

无机元素分析在中药质量控制与评价中的研究进展

高莹莹, 赵一懿*, 李 铮, 杜小伟, 傅欣彤, 郭洪祝

北京市药品检验研究院(北京市疫苗检验中心) 国家药品监督管理局监管科学创新研究基地 药品监管科学研究北京市重点实验室, 北京 102206

摘 要: 中药无机元素的组成与含量受种植环境、炮制工艺等多因素影响, 其中有害重金属元素与有益微量元素分别决定用药安全与药效活性, 是中药质量管控的核心关键指标。系统检索 2020—2026 年中国学术期刊全文数据库(CNKI)、PubMed 数据库近 5 年相关研究文献, 以电感耦合等离子体质谱(ICP-MS)无机元素指纹谱为核心, 梳理其在中药材产地溯源、真伪鉴别、制剂一致性评价、炮制工艺优化等方面的应用进展, 阐明化学计量学和机器学习在复杂元素谱数据挖掘中的应用价值。同时, 系统归纳暴露评估、风险表征及限量推导等多层次中药无机元素健康风险评估方法, 对比各国药典重金属限量标准差异, 剖析药食同源品种药品与食品双重标准冲突、元素总量模式无法区分不同形态元素的毒性差异、本土化暴露评估参数体系不完善等现存难题。基于现有研究短板, 提出未来研究应完善中药无机元素形态检测标准体系、构建基于真实世界用药规律的本土化暴露参数、建立基于预期用途分类管理的限量体系, 实现中药从种植、炮制、制剂到临床应用全链条无机元素智慧化质量管控, 为中药科学监管、质量标准完善与国际化发展提供理论与技术参考。

关键词: 无机元素; 中药质量控制; 电感耦合等离子体质谱; 无机元素指纹谱; 数据挖掘; 健康风险评估; 重金属; 药食同源; 安全评价

中图分类号: R284.1

文献标志码: A

文章编号: 1674-6376(2026)09-3349-16

DOI:10.7501/j.issn.1674-6376.2026.09.031

Research progress on inorganic element analysis in quality control and evaluation of traditional Chinese medicine

GAO Yingying, ZHAO Yiyi, LI Zheng, DU Xiaowei, FU Xintong, GUO Hongzhu

Beijing Key Laboratory of Drug Regulatory Science, NMPA Center for Innovation and Research in Regulatory Science, Beijing Institute for Drug Control (Beijing Center for Vaccine Control), Beijing 102206, China

Abstract: The composition and content of inorganic elements in traditional Chinese medicine (TCM) are influenced by multiple factors, including cultivation environment and processing techniques. Among these, harmful heavy metals and beneficial trace elements determine drug safety and pharmacological efficacy, making them key indicators for TCM quality control. This study systematically reviewed relevant research published between 2020 and 2026 from the China National Knowledge Infrastructure (CNKI) and PubMed databases. Focusing on inorganic elemental fingerprinting via inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS), it summarizes recent advances in applications such as geographical origin tracing, authenticity identification, consistency evaluation of formulations, and optimization of processing methods. It also highlights the value of chemometrics and machine learning in mining complex elemental spectral data. Furthermore, the study systematically outlines multi-tiered health risk assessment approaches for inorganic elements in TCM, including exposure assessment, risk characterization, and threshold derivation. It compares differences in heavy metal limit standards across national pharmacopoeias, analyzes existing challenges—such as conflicts between dual regulatory standards for food-medicine homologous species, the inability of total elemental concentrations to distinguish toxicological differences among element speciation, and incomplete localized exposure assessment parameters—and proposes future research directions. Based on current research gaps, it recommends improving standardized methods for detecting TCM inorganic element speciation, establishing localized exposure parameters based on real-world usage patterns, and developing a classification-based limit system according to

收稿日期: 2026-05-17

基金项目: 药品监管科学全国重点实验室课题(2025SKLDRS0343)

作者简介: 高莹莹, 女, 药师, 主要从事中药分析研究。E-mail: yingying1039@163.com

*通信作者: 赵一懿, 女, 主任药师, 主要从事中药成分分析与质量控制研究。E-mail: zhaoyiyi410@163.com

intended uses. These measures aim to achieve intelligent, end-to-end quality control of inorganic elements throughout the entire TCM supply chain—from cultivation and processing to formulation and clinical application—providing theoretical and technical support for scientific regulation, quality standard refinement, and international development of TCM.

Key words: inorganic elements; quality control of traditional Chinese medicine; inductively coupled plasma mass spectrometry; inorganic element fingerprint; data mining; health risk assessment; heavy metal; food and medicine homology; safety evaluation

中药是我国传统医药体系的核心构成部分,具有数千年临床应用历史和丰富的实践经验。在中药质量控制和评价研究中,安全性与有效性是贯穿始终的两大核心议题。中药化学成分极为复杂,其中无机元素是普遍存在且具有重要生物学价值的物质基础。中药材多源于天然植物,其无机元素的组成和含量受种植培育、环境迁移富集、炮制加工等多因素影响,元素含量波动幅度较大。在临床使用中,这些无机元素呈现出明确的双重属性:安全性方面铅(Pb)、镉(Cd)、砷(As)、汞(Hg)等有害重金属元素长期摄入可能引发慢性毒性蓄积,甚至增加致癌风险,构成用药安全的重大隐患;有效性方面中药材中铁(Fe)、锌(Zn)、硒(Se)等必需微量元素,可通过参与体内酶系统组成、调节生物代谢通路等途径,直接或间接介导中药的药理活性,是实现中药整体调控、辨证施治功效的重要物质支撑。由此可见,对中药材及中药制剂中无机元素开展系统、精确的定性与定量分析,并实施科学的风险管控,已成为中药质量控制体系中不可或缺的关键环节。

近年来,以电感耦合等离子体质谱(ICP-MS)为代表的现代分析技术,凭借其高灵敏度、宽线性范围、多元素同步检测能力,在中药无机元素分析领域获得了广泛应用。在此技术基础上衍生发展的无机元素谱分析方法,可较全面地反映中药材及制剂中无机元素的组成轮廓与含量分布特征,实现了从单一元素检测向整体元素特征表征的跃升,为中药质量评价开辟了新的分析维度。然而,ICP-MS等仪器输出的高维、多变量原始数据,无法直接转化为规范化的质量评价结论,如何从海量元素数据中有效提取与质量评价高度相关的特征信息,逐渐成为该领域的研究热点。

化学计量学方法[如主成分分析(PCA)、聚类分析(CA)、正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA)等]为无机元素高维数据的降维处理、样本分类与特征筛选提供了经典工具,而支持向量机、K近邻算法、随机森林等机器学习算法的引入,进一步提

升了样本分类判别与质量预测的精准度,为中药材产地溯源、真伪鉴别等场景提供了更强有力的数据支撑。与此同时,基于暴露评估、风险表征与限量阈值推导的健康风险评估方法日趋成熟,为客观评价中药有害元素的人体健康风险提供了科学依据。当前,各国药典在重金属限量的管控标准存在差异,加之药食同源品种面临药品、食品双重标准冲突,进一步凸显了建立科学、协调且兼顾不同使用场景的无机元素风险管控体系的紧迫性。

本文基于近5年国内外相关文献的系统梳理,围绕无机元素谱的构建与应用、数据挖掘方法、健康风险评估体系及国内外管控标准对比等核心主题,系统总结中药无机元素分析领域的最新研究进展。在此基础上,着重从数据分析手段、风险评估模型适用性、监管标准协调性3个维度,剖析该领域存在的问题与挑战,以期对中药无机元素的深入研究、中药质量的科学监管、行业标准完善及安全合理应用提供参考。

1 文献检索

1.1 检索策略

检索中国学术期刊全文数据库(CNKI)和PubMed数据库,检索时间范围设定为2021年1月1日至2026年3月31日,中文检索词包括“无机元素”“中药质量控制”“ICP-MS”“指纹图谱”“健康风险评估”;英文检索词包括“inorganic elements”“TCM quality control”“heavy metals”“health risk assessment”。

1.2 纳入与排除标准

纳入标准:(1)研究内容聚焦于中药无机元素分析、无机元素谱应用、数据挖掘方法或健康风险评估的原创性研究论文;(2)与本研究主题高度相关的高质量综述类文献;(3)各国药典标准、国家药品监督管理局发布的技术指导原则及权威机构发布的官方研究报告。排除标准:(1)仅涉及单一元素且未与中药质量控制或风险评估关联的研究;(2)重复发表或数据不完整的文献。初检共获得文献771篇,经去重、摘要筛选及全文评估后,最终纳入代表性文献75

篇（其中中文 65 篇，英文 10 篇）作为本综述的主要参考依据。需要说明的是，本综述以近 5 年研究进展为核心，但考虑到“无机元素谱”概念的提出及部分经典风险评估方法的形成时间较早，对少数关键性早期文献予以适当回溯引用。

1.3 发文趋势

本研究以初检检索获得的文献为统计样本，绘制 2021—2025 年中药无机元素全领域年度发文趋势图（图 1），体现学科整体产出情况（2026 年文献尚未完整收录，故未纳入统计分析）。近 5 年该领域研究始终保持较高活跃度，2022 年达峰值 165 篇，2023 年 158 篇，2024 年 142 篇，2025 年回升至 160 篇。中文发文量在 2023 年达到峰值（135 篇），英文发文量从 2021 年的 28 篇增长至 2025 年的 35 篇，直观体现该研究方向持续受到国内外关注。上述年度发文趋势基于全部初检文献完成；经标题、摘要与全文筛选复核后，最终有 75 篇符合本综述限定研究范围的文献，作为后文系统梳理研究进展的核心依据。

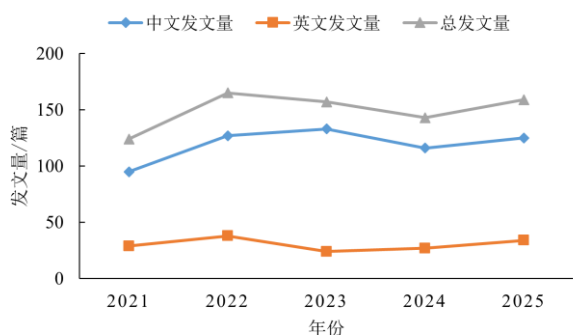


图 1 中药无机元素领域相关研究发文量时间分布

Fig. 1 Temporal distribution of publication volume in field of inorganic elements in traditional Chinese medicine

为精准挖掘领域内细分研究方向，本研究针对最终纳入的 75 篇文献开展关键词词频统计，结果见图 2。关键词频次排序靠前的高频词汇分别为“ICP-MS”（42 次）、“无机元素”（38 次）、“健康风险评估”（18 次）、“主成分分析（PCA）”（16 次）、“重金属及有害元素”（14 次）。上述高频关键词集中凝练了近 5 年中药无机元素分析领域的 4 大研究热点：无机元素谱的多元化应用场景，包括中药指纹图谱构建、产地溯源、真伪鉴别及炮制工艺优化等；数据挖掘分析方法，以 PCA、CA、OPLS-DA、化学计量学等技术为核心；中药无机元素健康风险评估体系，包含目标危害系数（THQ）、危害指数（HI）、致癌风险（CR）、最大残留限量（MRL）等评

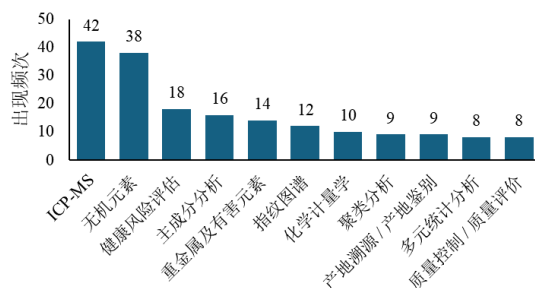


图 2 文献高频关键词 (频次 ≥ 8)

Fig. 2 High-frequency keywords in literature (frequency ≥ 8)

价指标；以及质量评价导向下中药无机元素的安全与药效特性，主要涉及重金属限量标准、元素形态毒性差异、微量元素药理活性及有机-无机成分协同作用等研究方向。基于上述分布特征，本文后续将围绕 4 大方向，系统梳理近 5 年中药无机元素分析的相关研究进展。

2 无机元素谱的应用

指纹图谱技术在中药质量分析领域应用已较为成熟，其作为表征中药多成分特征的一种综合型分析方法，能较全面地反映中药材及制剂中化学成分的整体轮廓。一般指纹图谱常用于中药有机活性成分的分析，本团队于 10 年前率先提出中药无机元素谱研究思路^[1-2]，以多元素同步含量数据构建无机指纹图谱，实现中药无机组分的定性与定量表征，弥补了现有质控体系仅侧重有机成分、忽略无机元素评价的不足^[3-5]。近年来随着中药质量研究更加强调整体性、全面性、准确性，无机元素谱的应用也更加广泛。

2.1 中药材产地溯源

中药材无机元素的种类与含量受土壤特性、灌溉水源及区域气候条件等多重环境因素影响，呈现特定的元素分布格局，可作为中药材产地溯源的重要标识。已有研究表明，不同产地银柴胡的无机元素谱峰形整体一致，反映出其元素组成特征在不同产地间具有相似性，但各元素含量存在明显差异，其中以钾（K）、钙（Ca）、硫（S）、硼（B）、Zn、锰（Mn）、铜（Cu）、铬（Cr）等元素的地域分化特征最为突出^[6]。赖晓娜等^[7]通过分析新会、广西、湖南 3 地陈皮中 51 种矿物元素的组成及含量特征，构建产地专属元素指纹图谱并建立溯源模型，对 24 批未知产地陈皮的判别准确率达 91.6%，验证了无机元素指纹技术在陈皮产地溯源中的可行性与实用性。张春华等^[8]采用 ICP-MS 技术测定我国山东、

吉林地区以及美国和加拿大产西洋参的 50 种矿物元素的含量,建立不同产地西洋参矿物元素指纹谱,通过相似度分析构建了精准的产地鉴别体系。于喆源等^[9]研究发现,不同生长区域的甘草样品虽元素种类基本一致,但含量差异明显,且不同地域元素累积规律表现出显著区别,结合无机元素指纹图谱与化学计量学方法,可有效解析甘草元素的地域富集特征。Xue 等^[10]联用电感耦合等离子体原子发射光谱法(ICP-AES)与 ICP-MS 技术,检测安徽 5 大产区牡丹皮药材中 54 种无机元素含量,筛选出 5 种核心特征元素构建产地判别模型,依据平原和丘陵土壤理化差异,实现牡丹皮药材的精准产地区分。综上,无机元素谱能够有效表征不同产地药材元素富集的地域差异,为中药材产地溯源提供了一种可靠的分析策略与科学依据。

2.2 中药材真伪鉴别

中药材作为特定物种的天然产物,其无机元素谱具有物种专属特征,而伪品因物种来源、生长环境的差异,其元素谱往往与正品存在显著区别,可作为中药材真伪鉴别的重要依据。谭新宁等^[11]筛选 23 种无机元素构建青箱子及其混伪品的无机元素谱,结果表明,青箱子与鸡冠花子在铝(Al)元素的含量变化规律方面存在明显差异;与菟丝子的 Al、Mn、锶(Sr)、铷(Rb)、铋(Bi)等元素含量上差异显著;与刺菟丝子的 Mg、Al、Mn、Pb、Bi 等元素含量方面差异较大;与反枝菟丝子在 Mg、Al、Mn、Sr、Pb、Bi 等元素含量方面表现出明显区别,证实基于无机元素特征可有效区分青箱子及其混伪品。石婧等^[12]基于 ICP-MS 技术测定 32 批浙贝母和湖北贝母样品进行多元素含量,构建元素指纹谱的产地判别模型,不仅可精准区分不同产地贝母,还可有效鉴别混伪样品。栾洁等^[13]比较了天然牛黄、体外培育牛黄及人工牛黄中 27 种无机元素的含量差异,发现 Ca、Mg、Fe、Cu、Pb 为核心差异元素,提出 Ca/Mg 值与 Fe/Cu 值可作为区分 3 者及其伪品的重要参数。乔青阳等^[14]筛选出 15 种在正品与伪品龙骨间含量差异显著的无机元素,发现正品龙骨中 Mn、Sr、铀(U)等元素含量明显高于伪品,据此建立以 U、Mn 为核心, Sr、钒(V)为辅助的多元素联合判别方法,可实现龙骨真伪的快速初步鉴别。另有研究报道^[15],利用无机元素谱结合 PCA,筛选 Sr、Fe、镓(Ga)等特征元素,可实现瓦楞子和蛤壳 2 种近缘贝壳类药材的真伪区分,

为同源矿物类中药材的真伪鉴别提供了新方法。综上,基于无机元素指纹谱结合特征差异分析,可有效区分不同药材基原,为中药材真伪鉴别、质量评价提供技术支撑。

2.3 中药制剂质量一致性研究

无机元素谱可有效表征中药制剂的质量特征,对不同生产厂家、不同生产批次制剂质量稳定性进行有效评估。石婧等^[16]通过建立半夏糖浆无机元素谱发现,不同厂家样品元素相似度均大于 0.9,表明各企业整体质量均一性较好,但同一厂家内部,不同批次样品相似度存在差异,表明企业内部制剂批间稳定性有待优化。李俊霖等^[17]运用 ICP-MS 技术建立七制香附丸无机元素谱,揭示同一厂家不同批次制剂间无机元素组成与含量差异,可体现制剂批间质量波动特征。毕春艳等^[18]建立复方西羚解毒制剂无机元素谱,相似度分析结果表明制剂批次间均一性较好,同时筛选出 Al 等批次差异显著的特征元素,明确了制剂质量波动的核心指标。多项研究报道^[19-20]采用 ICP-MS 技术分别建立连花清瘟胶囊、沉香化气片无机元素谱,结合化学计量学分析筛选出造成制剂批间、厂间质量差异的特征元素,直观反映原料来源、生产工艺等因素对制剂质量的影响机制。综上,无机元素谱可有效反映中药制剂批间质量波动,为制剂生产工艺的稳定性评价与质量一致性控制提供技术支持。

2.4 中药材加工炮制

炮制是中药材加工的关键环节,可通过物理或化学处理可改变药材中无机元素的存在形态、溶出特性及分布状态等,直接影响中药材的用药安全性与临床疗效。无机元素谱技术可系统、直观地表征炮制前后元素组成及含量的动态变化,为炮制工艺的科学评估与优化提供重要依据。

张洪怡等^[21]研究发现,煅牡蛎饮片炮制前后 CaCO_3 含量变化不大,但 Pb、Cr 等有害重金属元素含量明显降低,证实煅制可有效降低药材重金属风险。徐继军等^[22]研究发现,罂粟壳经炮制后有害元素 As、Cd、Hg、Cu 含量显著降低,提示炮制减毒的无机元素调控机制。杨思广等^[23]通过测定蛤蚧药材炮制前后的元素含量变化,发现酥油炙工艺可在一定程度上降低药材 Hg 元素的含量,提示生产企业应严格按炮制工艺操作,保障饮片质量。陈胜强等^[24]对地黄“九蒸九晒”炮制过程无机元素组成含量进行测定,发现随着蒸晒次数增加, Zn、Cu、

Fe 等有益元素含量呈先升后降趋势,而 Cd、As、Pb 等有害元素含量逐渐降低,佐证了地黄“九蒸九晒”炮制工艺减毒增效的科学内涵。综上,无机元素谱可揭示炮制过程对药材质量与安全性的影响规律,为中药材炮制工艺规范化、质量标准精细化提升提供依据。

3 无机元素含量数据挖掘方法

随着 ICP-MS、ICP-AES、ICP-QES 等仪器分析技术的不断更新,其凭借高灵敏度、高质量精度、同步快速定量多种元素等优势,已广泛应用于中药无机元素质量分析领域^[25]。各类检测技术的普及产生了海量的中药无机元素检测数据,其中蕴含着大量潜在的质量特征信息,针对此类数据的挖掘已成为中药质量研究的热点方向。化学计量学融合了数学、统计学和计算机科学与技术的交叉学科,结合机器学习等智能化手段不断更新迭代,能够实现模式识别、样本分类、关键变量筛选等一系列数据分析功能^[26],已逐步运用到中药材真伪鉴别、种植产地溯源、制剂质量控制等多方面。

3.1 PCA 与 CA

PCA 是一种经典的数据降维和可视化方法,广泛应用于多数据处理。其核心原理为通过线性变换对存在相关性的原始观测变量进行重构,最大限度地保留原数据集中的变异信息,将多维变量转换为少量相互独立的综合主成分^[27]。近年来,PCA 与 ICP-MS 技术联用策略在中药分析中广泛应用,尤其是在中药材产地溯源方面发挥重要作用,PCA 能够有效降低多维无机元素谱的复杂性,筛选出具有产地敏感性的差异特征元素,为建立标准化的中药材产地溯源方法提供理论依据^[28]。

CA 是以元素特征相似性为基础,对样本进行分层分类的方法,其核心思想遵循“物以类聚”的原则,分析结果往往以树状谱系图的形式直观地呈现,便于直观判别样本间的亲缘与差异关系^[29]。近 5 年相关研究表明,PCA 与 CA 联合被广泛用于中药材产地溯源、真伪鉴别、不同组织部位元素分布模式的研究中,大幅提升分析的准确性与全面性。

冉金凤等^[30]通过对不同产地黄精中 13 种共有无机元素含量进行 PCA,筛选出 Cr、Fe、V、Cd、Mn、Sr 为特征元素,可有效区分不同产地黄精的质量差异。CA 结果与产地分布基本吻合,同时结合判别评分揭示浙江江山产黄精质量最优,四川与贵州产黄精品质相对欠佳,为黄精药材的质量评价提

供参考。李海燕等^[31]对不同基原、产地及生产厂家的甘草药材与饮片,开展无机元素谱的多元统计分析,通过 PCA 筛选出 Ga、V、铯(Cs)、Se、钴(Co)、As、U、镍(Ni)、Cd、Hg 为甘草的特征无机元素,后续 CA 聚类结果显示,甘肃大部分厂家样品可聚为一类,提示同一区域、同一厂家饮片在元素组成与含量上具有高度一致性。齐鹏程等^[32]对茯苓不同药用部位的无机元素分布特征开展对比研究,发现茯苓皮、茯神、茯苓、赤茯苓无机元素组成含量差异显著,其中茯苓皮对无机元素的蓄积能力较强;PCA 结果表明茯苓与茯神样品聚为一类,说明二者无机元素组成含量分布接近,为后续药效物质基础研究提供依据。综上,PCA 与 CA 作为化学计量学常用方法,能够从复杂元素谱数据中提取关键特征并揭示样本间的内在关联,为中药材产地判别、真伪鉴别及质量评价等提供分析工具。

3.2 OPLS-DA

OPLS-DA 是一种有监督的多元统计方法,通过放大不同组别间的差异构建判别模型,能够有效识别具有标志性意义的元素。该方法借助变量重要性投影(VIP)值量化各变量对模型判别能力的贡献,通常认为 VIP 值大于 1.0 的元素为重要差异标志物,VIP 值越高表明该元素的组间差异越显著。与 PCA 相比,OPLS-DA 生成的得分图具有更优的聚类效果,即同类样本更为聚集,异类样本更为分散。这一特性使其能够高效筛选关键判别元素,尤其适用于处理元素组成高度相似、难以区分的复杂样本体系,如亲缘物种或地理邻近产区的药材,为后续快速检测方法的开发及质量标准制定提供支撑。

江垭霓等^[33]对黄芪药材周皮、韧皮部与木质部的无机元素开展分析,经 OPLS-DA 分析筛选出 B、钠(Na)、K 为区分不同组织部位的特征元素。贾德政等^[34]研究广东与广西产牡蛎的无机元素谱,基于 OPLS-DA 模型可实现产地的有效判别,并筛选出 Cu、锂(Li)、钛(Ti)为产地差异特征元素。陈晓婷等^[35]研究不同产地短瓣金莲花无机元素谱,通过 OPLS-DA 模型筛选出 K、Ca、Na、Mg、Fe 为产地差异特征元素。综上,OPLS-DA 能够从复杂元素谱中精准提取具有产地或种属判别价值的特征元素,为中药材分类鉴别、产地溯源与质量评价等提供可靠的分析手段。

3.3 相关性分析

相关性分析是中药元素研究中重要的统计手

段,主要用于挖掘并量化不同元素之间、元素与其他观测变量之间的线性关系,明确关联强度与作用方向。该方法对阐明药材内部元素的共生规律、追溯潜在累积来源以及理解植物对无机元素的吸收富集机制具有重要研究意义^[36]。实践中常通过计算 Pearson 或 Spearman 相关系数评估元素间的协同促进或拮抗效应。

陈佳梅等^[37]对 54 份药材样品中 24 种无机元素含量进行相关性分析,发现 Cd 与 Zn、Mg、Na、Se 呈极显著正相关,与 Cu、Cr 呈显著负相关,揭示药材中无机元素间的协同与拮抗关系,可为中药材种植过程中元素调控、降低重金属风险、提升药材安全性提供数据支撑。李运等^[38]通过分析六神曲中无机元素相关特征,发现 Cr 与 Cu 呈极显著负相关,As 与 Li、铍(Be)呈显著正相关;该相关性特征可能受六神曲原料组成及发酵过程中微生物代谢活动的影响,直观反映了发酵类中药无机元素吸收积累的协同与拮抗调控机制。李振凯等^[6]通过关联分析银柴胡药材与种植环境土壤元素特征,发现 Cu、Zn、B、钼(Mo)、Cr 等元素在药材内部及与土壤之间均表现出明显的相互促进关系,而 Pb、As 对药材中多数无机元素的吸收富集存在显著抑制作用,明确了土壤环境因子对银柴胡无机元素特征及道地品质形成的调控作用。综上,相关性分析能够系统揭示中药元素间的内在关联及与外部环境因子的相互作用,为阐明中药材元素积累规律、优化栽培调控措施、解析药材道地性形成机制提供参考。

3.4 机器学习方法

在中药元素分析领域,除经典多元统计方法外,以机器学习为代表的现代计算技术正日益融入研究实践,逐步形成涵盖关联挖掘、模型构建与智能预测的综合性研究体系,大幅提升了复杂无机元素大数据的挖掘深度与利用效率。

吕鑫等^[39]研究锁阳有效成分与无机元素间的整体关联规律,为弥补单一 Pearson 相关分析的局限,引入典型相关分析(CCA)以解析有效成分与无机元素间更为精细的相关关系。明确 K、Cr 对总多糖及原儿茶酸含量具有显著影响。在此基础上,采用逐步回归分析(SREG)以 19 种无机元素为自变量、5 种有效成分为因变量构建定量预测模型,解析了无机元素对药效成分积累的调控规律:Na、Pb 可促进多糖类成分的生物合成与积累,K、Cd、Hg 呈负向调控作用;Sr、Ni 利于黄酮类成分积累,

Fe 则起抑制作用;Mn、Cr 会抑制原儿茶酸的积累,同时 Mn 含量增加不利于儿茶素合成。该研究通过多方法互补分析,实现了无机元素与药效品质关联的精准量化。吴伟等^[40]针对白鲜皮不同生长年限的鉴别问题,采用支持向量机(SVM)模型,相较于传统统计方法,其鉴别准确率显著提升。李超等^[41]基于不同产地半夏药材的无机元素谱数据,构建 KNN 分类算法模型,可实现半夏产地的精准判别。江垭霓等^[33]基于不同产地黄芪药材无机元素组成含量,融合 AHP-CRITIC 加权与 TOPSIS 综合评价方法,构建黄芪品质综合评价体系。筛选出山西朔州、陕西榆林、甘肃定西所产黄芪综合品质较优,为完善黄芪质量评价体系提供了新思路。综上,机器学习方法能够从复杂数据中挖掘深层判别信息,显著提升中药材产地溯源、品质评价及药效关联分析等方面的准确性与可靠性,具有较好的应用前景。

4 元素的健康风险评估方法

无机元素作为中药化学物质基础的重要组成部分,在发挥药效的同时,部分有害元素(如 Pb、Cd、As、Hg 等)的潜在暴露风险亦不容忽视,仅依据无机元素总量与限量标准比对的评价方式,通常难以全面反映人体实际暴露水平及对人体的综合健康危害。因此,建立科学、系统的健康风险评估体系,对客观评价中药用药安全性、推动质量标准修订及保障临床用药安全具有重要现实意义。

目前,借鉴食品与环境领域的风险评估框架^[42],中药元素健康风险评价已形成以暴露评估、风险表征及限量推导为核心的多层次方法学体系,涵盖估计每日摄入量(EDI)、THQ、CR、污染指数评价及 MRL 推导等多种评估方法。图 3 系统梳理了中药材无机元素风险评估的完整技术流程。首先测定样品中无机元素的含量,基于检测结果开展人体暴露评估,进一步完成非致癌风险(THQ、HI)、CR 及内梅罗污染指数等多项风险指标测算;结合各类风险阈值反向推导无机元素 MRL,同时结合实际药食同源中药材限量差异化制定限量标准,最终为中药材安全管控、质量标准修订提供技术支撑。目前,我国已发布中药重金属风险评估技术指导规范,依托全国上万批次中药材数据与大样本人群用药调研数据,确定了用药频次、暴露年限等本土化参数,是国内各类中药材和中成药风险测算统一依据^[43]。

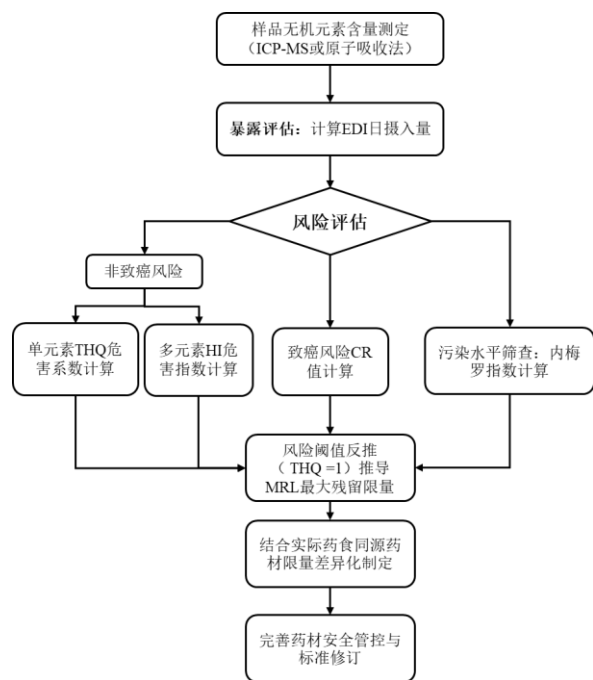


图 3 中药无机元素健康风险评估技术流程

Fig. 3 Technical flow chart of health risk assessment for inorganic elements in traditional Chinese medicine

4.1 EDI

EDI 是健康风险评估的基础指标,通过计算服用中药材可能摄入的有害元素水平,实现对人群暴露水平的量化评估。

$$EDI = C \times IR / BW$$

C 为中药中元素含量实测值 ($\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$), IR 为药材的每日摄入量 ($\text{kg} \cdot \text{d}^{-1}$), BW 为体质量 (kg)

EDI 的风险判定需依托国际权威机构制定的安全阈值标准,主要包括世界卫生组织 (WHO)、联合国粮农组织食品添加剂联合专家委员会 (FAO/JECFA) 及欧洲食品安全局 (EFSA) 发布的暂定每日耐受摄入量 (PTDI)。一般情况下,当 EDI 低于 PTDI 时,表明在此摄入水平下,对人体健康的不良影响风险较低^[44]。多项研究证实,甘草^[31]、黄芪^[45]、丹参^[46]等常见中药材按常规临床剂量使用时所含 Pb、Cd、As、Hg 等元素的 EDI 值均显著低于对应的 PTDI 限值,初步评估其健康风险隐患较小。李运等^[38]对中药六神曲开展分析,结果表明其整体健康风险可控,但仍需注意其中 Al、Cr 的摄取水平,日常及临床应用中需适度管控。实际应用中,EDI 的风险评估面临突出难题,即 IR 难以精准界定。中药临床用量范围宽泛,且需依据个体病情动态调整,如何精准确定具有普适代表性的暴露标

准,是该领域亟待突破的核心科学问题。

4.2 THQ 与 HI

THQ 是美国环境保护局为量化非致癌性健康风险而设立的一项关键评估工具。该系数主要用来衡量可能造成器官功能损害和神经系统病变等非致癌性不良效应的危险程度,是中药无机元素非致癌风险研判的重要指标。

$$THQ = EDI / RfD = (C \times EF \times ED \times IR) / (RfD \times BW \times AT \times 10^3)$$

EF 为年暴露频率 ($\text{d} \cdot \text{年}^{-1}$), ED 为暴露年限 (年), RfD 为该污染物的经口参考剂量 ($\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$), AT 为平均暴露时间 (d)

当目标元素 $THQ < 1$ 表示预期风险不明显; $THQ \geq 1$ 表示可能存在健康风险^[47],需进一步考察。宁知贵等^[48]对穿心莲药材的无机元素风险研究显示,其 Pb、Cd、As、Hg、Cu 有害金属元素的 THQ 均小于阈值,说明常规使用穿心莲无明显健康安全

风险。此外,对于中药中多种无机元素共存的复杂情况^[49],单一元素 THQ 评估无法反映多元素复合暴露的累积风险,因此引入 HI 开展综合风险评估。HI 通过累加各单一元素的危害系数 (HQ),量化多元素联合暴露的叠加健康危害,可实现中药材复合污染风险的整体、科学评价。

$$HQ = DI / RfD = (C \times IR) / (\text{MinRL} \times BW \times 10^3)$$

DI 为日摄入量 ($\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$), MinRL 为最小风险剂量 ($\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$)

$$HI = \sum_{i=1}^n HQ_i$$

当 $HI < 1$ 时,所有元素的联合暴露水平低于综合安全阈值,通常可判定为不存在明显的联合非致癌健康风险;当 $HI \geq 1$ 时,即多种元素联合暴露可能会产生潜在的健康风险,即使单一元素风险达标,其累积叠加效应仍需重点关注^[50]。燕梦遥等^[45]对不同产地黄芪药材质量研究中,发现青海互助县生产的黄芪 $HI > 1$,尽管样品中的重金属含量全部符合现行药典标准,但长期使用仍存在一定的非致癌风险。罗益远等^[51]对不同产地及部位乌药研究发现,乌药各部位的 5 种重金属单一 HQ 值均 < 1 ,但广东韶关的乌药块根与直根样本 HI 值接近临界点 1,建议对该产地乌药开展长期动态监测。此外,中药制剂的剂型和服用方法对样本的 THQ 结果会产生直接影响。江垭霓等^[33]对黄芪的对比研究发现,直接冲服黄芪原粉时,Al 和 Pb 的 THQ 值接近甚至

超过参照警戒线；而黄芪水煎液的 THQ、HI 值通常低于限值。这一结果揭示了传统煎煮方式对重金属暴露风险控制的积极意义，也提示中药安全性评估需紧密结合临床实际用药场景与服用习惯，避免脱离实际的片面性评价。

4.3 CR

国际癌症研究机构 (IARC) 将 As、Cd 等元素明确列为人类致癌物^[52]，此类元素的长期暴露存在潜在致癌风险，因此需针对性开展中药材无机元素 CR 评估。CR 指标可量化个体在终生持续暴露在特定有害物质中可能面临的超过基础水平的癌症概率，是中药材安全性评价的重要补充指标。

$$CR = EDI \times CSF$$

CSF 为致癌斜率因子，表示终生暴露于单位剂量污染物所导致的超额致癌风险

参照美国环境保护局制定的风险评估框架， $CR < 1 \times 10^{-6}$ 时，终身暴露的致癌风险可忽略；当 CR 值 $1 \times 10^{-6} \leq CR \leq 1 \times 10^{-4}$ 时，风险需纳入监管关注范围；当 $CR > 1 \times 10^{-4}$ ，表明存在无法接受的致癌风险，需立即采取干预管控措施^[53]。中药材重金属风险已有多项研究^[47,54-57]指出，As 和 Cd 元素的 CR 值大多在 1×10^{-6} 以下，整体致癌风险处于极低水平。但需要特别注意的是，当前通用的 CSF 值是基于无机 As 等特定价态制定，而中药中 As 元素包含无机砷与毒性较低的二甲基砷酸等有机砷。因此，若不区分价态直接使用总量计算 CR，存在高估致癌风险的可能，是当前致癌风险评估的主要误差来源^[58-59]。

4.4 单因子指数 (P_i) 与内梅罗综合指数 ($P_{\text{综合}}$)

P_i 与 $P_{\text{综合}}$ 是源自环境质量评价领域的指数方法。适用于中药材大批量样本的无机元素污染程度快速筛查与初步风险分级，其中，作为基础性评价工具的 P_i 主要用于量化表征单一特定污染物的污染程度。 $P_{\text{综合}}$ 是一种用于综合评价环境介质中多种污染物总体污染程度的方法。该指数能较全面地反映总体污染状况，通过综合考虑多种污染物的共同影响，集中放大污染程度最严重因素的贡献度，有效弥补 P_i 无法表征复合污染的缺陷。

$$P_i = C_i / S_i$$

C_i 为污染元素 i 的实测值 ($\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$)， S_i 为污染元素 i 的评价标准值 ($\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$)

$$P_{\text{综合}} = \sqrt{[(\sum_{i=1}^n P_i / n)^2 + (\max P_i)^2] / 2}$$

n 为参与评价的污染元素种类数量， $\max P_i$ 为所有污染元素 P_i 中的最大值

两类指数的统一分级标准为： $P \leq 0.7$ ，安全等级； $0.7 < P \leq 1.0$ ，警戒等级； $P > 1.0$ ，污染等级。毛敬彪等^[60]在对不同产地栀子花的污染评价显示，大多数样本中的 Pb、Cd、As、Hg 等元素 P_i 均 < 0.5 ，处于安全区间；仅湖南产地 1 个样品的 Cu 元素 P_i 达到 1.2，呈轻度污染，分析可能与当地土壤中高背景 Cu 值有关。左甜甜等^[61]对比硫磺熏制与未熏制黄芪饮片的无机元素差异发现，硫磺熏制可使样品 As 元素 P_i 增加 30%，表明中药材炮制工艺可能成为重金属元素污染源，提示需严控中药材加工炮制全流程的质量安全。

4.5 最大残留限量 (MRL)

MRL 是基于健康风险评估反向推导的安全限量阈值，指在常规暴露场景下、可保障人体健康无损害的中药材无机元素最大残留限量。以非致癌风险临界状态 ($\text{THQ} = 1$) 为基准，可推导得到目标元素的 MRL 值。

$$\text{MRL} = (\text{THQ} \times RfD \times BW \times AT) / (IR \times EF \times ED)$$

MRL 值的制定过程也需要平衡元素对健康的影响和潜在风险，尤其是对于药食同源中药材，例如在设定枸杞子中 Zn 元素的 MRL 值时，考虑到 Zn 作为人体必需营养物质，不能过于严苛而导致营养物质的正常摄入受到影响。

MRL 整合了人体体质量、用药剂量、暴露时长、暴露频率等多项核心参数，可精准界定不同应用场景下无机元素的安全残留阈值，有效补充现行药典限量标准的局限性^[62]。李海燕等^[31]基于成人甘草常规日服用量 5~10 g 的临床场景，推导出甘草中 Pb、Cd、As、Hg、Cu 的 MRL 值分别为 3.2、0.3、1.8、0.1、18.0 $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。其中 Cd 元素 MRL 值较《中国药典》2025 年版规定的 1 $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ 限量更为严格，为药典限量标准的优化修订提供了重要参考。MRL 值的制定需兼顾毒性风险与人体营养需求，尤其针对药食同源中药材。例如枸杞子中 Zn 为人体必需微量元素，其 MRL 值设定不宜过于严苛，避免限量标准限制人体正常微量元素摄入^[63]。

综上，当前中药无机元素健康风险评估已形成涵盖暴露评估 (EDI)、非致癌与致癌风险表征 (THQ/HI、CR)、污染水平筛查 (P_i 、 $P_{\text{综合}}$) 及限量推导 (MRL) 的多层次方法体系，为科学评价有害元素潜在危害提供了多维分析方法。然而暴露参数

的不确定性、元素价态毒性差异及药食同源品种评价标准不一致等问题较为突出,未来需结合元素价态分析、实际用药场景优化评估模型,进一步提升中药无机元素风险评估的精准性与科学性。

5 无机元素分析对中药材及中成药质量评价的意义

运用 ICP-MS 等现代分析技术研究中药材及制剂中无机元素,通过无机元素谱定性定量表征其组成含量,结合多维数据分析模型和多层次的健康风险评估方法,最终需评价的主要目标仍是中药的安全性和有效性。

5.1 无机元素分析对中药材安全性的意义

无机元素测定分析是一项确保中药用药安全、质量稳定的关键技术手段。通过严格设定不同有害金属元素的残留限值标准、规范其检测方法,可有效防控中药中的重金属污染风险,规避其引发的人体健康危害。以下从各国药典标准对比、药食同源药材限量制定依据、金属元素价态毒性差异影响 3 方面进行阐述。

不同国家药典及国际标准化组织对中药材重金属的管控标准存在显著差异。《中国药典》2025 年版四部通则〈0212〉明确了植物类中药材中核心重金属的残留限量,其中 Pb、Cd、As、Hg、Cu 的限量值分别为 5.0、1.0、2.0、0.2、20.0 mg·kg⁻¹,同时将 52 种植物来源中药材纳入统一限量管控体系^[64]。《美国药典》通则“232”规定中药材 Pb、Cd、As、Hg 的限量依次为 5.0、0.5、2.0、1.0 mg·kg⁻¹,并特别针对甲基汞设置不超过 0.2 mg·kg⁻¹ 的单独限值^[65]。欧洲药典的重金属管控标准整体更为严苛,其规定 Pb、Cd、Hg 的限量分别为 5.0、1.0、0.1 mg·kg⁻¹,但尚未建立 As 元素的通用限量标准^[66]。相较而言,ISO 国际标准《中医药-中药材重金属限量》(ISO 18664:2015) 的限量要求最为宽松,Pb、Cd、As、Hg 4 项重金属限值分别设定为 10、2、4、3 mg·kg⁻¹^[67]。各国及国际标准的限值差异,导致中药跨境贸易中极易出现标准适配冲突等问题,阻碍中药材的国际化流通。因此,建立与国际接轨且兼顾药用特点的限量体系,是保障中药安全性与国际化的基础。

此外药食同源品种需要同时满足药用与食用双重安全评价标准,《中国药典》2025 年版对植物类中药材中 Pb、Cd、As、Hg 的限值分别为 5.0、1.0、2.0、0.2 mg·kg⁻¹^[64],而《食品安全国家标准·食品中污染物限量》(GB 2762-2025) 对块根类蔬菜中对应元素的限值分别为 0.20、0.10、0.05、0.01 mg·kg⁻¹,相差

达一个数量级^[68]。以黄芪为例,有研究指出^[33],其周皮部位的 As、Pb 含量虽符合《中国药典》限值(As≤2、Pb≤5 mg·kg⁻¹),却已超出 GB 2762 中蔬菜类食品的限量(As≤0.5、Pb≤0.2 mg·kg⁻¹)。枸杞、山楂、西洋参等常用药食同源品种中也存在同类问题,大量符合药典要求的中药材用作食品(如保健茶、煲汤料)时,即面临“不合格”风险^[69]。这一矛盾并非简单的限值宽严之争,而是两类标准制定逻辑的本质错位:药典标准以临床用药剂量为依据,药材日服用量多为 3~15 g,服用周期有限,以治疗为目的;食品标准的制定则基于日常膳食暴露场景,每日摄入量可达数百克,且为终身持续摄入。同一物质在不同使用场景下,其暴露剂量可相差数十乃至上百倍,安全限量出现数量级差异具有客观合理性。然而,当前监管实践中,大量药食同源物质在作为食品(如保健茶、煲汤料、药膳食材)流通时,仍沿用品标准进行安全性判定,导致“合规药材在食品场景却存在实际安全风险”的监管悖论。反之,若以食品标准不加区分地套用于药用场景,又可能因标准过严而造成优质药材资源的无谓浪费,甚至影响临床用药供给。因此未来的监管策略不应追求“一刀切”的统一限值,而应建立基于“预期用途”的分类管理模式,完善双重标准体系。

另一方面,单一无机元素的总量并不能完全反映其毒性风险,不同价态或形态的无机元素毒理效应差异显著。例如,无机砷的毒性远高于有机砷,而甲基汞的神经毒性远超无机汞。美国药典在制定重金属限量时,除规定总 Hg 不超过 1 mg·kg⁻¹ 外,还特别要求甲基汞单独控制在 0.2 mg·kg⁻¹ 以内,这一做法体现了对元素形态毒性的科学重视。相比之下,《中国药典》2025 年版及欧洲药典目前仍以总 Hg、总 As 等总量指标为主,未针对高毒形态设置独立限值^[70]。仅控制元素总量可能低估高风险形态元素的暴露水平。因此,推动形态特异性检测方法(如 HPLC-ICP-MS)的应用,并针对 As、Hg 等元素制定价态限值,是提升中药安全性评价科学性的重要方向。

5.2 无机元素分析对中药有效性的意义

现代药理学研究对无机元素药用价值及功效贡献研究较少。无机元素是中药必不可少的物质基础,多种元素直接或间接与临床疗效相关。以补血类药物为例,当归、阿胶、丹参等典型补血中药的 Fe 元素含量,以及 Fe 在机体内的生物可利用形态,

是决定其补血功效强弱的核心因素之一^[71]。具有镇静安神、益智健骨功效的矿物质中药往往富含 Ca、Mg 成分。有研究表明,黄芪药材具有免疫增强作用与其中所含 Se、Zn 等微量元素密切相关^[72]。

微量元素可通过调控机体酶活性、代谢通路及免疫功能,间接赋能中药药效发挥。赵立春等^[73]研究表明,Zn 是体内 200 余种酶的核心组成成分,广泛参与生长、免疫及代谢调控过程;Se 是谷胱甘肽过氧化物酶的核心活性基团,在抗氧化防御体系中发挥关键作用,二者通过维持体内关键酶的正常活性、稳定机体生理功能,间接辅助并强化中药的整体治疗效果。另有研究发现^[74],中药中黄酮类、蒽醌类、生物碱类等分子结构中均含有供电子基团,可与金属离子发生配位作用,形成稳定的金属配合物。如黄芩苷与 Al 离子形成的配合物,抗菌活性显著优于黄芩苷单体;黄芪多糖与 Fe 络合后的产物可用于改善缺铁性贫血,为相关治疗策略优化提供了新的研究方向。此外,生物体内各无机元素并非孤立存在,元素间存在复杂的协同或拮抗关系,直接影响中药药效的综合表达。如 Zn 与 Cu 的拮抗作用,其在肠道发生吸收竞争,影响 Cu/Zn-SOD 活性与氧化平衡,最终调控中药抗氧化、抗炎等药理效应;Ca 与磷(P)的比例平衡也会影响骨骼健康^[75]。由此可见,仅检测中药无机元素的总含量,忽视其化学形态、价态特征及元素间的交互作用,无法全面、精准地阐明无机元素对中药药效的调控机制。综上,系统检测中药中无机元素的含量,深入分析其存在的形态和价态特征,研究元素间、元素与有机成分间的配伍作用规律,对科学、准确地评价中药药效具有至关重要的理论价值和实践意义。

6 结语与展望

无机元素是中药化学物质体系的重要组成部分,在中药质量控制与安全性评价中的价值日益凸显。通过系统梳理近年无机元素谱在产地溯源、真伪鉴别、炮制工艺评价及制剂一致性等方面的应用进展,明确了无机元素分析已从单一含量测定向整体特征表征的范式转变。结合化学计量学与机器学习等多元数据挖掘手段,研究者能够从高维元素谱中提取关键特征信息,实现对中药样品的精准分类与质量判别。与此同时,健康风险评估方法体系的不断完善,也为科学界定中药有害元素的安全阈值、规范风险判定标准提供了重要工具。在总结现有研究成果的基础上,该领域在方法学深度、风险

评估模型的适用性及监管应用层面仍存在不足,未来仍需针对性突破关键技术与应用难题。

首先,元素形态毒性的认知深度相对不足,导致现有基于元素总量的风险评估存在判定偏差。当前绝大多数研究仍以元素总量为分析终点,构成该领域研究方法学的核心局限。仅基于单一元素总量计算得出的 CR 存在显著的模型不确定性,评估结论准确性难以保障。未来研究必须从“总量控制”向“形态控制”范式转型,优先发展并标准化 HPLC-ICP-MS 等联用技术,系统建立主要毒性元素的形态分析数据库。监管层面则应优先关注 As、Cr、Hg 等高风险元素,借鉴《美国药典》对甲基汞的管控思路,在标准中增加特定毒性形态的单独限度,细化安全管控要求。

其次,现有健康风险评估模型在药源性暴露场景下的适用性边界不清,参数本土化与精细化程度严重滞后。当前广泛应用的 THQ 和 HI 等模型,本质上是为环境污染物(如受污染的水、土壤、食物)的长期、低剂量暴露场景设计的。直接套用至中药“间断性、疗程化、个体化”的用药场景时,会带来显著的模型偏倚。例如,大多数研究假设终身(70 年)每日不间断暴露,这与中药“病愈即止”的临床实际严重不符,导致 THQ 值被系统性地高估,产生“假阳性”风险信号。同时,现有模型忽略了中药复方“君臣佐使”配伍、炮制工艺、煎煮过程对元素溶出率、形态转化和生物可给性调控作用,无法真实反映中药用药的实际风险。未来应系统研究高风险元素 As、Hg、Cr 等的毒性形态及其在炮制、煎煮过程中的转化规律;借助金属组学与配位化学等手段,揭示元素与黄酮、多糖等中药有机活性成分的生物利用度及药效贡献,阐明无机元素在中药整体调节的作用通路。此外,可以引入生理药动学模型,精准评估元素在体内的吸收、分布、代谢和排泄过程。监管层面亟需建立基于中药真实世界用药规律,结合疗程、剂量、复方配伍等参数,构建适配中药场景的专属暴露评估参数体系,避免“用一个模型套用所有场景”的粗放评估模式。

再次,药食同源中药材品种亟需建立基于“预期用途”分类管理的双重标准体系,未来可从 3 个方面开展工作。第一,明确用途导向的监管分流。监管部门应在流通环节强化对药食同源物质的用途标识管理:凡以药品身份应用于临床诊疗的中药材,严格遵循《中国药典》标准,结合临床剂量进

行精准风险评估；凡以食品或保健食品形式进入普通消费市场的，必须强制执行 GB 2762 等食品安全国家标准，2 类标准不得混淆适用、随意替代。第二，加快药食同源物质专属食品安全限量的制定。国家卫生健康委已明确，自 2023 年起，新公布的食药物质目录均配套 Pb、Cd、As、Hg 等关键食品安全限量指标，且 2025 年已完成 19 种食药同源物质的重金属限量标准制定。以 2024 年新增的地黄等 4 种中药为例，其 Pb 限量设定为 $1.0 \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ ，其重金属限量采用介于药典 ($5 \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$) 与食品标准 ($0.2 \text{ mg} \cdot \text{kg}^{-1}$) 间的过渡限值。但对既往已纳入目录的近百种物质，配套标准仍存在大量空白。后续应加快推进存量药食同源物质的专属食品安全限量研究，结合实际膳食暴露量重新推导科学限值，避免简单套用典标准或盲目参照普通食品标准。第三，建立高风险品种的动态监测与预警机制。对黄芪、枸杞、三七、西洋参等消费量大、暴露频率高的药食同源品种，应建立专项风险评估数据库，持续跟踪其不同使用场景下的元素累积暴露水平，并根据最新毒理学数据和消费调研数据，动态优化安全限量标准。同时，鼓励生产企业开展主动检测与精准标识，向消费者明示产品的建议用途和每日建议摄入量，提升市场风险沟通与科普引导效能。

展望未来，中药无机元素研究应聚焦于以下 4 个方向的突破，以驱动行业研究从合规性检测向风险预测与精准管控的跃升。技术层面，全面推动形态分析与生物可给性技术的应用，建立基于毒性当量的风险评估新范式；模型层面，开发融合机器学习与生理药动学的多维度、智能化风险评估模型，实现对复方制剂中元素间协同、拮抗作用的量化预测；标准层面，推动药食同源品种双重安全标准体系的建立，并基于本土化临床暴露参数，修订完善现有有害元素限量规范；学科层面，深化金属组学、配位化学在中药研究中的应用，从分子层面揭示内源性必需无机元素与有机成分的协同增效机制，将无机元素的研究价值从安全隐患控制，拓展至中药活性功效挖掘、质量内涵解析的全新维度。在系统化、精准化评价理念的引领下，中药无机元素分析将突破当前的方法学瓶颈，构建覆盖药材种植、加工炮制、制剂生产、临床用药的全链条智慧化质量管控体系，为中药的科学监管、国际化进程及临床安全合理应用提供坚实支撑。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 赵一懿, 郭洪祝, 傅欣彤, 等. 基于 ICP-MS 法分析银杏叶系列品种中 25 种无机元素 [J]. 中草药, 2017, 48(10): 1991-1997.
Zhao Y Y, Guo H Z, Fu X T, et al. Analysis of 25 inorganic elements in *Ginkgo Folium* preparations by ICP-MS [J]. Chin Tradit Herb Drugs, 2017, 48(10): 1991-1997.
- [2] 赵一懿, 陈炼明, 郭洪祝, 等. 基于无机元素谱的玉竹药材质量特征研究 [J]. 中国新药杂志, 2019, 28(1): 3223-3227.
Zhao Y Y, Chen L M, Guo H Z, et al. Determination and quality assessment of inorganic elements fingerprint in *Polygonatum odoratum* by ICP-MS [J]. Chin J New Drugs, 2019, 28(1): 3223-3227.
- [3] 赵一懿, 陈炼明, 郭洪祝, 等. 基于 ICP-MS 技术在中药无机元素的分析应用与评价方法探讨 [J]. 中国新药杂志, 2019, 28(1): 54-59.
Zhao Y Y, Chen L M, Guo H Z, et al. Research and evaluation of inorganic elements in tradition Chinese medicine based on ICP-MS [J]. Chin J New Drugs, 2019, 28(1): 54-59.
- [4] 赵一懿, 郭洪祝, 傅欣彤, 等. ICP-MS 法测定不同产地甘草及商品药材中 25 种金属元素及相关性分析 [J]. 中药材, 2017, 40(11): 2524-2530.
Zhao Y Y, Guo H Z, Fu X T, et al. Determination and correlation analysis on 25 metal elements in *Glycyrrhiza uralensis* from different habitats and commercial herbs by ICP-MS [J]. J Chin Med Mater, 2017, 40(11): 2524-2530.
- [5] 赵一懿, 陈炼明, 郭洪祝, 等. 基于无机元素谱的白茅根药材质量特征研究 [J]. 中华中医药杂志, 2019, 34(7): 3223-3227.
Zhao Y Y, Chen L M, Guo H Z, et al. Determination and quality assessment of inorganic elements fingerprint on *Imperatae Rhizoma* [J]. China J Tradit Chin Med Pharm, 2019, 34(7): 3223-3227.
- [6] 李振凯, 王红, 宋乐, 等. 基于无机元素、有效成分银柴胡产地特征及关联分析 [J]. 中国现代应用药学, 2023, 40(7): 894-902.
Li Z K, Wang H, Song L, et al. Origin characteristics and correlation analysis of *Stellariae Radix* based on inorganic elements and effective components [J]. Chin J Mod Appl Pharm, 2023, 40(7): 894-902.
- [7] 赖晓娜, 罗辉泰, 张春华, 等. 基于矿物元素指纹图谱鉴定陈皮产地的方法研究 [J]. 分析测试学报, 2024, 43(2): 301-308.
Lai X N, Luo H T, Zhang C H, et al. A method of origin

- identifying of *Citrus Reticulata blanco* based on the mineral element fingerprint [J]. J Instrum Anal, 2024, 43(2): 301-308.
- [8] 张春华, 陈春桃, 陈亮, 等. 矿物元素指纹图谱的建立及在西洋参产地鉴别中的应用研究 [J]. 分析测试学报, 2021, 40(3): 318-325.
Zhang C H, Chen C T, Chen L, et al. Establishment of mineral element fingerprints and their application in identification on geographical origin of *American ginseng* [J]. J Instrum Anal, 2021, 40(3): 318-325.
- [9] 于喆源, 韦志超, 王昭国, 等. 无机元素指纹图谱结合化学计量学对甘草元素富集规律及产地溯源的研究 [J]. 中医药导报, 2021, 27(9): 91-95.
Yu Z Y, Wei Z C, Wang Z G, et al. Inorganic elements enrichment regularities and geographical origin traceability of *Gancao (Glycyrrhiza uralensis)* by fingerprint of inorganic elements combined with chemometrics [J]. Guid J Tradit Chin Med Pharm, 2021, 27(9): 91-95.
- [10] Xue X, Liu G, Tang Q, et al. Multi-elements characteristic and potential risk of heavy metals in *MOUTAN CORTEX* from Anhui Province, China [J]. Int J Environ Sci Technol, 2023, 20(7): 7829-7842.
- [11] 谭新宁, 吴文如, 张睿, 等. ICP-MS 法分析青箱子及其混伪品的无机元素差异 [J]. 中药材, 2022, 45(2): 379-384.
Tan X N, Wu W R, Zhang R, et al. Differential analysis of inorganic elements in *celosiae semen* and adulterants by ICP-MS [J]. J Chin Med Mater, 2022, 45(2): 379-384.
- [12] 石婧, 李彬, 马梦营, 等. 无机元素指纹结合多元统计分析鉴别浙贝母真伪 [J]. 食品安全质量检测学报, 2026, 17(6): 334-342.
Shi J, Li B, Ma M Y, et al. Authentication of *Fritillaria thunbergii* by inorganic element fingerprint combined with multivariate statistical analysis [J]. J Food Saf Qual, 2026, 17(6): 334-342.
- [13] 栾洁, 丁晴. 牛黄类药材及其伪品中 27 种元素含量分析 [J]. 药学与临床研究, 2021, 29(5): 360-364.
Luan J, Ding Q. Analysis of 27 elements in *Calculus bovis* and their adulterants [J]. Pharm Clin Res, 2021, 29(5): 360-364.
- [14] 乔青阳, 汪康, 陈灵丽, 等. 基于 ICP-MS 与多元统计分析的龙骨真伪鉴别 [J]. 中国现代中药, 2026, 28(2): 242-254.
Qiao Q Y, Wang K, Chen L L, et al. Authentic and counterfeit *draconis Os* identification based on ICP-MS and multivariate statistical analysis [J]. Mod Chin Med, 2026, 28(2): 242-254.
- [15] Wu L Z, Liu C L, Yao T, et al. Structural and compositional changes in two marine shell traditional Chinese medicines: A comparative analysis pre- and post-calcination [J]. J AOAC Int, 2024, 107(4): 704-713.
- [16] 石婧, 刘婷, 李彬, 等. 半夏糖浆无机元素指纹图谱的建立及质量评价 [J]. 中国药业, 2025, 34(20): 82-87.
Shi J, Liu T, Li B, et al. Establishment of inorganic element fingerprint and quality evaluation of *Banxia syrup* [J]. China Pharm, 2025, 34(20): 82-87.
- [17] 李俊霖, 沈沅, 卞如玉, 等. 七制香附丸中无机元素的分析及健康风险评估 [J]. 中国医院药学杂志, 2023, 43(2): 175-180, 200.
Li J L, Shen Y, Bian R Y, et al. Analysis and health risk assessment of inorganic elements in *Qizhi Xiangfu Pills* [J]. Chin J Hosp Pharm, 2023, 43(2): 175-180, 200.
- [18] 毕春艳, 薛剑桥, 祝茜, 等. 基于 ICP-MS 及多元统计方法分析复方西羚解毒制剂中 45 种元素含量 [J]. 中国药师, 2024(5): 762-771.
Bi C Y, Xue J Q, Zhu Q, et al. Analysis of 45 elements in *Fufang Xiling Jiedu* preparation based on ICP-MS and multivariate statistic method [J]. China Pharm, 2024(5): 762-771.
- [19] Li S Y, Yin K, Wang Y W, et al. Integrating ICP-MS and chemometrics for profiling inorganic elements in *Lianhua Qingwen capsules* and evaluating health risk [J]. Biol Trace Elem Res, 2025, 203(3): 1709-1720.
- [20] Pan S X, Yang L, Wang Y W, et al. Exploring potential health risk of *Chenxiang huaqi tablets* based on inorganic elemental evaluation using ICP-MS [J]. Biol Trace Elem Res, 2025, 203(12): 6310-6326.
- [21] 张洪怡, 周靖惟, 刘佳雯, 等. 基于 AHP-CRITIC 复合加权法优选牡蛎的炮制工艺及其重金属元素健康风险评估 [J]. 中草药, 2025, 56(5): 1549-1563.
Zhang H Y, Zhou J W, Liu J W, et al. Optimization of processing technology based on AHP-CRITIC mixed entropy method and health risk assessment of heavy metals elements in *Ostreae Concha* [J]. Chin Tradit Herb Drugs, 2025, 56(5): 1549-1563.
- [22] 徐继军, 张明童, 李冬华, 等. 罂粟壳炮制前后无机元素含量差异及地域分布特点 [J]. 中国药业, 2022, 31(19): 63-67.
Xu J J, Zhang M T, Li D H, et al. Content differences of inorganic element in *papaveris pericarpium* before and after processing and their area distribution characteristics [J]. China Pharm, 2022, 31(19): 63-67.
- [23] 杨思广, 韩宇, 金立弟. 蛤蚧炮制前后重金属及有害元素的含量研究 [J]. 中国药品标准, 2022, 23(6): 609-613.

- Yang S G, Han Y, Jin L D. Research on the content of heavy metals and harmful elements in *Gekko gecko Linnaeus* pre-processing and post-processing [J]. Drug Stand China, 2022, 23(6): 609-613.
- [24] 陈胜强, 杨克培, 康文利, 等. 熟地黄的炮制及有效成分和微量元素的检测研究 [J]. 分析测试技术与仪器, 2023, 29(4): 392-399.
- Chen S Q, Yang K P, Kang W L, et al. Study on concoction and detection of active components and trace elements of *Radix rehmanniae praeparata* [J]. Anal Test Technol Instrum, 2023, 29(4): 392-399.
- [25] 冯先进, 郑国经. 电感耦合等离子体发射光谱与质谱分析技术和应用研究进展 [J]. 中国无机分析化学, 2025, 15(3): 353-362.
- Feng X J, Zheng G J. Progress in analysis technology and application of ICP-OES and ICP-MS [J]. Chin Jorunal Inorg Anal Chem, 2025, 15(3): 353-362.
- [26] 解素雯. 基于主成分分析与因子分析数学模型的应用研究 [D]. 济南: 山东理工大学, 2016.
- Jie S W. Application of principal Component analysis and factor analysis based on mathematical models [D]. Jinan: Shandong University of Technology, 2016.
- [27] 许有诚, 赵庄, 卢日刚, 等. 主成分分析在中药质量分析及质量评价中的应用进展 [J]. 大众科技, 2021, 23(8): 37-41.
- Xu Y C, Zhao Z, Lu R G, et al. Principal component analysis in traditional Chinese medicine quality analysis and quality evaluation [J]. Pop Sci Technol, 2021, 23(8): 37-41.
- [28] Nguyen Q T, Nguyen T T, Le V N, et al. Towards a standardized approach for the geographical traceability of plant foods using inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS) and principal component analysis (PCA) [J]. Foods, 2023, 12(9): 1848.
- [29] 何秋云, 何敏, 陈明, 等. 基于 ICP-MS 结合化学计量学分析五指毛桃中微量元素含量及健康风险评估 [J]. 中药材, 2024, 47(10): 2549-2554.
- He Q Y, He M, Chen M, et al. Analysis of trace element contents in *fici hirtae Radix* by ICP-MS combined with chemometrics and its health risk assessment [J]. J Chin Med Mater, 2024, 47(10): 2549-2554.
- [30] 冉金凤, 胡文岳, 吴晓云, 等. 基于聚类分析和主成分分析的黄精无机元素特征图谱研究 [J]. 食品安全质量检测学报, 2022, 13(10): 3271-3277.
- Ran J F, Hu W Y, Wu X Y, et al. Study on specific spectrum of inorganic elements in *Polygonati Rhizoma* based on cluster analysis and principal component analysis [J]. J Food Saf Qual, 2022, 13(10): 3271-3277.
- [31] 李海燕, 尹盼盼, 彭腾腾, 等. 甘草中 20 种无机元素的测定及对有害元素的健康风险评估 [J]. 食品安全质量检测学报, 2024, 15(8): 281-291.
- Li H Y, Yin P P, Peng T T, et al. Determination of 20 kinds of inorganic elements in *Glycyrrhizae Radix et rhizoma* and their health risk assessment [J]. J Food Saf Qual, 2024, 15(8): 281-291.
- [32] 齐鹏成, 李佳蕊, 梁皓, 等. ICP-MS 结合多元统计分析测定和比较茯苓四种药用部位中无机元素分布 [J]. 沈阳药科大学学报, 2025, 42(7): 615-622.
- Qi P C, Li J R, Liang H, et al. Determination and comparison of the distribution of inorganic elements in four medicinal parts of *Poria cocos* (Schw.) Wolf by ICP-MS combined with multivariate statistical analysis [J]. J Shenyang Pharm Univ, 2025, 42(7): 615-622.
- [33] 江埏霓, 张振鸿, 卡迪热亚·吐尔逊买买提, 等. 基于 AHP-CRITIC 权重 TOPSIS 模型结合化学计量学的黄芪中无机元素富集规律、健康风险评估及品质评价方法 [J]. 中国无机分析化学, 2025, 15(9): 1480-1496.
- Jiang Y N, Zhang Z H, Tuerxunmaiti Kadireya, et al. Inorganic element enrichment pattern analysis, health risk assessment and quality evaluation of *Astragalus membranaceus* based on AHP-CRITIC weighted-TOPSIS model combined with chemometrics [J]. Chin J Inorg Anal Chem, 2025, 15(9): 1480-1496.
- [34] 贾德政, 陈伟韬, 谢灿辉, 等. 基于 ICP-MS 的两广地区牡蛎药材元素特征分析及重金属风险评估 [J]. 辽宁中医药大学学报, 2026, 28(3): 51-56.
- Jia D Z, Chen W T, Xie C H, et al. Elemental characteristic analysis and heavy metal risk assessment of Muli (*ostrea concha*) from Guangdong and Guangxi regions based on ICP-MS [J]. J Liaoning Univ Tradit Chin Med, 2026, 28(3): 51-56.
- [35] 陈晓婷, 刘振艳, 孙宇, 等. 基于 ICP-MS 结合化学计量学的短瓣金莲花产地分析及安全评价 [J]. 中药材, 2025, 48(8): 1995-2002.
- Chen X T, Liu Z Y, Sun Y, et al. Analysis of origin and safety evaluation of *Trollius ledebourii* based on ICP-MS combined with chemometrics [J]. J Chin Med Mater, 2025, 48(8): 1995-2002.
- [36] 任小娜, 王双双, 张春玲, 等. 近五年来中药材中无机元素含量测定和分析综述 [J]. 福建分析测试, 2025, 34(3): 14-19.
- Ren X N, Wang S S, Zhang C L, et al. A review of the determination and analysis of inorganic element content in traditional Chinese medicine in the past five years [J]. Fujian Anal Test, 2025, 34(3): 14-19.
- [37] 陈佳梅, 黄世伟, 李莞, 等. ICP-MS 测定川芎及其近缘

- 药材中的 24 种有害元素和营养元素 [J]. 中草药, 2025, 56(19): 7186-7199.
- Chen J M, Huang S W, Li (G /W), et al. Determination of 24 harmful and nutritional elements in *Ligusticum chuanxiong* and its related medicinal materials by ICP-MS [J]. Chin Tradit Herb Drugs, 2025, 56(19): 7186-7199.
- [38] 李运, 戚鹏飞, 张晓萍, 等. 基于 ICP-MS 技术的六神曲中无机元素分析及其风险评估 [J]. 中国无机分析化学, 2024, 14(9): 1340-1352.
- Li Y, Qi P F, Zhang X P, et al. Analysis and risk assessment of inorganic elements in liushenqu based on ICP-MS technology [J]. Chin J Inorg Anal Chem, 2024, 14(9): 1340-1352.
- [39] 吕鑫, 顾志荣, 葛斌, 等. 基于多产地及多模型的锁阳有效成分与无机元素相关性研究 [J]. 中药材, 2022, 45(4): 811-817.
- Lyu X, Gu Z R, Ge B, et al. Study on correlation between active ingredients and inorganic elements of *cynomorii herba* based on multiple producing areas and multiple models [J]. J Chin Med Mater, 2022, 45(4): 811-817.
- [40] 吴伟, 尹海波, 王丹, 等. 无机元素含量特征谱结合化学计量学鉴别不同生长年限的白鲜药材 [J]. 中药材, 2024, 47(3): 587-592.
- Wu W, Yin H B, Wang D, et al. Study on identification of different growth years of *Dictamnus dasycarpus* based on characteristic spectrum of inorganic elements and chemometrics [J]. J Chin Med Mater, 2024, 47(3): 587-592.
- [41] 李超, 申国玺, 徐铮锐, 等. 无机元素与计量学模型结合的半夏产地溯源研究 [J]. 中国无机分析化学, 2024, 14(5): 652-661.
- Li C, Shen G X, Xu Z R, et al. Study on the origin tracing of *Pinellia ternata* based on inorganic element analysis combined with chemometric models [J]. Chin J Inorg Anal Chem, 2024, 14(5): 652-661.
- [42] 左甜甜, 张磊, 王莹, 等. 中药材及饮片重金属及有害元素限量制定的探讨 [J]. 药物分析杂志, 2020, 40(4): 688-693.
- Zuo T T, Zhang L, Wang Y, et al. Exploration of the limit of heavy metals and harmful elements in Chinese medicinal materials and decoction pieces [J]. Chin J Pharm Anal, 2020, 40(4): 688-693.
- [43] Zuo T T, Zhang L, Wang Y, et al. Technical guidelines for risk assessment of heavy metals in traditional Chinese medicines [J]. Chin Med, 2023, 18(1): 69.
- [44] 孙常胜, 宇泉霖, 吴婧楠, 等. 电感耦合等离子体质谱 (ICP-MS) 法测定百荷冻干含糖中 18 种无机元素及健康风险评估 [J]. 中南药学, 2023, 21(5): 1366-1371.
- Sun C S, Yu Q L, Wu J N, et al. Inorganic elements in Baihe freeze-dried orally disintegrated tablets and their health risk assessment [J]. Cent South Pharm, 2023, 21(5): 1366-1371.
- [45] 燕梦遥, 宋平顺, 张明童, 等. 基于黄芪无机元素含量分析的产地区分及健康风险评估 [J]. 世界中医药, 2023, 18(9): 1211-1221.
- Yan M Y, Song P S, Zhang M T, et al. Origin differentiation and health risk assessment based on inorganic element content analysis of *Astragalus membranaceus* [J]. World Chin Med, 2023, 18(9): 1211-1221.
- [46] 王巧, 于永杰, 王紫怡, 等. 基于 ICP-MS 的不同产地丹参元素差异分析及健康风险评估 [J]. 中药材, 2023, 46(9): 2224-2232.
- Wang Q, Yu Y J, Wang Z Y, et al. Element difference analysis and health risk assessment of *salviae miltiorrhizae Radix et rhizoma* from different producing areas based on ICP-MS [J]. J Chin Med Mater, 2023, 46(9): 2224-2232.
- [47] 陈宏降, 罗益远, 彭昕, 等. 白及不同部位无机元素分布特征及其健康风险评估 [J]. 中成药, 2023, 45(6): 2079-2085.
- Chen H J, Luo Y Y, Peng X, et al. Distribution characteristics and health risk assessment of inorganic elements in different parts of *Bletilla striata* [J]. Chin Tradit Pat Med, 2023, 45(6): 2079-2085.
- [48] 宁知贵, 王裕成, 洪家顺, 等. 穿心莲不同部位无机元素分布及健康风险评估 [J]. 中药材, 2025, 48(11): 2810-2819.
- Ning Z G, Wang Y C, Hong J S, et al. Distribution of inorganic elements in different parts of *Andrographis paniculata* and health risk assessment [J]. J Chin Med Mater, 2025, 48(11): 2810-2819.
- [49] Loomis D, Huang W, Chen G S. The International Agency for Research on Cancer (IARC) evaluation of the carcinogenicity of outdoor air pollution: Focus on China [J]. Chin J Cancer, 2014, 33(4): 189-196.
- [50] 左甜甜, 高飞, 金红宇, 等. 基于生物可给性和靶器官毒性剂量法的乌梢蛇中铅和砷联合暴露评估 [J]. 药物评价研究, 2022, 45(12): 2473-2477.
- Zuo T T, Gao F, Jin H Y, et al. Risk assessment of combined exposure to lead and arsenic in *Zaocys dhumnades* (Cantor) based on bioaccessibility and target-organ toxicity dose modification of hazard index method [J]. Drug Eval Res, 2022, 45(12): 2473-2477.
- [51] 罗益远, 王娟, 陈宏降, 等. 不同产地、不同部位乌药中 31 种无机元素测定及初步风险评估 [J]. 药物分析杂志, 2022, 42(3): 424-432.
- Luo Y Y, Wang J, Chen H J, et al. Determination and

- primary risk evaluation of 31 inorganic elements in *Lindera aggregate* (Sims) Kosterm. from different habitat and medication part [J]. Chin J Pharm Anal, 2022, 42(3): 424-432.
- [52] 刘浩, 郭海涛, 姬爱熙, 等. ICP-MS 法测定松花粉无机元素含量及安全性、健康风险评估 [J]. 河北科技大学学报, 2025, 46(1): 67-76.
- Liu H, Guo H T, Ji A X, et al. Determination of inorganic elements in pine pollen by ICP-MS and safety and health risk assessment [J]. J Hebei Univ Sci Technol, 2025, 46(1): 67-76.
- [53] 阎睿, 熊雪庆, 朱德文, 等. 三峡库区道地药材木香中 29 种无机元素的测定与健康风险评估 [J]. 中国野生植物资源, 2025, 44(1): 52-59.
- Yan R, Xiong X Q, Zhu D W, et al. Determination and health risk assessment of 29 inorganic elements in genuine medicinal material *Aucklandia lappa* from Three Gorges Reservoir area [J]. Chin Wild Plant Resour, 2025, 44(1): 52-59.
- [54] 吴乾锋, 刘友平, 何东, 等. ICP-MS 法结合化学计量学分析杜仲叶无机元素及健康风险评估 [J]. 中药材, 2022, 45(9): 2157-2164.
- Wu Q F, Liu Y P, He D, et al. Analysis of inorganic elements in *Eucomimiae folium* by ICP-MS combined with chemometrics and health risk assessment [J]. J Chin Med Mater, 2022, 45(9): 2157-2164.
- [55] 李君翔, 王亚飞, 倪琳, 等. ICP-MS 结合化学计量学的地骨皮产地分析及健康风险评估 [J]. 中药材, 2022, 45(4): 898-905.
- Li J X, Wang Y F, Ni L, et al. Origin analysis and health risk assessment of *Lycii cortex* based on ICP-MS combined with chemometrics [J]. J Chin Med Mater, 2022, 45(4): 898-905.
- [56] 张林祥, 郝培君, 刘富强, 等. ICP-MS 法结合化学计量学的沉香产地分析及健康风险评估 [J]. 中药材, 2023, 46(4): 919-924.
- Zhang L X, Hao P J, Liu F Q, et al. Origin analysis and health risk assessment of *Aquilariae lignum resinatum* by ICP-MS combined with stoichiometry [J]. J Chin Med Mater, 2023, 46(4): 919-924.
- [57] 代磊, 邹佳佳, 徐小力, 等. 电感耦合等离子体质谱法分析不同产地使君子中无机元素及健康风险评估 [J]. 医药导报, 2023, 42(8): 1204-1210.
- Dai L, Zou J J, Xu X L, et al. ICP-MS analysis of inorganic elements and health risk assessment in *Quisqualis fructus* from various origins [J]. Her Med, 2023, 42(8): 1204-1210.
- [58] 刘晶, 孙铭忆, 吴慧敏, 等. 砷元素形态价态的研究进展 [J]. 中国中药杂志, 2023, 48(9): 2396-2405.
- Liu J, Sun M Y, Wu H M, et al. Arsenic speciation and valence [J]. China J Chin Mater Med, 2023, 48(9): 2396-2405.
- [59] 左甜甜, 金红宇, 张磊, 等. 根和根茎类中药材中铅和砷致癌性风险评估研究 [J]. 中国药事, 2021, 35(6): 661-665.
- Zuo T T, Jin H Y, Zhang L, et al. A study to carcinogenic risk assessment of Pb & as in root and rhizome medicinal materials [J]. Chin Pharm Aff, 2021, 35(6): 661-665.
- [60] 毛敬彪. 不同产地梔子中梔子苷、无机元素含量差异及其安全性评价 [J]. 上海化工, 2024, 49(2): 38-44.
- Mao J B. Differences in the content of geniposide and inorganic elements in *fructus gardeniae* from different producing areas and the safety evaluation [J]. Shanghai Chem Ind, 2024, 49(2): 38-44.
- [61] 左甜甜, 申明睿, 张磊, 等. 中药中重金属及有害元素限量标准的制定及有关问题的思考 [J]. 药物分析杂志, 2023, 43(4): 701-711.
- Zuo T T, Shen M R, Zhang L, et al. Formulation of limit standards for heavy metals and harmful elements in TCMs and related reflections [J]. Chin J Pharm Anal, 2023, 43(4): 701-711.
- [62] 潘超, 李海燕, 岳洪水, 等. 电感耦合等离子体-质谱法测定注射用益气复脉 (冻干) 中的 22 种无机元素 [J]. 药物评价研究, 2021, 44(11): 2430-2435.
- Pan C, Li H Y, Yue H S, et al. Determination of 22 kinds inorganic elements in Yiqi Fumai Lyophilized Injection by ICP-MS [J]. Drug Eval Res, 2021, 44(11): 2430-2435.
- [63] 闫莎莎, 周海云, 杨丽静, 等. 基于微量元素与多元统计对枸杞产地溯源研究 [J]. 西北民族大学学报(自然科学版), 2024, 45(3): 23-31.
- Yan S S, Zhou H Y, Yang L J, et al. Research on origin traceability of *Lycium barbarum* based on trace elements and multivariate statistics [J]. J Northwest Minzu Univ Nat Sci, 2024, 45(3): 23-31.
- [64] 中国药典 [S]. 四部. 2025.
- Pharmacopoeia of the People's Republic of China [S]. Volume I. 2025.
- [65] The United States Pharmacopoeial Convention 232 [S]. 2015.
- [66] European Pharmacopoeia 1433 [S]. 2015.
- [67] ISO Traditional Chinese Medicine Determination of Heavy Metals in Herbal Medicines Used in Traditional Chinese Medicine [S]. 2015.
- [68] 食品安全国家标准-食品中污染物限量: GB 2762—2012 [S]. 2013.
- National Food Safety Standard-Maximum Levels of

- Contaminants in Foods: GB 2762-2012 [S]. 2013.
- [69] 徐慧娟, 周家妤, 郑特, 等. 药食同源物质的安全性风险评估研究进展 [J]. 药物评价研究, 2025, 48(9): 2642-2651.
- Xu H J, Zhou J S, Zheng T, et al. Research progress on safety evaluation of medicine and food homologous substances [J]. Drug Eval Res, 2025, 48(9): 2642-2651.
- [70] 王莹, 申明睿, 刘芑汐, 等. 2025 年版《中国药典》中药中外源性有害残留物检测标准制修订解读与思考 [J]. 中国药品标准, 2025, 26(1): 83-92.
- Wang Y, Shen M R, Liu Y X, et al. Interpretation and thoughts on the formulation and revision of the standards for exogenous harmful residues in traditional Chinese medicinal materials in the Chinese Pharmacopoeia 2025 Edition [J]. Drug Stand China, 2025, 26(1): 83-92.
- [71] 汤莹, 杜光, 孙秋雁. 缺铁性贫血临床药物治疗进展 [J]. 中国医院药学杂志, 2022, 42(23): 2560-2566.
- Tang Y, Du G, Sun Q Y. Progress in clinical application of drugs to the treatment of iron deficiency Anemia [J]. Chin J Hosp Pharm, 2022, 42(23): 2560-2566.
- [72] 申明金, 曹洪斌, 陈丽. 补益中药微量元素的对应分析研究 [J]. 中医药导报, 2014, 20(2): 72-74.
- Shen M J, Cao H B, Chen L. Study on trace elements in benefit traditional Chinese medicines by correspondence analysis [J]. Guid J Tradit Chin Med Pharm, 2014, 20(2): 72-74.
- [73] 赵立春. 元素中药: 元素与中药功效的关联研究 [J]. 微量元素与健康研究, 2025, 42(5): 31-35.
- Zhao L C. Elemental traditional Chinese medicine: Investigating the relationship between elements and the efficacy of traditional Chinese medicine [J]. Stud Trace Elem Health, 2025, 42(5): 31-35.
- [74] 徐振娜, 丁浩冉, 徐子航, 等. 金属配位化学在中药新药研发中的应用及研究进展 [J]. 药科学报, 2025, 60(4): 919-928.
- Xu Z N, Ding H R, Xu Z H, et al. Application and research progress of metal coordination chemistry in the research and development of new drugs of traditional Chinese medicine [J]. Acta Pharm Sin, 2025, 60(4): 919-928.
- [75] 魏小成, 李成义, 周瑞娟, 等. 无机元素与中药关系研究进展 [J]. 中国中医药信息杂志, 2022, 29(7): 140-144.
- Wei X C, Li C Y, Zhou R J, et al. Research progress in relationship between inorganic elements and Chinese materia Medica [J]. Chin J Inf Tradit Chin Med, 2022, 29(7): 140-144.

[责任编辑 孙英杰]