

# 基于液质联用技术分析建昌帮蜜糠炒山药炮制过程中成分差异



袁娟丽<sup>1,2</sup>, 卜俊文<sup>1</sup>, 乐依荻<sup>1</sup>, 马玉山<sup>1</sup>, 叶喜德<sup>1</sup>

1. 江西中医药大学药学院 (南昌 330004)

2. 宜春市袁州区妇幼保健计划生育服务中心药剂科 (江西宜春 336000)

**【摘要】目的** 采用超高效液相色谱-四极杆飞行时间串联质谱 (UPLC-Q-TOF-MS) 技术, 分析建昌帮蜜糠炒山药在炮制过程中化学成分的变化。**方法** 色谱分离使用 ACQUITY UPLC BEH C<sub>18</sub> 色谱柱 (100 mm × 2.2 mm, 1.7 μm), 流动相为 0.05% 甲酸水溶液-乙腈, 梯度洗脱; 质谱检测在正、负离子模式下进行, 采用电喷雾离子源, 扫描范围为  $m/z$  50~1 300。通过自建数据库及相关文献比对, 结合 Peak View 1.2 软件对山药生品及 1~15 min 不同炮制时间的蜜糠炒制品进行化学成分分析, 并利用 SIMCA 14.1 软件进行主成分分析和正交偏最小二乘法-判别分析, 以变量重要性投影值大于 1 为标准筛选差异性成分。**结果** 从山药生品及其蜜糠炮制品中共鉴定出 62 种化学成分, 包括酚酸类 11 种、黄酮类 5 种、氨基酸类 16 种、核苷类 5 种、糖类 4 种及其他类化合物 21 种。通过峰面积比较发现, 葡萄糖基丁香酸、丁香酸、阿魏酸、脯氨酸、鸟苷、苯乙烯、亚麻酸和大叶茜草素为炮制后新增成分; 其余成分在炮制 3 min 时含量达到最高, 随着炮制时间延长, 所鉴定化学成分的含量总体呈下降趋势。**结论** UPLC-Q-TOF-MS 技术能够准确、系统地鉴定山药中的化学成分, 为深入研究蜜糠炒山药的炮制机制提供了基础。

**【关键词】** 蜜糠炒山药; 超高效液相色谱-四极杆飞行时间串联质谱; 主成分分析; 正交偏最小二乘法-判别分析

**【中图分类号】** R283

**【文献标识码】** A

Analysis of compositional differences during the processing of Jianchangbang honey bran stir fried yam using liquid chromatography-mass spectrometry technology

YUAN Juanli<sup>1,2</sup>, BU Junwen<sup>1</sup>, LE Yidi<sup>1</sup>, MA Yushan<sup>1</sup>, YE Xide<sup>1</sup>

1. School of Pharmacy, Jiangxi University of Chinese Medicine, Nanchang 330004, China

2. Department of Pharmacy, Yuanzhou District Maternal and Child Health and Family Planning Service Center of Yichun City, Yichun 336000, Jiangxi Province, China

Corresponding author: YE Xide, Email: 20070994@jxutcm.edu.cn

**【Abstract】Objective** To analyze the changes in chemical composition of Jianchangbang honey bran stir fried yam during the processing by ultra-high performance liquid chromatography quadrupole time-of-flight tandem mass spectrometry (UPLC-Q-TOF-MS). **Methods** The chromatographic separation was performed using an ACQUITY UPLC BEH C<sub>18</sub> column (100 mm × 2.2 mm, 1.7 μm), with a mobile phase of 0.05% formic acid aqueous solution-acetonitrile and

DOI: 10.12173/j.issn.2097-4922.202506088

基金项目: 江西省重点研发计划项目 (20232BBG70013)

通信作者: 叶喜德, 博士, 教授, 博士研究生导师, Email: 20070994@jxutcm.edu.cn

<https://yxqy.whuznhmedj.com>

gradient elution. Mass spectrometry detection was carried out in the positive and negative ion modes, using an electrospray ionization source, with a scanning range of  $m/z$  50-1 300. By comparison of self built databases and relevant literature, combined with Peak View 1.2 software, chemical composition analysis was conducted on raw yam and honey bran stir fried products with different processing times of 1-15 minutes. SIMCA 14.1 software was used for principal component analysis and orthogonal partial least squares discriminant analysis, and differential components were screened based on variable importance projection values greater than 1. **Results** A total of 62 chemical constituents were identified from raw yam and honey bran processed products, including 11 phenolic acids, 5 flavonoids, 16 amino acids, 5 nucleosides, 4 carbohydrates, and 21 other compounds. Through the comparison of peak area, it was found that glucosyl syringic acid, syringic acid, ferulic acid, proline, guanosine, styrene, linolenic acid and mollugin were new components after processing. The content of other components was the highest at 3 min. With the prolongation of processing time, the content of chemical components identified in yam showed a decreasing trend. **Conclusion** UPLC-Q-TOF-MS technology can accurately and systematically identify the chemical components contained in yam, which lays a foundation for further study of honey bran fried yam.

**【Keywords】** Honey bran stir fried yam; Ultra-high performance liquid chromatography quadrupole time-of-flight tandem mass spectrometry; Principal component analysis; Orthogonal partial least squares-discriminant analysis

山药为薯蓣科植物薯蓣 (*Dioscorea opposita* Thunb.) 的干燥根茎, 主产于河南、河北等地, 其味甘、性平, 具有健脾养胃、生津润肺、固肾涩精的功效, 临床上常用于治疗糖尿病等<sup>[1]</sup>。山药为传统药食两用作物, 含有多种营养物质, 如多糖类、皂苷类、氨基酸、尿囊素等, 其中多糖类是山药生物活性中的主要有效成分, 有抗癌、抗氧化、降血糖、增强免疫功能的功效, 在食品、药品与保健品等领域都有广泛应用<sup>[2]</sup>。

“建昌帮”是我国江西著名的药帮, 经过建昌帮特色炮制方法得到的饮片, 具有形色气味俱佳、毒性弱、疗效高的特点<sup>[3]</sup>。蜜糠炒山药是建昌帮特色炮制品种, 其辅料蜜糠综合了谷糠与蜂蜜的功效, 具有健脾祛湿、润肺止咳的作用, 将蜜糠与山药拌炒, 可为其缓和药效、添香赋色<sup>[4]</sup>。山药经蜜糠炒后能够增强补气益脾的作用<sup>[5]</sup>。本研究采用超高效液相色谱-四极杆飞行时间串联质谱技术 (ultra performance liquid chromatography-quadrupole time-of-flight mass spectrometry, UPLC-Q-TOF-MS) 对山药的化学成分进行检测, 该技术具备优异的分离能力、高分辨率和灵敏的检测性能, 适用于复杂成分的鉴定分析, 通过该方法的应用, 可为阐明山药炮制过程中的化学变化及其作用机理提供参考。

## 1 材料

### 1.1 主要仪器

Zeno TOF 7600 型高分辨质谱 (美国 AB SCIEX 公司); Nexera X2 LC-40D 型超高效液相色谱仪 (日本岛津公司); FA1004N 型电子天平 (上海精密科学仪器有限公司); KQ-500E 型超声波清洗器 (昆山市超声仪器有限公司); 111B 型二两装高速中药粉碎机 (瑞安市永利制药机械有限公司); TDL-80-2C 型低速台式离心机 (上海安亭科学仪器厂)。

### 1.2 主要药品与试剂

山药生品 (批号: 230601) 购于安徽亳州药材市场, 产地为河南, 经江西中医药大学中药鉴定室刘应蛟副教授鉴定为薯蓣科植物薯蓣 *Dioscorea opposita* Thunb. 的干燥根茎; 糠 (江西圣田实业有限公司, 批号: 211213); 炼蜜 (上海冠生园蜂制品有限公司, 批号: 153204X22); 乙腈为色谱纯, 其余试剂均为分析纯, 水为娃哈哈纯净水。

## 2 方法与结果

### 2.1 样品的制备

#### 2.1.1 蜜糠

按比例将蜂蜜与沸水混合搅拌至完全溶解,

制备成蜜水溶液。取净糠置于热锅中,以文火炒热后,将制备好的蜜水溶液均匀淋洒于糠粒表面,快速翻炒使辅料均匀附着。持续翻炒至糠粒表皮呈现油润光泽且触感微粘,取出自然冷却后即得蜜糠。每处理 100 g 净糠,需加入 20 g 炼蜜和 4 g 沸水。

### 2.1.2 山药生品及蜜糠炒山药

取山药生品,平行制备 5 份样品,依次编号为 SP1~SP5。

根据《建昌帮中药传统炮制法》<sup>[6]</sup>记载,炮制方法如下:以武火加热锅体至底部呈微红色,投入蜜糠快速翻炒;待冒青烟时,将其均匀铺于锅底及周边,随即按药材与辅料 2:1 的比例投入干燥生药片,并用周边蜜糠覆盖药材 10 s;最后快速翻炒。本研究根据试验需求,分别炒制 1~15 min,共得到 15 份样品,取出后筛去蜜糠,即得不同炮制时间的蜜糠炒山药样品,依次标记为 PZ1~PZ15。

### 2.1.3 供试品溶液

精密称取山药生品及 15 批蜜糠制品粉末(过三号筛)各 1 g,分别置于 25 mL 具塞锥形瓶中,加入 50% 甲醇 10 mL,超声处理(功率:240 W,频率:45 kHz)30 min,取出放冷,补足减失重量,离心,取上清液经 0.22  $\mu\text{m}$  微孔滤膜过滤,即得供试品溶液。

## 2.2 检测条件

### 2.2.1 色谱条件

采用 ACQUITY UPLC BEH  $\text{C}_{18}$  色谱柱(100 mm $\times$ 2.2 mm, 1.7  $\mu\text{m}$ );流动相为 0.05% 甲酸水溶液(A)–乙腈(B),梯度洗脱(0~10 min, 3% $\rightarrow$ 30% B; 10~20 min, 30% $\rightarrow$ 99% B; 20~26 min, 99% B; 26~26.1 min, 99% $\rightarrow$ 3% B; 26.1~30 min, 3% B);流速为 0.4 mL/min;柱温为 40 $^{\circ}\text{C}$ ;进样量为 5  $\mu\text{L}$ 。

### 2.2.2 质谱条件

采用电喷雾离子源(electrospray ionization, ESI),离子源温度为 500 $^{\circ}\text{C}$ ,雾化气与加热气压力均为 50 psi;分别在正、负离子模式下进行数据采集:一级质谱母离子扫描范围为 50~1 300  $m/z$ ,二级质谱扫描范围为 50~1 000  $m/z$ ;在正离子模式下,喷雾电压为 5 500 V,解簇电压为 60 V,碰撞能量为 35 eV,碰撞能量扩展为 15 eV;负离子模式下,喷雾电

压为 -4 500 V,解簇电压为 -60 V,碰撞能量为 -35 eV,碰撞能量扩展为 15 eV。

## 2.3 化学成分鉴定

通过检索 CNKI、万方及 PubMed 等数据库,构建了山药的化学成分质谱信息表。采用“2.2”项下色谱与质谱条件,对“2.1.2”项下山药生品及 PZ1~PZ15 15 批蜜糠炮制品进行分析,在正、负离子模式下分别平行采集 2 次数据,获得其基峰离子流图(图 1)。初步比较发现,炮制前后化学成分组成存在明显差异。

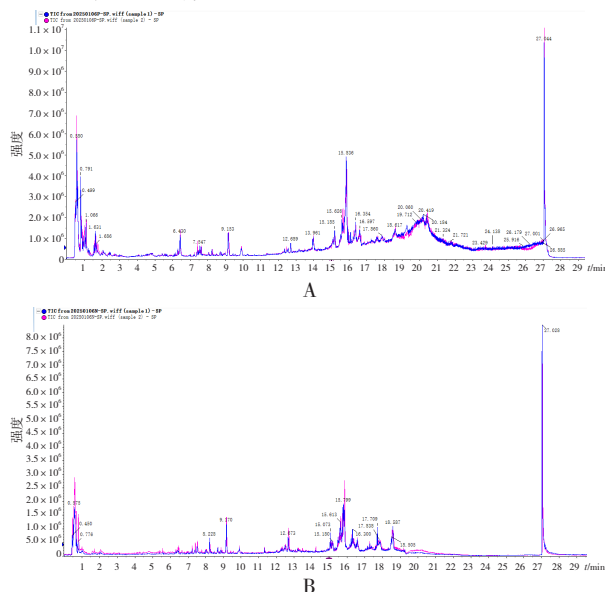


图1 山药提取物在正离子模式(A)和负离子模式(B)下的基峰离子

Figure 1. The base peak ions of yam extract in positive ion mode (A) and negative ion mode (B)

进一步采用 PeakView 1.2 软件进行目标化合物筛查,将数据库中各成分的分子式导入系统,设定质量误差范围为  $\pm 5$  ppm,并对比其二级质谱碎片离子信息,结合裂解规律、特征碎片及保留时间等参数进行综合鉴定。最终从山药生品及蜜糠炮制品中共同鉴定出 62 个化学成分,具体见表 1。

## 2.4 化学成分解析

### 2.4.1 酚酸类

本研究共鉴定出 11 个酚酸类成分,该类成分在植物中分布广泛,并具有抗氧化与抗肿瘤等药理活性。现以化合物 4 为例解析其裂解过程:在负离子模式下,该化合物显示  $m/z$  577.135 15  $[\text{M}-\text{H}]^-$  的准分子离子峰,推测其分子式为  $\text{C}_{30}\text{H}_{26}\text{O}_{12}$ 。质谱分析中主要观察到两种

表1 山药生品与蜜糠炒制品中化学成分在生品和蜜糠炒制品中的鉴定  
Table 1. Identification of chemical constituents in raw yam and honey bran stir fried products

| 分类   | 编号 | 保留时间<br>(min) | 化合物                                    | 分子式                                                           | 理论值        | 实测值        | 二级碎片离子 (m/z)                                          | 离子                 | 偏差<br>(ppm) | 生品 | 炮制品 | 参考文献   |
|------|----|---------------|----------------------------------------|---------------------------------------------------------------|------------|------------|-------------------------------------------------------|--------------------|-------------|----|-----|--------|
| 酚酸类  | 1  | 4.47          | 儿茶素 (catechin)                         | C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> O <sub>6</sub>                | 290.079 04 | 291.086 31 | 123.053 8, 139.029 4, 147.034 5                       | [M+H] <sup>+</sup> | -1.0        | +  | +   | [7]    |
|      | 2  | 4.50          | 表儿茶素 (epicatechin)                     | C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> O <sub>6</sub>                | 290.079 04 | 289.071 76 | 159.047 8, 175.078 2, 243.069 1                       | [M-H] <sup>-</sup> | -2.1        | +  | +   | [7]    |
|      | 3  | 4.12          | 原花青素 B2 (procyanidin B2)               | C <sub>30</sub> H <sub>26</sub> O <sub>12</sub>               | 578.142 43 | 579.149 70 | 127.038 9, 287.054 2, 407.101 3, 409.091 3            | [M+H] <sup>+</sup> | 0.9         | +  | +   | [7]    |
|      | 4  | 4.12          | 原花青素 B1 (procyanidin B1)               | C <sub>30</sub> H <sub>26</sub> O <sub>12</sub>               | 578.142 43 | 577.135 15 | 125.024 4, 289.072 7, 407.077 8, 425.089 0            | [M-H] <sup>-</sup> | -3.3        | +  | +   | [7]    |
|      | 5  | 6.31          | 原花青素 (yuanke)                          | C <sub>27</sub> H <sub>20</sub> O <sub>14</sub>               | 578.163 56 | 577.156 28 | 297.040 9, 311.054 0, 473.107 9                       | [M-H] <sup>-</sup> | -1.7        | +  | +   | [7-8]  |
|      | 6  | 3.01          | 葡萄糖基丁香酸 (glucosyringic acid)           | C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> O <sub>10</sub>               | 360.105 65 | 359.098 37 | 138.032 7, 182.022 5, 197.043 6                       | [M-H] <sup>-</sup> | -2.4        | -  | +   | [7]    |
|      | 7  | 4.25          | 丁香酸 (syringic acid)                    | C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>5</sub>                 | 198.052 82 | 197.045 55 | 23.012 4, 167.001 7, 182.024 2                        | [M-H] <sup>-</sup> | -1.3        | -  | +   | [7]    |
|      | 8  | 1.97          | 香草酸 (vanillic acid)                    | C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>                  | 168.042 26 | 167.034 98 | 69.000 5, 123.010 9                                   | [M-H] <sup>-</sup> | -1.3        | +  | +   | [7]    |
|      | 9  | 12.50         | 山药素III (batatasin III)                 | C <sub>15</sub> H <sub>16</sub> O <sub>3</sub>                | 244.109 94 | 243.102 67 | 183.083 9, 228.077 2                                  | [M-H] <sup>-</sup> | 0.9         | +  | +   | [7]    |
|      | 10 | 12.82         | 山药素I (batatasin I)                     | C <sub>17</sub> H <sub>16</sub> O <sub>4</sub>                | 284.104 86 | 283.096 73 | 197.060 8, 253.051 6, 267.074 2,                      | [M-H] <sup>-</sup> | -3.0        | +  | +   | [7]    |
|      | 11 | 5.90          | 阿魏酸 (ferulic acid)                     | C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>                | 194.057 91 | 193.050 63 | 134.039 8, 178.031 7                                  | [M-H] <sup>-</sup> | -4.3        | -  | +   | [7]    |
|      | 12 | 0.60          | 芦丁 (rutin)                             | C <sub>27</sub> H <sub>30</sub> O <sub>16</sub>               | 610.153 39 | 609.146 11 | 189.006 1, 300.033 8, 301.041 5                       | [M-H] <sup>-</sup> | -4.3        | +  | +   | [7]    |
| 黄酮类  | 13 | 0.59          | 异槲皮素 (isoquercetin)                    | C <sub>31</sub> H <sub>26</sub> O <sub>12</sub>               | 464.095 48 | 463.088 20 | 151.017 8, 255.032 8, 271.028 7, 301.039 6, 463.095 8 | [M-H] <sup>-</sup> | 1.6         | +  | +   | [7]    |
|      | 14 | 9.55          | 芹菜素 (apigenin)                         | C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> O <sub>5</sub>                | 270.052 82 | 271.060 10 | 187.026 0, 228.025 9, 243.048 8                       | [M+H] <sup>+</sup> | -4.9        | +  | +   | [7]    |
| 氨基酸类 | 15 | 9.44          | 异落叶松脂素 (isolaricresinol)               | C <sub>30</sub> H <sub>24</sub> O <sub>6</sub>                | 360.157 29 | 359.150 01 | 165.052 4, 313.145 2                                  | [M-H] <sup>-</sup> | -4.0        | +  | +   | [7]    |
|      | 16 | 9.85          | 金合欢素 (acacetin)                        | C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> O <sub>5</sub>                | 284.068 47 | 283.061 20 | 183.045 4, 211.040 2, 240.043 5                       | [M-H] <sup>-</sup> | -4.1        | +  | +   | [7]    |
|      | 17 | 1.02          | 异亮氨酸 (isoleucine)                      | C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>                | 131.094 63 | 132.101 91 | 69.070 1, 86.101 1                                    | [M+H] <sup>+</sup> | -1.8        | +  | +   | [9-10] |
|      | 18 | 1.60          | L-苯丙氨酸 (L-Phenylalanine)               | C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>                 | 165.078 98 | 166.086 26 | 91.054 6, 103.056 0, 120.084 9                        | [M+H] <sup>+</sup> | -1.2        | +  | +   | [7]    |
|      | 19 | 2.09          | L-色氨酸 (L-tryptophan)                   | C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> | 204.089 88 | 205.097 15 | 118.054 3, 143.061 2, 146.050 1                       | [M+H] <sup>+</sup> | -4.4        | +  | +   | [7]    |
|      | 20 | 5.29          | N-乙酰-L-苯丙氨酸 (N-acetyl-L-phenylalanine) | C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>3</sub>               | 207.089 54 | 206.082 27 | 91.055 6, 147.045 7, 164.072 1, 206.081 5             | [M-H] <sup>-</sup> | -2.9        | +  | +   | [7]    |
|      | 21 | 1.02          | L-亮氨酸 (L-leucine)                      | C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>                | 131.094 63 | 132.101 91 | 69.070 1, 86.101 1                                    | [M+H] <sup>+</sup> | -1.8        | +  | +   | [7-10] |
|      | 22 | 0.58          | L-谷氨酸 (L-glutamic acid)                | C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>4</sub>                 | 147.053 16 | 148.060 43 | 84.046 0, 102.054 9                                   | [M+H] <sup>+</sup> | -2.1        | +  | +   | [1-11] |
|      | 23 | 0.54          | L-精氨酸 (L-arginine)                     | C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>  | 174.111 68 | 173.104 40 | 60.054 2, 70.064 3, 116.071 1                         | [M-H] <sup>-</sup> | -1.1        | +  | +   | [1-11] |
|      | 24 | 0.60          | L-丝氨酸 (L-threonine)                    | C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>                 | 105.042 59 | 106.049 87 | 60.044 5, 88.034 3                                    | [M+H] <sup>+</sup> | -3.3        | +  | +   | [1-11] |
|      | 25 | 0.58          | L-天冬氨酸 (L-aspartic acid)               | C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>4</sub>                 | 133.037 51 | 134.044 78 | 60.043 3, 88.039 7                                    | [M+H] <sup>+</sup> | -3.8        | +  | +   | [1-11] |
|      | 26 | 0.50          | L-赖氨酸 (L-lysine)                       | C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>  | 146.105 53 | 147.112 80 | 84.080 9, 103.086 4                                   | [M+H] <sup>+</sup> | -4.3        | +  | +   | [1-11] |
|      | 27 | 0.50          | L-甲硫氨酸 (L-methionine)                  | C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub> S              | 146.105 53 | 147.112 80 | 56.049 3, 104.052 7, 133.031 6                        | [M+H] <sup>+</sup> | -2.7        | +  | +   | [1-11] |
|      | 28 | 0.58          | L-苏氨酸 (L-threonine)                    | C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>3</sub>                 | 119.058 24 | 120.065 52 | 56.049 8, 74.061 1, 102.047 9                         | [M+H] <sup>+</sup> | -4.1        | +  | +   | [1-11] |

续表1

| 分类  | 编号 | 保留时间<br>(min) | 化合物                                           | 分子式                                                           | 理论值        | 实测值        | 二级碎片离子 (m/z)                                     | 离子                 | 偏差<br>(ppm) | 生品 | 炮制品 | 参考文献    |
|-----|----|---------------|-----------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|------------|------------|--------------------------------------------------|--------------------|-------------|----|-----|---------|
| 核苷类 | 29 | 0.62          | L-缬氨酸 (L-valine)                              | C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>                | 117.078 98 | 118.086 26 | 72.080 7                                         | [M+H] <sup>+</sup> | -2.5        | +  | +   | [1-11]  |
|     | 30 | 0.60          | 脯氨酸 (L-proline)                               | C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>                 | 115.063 33 | 116.070 61 | 70.065 7                                         | [M+H] <sup>+</sup> | -0.9        | -  | +   | [11-12] |
|     | 31 | 0.52          | 组氨酸 (histidine)                               | C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>   | 155.069 48 | 156.076 75 | 83.060 6, 110.071 3                              | [M+H] <sup>+</sup> | -2.7        | +  | +   | [11-12] |
|     | 32 | 0.87          | 酪氨酸 (tyrosine)                                | C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>3</sub>                | 182.081 17 | 182.080 88 | 91.054 6, 119.049 0, 123.044 7, 136.076 2        | [M+H] <sup>+</sup> | -1.6        | +  | +   | [11-12] |
|     | 33 | 1.02          | 鸟嘌呤 (guanine)                                 | C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> O                | 151.049 41 | 152.056 69 | 82.039 8, 110.034 5, 135.030 1, 152.056 6        | [M+H] <sup>+</sup> | -1.1        | +  | +   | [9-10]  |
|     | 34 | 0.94          | 腺苷 (adenosine)                                | C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>5</sub> O <sub>4</sub> | 267.096 75 | 268.104 03 | 119.035 5, 136.069 1                             | [M+H] <sup>+</sup> | -0.1        | +  | +   | [7-13]  |
|     | 35 | 0.94          | 腺嘌呤 (adenine)                                 | C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub>                  | 135.054 50 | 136.061 77 | 92.024 1, 119.020 4                              | [M+H] <sup>+</sup> | -0.2        | +  | +   | [13]    |
|     | 36 | 0.84          | 尿嘧啶 (uracil)                                  | C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>   | 112.027 28 | 113.034 55 | 70.02 8, 95.014 0                                | [M+H] <sup>+</sup> | -2.1        | +  | +   | [13]    |
|     | 37 | 1.02          | 鸟苷 (guanosine)                                | C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>5</sub> O <sub>5</sub> | 283.091 67 | 284.098 95 | 134.829 8, 151.856 3                             | [M+H] <sup>+</sup> | -1.5        | -  | +   | [13]    |
|     | 38 | 0.59          | 果糖 (D-fructose)                               | C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>                 | 180.063 39 | 179.056 11 | 59.014, 71.014 2, 89.023 4, 101.024 9, 113.033 9 | [M-H] <sup>-</sup> | -0.6        | +  | +   | [7]     |
| 糖类  | 39 | 0.61          | D-蔗糖 (D-sucrose)                              | C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub>               | 342.116 21 | 341.108 94 | 89.024 6, 119.035 5, 161.046 9, 179.056 1,       | [M-H] <sup>-</sup> | 0.1         | +  | +   | [7-14]  |
|     | 40 | 0.58          | 葡萄糖 (glucose)                                 | C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>                 | 180.063 39 | 179.056 11 | 71.014 0, 101.028 2, 143.032 1, 161.009 1,       | [M-H] <sup>-</sup> | -0.6        | +  | +   | [1-15]  |
| 其他类 | 41 | 0.58          | 半乳糖 (galactose)                               | C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>                 | 180.063 39 | 179.056 11 | 59.013 8, 71.014 0, 89.024 6, 101.028 2          | [M-H] <sup>-</sup> | -0.6        | +  | +   | [1-16]  |
|     | 42 | 0.79          | 柠檬酸 (citric Acid)                             | C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O <sub>7</sub>                  | 192.027 00 | 191.019 73 | 111.014 2, 129.020 2                             | [M-H] <sup>-</sup> | 1.7         | +  | +   | [7]     |
|     | 43 | 0.59          | 尿囊素 (allantoin)                               | C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub>   | 158.043 99 | 159.051 27 | 61.039 6, 73.039 8, 99.019 1                     | [M+H] <sup>+</sup> | -2.7        | +  | +   | [7]     |
|     | 44 | 1.63          | 1-没食子酸酐葡萄糖 (1-galloylglucose)                 | C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> O <sub>10</sub>               | 332.074 35 | 331.067 07 | 125.024 8, 168.006 9                             | [M-H] <sup>-</sup> | -1          | +  | +   | [7-17]  |
|     | 45 | 1.99          | D-泛酸 (D-pantothenic acid)                     | C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>5</sub>                | 219.110 67 | 218.103 40 | 88.040 4, 146.082 6                              | [M-H] <sup>-</sup> | -3.1        | +  | +   | [7]     |
|     | 46 | 3.68          | 杜仲酸 (eucomic acid)                            | C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>                | 240.063 39 | 239.056 11 | 149.061 2, 177.056 1, 179.035 9                  | [M-H] <sup>-</sup> | -1.1        | +  | +   | [7]     |
|     | 47 | 7.56          | 葛根内酯A (kuzubutenolide A)                      | C <sub>23</sub> H <sub>34</sub> O <sub>10</sub>               | 460.136 95 | 459.129 67 | 205.050 9, 233.046 8, 339.089 1                  | [M-H] <sup>-</sup> | -1.3        | +  | +   | [7]     |
|     | 48 | 9.19          | 汉诺醇 (hannokinol)                              | C <sub>10</sub> H <sub>24</sub> O <sub>4</sub>                | 316.167 46 | 315.160 18 | 147.082 0, 149.062 8                             | [M-H] <sup>-</sup> | 1.0         | +  | +   | [7]     |
|     | 49 | 9.92          | 苦木内酯I (nigakilactone I)                       | C <sub>21</sub> H <sub>28</sub> O <sub>6</sub>                | 376.188 59 | 375.181 31 | 135.046 4, 179.072 1                             | [M-H] <sup>-</sup> | -0.5        | +  | +   | [7]     |
|     | 50 | 10.28         | 迷迭香双醛 (rosmadial)                             | C <sub>20</sub> H <sub>24</sub> O <sub>5</sub>                | 344.162 37 | 345.169 65 | 137.059 3, 177.090 7                             | [M+H] <sup>+</sup> | -2.3        | +  | +   | [7]     |
|     | 51 | 8.98          | N-反式-阿魏酰酯胺 (trans-N-feruloyltyramine)         | C <sub>18</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>4</sub>               | 313.131 41 | 312.124 13 | 191.058 2, 297.010 2                             | [M-H] <sup>-</sup> | -1.5        | +  | +   | [18-19] |
|     | 52 | 0.61          | L-苹果酸 (L-malic acid)                          | C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>5</sub>                  | 134.021 52 | 133.014 25 | 133.014 2                                        | [M-H] <sup>-</sup> | 0.8         | +  | +   | [20]    |
|     | 53 | 1.15          | 5-羟甲基糠醛 (5-hydroxymethylfurfural)             | C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>                  | 126.031 69 | 125.024 42 | 125.024 0                                        | [M-H] <sup>-</sup> | 0.0         | +  | +   | [20]    |
|     | 54 | 18.52         | 油酸 (oleic acid)                               | C <sub>18</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>                | 282.255 88 | 283.263 16 | 116.927 9, 255.232 6                             | [M+H] <sup>+</sup> | 0.7         | +  | +   | [21-22] |
|     | 55 | 8.66          | 3,3',5'-三甲氧基二苯乙烯 (3,3',5'-trimethoxybibenzyl) | C <sub>17</sub> H <sub>18</sub> O <sub>3</sub>                | 270.125 59 | 329.138 35 | 147.052 5, 197.915 8, 221.884 7                  | [M+H] <sup>+</sup> | 0.4         | -  | +   | [22]    |



续表1

| 分类 | 编号 | 保留时间<br>(min) | 化合物                                                                     | 分子式                                                          | 理论值        | 实测值        | 二级碎片离子 ( <i>m/z</i> )                      | 离子                 | 偏差<br>(ppm) | 生品 | 炮制品 | 参考文献   |
|----|----|---------------|-------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|------------|------------|--------------------------------------------|--------------------|-------------|----|-----|--------|
|    | 56 | 12.72         | 2,5-二羟基-3,4-二甲氧基菲 (2,5-dihydroxy-3,4-dimethoxyphenanthrene)             | C <sub>16</sub> H <sub>14</sub> O <sub>4</sub>               | 270.089 21 | 269.081 93 | 254.059 7                                  | [M-H] <sup>-</sup> | 1.0         | +  | +   | [22]   |
|    | 57 | 17.92         | 亚麻酸 (linolenic acid)                                                    | C <sub>18</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>               | 278.224 58 | 277.217 3  | 146.909 2                                  | [M-H] <sup>-</sup> | -1.4        | -  | +   | [8-22] |
|    | 58 | 18.61         | 锦葵酸 (malvalic acid)                                                     | C <sub>18</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>               | 280.240 23 | 279.232 95 | 134.896 2, 261.227 0                       | [M-H] <sup>-</sup> | 0.4         | +  | +   | [8]    |
|    | 59 | 13.98         | 大叶茜草素 (mollugin)                                                        | C <sub>17</sub> H <sub>16</sub> O <sub>4</sub>               | 284.104 86 | 283.097 58 | 182.038 0, 225.056 1, 253.051 6, 269.074 2 | [M-H] <sup>-</sup> | -3.4        | -  | +   | [8]    |
|    | 60 | 11.65         | 桑辛素C (moracin C)                                                        | C <sub>19</sub> H <sub>18</sub> O <sub>4</sub>               | 310.120 51 | 309.113 23 | 135.044 9, 159.044 5, 161.060 9, 241.086 0 | [M-H] <sup>-</sup> | -3.9        | +  | +   | [8]    |
|    | 61 | 9.56          | 去乙酰伪巴豆酸 A (deacetyl <pseudobartiac a)<="" acid="" p=""></pseudobartiac> | C <sub>20</sub> H <sub>26</sub> O <sub>5</sub>               | 346.178 02 | 345.170 75 | 309.149 6, 327.157 2                       | [M-H] <sup>-</sup> | -0.9        | +  | +   | [8]    |
|    | 62 | 0.56          | 谷氨酰胺 (glutamine)                                                        | C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 146.069 14 | 145.061 87 | 102.057 7, 128.035 8                       | [M-H] <sup>-</sup> | -3.4        | +  | +   | [8]    |

注：“+”表示检出成分；“-”表示未检出此成分。

裂解途径：①经由狄尔斯-阿尔德反应，脱去 1 个质量为 152 Da 的中性碎片 (C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>O<sub>3</sub>)，生成 *m/z* 425.089 0 [M-H-C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>O<sub>3</sub>]<sup>-</sup> 碎片离子，该离子进一步失去 1 分子水，得到 *m/z* 407.077 8 [M-H-C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>O<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O]<sup>-</sup>；②直接裂解 C 键连接的上部结构单元，生成特征碎片离子 *m/z* 289.072 7。通过综合裂解行为、特征碎片及文献数据 [7]，最终鉴定化合物 4 为原花青素 B1，其裂解路径见图 2。

2.4.2 黄酮类

本研究共鉴定出 5 个黄酮类化合物，该类结构通常由 2 个苯环通过中央三碳链连接而成，在植物中常以苷类（与糖结合）或游离形式存在。现以化合物 13 为例解析其裂解过程：在 ESI<sup>-</sup> 模式下观察到准分子离子峰 *m/z* 463.088 2[M-H]<sup>-</sup>，推测其分子式为 C<sub>21</sub>H<sub>20</sub>O<sub>12</sub>。通过对其二级图谱进行分析，该离子首先脱去 1 分子葡萄糖残基 C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>O<sub>5</sub>，得到特征碎片离子 *m/z* 301.039 6 [M-H-162 Da]<sup>-</sup>，随后该碎片可通过两种裂解途径进一步分解：一是脱去 1 分子中性离子 CH<sub>2</sub>O 形成碎片离子 *m/z* 271.028 7 [M-H-162 Da-30 Da]<sup>-</sup>；二是丢失 1 分子 C<sub>8</sub>H<sub>6</sub>O<sub>3</sub> 中性片段，生成次级碎片离子 *m/z* 151.017 8 [M-H-162 Da-150 Da]<sup>-</sup>。综合其保留时间、碎片特征及文献数据 [7]，鉴定化合物 13 为异槲皮素，确定此化合物为异槲皮素，具体裂解其裂解路径见图 3。

2.4.3 氨基酸类

在山药生品及炮制品中共鉴定出 16 个氨基酸类成分，其中正离子模式下检出 14 个，负离子模式下检出 2 个。该类成分在正离子模式下的准分子离子峰 [M+H]<sup>+</sup> 信号通常较弱，常见裂解途径为丢失 1 分子氨基 (-NH<sub>2</sub>) 或羧基 (-COOH)。以化合物 21 为例，其在 ESI<sup>+</sup> 模式下观察到 *m/z* 132.101 91 的准分子离子峰，该离子首先脱去 1 分子-COOH，形成 *m/z* 86.101 1 [M+H-COOH]<sup>+</sup> 的碎片，随后进一步失去-NH<sub>2</sub>（实际常以 NH<sub>3</sub> 形式丢失），生成较稳定的碎片 *m/z* 69.070 1 [M+H-COOH-NH<sub>3</sub>]<sup>+</sup>。此外，在二级谱图中还观察到较弱的碎片 *m/z* 57.069 4，推测为 *m/z* 69.070 1 离子在 高能碰撞下产生的低丰度子离子。综合其碎片信息、裂解路径、保留时间及文献对照 [7-10]，鉴定该化合物为亮氨酸，具体裂解过程见图 4。

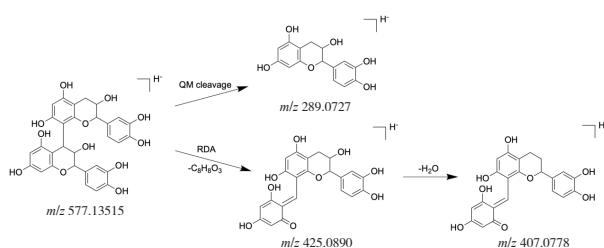


图2 原花青素B1的裂解途径

Figure 2. The cleavage pathway of proanthocyanidin B1

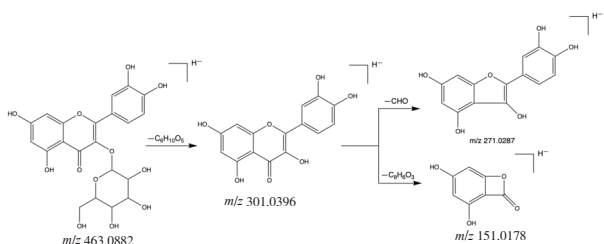


图3 异槲皮素的裂解途径

Figure 3. The cleavage pathway of isoquercetin

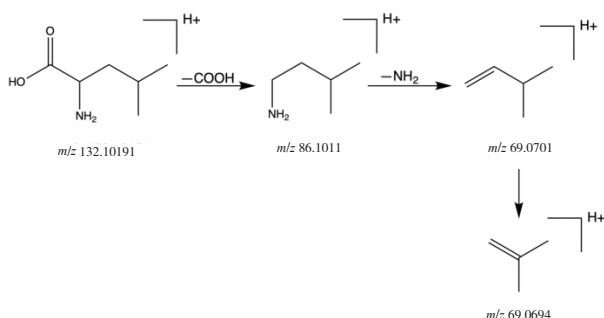


图4 亮氨酸的裂解途径

Figure 4. The cleavage pathway of leucine

#### 2.4.4 核苷类

本研究共鉴定出 5 个核苷类化合物，该类成分是一类具有多种生物活性的水溶性物质。现以化合物 34 为例进行解析：在正离子模式下检测到准分子离子峰  $m/z$  268.104 03  $[M+H]^+$ ，推测其分子式为  $C_{10}H_{13}N_5O_4$ 。该离子信号强度较弱，其主要裂解途径为丢失 1 分子呋喃糖 ( $C_5H_7O_4$ )，生成  $m/z$  136.069 1  $[M+H-C_5H_7O_4]^+$  的碎片离子；随后在较高碰撞能量下，该碎片进一步失去 1 分子  $NH_3$ ，形成  $m/z$  119.035 5  $[M+H-C_5H_7O_4-NH_3]^+$  的次级碎片。综合保留时间、碎片离子信息及裂解规律，并与文献<sup>[7-13]</sup>对照，鉴定该化合物为腺苷，具体裂解路径见图 5。

#### 2.4.5 糖类

本研究在山药中共鉴定出 4 个糖类成分，包括单糖与二糖，其裂解方式多涉及  $\alpha$ -1,2-糖苷

键的断裂。以化合物 39 为例，在 ESI<sup>-</sup> 模式下观察到  $m/z$  341.108 94  $[M-H]^-$  的准分子离子峰，推测其分子式为  $C_{12}H_{22}O_{11}$ 。该离子在碰撞过程中优先断裂  $\alpha$ -1,2-糖苷键，丢失 1 分子  $C_6H_{11}O_5$ ，生成  $m/z$  179.056 1  $[M-H-C_6H_{11}O_5]^-$  的碎片；随后该碎片进一步脱去 1 分子  $H_2O$ ，形成  $m/z$  161.046 9  $[M-H-C_6H_{11}O_5-H_2O]^-$ 。综合其碎片离子、裂解路径及文献数据<sup>[7-14]</sup>，鉴定该化合物为 D-蔗糖，具体裂解过程见图 6。

#### 2.4.6 其他类

本研究在山药中共鉴定出 21 个其他类化合物，如萜类、脂类、有机酸类等。以化合物 44 为例，在 ESI<sup>-</sup> 模式下观察到准分子离子峰  $m/z$  331.067 07  $[M-H]^-$ ，推测其可能分子式为  $C_{13}H_{16}O_{10}$ 。首先脱去 1 分子葡萄糖单元  $C_6H_{10}O_5$ ，生成二级碎片离子  $m/z$  169.0137  $[M-H-C_6H_{10}O_5]^-$ ，随后通过脱羧反应失去中性分子  $CO_2$ ，得到碎片离子  $m/z$  125.024 8  $[M-H-C_6H_{10}O_5-CO_2]^-$ 。通过分析这些碎片信息及裂解规律，并与已有研究数据<sup>[7-17]</sup>进行比对，最终确定此化合物为 1-没食子酸酐葡萄糖，具体裂解方式见图 7。

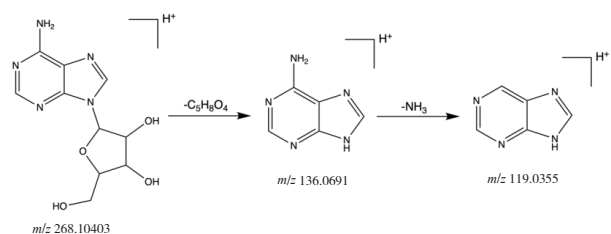


图5 腺苷的裂解途径

Figure 5. The cleavage pathway of adenosine

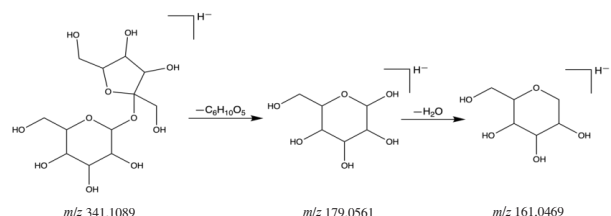


图6 D-蔗糖的裂解途径

Figure 6. The cleavage pathway of D-sucrose

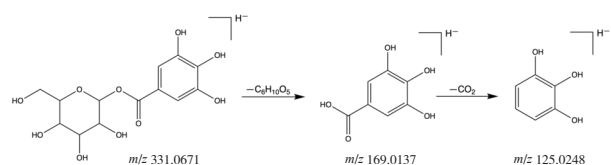


图7 1-没食子酸酐葡萄糖的裂解途径

Figure 7. The cleavage pathway of 1-galloylglucose

## 2.5 蜜糠炒山药样品主成分分析及正交偏最小二乘判别分析

### 2.5.1 主成分分析

采用 SIMCA 14.1 软件对山药生品及其炮制过程中的样品数据进行主成分分析 (principal component analysis, PCA), 结果见图 8。由图可知, 在正、负离子两种模式下, 所有样品均位于置信区间内。其中, 5 个生品样本聚集在同一区域, 而炮制过程中的样品则分布较为分散, 彼此区分明显。该结果表明, 在山药炮制过程中, 不同炮制时间点的样品与生品在化学成分上存在较大差异。

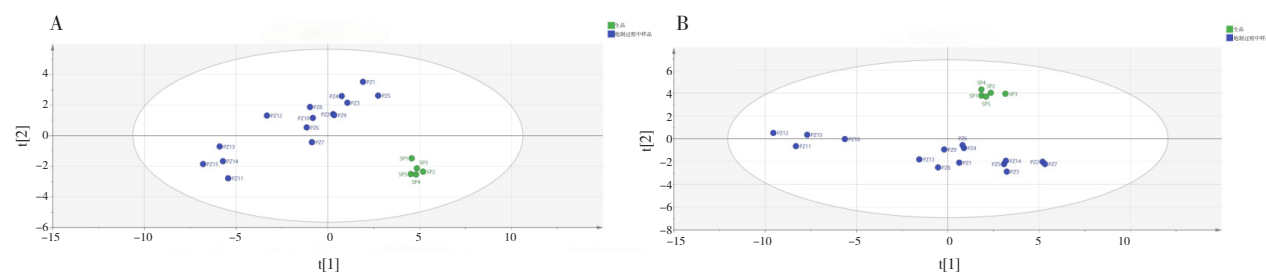


图8 正 (A)、负 (B) 离子模式下PCA图

Figure 8. PCA diagrams in positive mode (A) and negative ion mode (B)

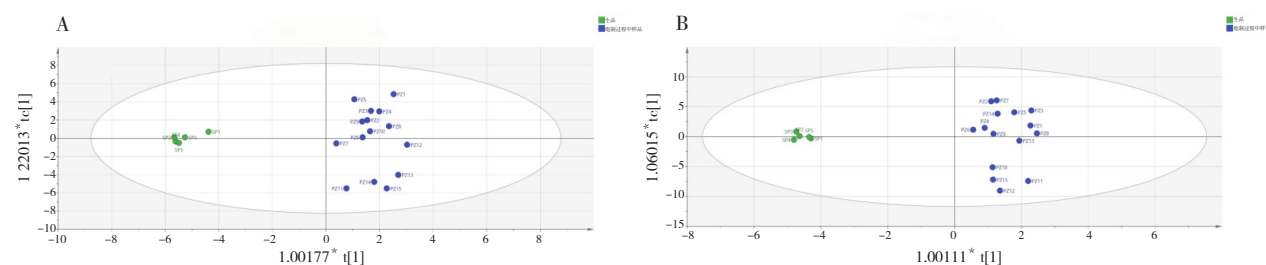


图9 正 (A)、负 (B) 离子模式下OPLS-DA得分图

Figure 9. OPLS-DA score plots in positive mode (A) and negative ion mode (B)

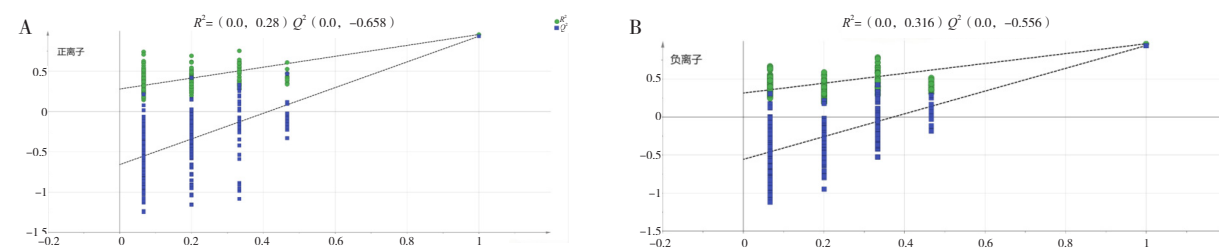


图10 正 (A)、负 (B) 离子模式下置换检验

Figure 10. Permutation test in positive mode (A) and negative ion mode (B)

### 2.5.3 样品中差异性成分筛选

根据 OPLS-DA 分析结果, 以变量投影重要性 (variable importance in projection, VIP) 值大于 1 为筛选条件, 在正离子模式下共筛选出 14 个差异性成分, 包括 10 个氨基酸类、1 个酚

### 2.5.2 正交偏最小二乘判别分析

在 PCA 分析的基础上进一步采用正交偏最小二乘判别分析 (orthogonal partial least-squares discrimination analysis, OPLS-DA), 结果见图 9, 正、负离子模式下山药炮制前与炮制过程中的样品沿 Y 轴两侧分布, 能够明显区分; 该模型中正离子模式的  $R^2X$ 、 $R^2Y$  (所建模型对 X 和 Y 矩阵的解释率) 和  $Q^2$  (表示模型的预测能力) 分别为 0.741、0.956 和 0.934, 负离子模式下分别为 0.715、0.965 和 0.941, 各指标均大于 0.5, 表明模型构建良好、预测性能可靠; 结合 200 次置换检验结果 (图 10) 显示  $Q^2$  均小于 0, 进一步证实模型有效且不存在过拟合现象。

酸类、1 个核苷类、1 个黄酮类和 1 个其他类成分; 在负离子模式下则筛选出 16 个差异性成分, 包括 1 个氨基酸类、6 个酚酸类、2 个黄酮类、3 个糖类和 4 个其他类成分, 具体结果见表 2 和表 3。



表2 正离子模式差异性成分

Table 2. Differential components of positive ion mode

| 序号 | 化合物名称  | VIP值  |
|----|--------|-------|
| 1  | 酪氨酸    | 1.319 |
| 2  | 异亮氨酸   | 1.229 |
| 3  | L-亮氨酸  | 1.229 |
| 4  | 油酸     | 1.224 |
| 5  | L-苯丙氨酸 | 1.214 |
| 6  | L-赖氨酸  | 1.165 |
| 7  | L-天冬氨酸 | 1.164 |
| 8  | L-苏氨酸  | 1.105 |
| 9  | 儿茶素    | 1.083 |
| 10 | 组氨酸    | 1.073 |
| 11 | L-丝氨酸  | 1.067 |
| 12 | L-缬氨酸  | 1.050 |
| 13 | 芹菜素    | 1.037 |
| 14 | 乌苷     | 1.029 |

表3 正离子模式差异性成分

Table 3. Differential components of negative ion mode

| 序号 | 化合物名称      | VIP值  |
|----|------------|-------|
| 1  | 桑辛素C       | 1.564 |
| 2  | 金合欢素       | 1.418 |
| 3  | N-反式-阿魏酰酯胺 | 1.398 |
| 4  | L-精氨酸      | 1.388 |
| 5  | 原花青素       | 1.305 |
| 6  | 葡萄糖基丁香酸    | 1.292 |
| 7  | 山药素III     | 1.193 |
| 8  | 原花青素B1     | 1.133 |
| 9  | 阿魏酸        | 1.094 |
| 10 | 果糖         | 1.037 |
| 11 | 丁香酸        | 1.035 |
| 12 | 1-没食子酸酐葡萄糖 | 1.030 |
| 13 | 谷氨酰胺       | 1.024 |
| 14 | 大叶茜草素      | 1.019 |
| 15 | 葡萄糖        | 1.018 |
| 16 | 半乳糖        | 1.008 |

3 讨论

本研究采用 UPLC-Q-TOF-MS 技术对山药炮制前后的主要化学成分进行比较分析,探讨蜜糠炒制工艺对药材主成分的影响。在正、负离子模式下,对山药生品和蜜糠炒山药炮制过程中的炮制品进行检测,通过分析特征峰、碎片信息、保留时间等数据,并结合标准品和文献进行比对,共鉴定出 62 种化合物,包括酚酸类 11 个、黄酮类 5 个、氨基酸类 16 个、核苷类 5 个、糖类 4 个及其他类化合物 21 个。随着炮制时间的增加,山药中鉴定出的化学成分呈递减趋势,其中蜜糠炒山药炮制时间为 4 min 时鉴定出的化合物最多、峰型最好。

本研究重点关注了山药中的重要活性成分,

如具有抗炎、抗肿瘤等作用的原花青素 B1<sup>[23]</sup>,具有抗氧化、保护心血管系统功效的异槲皮素<sup>[24]</sup>,以及尿囊素、腺苷、各类氨基酸等重要成分<sup>[25]</sup>。结果表明,炮制工艺对药材的化学成分组成存在影响,从而可能影响其药理作用,在实际应用中应控制适宜的炮制时间,以更好地发挥山药的药效。但所含化学成分的变化与其引起的具体药效改变之间的关联性,以及何种成分变化起到关键作用,还需进一步的药效学实验加以验证。

同时,蜜糠作为江西“建昌帮”的传统特色炮制辅料,在加热过程中起到的共同作用可能是导致成分改变的重要因素,但具体机制尚需深入探讨。本研究可为后续探讨蜜糠炒山药的炮制机制提供参考。

参考文献

1 陈梦雨,刘伟,俞桂新,等. 山药化学成分与药理活性研究进展[J]. 中医药学报, 2020, 48(2): 62-66. [Chen MY, Liu W, Qi GX, et al. Research progress on chemical constituents and pharmacological activities of *Dioscorea opposita* Thunb.[J]. Acta Chinese Medicine and Pharmacology, 2020, 48(2): 62-66.] DOI: [10.19664/j.cnki.1002-2392.200035](https://doi.org/10.19664/j.cnki.1002-2392.200035).

2 杨雁,孙羽灵,孙建梅,等. 山药活性成分药理作用研究进展 [J]. 中国野生植物资源, 2022, 41(12): 55-60. [Yang Y, Sun YL, Sun JM, et al. Progress on pharmacological effects of active ingredients in Chinese yam[J]. Chinese Wild Plant Resources, 2022, 41(12): 55-60.] DOI: [10.3969/j.issn.1006-9690.2022.12.011](https://doi.org/10.3969/j.issn.1006-9690.2022.12.011).

3 郭三保,何芹,周铁文,等. 建昌帮发展历程及炮制特色探究[J]. 中国中医药现代远程教育, 2021, 19(6): 80-82. [Guo SB, He Q, Zhou TW, et al. Research on the development history and processing characteristics of Jianchangbang[J]. Chinese Medicine Modern Distance Education of China, 2021, 19(6): 80-82.] DOI: [10.3969/j.issn.1672-2779.2021.06.031](https://doi.org/10.3969/j.issn.1672-2779.2021.06.031).

4 邓怡芳,祝婧,钟凌云,等. 建昌帮特色辅料蜜糠的应用现状及研究进展 [J]. 江西中医药大学学报, 2021, 33(6): 116-119. [Deng YF, Zhu J, Zhong LY, et al. Application status and research progress of the characteristic adjuvant material honey chaff of Jianchang faction[J]. Journal of Jiangxi University of Traditional Chinese Medicine, 2021, 33(6): 116-119.] <https://www.cnki.com.cn/Article/CJFDTOTAL-XYXB202106031.htm>.

5 黄璐莹,汤灿辉,何平平,等. 建昌帮蜜糠山药炮制工艺研究进展 [J]. 现代食品, 2024, 30(20): 27-29. [Huang LY, Tang CH, He PP, et al. Research progress on the processing technology of honey chaff-fried yam of Jianchang faction[J]. Modern Food, 2024, 30(20): 27-29.] DOI: [10.16736/j.cnki.cn41-1434/ts.2024.20.006](https://doi.org/10.16736/j.cnki.cn41-1434/ts.2024.20.006).

6 梅开丰,张祯祥,易斌,等,编. 建昌帮中药传统炮制法 [M]. 北京: 人民卫生出版社: 2022: 472.

7 安莉,汪红,马婧玮,等. 基于 UPLC-Q/TOF-MS/MS 和生物信息学探讨铁棍山药皮中化学成分的药用和营养价值 [J]. 食品工

- 业科技, 2023, 44(2): 1–9. [An L, Wang H, Ma JW, et al. Medicinal and nutritional value of the chemical compositions of *Dioscorea opposita* Thunb. cv. Tiegun peel based on UPLC–Q/TOF–MS/MS and bioinformatics[J]. Science and Technology of Food Industry, 2023, 44(2): 1–9.] DOI: [10.13386/j.issn1002-0306.2021100320](https://doi.org/10.13386/j.issn1002-0306.2021100320).
- 8 Yu YG, Guo XY, Li XY, et al. Organ- and age-specific differences of *Dioscorea polystachya* compounds measured by UPLC–QTOF/MS[J]. Chem Biodivers, 2021, 18(2): e2000856. DOI: [10.1002/cbdv.202000856](https://doi.org/10.1002/cbdv.202000856).
- 9 牛晓晖, 张海莲, 孙佳明, 等. 脾细胞生物色谱法和液质联用分析鹿茸–山药药对的补虚活性成分[J]. 吉林中医药, 2013, 33(9): 920–921, 924. [Niu XH, Zhang HL, Sun JM, et al. Analysis of active ingredients for tonifying deficiency in Antler–Chinese yam by splenic cell biological chromatography and liquid chromatography–mass spectrometry[J]. Jilin Journal of Traditional Chinese Medicine, 2013, 33(9): 920–921, 924.] DOI: [10.13463/j.cnki.jlzy.2013.09.038](https://doi.org/10.13463/j.cnki.jlzy.2013.09.038).
- 10 胡小勤, 蒙丹, 曾学文, 等. 基于 UPLC–Q–TOF–MS/MS 和 HPLC 的广东产广地龙鲜、干品主要化学成分分析[J]. 天然产物研究与开发, 2024, 36(12): 2051–2063. [Hu XQ, Meng D, Zeng XW, et al. Analysis of the main chemical components in fresh and dried *Pheretima aspergillum* from Guangdong by UPLC–Q–TOF–MS/MS and HPLC[J]. Natural Product Research and Development, 2024, 36(12): 2051–2063.] DOI: [10.16333/j.1001-6880.2024.12.007](https://doi.org/10.16333/j.1001-6880.2024.12.007).
- 11 甘巧, 廖丽, 荆雄, 等. 基于 UPLC–Q/Orbitrap HRMS 同时测定发酵型果酒中 22 种氨基酸含量[J]. 酿酒科技, 2025, (7): 81–89. [Gan Q, Liao L, Jing X, et al. Simultaneous determination of 22 amino acids in fermented fruit wines by UPLC–Q/Orbitrap HRMS[J]. Liquor-Making Science & Technology, 2025, (7): 81–89.] DOI: [10.13746/j.njki.2024185](https://doi.org/10.13746/j.njki.2024185).
- 12 陈艳, 姚成. 淮山药中氨基酸含量的测定[J]. 氨基酸和生物资源, 2004, 26(2): 47–48. [Chen Y, Yao C. Analysis of amino acids in rhizoma *discoreae*[J]. Amino Acids and Biotic Resources, 2004, 26(2): 47–48.] DOI: [10.14188/j.ajsh.2004.02.017](https://doi.org/10.14188/j.ajsh.2004.02.017).
- 13 杨秋红, 张红伟, 张振凌, 等. UPLC–MS/MS 同时测定山药饮片 6 个核苷类成分的含量[J]. 中南药学, 2020, 18(5): 849–853. [Yang QH, Zhang HW, Zhang ZL, et al. Simultaneous determination of 6 nucleosides in *Dioscoreae* rhizoma decoction pieces by UPLC–MS/MS[J]. Central South Pharmacy, 2020, 18(5): 849–853.] DOI: [10.7539/j-issn-1672-2981-2020.05.027](https://doi.org/10.7539/j-issn-1672-2981-2020.05.027).
- 14 郑鹏, 黄敏, 张金莲, 等. 基于 UPLC–Q–TOF–MS/MS 技术的江西特产中药茶茛化学成分研究[J]. 天然产物研究与开发, 2024, 36(1): 52–62. [Zheng P, Huang M, Zhang JL, et al. Study on the chemical composition of Jiangxi specialty Chinese medicine Chaxiong based on UPLC–Q–TOF–MS/MS[J]. Natural Product Research and Development, 2024, 36(1): 52–62.] DOI: [10.16333/j.1001-6880.2024.1.006](https://doi.org/10.16333/j.1001-6880.2024.1.006).
- 15 张立强, 单国顺, 洪艺丹, 等. 基于 UPLC–Q–TOF–MS 和 UPLC–QqQ–MS/MS 的山茱萸不同炮制品化学成分定性分析与定量分析[J]. 中国中药杂志, 2025, 50(8): 2145–2158. [Zhang LQ, Shan GS, Hong YD, et al. Qualitative and quantitative analysis of chemical components of different processed products of *Corni fructus* by UPLC–Q–TOF–MS and UPLC–QqQ–MS/MS[J]. China Journal of Chinese Materia Medica, 2025, 50(8): 2145–2158.] DOI: [10.19540/j.cnki.cjcm.20250219.301](https://doi.org/10.19540/j.cnki.cjcm.20250219.301).
- 16 温媛, 刘畅, 原琪, 等. 基于 UPLC–Q–Exactive Orbitrap–MS 技术的竹节参提取物血清药物化学研究[J]. 中国中药杂志, 2024, 49(23): 6490–6499. [Wen Y, Liu C, Yuan Q, et al. Serum pharmacokinetics of Panacis Japonici Rhizoma extract based on UPLC–Q–Exactive Orbitrap–MS[J]. China Journal of Chinese Materia Medica, 2024, 49(23): 6490–6499.] DOI: [10.19540/j.cnki.cjcm.20240910.203](https://doi.org/10.19540/j.cnki.cjcm.20240910.203).
- 17 陈美庆, 朱卫丰, 管咏梅, 等. 基于 UPLC–Q–TOF–MS/MS 技术分析葛根配方颗粒的化学成分[J]. 中国实验方剂学杂志, 2023, 29(19): 176–186. [Chen MQ, Zhu WF, Guan YM, et al. Analysis of chemical constituents in *Puerariae lobatae* radix dispensing granules by UPLC–Q–TOF–MS/MS[J]. Chinese Journal of Experimental Traditional Medical Formulae, 2023, 29(19): 176–186.] DOI: [10.13422/j.cnki.syfjx.20230762](https://doi.org/10.13422/j.cnki.syfjx.20230762).
- 18 冯文明, 韩竹箴, 王峥涛. 山药化学成分研究[J]. 中草药, 2018, 49(21): 5034–5039. [Feng WM, Han ZZ, Wang ZT. Chemical constituents from *Dioscorea opposita*[J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2018, 49(21): 5034–5039.] DOI: [10.7501/j.issn.0253-2670.2018.21.013](https://doi.org/10.7501/j.issn.0253-2670.2018.21.013).
- 19 梁泽华, 潘颖洁, 邱丽媛, 等. 基于 UPLC–Q–TOF–MS/MS 分析黄精九蒸九晒炮制过程中化学成分的变化[J]. 中草药, 2022, 53(16): 4948–4957. [Liang ZH, Pan YJ, Qiu LY, et al. Analysis on chemical components changes of *Polygonati rhizoma* in processing of nine times steaming and nine times sunning by UPLC–Q–TOF–MS/MS[J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2022, 53(16): 4948–4957.] DOI: [10.7501/j.issn.0253-2670.2022.16.004](https://doi.org/10.7501/j.issn.0253-2670.2022.16.004).
- 20 樊晓荃, 付娟, 胡军华, 等. UPLC–Q–TOF–MS/MS 快速分析六味地黄苷糖片化学成分[J]. 中草药, 2021, 52(21): 6473–6484. [Fan XQ, Fu J, Hu JH, et al. Rapid identification of chemical components in Liuwei Dihuang Gantang tablets by UPLC–Q–TOF–MS/MS[J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2021, 52(21): 6473–6484.] DOI: [10.7501/j.issn.0253-2670.2021.21.004](https://doi.org/10.7501/j.issn.0253-2670.2021.21.004).
- 21 龙红萍, 秦裕辉, 刘峥嵘, 等. UPLC–Q–TOF 法分析双丹明目胶囊化学成分[J]. 中成药, 2017, 39(7): 1527–1531. [Long HP, Qin YH, Liu ZR, et al. Analysis of chemical constituents of Shuangdan Mingmu capsule by UPLC–Q–TOF[J]. Chinese Traditional Patent Medicine, 2017, 39(7): 1527–1531.] DOI: [10.3969/j.issn.1001-1528.2017.07.046](https://doi.org/10.3969/j.issn.1001-1528.2017.07.046).
- 22 Ge X, Li X, Dai D, et al. Metabolomic analysis of Chinese yam (*Dioscorea polystachya* Turczaninow.) bulbils at different germination stages by UPLC–Q–TOF–MS[J]. Acta Sci Pol-Hortoru, 2024, 23(1): 29–40. DOI: [10.24326/asphc.2024.5247](https://doi.org/10.24326/asphc.2024.5247).
- 23 邢颖, 薛文婧, 徐怀德, 等. 薯类茎叶化学成分与生物活性研究进展[J]. 食品工业科技, 2022, 43(7): 457–466. [Xing Y, Xue WJ, Xu HD, et al. Research progress on chemical constituents and biological activities of stems and leaves of potato[J]. Science and Technology of Food Industry, 2022, 43(7): 457–466.] DOI: [10.13386/j.issn1002-0306.2021040182](https://doi.org/10.13386/j.issn1002-0306.2021040182).
- 24 王鑫淼, 许杨, 王崧, 等. 植物化合物对血小板功能的影响[J]. 西部中医药, 2018, 31(1): 126–131. [Wang XM, Xu Y, Wang S, et al. The effects of phytochemicals on the functions of platelets[J]. Western Journal of Traditional Chinese Medicine, 2018, 31(1): 126–131.] DOI: [10.3969/j.issn.1004-6852.2018.01.038](https://doi.org/10.3969/j.issn.1004-6852.2018.01.038).
- 25 杨学梅. 山药营养保健成分及其应用前景[J]. 当代生态农业, 2012, (3): 131–134. [Yang XM. Nutritional and health components of yam and its application prospects[J]. Contemporary Eco-Agri Culture, 2012, (3): 131–134.] DOI: [CNKI:SUN:DDSN.0.2012-Z2-034](https://doi.org/CNKI:SUN:DDSN.0.2012-Z2-034).

收稿日期: 2025 年 06 月 30 日 修回日期: 2025 年 09 月 10 日  
本文编辑: 钟巧妮 李 阳