

基于 UPLC-MS/MS 技术分析火炭母次生代谢产物

谢凤凤¹, 余秀琪¹, 周嵩煜^{2*}, 朱 华^{1*}, 施晓光², 吴文源¹, 梁仁涛¹, 吴 煊¹, 黄诗萍¹

(1. 广西中医药大学, 广西壮瑶药重点实验室, 壮瑶药材开发及产业化广西高校工程研究中心, 广西壮族自治区民族药资源与应用工程研究中心, 壮瑶药协同创新中心, 广西 南宁 530200; 2. 广西壮族自治区药品检验研究院, 国家药品监督管理局中药材质量监测与评价重点实验室, 广西 南宁 530021)

摘要: **目的** 采用 UPLC-MS/MS 技术快速鉴定壮药火炭母中次生代谢产物。**方法** 分析采用 Agilent SB-C₁₈ 色谱柱 (2.1 mm×100 mm, 1.8 μm); 流动相水 (含 0.1% 甲酸) -乙腈 (含 0.1% 甲酸); 体积流量 0.35 mL/min; 柱温 40 ℃; 电喷雾离子源; 多反应监测模式; 正负离子扫描。对不同产地火炭母中全成分分析, 并解析黄酮类、酚酸类、生物碱类等代表性成分的裂解过程。**结果** 共检测出代谢物 2 027 种, 包括黄酮类 483 种、酚酸类 425 种、生物碱 334 种、萜类 260 种、木脂素和香豆素 126 种、鞣质 68 种、醌类 49 种、甾体 5 种、其他类 277 种。黄酮类以苷元母核和糖基部分的断裂为主; 酚酸类以脱羧为核心; 生物碱以氮原子的类型、位置及骨架为裂解规律; 萜类以失去 H、H₂O 等为主; 木质素主要是苣基裂解; 香豆素主要丢失 CO 和 RDA 裂解; 鞣质类以 *m/z*: 288、152 碎片离子为特征。**结论** 不同产地火炭母中所含次生代谢产物差异不明显, 推测儿茶素、表儿茶素、没食子儿茶素没食子酸酯、鞣花酸及延胡索乙素等黄酮类、酚酸类及生物碱化合物为其药效物质, 可为火炭母质量控制及资源开发提供科学依据。

关键词: 火炭母; 黄酮类成分; 酚酸类成分; 生物碱类成分; 裂解途径

中图分类号: R284.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 1001-1528(2026)08-2801-09

doi: 10.3969/j.issn.1001-1528.2026.08.041

火炭母为蓼科植物火炭母 *Polygonum chinense* L. 的全草^[1], 具有清热除湿、凉血解毒、利肝明目、舒经活血的功效, 主治肝炎、肺热咳嗽、泄泻、痢疾、咽喉肿痛等, 主要分布于广西、广东等地^[2], 药用资源丰富, 被《广西壮族自治区壮药质量标准 (第一卷)》收录, 并记载其壮医功效为清热毒、除湿毒、凉血止痛, 主治阿意咪 (痢疾)、白冻 (泄泻)、能蚌 (黄疸)、货烟妈 (咽痛)、北嘻 (乳痈)、呗农 (痈疮) 等^[3], 在广西被广泛使用, 具有良好的药用价值。

现代药理研究表明, 火炭母中含有黄酮类^[4]、酚酸类^[5]、生物碱类^[6]、鞣质类^[7]、挥发类^[8]和芳香环类等多种成分, 具有抗乙肝病毒、抗炎止痛、抗氧化、抗菌等作用, 特别是对肝脏疾病的防治具有显著疗效^[9-10], 但其药效物质基础尚未明

确, 且目前火炭母次生代谢产物相关研究中样本量较少, 缺乏代表性。因此, 本研究采用 UPLC-MS/MS 技术对 10 个产地的火炭母次生代谢产物进行分析, 结合文献报道、自建数据库、公共数据库等多种手段进行成分鉴定, 明确其裂解规律, 以期为壮药火炭母药效物质基础发掘和药用资源开发利用提供科学依据。

1 材料

1.1 仪器 ExionLC™ AD 型超高效液相色谱串联质谱 (美国 SCIEX 公司); 5424R 型离心机 (德国艾本德公司); MS105DM 型电子天平 (十万分之一, 瑞士梅特勒-托利多公司); CentriVap 型离心浓缩仪 (美国 LABCONCO 公司); Biomek i5 型自动化工作站 (美国贝克曼库尔特有限公司)。

1.2 试剂与药材 甲醇、乙腈 (色谱纯, 纯度 ≥

收稿日期: 2026-01-20

基金项目: 广西自然科学基金项目 (2025GXNSFBA069256); 广西药品监督管理局药品科研计划项目 (桂药监科直属 [2023] 034 号); 广西重点研发计划项目 (桂科 AB21196016); 广西科技基地和人才专项 (桂科 AD21238031); 广西中医药重点学科壮药学 (GZXK-Z-20-64); 广西中医药大学引进博士科研启动基金项目 (2023BS024)

作者简介: 谢凤凤 (1989—), 女 (壮族), 博士, 副研究员, 从事中药及民族药药效物质及活性研究。E-mail: 15177143553@163.com

* **通信作者:** 周嵩煜 (1971—), 男, 硕士, 主任药师, 研究方向中药民族药质量标准。E-mail: zhousongyu@163.com
朱 华 (1957—), 男, 博士, 二级教授, 研究方向中药及民族药品种品质评价。E-mail: Zhuhuagx@163.com

98%，批号 164786、204433，德国默克公司)；甲酸（批号 F112034，纯度≥98%，色谱纯，阿拉丁控股集团有限公司）。

10 批新鲜火炭母分别采于广西各地，经广西中医药大学药学院黎理副教授鉴定为蓼科植物火炭母 *Polygonum chinense* L. 的全草，信息见表 1。

表 1 火炭母样品信息

序号	产地	采集时间
1	广西钦州钦北区平吉镇	2024 年 5 月
2	广西玉林容县自良镇古济村	2024 年 5 月
3	广西梧州岑溪市义昌江边	2024 年 5 月
4	广西桂林全州县 235 乡道	2024 年 5 月
5	广西南宁青秀区周屋	2024 年 3 月
6	广西贵港市桂平市白沙镇罗丛岩	2024 年 5 月
7	广西来宾市兴宾区凤凰镇牛角村	2024 年 6 月
8	广西百色平果市新安镇中桥村	2024 年 6 月
9	广西贺州钟山县公安镇南门村	2024 年 6 月
10	广西南宁西乡塘区高峰林场	2024 年 6 月

2 方法

2.1 溶液制备 火炭母样品经真空冷冻干燥，研磨至粉末状，称取粉末 50 mg，加入 70% 甲醇1 200 μL，每 0.5 h 涡旋 1 次，每次持续 30 s，共涡旋 6 次，再 12 000 r/min 离心 3 min，吸取上清，0.22 μm 微孔滤膜过滤，取续滤液，即得供试品溶液。另称取标准品 1 mg，溶于 1 mL 70% 甲醇中，再用 70% 甲醇稀释成 250 μg/mL 的内标溶液^[11]。

2.2 分析条件

2.2.1 色谱 Agilent SB-C₁₈ 色谱柱 (2.1 mm×100 mm, 1.8 μm)；流动相水 (含 0.1% 甲酸, A) -乙腈 (含 0.1% 甲酸, B)，梯度洗脱 (0~9.0 min, 5%~95% B；9.0~10.0 min, 95% B；10.0~11.1 min, 95%~5% B；11.1~14.0 min, 5% B)；体积流量 0.35 mL/min；柱温 40 ℃；进样量 2 μL。

2.2.2 质谱 电喷雾离子源，温度 500 ℃；正负离子扫描；离子喷雾电压 5 500、-4 500 V；离子源气体 I、气体 II 和气帘气压力分别为 50、60、25 psi (1 psi = 6.895 kPa)；多重反应监测 (MRM) 模式；碰撞诱导电离参数为高；碰撞气体 (氮气) 为中等。对各个离子对的去簇电压和碰撞能进行优化。根据各时间段内洗脱的代谢物，监测一组特定的 MRM 离子对。以上色谱和质谱条件参考文献 [12] 报道制定。

2.3 数据处理 将采集的各样品数据导入 Analyst 1.6.3 软件进行峰对齐、降噪、峰提取、归一化等

2802

处理，根据二级谱信息进行定性分析，分析时去除同位素信号，含 K⁺、Na⁺、NH₄⁺ 的重复信号，以及本身是其他更大分子量物质碎片离子的重复信号^[13]。化合物结构解析参考 PubChem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>)、CFM-ID (<https://cfmid.wishartlab.com/>)、the NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/>) 数据库。化合物结构图利用 ChemDraw 20.0 软件绘制。

3 结果

3.1 火炭母次生代谢产物分析 从不同产地火炭母中共检测出代谢物 2 027 种，分为九大类，其中黄酮类 483 种 (24%)、酚酸类 425 种 (21%)、生物碱 334 种 (17%)、萜类 260 种 (13%)、木脂素和香豆素 126 种 (6%)、鞣质 68 种 (3%)、醌类 49 种 (2%)、甾体 5 种 (0.2%)、其他类 277 种 (14%)。

3.2 黄酮类成分的鉴定及裂解规律 通过迈维自建标准品谱库 (MWBD) 比对出 121 个黄酮类化合物，包括芦丁、紫云英苷等 46 个黄酮醇，芹菜素、木犀草素-7-*O*-芸香糖苷等 32 个黄酮，金鸡纳素 1a、表儿茶素等 15 个黄烷醇类，樱桃苷、乔松苷等 7 个二氢黄酮，槐角苷、金雀异黄素等 7 个异黄酮，槌石松黄酮苷、墨沙酮等 5 个橙酮类，二氢查耳酮-4'-*O*-葡萄糖苷、根皮素-4'-*O*-葡萄糖苷等 4 个查尔酮，短叶松素 1 个二氢黄酮醇和 4 个其他类黄酮。以山柰酚-4'-*O*-葡萄糖苷和木犀草素-4'-*O*-葡萄糖苷、儿茶素和表儿茶素为例阐释黄酮类化合物裂解途径。

化合物准分子离子峰为 m/z : 449.105 6 [M+H]⁺，推测其分子式为 C₂₁H₂₀O₁₁，先脱去一个 C₅H₈O₄，得到碎片离子 m/z : 317.030 5 [M+H-C₅H₈O₄]⁺，碎片离子 m/z : 303.050 6 [M+H-C₅H₈O₄-CH₂]⁺ 脱去一分子 CH₂，然后脱去一分子 OH，得到碎片离子 m/z : 287.055 7 [M+H-C₅H₈O₄-CH₂-OH]⁺，结合 CFM-ID、PubChem 公共数据库、MWDB 自建数据库以及文献 [14] 报道，推测该化合物为山柰酚-4'-*O*-葡萄糖苷或木犀草素-4'-*O*-葡萄糖苷，裂解过程见图 1。

化合物准分子离子峰为 m/z : 291.090 0 [M+H]⁺，推测其分子式为 C₁₅H₁₄O₆，先脱去一个 C₈H₈O₃，得到碎片离子 m/z : 139.038 6 [M+H-C₈H₈O₃]⁺，再脱去一个 OH，得到碎片离子 m/z : 123.043 1 [M+H-C₈H₈O₃-OH]⁺，结合 CFM-ID 和 PubChem 公共数据库、MWDB 自建数据库以及文献 [15] 报道，可推测该化合物为儿茶素或表儿茶素，裂解过程见图 2。

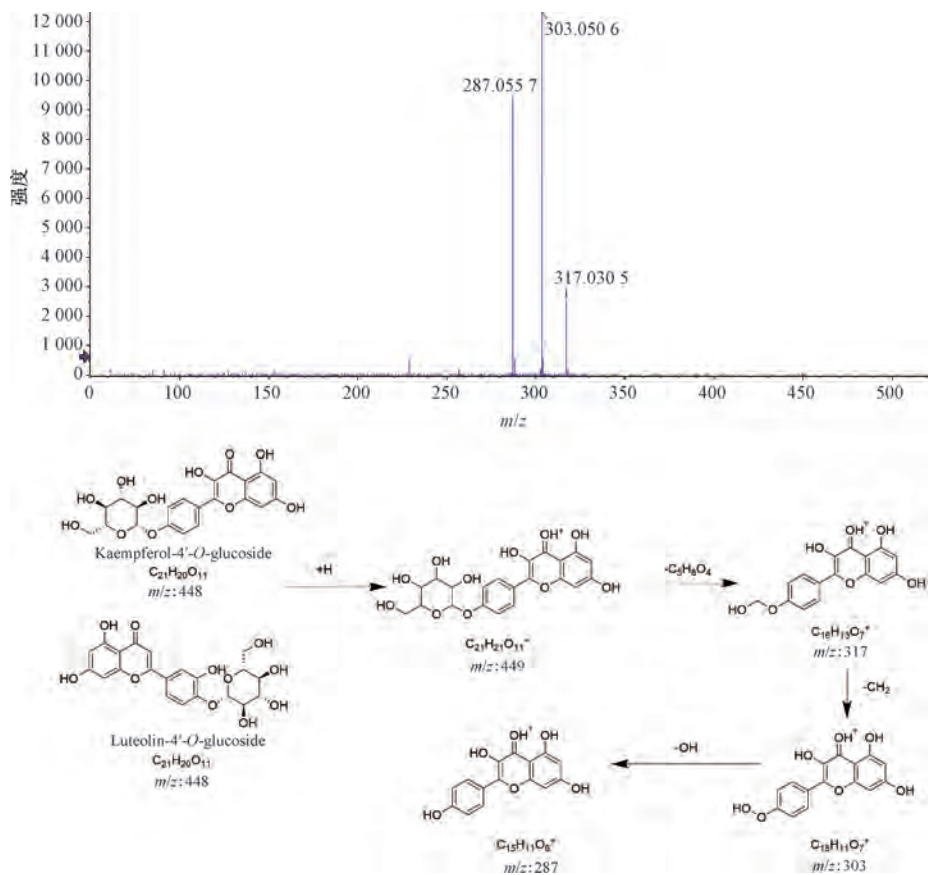


图 1 山奈酚-4'-O-葡萄糖苷和木犀草素-4'-O-葡萄糖苷二级质谱图及可能的裂解方式

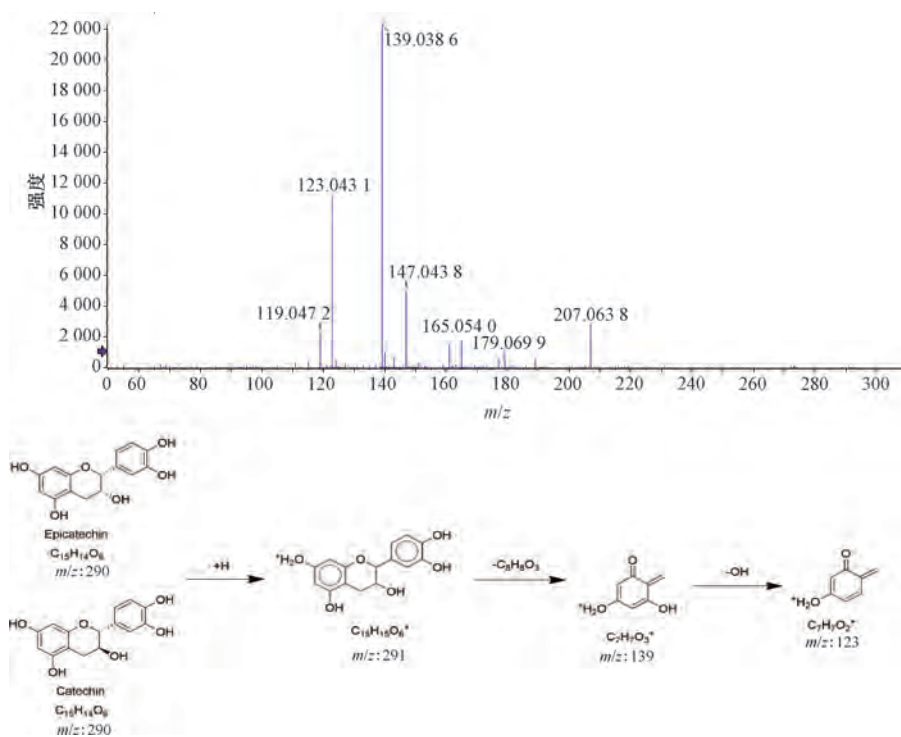


图 2 儿茶素和表儿茶素二级质谱图及可能的裂解方式

3.3 酚酸类成分的鉴定及裂解规律 共鉴定得到 87 种酚酸类成分，包括异阿魏酸、阿魏酸、绿原酸、新绿原酸、原儿茶酸、鞣花酸等。以阿魏酸和异阿魏酸、绿原酸为例阐释酚酸类化合物裂解途径。

化合物准分子离子峰为 m/z : 193.050 0 $[M-H]^-$ ，推测其分子式为 $C_{10}H_{10}O_4$ ，先脱去一分子 CH_3 ，得

到碎片离子 m/z : 178.025 7 $[M-H-CH_3]^-$ ，再脱去一个 CO_2 ，得到碎片离子 m/z : 134.037 4 $[M-H-CH_3-CO_2]^-$ ，结合 CFM-ID 和 PubChem 公共数据库、MWDB 自建数据库以及文献 [16] 报道，推测该化合物为阿魏酸或异阿魏酸，裂解过程见图 3。

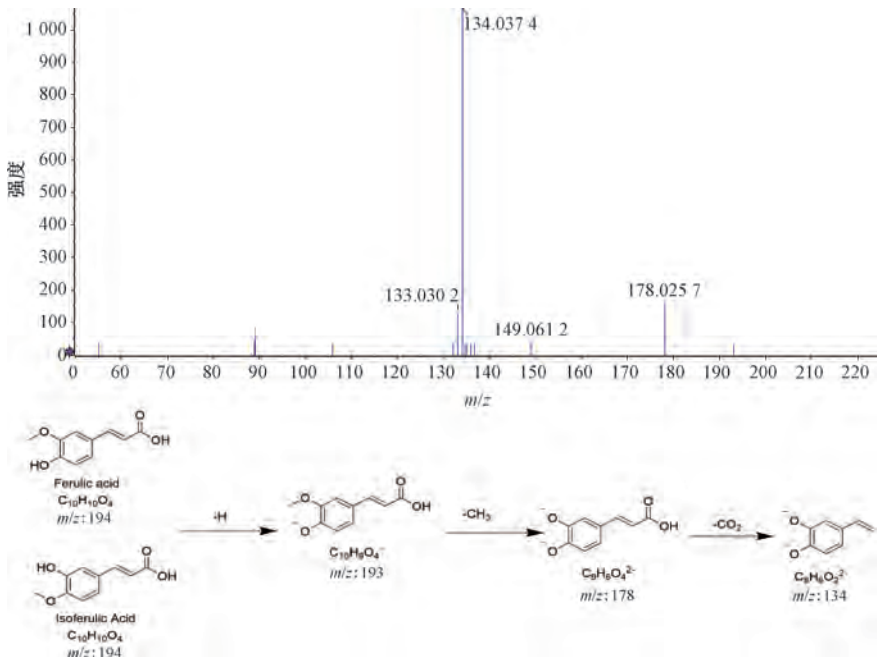


图 3 阿魏酸和异阿魏酸二级质谱图及可能的裂解方式

化合物准分子离子峰为 m/z : 353.088 7 $[M-H]^-$ ，推测其分子式为 $C_{16}H_{18}O_9$ ，经能量轰击后，生成碎片离子 m/z : 191.056 8 $[quinic\ acid-H]^-$ 、179.035 5 $[caffeic\ acid-H]^-$ ，后者再脱去一分子 $COOH$ 得到

碎片离子 m/z : 135.045 2 $[caffeic\ acid-H-COOH]^-$ ，结合 CFM-ID 和 PubChem 公共数据库、MWDB 自建数据库以及文献 [17] 报道，推测该化合物为绿原酸，裂解过程见图 4。

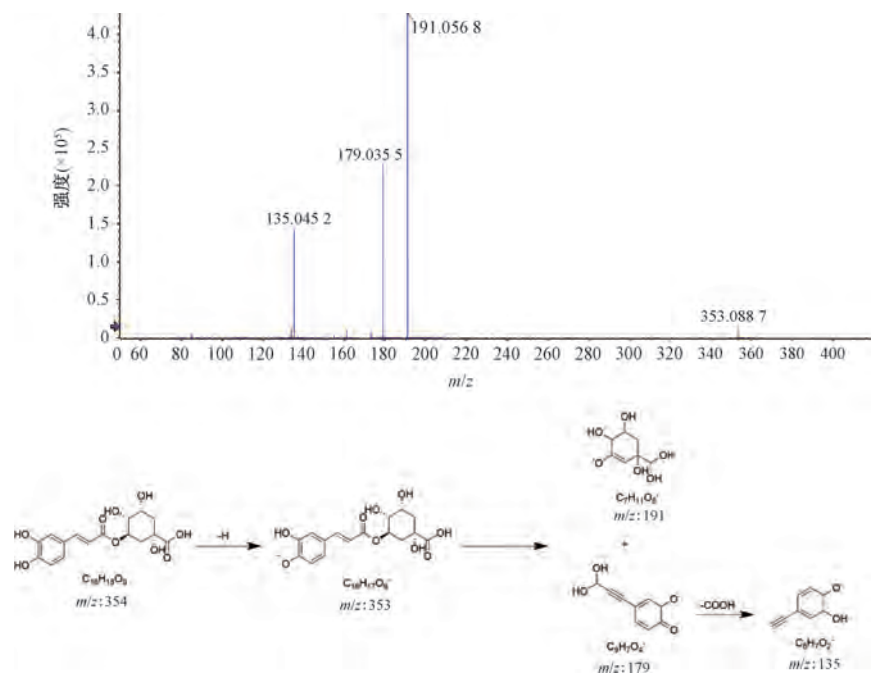


图 4 绿原酸二级质谱图和可能及裂解方式

3.4 生物碱类成分的鉴定及裂解规律 共鉴定出 52 种生物碱类成分，主要包括肉桂酰酪胺、*N*-阿魏酰酪胺等 21 种酚胺，大麻素 B、tribulusamide A 等 18 种生物碱，3-吡啶丙烯酸、吡啶-5-甲酸等 5 种吡啶类生物碱，四氢巴马汀红碱、延胡索乙素等 4 种异喹啉类生物碱，4-羟基-2-氧代-1, 2-二氢喹啉-3-羧酸、3-喹啉羧酸 2 种喹啉类生物碱，1 个吡咯类生物碱和 1 个吡啶类生物碱。以四氢巴马汀红碱和延胡索乙素、大麻素 B 为例阐释生物碱类化合物裂解途径。

化合物准分子离子峰为 m/z : 342.170 0 $[M+H]^+$ ，推测其分子式为 $C_{20}H_{24}NO_4$ ，脱去一个 $C_9H_{10}O_2$ 后得到碎片离子 m/z : 192.101 9 $[M+H-C_9H_{10}O_2]^+$ ，

再脱去一分子 CH_3 得到碎片离子 m/z : 177.079 0 $[M+H-C_9H_{10}O_2-CH_3]^+$ ，结合 CFM-ID 和 PubChem 公共数据库、MWDB 自建数据库以及文献 [18] 报道，推测该化合物为四氢巴马汀红碱或延胡索乙素，裂解过程见图 5。

化合物准分子离子峰为 m/z : 597.225 2 $[M+H]^+$ ，推测其分子式为 $C_{34}H_{32}N_2O_8$ ，脱去一个 NH_2 后得到碎片离子 m/z : 460.140 1 $[M+H-NH_2]^+$ 、121.062 9 $[M+H-NH_2]^+$ ，前者再脱去一个 CO ，得到碎片离子 m/z : 432.144 3 $[M+H-NH_2-CO]^+$ ，结合 CFM-ID 和 PubChem 公共数据库、MWDB 自建数据库以及文献 [19] 报道，推测该化合物为 大麻素 B，裂解过程见图 6。

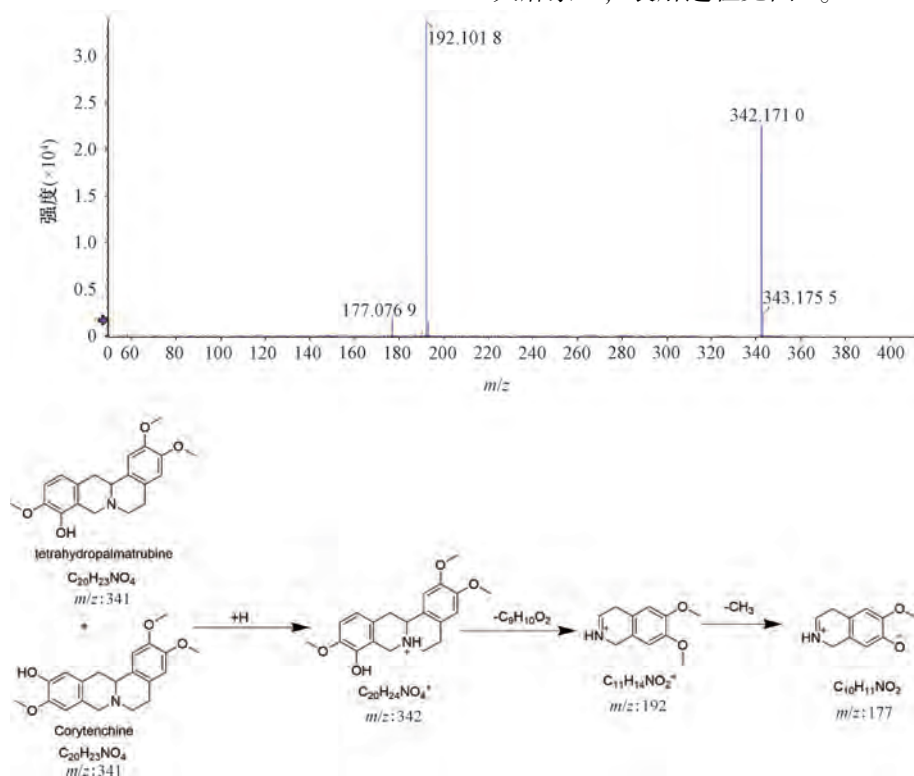


图 5 四氢巴马汀红碱或延胡索乙素二级质谱图及可能的裂解方式

3.5 其他类成分的鉴定及裂解规律 共鉴定得到齐墩果酸、熊果酸、海松酸、山楂酸、白桦脂酸等 47 种萜类，落叶松脂素-4'-*O*-葡萄糖苷、欧前胡素、8-甲氧基香豆素、五味子苷、松脂醇等 32 种木脂素和香豆素，3-*O*-甲基鞣花酸、木麻黄鞣质、老鹳草素、地榆素 H1、老鹳草鞣酸 C 等 15 种鞣质。以齐墩果酸和熊果酸、落叶松脂素-4'-*O*-葡萄糖苷、3-*O*-甲基鞣花酸为例，阐释萜类、木脂素和香豆素、鞣质类化合物的裂解途径。

化合物准分子离子峰为 m/z : 454.345 2 $[M-H]^-$ ，

推测其分子式为 $C_{30}H_{48}O_3$ ，结合 CFM-ID 和 PubChem 公共数据库、MWDB 自建数据库以及文献 [20] 报道，可推测该化合物为齐墩果酸或熊果酸，裂解过程见图 7。

化合物准分子离子峰为 m/z : 521.203 8 $[M-H]^-$ ，推测其分子式为 $C_{26}H_{34}O_{11}$ ，脱去一个 $C_6H_{10}O_5$ 后得到碎片离子 m/z : 359.149 4 $[M-H-C_6H_{10}O_5]^-$ ，结合 CFM-ID 和 PubChem 公共数据库、MWDB 自建数据库以及文献 [21] 报道，推测该化合物为落叶松脂素-4'-*O*-葡萄糖苷，裂解过程见图 8。

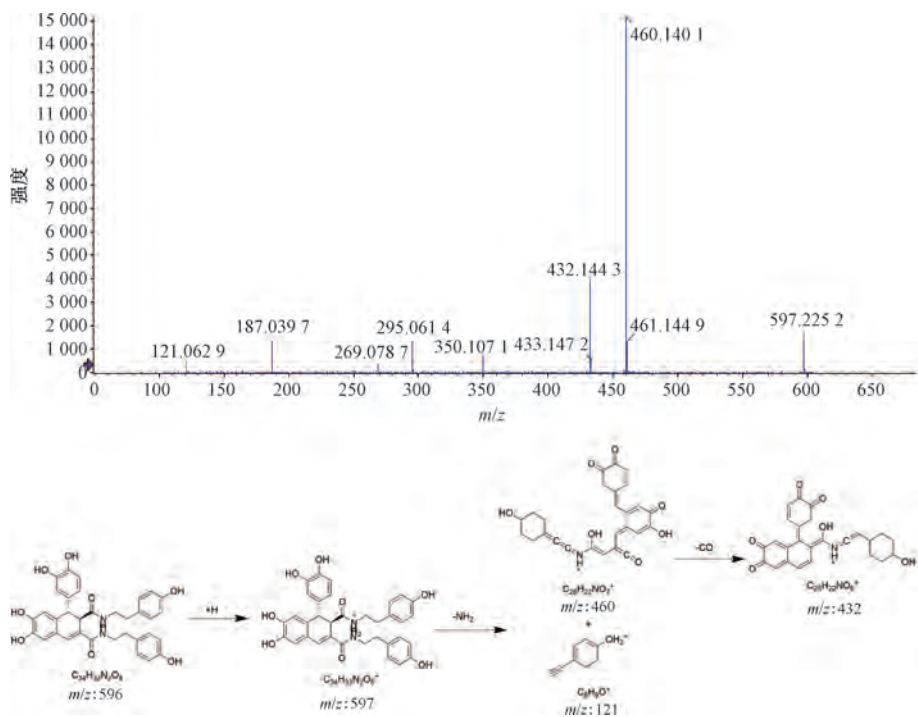


图 6 大麻素 B 二级质谱图及可能的裂解方式

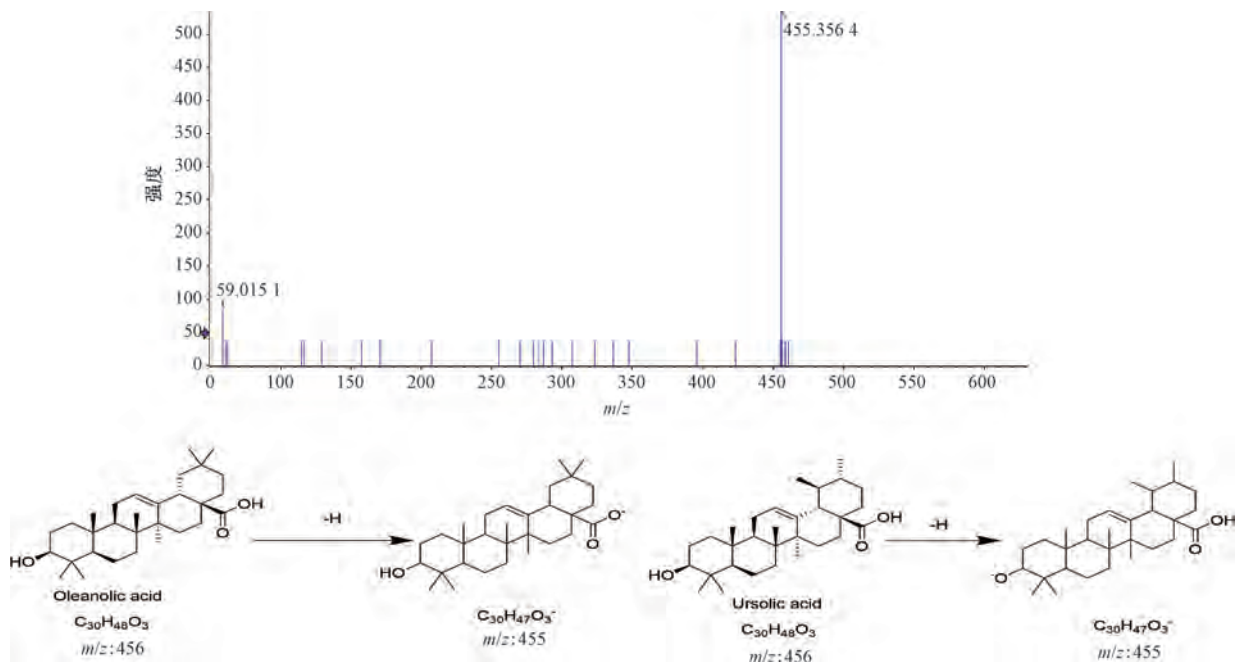


图 7 齐墩果酸或熊果酸二级质谱图和可能的裂解方式

化合物准分子离子峰为 m/z : 315.010 0 $[M-H]^-$, 推测其分子式为 $C_{15}H_8O_8$, 脱去一分子 CH_3 后得到碎片离子 m/z : 299.991 7 $[M-H-CH_3]^-$, 结合 CFM-ID 和 PubChem 公共数据库、MWDB 自建数据库及文献 [22] 报道, 推测该化合物为 3-O-甲基鞣花酸, 裂解过程见图 9。

4 讨论

本研究从壮药火炭母中鉴定得到黄酮类 121

种、酚酸类 87 种、生物碱类 52 种、萜类 47 种、木脂素和香豆素 32 种、鞣质 15 种, 发现苷元母核和糖基部分的断裂是黄酮类化合物的主要裂解方式^[23], 苷元的裂解主要产生保留 A 环和 B 环信息的特征离子, RDA 裂解和碎片离子丢失是主要裂解途径, 故出现- CH_3 、-OH 分子等脱落, 裂解过程较复杂; 酚酸类化合物核心裂解主要围绕苯环骨架、羧基、羟基、甲氧基等官能团丢失, 其中脱羧

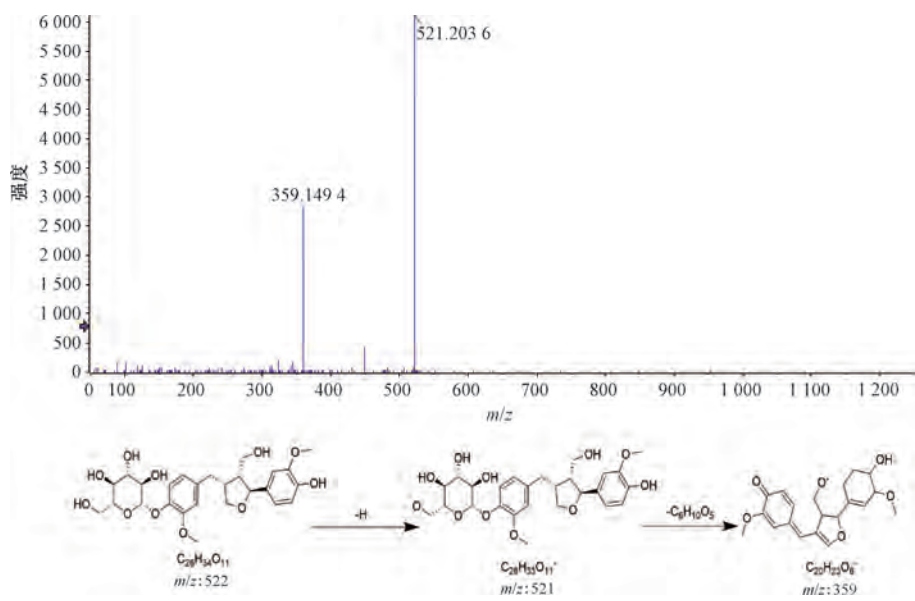


图 8 落叶松脂素-4'-O-葡萄糖苷二级质谱图和可能的裂解方式

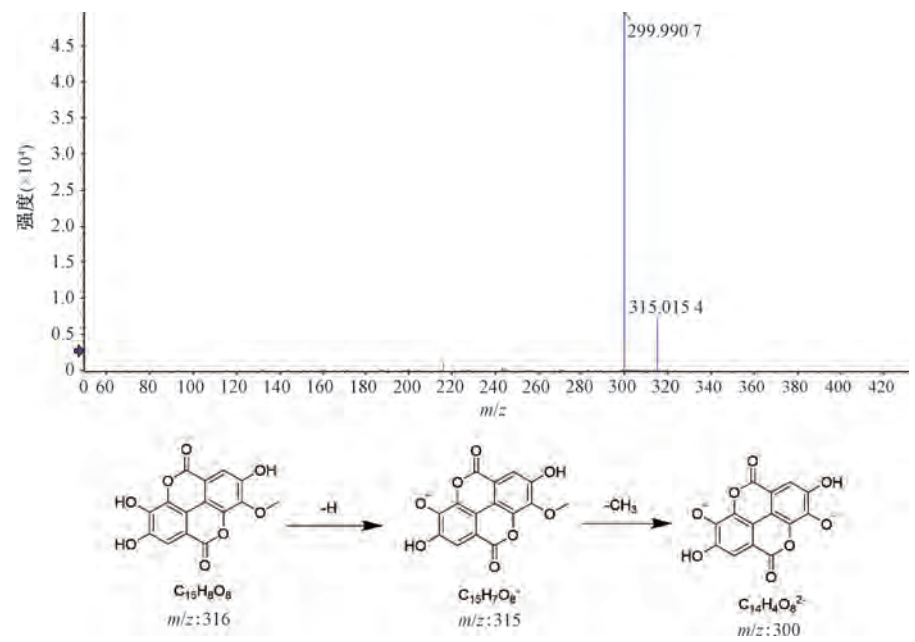


图 9 3-O-甲基鞣花酸二级质谱图和可能的裂解方式

是核心^[24]；生物碱类化合物以含氮杂环为核心，裂解依赖于氮原子的类型（叔胺、仲胺、酰胺等）、位置及整体骨架^[25]，裂解过程主要为失去NH₂、H₂O等；萜类化合物分子量范围广，随着异戊二烯单元数量的增加，分子的碳骨架变大，复杂度增加^[26]，在裂解过程中结构较稳定，往往以失去H、H₂O等为主；木脂素和香豆素类化合物均由C₆-C₃单元衍生，木质素主要是苜基裂解，产生特征苜基离子，如m/z：137、151等碎片离子，香豆素主要依靠丢失CO和RDA裂解^[27]，均表现为失去C、O关联的环基团等；鞣质类化合物结构高度

复杂，缩合鞣质和可水解鞣质通常以m/z：288、152碎片离子为特征^[28]，各类次生代谢产物裂解规律可为壮药中同类成分的鉴定提供参考。

壮医认为，肝病的核心是“毒”滞于谷道、湿瘀阻塞龙路，导致气血运行不畅，毒邪内蕴于肝，以调气解毒、通络祛瘀为主要治疗原则^[29]。而火炭母药材在广西药用资源丰富，壮药名为勾莓，功效为清热毒、除湿毒，在肝炎为酿毒初期，邪毒尚浅，正气尚存，以去湿毒为主治，具有保肝降酶、抗病毒、抗肝纤维化作用，是治疗肝病、炎症和黄疸的良药，故本研究对广西产火炭母进行研

究。现代药理研究表明,火炭母总黄酮可显著下调小鼠血清或肝组织中AST、ALT、TBIL、MDA、TNF- α 和IFN- γ 水平,提升T-SOD、GSH-Px、IL-10和IL-4水平,改善急性肝损伤^[30],但未能明确其药效物质。儿茶素及其异构体、衍生物均具防治肝病的功效,如儿茶素和表儿茶素能降低APAP诱导肝损伤小鼠血清ALT、AST活性,升高肝脏GSH、SOD、ROS和MPO活性,上调ATP、GSH水平及GPX4、xCT表达,抑制肝铁死亡,改善肝损伤。同时,通过下调线粒体Drp1、Bax和胞质Smac、AIF蛋白表达,促进线粒体Mfn2和胞质Bax蛋白表达,抑制JNK磷酸化,拮抗肝损伤^[31-32]。没食子儿茶素没食子酸酯(EGCG)生物活性好,通过调控HMGB1、Cav-1等关键蛋白的水平,抑制TLR4/NF- κ B、Wnt等经典信号通路,改善脓毒症后急性肝损伤^[33]。鞣花酸为天然多酚,可通过降低脂肪性肝病小鼠血清中AST、ALT和MDA水平,下调肝组织中NF- κ B、TNF- α 、IL-6、COX-2等表达,发挥改善作用^[34]。延胡索乙素通过上调mtROS水平显著促进人肝细胞癌细胞自噬,并通过重编程能量代谢表型抑制线粒体呼吸,激活线粒体凋亡途径引发细胞凋亡^[35]。综上所述,火炭母主要通过抑制氧化应激指标、降低炎症因子、抑制相关经典炎症通路及下调关键蛋白水平发挥作用,同时推测儿茶素、表儿茶素、EGCG、鞣花酸及延胡索乙素等黄酮类、酚酸类及生物碱化合物为火炭母的药效物质基础,但其作用机制及确切的药效物质需更多实验进一步验证。

参考文献:

[1] 中国科学院《中国植物志》编辑委员会. 中国植物志[M]. 北京: 科学出版社, 1982: 223.

[2] 国家中医药管理局. 中华本草(第3卷)[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1999: 34.

[3] 广西壮族自治区食品药品监督管理局. 广西壮族自治区壮药质量标准(第一卷)[S]. 南宁: 广西科学技术出版社, 2008: 69.

[4] 柳贤福, 陆万冰, 傅 鹏, 等. 基于HPLC指纹图谱和含量测定控制火炭母质量[J]. 中成药, 2025, 47(8): 2676-2679.

[5] Chen W, Shen X M, Ma L, *et al.* Phenolic compounds from *Polygonum chinense* induce growth inhibition and apoptosis of cervical cancer SiHa cells[J]. *Biomed Res Int*, 2020, 2020: 8868508.

[6] Wu Y J, Zhang Z F, Chen T B, *et al.* Comparison of two *Polygonum chinense* varieties used in Chinese cool tea in terms

of chemical profiles and antioxidant/anti-inflammatory activities[J]. *Food Chem*, 2020, 310: 1-31.

[7] Zheng H C, Lu Y, Chen D F. Anticomplement compounds from *Polygonum chinense*[J]. *Bioorg Med Chem Lett*, 2018, 28(9): 1495-1500.

[8] Wei A D, Zhu H, Xie F F, *et al.* Analysis of the volatile components of *Polygonum chinense* L. extracted with different solvents by GC-MS[J]. *Agric Biotechnol*, 2021, 10(4): 123-126.

[9] Tran T T, Kim M, Jang Y, *et al.* Characterization and mechanisms of anti-influenza virus metabolites isolated from the Vietnamese medicinal plant *Polygonum chinense*[J]. *BMC Complement Altern Med*, 2017, 17(1): 1-11.

[10] 黄思茂, 王梦楠, 许琼梅, 等. 火炭母总黄酮对D-氨基半乳糖诱导的肝损伤小鼠的保护作用及其机制[J]. 中药药理与临床, 2018, 34(2): 32-35.

[11] 蒋 琪, 汪 强, 韩林涛, 等. 基于UPLC-MS/MS和网络药理学探究瓜蒌-薤白治疗动脉粥样硬化的作用机制[J]. 湖北中医杂志, 2023, 45(8): 3-9.

[12] 王馨悦, 刘 畅, 杨小英, 等. 基于UPLC-MS/MS技术的苗药八角枫不同部位化学成分差异研究[J]. 中国药学杂志, 2024, 59(17): 1605-1619.

[13] 谢凤凤, 黎 理, 韦安达, 等. 基于广泛靶向代谢组学的火炭母和硬毛火炭母次生代谢产物差异性分析[J]. 中药材, 2022, 45(1): 101-107.

[14] Cai R X, Li X C, Li C H, *et al.* Standards-based UPLC-Q-Exactive Orbitrap MS systematically identifies 36 bioactive compounds in *Ampelopsis grossedentata* (vine tea) [J]. *Separations*, 2022, 9(11): 329.

[15] 曾立峰, 范宇光, 包海鹰, 等. 基于UPLC-QTOF-MS技术分析野生与栽培杨树桑黄的化学成分[J]. 天然产物研究与开发, 2021, 33(11): 1818-1828; 1886.

[16] 李胜男, 李 君, 解红娟, 等. HPLC-Q-Exactive-Orbitrap-MS法鉴定森登-4味涂剂中化学成分[J]. 现代药物与临床, 2023, 38(4): 811-819.

[17] 赵桂铃, 缪兴龙, 宋兆辉, 等. UPLC-Q-TOF/MS法坤怡宁颗粒化学成分分析[J]. 中成药, 2020, 42(4): 1074-1082.

[18] Ge H X, Zhang Y, Yang Z, *et al.* Chemical synthesis, microbial transformation and biological evaluation of tetrahydropyprotoberberines as dopamine D1/D2 receptor ligands[J]. *Bioorgan Med Chem*, 2019, 27(10): 2100-2111.

[19] Benkirane C, Ben Moumen A, Fauconnier M L, *et al.* Bioactive compounds from hemp (*Cannabis sativa* L.) seeds: optimization of phenolic antioxidant extraction using simplex lattice mixture design and HPLC-DAD/ESI-MS² analysis[J]. *Rsc Adv*, 2022, 12(39): 25764-25777.

[20] 钟询龙, 王若伦, 段 炼, 等. 基于UPLC/Q-TOF-MS技术分析女贞子与墨旱莲配伍协同增效的物质基础[J]. 中国医院药学杂志, 2017, 37(19): 1887-1891.

[21] Huang B, Chen F J, Zhang X, *et al.* A fragmentation study of disaccharide flavonoid C-glycosides using triple quadrupole mass spectrometry and its application for identification of flavonoid C-

glycosides in *Odontosoria chinensis*[J]. *Rapid Commun Mass Spectrom*, 2025, 39(2): e9936.

[22] Zheng Y Z, Fu M, Deng G, *et al.* Free radical scavenging potency of ellagic acid and its derivatives in multiple H⁺/e⁻ processes[J]. *Phytochemistry*, 2020, 180: 112517.

[23] Cuyckens F, Claeys M. Mass spectrometry in the structural analysis of flavonoids[J]. *J Mass Spectrom*, 2004, 39(4): 461.

[24] Clifford M N, Johnston K L, Knight S, *et al.* Hierarchical scheme for LC-MSⁿ identification of chlorogenic acids[J]. *J Agr Food Chem*, 2003, 51(10): 2900-2911.

[25] Geoffrey A, Cordell. The alkaloids: chemistry and biology[M]. San Diego: Academic Press, 1998.

[26] Li Y L, Wang J, Li L Y, *et al.* Natural products of pentacyclic triterpenoids: from discovery to heterologous biosynthesis[J]. *Nat Prod Rep*, 2023, 40(8): 1303-1353.

[27] Häkkinen S T. MS/MS fragmentation patterns of coumarins and lignans[M]. Berlin: Springer, 2022.

[28] Rue E A, Rush M D, van Breemen R B. Procyanidins: a comprehensive review encompassing structure elucidation *via* mass spectrometry[J]. *Phytochem Rev*, 2017, 17(1): 1-16.

[29] 李宏一, 蓝绍航, 庞宇舟. 基于“毒病”理论探讨肝炎到肝癌的演变及治疗[J]. *中医药学报*, 2023, 51(7): 57-61.

[30] 高雅, 朱 华. 火炭母醇提取物对大鼠急性肝损伤的保护作用研究[J]. *华西药学杂志*, 2012, 27(3): 283-284.

[31] 孙武燕, 张 娟, 张 炫, 等. 基于 JNK 信号通路和线粒体氧化应激研究儿茶素拮抗对乙酰氨基酚诱导肝损伤的作用机制[J]. *中草药*, 2024, 55(8): 2589-2600.

[32] 于蕙源, 金 令, 于 颖, 等. 表儿茶素对对乙酰氨基酚诱导小鼠肝损伤的改善作用及其机制[J]. *吉林大学学报(医学版)*, 2025, 51(6): 1498-1507.

[33] 李 飞, 吴传新, 何佳辉, 等. 表没食子儿茶素没食子酸酯通过减弱 HMGB1/TLR4/NF-κB/NLRP3 途径改善脓毒症后急性肝损伤[J]. *海军军医大学学报*, 2022, 43(9): 1012-1021.

[34] 张 聪, 盛 磊, 杨 恬, 等. 鞣花酸对 AKT 基因转染诱导小鼠脂肪性肝病中炎症及氧化应激的影响[J]. *中国中药杂志*, 2019, 44(9): 1869-1875.

[35] 尹逊哲, 刘作家, 汪 劲. 延胡索乙素通过线粒体活性氧调控能量代谢表型转换促进人肝细胞癌凋亡[J]. *中国中药杂志*, 2022, 47(23): 6494-6504.

荆银颗粒物质基础及其抗炎活性研究

江美芳^{1,2}, 何文耀², 张 彤^{1*}

(1. 上海中医药大学, 上海 201203; 2. 上海上药杏灵科技药业股份有限公司, 上海 201707)

摘要: **目的** 阐明荆银颗粒物质组成, 并评价其抗炎活性。**方法** LC-MS、GC-MS 法鉴定主要成分, 斑马鱼模型及 LPS 诱导人支气管上皮 (16HBE) 细胞验证抗炎活性。**结果** 共鉴定出 75 种成分, 其中 29 种为挥发油。制剂水提液和挥发油均抑制斑马鱼中性粒细胞活化, 降低 *IL-1β*、*IL-6*、*TNF-α* mRNA 表达 ($P<0.01$); 在 16HBE 细胞中, 两者也均降低 *IL-1β*、*IL-6*、*TNF-α* mRNA 及蛋白表达 ($P<0.05$, $P<0.01$)。**结论** 荆银颗粒水溶性成分及挥发油均可通过抑制 *IL-1β*、*IL-6*、*TNF-α* 表达来有效缓解 LPS 诱导的炎症反应。

关键词: 荆银颗粒; 物质基础; 抗炎活性; LC-MS; GC-MS; 斑马鱼; 人支气管上皮 (16HBE) 细胞

中图分类号: R283.6 **文献标志码:** A **文章编号:** 1001-1528(2026)08-2809-07

doi:10.3969/j.issn.1001-1528.2026.08.042

荆银颗粒由荆芥、金银花、四季青、鱼腥草、大青叶、蒲公英、牛蒡子、防风、甘草 9 味中药组成, 具有疏风透表、清热解毒、宣肺利咽的作用^[1-7], 抗病毒作用良好, 在防治 SARS、禽流感疫情、甲型 H1N1 流感中被列为上海市储备药物, 尤其在新冠肺炎疫情中发挥了积极作用, 对轻度患者能显著提高其 RNA 阴转率, 缩短转阴时间和住院时间^[8-11], 方中荆芥、金银花为君药, 四季青、鱼腥草、大青叶为臣药, 蒲公英、牛蒡子、防风为佐药, 甘草为使药。在荆银颗粒制备过程中, 主要采用水煎煮, 再加入荆芥挥发油 β-环糊精包合物制粒, 故该制剂由水提物和荆芥挥发油组成, 目前对其物质基础的研究主要集中在前者, 并且作用机制不明确。因此, 本实验探讨荆银颗粒水提部分和挥发油的抗炎作用, 以期为该制剂临床治疗呼吸道疾病提供一定的理论依据。

收稿日期: 2025-11-04
基金项目: 上海市科技计划项目 (20S21900900)
作者简介: 江美芳 (1990—), 女, 工程师, 执业药师, 研究方向为中药分析。E-mail: jiangmeifang@xingling.com.cn.
* 通信作者: 张 彤, 男, 教授, 研究方向为中药制药、分析技术。E-mail: zhangtdmj@hotmail.com