

DOI: 10.12161/j.issn.1005-6521.2025.03.012

基于非靶向代谢组学的红景天和麦冬代谢途径及代谢产物差异分析

于然, 金丽华, 李敬慈, 王子豪

(北京电子科技职业学院 生物工程学院, 北京 100176)

摘要: 为研究麦冬和红景天代谢产物的多样性和相关性, 采用液相色谱-高分辨质谱技术分析麦冬、红景天以及麦冬和红景天复合提取物代谢产物, 对物质种类及其含量进行分类、主成分分析(principal component analysis, PCA)、最小偏二乘判别分析(partial least squares discriminant analysis, PLS-DA)以及代谢途径分析。研究发现, 红景天和麦冬代谢产物以酮酸、醇酚类和黄酮类等为主, 红景天中具有较为丰富的苷类化合物, 而麦冬中糖类成分种类较多。红景天、麦冬及其复合提取物的代谢产物组成具有明显差异, 使用富集分析确定红景天和麦冬的共有代谢途径为核黄素代谢、花生四烯酸代谢、类固醇类激素合成代谢、淀粉和蔗糖代谢、果糖和甘露糖代谢和 α -亚麻酸代谢, 该共有代谢途径是根茎类药材中抗氧化、抗炎、滋阴、提升免疫力等功能性小分子化合物形成的关键途径。D-吡喃半乳糖是麦冬多糖代谢通路的重要中间体, 是麦冬多糖形成的关键。红景天和麦冬在配伍过程中酯类、醇酚类及羧酸等成分是影响其活性的关键物质。

关键词: 麦冬; 红景天; 配伍; 非靶向代谢组学; 相关性; D-吡喃半乳糖

Comparison on Metabolic Profiles and Active Compounds of *Rhodiola crenulatae* Radix et Rhizoma and *Ophiopogonis* Radix Based on Non-targeted Metabolomics

YU Ran, JIN Lihua, LI Jingci, WANG Zihao

(College of Bioengineering, Beijing Polytechnic, Beijing 100176, China)

Abstract: The diversity and correlation of metabolites in *Ophiopogonis* Radix and *Rhodiola crenulatae* Radix et Rhizoma were studied. Liquid chromatography-high-resolution mass spectrometry was employed to analyze the secondary metabolites in the extracts of *Ophiopogonis* Radix, *Rhodiola crenulatae* Radix et Rhizoma, and their combination. The types and content of the compounds were determined, and principal component analysis (PCA), partial least squares discriminant analysis (PLS-DA), and metabolic pathway analysis were performed. The results showed that the metabolites of *Rhodiola crenulatae* Radix et Rhizoma and *Ophiopogonis* Radix mainly included ketone acids, alcohol phenols, and flavonoids. In addition, *Rhodiola crenulatae* Radix et Rhizoma contained abundant glycosides, while *Ophiopogonis* Radix contained a variety of sugars. There were significant differences in the secondary metabolites in the extracts of *Rhodiola crenulatae* Radix et Rhizoma, *Ophiopogonis* Radix, and their combination. The enrichment analysis showed that the common metabolic pathways of *Rhodiola crenulatae* Radix et Rhizoma and *Ophiopogonis* Radix were riboflavin metabolism, arachidonic acid metabolism, steroid hormone synthesis, starch and sucrose metabolism, fructose and mannose metabolism, and alpha linolenic acid metabolism. The common metabolic pathways provided a basis for the discovery of small molecule compounds with antioxidant, anti-inflammatory, yin-nourishing, and immunity-enhancing effects in root and rhizoma medicinal materials. D-Galactopyranose was an important intermediate in multiple sugar metabolism pathways of *Ophiopogonis* Radix, serving as a key to the formation of polysaccharides in *Ophiopogonis* Radix. During the compatibility process of *Rhodiola crenulatae* Radix et Rhizoma and *Ophiopogonis* Radix, esters, phenols, and carboxylic acids were the key substances that affect their activity.

Key words: *Ophiopogonis* Radix; *Rhodiola crenulatae* Radix et Rhizoma; compatibility; non-targeted metabolomics; correlation; D-galactopyranose

基金项目: 北京电子科技职业学院科技类重点课题(2024X007-KXZ); 2024年校级青年拔尖人才项目(CJGX2024-028-08)

作者简介: 于然(1983—), 女(汉), 博士, 研究方向: 药物分析。

引文格式:

于然,金丽华,李敬慈,等.基于非靶向代谢组学的红景天和麦冬代谢途径及代谢产物差异分析[J].食品研究与开发,2025,46(3):87-96.

YU Ran, JIN Lihua, LI Jingci, et al. Comparison on Metabolic Profiles and Active Compounds of *Rhodiola crenulatae* Radix et Rhizoma and *Ophiopogonis* Radix Based on Non-targeted Metabolomics[J]. Food Research and Development, 2025, 46 (3):87-96.

植物多以根和根茎部位入药,此类药材在临床应用广泛,是中药的重要组成部分。根茎类药材富含黄酮、多糖、皂苷、萜类等多骨架类型代谢产物,参与体内复杂机制调节^[1]。麦冬和红景天属典型根及根茎类入药中药材,常配伍使用。麦冬是百合科沿阶草属植物麦冬[*Ophiopogon japonicus* (Linn.f.) Ker-Gawl]的干燥根,是一种药食同源中药材^[2-3]。麦冬含有黄酮类^[4-5]、多糖类、皂苷类^[6]和氨基酸等多种类型化合物。

红景天为高原高寒地带根茎药材,为景天科红景天属(*Rhodiola* L.)草本植物红景天的干燥根茎。2020年版《中国药典》记载品种为大花红景天 [*Rhodiola crenulata* (Hook.f.et Thoms.) H. Ohba]^[7]。红景天主要功能性成分包括红景天苷、酪醇、没食子酸、焦柠檬酸、 β -谷甾醇等^[8]。大花红天素、酪醇、红景天苷、没食子酸等为红景天主要品质标志物。红景天具有抗炎、抗氧化、抗衰老、心血管调节^[9]等作用。

中药以根茎类配伍用药方剂很多^[10]。代谢组学^[11]依赖可提供丰富信息的检测分离技术,如气相色谱技术^[13]、液相色谱技术^[14]、核磁共振和质谱(mass spectrometry, MS)技术等^[12],实现对多级代谢产物的定性和定量分析。非靶向代谢组学依据代谢组学特征,鉴定代谢产物之间关联性,具有高灵敏度和可重复性^[15]。非靶向代谢组学可区分化合物代谢种类、药材相似性、聚类情况及差异^[16-19],对生物标志物的代谢产物识别有重要意义^[20-21]。

植物受物种类型^[22]、生态环境和地理分布^[23]影响,可能会改变代谢产物的合成及其对外界逆境的响应机制^[24-25]。本研究基于超高效液相色谱-四极杆/静电场轨道阱高分辨质谱(ultra-high performance liquid chromatography - quadrupole - electrostatic field orbitrap high resolution mass spectrometry, UPLC-Q/Orbitrap-HRMS),采用广泛非靶向代谢组学技术对麦冬和红景天根茎进行多元统计分析,筛选代谢差异表达产物,揭示药材成分以及配伍对生物活性成分的影响。利用非靶向代谢组学构建药材典型代谢途径,明确关键成分配伍前后差异,探讨生物标志物可能的作用机制和作用通路,验证配伍的合理性和科学性,确立代谢产物与功能活性之间的联系,系统研究红景天和麦冬代谢产物类型、代谢途径的共性和差异以及配伍过程中化合物分类变化

规律,以期为临床药物配伍应用提供试验依据和应用基础。

1 材料与方法

1.1 材料与试剂

麦冬、大花红景天:市售;乙腈、甲醇(均为色谱纯):美国赛默飞世尔科技公司;甲酸(色谱纯):西格玛奥德里奇(上海)贸易有限公司。

1.2 仪器与设备

超高效液相色谱仪(Vanquish Duo)、Q Exactive™组合型四极杆 Orbitrap™质谱仪(Q Exactive):美国赛默飞世尔科技公司;真空离心浓缩仪(Concentrator plus):德国 Eppendorf 公司;分析天平(BP211d):瑞士 Sartorius 公司;低温高速离心机(Microfuge 22R):美国贝克曼库尔特公司;超声波清洗器(KQ2200E):昆山市超声仪器有限公司;离心机(D1008)、涡旋仪(MX-S):美国赛洛捷克公司。

1.3 试验方法

1.3.1 代谢产物提取

红景天和麦冬分别干燥、粉碎、研磨过 80 目筛,干燥至恒重,备用。精确称取样品粉末 100 mg 于 50 mL 离心管中(红景天和麦冬配伍样品质量比 1:1,共 100 mg),按料液比 1:15 (g/mL)加入提取溶剂甲醇,60 °C 超声辅助提取 2 h,9 000 r/min 离心 30 s,取上清液经过 0.22 μ m 滤膜,用于 UPLC-Q/Orbitrap-HRMS 测定。

1.3.2 UPLC-Q-Orbitrap HRMS 测定条件

1.3.2.1 液相色谱条件

色谱柱为 Waters HSS T3(2.1 mm \times 100 mm,1.7 μ m),柱温 40 °C,流速 0.3 mL/min,进样量 2 μ L。流动相正离子模式为 0.1% 甲酸-水(A)和甲醇(B),负离子模式流动相为 5 mmol/L 乙酸铵(A)和甲醇(B)。流动相梯度洗脱程序为 0~1.00 min,98% A、2% B;1.00~5.50 min,100% B;5.50~14.00 min,100% B;14.00~14.10 min,98% A、2% B;14.10~16.00 min,98% A、2% B。

1.3.2.2 质谱条件

采用 UPLC-Q/Orbitrap-HRMS 在正、负两种离子模式下进行样品分析,使用电喷雾离子源(electro-spray ionization,ESI)。电喷雾电压分别为 3.5 kV 和 3.0 kV,离子源温度为 350 °C,鞘气流速为 12 L/min,辅助气流

速 $3 \mu\text{L}/\text{min}$, 一级全扫描分辨率为 70 000, 二级分辨率为 17 500。一级质谱 AGC target 设置为 $1\text{e}6$, maximum IT 50 ms, 二级质谱 AGC target 设置为 $1\text{e}5$, maximum IT 50 ms, 质量扫描范围为 m/z 150~1 500, 碰撞能量(normalized collision energy, NCE)为 10、30、55eV。

1.4 数据处理与分析

各待测样本设置 3 个平行样品, 数据分类环形图采用 Origin 软件, 数据导入 Graphpad prism9.0 软件进行主成分分析(principal component analysis, PCA), 利用方差分析(analysis of variance, ANOVA)完成组间差异显著性检验, 以 $P < 0.05$ 为显著差异标准。采用 MetaboAnalyst 在线分析平台进行偏最小二乘判别分析(partial least squares discriminant analysis, PLS-DA), 根据化合物分类和含量分别绘制分析热图。利用京都基因与基因组百科全书(Kyoto Encyclopedia of Genes

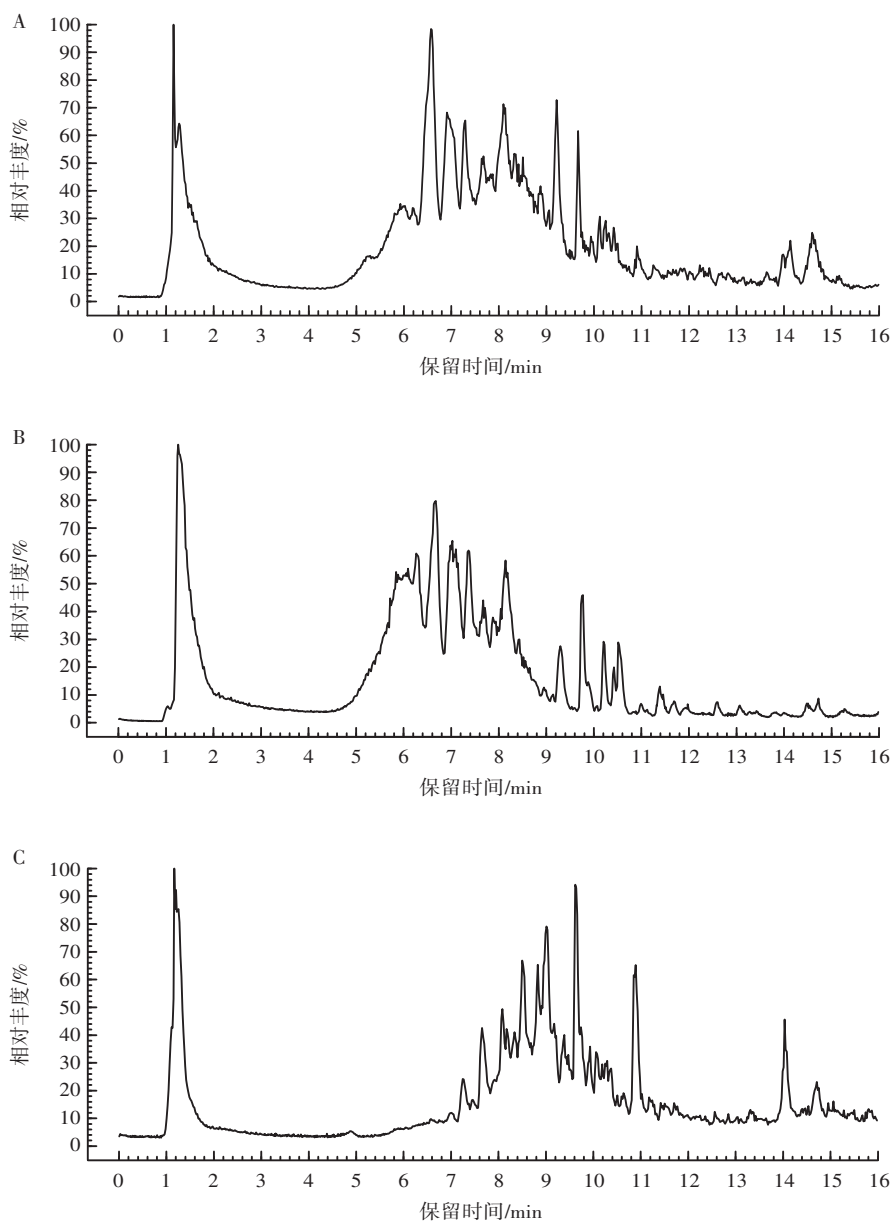
and Genomes, KEGG)数据库进行代谢途径分析, 归纳红景天和麦冬主要代谢途径, 对关键通路和中间体进行数据挖掘。

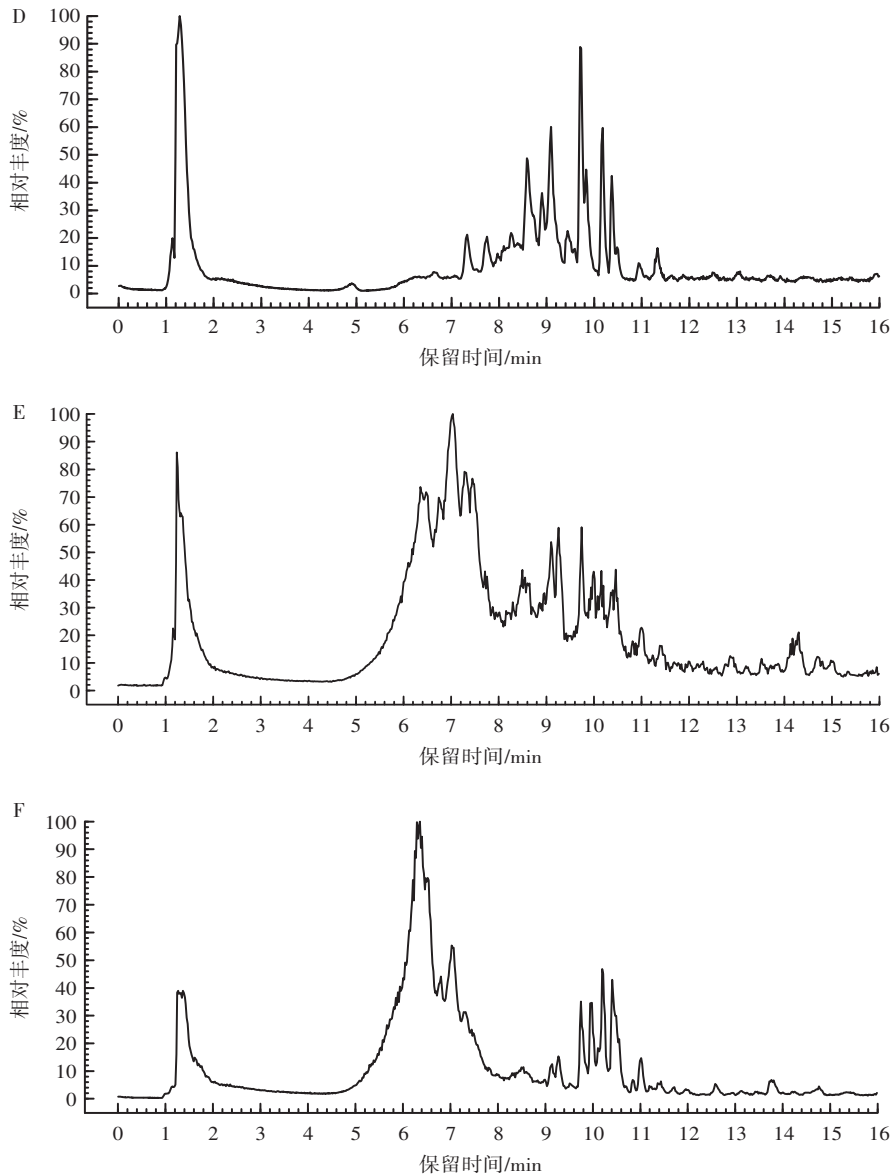
2 结果与分析

2.1 代谢组总体特征

利用液相色谱-高分辨质谱正、负离子交替模式的非靶向代谢组学方法进行红景天、麦冬以及红景天和麦冬复合提取物代谢产物化学成分差异分析, 结果见图 1。

在红景天中检测出 827 个化合物, 在麦冬中检测出 525 个化合物, 在红景天和麦冬复合提取物中检测出 565 个化合物。正离子模式下, 红景天和麦冬在 1~2 min、8~10 min 为主成分流出段, 表明主成分分子极性和化学结构较为接近。保留时间 6~7 min 时, 红景天成分峰强明显增高, 说明红景天中极性成分含量有





A. 红景天正离子模式; B. 红景天负离子模式; C. 麦冬正离子模式; D. 麦冬负离子模式; E. 红景天和麦冬复合提取物正离子模式; F. 红景天和麦冬复合提取物负离子模式。

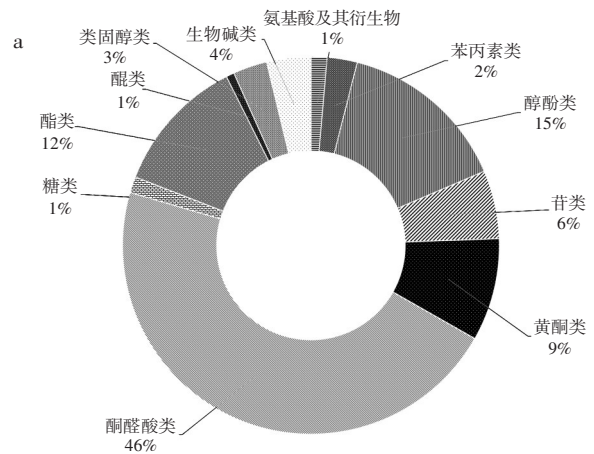
图1 样品总离子流图

Fig.1 Total ion chromatograms of samples

所增加。负离子模式下,麦冬与红景天总离子流图差异较大。红景天主成分流出时间为6~9 min,而该模式麦冬主成分流出时间为8.5~10.8 min,且峰型差异较大。红景天麦冬复合提取物的离子流图呈现出一定的复合性。

红景天和麦冬代谢产物分类分析结果见图2。

根据物质结构特点进行分类,红景天中主要代谢产物包括酮醛酸类269种(占46%)、醇酚类85种(占15%)、酯类68种、黄酮类51种、苷类34种、生物碱22种、类固醇类17种、苯丙素类15种、氨基酸及其衍生物8种、糖类8种、醌类2种。红景天中代谢产物以极性化合物居多,特别是酮醛酸类化合物,其次是多酚和



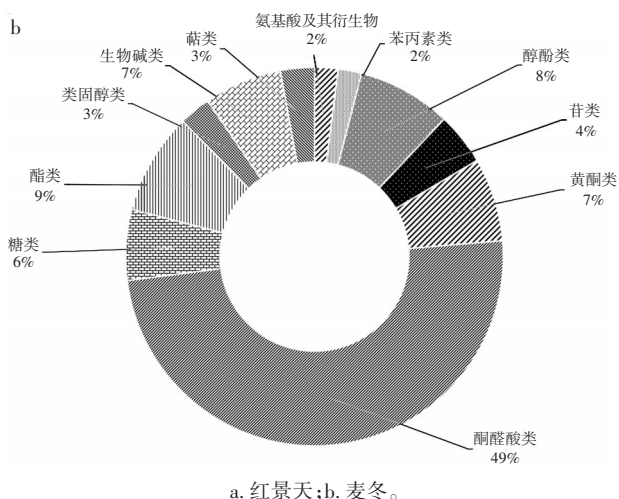


图2 代谢产物分类环形图

Fig.2 Circular diagram of metabolite classification

醇类化合物。麦冬中主要代谢产物分类为酮醛酸 221 种、醇酚类 36 种、酯类 29 种、黄酮类 32 种、苷类 20 种、生物碱 30 种、类固醇类 12 种、苯丙素类 28 种、氨基酸及其衍生物 9 种、糖类 27 种。从代谢产物物质种类中可以看出,麦冬中多糖等糖类成分的种类明显增多,种类占比为 6%,是红景天中糖类成分种类的 6 倍,证实了麦冬多糖是麦冬中重要的功能成分。红景天和麦冬作为根茎类药材主要代谢产物种类均以酮醛酸类为主,其次是醇酚类、酯类和黄酮类。红景天中苷类成分占比较麦冬更高,而麦冬中糖类成分种类更丰富,表明不同的种属类型和环境特点对代谢产物生成过程的影响。

红景天和麦冬复合提取物中代谢产物分类组成,结果见图 3。

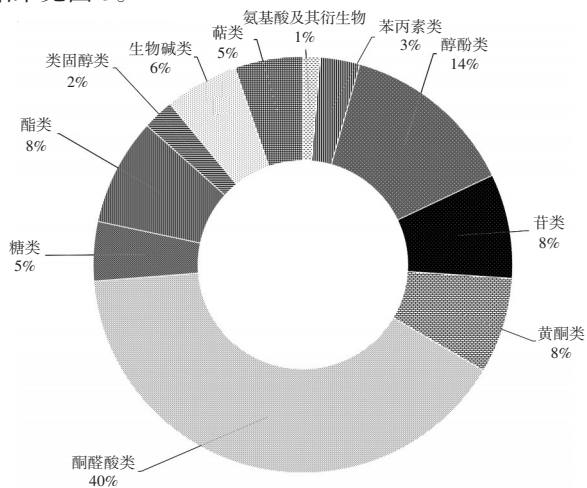


图3 红景天与麦冬复合提取物分类环形图

Fig.3 Circular diagram of metabolite classification of the mixed extract of *Rhodiola crenulatae* Radix et Rhizoma and *Ophiopogonis* Radix

由图 3 可知,在红景天与麦冬复合提取物中,物质种类组成较单一成分有所改变。在复合提取物中,酮醛酸占比下降,苷类和酯类物质种类占比上升。说明

在麦冬和红景天混合配伍过程中,部分酮醛酸类化合物与醇、酚、糖等含有羟基的化合物发生反应,提高了复合提取物中酯类成分的种类和丰富度。

红景天与麦冬复合提取物中非共有成分种类分析,结果见图 4。

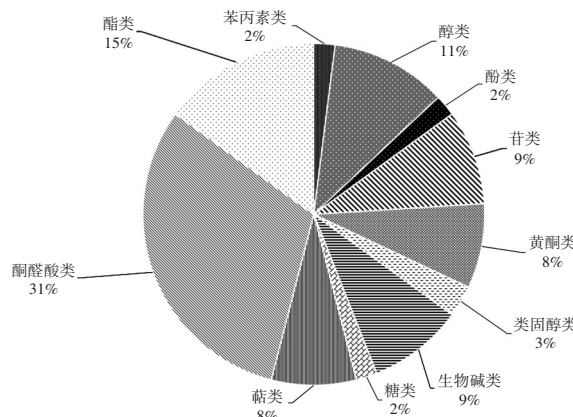


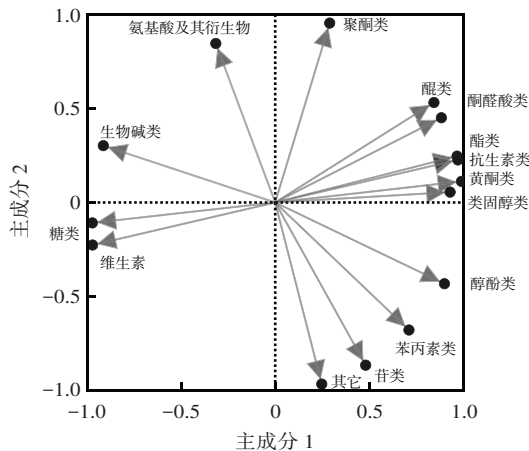
图4 红景天与麦冬复合提取物中非共有成分种类占比

Fig.4 Proportion of non-common components in the mixed extract of *Rhodiola crenulatae* Radix et Rhizoma and *Ophiopogonis* Radix

由图 4 可知,在红景天和麦冬的复合提取物非共有成分中,酯类成分占比 15%,较红景天(12%)和麦冬(9%)含量均出现明显上升,表明有新的酯类物质生成。这部分成分是影响其活性的关键。含量较高的酯类成分包括甲基(*E*)-3-(3,4,5-三甲氧基苯基)丙-2-烯酸酯、亚麻酸甘油酯、戊内酯、甲基 3,4,5-三甲氧基肉桂酸酯、D-半乳糖-1,5-内酯、2,3-二羟基苯丙酸酯、苜基 4-羟基苯甲酸酯和癸二酸二丁酯等。红景天中含有丰富的酮醛酸类化合物,麦冬以糖类成分作为主要功能物质活性基础,在两种药材配伍提取过程中,红景天中羧酸类成分可与麦冬中糖类成分形成酯类成分,成为其活性的重要物质基础。

2.2 PCA 和聚类分析

利用 PCA 进一步表明红景天和麦冬代谢组学数据的总体分布趋势和主要代谢产物的差异,结果见图 5。



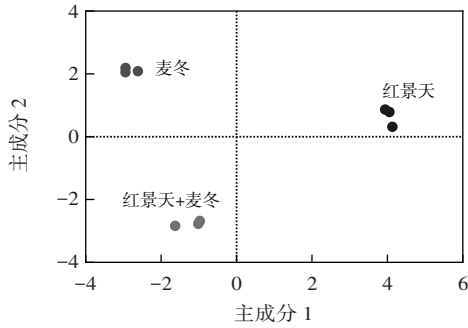


图5 主成分分析
Fig.5 PCA plots

由图5可知,主成分1主要包括酮醛酸、酯类、类固醇类、醇酚类、苯丙素类和苷类等。PC1的方差贡献率为81.8%,主成分2主要包括氨基酸及其衍生物、生物碱和维生素类等,PC2的方差贡献率为17.7%,说明主成分1和主成分2可以对数据进行有效解释。从主成分轴上可以明显区分红景天、麦冬以及红景天麦冬复合提取物成分,3组成分均有明显差异。

采用有监督模式的PLS-DA进一步分析组间成分含量差异,结果见图6。

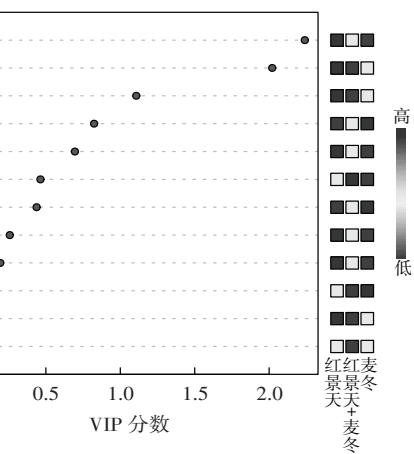
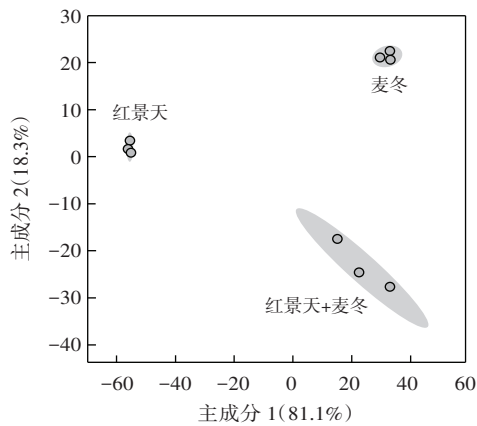


图6 PLS-DA分析
Fig.6 PLS-DA results

由图6可知,PLS-DA和PCA的结果均表明红景

天、麦冬以及红景天麦冬复合提取物可以明显分离,代谢产物种类之间具有明显差异,进一步说明在配伍过程中红景天麦冬复合物中物质种类和成分与单一药材有明显差异。从成分贡献率上分析,酮醛等极性成分对红景天有较大影响,酯类和苷类成分对复合提取物有较大贡献,麦冬中主要成分是糖类及氨基酸衍生物,分析结果与PCA结果一致。

2.3 差异代谢产物及代谢途径分析

根据其丰度变化进行层次聚类分析,并以热图概述代谢产物类型,结果见图7。

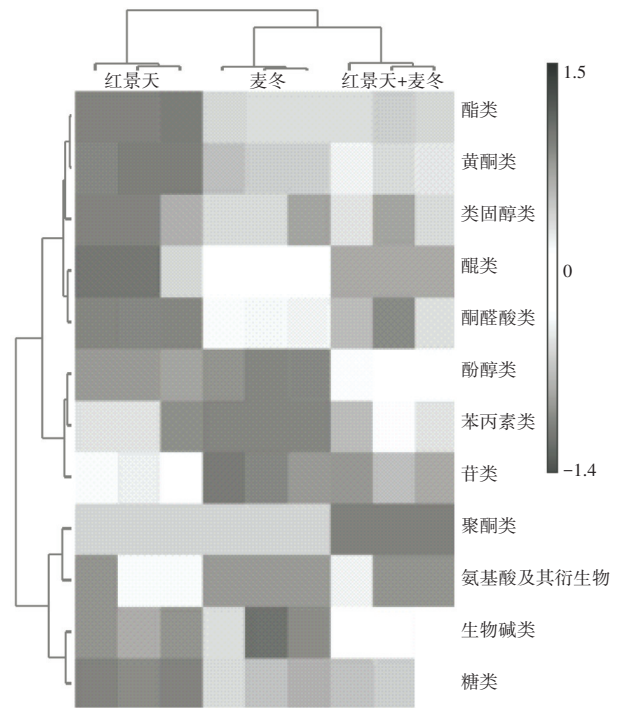


图7 代谢产物种类的层次聚类分析热图

Fig.7 Heatmap of hierarchical clustering analysis of metabolite types

由图7可知,红景天主要代谢产物组成为酮醛酸、黄酮类、类固醇类和醇酚类化合物;麦冬中主要成分为糖类和氨基酸及其衍生物;红景天和麦冬复合提取物中的主要物质为苷类、苯丙素类。

代谢产物含量分析结果见图8。

红景天中含量较高的成分为(10E,15Z)-9,12,13-三羟基十八碳-10,15-二烯酸、2-羟基-3,4-二甲氧基苯甲酸、4-羟基香豆素、对香豆酰奎宁酸、红景天苷、花生四烯酸、核黄素、4-羟基视黄酸、2-(3-甲硫基)丙基苹果酸酯等;麦冬中含量较高的成分为棉子糖、果糖、色氨酸、5,7-二羟基-2-(2,3,4-三羟基苯基)色原酮、毛果芸香碱、麦芽五糖、D-木酮糖酸、麦冬皂苷、11Z-二十碳烯酸、16-十七碳炔-1,2,4-三醇、2-(3-甲硫基)丙基苹果酸酯、戊内酯等;红景天和麦冬复合提取物中含量较高的成分为(Z)-2-辛基戊-2-烯二酸、山奈酚-3-芸香糖苷、

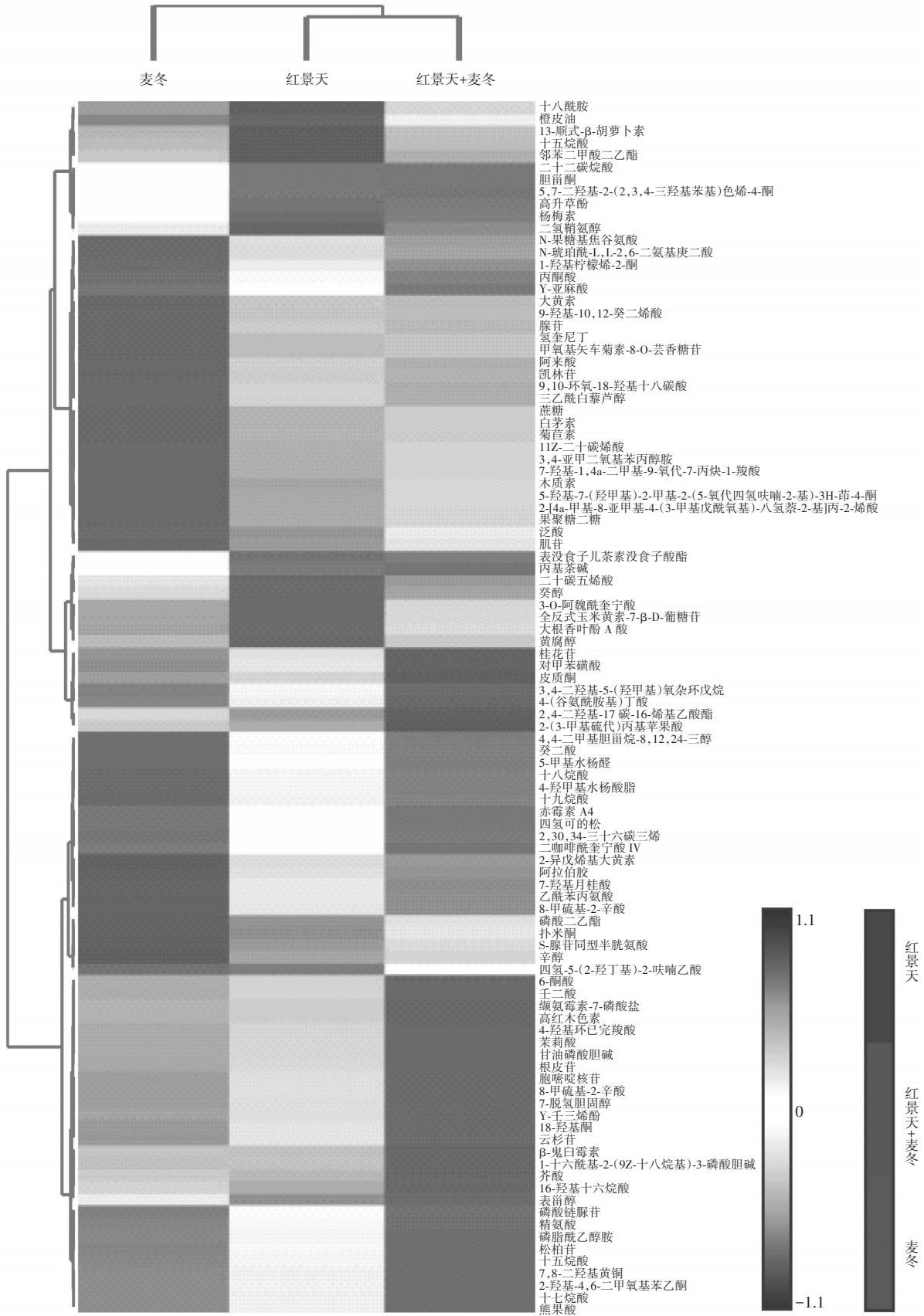


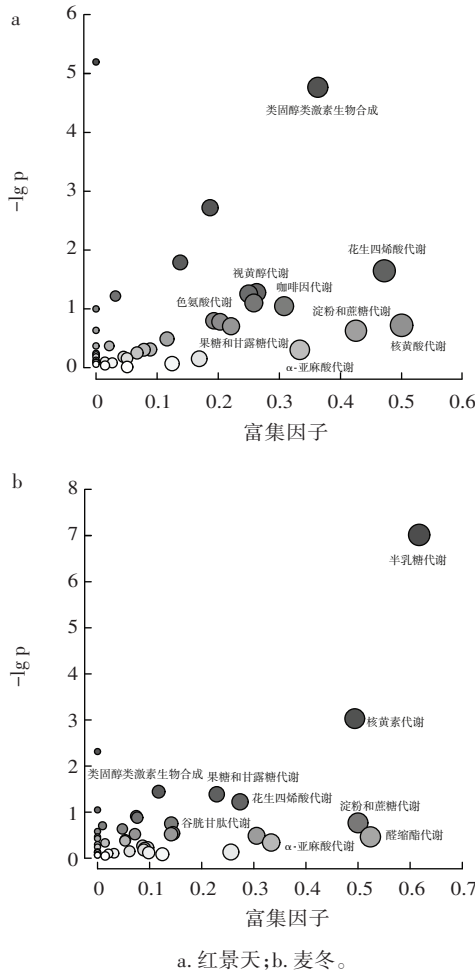
图 8 代谢产物含量层次聚类分析热图

Fig.8 Heatmap of hierarchical clustering analysis of metabolite content

山梨醇、戊内酯、16-十七碳炔-1,2,4-三醇、癸二酸、13(S)-氢过氧化亚麻酸。

2.4 代谢途径分析

利用 MetaboAnalyst 对红景天和麦冬中差异代谢产物进行代谢通路分析,结果见图 9。



a. 红景天; b. 麦冬。

图 9 代谢途径分析

Fig.9 Metabolic pathway analysis

由图 9 可知,在代谢途径分析过程中,应用 KEGG 数据库进行差异分析。颜色由白色到红色表示富集因子比重增加,气泡由大到小表示富集到该通路的差异代谢产物数目由少到多。以影响值大于 0.2 作为筛选依据,红景天主要代谢通路有 9 条,分别为核黄素代谢、花生四烯酸代谢、类固醇类激素合成代谢、淀粉和蔗糖代谢、视黄醇代谢、咖啡因代谢、果糖和甘露糖代谢、色氨酸代谢和 α -亚麻酸代谢的影响。麦冬代谢产物的形成受到半乳糖代谢、核黄素代谢、醛缩酶代谢、淀粉和蔗糖代谢、类固醇类激素合成代谢、花生四烯酸代谢、果糖和甘露糖代谢、谷胱甘肽合成代谢和 α -亚麻酸代谢的影响。红景天和麦冬共同的代谢途径有核黄素代谢、花生四烯酸代谢、类固醇类激素合成代谢、淀粉和蔗糖代谢、果糖和甘露糖代谢和 α -亚麻酸

代谢,以上代谢途径中主要代谢产物与根茎类药材中主要活性成分有关。红景天特有代谢途径为视黄醇代谢、咖啡因代谢和色氨酸代谢,以上代谢途径中的化合物与红景天中特有成分,特别是差异性成分苷类化合物的生成有关。麦冬特有代谢途径为半乳糖代谢、醛缩酶代谢和谷胱甘肽合成代谢。

麦冬主要活性产物麦冬多糖的形成与半乳糖代谢相关,谷胱甘肽合成代谢可能影响麦冬抗氧化活性代谢产物的生成。根据麦冬半乳糖代谢途径,结果见图 10。

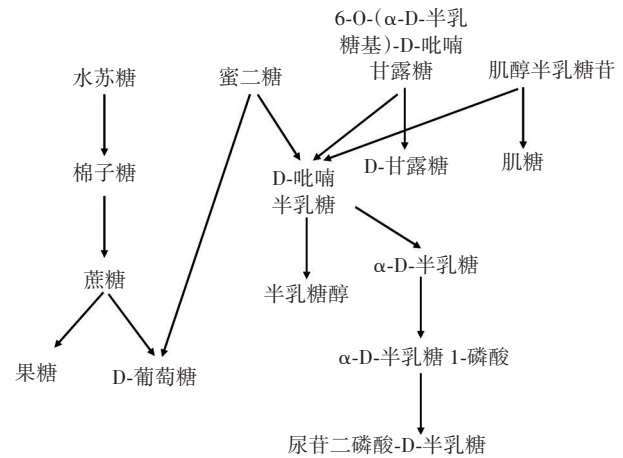


图 10 麦冬半乳糖代谢途径

Fig.10 Metabolic pathway of galactose in *Ophiopogonis Radix*

由图 10 可知,麦冬多糖成分的形成与水苏糖、棉子糖、蔗糖、果糖代谢以及半乳糖醇的代谢相关, D-吡喃半乳糖是麦冬半乳糖代谢途径的关键化合物,其作为多条代谢通路的连接化合物,是重要的糖代谢中间体,对糖代谢及其多糖化合物的形成具有重要作用。

3 讨论

红景天和麦冬作为根茎类药材,具有滋阴除燥、抗氧化和提高免疫力等共同作用,其生物活性又具有差异,可以配伍应用提高活性作用。从代谢组学以及物质组成种类和含量上分析,红景天、麦冬及复合提取物均具有明显差异。

红景天和麦冬代谢产物物质种类均以酮醛酸类、醇酚类、酯类和黄酮类物质种类最为丰富,此部分化合物为具有抗氧化和滋阴益气类根茎药材的有效成分。从物质种类分析,红景天特有成分中苷类物质较多,而麦冬以糖类成分居多,这与红景天苷、麦冬多糖等主要特征活性成分一致。在复合提取物中,酯类成分的含量上升,说明在配伍提取过程中,存在明显的酯化反应。

红景天与麦冬复合提取物中酮醛酸占比较高,其次是酯类和醇酚类。酮醛酸类型包括了部分挥发性成分和不饱和化合物等,此部分成分占比较大,但受到化

合物结构稳定性和挥发性的影响,在复合提取物中该部分物质种类有所差异。同时,在配伍提取过程中,可能存在部分苷元水解,产生新的酚、醇和羧酸等化合物。复合提取物中,酯类成分占比明显升高,说明在配伍过程中存在酯化反应,极性化合物羧酸与酚醇形成新的酯键改变复合提取物的化学组成。

代谢途径分析显示,红景天和麦冬具有代谢途径的高度一致性,如核黄素代谢、花生四烯酸代谢、类固醇类激素合成代谢、淀粉和蔗糖代谢、果糖和甘露糖代谢和 α -亚麻酸代谢,这为其共有物质结构提供了代谢基础。麦冬半乳糖代谢途径与其特有成分麦冬多糖的形成高度相关,其关键代谢化合物D-吡喃半乳糖连接多条代谢通路,是重要的麦冬多糖代谢中间体,是实现其生物活性的重要基础物质。

4 结论

红景天和麦冬中分别筛选出827个和525个代谢产物,以酮醛酸、醇酚类、酯类和黄酮类等为主,此类化合物与根茎类药材抗氧化、滋阴益气作用密切相关。红景天和麦冬的代谢产物分类差异主要体现在苷类和糖类,红景天中具有较为丰富的苷类化合物,而麦冬中包括较多种类的糖类成分,此分类特点与红景天苷和麦冬多糖等特征成分一致。通过聚类分析发现,红景天、麦冬及其复合提取物物质组成具有明显差异。通过分类分析发现,复合提取物中酯类成分物质种类明显上升,说明在配伍过程羧酸和酚醇结构生成酯键,改变了物质的结构类型特点,成为重要配伍应用物质基础。使用KEGG富集分析得到红景天和麦冬的代谢途径,核黄素代谢、花生四烯酸代谢、类固醇类激素合成代谢、淀粉和蔗糖代谢、果糖和甘露糖代谢和 α -亚麻酸代谢为其共有代谢途径。麦冬的半乳糖代谢过程中确定D-吡喃半乳糖是麦冬多糖形成的关键中间体,连接多个糖代谢通路。D-吡喃半乳糖的形成和代谢是影响麦冬有效活性成分的关键成分。红景天和麦冬根茎药材,用药部位具有一致性、代谢产物组成分类、代谢途径等的一致性为其生物活性提供了物质基础,同时在其配伍过程中生成的酯类物质、醇酚及羧酸等是其活性的关键物质基础。

参考文献:

- [1] 杨钰颖, 苗水, 李雯婷, 等. 植物代谢组学在根及根茎类中药材中的研究进展[J]. 中草药, 2023, 54(20): 6856-6865.
YANG Yuying, MIAO Shui, LI Wenting, et al. Research progress on plant metabolomics in root and rhizome traditional Chinese medicine[J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2023, 54(20): 6856-6865.
- [2] 彭志荣, 王旭易, 欧阳威, 等. 经典名方沙参麦冬汤颗粒制备工艺及质量标准研究[J]. 湖南中医药大学学报, 2024, 44(7): 1181-1192.

- PENG Zhirong, WANG Xuyi, OUYANG Wei, et al. Preparation technology and quality standards of the classic formula, Shashen Maidong Granule[J]. Journal of Hunan University of Chinese Medicine, 2024, 44(7): 1181-1192.
- [3] 张志强, 袁涛, 陈娟娟. 基于核磁指纹图谱和化学计量学方法的川麦冬质量评价[J]. 理化检验-化学分册, 2024, 60(5): 1-8.
ZHANG Zhiqiang, YUAN Tao, CHEN Juanjuan. Quality evaluation of Sichuan *Ophiopogon japonicus* based on $^1\text{H-NMR}$ fingerprints and chemometrics methods[J]. Physical Testing and Chemical Analysis(Part B:Chemical Analysis), 2024, 60(5): 1-8.
- [4] 王萍, 赵姿雯, 王丁丁. 生脉饮的化学成分、药理作用和临床应用进展[J]. 天津中医药大学学报, 2024, 43(6): 565-570.
WANG Ping, ZHAO Ziwen, WANG Dingding. Progress on chemical constituents, pharmacological effects and clinical applications of Shengmaiyin[J]. Journal of Tianjin University of Traditional Chinese Medicine, 2024, 43(6): 565-570.
- [5] 雷蓉, 刘亚茹, 袁浩, 等. UPLC-MS/MS法结合多元统计分析麦冬和湖北麦冬中多指标成分[J]. 中药材, 2024, 47(1): 137-142.
LEI Rong, LIU Yaru, YUAN Hao, et al. Analysis of multi-index components in *Ophiopogon japonicus* and *Ophiopogon japonicus* in Hubei Province by UPLC-MS/MS combined with multivariate statistics[J]. Journal of Chinese Medicinal Materials, 2024, 47(1): 137-142.
- [6] 方佳. 基于代谢组学和肠道菌群分析探讨麦冬寡糖抗2型糖尿病的作用机制[D]. 广州: 广州中医药大学, 2021.
FANG Jia. Based on metabolomics and intestinal flora analysis, the mechanism of *Ophiopogon japonicus* oligosaccharide against type 2 diabetes mellitus was discussed[D]. Guangzhou: Guangzhou University of Chinese Medicine, 2021.
- [7] 贺嘉, 杨蒙恩, 史晶晶. 红景天的质量控制现状及质量标志物预测分析[J]. 中华中医药学刊, 2024, 12(7): 1-9.
HE Jia, YANG Meng'en, SHI Jingjing. Quality control status and predictive analysis of quality markers of *Rhodiola*[J]. Chinese Archives of Traditional Chinese Medicine, 2024, 12(7): 1-9.
- [8] 樊金昊, 许仙明, 孙桂鸿. 以藏药红景天为碳源的碳点制备及表征研究[J]. 生物学杂志, 2024, 7(34): 1-8.
FAN Jinhao, XU Xianming, SUN Guihong. Preparation and characterization of carbon dots using Tibetan medicine *Rhodiola crenulata* as carbon source[J]. Journal of Biology, 2024, 7(34): 1-8.
- [9] 骆前飞, 王瑞, 王峥涛, 等. 基于UPLC-Q-TOF-MS结合分子网络技术快速表征大花红景天的化学成分[J]. 中成药, 2024, 46(6): 2101-2114.
LUO Qianfei, WANG Rui, WANG Zhengtao, et al. Rapid characterization of chemical constituents of *Rhodiola crenulata* based on UPLC-Q-TOF-MS combined with molecular network technology[J]. Chinese Traditional Patent Medicine, 2024, 46(6): 2101-2114.
- [10] 陈晓云, 谈欣怡. 君臣佐使配伍原则在现代中医药临床研究中的作用[J]. 现代中西医结合杂志, 2020, 29(13): 1415-1418.
CHEN Xiaoyun, TAN Xinyi. The role of compatibility principle of monarch, minister, assistant and envoy in clinical research in modern traditional Chinese medicine[J]. Modern Journal of Integrated Traditional Chinese and Western Medicine, 2020, 29(13): 1415-1418.
- [11] GRIJSELS S, VASSKOG T, HEINSVIG P J, et al. Validation of two LCHRMS methods for large-scale untargeted metabolomics of serum samples: Strategy to establish method fitness-for-purpose[J]. Journal of Chromatography A, 2024, 1732: 465230.
- [12] BOZZA D, BARBONI D, SPADAFORA N D, et al. Untargeted metabolomics approaches for the characterization of cereals and their derived products by means of liquid chromatography coupled to

- high resolution mass spectrometry[J]. Journal of Chromatography Open, 2024, 6: 100168.
- [13] WANG L L, XIE J L, MIAO Y W, et al. Exploration of the effects of geographical regions on the volatile and non-volatile metabolites of black tea utilizing multiple intelligent sensory technologies and untargeted metabolomics analysis[J]. Food Chemistry: X, 2024, 23: 101634.
- [14] CHEN W, YU J W, DENG Y Y, et al. Identification of sedative-hypnotic compounds shared by five medicinal Polyporales mushrooms using UPLC-Q-TOF-MS/MS-based untargeted metabolomics[J]. Phytomedicine: International Journal of Phytotherapy and Phytopharmacology, 2024, 128: 155355.
- [15] SÁNCHEZ-RECILLAS E, ALMANZA-AGUILERA E, DUFOO-HURTADO E, et al. Untargeted metabolomics of gut-derived metabolites from *in vitro* colonic fermentation of garambullo (*Mytillocactus geometrizans*) [J]. Journal of Functional Foods, 2024, 114: 106063.
- [16] LE SCANFF M, MARCOURT L, RUTZ A, et al. Untargeted metabolomics analyses to identify a new sweet compound released during post-fermentation maceration of wine[J]. Food Chemistry, 2024, 461: 140801.
- [17] HEMMER S, MANIER S K, WAGMANN L, et al. Impact of four different extraction methods and three different reconstitution solvents on the untargeted metabolomics analysis of human and rat urine samples[J]. Journal of Chromatography A, 2024, 1725: 464930.
- [18] PENG Z X, GU H W, PAN Y, et al. Revealing the key antioxidant compounds and potential action mechanisms of Chinese Cabernet Sauvignon red wines by integrating UHPLC-QTOF-MS-based untargeted metabolomics, network pharmacology and molecular docking approaches[J]. Food Chemistry, 2024, 460(Pt 1): 140540.
- [19] 程锦春, 戴璐, 王丽红. 基于非靶向代谢组学分析 3 种青藏高原药用植物根际土壤代谢产物特征[J]. 中草药, 2024, 55(8): 2734-2745.
- CHENG Jinchun, DAI Lu, WANG Lihong. Characteristics of metabolites in rhizosphere soil of three medicinal plants in the Qinghai Tibet Plateau based on non targeted metabolomics analysis[J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2024, 55(8): 2734-2745.
- [20] VASEGHI BAKHSHAYESH R, PANAH B, HEJAZI M A, et al. Metabolite profiling of different Iranian traditional yogurts using an untargeted metabolomics approach[J]. Heliyon, 2024, 10(15): e34760.
- [21] SHAN X, LI L, LIU Y, et al. Untargeted metabolomics analysis using UPLC-QTOF/MS and GC-MS to unravel changes in antioxidant activity and compounds of almonds before and after roasting[J]. Food Research International, 2024, 194: 114870.
- [22] 杨思雨, 池玉洁, 张海琼. 基于广泛靶向代谢组学分析不同基原黄连根茎次生代谢物差异[J]. 中国中药杂志, 2024, 49(20): 1-10.
- YANG Siyu, CHI Yujie, ZHANG Haiqiong. Analysis of differences in secondary metabolites of coptis root and stem based on broad targeted metabolomics[J]. China Journal of Chinese Materia Medica, 2024, 49(20): 1-10.
- [23] 王昕璐, 武琳霞, 代敏. 基于植物代谢组学的不同品种甜椒特征成分挖掘[J]. 农产品质量与安全, 2024, 7(4): 5-12.
- WANG Xinlu, WU Linxia, DAI Min. Mining of characteristic components of different varieties of sweet peppers based on plant metabolomics[J]. Quality and Safety of Agro-products, 2024, 7(4): 5-12.
- [24] 劳秋荣, 袁颖宸, 王花欣, 等. 代谢组学在中药配伍减毒中的应用进展[J]. 中华中医药杂志, 2024, 39(2): 866-870.
- LAO Qiurong, YUAN Haochen, WANG Huaxin, et al. Application progress of metabonomics in compatibility and attenuation of traditional Chinese medicine[J]. China Journal of Traditional Chinese Medicine and Pharmacy, 2024, 39(2): 866-870.
- [25] 郭凯欣, 唐慧, 李燕芳, 等. 代谢组学结合组方配伍理论探讨芪葛汤配伍的降脂作用[J]. 中药新药与临床药理, 2024, 35(7): 971-984.
- GUO Kaixin, TANG Hui, LI Yanfang, et al. Metabonomics combined with prescription compatibility theory to explore the lipid-lowering effect of Qige decoction compatibility[J]. Traditional Chinese Drug Research and Clinical Pharmacology, 2024, 35(7): 971-984.

责任编辑:张璐
收稿日期:2024-08-20