

· 综述 ·

# UPLC-MS技术在中药炮制领域的研究进展

曹星星<sup>1</sup>, 李晓娟<sup>1</sup>, 赵翡翠<sup>1, 2, 3</sup>

1. 新疆医科大学附属中医医院药学部(乌鲁木齐 830000)
2. 新疆维吾尔自治区中药炮制重点实验室(乌鲁木齐 830000)
3. 新疆维吾尔自治区名老中医药专家传承工作室(乌鲁木齐 830000)

**【摘要】**中药炮制在临床应用中意义重大,但其质量标准体系构建和药效物质基础研究面临诸多难题,传统检测分析手段存在局限性。超高效液相色谱-质谱联用(UPLC-MS)技术因选择性高、灵敏度高、分离效果出色等优势,在中药炮制领域得到广泛应用。本文系统综述了UPLC-MS技术的组成、原理及常见种类,重点阐述其在中药炮制领域的应用,包括同一炮制方法、不同炮制方法对中药化学成分的影响,炮制对有毒中药成分、中药中农药残留及中药药动学的影响等方面的研究进展。UPLC-MS技术可快速解析和精准定量中药炮制过程中的复杂成分,为优化炮制工艺、阐释炮制机制提供了有力工具,但该技术也存在对样品要求苛刻、微量成分检测易受仪器灵敏度影响等局限性。在未来的研究中,通过结合质谱数据库和人工智能技术,有望进一步推动中药炮制现代化及质量评价标准的建立。

**【关键词】**超高效液相色谱-质谱联用; 中药炮制; 化学成分; 有毒成分; 农药残留; 药动学; 研究进展

**【中图分类号】** R284.1

**【文献标识码】** A

Research progress of UPLC-MS technology in the field of traditional Chinese medicine processing

CAO Xingxing<sup>1</sup>, LI Xiaojuan<sup>1</sup>, ZHAO Feicui<sup>1,2,3</sup>

1. Department of Pharmacy, Affiliated Hospital of Traditional Chinese Medicine of Xinjiang Medical University, Urumqi 830000, China

2. Key Laboratory of Traditional Chinese Medicine Processing of Xinjiang Uygur Autonomous Region, Urumqi 830000, China

3. Inheritance Studio Program of Famous Traditional Chinese Medicine Experts, Urumqi 830000, China  
Corresponding author: ZHAO Feicui, Email: 1017987429@qq.com

**【Abstract】** Traditional Chinese medicine (TCM) processing holds significant importance in clinical applications. However, the construction of its quality standard system and research on the material basis of its efficacy face numerous challenges, and traditional detection and analysis methods have limitations. Ultra-performance liquid chromatography-mass spectrometry (UPLC-MS) technology has been widely used in the field of TCM processing due to its advantages of high selectivity, high sensitivity, and excellent separation efficiency. This paper systematically reviews the composition, principles, and common types of UPLC-MS technology, with a primary focus on elaborating its

---

DOI: 10.12173/j.issn.2097-4922.202504013

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(82260766); 新疆维吾尔自治区自然科学基金重点项目(2022D01D24)

通信作者: 赵翡翠, 博士, 教授, 主任中药师, 硕士研究生导师, Email: 1017987429@qq.com

applications in TCM processing, including research progress on the effects of the same processing method and different processing methods on the chemical composition of TCM, as well as the effects of processing on toxic components in TCM, pesticide residues in TCM, and the pharmacokinetics of TCM. UPLC-MS technology enables rapid analysis and precise quantification of complex components during TCM processing, providing a powerful tool for optimizing processing techniques and elucidating processing mechanisms. Nevertheless, this technology also has limitations, such as stringent sample requirements and the susceptibility of trace component detection to instrument sensitivity. In the future, it is expected to further advance the modernization of TCM processing and the establishment of quality evaluation standards by combining with mass spectrometry databases and artificial intelligence technology.

**【Keywords】** Ultra-performance liquid chromatography-mass spectrometry; Traditional Chinese medicine processing; Chemical components; Toxic components; Pesticide residues; Pharmacokinetics; Research progress

中药炮制作为一项传承已久的传统中药技术，在临床应用中发挥着举足轻重的作用。其能够有效降低药物的毒性，消除药物的副作用，实现减毒增效的目的，同时还能精准调整中药的药理活性。然而，由于中药种类丰富繁杂，化学成分千变万化，在中药炮制前后，有毒物质与有效成分的动态变化情况，以及对未知化合物的检测等问题，成为了当前中药质量标准体系构建和药效物质基础研究中亟待攻克的难题。传统的检测分析手段，往往因技术的局限性，难以全面获取充足、完整的样本化学信息。

随着液质联用技术的蓬勃发展与持续革新，其凭借选择性高、灵敏度高、分离效果出色等显著优势<sup>[1-4]</sup>，在中药炮制领域得到了广泛且深入的应用。超高效液相色谱（ultra-performance liquid chromatography, UPLC）凭借其卓越的分离能力，尤其适用于多成分复杂体系的分离与分析<sup>[5]</sup>。在中药炮制研究中，其能够迅速且高效地分离中药的复杂成分以及炮制所用辅料的成分。而质谱（mass spectrometry, MS）则能够精确反映对应化合物的分子量，进而深入剖析其结构信息。UPLC 与 MS 相互配合、优势互补，不仅能够对未知化合物进行精准的定性分析，对已知化合物进行可靠的定量分析，还能够成功检测到其他方法难以检测到的低浓度化合物。

本文系统地总结了近年来 UPLC-MS 技术在中药炮制领域的应用实例与研究成果，旨在为后续进一步深入探索 UPLC-MS 技术在中药炮制中的应用潜力，提供全面且有价值的参考依据，推动中药炮制研究的不断发展与创新。

## 1 UPLC-MS技术的组成与原理

UPLC-MS 技术融合了 UPLC 和高分辨 MS 两项技术，是极具创新性的分析技术。凭借 UPLC 模块，其能够对复杂样品进行高效分离，搭配高分辨 MS 模块，还可精准获取未知化合物离子峰的详细 MS 信息。在 UPLC-MS 系统内，离子源和质量分析器高度集成，实现了从分离到检测流程的高效衔接，极大提升了分析效率。UPLC-MS 具有速度快、分辨率高和灵敏度强的显著优势，这一技术的兴起，有望为液相色谱领域带来全新的变革，引领行业的发展方向<sup>[6]</sup>。

与传统的 HPLC 和 TLC 技术相比，UPLC 在硬件配置上有着本质区别，其使用的柱填料粒径小于 2 μm。这种微小的填料颗粒虽然极大提升了分离效能，但也导致系统在运行过程中产生的压力呈指数级增长，对仪器的耐压性能提出了极高的要求<sup>[7]</sup>。在高分辨 MS 技术领域，四极杆飞行时间质谱仪（quadrupole-time-of-flight mass spectrometer, Q-TOF-MS）和 四极杆轨道阱质谱仪（quadrupole orbital trap mass spectrometry, Q-Orbitrap-MS）凭借出色的分辨率和质量精度，被广泛应用于中药材中化合物的检测与鉴定工作。这不仅助力科研人员深入了解中药材的化学组成，还为中药质量控制和新药研发提供了强有力的技术支持。UPLC-MS 系统的组成见图 1，种类及特点见表 1。

## 2 UPLC-MS在中药炮制领域的应用

中药，作为在中医药理论体系指导下应用的植物药与矿物药，与西药显著不同。西药成分清

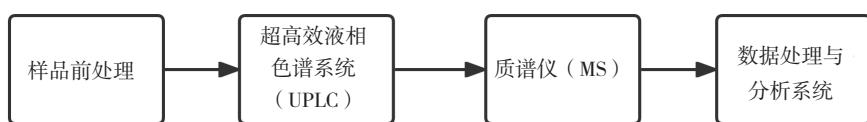


图1 UPLC-MS系统组成

Figure 1. UPLC-MS system components

表1 常见UPLC-MS种类及其特点

Table 1. Common types of UPLC-MS and their characteristics

名称	分辨率	质量精度 ( ppm )	灵敏度	主要应用场景	优点	缺点
UPLC-Q-TOF-MS	高分辨率 ( ≥40 000 )	<5	高	非靶向代谢组学、未知化合物鉴定、天然产物分析 <sup>[8-10]</sup>	高分辨率、高质量精度，适合结构解析 <sup>[11]</sup>	定量能力弱于三重四极杆，设备成本较高
UPLC三重四极杆串联MS	低分辨率	10~50	超高	靶向定量分析（如药动学、残留检测）、多反应监测 <sup>[12-15]</sup>	高灵敏度和特异性，适合低丰度化合物定量	无法进行未知物鉴定，分辨率低
UPLC-Orbitrap-MS	超高分辨率 ( ≥100 000 )	<2	高	复杂基质分析（如蛋白质组学、脂质组学）、精准质量数测定 <sup>[16-17]</sup>	超高分辨率和质量精度，适合复杂体系	设备昂贵，维护复杂
UPLC离子阱MS	中等分辨率 ( ≤10 000 )	5~10	中等	化合物碎片解析（MS）、小分子结构鉴定 <sup>[18-19]</sup>	多级MS能力强，适合结构解析	分辨率和质量精度较低，定量能力有限
UPLC-Q-轨道阱复合式MS	超高分辨率 ( ≥70 000 )	<3	高	高通量代谢组学、药物杂质分析、生物大分子研究 <sup>[20-21]</sup>	结合四极杆选择性与Orbitrap高分辨，兼顾定性与定量	仪器成本极高，操作复杂

晰、含量可控，而中药即便单味使用，其化学成分也极为复杂。并且中药在实际应用中，多遵循君臣佐使、配伍禁忌以及互补调和等中医药理论进行配伍使用。

在临床应用方面，中药以各类中药材为原料，依据药物的特性、功效以及不同的配制与制备要求，经多种炮制加工方法制作而成。炮制，作为中药制备的关键环节，不仅能改变中药的药理特性，还可以降低或消除药物的毒性，确保用药安全。在炮制实践中，借助辅料加工是常用的手段，例如采用盐溶液、酒、麦麸等配料，对中药材进行炒制。当下，中医药现代化势在必行。探明炮制过程中化学成分的变化，是打开中药现代化大门的密码，也是推动行业发展的关键。规范炮制工艺、明确炮制原则，是保障中药临床疗效的锚石，对提升中药品质、开拓国际市场起着决定性作用。

## 2.1 同一炮制方法对中药化学成分的影响研究

中药的化学成分具有复杂性和多样性，种类极为繁多。在中药炮制流程中，炮制工艺不仅直接决定了中药的品质，还对其临床疗效产生着关键影响。剖析中药炮制前后化学物质的变化，能

从物质层面阐释炮制所发挥的作用，具有极为重要的意义。

任天航等<sup>[22]</sup>借助UPLC-MS技术开展研究，发现酸枣仁在经过炒制后，其黄酮类、皂苷类以及脂肪酸类成分的含量显著增加，其中酸枣仁皂苷A的含量提升最为突出。这一发现为阐释酸枣仁“生效熟增”的炮制原理，以及炮制品的质量把控，提供了极具价值的参考依据。昝珂等<sup>[23]</sup>运用UPLC-MS法测定发现，款冬花在炮制后，其中款冬碱的含量有所下降。张凡等<sup>[24]</sup>通过UPLC-MS法对人参及其炮制品红参进行分析，结果表明两者化学组成相似，但成分含量存在显著差异。陈佩东等<sup>[25]</sup>采用同样的UPLC-MS法检测到黄芩炒炭后，黄酮苷类化合物含量降低，而黄酮苷元含量则呈现增高趋势。管汉亮等<sup>[26]</sup>借助UPLC-MS分析得出，80℃干燥处理的银杏叶，更有利于儿茶素、黄酮苷、萜烯内酯的积累，相比其他工序效果更为突出。

黄芪作为一种传统中药，在预防和治疗多种疾病方面应用广泛，具有益气固表、敛汗固脱、托疮生肌、利水消肿等功效。在历代文献记载中，黄芪的炮制方法丰富多样，包括盐炙、蜜炙、醋炙、

炒炙、米炙法等<sup>[27]</sup>。不同的炮制方法，对黄芪有效成分及功效的影响也不尽相同。刘蓬蓬等<sup>[28]</sup>利用UPLC-MS法分析发现，采用有机酸直接炮制黄芪后，皂苷和黄酮含量发生了显著变化。Xing等<sup>[29]</sup>通过UPLC-MS检测到在硫熏蒸过程中，黄芪中的黄酮苷发生了化学转化，这一研究结果为硫熏黄芪的全球质量评价提供了参考。

酸枣仁炒制后皂苷类成分含量增加（量变），款冬花在炮制后，其中款冬碱的含量有所下降（量变）。黄芩炒炭后黄酮苷→苷元转化（质变）。成分增量、减量是否必然有药效变化缺乏量效关系验证，炮制需在“成分增量/转化”与“成分稳定性”间寻求动态平衡。

硫熏黄芪黄酮苷转化仅关注目标成分，忽视副产物亚硫酸酯的肝肾毒性风险；酸枣仁炒制后脂肪酸增加，但未检测氧化衍生物的潜在毒性。UPLC-MS的靶向分析方法在中药炮制中存在系统性表征不足的局限性，难以全面评估炮制工艺化学成分网路的整体性影响。当前UPLC-MS研究多停留在“成分变化现象描述”阶段（如“含量增加/减少”），但亟需向三方面深化：为什么变？变得如何？如何控变？唯有回答这3个问题，UPLC-MS数据才能真正转化为炮制工艺优化的科学依据。

## 2.2 不同炮制方法对中药化学成分的影响研究

随着科技持续进步，学科间的交叉融合愈发深入，众多新工艺、新技术与传统中药炮制实现了有机结合。UPLC-MS技术凭借其在成分分析方面的显著优势，在中药炮制研究中得到广泛应用，通过对炮制后中药有效成分的鉴别与含量测定，为合理选择中药炮制方法、充分发挥有效成分作用提供了科学依据。

杨璐嘉等<sup>[30]</sup>运用UPLC-MS技术检测发现，山楂经过炒山楂、山楂炭、焦山楂3种不同炮制方法处理后，炒山楂的化学成分含量变化最为显著，这一成果为后续深入研究山楂的不同炮制品筑牢了根基。叶协滔等<sup>[31]</sup>借助该技术研究证实，不同炮制方法会显著影响川乌的化学成分，这为临床用药时精准选择川乌的炮制方法提供了重要参考。

孙钰婧等<sup>[32]</sup>通过UPLC-MS技术研究发现，炒车前子过程中，炮制时间的延长与多种化学成

分的含量密切相关。这一发现不仅为制定车前子炒制过程的合理标准提供了依据，也避免了因过度炒制导致有效成分损失。熊之琦等<sup>[33]</sup>运用UPLC-MS技术分析发现，炮制对蚕砂的化学成分存在影响，为深入研究蚕砂的药用价值提供了方向。

赵琴等<sup>[34]</sup>采用UPLC-MS分析不同黑豆汁蒸制法，如蒸与闷交叉进行、高压连续蒸制，发现这些方法会对何首乌的化学成分产生明显影响，表明选择合适的炮制时间，对保障制何首乌的质量至关重要。总体来看，UPLC-MS技术在中药炮制研究中发挥着关键作用，推动了中药炮制领域的科学发展。

不同炮制方法（炒、蒸、熏等）通过热力学、传质效率、化学反应路径多维影响成分，但当前研究仅依赖成分含量升降单一指标（如“变化显著”），缺乏工艺-成分变化的量化模型。UPLC-MS产出海量数据，但其解析能力的局限性导致难以阐明成分变化的关联机制，阻碍工艺精准调控。

## 2.3 炮制对有毒中药成分的影响

在传统中医药学领域，炮制是极为关键的环节。通过炮制，不仅能降低中药毒性，还可以改变其治疗功效，对保障潜在毒性中草药的安全使用，起着无可替代的作用。UPLC-MS技术凭借高灵敏度与精准的成分分析能力，成为评估有毒中药炮制过程的重要手段，这对于推动有毒中药在临床安全、有效地应用至关重要。

Jiang等<sup>[35]</sup>运用UPLC-MS技术对生苍耳子和炮制后的苍耳子进行对比研究，评估二者的肝毒性。结果表明，炮制能显著降低苍耳子对肝脏的毒性。半夏作为有毒中药，加工一直是降低其毒性的常用策略。Sun等<sup>[36]</sup>借助UPLC-MS检测发现，半夏经加工后，已鉴定出的化学成分含量大幅下降，约减少至原来的十分之一到百分之一。

为深入探究长期煎煮后附子的安全性，Sun等<sup>[37]</sup>创新地将斑马鱼模型与UPLC-MS分析相结合，确定了附子的主要毒性成分，对其急性毒性进行了量化评估。研究显示，即便经过长时间煎煮，附子在应用中仍存在安全风险。这些研究成果为有毒中药的炮制工艺优化和临床安全使用提供了科学的参考依据。

炮制对有毒中药成分的影响研究止步于“毒

性下降”的宏观结论，未建立“毒性成分-剂量-效应”关联模型。如何在最大化降解毒性成分与最小化活性成分损失间寻求最优解是炮制工艺需要解决的“安全-活性”平衡困境。

#### 2.4 炮制对中药中农药残留的影响

中药作为传统医学的瑰宝，在全球范围内广泛传播与应用。近年来，随着人们健康意识的提升，中药材农药残留问题愈发凸显，成为各界关注的焦点。这一问题直接引发大众对中药安全性的深切担忧，给中药产业的健康发展带来挑战。

在此背景下，传统炮制手段凭借丰富的经验积淀，成为降低中药材农药残留风险的重要途径。UPLC-MS 技术以其超高的灵敏度和优异的专属性脱颖而出，能够精准测定经各类炮制处理后的中药农药残留量，为评估中药安全性提供可靠的数据支撑，助力制定科学有效的质量管控策略。

He 等<sup>[38]</sup>借助 UPLC-MS 技术，系统检测地黄炮制过程中农药残留量的变化，发现戊唑醇、咪鲜胺和阿维菌素等多种农药残留量显著降低，尤其戊唑醇经全套炮制流程后，残留量大幅减少。Liu 等<sup>[39]</sup>运用相同的技术对广藿香加工过程展开分析，结果显示，4 种目标农药的残留量均有不同程度的下降。

这些研究充分表明，加工环节在中药农药残留风险评估中起着关键作用。然而，当前对于炮制减控农药残留的研究仍处于发展阶段，在作用机制、适用范围和优化方案等方面亟待开展更为深入、全面的研究，从而更好地保障中药质量安全，推动中药产业高质量发展。

地黄炮制后戊唑醇残留大幅减少、广藿香加工中 4 种农药残留下降，但残留降低是否意味着风险消除？有可能农药代谢产物毒性更强，如戊唑醇降解为毒性更高的 1,2,4-三唑，但 UPLC-MS 通常仅检测母体化合物。炮制降低农药残留的研究需跨越“单纯残留量下降”的表层认知，向“多形态残留识别-转化产物毒理-暴露风险量化”三位一体进阶，方能为中药安全全球化铺平道路。

#### 2.5 炮制对中药药动学的影响

中药药动学作为中药效应与质量控制研究的延伸，是推动中药现代化进程的关键环节。中药发挥治疗功效，主要依赖于被机体吸收后作用于体内的药物成分。然而，中药炮制前后，机体所暴露的药物成分存在诸多不确定性。一方面，炮

制会改变化学成分在体内的含量；另一方面，新的化学成分可能因炮制而在体内暴露。因此，深入开展中药炮制后的药动学研究对准确把握中药药效和安全性至关重要。

UPLC-MS 技术凭借其强大的分析能力，成为研究炮制前后中药成分变化的得力工具。该技术能有效实现对中药成分吸收、分布、代谢及排泄过程的可视化与识别，分析代谢物的选择性，对靶向分析具有高度敏感度，还可检测出其他方法难以发现的低浓度化合物。

运用 UPLC-MS 技术研究中药炮制后在体内的代谢、排泄变化过程以及时效关系，是中药药动学研究重要组成部分。以下为部分前沿研究：

**三七：**Dong 等<sup>[40]</sup>研究表明，三七经过蒸制后，三七皂苷 R<sub>1</sub> 的全身暴露水平降低，这一发现有助于理解三七炮制后的药效变化。

**苍术：**苍术作为常用中药，具有祛湿补脾功效。Xu 等<sup>[41]</sup>借助 UPLC-MS 技术发现，麦麸加工不仅降低了苍术根茎的干燥程度，增强了补脾功能，还增加了苍术内酯的血浆暴露量，促进其尿液排泄，为阐释苍术炮制机理提供了依据。

**丹参：**Cao 等<sup>[42]</sup>采用 UPLC-MS 代谢组学与多元统计分析相结合的方法，揭示了“出汗”炮制方式对丹参代谢产物的含量和组成具有显著影响，进一步明晰了丹参“出汗”的炮制机理，阐明了“出汗”理论的科学内涵。

**延胡索：**Tao 等<sup>[43]</sup>通过 UPLC-MS 法证实，醋加工可提高延胡索中 9 种生物碱在大鼠体内的生物利用度，为延胡索在临床治疗中的应用提供了药动学依据。

**胆南星：**Zhao 等<sup>[44]</sup>运用 UPLC-MS 技术测定了不同产地和发酵时间的胆南星中 12 种活性成分，为胆南星的质量评价和加工机理研究提供了范例。

**知母：**知母经盐处理后，滋阴降火和降血糖作用增强。Wang 等<sup>[45]</sup>利用 UPLC-MS 技术对这一现象进行了验证。Yu 等<sup>[46]</sup>通过 UPLC-MS 法，筛选出知母不同提取物在盐水炒制前后相应活性部位 8 种成分的含量变化，为提升知母降血糖活性、阐明盐处理增效机制提供了理论支持。

这些研究均借助 UPLC-MS 技术，在不同层面深化了对中药炮制后药动学特性的理解，为中药的现代化研究和临床应用提供了坚实支撑。知

母盐制后 8 种成分含量变化，但未阐明成分间药动学相互作用多成分协同贡献降血糖效应的权重比。当前研究将中药简化为“活性成分之和”，忽视炮制对成分网络动力学的重构作用。炮制对中药药动学的影响研究需跨越“单体成分暴露量”的表层认知，向“多成分 PK 网络 – 菌群代谢调控 – 靶组织药效物质基础”多维整合研究转型，才能真正实现“炮制改变体内命运，精准赋能临床疗效”的终极目标。

### 3 结语

UPLC-MS 技术凭借其卓越的性能，实现了对中药炮制过程中复杂成分的快速解析与精准定量。不仅显著提升了分析的分辨率，还大幅缩短了分析时间，降低了研究成本。借助该技术，科研人员能够深入了解中药炮制过程中化学成分的动态变化，为优化炮制工艺、阐释炮制机制提供了强大的科研工具，是一种简便、高效的中药炮制质量控制方法。然而，当前 UPLC-MS 在中药炮制研究中的应用仍存在三大核心矛盾：①高维数据与低解释度的矛盾，技术可同时检测上千种成分，但多数成分的炮制转化机制不明；②静态检测与动态过程的脱节，现有研究多聚焦炮制“终点”的化学成分差异，未能实时追踪炮制过程中成分的动态转化轨迹；③化学指标与药效关联的缺失，大量成分含量变化数据尚未与药效/毒性评价形成闭环验证。

对此，UPLC-MS 技术在未来发展中，需要构建“炮制过程-化学指纹-生物效应”三元模型，整合 UPLC-MS 多组学数据与斑马鱼模型、肠吸收模型等生物评价结果，建立成分变化与药效/毒性的量化关系。开发原位实时监测技术，结合在线微萃取探头与便携式 MS，实现炮制过程中化学成分的实时追踪。推动人工智能驱动的炮制智能决策，利用深度学习算法分析历史炮制数据，建立炮制工艺智能优化模型，实现“成分导向”的精准炮制。

尽管 UPLC-MS 技术作用关键，其局限性亦不容忽视。一方面，分析对样品要求苛刻，纯度、浓度等因素会影响结果；微量成分检测受仪器灵敏度制约。另一方面，技术成本高昂，UPLC-MS 仪器购置费用远超常规设备，单台 UPLC- 高分辨 MS 联用仪价格可达 300 万元，且后续维护、耗

材及数据处理软件年均成本增加 30% 以上，基层单位难以普及；专业人才储备不足，技术操作需同时掌握 MS 解析、中药化学及炮制工艺的复合型人才，而当前跨学科培训体系尚未完善。复杂数据处理（如代谢组学分析）高度依赖专业人员经验，导致结果解读存在主观偏差。

未来需着力于以下方面：发展高兼容性前处理方法，解决中药复杂基质干扰；研发新型离子化技术（如解吸电喷雾电离、快速蒸发电离质谱），提升难电离成分的检测灵敏度；建立炮制专属 MS 数据库，整合化合物结构、裂解规律及炮制转化路径信息。通过省级重点实验室牵头，配置高端 UPLC-MS 核心设备共享网络，结合远程操作系统降低基层使用成本中的多机构合作模式；开发自动化分析流程，构建中药炮制专属分析模块（如炮制样品前处理试剂盒、一键化数据处理包），减少人工干预环节，降低对操作人员的技术依赖；制定炮制分析技术规范，联合药典委员会制定中药炮制品 UPLC-MS 检测相关指南，明确不同炮制品类（炒 / 蒸 / 煅等）的标准化前处理方法与质控参数，提升跨实验室数据一致性。

UPLC-MS 技术已成为解码中药炮制化学内涵的“核心引擎”，但其价值远不止于成分分析。通过深度融合人工智能、原位监测与多维度生物评价，该技术有望推动中药炮制从“经验传承”迈向“数字智造”，最终建立“化学可测、机制明确、效应可控”的现代炮制科学体系。

### 参考文献

- 梅余琪, 魏丽芳, 邹立思, 等. 鸡血藤中多元活性成分动态积累的分析与评价 [J]. 中国中药杂志, 2020, 45(3): 584–595. [Mei YQ, Wei LF, Zou LS, et al. Analysis and evaluation of dynamic accumulation of multiple active components in Spatholobus suberectus[J]. China Journal of Chinese Materia Medica, 2020, 45(3): 584–595.] DOI: [10.19540/j.cnki.cjcm.20191107.202](https://doi.org/10.19540/j.cnki.cjcm.20191107.202).
- 王沛, 李建定. UPLC-MS/MS 法在药物成分分析领域的应用研究进展 [J]. 科技视界, 2015, (25): 319, 329. [Wang P, Li JD. Application research progress of UPLC-MS/MS in pharmaceutical component analysis[J]. Science & Technology Vision, 2015, (25): 319, 329.] DOI: [10.19694/j.cnki.issn2095-2457.2015.25.240](https://doi.org/10.19694/j.cnki.issn2095-2457.2015.25.240).
- Zhao YY, Lin RC. UPLC-MS<sup>E</sup> application in disease biomarker discovery: the discoveries in proteomics to metabolomics[J]. Chem Biol Interact, 2014, 215: 7–16. DOI: [10.1016/j.cbi.2014.02.014](https://doi.org/10.1016/j.cbi.2014.02.014).
- Liu G, Qiao S, et al. Simultaneous determination of 18 chemical constituents in traditional Chinese medicine of antitussive by UPLC-MS-MS[J]. J Chromatogr Sci, 2016, 54(9): 1540–1552.

- DOI: [10.1093/chromsci/bmw099](https://doi.org/10.1093/chromsci/bmw099).
- 5 徐东升, 何云娇, 钟灵俊. UPLC-QQQ-MS/MS 在中药分析中的应用研究进展 [J]. 中医药临床杂志, 2021, 33(11): 2247–2250. [Xu DS, He YJ, Zhong LJ. Research progress on the application of UPLC–QQQ–MS/MS in traditional Chinese medicine analysis[J]. Journal of Clinical Chinese Medicine, 2021, 33(11): 2247–2250.] DOI: [10.16448/j.cjcm.2021.1149](https://doi.org/10.16448/j.cjcm.2021.1149).
  - 6 Huang H, Liu M, Chen P. Recent advances in ultra-high performance liquid chromatography for the analysis of traditional Chinese medicine[J]. Anal Lett, 2014, 47(11): 1835–1851. DOI: [10.1080/00032719.2014.888727](https://doi.org/10.1080/00032719.2014.888727).
  - 7 Jin H, Liu Y, Guo Z, et al. Recent development in liquid chromatography stationary phases for separation of traditional Chinese medicine components[J]. J Pharm Biomed Anal, 2016, 130: 336–346. DOI: [10.1016/j.jpba.2016.06.008](https://doi.org/10.1016/j.jpba.2016.06.008).
  - 8 车爽. UPLC–Q–TOF–MS 联合 UNIFI 技术在中药分析领域的应用进展 [J]. 天津药学, 2022, 34(3): 67–74. [Che S. Advances in the application of UPLC–Q–TOF–MS combined with UNIFI technology in the field of traditional Chinese medicine analysis[J]. Tianjin Pharmacy, 2022, 34(3): 67–74.] DOI: [10.3969/j.issn.1006-5687.2022.03.016](https://doi.org/10.3969/j.issn.1006-5687.2022.03.016).
  - 9 李书晚, 廖扬振, 王龙飞, 等. 基于 UPLC–Q–TOF–MS/MS 法、HPLC 指纹图谱、含量测定评价覆盆子质量 [J]. 中成药, 2025, 47(4): 1077–1084. [Li SW, Liao YZ, Wang LF, et al. Evaluation of Raspberry quality based on UPLC–Q–TOF–MS/MS, HPLC fingerprint, and content determination[J]. Chinese Traditional Patent Medicine, 2025, 47(4): 1077–1084.] DOI: [10.3969/j.issn.1001-1528.2025.04.002](https://doi.org/10.3969/j.issn.1001-1528.2025.04.002).
  - 10 杨红霞, 许文, 黄泽豪. 基于 UPLC–Q–TOF–MS/MS 的银线莲化学成分分析 [J]. 中国现代应用药学, 2025, 42(6): 948–957. [Yang HX, Xu W, Huang ZH. Chemical constituent analysis of Silver-vein orchid (*Goodyera schlechtendaliana*) based on UPLC–Q–TOF–MS/MS[J]. Chinese Journal of Modern Applied Pharmacy, 2025, 42(6): 948–957.] DOI: [10.13748/j.cnki.issn1007-7693.20232655](https://doi.org/10.13748/j.cnki.issn1007-7693.20232655).
  - 11 王宏宇, 赵思俊, 李存. UPLC–Q–TOF–MS 技术在食品中药物残留分析上的应用进展 [J]. 动物医学进展, 2020, 41(10): 121–124. [Wang HY, Zhao SJ, Li C. Advances in the application of UPLC–Q–TOF–MS technology for the analysis of veterinary drug residues in food[J]. Progress in Veterinary Medicine, 2020, 41(10): 121–124.] DOI: [10.16437/j.cnki.1007-5038.2020.10.022](https://doi.org/10.16437/j.cnki.1007-5038.2020.10.022).
  - 12 赵红霞. 超高效液相色谱 – 三重四极杆串联质谱 (UPLC–QqQ–MS/MS) 对农作物中农药多残留的检测研究 [D]. 济南: 山东大学, 2013. DOI: [10.7666/d.Y2331950](https://doi.org/10.7666/d.Y2331950).
  - 13 王琳, 姜大伟, 许海鹏, 等. 超高效液相色谱 – 三重四极杆质谱法在检测水中农药残留的应用 [J]. 中国高新科技, 2021, (19): 94–95. [Wang L, Jiang DW, Xu HP, et al. Application of ultra performance liquid chromatography–triple quadrupole mass spectrometry (UPLC–QqQ–MS) for detection of pesticide residues in water samples[J]. China High and New Technology, 2021, (19): 94–95.] DOI: [10.3969/j.issn.2096-4137.2021.19.045](https://doi.org/10.3969/j.issn.2096-4137.2021.19.045).
  - 14 罗洲飞, 徐梦薇, 陆静, 等. 高效液相色谱 – 三重四极杆串联质谱测定环境水样中 20 种环境内分泌干扰物 [J]. 环境化学, 2020, 39(7): 1923–1933. [Luo ZF, Xu MW, Lu J, et al. Determination of 20 Environmental endocrine disruptors in environmental water samples by high performance liquid chromatography–triple quadrupole tandem mass spectrometry[J]. Environmental Chemistry, 2020, 39(7): 1923–1933.] DOI: [10.7524/j.issn.0254-6108.2019050706](https://doi.org/10.7524/j.issn.0254-6108.2019050706).
  - 15 孙铭, 古其会, 张菊梅, 等. 超高效液相色谱 – 三重四极杆质谱联用检测饮用水中 N– 亚硝胺类消毒副产物 [J]. 食品科学, 2022, 43(2): 310–315. [Sun M, Gu QH, Zhang JM, et al. Detection of N-nitrosamine disinfection by-products in drinking water by ultra performance liquid chromatography–triple quadrupole mass spectrometry (UPLC–QqQ–MS)[J]. Food Science, 2022, 43(2): 310–315.] DOI: [10.7506/spkx1002-6630-20210425-351](https://doi.org/10.7506/spkx1002-6630-20210425-351).
  - 16 汤钜添, 陈少茹, 张诚光. 基于 UPLC–QE–Orbitrap–MS 技术鉴定中药三棱入血成分 [J]. 深圳中西医结合杂志, 2024, 34(5): 72–74. [Tang JT, Chen SR, Zhang CG. Identification of blood entering components of traditional Chinese medicine Rhizoma sparganiis using UPLC–QE–Orbitrap–MS technology[J]. Shenzhen Journal of Integrated Traditional Chinese and Western Medicine, 2024, 34(5): 72–74.] DOI: [10.16458/j.cnki.1007-0893.2024.05.021](https://doi.org/10.16458/j.cnki.1007-0893.2024.05.021).
  - 17 Chen CL, Chen YT, Liao WY, et al. Urinary metabolomic analysis of prostate cancer by UPLC–FTMS and UPLC–Ion Trap MS[J]. Diagnostics (Basel), 2023, 13(13): 2270. DOI: [10.3390/diagnostics13132270](https://doi.org/10.3390/diagnostics13132270).
  - 18 Kim JH, Lee Y, Lee G, et al. Quantitative interrelation between atractylenolide I, II, and III in *Atractylodes japonica* Koidzumi Rhizomes, and evaluation of their oxidative transformation using a biomimetic kinetic model[J]. ACS Omega, 2018, 3(11): 14833–14840. DOI: [10.1021/acsomega.8b02005](https://doi.org/10.1021/acsomega.8b02005).
  - 19 胡振宇, 卜俊文, 吴宇, 等. 基于 UPLC–LTQ–Orbitrap MS 技术分析醋润蜜麸炒柴胡炮制过程中成分差异 [J]. 中草药, 2025, 56(9): 3109–3120. [Hu ZY, Bu JW, Wu Y, et al. Analyzing differences in components of Bupleuri radix by vinegar wetting and honey bran fried during processing based on UPLC–LTQ–Orbitrap MS[J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2025, 56(9): 3109–3120.] DOI: [10.7501/j.issn.0253-2670.2025.09.009](https://doi.org/10.7501/j.issn.0253-2670.2025.09.009).
  - 20 Zhang W, Ren K, Ren S, et al. UPLC–Q–exactive–MS analysis for hepatotoxicity components of *Evodiae fructus* based on spectrum-toxicity relationship[J]. J Chromatogr B Analyt Technol Biomed Life Sci, 2021, 1176: 122772. DOI: [10.1016/j.jchromb.2021.122772](https://doi.org/10.1016/j.jchromb.2021.122772).
  - 21 Yang R, Zhang Y, Wang L, et al. UPLC–Q–exactive/MS–based metabolomics revealed protective effect of *Zingiberis rhizome* and its processed product on deficiency–cold and hemorrhagic syndrome rats[J]. Biomed Chromatogr, 2022, 36(8): e5412. DOI: [10.1002/bmc.5412](https://doi.org/10.1002/bmc.5412).
  - 22 任天航, 李喆, 廉婧, 等. UPLC–MS 法测定酸枣仁炮制前后的 12 种成分 [J]. 华西药学杂志, 2023, 38(3): 300–305. [Ren TH, Li Z, Lian J, et al. Determination of 12 components in *Ziziphi spinosae semen* before and after processing by UPLC–MS[J]. West China Journal of Pharmaceutical Sciences, 2023, 38(3): 300–305.] DOI: [10.13375/j.cnki.wcjps.2023.03.014](https://doi.org/10.13375/j.cnki.wcjps.2023.03.014).

- 23 眭珂, 李耀磊, 王丹丹, 等. UPLC-MS/MS 法测定炮制前后款冬花中款冬碱的含量 [J]. 中国民族民间医药, 2021, 30(20): 28–31. [Zan K, Li YL, Wang DD, et al. Determination of tussilagone in Tussilago farfara before and after processing by UPLC-MS/MS[J]. Chinese Journal of Ethnomedicine and Ethnopharmacy, 2021, 30(20): 28–31.] DOI: [10.3969/j.issn.1007-8517.2021.20.zgmzmjyzz202120008](https://doi.org/10.3969/j.issn.1007-8517.2021.20.zgmzmjyzz202120008).
- 24 张凡, 张诗雯, 李金昱, 等. UPLC-QTOF-MS 结合主成分分析法考察生晒参与红参的化学成分差异 [J]. 中华中医药学刊, 2022, 40(2): 75–81. [Zhang F, Zhang SW, Li JY, et al. Investigation on chemical composition differences between sun-dried ginseng and red ginseng using UPLC-QTOF-MS combined with principal component analysis[J]. Chinese Journal of Traditional Chinese Medicine, 2022, 40(2): 75–81.] DOI: [10.13193/j.issn.1673-7717.2022.02.017](https://doi.org/10.13193/j.issn.1673-7717.2022.02.017).
- 25 陈佩东, 徐丹洋, 李芳, 等. UPLC-MS 法分析黄芩炮制前后化学成分变化 [J]. 中成药, 2013, 35(4): 784–788. [Chen PD, Xu DY, Li F, et al. Analysis of chemical composition changes in Scutellaria baicalensis before and after processing using UPLC-MS[J]. Chinese Traditional Patent Medicine, 2013, 35(4): 784–788.] DOI: [10.3969/j.issn.1001-1528.2013.04.035](https://doi.org/10.3969/j.issn.1001-1528.2013.04.035).
- 26 管汉亮, 钱大玮, 段金蕨, 等. 银杏叶干燥方法的优化及其机制探讨 [J]. 中国中药杂志, 2013, 38(13): 2140–2146. [Guan HL, Qian DW, Duan JA, et al. Study on optimization of drying method and its mechanism in Ginkgo biloba leaves[J]. China Journal of Chinese Materia Medica, 2013, 38(13): 2140–2146.] DOI: [10.4268/cjemm20131321](https://doi.org/10.4268/cjemm20131321).
- 27 邵长鑫, 林欢欢, 靳晓杰, 等. 黄芪的炮制历史沿革及现代研究进展 [J]. 中草药, 2023, 54(15): 5057–5074. [Shao CX, Lin HH, Jin XJ, et al. Historical evolution and modern research progress of processing of Astragalus membranaceus (Huangqi)[J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2023, 54(15): 5057–5074.] DOI: [10.7501/j.issn.0253-2670.2023.15.030](https://doi.org/10.7501/j.issn.0253-2670.2023.15.030).
- 28 刘蓬蓬, 单国顺, 张凡, 等. UPLC-MS 比较有机酸定向炮制黄芪中 12 种活性成分的含量 [J]. 中国中药杂志, 2020, 45(1): 113–118. [Liu PP, Shan GS, Zhang F, et al. Comparison of 12 constituents of Astragali radix directionally processed with organic acid by UPLC-MS[J]. China Journal of Chinese Materia Medica, 2020, 45(1): 113–118.] DOI: [10.19540/j.cnki.cjemm.20191001.307](https://doi.org/10.19540/j.cnki.cjemm.20191001.307).
- 29 Xing X, Sun Z, Yang M, et al. Quantitative Evaluation of twelve Major components of sulfur-fumigated Astragali radix with different durations by UPLC-MS[J]. Molecules, 2018, 23(10): 2609. DOI: [10.3390/molecules23102609](https://doi.org/10.3390/molecules23102609).
- 30 杨璐嘉, 张传洋, 王丽娟, 等. 基于 UPLC-Q-Orbitrap HRMS 法比较不同炮制方法下山楂化学成分差异 [J]. 山东化工, 2023, 52(10): 138–145. [Yang LJ, Zhang CY, Wang LJ, et al. Comparison of chemical composition differences in Crataegus pinnatifidae (Shanzha) under different processing methods based on UPLC-Q-Orbitrap HRMS[J]. Shandong Chemical Industry, 2023, 52(10): 138–145.] DOI: [10.19319/j.cnki.issn.1008-021x.2023.10.009](https://doi.org/10.19319/j.cnki.issn.1008-021x.2023.10.009).
- 31 叶协滔, 钟凌云, 张大永, 等. 基于 UPLC/Q-TOF-MS/MS 分析川乌生品及其不同炮制品化学成分差异 [J]. 中华中医药杂志, 2021, 36(10): 5837–5842. [Ye XT, Zhong LY, Zhang DY, et al. Analysis of chemical composition differences between raw Aconitum carmichaelii (Chuanwu) and its different processed products based on UPLC/Q-TOF-MS/MS[J]. Chinese Journal of Traditional Chinese Medicine, 2021, 36(10): 5837–5842.] <https://www.cnki.com.cn/Article/CJFDTotal-BXYY202110029.htm>.
- 32 孙钰婧, 霍志鹏, 王玉, 等. 基于 UPLC-Q-TOF/MSE 分析不同炮制时间炒车前子的化学成分变化规律 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2022, 28(4): 146–153. [Sun YJ, Huo ZP, Wang Y, et al. Analysis of chemical component variation patterns in stir-fried Plantago asiatica (Cheqianzi) with different processing times based on UPLC-Q-TOF/MSE[J]. Chinese Journal of Experimental Traditional Medical Formulae, 2022, 28(4): 146–153.] DOI: [10.13422/j.cnki.syfjx.202111761](https://doi.org/10.13422/j.cnki.syfjx.202111761).
- 33 熊之琦, 李莹, 徐媛, 等. 基于 UPLC-Q/TOF-MS 研究蚕砂不同炮制品主成分差异 [J]. 江西中医药大学学报, 2021, 33(3): 89–94. [Xiong ZQ, Li Y, Xu Y, et al. Study on differences in major components of different processed products of Bombyx batryticatus based on UPLC-Q/TOF-MS [J]. Journal of Jiangxi University of Traditional Chinese Medicine, 2021, 33(3): 89–94.] <https://www.cnki.com.cn/Article/CJFDTOTAL-XYXB202103024.htm>.
- 34 赵琴, 黄惠红, 汪颖舒, 等. UPLC-Q-TOF-MS/MS 分析不同黑豆汁蒸制法对何首乌成分的影响 [J]. 中成药, 2020, 42(8): 2211–2217. [Zhao Q, Huang HH, Wang YS, et al. Analysis of the effects of different steaming methods with black soybean juice on the components of Fallopia multiflora using UPLC-Q-TOF-MS/MS[J]. Chinese Traditional Patent Medicine, 2020, 42(8): 2211–2217.] DOI: [10.3969/j.issn.1001-1528.2020.08.051](https://doi.org/10.3969/j.issn.1001-1528.2020.08.051).
- 35 Jiang H, Yang L, Xing X, et al. A UPLC-MS/MS application for comparisons of the hepatotoxicity of raw and processed Xanthii fructus by energy metabolites[J]. RSC Adv, 2019, 9(5): 2756–2762. DOI: [10.1039/c8ra08272c](https://doi.org/10.1039/c8ra08272c).
- 36 Sun LM, Zhang B, Wang YC, et al. Metabolomic analysis of raw Pinelliae rhizoma and its alum-processed products via UPLC-MS and their cytotoxicity[J]. Biomed Chromatogr, 2019, 33(2): e4411. DOI: [10.1002/bmc.4411](https://doi.org/10.1002/bmc.4411).
- 37 Sun W, Yan B, Wang R, et al. In vivo acute toxicity of detoxified fuzi (lateral root of Aconitum carmichaeli) after a traditional detoxification process[J]. EXCLI J, 2018, 17: 889–899. DOI: [10.17179/excli2018-1607](https://doi.org/10.17179/excli2018-1607).
- 38 He H, Gao F, Zhang Y, et al. Effect of processing on the reduction of pesticide residues in a traditional Chinese medicine (TCM)[J]. Food Addit Contam Part A Chem Anal Control Expo Risk Assess, 2020, 37(7): 1156–1164. DOI: [10.1080/19440049.2020.1748725](https://doi.org/10.1080/19440049.2020.1748725).
- 39 Liu Y, Zheng Z, Liu H, et al. Residual change of four pesticides in the processing of Pogostemon cablin and associated factors[J]. Molecules, 2023, 28(18): 6675. DOI: [10.3390/molecules28186675](https://doi.org/10.3390/molecules28186675).
- 40 Dong J, Yin Z, Su L, et al. Comparative pharmacokinetic analysis of raw and steamed Panax notoginseng roots in rats by UPLC-MS/MS for simultaneously quantifying seven saponins[J]. Pharm Biol,

- 2021, 59(1): 653–661. DOI: [10.1080/13880209.2021.1928239](https://doi.org/10.1080/13880209.2021.1928239).
- 41 Xu S, Qi X, Liu Y, et al. UPLC–MS/MS of atractylenolide I, atractylenolide II, atractylenolide III, and atractyloside A in rat plasma after oral administration of raw and wheat bran–processed Atractylodis rhizoma[J]. Molecules, 2018, 23(12): 3234. DOI: [10.3390/molecules23123234](https://doi.org/10.3390/molecules23123234).
- 42 Cao M, Liu Y, Jiang W, et al. UPLC/MS–based untargeted metabolomics reveals the changes of metabolites profile of *Salvia miltiorrhiza* bunge during Sweating processing[J]. Sci Rep, 2020, 10(1): 19524. DOI: [10.1038/s41598-020-76650-w](https://doi.org/10.1038/s41598-020-76650-w).
- 43 Tao Y, Huang S, Yan J, et al. Establishment of a rapid and sensitive UPLC–MS/MS method for pharmacokinetic determination of nine alkaloids of crude and processed *Corydalis turtschaninovii* Besser aqueous extracts in rat plasma[J]. J Chromatogr B Analyt Technol Biomed Life Sci, 2019, 1124: 218–225. DOI: [10.1016/j.jchromb.2019.06.018](https://doi.org/10.1016/j.jchromb.2019.06.018).
- 44 Zhao Q, Shan G, Xu D, et al. Simultaneous analysis of twelve bile acids by UPLC–MS and exploration of the processing mechanism of bile arisaema by fermentation[J]. J Anal Methods Chem, 2019, 2019: 2980596. DOI: [10.1155/2019/2980596](https://doi.org/10.1155/2019/2980596).
- 45 Wang X, Yu Y, Pei L, et al. Comparison of the pharmacokinetics of timosaponin AIII, timosaponin BIII, and mangiferin extracted from crude and salt–processed *Anemarrhenae rhizoma* by UPLC–MS/MS[J]. RSC Adv, 2023, 13(18): 11919–11928. DOI: [10.1039/d2ra07979h](https://doi.org/10.1039/d2ra07979h).
- 46 Yu YQ, Yan L, Wang XT, et al. Study on the effects of Chinese materia medica processing on the hypoglycemic activity and chemical composition of *Anemarrhenae rhizoma*[J]. Evid Based Complement Alternat Med, 2021, 2021: 6211609. DOI: [10.1155/2021/6211609](https://doi.org/10.1155/2021/6211609).

收稿日期：2025 年 04 月 05 日 修回日期：2025 年 06 月 04 日

本文编辑：钟巧妮 李阳