

## UPLC 指纹图谱、粉末色度值联合化学计量学评价茅根炭的质量

李娇艳<sup>1,2</sup>, 刘晓霞<sup>2</sup>, 郑蓉慧<sup>1,2</sup>, 粟春枝<sup>1,2</sup>, 谢翡翡<sup>1,2</sup>, 张 勋<sup>2</sup>, 孙冬梅<sup>2\*</sup>

1. 广州中医药大学, 广东 广州 510006

2. 广东一方制药有限公司 广东省中药配方颗粒企业重点实验室, 广东 佛山 528244

**摘要:** **目的** 研究不同炮制时间茅根炭超高效液相色谱 (UPLC) 指纹图谱与饮片粉末色度值的关系。**方法** 以特征峰相对峰面积、色度值为指标进行化学计量学分析, 进行粉末色度值与各特征峰相对峰面积相关性分析。**结果** UPLC 指纹图谱的 11 个特征峰相对峰面积与色度值呈现不同程度的相关性: 其中新绿原酸、化合物 5、咖啡酸、绿原酸、化合物 8、化合物 9 和隐绿原酸随着炭化程度加深而含量递减, 化合物 1、5-羟甲基糠醛、化合物 3、4-香豆酸随着炭化程度加深而含量先增后减。聚类分析 (HAC)、主成分分析 (PCA)、正交偏最小二乘法判别分析 (OPLS-DA) 均将不同炮制程度的茅根炭分为 3 类, OPLS-DA 结果显示 5-羟甲基糠醛、隐绿原酸、4-香豆酸、绿原酸和化合物 5 是茅根炭炮制过程中的重要质量评价指标。**结论** 茅根炭粉末色度值与化学成分变化的关联度较高, 可为茅根炭质量控制研究提供思路。

**关键词:** 茅根炭; 色度值; UPLC 指纹图谱; 相关性; 聚类分析; 主成分分析; 正交偏最小二乘法判别分析

**中图分类号:** R286.02 **文献标志码:** A **文章编号:** 1674-5515(2026)03-0639-07

**DOI:** 10.7501/j.issn.1674-5515.2026.03.010

## Quality evaluation of carbonized *Imperatae Rhizoma* by combining UPLC fingerprint, powder chromaticity values and chemometrics

LI Jiaoyan<sup>1,2</sup>, LIU Xiaoxia<sup>2</sup>, ZHENG Ronghui<sup>1,2</sup>, SU Chunzhi<sup>1,2</sup>, XIE Feifei<sup>1,2</sup>, ZHANG Xun<sup>2</sup>, SUN Dongmei<sup>2</sup>

1. Guangzhou University of Chinese Medicine, Guangzhou 510006, China

2. Guangdong Provincial Key Laboratory of Traditional Chinese Medicine Formula Granule, Guangdong Yifang Pharmaceutical Co., Ltd., Foshan 528244, China

**Abstract: Objective** To investigate the relationship between UPLC fingerprints and chromaticity values of carbonized *Imperatae Rhizoma* with different processing times. **Methods** Chemometrics analysis was conducted using the relative peak area of characteristic peaks and chromaticity values as indicators. The correlation between the chromaticity values of the powder and the relative peak areas of each characteristic peak was analyzed. **Results** The relative peak areas of 11 characteristic peaks in the UPLC fingerprint showed different degrees of correlation with chromaticity values: among them, the contents of neochlorogenic acid, compound 5, caffeic acid, chlorogenic acid, compound 8, compound 9, and cryptochlorogenic acid decreased with the deepening of carbonization degree. While the contents of compound 1, 5-HMF, compound 3, and 4-coumaric acid first increased and then decreased as the carbonization degree deepened. Carbonized *Imperatae Rhizoma* with different processing degrees were all classified into 3 categories according to HCA, PCA, and OPLS-DA. The OPLS-DA results indicated that 5-HMF, cryptochlorogenic acid, 4-coumaric acid, chlorogenic acid, and compound 5 were important quality indicators during the processing of carbonized *Imperatae Rhizoma*. **Conclusion** There is a high correlation between the chromaticity value of carbonized *Imperatae Rhizoma* powder and its chemical composition changes, which can provide ideas for the quality for carbonized *Imperatae Rhizoma*.

**Key words:** carbonized *Imperatae Rhizoma*; chromaticity value; UPLC fingerprint; correlation; HCA; PCA; OPLS-DA

茅根炭收载于《中国药典》2025 年版一部白茅根项下, 味甘、性寒, 归肺、胃、膀胱经, 具有凉

血止血、清热利尿的功效, 临床常用于血热出血证、热病烦渴、湿热黄疸等症<sup>[1]</sup>。白茅根炒制后无论是

收稿日期: 2025-10-14

基金项目: 佛山市南海区重点领域科技攻关专项 (南科[2023]20 号-18)

作者简介: 李娇艳 (1999—), 女 (土家族), 硕士研究生, 从事中药质量评价研究。E-mail: 1845998893@qq.com

\*通信作者: 孙冬梅 (1969—), 女, 主任中药师, 博士研究生导师, 从事中药质量评价研究。E-mail: 1471237855@qq.com

在外观还是功效上都有很大的变化,但目前没有明确规定炮制参数和终点,很难保证产品的质量和疗效。因此,需要解决茅根炭饮片炮制工艺全靠经验、缺乏具体的炮制工艺参数和相关质量控制指标的问题。此外,炭药要求“炒炭存性”,即在炒成炭的同时又要保证药物内部不炭化、原本特性不丧失<sup>[2]</sup>。为充分体现中药所具备的多成分特性,可借助中药指纹图谱这一技术手段对中药的质量展开整体性控制<sup>[3]</sup>。颜色可以直观地评价中药饮片的质量,但因颜色属于一种主观评价,缺少客观依据,对于颜色的判断、理解往往因人而异,故需要将主观经验判定的外观颜色描述转化为可量化的具体数值<sup>[4-5]</sup>。分光测色仪可以将外观颜色转化为可量化的具体数值<sup>[6-7]</sup>。本研究将炮制获取的茅根炭 UPLC 指纹图谱数据与该过程中粉末色度值的动态变化情况进行整合分析,运用多元统计学方法进行化学计量学分析,进而明确茅根炭粉末色度值改变与其中内在化学成分变化之间的关联关系,进一步筛选出对茅根炭颜色变化具有显著影响的特征性化学成分,以期对茅根炭饮片质量评价体系的完善提供科学且可靠的参考依据。

## 1 仪器与材料

Waters ARC 型高效液相色谱仪(沃特世公司); TS7600 型分光测色仪(深圳市三恩时科技有限公司); XP26 型百万分之一天平、ME204E 型万分之天平(梅特勒公司); Milli-0Direct 型超纯水系统(默克公司); H22-X3 型电陶炉(杭州九阳生活电器有限公司); AR852B+型红外测温仪(东莞万创电子制品有限公司); 111B 型二两装高速中药粉碎机(浙江瑞安市永历制药机械有限公司)。

4-香豆酸(批号 112037-202102,质量分数 99.7%)、5-羟甲基糠醛(批号 11162-202316,质量分数 98.4%)、绿原酸(批号 110753-202119,质量分数 96.3%)、咖啡酸(批号 110885-201703,质量分数 99.7%)对照品均购自中国食品药品检定研究院;隐绿原酸(批号 ST07850120,质量分数 98.0%)、新绿原酸(批号 DSTDX001503,质量分数 97.4%)对照品均购自成都乐美天医药科技有限公司;甲醇为色谱纯(默克公司),水为超纯水,其余试剂均为分析纯。白茅根饮片经广东一方制药有限公司孙冬梅教授鉴定为禾本科植物白茅 *Imperata cylindrica* Beauv. var. *major* (Nees) C. E. Hubb 的干燥根茎,样品产地信息见表 1。

表 1 样品产地信息

Table 1 Sample Origin Information

编号	产地	编号	产地
B1	广西河池	B6	河南南阳
B2	广西玉林	B7	山东泰安
B3	广东揭阳	B8	山东临沂
B4	广东清远	B9	四川南充
B5	四川南充	B10	广西钦州

## 2 方法与结果

### 2.1 不同炮制时间茅根炭的制备

取净白茅根段(编号 B1),置热锅内,用武火炒制 60 min,分别取 3、6、10、12、15、20、30、40、50、60 min 的样品,放凉,即得(编号分别为 B1、M1~M10)。其中炒制 12 min 得到的饮片(M4)符合《中国药典》2025 年版一部白茅根项下对茅根炭的制备方法的相关规定:“照炒炭法(通则 0213)炒至焦褐色”<sup>[1]</sup>。

### 2.2 茅根炭的 UPLC 指纹图谱

**2.2.1 色谱条件** 采用 Waters ACQUITY UPLC BEH C<sub>18</sub> 色谱柱(100 mm×2.1 mm, 1.7 μm);以甲醇(A)-0.1%磷酸水溶液(B)为流动相,梯度洗脱(0~5 min, 2%A; 5~20 min, 2%→15%A; 20~25 min, 15%A; 25~30 min, 15%→25%A);检测波长为 290 nm 体积流量为 0.3 mL/min;柱温为 30 ℃;进样量为 2 μL。

**2.2.2 对照品溶液的制备** 分别取绿原酸、新绿原酸、隐绿原酸、4-香豆酸、咖啡酸、5-羟甲基糠醛对照品适量,精密称定,加甲醇制成含绿原酸、新绿原酸、隐绿原酸、4-香豆酸、咖啡酸、5-羟甲基糠醛 68.468、45.732、37.575、46.375、72.688、25.373 μg/mL 的混合对照品溶液。

**2.2.3 供试品溶液的制备** 精密称取茅根炭粉末(过 3 号筛)约 1.0 g,置具塞锥形瓶中,精密加入 10%甲醇 25 mL,称量,超声处理(功率 300 W、频率 40 kHz) 30 min,取出,放冷,再称重,用 10%甲醇补足减失的量,摇匀,滤过,取续滤液,即得。

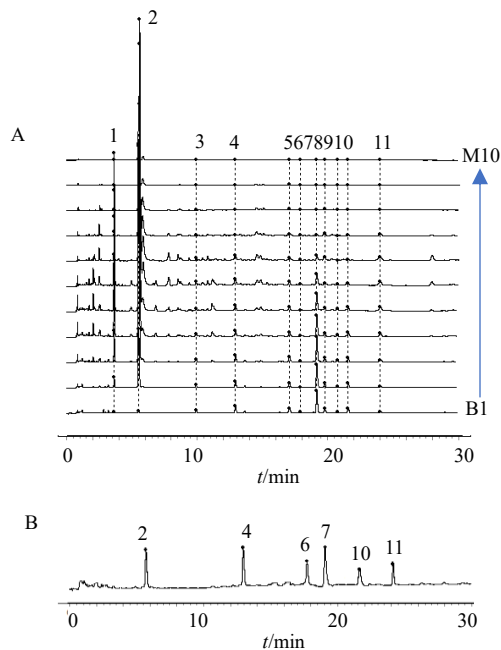
**2.2.4 精密度试验** 取茅根炭样品粉末(编号 M4),制备供试品溶液,连续进样 6 次。选取 7 号色谱峰(绿原酸)作为参照峰(记为 S 峰),计算其余各色谱峰与 S 峰之间的相对保留时间和相对峰面积,结果 RSD 值为 0.95%~1.36%、0.41%~1.24%。

**2.2.5 稳定性试验** 取茅根炭样品粉末(编号 M4),制备供试品溶液,分别于 0、4、8、12、24、

48 h 进样测定, 选取 7 号色谱峰 (绿原酸) 作为参照峰 (记为 S 峰), 计算其余各色谱峰与 S 峰之间的相对保留时间及相对峰面积, 得 RSD 值分别为 0.42%~0.70%、0.27%~1.13%, 表明供试品溶液在 48 h 内稳定性良好。

**2.2.6 重复性试验** 取茅根炭样品粉末 (编号 M4), 制备 6 份供试品溶液, 选取 7 号色谱峰 (绿原酸) 作为参照峰 (记为 S 峰), 计算其余各色谱峰与 S 峰之间的相对保留时间和相对峰面积, 得 RSD 值分别为 0.50%~0.78%、0.15%~0.52%。

**2.2.7 指纹图谱的建立** 取经不同时长炮制处理的炒茅根 (编号为 B1、M1~M10) 样品, 制备供试品溶液并进样测定, 记录生成的色谱图数据。将上述记录的色谱图分别导入《中药色谱指纹图谱相似度评价系统 (2012 版)》中, 通过该系统的功能分析和处理最终得到白茅根、炒茅根样品的 UPLC 叠加指纹图谱, 见图 1。白茅根、炒茅根样品共标定 11 个特征峰, 通过与对照品进行对比, 确定了峰 2 为 5-羟甲基糠醛, 峰 4 为新绿原酸, 峰 6 为咖啡酸, 峰 7 为绿原酸, 峰 10 为隐绿原酸, 峰 11 为 4-香豆酸。



2-5-羟甲基糠醛, 4-新绿原酸, 6-咖啡酸, 7-绿原酸, 10-隐绿原酸, 11-4-香豆酸。

2-5-hydroxymethylfurfural; 4-neochlorogenic acid; 6-caffeic acid; 7-chlorogenic acid; 10-cryptochlorogenic acid; 1-4-coumaric acid.

图 1 茅根炭的 UPLC 指纹图谱堆叠图(A)和特征图谱(B)

Fig. 1 UPLC fingerprint (A) and characteristic chromatogram (B) of Carbonized *Imperatae cylindrica*

**2.2.8 茅根炭炮制过程 UPLC 指纹图谱动态变化分析** 以白茅根 (编号 B1) 的图谱为对照, 计算其与不同炮制程度炒茅根图谱的相似度, 结果见表 2。结果显示, 相似度随着炮制时间的延长逐渐降低。选取 B1 样品的图谱峰面积作为参照基准, 在此基础上, 进一步计算不同炮制程度下炒茅根样品所对应的相对峰面积。11 个共有峰的相对峰面积随着炮制时间的延长呈现出不同的变化趋势, 其中化合物 1、5-羟甲基糠醛、化合物 3、4-香豆酸的相对峰面积呈先升后降的趋势, 其他共有峰单位峰面积呈下降趋势。另外当炮制 40 min 时, 化合物 3、新绿原酸、绿原酸基本无法检出。

表 2 茅根炭的相似度

Table 2 Similarity of carbonized *Imperatae Rhizoma*

编号	相似度	编号	相似度
B1	1.000	M6	0.505
M1	0.999	M7	0.431
M2	0.994	M8	0.386
M3	0.961	M9	0.393
M4	0.930	M10	0.347
M5	0.651		

## 2.3 茅根炭饮片粉末色度值测定

**2.3.1 测定方法** 取过 3 号筛的茅根炭饮片粉末, 将粉末均匀压制在载玻片表面, 控制压制后的粉末层厚度维持在 1 mm 左右; 分别测定各份茅根炭饮片粉末样品的色度值, 每个样品均设置 3 次平行测定操作, 最终以 3 次测定结果的平均值作为该样品的色度值数据。总色值  $E^*$  的公式为  $Eab^* = (L^{*2} + a^{*2} + b^{*2})^{1/2}$ 。明度差值为  $\Delta L^* = L_{tn}^* - L_{t0}^*$ , 色差值为  $\Delta Eab^* = (\Delta L^{*2} + \Delta a^{*2} + \Delta b^{*2})^{1/2}$  ( $\Delta a^* = a_{tn}^* - a_{t0}^*$ ,  $\Delta b^* = b_{tn}^* - b_{t0}^*$ ) [8-11]。

**2.3.2 精密度试验** 取编号 M4 的茅根炭粉末样品, 进行连续 6 次重复测定, 记录色度数据, 该样品色度参数  $L^*$ 、 $a^*$ 、 $b^*$  的 RSD 值均处于 2.0% 以下。

**2.3.3 重复性试验** 取编号 M4 的茅根炭粉末, 平行称取 6 份相同样品, 分别进行色度检测, 该样品色度参数  $L^*$ 、 $a^*$ 、 $b^*$  的 RSD 值均处于 3.0% 以下。

**2.3.4 稳定性试验** 取编号 M4 的茅根炭粉末, 分别在 0、2、4、6、8、10、12、24 h 进行色度检测, 并逐一记录各时间节点对应的  $L^*$ 、 $a^*$ 、 $b^*$  参数值, 得出  $L^*$ 、 $a^*$ 、 $b^*$  各参数的 RSD 值均小于 2.0%, 结合稳定性评价标准可判定, 该茅根炭 (M4) 样品在

24 h 内色度值具备良好的稳定性。

**2.3.5 测定结果** 取白茅根和不同炮制时长的茅根炭粉末, 进行色度测定, 并同步记录色度数据。从图 2 的色彩图像可以看出不同炮制时间的差异很大, 颜色逐渐变暗, 表 3 为茅根炭炮制过程样品的色度值数据。分别以色度值为纵坐标, 以炮制时间为横坐标进行回归分析, 得色度值  $L^*$  的回归方程为  $Y=0.029\ 86\ X^2-2.643\ X+72.44$ ,  $r=0.970\ 2$ ; 色度值  $a^*$  回归方程为  $Y=-0.000\ 552\ 9\ X^2-0.097\ 78\ X+9.959$ ,  $r=0.977\ 0$ ; 色度值  $b^*$  的回归方程为  $Y=0.002\ 188\ X^2-0.505\ 9\ X+25.999$ ,  $r=0.968\ 1$ ; 色度值  $Eab^*$  的回归方程为  $Y=0.027\ 47\ X^2-2.584\ X+77.26$ ,  $r=0.979\ 8$ ;  $L^*$ 、 $a^*$ 、 $b^*$ 、 $Eab^*$  的范围分别为: 16.82~71.50、2.55~9.82、4.56~24.64、17.62~75.60;  $L^*$ 、 $a^*$ 、 $b^*$ 、 $Eab^*$  均呈下降的趋势。

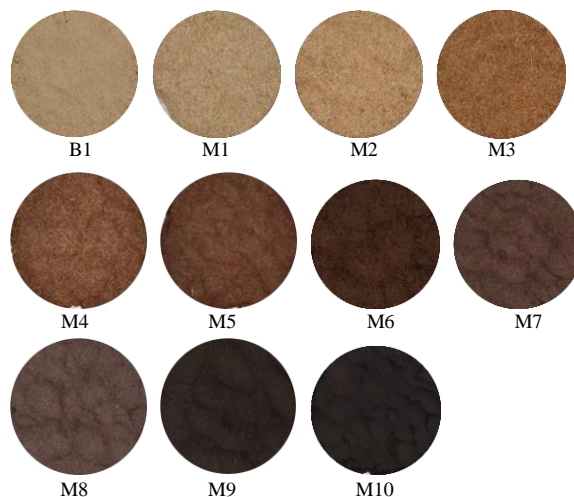


图 2 茅根炭粉末的色彩图像

Fig. 2 Color images of carbonized *Imperatae Rhizoma* powder

表 3 茅根炭样品色度值

Table 3 Chromaticity values of carbonized *Imperatae Rhizoma*

编号	炮制时间/min	$L^*$	$a^*$	$b^*$	$Eab^*$	$\Delta L^*$	$\Delta a^*$	$\Delta b^*$	$\Delta Eab^*$
B1	0	71.50	9.48	22.67	75.60				
M1	3	67.40	9.30	23.80	72.08	-4.10	-0.18	1.12	4.72
M2	6	66.11	9.15	24.30	71.03	-5.38	-0.33	1.63	6.25
M3	10	48.98	9.00	24.64	55.56	-22.52	-0.48	1.96	23.51
M4	12	40.21	9.82	22.90	47.31	-31.29	0.34	0.23	32.12
M5	15	31.21	8.89	18.34	37.28	-40.29	-0.59	-4.33	41.01
M6	20	27.08	7.99	15.78	32.35	-44.41	-1.49	-6.89	45.27
M7	30	23.22	6.26	11.64	26.72	-48.28	-3.22	-11.03	49.66
M8	40	19.46	4.16	7.59	21.30	-52.04	-5.32	-15.08	54.21
M9	50	18.70	3.64	6.03	19.98	-52.80	-5.84	-16.64	55.37
M10	60	16.82	2.55	4.56	17.62	-54.67	-6.93	-18.11	57.59

**2.4 茅根炭饮片化学成分与粉末色泽关联性分析**

采用 SPSS 26.0 软件, 以不同炮制时间炒茅根 UPLC 指纹图谱的相对峰面积和色度值 ( $L^*$ 、 $a^*$ 、 $b^*$ 、 $Eab^*$ ) 为变量进行相关性分析<sup>[12]</sup>, 结果见表 4。可知 5-羟甲基糠醛、化合物 5、绿原酸、化合物 8、化合物 9 与  $L^*$ 、 $a^*$ 、 $b^*$ 、 $Eab^*$  均呈极显著的正相关 ( $P < 0.01$ ); 化合物 3、新绿原酸与  $a^*$ 、 $b^*$  呈极显著正相关 ( $P < 0.01$ ); 咖啡酸与  $a^*$  呈极显著正相关 ( $P < 0.01$ ); 隐绿原酸与  $b^*$  呈极显著正相关 ( $P < 0.01$ ); 4-香豆酸与  $a^*$  呈显著正相关 ( $P < 0.05$ )。

**2.5 化学计量学分析**

**2.5.1 聚类分析 (CA)** 采用 SPSS 软件, 以不同炮制时间炒茅根饮片共有特征峰的相对峰面积为

变量进行聚类分析。采用瓦尔德法作为核心分析方法, 并选用欧氏距离来计算变量间的相似度, 结果见图 3。当欧氏距离在 12~25 时, 样品可分为两个大类, B1、M1~M2 和 M7~M10 为第一类, M3~M6 为第二类。其中第一类又能分为两类, B1、M1~M2 为一类, M7~M10 为一类。结果表明不同炮制程度炒茅根饮片化学成分的质量分数存在差异。

**2.5.2 主成分分析 (PCA)** 采用 SIMCA 14.1 软件分别以不同炮制时间炒茅根饮片共有特征峰的相对峰面积和色度值为变量进行 PCA 分析, 建立 PCA 模型, 主成分模型累积贡献率达到 99.5%,  $Q^2$  值为  $0.958 > 0.5$ ; 色度值模型累积贡献率达到 100.0%,  $Q^2$  值为  $0.910 > 0.5$ ; 表明这两个模型均有效, 结果

见图 4、5。在无监督模式下，两个模型均将茅根炭分为 3 类，B1、M1~M2 为一类；M3~M6 为一类；M7~M10 为一类，与聚类分析结果基本一致。

表 4 茅根炭相对峰面积与色度值的相关性

Table 4 Correlation between relative peak areas and chromaticity values of carbonized *Imperatae Rhizoma*

成分	$L^*$	$a^*$	$b^*$	$E_{ab}^*$
化合物 1	0.131	0.533	0.537	0.198
5-羟甲基糠醛	0.854**	0.921**	0.842**	0.824**
化合物 3	0.460	0.818**	0.769**	0.521
新绿原酸	0.676*	0.918**	0.880**	0.725*
化合物 5	0.895**	0.957**	0.991**	0.928**
咖啡酸	0.479	0.808**	0.675*	0.526
绿原酸	0.975**	0.777**	0.890**	0.979**
化合物 8	0.783**	0.919**	0.871**	0.815**
化合物 9	0.874**	0.794**	0.877**	0.889**
隐绿原酸	0.964**	0.684*	0.794**	0.954**
4-香豆酸	0.079	0.630*	0.532	0.156

\*和\*\*在 0.05、0.01 级别（双侧），相关性显著。

\* and \*\*Significant correlation at the 0.05 or 0.01 level (two-tailed).

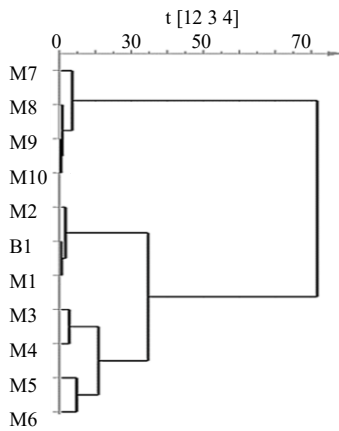


图 3 茅根炭聚类分析结果

Fig. 3 Cluster analysis results of carbonized *Imperatae Rhizoma*

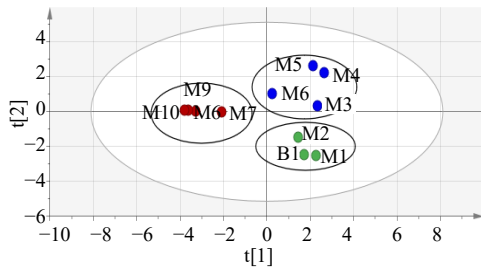


图 4 茅根炭主要成分的 PCA 得分图

Fig. 4 PCA score plot of main components in carbonized *Imperatae Rhizoma*

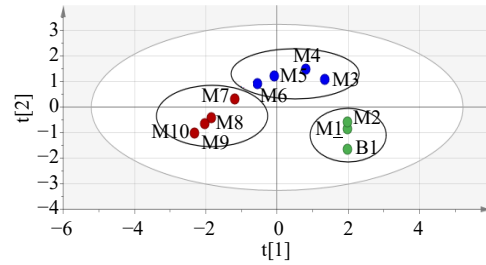


图 5 茅根炭色度值的 PCA 得分图

Fig. 5 PCA score plot of chromaticity values for carbonized *Imperatae Rhizoma*

变量离原点的距离越远，其在主成分中的影响权重就越大，如 5-羟甲基糠醛、隐绿原酸，见图 6。

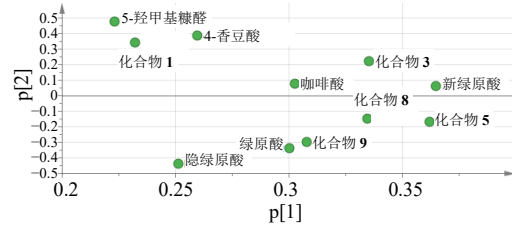


图 6 茅根炭主要成分的 PCA 变量载荷图

Fig. 6 PCA variable loading plot of main components in carbonized *Imperatae Rhizoma*

2.5.3 正交偏最小二乘法判别分析 (OPLS-DA) 采用 SIMCA 14.1 软件以不同炮制时间炒茅根饮片共有特征峰的相对峰面积为变量进行 OPLS-DA 分析，所建立的模型  $R^2_X=0.886$ ， $R^2_Y=0.896$ ， $Q^2=0.858 > 0.5$ ，表明该模型有效。得分图显示，不同炮制时间茅根炭饮片被分为 3 类，B1、M1~M2 为一类；M3~M6 为一类；M7~M10 为一类，见图 7。以投影变量重要性 (VIP)  $> 1.0$  为显著影响，共找到了 5 个差异标志物：5-羟甲基糠醛、隐绿原酸、4-香豆酸、绿原酸和化合物 5，可见上述成分对茅根炭炮制过程的影响较显著，在判断茅根炭质量方面展现出一定潜力，见图 8。

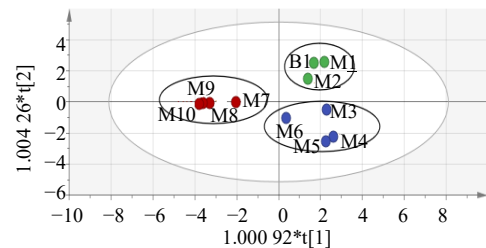


图 7 茅根炭 OPLS-DA 得分图

Fig. 7 OPLS-DA score plot of carbonized *Imperatae Rhizoma*

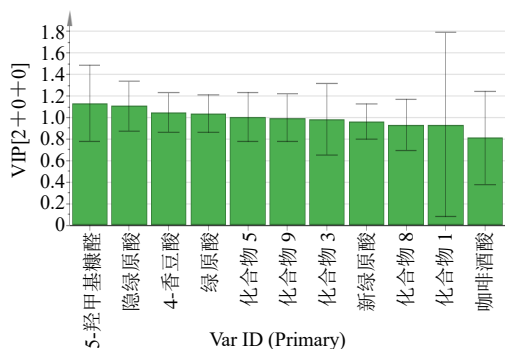


图 8 茅根炭 OPLS-DA 差异性标志物 VIP 图

Fig. 8 OPLS-DA VIP plot of differential biomarkers for carbonized *Imperatae Rhizoma*

### 3 讨论

本研究采用 SPSS 软件,以不同炮制时间炒茅根的共有特征峰的相对峰面积为变量进行了 CA 分析。采用 SIMCA 软件,分别以不同炮制时间炒茅根的共有特征峰的相对峰面积和色度值为变量进行了无监督的 PCA 分析,考察色度与成分之间是否存在联系,观察样本的自然分布趋势。同时又以不同炮制时间炒茅根的共有特征峰的相对峰面积为变量进行了有监督的 OPLS-DA 分析,筛选差异变量。结果表明,CA、PCA 和 OPLS-DA 分析均将不同炮制时间炒茅根饮片分为了 3 类: B1、M1~M2 为一类, M3~M6 为第一类, M7~M10 为一类。载荷图和 VIP 图均筛选出了 5-羟甲基糠醛、隐绿原酸 2 个化合物, VIP 图还筛选出了 4-香豆酸、绿原酸和化合物 5, 这些差异标志物在判断茅根炭质量方面展现出一定潜力。因此, CA、PCA 结合 OPLS-DA 分析的方法可互为补充、互相验证, 共同应用于分析不同炮制程度茅根炭的成分与粉末色度值之间是否存在关联, 同时可进一步为茅根炭的炮制工艺和质量控制研究提供依据。

随着炮制时间的延长, 新绿原酸、化合物 5、咖啡酸的相对峰面积逐渐降低, 这可能与加热时间过长、成分出现降解有关<sup>[13]</sup>。炮制 0~12 min 过程中, 化合物 1、5-羟甲基糠醛的相对峰面积逐渐升高, 12 min 之后呈下降趋势, 说明 12 min 是一个重要节点。据报道, 5-羟甲基糠醛是 Maillard 反应产物, 在炮制过程中质量分数会发生变化<sup>[14]</sup>。然而, 由于 5-羟甲基糠醛具有双向药理作用<sup>[15]</sup>, 因此需要对其进行质量分数控制, 下一步将对 5-羟甲基糠醛质量分数上限的控制、茅根炭炮制工艺参数的细化进行研究。

饮片的炮制程度可通过外观性状得到一定体现, 外观上的变化能够间接反映炮制过程的进展情况<sup>[16]</sup>。借助色度检测技术, 能够把饮片外观的颜色信息转化为具体数值形式, 让原本抽象的颜色特征变得可量化、可分析<sup>[17]</sup>。本研究比较了白茅根炒炭过程中内在成分和外颜色的变化情况, 发现色度值 ( $L^*$ 、 $a^*$ 、 $b^*$ 、 $E_{ab}^*$ ) 随着炮制程度的加深逐渐下降, 且与茅根炭中 5-羟甲基糠醛、化合物 5、绿原酸、化合物 8、化合物 9 的相对峰面积呈极显著正相关关系。结合相关性分析结果可知, 色度值在一定程度上可以预测某些重要成分的质量分数, 可作为优化茅根炭炮制工艺的相关指标。HCA、PCA 和 OPLS-DA 均可将不同炮制时间的茅根炭饮片分为 3 类, 且将 OPLS-DA 筛选得到的 5 个差异性标志物与相关性结果结合后可得到 5-羟甲基糠醛、化合物 5、绿原酸 3 个成分, 后续可进一步对化合物 5 进行对照品指认, 并对 5-羟甲基糠醛和绿原酸进行测定。显然, 上述各类分析方法在一定层面上形成了互补且相互验证的关系, 它们从不同研究切入点对茅根炭进行剖析, 共同表明茅根炭粉末色度值与化学成分变化之间的关联度较高。

综上, 在茅根炭炮制过程中, 粉末色度值与化学成分变化的关联度很高, 让色度值具备了作为控制炮制程度指标的可行性, 借此可以达成快速、客观地评价茅根炭质量的目标, 明确区分茅根炭质量差异的关键指标, 为茅根炭质量控制研究注入新的思路。

**利益冲突** 所有作者均声明不存在利益冲突

### 参考文献

- [1] 中国药典 [S]. 一部. 2025: 5.
- [2] 杨丽, 龚焱婷, 许铭珊, 等. 基于“表里关联”的大黄炭炮制过程颜色和成分变化关系研究 [J]. 中草药, 2020, 51(22): 5705-5713.
- [3] 张雪, 李晓庆, 王云, 等. 焦栀子炒制过程中 HPLC 图谱变化与外观颜色的动态关联研究 [J]. 中草药, 2018, 49(17): 4029-4037.
- [4] 刘婧, 黄潇, 付小梅, 等. 栀子炮制过程中颜色及 5 种成分的动态变化 [J]. 中成药, 2017, 39(11): 2350-2355.
- [5] 陈丹燕, 王瑜婷, 潘玲, 等. 姜炭炮制过程中化学成分与粉末色泽关联性分析 [J]. 药物分析杂志, 2023, 43(10): 1800-1810.
- [6] 高原, 方妍, 单梦瑶, 等. 基于色差原理分析不同产地桑白皮有效成分含量与颜色的相关性 [J]. 中国药房, 2021, 32(2): 213-219.

- [7] 于梦婷, 童黄锦, 毛春芹, 等. 基于色泽量化与主要成分含量的不同基原莪术饮片质量识别研究 [J]. 中国中药杂志, 2021, 46(6): 1393-1400.
- [8] 林华坚, 张梓豪, 孟江, 等. 干姜及其炮制品色差值与活性成分含量的相关性研究 [J]. 中国药房, 2020, 31(10): 1197-1202.
- [9] 徐东婷, 李美洲, 余欣彤, 等. 基于指纹图谱结合色度值的不同炮制时间茅根炭差异研究 [J]. 现代药物与临床, 2023, 38(11): 2723-2730.
- [10] 余凌英, 李星, 强梦琴, 等. 干姜和炮姜高效液相色谱指纹图谱与色度值对比研究 [J]. 中南药学, 2022, 20(10): 2305-2311.
- [11] 胡佳莉, 刘林, 李钟, 等. 黄精发酵过程中有效成分含量与色泽的相关性 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2020, 26(15): 169-176.
- [12] 马彦江, 于兰兰, 陈天朝, 等. 地黄九蒸九晒炮制工艺的优选及色度值、pH 值与内在成分的相关性分析[J]. 中南药学, 2025, 23(4): 941-947.
- [13] 朱鹏, 苗满磊, 陈勇. 绿原酸、隐绿原酸和新绿原酸在中性和碱性 pH 条件下的降解动力学 [J]. 药学学报, 2016, 51(1): 122-126.
- [14] 张丽, 曹琳琳, 赵学龙, 等. 同炮制程度牡丹皮炭中 5-羟甲基糠醛的含量变化 [J]. 中国药房, 2009, 20(33): 2624-2626.
- [15] 徐晓. 马铃薯制品中 5-羟甲基糠醛的形成机制和调控策略 [J]. 食品安全导刊, 2025, 19(22): 155-157.
- [16] 何晓凤, 王露露, 张晶, 等. 基于色度学原理的颜色分析方法在药物研究领域的应用概况 [J]. 药物分析杂志, 2018, 38(9): 1471-1475.
- [17] 王梦琦, 谷云霞, 田静. 蜘蛛香炒制过程中色泽与主要成分的相关性研究 [J]. 中草药, 2023, 54(18): 5916-5922.

【责任编辑 解学星】