效导向型”转变。随着多学科技术的深度融合与理论体系的持续完善，中药化学生物学有望在解析中药复杂系统作用机制方面取得更深层次的突破。

在此，衷心感谢为本专栏贡献智慧与成果的各位专家学者，以及为专栏出版付出辛勤努力的编辑部同仁。希望本专栏能够为同行提供有益参考，也诚挚期待广大读者的批评与交流，让我们共同推动中药化学生物学在基础研究与临床实践中的进一步发展，助力中医药事业迈向更高质量的未来。

特邀编辑介绍



白　钢　博士，南开大学教授、博士生导师，药物化学生物学全国重点实验室课题负责人 (PI)，教育部新世纪优秀人才。现任中国中药协会产品开发与培育专业委员会主任委员、呼吸药物研究专业委员会副主任委员、世界中医药学会联合会网络药理学专业委员会副主任委员；曾任天津市药学会中药与天然药物专业委员会主任委员。主要研究方向为基于中医药基础理论的系统生物学与化学生物学研究，以及创新药物研发与中药质量控制研究。已在国际学术期刊发表 SCI 收录论文 280 余篇，总被引次数逾 4 700 次。主持完成国家高技术研究发展计划 (863 计划)、国家重点基础研究发展计划 (973 计划)、重大新药创制专项、国家重点研发计划及国家自然科学基金等国家级和省部级科研项目 40 余项，荣获天津市科技进步一等奖 2 项。



张铁军　研究员，天津药物研究院中药首席专家，兼任中药现代制剂与质量控制国家地方 (天津) 工程实验室主任、天津市中药质量标志物重点实验室主任、药物成药性评价与系统转化全国重点实验室 (天然药物单元) 负责人，以及和光中药科技有限公司总经理。享受国务院政府特殊津贴，被授予天津市中药资源授衔专家，荣获“全国优秀科技工作者”称号。现任中国中药协会中药品种开发与培育专业委员会副主任委员、世界中医药学会联合会中药新型给药系统专业委员会副会长、天津市药学会副会长。主持完成国家及省部级科研项目 30 余项，主导研制中药新药 20 余项，获得新药证书 4 项、临床研究批件 5 项；获国际和国家发明专利 50 余项；主编学术专著 17 部，副主编 4 部，发表学术论文 450 余篇。曾获国家科技进步二等奖 1 项，省部级科技奖励一等奖 4 项、二等奖 2 项、三等奖 2 项。