

基于“方-证”关联的身痛逐瘀汤治疗痹证的网络药理学研究及其“异病同治”机制探讨

宋紫腾^{1,2,3}, 吕洪萍⁴, 王佳悦^{1,2,3}, 许 浚^{1,2,3*}, 张铁军^{1,2,3*}

1. 天津药物研究院有限公司 药物成药性评价与系统转化全国重点实验室, 天津 300301

2. 天津药物研究院有限公司 天津市中药质量标志物重点实验室, 天津市中药现代制剂与质量控制技术工程研究中心, 天津 300301

3. 和光中药科技(天津)有限公司, 天津 300301

4. 天津中医药大学, 天津 301617

摘要: 目的 基于“方-证”关联的研究思路, 系统阐释身痛逐瘀汤(STZYD)治疗痹证的化学物质基础、作用靶点及生物网络机制, 并探讨其“异病同治”的科学内涵。方法 采用高效液相色谱-四极杆飞行时间质谱(HPLC-Q-TOF-MS/MS)对 STZYD 化学成分进行系统表征与辨识; 选取 33 个主要活性成分为研究对象, 利用 Swiss Target prediction 与 PharmMapper 数据库收集活性成分的候选靶标; 通过 SoFDA 与 SymMap 数据库, 收集痹证的证候基因集, 借助 STRING 12.0 平台构建痹证相关基因与 STZYD 候选靶标交集的蛋白质-蛋白质相互作用(PPI)网络, 筛选核心靶点, 并通过 Cytoscape3.10.3 软件构建网络图; 利用 Metascape 在线对交集靶点进行基因本体(GO)和京都基因与基因组百科全书(KEGG)通路富集分析; 运用 SoFDA 平台预测交集靶点的现代医学症状, 并与痹证相关现代医学疾病相对应, 构建“靶点-通路-药理作用-疾病”关联网络。结果 STZYD 中共鉴定出 244 个化学成分; 选取的 33 个活性成分治疗痹证的潜在作用靶点共 190 个, PPI 网络分析发现白细胞介素-6(IL6)、肿瘤坏死因子(TNF)、白细胞介素-1 β (IL1B)、信号转导子和转录激活子 3(STAT3)、表皮生长因子受体(EGFR)等可能为核心靶点; KEGG 筛选出与痹证密切相关的通路共 70 条, 包括磷脂酰肌醇-3-激酶-蛋白激酶 B(PI3K)、核因子- κ B(NF- κ B)、白细胞介素 17(IL-17)等信号通路; 病-证关联结果显示, STZYD 可能对痹证相关骨关节病、自身免疫性疾病等具有治疗作用。结论 STZYD 可通过多成分、多靶点、多通路的协同作用, 干预炎症反应、免疫调节、血管生成等过程, 体现了“瘀血痹阻证”与多种现代疾病之间的内在关联, 为“异病同治”理论提供了现代生物学依据。

关键词: 身痛逐瘀汤; 痹证; 方-证关联; 网络药理学; 异病同治; HPLC-Q-TOF-MS/MS

中图分类号: R285.5 文献标志码: A 文章编号: 1674-6376(2026)10-3522-24

DOI: 10.7501/j.issn.1674-6376.2026.10.011

Network pharmacology study of Shentong Zhuyu Decoction for *bi* syndrome based on “prescription-syndrome” correlation and its “treating different diseases with same therapy” mechanism

SONG Ziteng^{1,2,3}, LÜ Hongping⁴, WANG Jiayue^{1,2,3}, XU Jun^{1,2,3}, ZHANG Tiejun^{1,2,3}

1. State Key Laboratory of Druggability Evaluation and Systematic Translational Medicine, Tianjin Institute of Pharmaceutical Research Co., Ltd., Tianjin 300301, China

2. Tianjin Key Laboratory of Quality Marker of Traditional Chinese Medicine, Tianjin Engineering Research Center of Modern Preparation and Quality Control Technology of Traditional Chinese Medicine, Tianjin Institute of Pharmaceutical Research Co., Ltd., Tianjin 300301, China

3. Huguang Chinese Medicine Technology (Tianjin) Co., Ltd., Tianjin 300301, China

4. Tianjin University of Traditional Chinese Medicine, Tianjin 301617, China

收稿日期: 2026-05-29

基金项目: 国家科技重大专项-“四大慢病重大专项”(2025ZD0549700); 安徽省科技重大专项资助(202303a07020007)

作者简介: 宋紫腾, 硕士, 助理研究员, 从事中药药效物质基础和作用机制研究。E-mail: songziteng@cmhk.com

*通信作者: 许 浚, 研究员, 从事中药质量和中药大品种二次开发研究。E-mail: xujuntj@163.com

张铁军, 研究员, 从事中药资源、中药质量和新产品开发研究。E-mail: zhangtj@cmhk.com

Abstract: Objective Based on the research idea of “prescription-syndrome correlation”, the study systematically elucidates the chemical material basis, action targets and biological network mechanism of Shentong Zhuyu Decoction (STZYD) in the treatment of *bi* syndrome, and explores the scientific connotation of its “treating different diseases with the same therapy”. **Methods** HPLC-Q-TOF-MS/MS was used to systematically characterize and identify the chemical components of STZYD. A total of 33 main active ingredients were selected as the research objects, and the potential targets of the compounds were collected by Swiss Target Prediction and PharmMapper databases. The syndrome-related gene sets of *bi* syndrome were retrieved from the SoFDA and SymMap databases. The protein-protein interaction (PPI) network of the common targets between *bi* syndrome-related genes and STZYD candidate targets was constructed by STRING 12.0 platform, and the core targets were screened and visualized by Cytoscape 3.10.3 software. Gene Ontology (GO) functional analysis and Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes (KEGG) pathway enrichment analysis of the intersection targets was performed online by Metascape. The modern medical symptoms of the intersection targets were predicted by the SoFDA platform and corresponded to the modern medical diseases related to *bi* syndrome, so as to construct a “targets-pathways-pharmacological effects-diseases” association network. **Results** A total of 244 chemical components were identified in the STZYD sample. 190 potential therapeutic targets of the 33 selected active components against *bi* syndrome were identified. PPI network analysis revealed that interleukin-6 (IL6), tumor necrosis factor (TNF), interleukin-1 β (IL1 β), signal transducer and activator of transcription 3 (STAT3), epidermal growth factor receptor (EGFR) might be the core targets. KEGG pathway enrichment analysis identified 70 pathways closely associated with *bi* syndrome, including phosphatidylinositol 3-kinase protein kinase B signaling pathway, nuclear factor- κ B signaling pathway, and interleukin-17 signaling pathway. The disease-syndrome association results indicate that STZYD may have therapeutic effects on osteoarticular diseases and autoimmune diseases related to *bi* syndrome. **Conclusion** STZYD can intervene in processes such as inflammatory response, immune regulation, and angiogenesis through the synergistic effect of multi-component, multi-target and multi-pathway, which reflects the intrinsic correlation between “syndrome of static blood blocking collaterals” and various modern diseases, and provides a modern biological basis for the theory of “treating different diseases with the same therapy”.

Key words: Shentong Zhuyu Decoction; *bi* syndrome; prescription-syndrome correlation; network pharmacology; treating different diseases with the same therapy; HPLC-Q-TOF-MS/MS

中医痹证作为一种全身性多发病自古以来就严重影响着人类身体健康,其病因复杂,由内外因交互作用所致,由外感染六淫邪气,尤其是风寒湿三气杂至,闭阻经络,气血运行受阻,不通则痛;由内因则多责之情志失调、跌扑损伤、正气不足或久病体虚,导致气机郁滞,血行不畅^[1]。清代王清任在《医林改错》^[2]中首次提出:“瘀血致痹说”,并由此创立身痛逐瘀汤这一广为临床应用的经典名方,认为痹证久治不愈的根本在于瘀血作祟,提出当痹证用以往的祛风、散寒、除湿、清热治法无效时,应用活血化瘀为主,佐以祛风除湿散寒通络的治疗新原则,后被广泛应用于临床治疗。

身痛逐瘀汤由秦艽、川芎、桃仁、红花、甘草、羌活、没药、当归、五灵脂、香附、牛膝、地龙 12 味药组成,具有活血行气,祛瘀通络,通痹止痛的功效,用于瘀血痹阻经络证,临床上具有显著治疗效果^[3]。现有研究主要是对身痛逐瘀汤治疗某种疾病的生物学基础及病理机制的探索,尚缺乏其治疗痹证这一中医整体概念的全面诠释^[4]。网络药理学是一门基于系统生物学和网络分析的多靶点药物研究学科,旨在整体解析药物作用机制和疾病网

络,其系统性与中医多途径、多靶点、整合调节机制高度契合^[5]。故本研究利用网络药理学从“证-方”关联角度,探索身痛逐瘀汤作用于痹证的复杂生物网络,并系统阐述其对于现代医学疾病“异病同治”的疗效机制,为经典名方身痛逐瘀汤临床应用奠定理论基础。

1 仪器与材料

1.1 仪器

ExionLC AC 高效液相色谱仪,日本岛津公司;SCIEX X500R QTOF 质谱仪,美国 Sciex 公司;Sartorius BCE 224I-1CCN 电子天平,德国赛多利斯分析天平;KQ-500DE 数控超声波清洗仪,昆山市超声仪器有限公司。

1.2 药品与试剂

对照品羟基红花黄色素 A (批号 110703-202015),马钱苷酸(批号 110736-202044),龙胆苦苷(批号 110715-202122), β -蜕皮甾酮(批号 111685-201908),苦杏仁苷(批号 111610-201908),紫花前胡苷(批号 110731-202021),阿魏酸(批号 110773-202316),异欧前胡素(批号 110827-202113)均购自中国药品检定研究院。乙腈(色谱纯),甲醇(色

谱纯), 购自天津市康科德科技有限公司; 甲酸(色谱纯), 购自美国 Thermo Fisher Scientific 公司; 纯净水, 购自广州屈臣氏饮用水有限公司。

身痛逐瘀汤基准样品(提取液自制), 红花(批号 YF-ZC0026-20240529-1, 产地: 云南)、桃仁(批号 YF-ZC0089-20240516-1, 产地: 甘肃)、川芎(批号 YF-ZC0071-20240529-3, 产地: 四川)、当归(批号 YF-ZC0039-20240516-2, 产地: 甘肃)、羌活(批号 YF-20240516-9, 产地: 甘肃)、秦艽(批号 YF-ZC0029-20240516-5, 产地: 甘肃)、没药(批号 YF-ZC0004-20240516-3, 产地: 肯尼亚)、醋五灵脂(批号: YF-20240516-6, 产地: 陕西)、香附(YF-ZC0049-20240516-4, 产地: 河南)、牛膝(批号 YF-ZC0087-20240506-4, 产地: 河南)、甘草(批号 YF-ZC0013-20240516-2, 产地: 内蒙古)、地龙(批号 YF-20240611-5, 产地: 广西) 购自陕西海天制药有限公司。经天津药物研究院有限公司张铁军研究员鉴定均为正品。

1.3 数据库及软件

PubChem 数据库 (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>); MassBank (<https://massbank.eu/MassBank/Search>); HMDB 数据库 (<https://hmdb.ca/>); Swiss Target prediction (<https://www.swisstargetprediction.ch>); PharmMapper 数据库 (<https://www.lilab-ecust.cn/pharmmapper/>); SoFDA 数据库 (<https://www.tcmip.cn/Syndrome/front/>); SymMap 数据库 (<https://www.symmap.org/>); Uniprot 数据库 (<http://www.uniprot.org/>); STRING 12.0 数据库 (<http://string-db.org/>); Metascape 数据库 (<https://metascape.org/gp/index.html#/main/step1>); Cytoscape 3.10.3 软件。

2 方法

2.1 对照品及供试品溶液的制备

精密称取羟基红花黄色素 A、马钱苷酸、龙胆苦苷、 β -蜕皮甾酮、苦杏仁苷、紫花前胡苷、阿魏酸、异欧前胡素对照品各 1 mg, 置于 10 mL 量瓶中, 加甲醇溶解至刻度, 即得对照品溶液。

按照国家公布的身痛逐瘀汤关键信息^[6]称取秦艽 3.73 g、川芎 7.46 g、桃仁 11.19 g、红花 11.19 g、甘草 7.46 g、羌活 3.73 g、没药 7.46 g、当归 11.19 g、五灵脂 7.46 g、香附 3.73 g、牛膝 11.19 g、地龙 7.46 g, 置于 2 L 电陶瓷煎药壶中, 加 6 倍量水煎煮 2 次, 每次 30 min, 趁热滤过, 煎液合并, 混匀。

精密量取煎液 5 mL, 至 10 mL 棕色量瓶中, 加甲醇稀释至刻度, 摇匀, 滤过, 取续滤液, 即得供试品溶液。

2.2 色谱-质谱条件

色谱柱为 ChromCore AR C18 色谱柱 (250 mm $\times$ 4.6 mm, 5 μ m); 流动相 0.1% 甲酸水 (A)-乙腈 (B), 梯度洗脱 0~5 min, 5%~7% B; 5~20 min, 7%~9% B; 20~32 min, 9%~12% B; 32~40 min, 12%~19% B; 40~55 min, 19%~23% B; 55~75 min, 23%~40% B; 75~95 min, 40%~50% B; 95~105 min, 50%~68% B; 105~120 min, 68%~90% B; 柱温 25 $^{\circ}$ C; 进样量 10 μ L; 体积流量 1.0 mL $\cdot$ min⁻¹。质谱条件: 使用 Sciex X500R QTOF 质谱仪, 正、负 2 种模式扫描测定, 采用电喷雾离子源; 雾化气: 413.68 kPa, 辅助气: 413.68 kPa, 气帘气: 206.84 kPa, 雾化温度: 600 $^{\circ}$ C, 正负离子分别进行全扫描 (ESI), 扫描质量范围 m/z 50~1 500 Da; 阳离子模式下, 毛细管电压 5 500 V, 阴离子模式下的毛细管电压 -4 500 V。

2.3 数据库建立及鉴定策略

通过检索身痛逐瘀汤及其组方中单味药的相关中、英文文献, 结合 PubChem、MassBank、HMDB 等数据库, 对身痛逐瘀汤中化学成分质谱信息进行汇总, 建立包含化合物名称、分子式、精确相对分子质量、主要碎片离子等质谱信息的身痛逐瘀汤原始液质数据库。

采用信息依赖采集 (IDA) 模式采集数据, 原始数据直接在 SCIEX OS 软件中进行分析。具体鉴定流程如下: 首先, 提取各候选成分的准分子离子峰并记录精确 m/z 值及保留时间; 其次, 调取 IDA 模式实时触发的对应二级质谱 (MS/MS) 图获取碎片离子信息, 与数据库及文献报道的标准碎片模式进行比对; 最后, 结合精确相对分子质量 (质量误差 $\leq 1.0 \times 10^{-5}$)、二级碎片匹配度及保留时间一致性进行综合鉴定, 对关键成分进一步通过与对照品比对保留时间和质谱信息进行确认。

2.4 目标化合物选取

化合物的选取基于以下原则: 1) 基于本研究对身痛逐瘀汤进行化合物表征后的主要成分; 2) 根据文献报道, 筛选有效成分及入血成分取并集^[7-18]; 3) 根据身痛逐瘀汤君臣佐使复方配伍规律, 兼顾各单味药材化合物结构类型及《中国药典》2025 年版质控指标成分进行补充。

2.5 身痛逐瘀汤药物候选基因的获取

利用 PubChem 获取目标化合物的 SDF 文件，输入到 Swiss Target Prediction 及 PharmMapper 中。Swiss Target Prediction 选择“Homo sapiens”，筛选“Probability>0”的靶点；PharmMapper 筛选“Norm Fit≥0.8”的靶点并利用 Uniprot 进行名称转换。将 2 个数据库获得靶点合并后剔除重复，得到身痛逐瘀汤关键作用靶点。

2.6 证候相关基因的获取

利用 SoFDA 和 SymMap 数据库筛选符合痹证的关键词，并检索相应靶点，整合并剔除重复后得到痹证相关基因集。SoFDA 平台提供检索词包括：气滞证、血瘀证、寒湿凝滞筋骨证；SymMap 数据库提供检索词包括寒湿、寒湿内阻、气滞、瘀血阻络、瘀滞、瘀滞肿痛、瘀血、瘀阻、肝肾不足、肝肾亏虚、血瘀、风寒挟湿、风寒湿。

2.7 交集靶点相关网络的构建

利用微生信平台将获得的证候基因以及身痛逐瘀汤候选靶点取交集并绘制 Venn 图；将交集靶点输入 STRING v12.0 平台，物种限定为“Homo sapiens”，交互得分置信度为 0.400，去除游离靶点，获得蛋白质-蛋白质相互作用（PPI）网络；将结果导入 Cytoscape 3.10.3 软件，运用 Network Analyzer 插件对网络进行拓扑分析，以度（degree）值、介数中心性、接近中心性值均大于中位数为筛选依据，从而确定核心靶点；借助 Cytoscape 3.10.3 构建“药

材-成分-靶点”网络。

2.8 生物信息学分析

将交集靶点导入 Metascape 数据库进行生物信息学基因本体（GO）及京都基因与基因组百科全书（KEGG）分析，结果以 *P* 值排列（*P*<0.05），分别取生物功能（BP）、细胞成分（CC）、分子功能（MF）以及 KEGG 信号通路排名靠前的条目分别绘制柱状图和气泡图。

2.9 现代医学症状、疾病预测

通过 SoFDA 预测共有网络靶点所参与的现代医学症状；根据《中国痹病大全》^[16]中记载的痹证现代医学疾病与靶点映射得到的症状分别对应并绘制桑基图。

2.10 构建“靶点-通路-药理作用-疾病”网络

将共有靶点生物信息学分析结果根据药理作用进行分类，构建“靶点-通路-药理作用-疾病”网络。

3 结果

3.1 身痛逐瘀汤基准物质化学成分鉴定

通过 HPLC-Q-TOF-MS/MS 技术对身痛逐瘀汤基准物质在正、负 2 种扫描模式下采集。初步鉴定出 244 个化学成分（表 1），包括 56 个黄酮及其苷类成分、37 个倍半萜及其内酯类、33 个含氮类、31 个有机酸类、21 个三萜皂苷类、17 个苯酞类、13 个环烯醚萜及其苷类、9 个香豆素类、4 个萜类、4 个酯类、4 个甾体类、4 个糖苷类、3 个酚类、8 个其他类成分。

表 1 身痛逐瘀汤 HPLC-Q-TOF-MS/MS 数据
Table 1 HPLC-Q-TOF-MS/MS data of Shentong Zhuyu Decoction

序号	<i>t</i> _R /min	化学式	离子模式	<i>m/z</i>		误差/ (×10 ⁻⁶)	二级碎片离子	成分	归属
				理论值	实测值				
1	2.62	C ₆ H ₁₄ O ₂ N ₂	[M+H] ⁺	147.112 8	147.112 3	-3.40	84.080 6、65.038 1、 56.049 6	<i>L</i> -赖氨酸	TR、QJ、CX、DL、 DG、HH、XF
2	2.66	C ₆ H ₉ N ₃ O ₂	[M-H] ⁻	154.062 2	154.061 5	-4.54	93.045 3、81.045 8、 80.037 3、66.034 2	组氨酸	ALL
3	2.77	C ₆ H ₁₄ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	175.119 0	175.118 5	-2.57	116.071 3、158.092 4、 70.064 6	精氨酸	ALL
4	2.81	C ₅ H ₉ NO ₄	[M+H] ⁺	148.060 4	148.060 4	-0.20	102.055 1、84.044 7、 56.049 7	<i>L</i> -谷氨酸	TR、QJ、DL、XF
5	2.86	C ₅ H ₇ NO ₃	[M+H] ⁺	130.049 9	130.049 6	-2.08	56.049 7、84.045 7	焦谷氨酸	ALL
6	2.89	C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	[M-H] ⁻	341.108 9	341.107 6	-3.90	179.054 9、101.023 3、 89.023 8、71.013 5	蔗糖	ALL
7	2.94	C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	[M-H] ⁻	341.108 9	341.107 4	-4.49	161.043 0、73.099 4、 59.013 5	α-乳糖	ALL

表 1 (续)

序号	<i>t_R</i> /min	化学式	离子模式	<i>m/z</i>		误差/ ($\times 10^{-6}$)	二级碎片离子	成分	归属
				理论值	实测值				
8	2.97	C ₅ H ₁₁ NO ₂	[M+H] ⁺	118.086 3	118.086 1	-1.35	58.064 7、57.057 74	<i>L</i> -缬氨酸	ALL
9	3.00	C ₅ H ₉ NO ₂	[M+H] ⁺	116.070 6	116.070 5	-0.95	74.024 6、70.064 6、 68.049 67	脯氨酸	TR、QJ、CX、GC、 DG、HH、XF
10	3.21	C ₁₀ H ₁₄ N ₅ O ₇ P	[M+H] ⁺	348.070 4	348.069 4	-2.76	136.061 7、119.035 2	腺苷酸	QJ、CX、WLZ、 NX、DL、QH、 DG、XF
11	3.28	C ₁₉ H ₃₂ O ₁₅	[M-H] ⁻	499.166 8	499.164 2	-5.29	191.055 6、173.044 9、 87.008 7	3-[[6- <i>O</i> -(<i>D</i> -吡喃半乳糖基)-β- <i>D</i> -吡喃半乳糖基]-氧基]-1,2-丙二基二乙酸酯	HH
12	3.30	C ₉ H ₁₃ N ₃ O ₅	[M+H] ⁺	244.092 8	244.092 3	-2.05	112.050 3	胞苷	QJ、CX、WLZ、 DG、HH
13	3.35	C ₄ H ₅ N ₃ O	[M+H] ⁺	112.050 5	112.050 5	-0.36	95.024 2、69.044 5、 68.012 8、52.018 2	胞嘧啶	QJ、CX、WLZ、 QH、GC
14	4.29	C ₅ H ₅ N ₅	[M+H] ⁺	136.061 8	136.061 0	-5.66	92.024 0、77.013 8、 67.028 9	腺嘌呤	ALL
15	4.36	C ₆ H ₅ NO ₂	[M+H] ⁺	124.039 3	124.039 3	0	96.044 5、80.049 5、 53.038 7	烟酸	HH
16	4.39	C ₆ H ₈ O ₇	[M-H] ⁻	191.019 7	191.019 0	-3.82	57.034 0、67.018 3、 87.007 7	柠檬酸	ALL
17	4.78	C ₉ H ₁₂ N ₂ O ₆	[M+H] ⁺	245.076 8	245.076 6	-0.86	96.008 1、70.029 1、 57.033 4	尿苷	DL
18	4.85	C ₄ H ₄ O ₂ N ₂	[M+H] ⁺	113.034 6	113.034 5	-0.44	70.029 7、68.012 4	尿嘧啶	DL
19	5.32	C ₁₀ H ₁₃ N ₅ O ₄	[M+H] ⁺	268.104 0	268.103 1	-3.47	136.061 1、119.035 6	腺苷	HH、TR、DL
20	5.37	C ₄ H ₆ O ₄	[M-H] ⁻	117.019 3	117.018 9	-3.67	99.924 7、73.029 3、 55.018 8	琥珀酸	WLZ、NX、DL、 DG、HH、TR
21	5.65	C ₆ H ₁₃ NO ₂	[M+H] ⁺	132.101 9	132.101 8	-0.83	86.096 6、69.070 0	异亮氨酸	ALL
22	5.68	C ₆ H ₁₃ NO ₂	[M+H] ⁺	132.101 9	132.101 7	-1.59	86.096 8、69.070 16	亮氨酸	ALL
23	5.90	C ₉ H ₁₁ NO ₃	[M+H] ⁺	182.081 2	182.081 0	-0.93	123.044 4、91.054 0、 65.039 0	<i>L</i> -酪氨酸	ALL
24	5.93	C ₁₀ H ₁₃ N ₅ O ₅	[M+H] ⁺	284.099 0	284.098 5	-1.58	152.056 1、135.030 0	鸟苷	HH、TR、DL
25	6.01	C ₁₀ H ₁₂ N ₄ O ₅	[M+H] ⁺	269.088 6	269.088 0	-2.23	137.045 5、119.035 6、 110.035 5	肌苷 [#]	DL
26	6.08	C ₅ H ₄ N ₄ O	[M+H] ⁺	137.045 8	137.045 4	-2.85	119.036 1、110.035 2、 94.039 0	次黄嘌呤 [#]	DL
27	6.15	C ₁₀ H ₁₃ N ₅ O ₃	[M+H] ⁺	252.109 1	252.108 9	-0.87	136.062 0、119.035 7	2'-脱氧腺苷	QH、DL
28	7.53	C ₈ H ₉ N ₅ O ₃	[M+H] ⁺	224.077 8	224.077 7	-0.54	178.074 3、161.047 0、 135.031 4	3-腺嘌呤-9-基-2-羟基丙酸	DL
29	7.75	C ₇ H ₆ O ₅	[M-H] ⁻	169.014 3	169.013 7	-3.25	125.024 0、81.034 1、 97.029 5	没食子酸 [#]	WLZ、MY
30	9.62	C ₉ H ₁₁ NO ₂	[M+H] ⁺	166.086 3	166.086 4	0.84	120.080 4、103.053 7、 77.038 6	<i>L</i> -苯丙氨酸	ALL

表 1 (续)

序号	<i>t_R</i> /min	化学式	离子模式	<i>m/z</i>		误差/ (×10 ⁻⁶)	二级碎片离子	成分	归属
				理论值	实测值				
31	9.95	C ₂₀ H ₂₉ NO ₁₂	[M+Na] ⁺	498.158 2	498.156 2	-4.01	347.094 2、336.105 6、 134.060 4	<i>O</i> -β- <i>D</i> -龙胆二糖基- <i>D</i> (-)-扁桃酰胺 [#]	TR
32	10.99	C ₁₃ H ₁₆ O ₉	[M-H] ⁻	315.072 2	315.071 3	-2.73	153.018 2、109.028 8	龙胆酸-5- <i>O</i> -β-葡萄糖苷	QJ
33	11.73	C ₁₇ H ₂₄ O ₁₁	[M-H] ⁻	403.124 6	403.123 3	-3.18	195.066 0	栀子苷	QJ
34	13.53	C ₁₅ H ₁₄ O ₇	[M-H] ⁻	305.066 7	305.066 1	-1.90	167.035 1、137.023 9、 125.024 0	没食子儿茶素	WLZ、XF
35	13.72	C ₁₆ H ₁₈ O ₉	[M-H] ⁻	353.087 8	353.086 8	-2.86	191.055 9、179.034 0、 135.043 0	新绿原酸	QH、DG、CX、HH
36	13.90	C ₇ H ₆ O ₄	[M-H] ⁻	153.019 3	153.018 8	-3.46	108.020 8、109.028 6、 91.018 5、81.034 0	原儿茶酸	WLZ
37	13.97	C ₆ H ₆ O ₂	[M-H] ⁻	109.029 5	109.029 3	-1.83	109.029 1、108.021 3、 91.017 7	邻苯二酚	WLZ
38	16.18	C ₂₀ H ₂₈ O ₁₃	[M-H] ⁻	475.145 7	475.144 1	-3.39	269.102 6	苦杏仁苷酸	TR
39	16.30	C ₁₇ H ₂₆ O ₁₁	[M-H] ⁻	405.140 2	405.141 5	3.13	197.045 2、153.055 3、 123.008 2	山栀苷甲酯	QJ
40	16.37	C ₁₆ H ₁₈ O ₉	[M-H] ⁻	353.087 8	353.087 0	-2.29	191.055 6、179.034 5、 135.044 3	绿原酸	QH、DG、CX、HH
41	16.43	C ₁₆ H ₂₄ O ₁₀	[M-H] ⁻	375.129 7	375.128 2	-3.92	213.077 5、169.086 7、 151.076 3、125.058 5	玉叶金花苷酸	QJ
42	20.56	C ₇ H ₆ O ₃	[M-H] ⁻	137.024 4	137.024 0	-3.07	137.023 9、109.024 6、 93.034 3、65.002 1	对羟基苯甲酸	TR、CX、WLZ、 NX、QH、DL、 MY、DG、HH、XF
43	20.72	C ₁₆ H ₂₄ O ₁₀	[M-H] ⁻	375.129 7	375.128 1	-4.19	213.075 9、195.065 4、 169.086 1	马钱苷酸 [#]	QJ
44	20.76	C ₁₇ H ₂₆ O ₁₂	[M-H] ⁻	421.135 2	421.134 4	-1.78	375.129 4、213.075 6、 169.086 3、125.060 3	野芝麻新苷	QJ
45	23.44	C ₇ H ₆ O ₃	[M+H] ⁺	139.039 0	139.038 6	-2.66	65.039 0、53.038 7	原儿茶醛	WLZ、HH、QH
46	24.44	C ₃₀ H ₂₆ O ₁₂	[M-H] ⁻	577.135 2	577.133 4	-3.03	407.077 6、289.072 6、 245.080 9、125.023 4	原花青素 B2	TR、WLZ、XF
47	25.89	C ₈ H ₆ O ₄	[M-H] ⁻	165.019 9	165.019 0	-5.64	121.025 6、77.039 1	胡椒酸	QJ、CX、QH、DG
48	26.56	C ₈ H ₈ O ₄	[M-H] ⁻	167.035 0	167.034 4	-3.47	123.044 4、95.048 6、 79.054 4	香草酸	QJ、CX、QH、DG
49	26.78	C ₈ H ₈ O ₄	[M+H] ⁺	169.049 5	169.049 7	0.95	53.038 9	异香草酸	CX、DG、QJ、QH
50	27.19	C ₂₀ H ₂₇ NO ₁₁	[M-H] ⁻	456.151 1	456.149 5	-3.57	263.073 9、119.034 0、 89.024 0、71.013 4	<i>L</i> -苦杏仁苷 [#]	TR
51	27.27	C ₂₀ H ₂₇ NO ₁₁	[M-H] ⁻	456.151 1	456.149 3	-4.01	263.074 6、179.052 5、 119.034 1、89.024 3、 71.013 59	<i>D</i> -苦杏仁苷	TR
52	27.96	C ₁₆ H ₂₂ O ₁₀	[M+H] ⁺	375.128 6	375.127 3	-3.39	195.065 1、177.054 8、 143.033 8、85.028 7	獐芽菜苦苷 [#]	QJ
53	28.32	C ₁₅ H ₁₄ O ₆	[M-H] ⁻	289.071 8	289.070 6	-4.01	203.070 9	儿茶素	WLZ

表 1 (续)

序号	<i>t_R</i> /min	化学式	离子模式	<i>m/z</i>		误差/ (×10 ⁻⁶)	二级碎片离子	成分	归属
				理论值	实测值				
54	29.57	C ₁₇ H ₂₀ O ₉	[M-H] ⁻	367.103 5	367.102 7	-2.07	193.049 8、191.053 5、 173.044 0、155.033 6	5- <i>O</i> -阿魏酰奎宁 酸	TR、CX、WLZ、 QH、HH、DG
55	29.61	C ₃₃ H ₃₈ O ₂₃	[M+H] ⁺	803.187 7	803.184 0	-4.56	641.135 3、479.081 8、 303.049 6	2-(3,4-dihy droxy phenyl)- 3-[[2- <i>O</i> -(β- <i>D</i> - erythro- hexopyranosyl)-β- <i>D</i> -glycero- hexopyranosyl]oxy}-5- hydroxy-4- oxo-4 <i>H</i> - chromen-7-yl- β- <i>D</i> -threo- hexopyranosid uronicacid	HH
56	29.89	C ₃₃ H ₄₀ O ₂₂	[M+H] ⁺	789.208 4	789.205 1	-4.18	627.157 1、465.102 9、 303.050 3	6-羟基山柰酚- 3,6,7-三- <i>O</i> -β- <i>D</i> -葡萄糖苷	HH
57	30.06	C ₂₇ H ₃₂ O ₁₆	[M+H] ⁺	613.176 3	613.173 7	-4.26	451.124 6、433.113 4、 289.071 2、169.014 2、 121.065 6、147.044 5	羟基红花黄色 素 A ^{##}	HH
58	30.60	C ₂₂ H ₃₂ O ₁₄	[M+H] ⁺	521.186 5	521.185 3	-2.26	197.079 7、127.038 8	紫药苦苷	QJ
59	30.63	C ₁₆ H ₁₈ O ₉	[M-H] ⁻	353.087 8	353.085 7	-5.98	191.054 8、179.033 8、 173.044 6、135.044 4	隐绿原酸	QH、DG、CX、 HH
60	33.82	C ₁₆ H ₂₀ O ₉	[M+H] ⁺	357.118 0	357.117 0	-2.83	177.054 6、149.059 4、 121.064 6、85.028 7	龙胆苦苷 ^{##}	QJ
61	34.13	C ₂₃ H ₄₀ N ₄ O ₃	[M+H] ⁺	421.317 3	421.315 0	-5.51	178.086 3、156.138 0	<i>N</i> -{8-[(3- aminopropyl) amino]octyl}- <i>N</i> - α-propionyl- <i>L</i> - tyrosinamide	DL
62	35.78	C ₁₆ H ₂₂ O ₉	[M+H] ⁺	359.133 7	359.132 0	-4.62	197.080 3、179.071 4、 151.039 8、127.039 0	獐芽菜苷/当药 苷	QJ
63	35.89	C ₁₇ H ₂₄ O ₁₁	[M-H] ⁻	403.124 6	403.121 8	-6.90	125.023 8、59.013 36	龙胆苦苷 A	QJ
64	35.98	C ₂₄ H ₂₀ O ₆	[M-H] ⁻	403.118 7	403.121 8	7.67	151.074 4	甘油三苯甲酸酯	QJ
65	36.25	C ₂₁ H ₂₂ O ₉	[M-H] ⁻	417.119 1	417.117 4	-4.10	255.064 3、135.007 3、 119.050 3	甘草苷 ^{##}	GC
66	38.62	C ₁₅ H ₁₄ O ₆	[M+H] ⁺	291.086 3	291.085 8	-1.75	139.039 2、123.046 6	表儿茶素	TR
67	39.73	C ₂₂ H ₃₀ O ₁₄	[M-H] ⁻	517.156 3	517.154 7	-3.06	193.050 1、175.036 7	6'- <i>O</i> -β- <i>D</i> -葡萄糖 基龙胆苦苷	QJ
68	40.01	C ₃₃ H ₄₀ O ₂₀	[M-H] ⁻	755.204 0	755.201 3	-3.60	593.150 8	gentistraminoside B	QJ
69	40.60	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₅	[M+H] ⁺	595.165 8	595.162 6	-5.29	541.134 6、457.113 0、 439.102 7、355.081 9	皂草苷	GC

表 1 (续)

序号	<i>t_R</i> /min	化学式	离子模式	<i>m/z</i>		误差/ (×10 ⁻⁶)	二级碎片离子	成分	归属
				理论值	实测值				
70	41.57	C ₁₀ H ₁₀ O ₂	[M+H] ⁺	163.075 3	163.075 3	-0.37	53.038 9、103.054 2	黄樟素	DG、CX、QH
71	41.71	C ₁₇ H ₂₀ O ₉	[M-H] ⁻	367.103 5	367.102 5	-2.62	193.049 7、173.045 0、 134.037 1	5- <i>O</i> -芥酸	TR、CX、WLZ、 QH、DG、HH
72	42.10	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₅	[M+H] ⁺	595.165 8	595.163 0	-4.62	433.115 2、415.101 8、 397.092 2、301.071 5	牡荆素 葡萄糖 苷	HH
73	42.19	C ₂₅ H ₂₄ O ₁₂	[M+H] ⁺	517.134 1	517.131 5	-4.93	163.039 3、145.029 2、 135.043 7	3,4-二咖啡酰奎 宁酸异绿原酸 B	QH、CX
74	42.44	C ₃₃ H ₄₀ O ₂₁	[M-H] ⁻	771.198 9	771.194 6	-5.61	609.143 3、463.086 8、 301.033 7	6-羟基山柰酚-3- <i>O</i> - β-芸香糖-6- <i>O</i> -β- D-葡萄糖苷	HH
75	42.64	C ₁₇ H ₂₀ O ₉	[M-H] ⁻	367.103 5	367.101 2	-6.16	191.054 7、173.044 1、 134.036 1	3- <i>O</i> -芥酸	TR、CX、WLZ、 QH、DG、HH
76	42.89	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₇	[M-H] ⁻	625.141 0	625.137 4	-5.79	463.085 1、301.033 5、 271.023 2	6-羟基山柰酚- 3, 6-二- <i>O</i> -葡 萄糖苷	WLZ、HH
77	43.51	C ₂₆ H ₂₈ O ₁₄	[M-H] ⁻	563.140 6	563.137 6	-5.38	443.096 8、383.075 5、 353.065 3	夏佛塔苷	GC
78	43.68	C ₉ H ₁₂ O ₃	[M+H] ⁺	169.085 9	169.085 5	-2.48	94.041 7、79.053 1、 53.038 91	3-乙氧基-4-甲 氧基苯酚	DL
79	44.08	C ₁₆ H ₂₄ O ₉	[M-H] ⁻	359.134 8	359.133 4	-3.79	197.081 6、153.090 7、 135.080 4	7-去氧马钱子酸	QJ
80	44.21	C ₉ H ₈ O ₃	[M+H] ⁺	165.054 6	165.054 4	-1.33	119.049 9、91.054 5	对香豆酸	WLZ
81	44.28	C ₃₀ H ₃₀ O ₁₄	[M-H] ⁻	613.156 3	613.153 3	-4.86	595.142 3、551.156 2、 425.107 3、361.106 8	1,5-anhydro-1- [3-[2-carboxy- 1-(4- hydroxyphenyl) ethyl]-1,2,4- trihydroxy-5- [(2 <i>E</i>)-3-(4- hydroxyphenyl)- 2-propenoyl]- 6-oxo-2,4- cyclohexadien-1- yl]hexitol	HH
82	44.42	C ₂₇ H ₃₂ O ₁₄	[M-H] ⁻	579.171 9	579.169 2	-4.71	255.064 6、135.008 1、 119.048 7	甘草素-7, 4'-二 葡萄糖苷	GC
83	44.48	C ₁₅ H ₂₂ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	279.170 3	279.169 5	-2.94	149.023 8、121.028 82、 120.081 2	亮氨酰苯丙氨酸	WLZ、NX、DL、 GC、HH
84	44.69	C ₂₆ H ₂₈ O ₁₄	[M-H] ⁻	563.140 6	563.137 5	-5.56	443.099 5、383.074 8、 353.067 5	异夏佛塔苷	HH、XF、GC
85	44.95	C ₃₀ H ₃₀ O ₁₄	[M-H] ⁻	613.156 3	613.155 0	-2.09	595.142 1、551.152 3、 425.107 5、361.105 5	红花黄 C	HH
86	45.38	C ₉ H ₆ O ₃	[M-H] ⁻	161.024 4	161.023 7	-4.47	117.033 3、89.039 4、 77.038 2	伞形花内酯 [#]	QH

表 1 (续)

序号	t_R/min	化学式	离子模式	m/z		误差/ ($\times 10^{-6}$)	二级碎片离子	成分	归属
				理论值	实测值				
87	45.83	$\text{C}_{17}\text{H}_{16}\text{O}_9$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	365.086 7	365.086 5	-0.58	203.034 1、147.045 0	佛手酚葡萄糖苷	QH
88	46.23	$\text{C}_{21}\text{H}_{20}\text{O}_{12}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	463.088 2	463.085 3	-6.26	463.085 3、301.033 6	金丝桃苷	HH、WLZ
89	46.90	$\text{C}_{27}\text{H}_{30}\text{O}_{16}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	609.146 1	609.142 5	-5.93	429.080 5、285.039 1、 284.031 1、255.029 1	山柰酚-3- <i>O</i> -槐糖苷	HH
90	46.98	$\text{C}_{27}\text{H}_{44}\text{O}_7$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	481.316 0	481.313 3	-5.57	445.292 9、301.180 1、 69.070 5	β -蜕皮甾酮 ^{##}	NX
91	47.09	$\text{C}_{27}\text{H}_{30}\text{O}_{14}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	577.156 3	577.154 3	-3.43	559.145 0、457.111 6、 383.075 4	异佛莱心苷	HH、GC
92	47.28	$\text{C}_{21}\text{H}_{22}\text{O}_9$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	417.119 1	417.117 3	-4.34	119.049 6、135.007 7、 255.064 8	异甘草苷	GC
93	47.51	$\text{C}_{27}\text{H}_{32}\text{O}_{14}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	579.171 9	579.169 5	-4.20	255.064 9、135.008 3、 119.049 6	柚皮苷	GC
94	47.77	$\text{C}_{10}\text{H}_{10}\text{O}_4$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	193.050 6	193.049 4	-6.37	133.028 5、137.022 5、 121.029 2	阿魏酸 ^{##}	QH、CX、DG、 NX
95	48.08	$\text{C}_{15}\text{H}_{12}\text{O}_5$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	273.075 8	273.075 5	-0.92	153.017 6、137.023 0、 119.049 4	柚皮素	GC
96	48.31	$\text{C}_{15}\text{H}_{12}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	257.080 8	257.079 7	-4.43	239.070 3、211.075 4、 137.022 7	甘草素 [#]	GC
97	48.37	$\text{C}_{26}\text{H}_{30}\text{O}_{13}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	549.161 4	549.158 1	-5.94	255.064 0、135.007 8、 119.049 5	异甘草素-4'- <i>O</i> - 芹糖(1 $\rightarrow$ 2)葡萄糖苷	GC
98	48.41	$\text{C}_{27}\text{H}_{30}\text{O}_{16}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	609.145 6	609.144 1	-2.46	301.033 8、300.026 0、 151.003 1	芦丁	HH
99	48.60	$\text{C}_{21}\text{H}_{22}\text{O}_9$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	417.119 1	417.115 7	-8.18	255.063 4、135.007 1、 119.048 8	新甘草苷	GC
100	48.73	$\text{C}_7\text{H}_6\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	123.044 1	123.043 9	-1.30	79.054 4、53.039 1、 51.023 3	苯甲酸 [#]	WLZ
101	48.82	$\text{C}_{21}\text{H}_{20}\text{O}_{12}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	463.088 2	463.085 5	-5.83	316.019 8、271.022 8、 151.003 1	异槲皮素	HH、WLZ
102	50.38	$\text{C}_{21}\text{H}_{20}\text{O}_{12}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	463.088 2	463.086 5	-3.67	301.033 9、283.020 2、 271.023 9、243.027 7	6-羟基山柰酚-3- <i>O</i> - β -D-葡萄糖苷	WLZ、HH
103	50.77	$\text{C}_{20}\text{H}_{24}\text{O}_9$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	409.149 3	409.147 1	-5.40	187.038 4、229.085 1、 247.095 4	紫花前胡苷 ^{##}	QH
104	52.35	$\text{C}_{42}\text{H}_{42}\text{O}_{21}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	883.229 1	883.225 2	-4.45	721.180 0、415.103 4、 313.070 6、289.070 9	flavonederivative	HH
105	52.42	$\text{C}_{48}\text{H}_{52}\text{O}_{26}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	1 045.282 0	1 045.275 9	-5.80	883.227 9、721.176 2、 313.070 1	脱水红花黄色素 B	HH
106	52.47	$\text{C}_{21}\text{H}_{22}\text{O}_9$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	417.119 1	417.116 3	-6.74	255.070 0、135.008 4、 119.047 5	新异甘草苷	GC
107	52.52	$\text{C}_{12}\text{H}_{16}\text{O}_5$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	239.092 5	239.091 5	-4.18	154.027 6	洋川芎内酯 S	CX、DG
108	53.08	$\text{C}_{21}\text{H}_{20}\text{O}_{11}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	449.107 8	449.107 0	-1.87	287.053 2、247.181 8、 176.107 8	木犀草苷	HH
109	53.11	$\text{C}_{15}\text{H}_{10}\text{O}_6$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	287.055 0	287.054 2	-2.82	213.056 5、153.018 0、 1 121.029 1	山柰酚 [#]	HH
110	53.31	$\text{C}_{27}\text{H}_{30}\text{O}_{15}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	593.151 2	593.147 7	-5.88	285.038 2、255.028 3	山柰素或其同分异构体	HH

表 1 (续)

序号	<i>t_R</i> /min	化学式	离子模式	<i>m/z</i>		误差/ (×10 ⁻⁶)	二级碎片离子	成分	归属
				理论值	实测值				
111	53.43	C ₂₈ H ₃₂ O ₁₆	[M+H] ⁺	625.176 3	625.173 8	-4.01	317.065 23、147.064 5、 85.029 1	异鼠李素-3- <i>O</i> - 新橙皮苷	QH、HH
112	53.70	C ₂₈ H ₃₂ O ₁₆	[M-H] ⁻	623.161 8	623.157 6	-6.68	315.048 4、300.025 8、 272.030 6	水仙苷异构体	HH
113	54.86	C ₁₂ H ₁₄ O ₄	[M-H] ⁻	221.081 9	221.080 8	-5.11	203.070 2、177.053 0	洋川芎内酯 D	CX、DG
114	55.03	C ₄₀ H ₇₀ O ₈	[M+H] ⁺	679.514 4	679.507 8	-9.64	661.499 1、548.417 9、 435.333 9	Klysimplexin I	QH
115	55.27	C ₉ H ₁₆ O ₄	[M-H] ⁻	187.097 6	187.096 8	-4.17	97.064 8、123.081 1、 125.096 0	壬二酸	CX、WLZ、 QH、DL、MY、 GC、DG、HH
116	55.82	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	[M+H] ⁺	449.107 8	449.106 5	-2.98	287.055 2、85.028 7	槲皮苷	WLZ、HH
117	55.85	C ₁₅ H ₁₀ O ₇	[M+H] ⁺	303.049 9	303.048 9	-3.40	229.050 6、201.055 1、 153.019 2	槲皮素 [#]	HH
118	55.90	C ₁₅ H ₁₀ O ₇	[M+H] ⁺	303.049 9	303.048 9	-3.40	229.050 1、165.020 2	6-羟基山柰酚	HH
119	55.96	C ₁₂ H ₁₆ O ₄	[M+H] ⁺	225.112 1	225.111 0	-5.06	207.102 9、179.107 0、 161.095 1	洋川芎内酯 I [#]	CX、DG
120	55.98	C ₂₅ H ₂₄ O ₁₂	[M-H] ⁻	515.119 5	515.116 2	-6.41	191.054 6、179.034 6、 173.044 1、135.044 2	异绿原酸 A	QH、DG、CX、 HH
121	56.29	C ₂₅ H ₃₄ O ₁₄	[M-H] ⁻	603.193 1	603.190 3	-4.63	323.098 7、263.079 1、 233.080 4、221.066 2、 189.091 5、125.023 5、 101.023 9	大叶草苷 D	QJ
122	56.55	C ₁₆ H ₁₂ O ₆	[M-H] ⁻	299.056 1	299.054 6	-5.05	284.027 6、240.042 2	山柰素	QJ
123	56.96	C ₁₅ H ₂₀ O ₄	[M+H] ⁺	265.143 4	265.143 1	-1.28	161.095 2、133.101 1、 131.085 3、105.071 0	mommiphorane E1	MY
124	58.11	C ₂₃ H ₂₄ O ₁₀	[M-H] ⁻	459.129 7	459.126 7	-6.47	255.064 7、135.007 9、 119.049 6	6"- <i>O</i> -乙酰基甘 草苷	GC
125	58.45	C ₂₁ H ₁₈ O ₁₁	[M+H] ⁺	447.092 2	447.091 2	-2.21	271.058 4	芹菜素-7-葡萄 糖醛酸	WLZ、HH
126	62.00	C ₂₂ H ₂₂ O ₉	[M+H] ⁺	431.133 7	431.132 5	-2.69	269.079 7、254.057 2、 213.091 1	芒柄花苷	GC
127	62.29	C ₂₆ H ₃₀ O ₁₃	[M-H] ⁻	549.161 4	549.157 5	-7.03	255.064 4、135.007 7、 119.049 4	芹糖甘草苷	GC
128	62.58	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₀	[M-H] ⁻	431.098 4	431.095 8	-5.96	284.031 2、255.028 7、 229.049 3	异牡荆素	WLZ、HH
129	62.64	C ₂₁ H ₃₆ O ₁₀	[M+FA-H] ⁻	493.229 1	493.227 0	-4.16	315.180 0、161.044 4	苍术苷 A	QJ
130	63.02	C ₃₀ H ₃₀ O ₁₄	[M-H] ⁻	613.156 3	613.151 9	-7.14	595.141 5、551.152 1、 425.106 2、361.105 9	1,5-anhydro-1-{3- [2-carboxy-1-(4- hydroxyphenyl) ethyl]-1,2,4- trihydroxy-5- [(2 <i>E</i>)-3-(4- hydroxyphenyl)- 2-propenoyl]-6- oxo-2,4-cy- clohexadien-1- yl}hexitol	HH

表 1 (续)

序号	t_R/min	化学式	离子模式	m/z		误差/ ($\times 10^{-6}$)	二级碎片离子	成分	归属
				理论值	实测值				
131	64.32	$\text{C}_{14}\text{H}_{14}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	247.096 5	247.095 1	-5.63	229.086 2、175.039 3、 159.043 7	异紫花前胡内酯	QH
132	64.50	$\text{C}_{14}\text{H}_{14}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	247.096 5	247.095 1	-5.63	159.043 7、145.068 3、 131.050 1	二氢欧山芹素	QH
133	65.60	$\text{C}_{36}\text{H}_{38}\text{O}_{16}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	725.208 7	725.204 9	-5.25	549.156 8、531.146 3、 255.064 6、193.051 2	甘草苷 C2	GC
134	65.75	$\text{C}_{35}\text{H}_{36}\text{O}_{15}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	695.198 1	695.194 4	-5.38	549.159 6、531.148 3、 255.064 7	甘草苷 B	GC
135	65.78	$\text{C}_{18}\text{H}_{19}\text{NO}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	314.138 7	314.137 3	-4.39	177.054 3、145.028 4、 121.064 8	<i>N</i> -阿魏酰酪胺	NX
136	65.84	$\text{C}_{15}\text{H}_{20}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	265.143 4	265.142 2	-4.68	151.074 0、133.101 2、 121.102 1、83.049 6	curcolonol	MY
137	66.31	$\text{C}_{15}\text{H}_{20}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	265.143 4	265.142 6	-3.17	137.060 3、69.033 9	myrrhanoperoxide	MY
138	66.66	$\text{C}_{16}\text{H}_{22}\text{O}_6$	$[\text{M}+\text{NH}_4]^+$	328.175 5	328.174 4	-3.23	85.028 8	红花炔苷 [#]	HH
139	66.81	$\text{C}_{19}\text{H}_{21}\text{NO}_5$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	344.149 3	344.148 2	-3.05	177.054 7、145.028 4	<i>N</i> -阿魏酰-3-甲氧基酪胺	NX
140	67.66	$\text{C}_{15}\text{H}_{12}\text{O}_4$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	255.066 3	255.064 5	-6.98	135.007 7、119.048 8、 91.018 1	异甘草素 [#]	GC
141	68.92	$\text{C}_{15}\text{H}_{24}\text{O}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	221.190 0	221.189 2	-3.57	147.116 9、119.085 6	环氧石竹烯	XF、CX、QH、MY
142	69.77	$\text{C}_{42}\text{H}_{64}\text{O}_{16}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	823.412 2	823.408 0	-5.05	351.055 4	甘草皂苷 J2	GC
143	70.23	$\text{C}_{34}\text{H}_{37}\text{N}_3\text{O}_6$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	584.275 5	584.272 2	-5.67	438.238 2、318.180 1	N^1,N^5,N^{10} -(<i>E</i>)-tri- p-coumaroyl- spermidine	HH
144	70.87	$\text{C}_{12}\text{H}_{12}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	189.091 0	189.090 0	-5.34	128.062 2、115.053 7、 91.054 6、55.017 8	<i>E</i> -丁烯基苯酚	CX、DG
145	71.04	$\text{C}_{15}\text{H}_{18}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	263.127 8	263.126 5	-4.90	217.122 3、107.085 4	myrrhanolides B	MY
146	71.45	$\text{C}_{15}\text{H}_{20}\text{O}_4$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	263.128 9	263.127 5	-5.24	219.137 6、217.124 1、 201.126 4	脱落酸	MY
147	71.49	$\text{C}_{48}\text{H}_{74}\text{O}_{19}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	953.475 2	953.472 5	-2.78	917.377 6、351.055 2	牛膝皂苷 E 二甲酯	NX
148	71.51	$\text{C}_{44}\text{H}_{64}\text{O}_{19}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	895.396 9	895.392 7	-4.69	351.055 4、193.034 3	22 β - acetoxyllicorice saponin G2	GC
149	71.59	$\text{C}_{48}\text{H}_{72}\text{O}_{21}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	983.449 3	983.445 2	-4.20	821.393 6、469.333 4、 351.055 6	甘草皂苷 A3	GC
150	72.54	$\text{C}_{42}\text{H}_{62}\text{O}_{16}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	821.396 5	821.392 6	-4.76	351.055 7	甘草皂苷 H2	GC
151	73.21	$\text{C}_{16}\text{H}_{20}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	277.143 4	277.141 7	-6.28	173.096 7、121.065 1	myrrhterpenoid O [#]	MY
152	73.25	$\text{C}_{18}\text{H}_{29}\text{NO}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	308.222 0	308.222 2	0.58	308.222 3、290.212 1、 136.076 8、122.059 8	二氢辣椒碱	WLZ 、 NX 、 QH、DL、DG、 HH
153	73.53	$\text{C}_{18}\text{H}_{34}\text{O}_5$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	329.233 4	329.231 4	-5.92	311.221 9、293.211 0、 201.112 3、171.101 7	9,10,13-三羟基- 11-十八碳烯酸	HH
154	74.11	$\text{C}_{11}\text{H}_{20}\text{O}_4$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	215.128 9	215.127 9	-4.56	197.117 0、153.125 9	十一烷二酸	TR、QJ、NX、 QH、DL、DG、 HH、XF

表 1 (续)

序号	<i>t_R</i> /min	化学式	离子模式	<i>m/z</i>		误差/ (×10 ⁻⁶)	二级碎片离子	成分	归属
				理论值	实测值				
155	74.38	C ₁₃ H ₁₄ O ₂	[M+H] ⁺	203.106 7	203.105 9	-3.74	105.070 0、91.055 3	9-nor-9, 10-seco-MY isolindestrenolide	MY
156	74.39	C ₁₅ H ₁₆ O ₃	[M+H] ⁺	245.117 2	245.115 8	-5.79	217.124 5、199.112 8	乌药内酯	MY
157	74.60	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	[M+H] ⁺	279.159 1	279.158 3	-2.83	123.044 5、121.028 7	myrrhterpenoid C	MY
158	75.96	C ₂₀ H ₂₀ O ₆	[M-H] ⁻	355.118 7	355.117 5	-3.41	296.103 9、281.080 7	阿魏酸松柏酯	CX、QH
159	76.12	C ₅₃ H ₈₂ O ₂₅	[M-H] ⁻	1 117.507 2	1 117.503 1	-3.70	997.498 7、955.487 1、 793.438 0	牛膝皂苷 D	NX
160	76.20	C ₁₅ H ₂₂ O	[M+H] ⁺	219.174 3	219.173 9	-2.01	145.101 2、119.086 5	香附烯酮 [#]	XF
161	76.23	C ₄₈ H ₇₆ O ₁₉	[M-H] ⁻	955.490 8	955.486 1	-4.92	793.434 1、731.439 6、 569.383 0	人参皂苷 Ro	NX
162	76.25	C ₃₀ H ₄₆ O ₂	[M+H] ⁺	439.357 1	439.354 3	-6.28	249.185 5、221.189 3、 217.196 3、203.179 4、 191.179 5、149.132 6、 123.116 8	α-香树脂酮	NX
163	76.35	C ₁₈ H ₁₈ O ₄	[M-H] ⁻	297.113 2	297.112 1	-3.80	253.121 6、189.054 9、 165.054 3、107.049 3	阿魏酸苯乙醇酯	QH
164	76.40	C ₁₈ H ₃₄ O ₅	[M-H] ⁻	329.233 4	329.231 0	-7.14	311.221 3、293.211 2、 211.132 7、171.101 7	9,12,13- 三 羟 基 - 10-十八碳烯酸	除 NX 外
165	77.18	C ₁₅ H ₁₈ O ₃	[M+H] ⁺	247.132 9	247.131 8	-4.33	159.080 9、91.054 6	9,10-Seco-iso- hydroxyaconido lactone	MY
166	77.48	C ₄₂ H ₆₂ O ₁₇	[M-H] ⁻	837.391 4	837.385 8	-6.71	661.355 5、485.326 1、 351.054 8、289.056 3	甘草皂苷 G2	GC
167	77.75	C ₂₁ H ₂₀ O ₆	[M+H] ⁺	369.133 3	369.132 2	-2.87	193.050 4、165.055 5	甘草宁 N	GC
168	78.16	C ₄₂ H ₆₀ O ₁₆	[M-H] ⁻	819.380 9	819.377 3	-4.34	643.348 0、351.055 5	甘草皂苷 E2	GC
169	78.21	C ₃₀ H ₄₄ O ₄	[M+H] ⁺	469.331 2	469.329 8	-3.07	451.321 0、405.310 3、 217.158 3、175.148 7	光甘草内酯	GC
170	78.27	C ₁₂ H ₁₂ O ₂	[M+H] ⁺	189.091 0	189.090 5	-2.70	129.035 8	川芎内酯	CX、DG
171	78.67	C ₄₇ H ₇₀ O ₂₀	[M-H] ⁻	953.438 8	953.434 6	-4.37	909.445 6、851.439 9、 793.436 0、569.383 7	牛膝皂苷Ⅲ [#]	NX
172	78.76	C ₁₆ H ₁₂ O ₆	[M-H] ⁻	299.056 1	299.055 4	-2.37	284.031 6、256.035 7	高车前素	WLZ、NX、QH、 HH、XF、QJ
173	79.03	C ₄₄ H ₆₄ O ₁₈	[M-H] ⁻	879.402 0	879.399 6	-2.72	351.055 4、193.032 5	uralsaponinsM	GC
174	79.60	C ₄₂ H ₆₆ O ₁₄	[M-H] ⁻	793.438 0	793.434 6	-4.26	631.384 0、569.380 0、 455.348 6	姜状三七苷 R1	NX
175	79.66	C ₄₇ H ₇₂ O ₂₀	[M-H] ⁻	955.454 4	955.449 4	-5.25	835.445 9、793.435 5、 631.384 0	牛膝皂苷 C	NX
176	79.92	C ₄₇ H ₇₀ O ₂₀	[M-H] ⁻	953.438 8	953.434 8	-4.16	909.447 0、793.436 9、 631.386 7	牛膝皂苷 B	NX
177	80.06	C ₄₆ H ₇₀ O ₁₉	[M-H] ⁻	925.443 9	925.440 5	-3.62	793.432 5、631.379 5、 130.999 1	牛膝皂苷 E	NX
178	80.36	C ₄₂ H ₆₂ O ₁₆	[M-H] ⁻	821.396 5	821.390 1	-7.80	645.362 7、351.054 4、 193.034 4	甘草酸 [#]	GC
179	80.41	C ₃₀ H ₄₆ O ₄	[M+H] ⁺	471.346 9	471.345 6	-2.74	317.211 5、235.169 6	五灵脂三萜酸 [#]	WLZ

表 1 (续)

序号	t_R/min	化学式	离子模式	m/z		误差/ ($\times 10^{-6}$)	二级碎片离子	成分	归属
				理论值	实测值				
180	81.69	$\text{C}_{13}\text{H}_{14}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	235.096 5	235.095 3	-5.06	217.086 4、205.050 0、 202.063 0、187.039 4、 174.067 9、159.044 8	2-甲氧基鳝藤酸 甲氧基烯酸	QJ
181	82.11	$\text{C}_{12}\text{H}_8\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	217.049 5	217.049 3	-1.11	202.025 8、174.030 9、 146.036 2	甲氧沙林	QH
182	82.34	$\text{C}_{15}\text{H}_{24}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	205.195 1	205.194 4	-3.31	149.132 4、121.101 7、 107.085 8	白菖烯	XF、TR、QJ、 MY、XF
183	82.47	$\text{C}_{15}\text{H}_{26}\text{O}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	223.205 6	223.206 0	1.61	69.070 4、55.055 5	<i>t</i> -杜松醇	MY
184	82.64	$\text{C}_{42}\text{H}_{62}\text{O}_{15}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	805.401 6	805.400 0	-1.97	351.050 3	甘草皂苷 C2	GC
185	82.77	$\text{C}_{42}\text{H}_{62}\text{O}_{16}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	821.396 5	821.393 2	-4.03	645.362 7、351.056 2	甘草皂苷 K2	GC
186	83.28	$\text{C}_{21}\text{H}_{20}\text{O}_6$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	369.133 3	369.131 9	-3.68	313.070 1、211.113 3	甘草瑞酮	GC
187	83.45	$\text{C}_{16}\text{H}_{20}\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	261.148 5	261.147 7	-3.14	145.065 3、131.085 8	Rel-3R-methoxy-4S- furanogermacra- 1E, 10(15)-dien-6- one	MY
188	86.98	$\text{C}_{12}\text{H}_{12}\text{O}_3$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	203.071 4	203.070 8	-2.81	173.023 2、160.015 9、 145.029 2、132.021 0	川芎内酯酚	CX
189	88.00	$\text{C}_{15}\text{H}_{20}\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	249.148 5	249.148 0	-2.09	161.096 4、143.085 7	苍术内酯 III	MY
190	88.60	$\text{C}_{15}\text{H}_{16}\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	245.117 2	245.116 3	-3.75	175.075 4、145.064 5	commiphorene B	MY
191	90.27	$\text{C}_{47}\text{H}_{72}\text{O}_{20}$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	955.454 4	955.450 2	-4.42	835.445 5、793.434 4、 161.007 9	牛膝皂苷 G	NX
192	90.58	$\text{C}_{15}\text{H}_{24}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	237.184 9	237.184 1	-3.42	159.116 7、135.117 2、 133.102 0、121.101 9、 119.085 8	莪术醇	MY
193	90.60	$\text{C}_{12}\text{H}_{12}\text{O}_3$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	203.071 4	203.070 6	-3.79	173.021 3、145.028 3	洋川芎内酯 E	CX、DG
194	90.83	$\text{C}_{20}\text{H}_{18}\text{O}_6$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	353.103 1	353.102 5	-1.59	332.973 0、292.984 9、 266.986 4、248.995 1	甘草异黄烷酮	GC
195	90.99	$\text{C}_{20}\text{H}_{16}\text{O}_6$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	351.087 4	351.086 4	-2.88	283.097 6、265.085 3、 250.993 4	甘草异黄酮 B	GC
196	91.85	$\text{C}_8\text{H}_8\text{O}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	121.064 8	121.064 8	0.08	53.038 9、51.022 8	1-苯基乙酮	GC
197	92.63	$\text{C}_{12}\text{H}_{16}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	193.122 3	193.121 1	-6.27	147.117 1、137.059 9、 93.070 1、81.070 0、 55.054 5	洋川芎内酯 A [#]	CX、DG
198	94.79	$\text{C}_{15}\text{H}_{18}\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	247.132 9	247.131 6	-5.14	159.080 2、147.080 6、 119.085 9	myrrheterpenoid K	MY
199	94.82	$\text{C}_{12}\text{H}_{14}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	191.106 7	191.106 1	-2.93	105.070 1、145.101 5	3-正丁基苯酚	CX、DG
200	96.23	$\text{C}_{22}\text{H}_{22}\text{O}_6$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	383.148 9	383.147 1	-4.72	163.039 0、149.024 3	甘草利酮	GC
201	97.18	$\text{C}_{20}\text{H}_{18}\text{O}_6$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	353.103 1	353.102 5	-1.59	284.980 0、135.006 7、 125.023 8、83.013 8	甘草异黄酮 A	GC
202	97.54	$\text{C}_{16}\text{H}_{14}\text{O}_4$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	269.081 9	269.080 5	-5.31	228.987 4、185.096 3	欧前胡素	QH
203	98.42	$\text{C}_{16}\text{H}_{22}\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{Na}]^+$	285.146 1	285.145 4	-2.53	171.084 1、159.080 9、 145.100 8	2-methoxy-8,12- epoxygermacra- 1(10),7,11-trien- 6-one	MY

表 1 (续)

序号	<i>t_R</i> /min	化学式	离子模式	<i>m/z</i>		误差/ (×10 ⁻⁶)	二级碎片离子	成分	归属
				理论值	实测值				
204	98.49	C ₁₄ H ₂₂ O ₂	[M+Na] ⁺	245.151 2	245.153 0	7.34	119.086 3、115.054 2、 91.055 2	canangaterpene VI	MY
205	98.57	C ₁₅ H ₁₈ O ₂	[M+H] ⁺	231.138 0	231.137 2	-3.29	189.091 2、179.086 0、 171.080 6、161.096 8	去氢木香内酯	MY
206	98.60	C ₁₅ H ₂₆ O ₃	[M+Na] ⁺	263.161 8	263.163 8	7.71	145.101 2、133.101 2、 65.038 7	orientalol E	MY
207	98.62	C ₁₅ H ₁₆ O	[M+H] ⁺	213.127 4	213.126 4	-4.65	197.095 6、171.081 0、 155.085 6、141.070 0	焦莪术酮	MY
208	99.07	C ₁₈ H ₂₂ O ₄	[M+H] ⁺	303.159 1	303.159 9	2.67	211.112 0、196.089 3、 182.072 6	commiterpene B	MY
209	99.09	C ₁₅ H ₁₄ O	[M+H] ⁺	211.112 3	211.111 1	-5.68	195.080 6、181.064 7、 167.085 6	脱氢色原蛋白	MY
210	99.10	C ₁₈ H ₂₄ O ₅	[M+H] ⁺	321.169 7	321.168 6	-3.27	185.096 5、168.093 3、 159.080 3、145.065 6、 131.085 9	2-甲氧基-5-乙酰基- 呋喃吉玛烷-1(10)-烯-6-酮	MY
211	99.99	C ₄₁ H ₆₀ O ₁₅	[M-H] ⁻	791.385 9	791.382 6	-4.22	631.383 0、613.374 0、 455.352 2、291.034 5、 133.013 5	牛膝皂苷IV [#]	NX
212	100.15	C ₄₂ H ₆₆ O ₁₄	[M-H] ⁻	793.438 0	793.440 7	3.40	673.394 4、631.384 9、 455.351 6	fatsiaside C	NX
213	100.37	C ₁₆ H ₁₄ O ₄	[M-H] ⁻	269.081 9	269.081 9	-0.11	228.986 5	selinidin	QH
214	101.00	C ₁₅ H ₂₈ O ₃	[M+Na] ⁺	279.193 1	279.194 3	4.41	201.047 2、149.023 8、 121.028 9	eudine-1α,5β,11-trio	MY
215	101.61	C ₁₂ H ₁₄ O ₂	[M+H] ⁺	191.106 7	191.105 2	-7.64	173.096 2、163.111 2、 149.060 0、145.101 2、 135.044 3、107.049 3	<i>E</i> -藁本内酯 [#]	CX、DG、QH
216	102.26	C ₁₂ H ₁₂ O ₂	[M+H] ⁺	189.091 0	189.090 2	-4.28	171.078 2	<i>Z</i> -丁烯基酞内酯	CX、DG
217	102.81	C ₁₅ H ₁₈ O ₂	[M+H] ⁺	231.138 0	231.136 1	-8.05	145.064 7、131.085 6、 95.049 4	表莪术呋喃烯酮	MY
218	103.59	C ₂₁ H ₂₂ O ₅	[M-H] ⁻	381.134 4	381.133 8	-1.47	340.981 5、300.989 5	羌活醇 [#]	QH
219	104.29	C ₁₅ H ₂₀ O	[M+H] ⁺	217.158 7	217.157 9	-3.64	173.097 5、159.080 0、 145.099 8、119.085 2、 77.038 9	comosone II	MY
220	104.52	C ₁₅ H ₁₈ O ₂	[M+H] ⁺	231.138 0	231.136 6	-5.88	159.080 5、145.064 9、 105.069 9、91.054 0	(1 <i>E</i>)-8,12-epoxygermacra- 1,7,10,11-tetraen-6-one	MY
221	105.66	C ₁₅ H ₁₆ O	[M+H] ⁺	213.127 4	213.126 4	-4.65	145.065 7、131.084 7	commiphoin B	MY
222	105.90	C ₁₆ H ₁₄ O ₄	[M+H] ⁺	271.096 5	271.096 4	-0.33	203.034 2、159.044 4、 147.044 5、131.049 8	异欧前胡素 [#]	QH
223	106.04	C ₁₅ H ₁₈ O ₂	[M+H] ⁺	231.138 0	231.136 7	-5.45	215.106 0、109.064 9	香樟内酯	MY
224	106.64	C ₁₅ H ₂₂ O	[M+H] ⁺	219.174 3	219.173 0	-6.11	201.153 2、177.126 7、 163.112 0、159.116 9、 137.096 4、121.064 7	吉马酮	MY、HH、XF

表 1 (续)

序号	t_R/min	化学式	离子模式	m/z		误差/ ($\times 10^{-6}$)	二级碎片离子	成分	归属
				理论值	实测值				
225	107.31	$\text{C}_{16}\text{H}_{18}\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	259.132 9	259.131 8	-4.13	211.075 6、189.091 4、 174.105 0、161.059 8	9-甲氧基没药酮	MY
226	107.35	$\text{C}_{15}\text{H}_{18}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	231.138 0	231.137 4	-2.42	109.101 1、81.070 6	2-methoxy-8,12- epoxygermacra- 1(10),7,11-trien- 6-one	MY
227	107.42	$\text{C}_{15}\text{H}_{16}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	229.122 3	229.121 2	-4.84	213.090 8、159.080 3、 145.065 3	没药酮 [#]	MY
228	107.66	$\text{C}_{20}\text{H}_{28}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	301.216 2	301.215 0	-4.02	255.209 3、201.044 4、 149.029 9	5, 8, 11-二十碳三 烯酸	WLZ
229	107.71	$\text{C}_{30}\text{H}_{48}\text{O}_5$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	487.342 9	487.342 1	-1.64	469.331 9、443.317 2、 369.276 4	积雪草酸	NX
230	108.27	$\text{C}_{15}\text{H}_{22}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	203.179 4	203.178 2	-6.05	147.116 8、133.101 6、 119.085 6	去氢白菖烯	XF、TR、CX、 WLZ、NX、 QH、DL、 MY、DG、HH
231	109.25	$\text{C}_{15}\text{H}_{20}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	233.153 6	233.152 4	-5.19	175.112 3、159.080 5、 105.070 4	木香烯内酯	MY
232	109.28	$\text{C}_{24}\text{H}_{28}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	381.206 0	381.204 7	-3.52	191.106 4	洋川芎内酯 O	CX、DG
233	109.98	$\text{C}_{18}\text{H}_{30}\text{O}_3$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	293.212 2	293.210 9	-4.50	249.221 2、113.096 6	(9Z,11E)-13- oxooctadeca- 9,11-dienoic acid	TR、CX、 WLZ、QH、 DL、DG、HH
234	110.54	$\text{C}_{15}\text{H}_{22}\text{O}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	219.174 3	219.173 7	-2.92	163.113 2、135.115 8、 123.080 5、109.064 0	α -香附酮 [#]	XF
235	111.52	$\text{C}_{24}\text{H}_{30}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	383.221 7	383.220 3	-3.63	191.107 0	洋川芎内酯 P	CX、DG
236	111.83	$\text{C}_{16}\text{H}_{22}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	279.159 1	279.158 5	-2.11	149.022 9、121.028 9、 65.038 9	邻苯二甲酸二丁 酯	ALL
237	111.86	$\text{C}_{24}\text{H}_{28}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	381.206 0	381.204 9	-2.99	191.107 3、173.096 1、 145.101 9	riligustilide	CX、DG
238	111.97	$\text{C}_{24}\text{H}_{28}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	381.206 0	381.204 7	-3.52	191.107 1、173.097 2、 145.102 1	Z,Z'-6,6',7,3'-二 聚体蒿本内酯	CX、DG
239	112.39	$\text{C}_{15}\text{H}_{22}\text{O}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	219.174 3	219.173 9	-2.01	121.064 7、55.053 8	马兜铃酮	XF、CX、MY、 HH
240	112.63	$\text{C}_{15}\text{H}_{24}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	205.195 1	205.194 4	-3.31	121.101 5、91.054 3	(-)- α -萜 油烯	MY
241	113.31	$\text{C}_{24}\text{H}_{28}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	381.206 0	381.204 0	-5.35	191.106 5、173.096 5、 145.101 4、91.054 5	欧当归内酯 A	CX、DG
242	114.47	$\text{C}_{27}\text{H}_{34}\text{O}_5$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	437.233 4	437.230 6	-6.29	203.105 8	甘草异黄烷甲	GC
243	116.39	$\text{C}_{24}\text{H}_{28}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	381.206 0	381.205 6	-1.15	191.107 9、173.096 9、 145.103 4	Z-6,8',7,3'-二 聚体蒿本内酯	CX、DG
244	118.21	$\text{C}_{18}\text{H}_{30}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	279.231 9	279.230 3	-5.59	95.085 9、81.069 9	亚麻酸	TR、WLZ、 NX、DL、HH

*经与对照品比对得到; #网络药理学所选化合物; HH-红花; TR-桃仁; DG-当归; CX-川芎; MY-没药; WLZ-五灵脂; XF-香附; QJ-秦艽; QH-羌活; NX-牛膝; DL-地龙; GC-甘草; ALL-所有药材。

*After comparison with the control sample; #Compounds selected by network pharmacology; HH-*Carthami Flos*; TR-*Persicae Semen*; DG-*Angelicae Sinensis Radix*; CX-*Chuanxiong Rhizoma*; MY-*Myrrha*; WLZ-*Troglodytes Faeces*; XF-*Cyperus Rhizoma*; QJ-*Gentiana Macrophyllae Radix*; QH-*Notopterygii Rhizoma et Radix*; NX-*Achyranthis Bidentatae Radix*; DL-*Pheretima*; GC-*Glycyrrhizae Radix et Rhizoma*; ALL-all herbs.

3.2 化合物-证候靶点 Venn 图构建

确定身痛逐瘀汤中 33 个成分为研究对象(表 1), 筛选共得到 648 个候选靶标基因。证候靶点得到 2 705 个, 将化合物作用靶点与证候靶点取交集, 得到 190 个交集靶点, 作为身痛逐瘀汤治疗痹证的潜在靶点。

3.3 PPI 网络的构建

身痛逐瘀汤干预痹证的 PPI 网络见图 1, 网络图共有 179 个节点, 1 500 条边, 利用 Cytoscape 3.10.3 软件进行拓扑分析, 筛选出 67 个核心网络节点, 处于网络中心的前 10 个靶点为白细胞介素-6 (IL6)、肿瘤坏死因子 (TNF)、白细胞介素-1 β (IL1B)、信号转导子和转录激活子 3 (STAT3)、表皮生长因子受体(EGFR)、半胱天冬酶-3(CASP3)、过氧化物酶体增生激活受体 γ (PPARG)、前列腺素内过氧化物合酶 2 (PTGS2)、Jun 原癌基因 (JUN)、基质金属蛋白酶 9 (MMP9), 可能为身痛逐瘀汤治疗痹证的关键靶点。根据对应关系构建身痛逐瘀汤“药材-成分-靶点”的网络图(图 2, 其中三角形代表药材; 菱形代表成分; 圆形代表靶点), 该网络图存在 235 个节点, 1 189 条边, 表明身痛逐瘀汤可能通过多成分、多靶点、多途径治疗痹证相关疾病。

3.4 GO 与 KEGG 富集分析

将共有靶点投射至 Metoscape 平台进行 GO 和 KEGG 通路富集分析, GO 功能富集分析包括 1 639 个 BP 条目、112 个 CC 条目、211 个 MF 条目, 分别将 $P < 0.05$ 的前 10 个条目进行可视化(图 3),

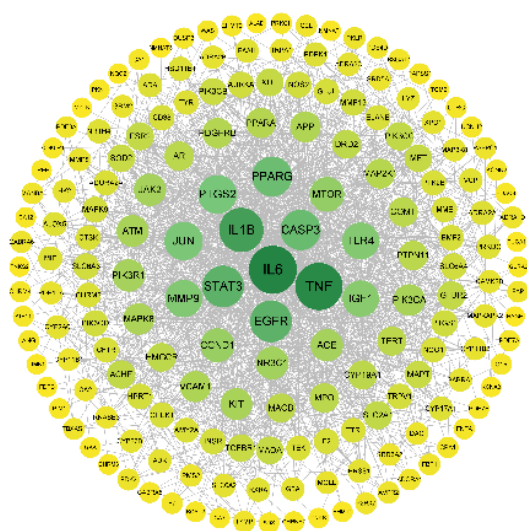


图 1 PPI 网络图

Fig. 1 PPI network

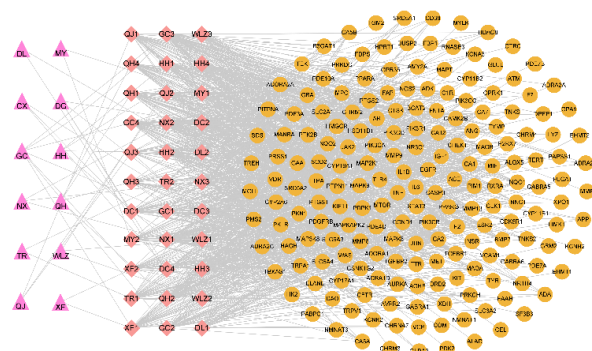


图 2 药材-成分-靶点网络图

Fig. 2 Medicinal materials-components-target network

结果表明身痛逐瘀汤可能参与对血液循环、循环系统过程、丝裂原活化蛋白激酶 (MAPK) 级联调节等 BP; 磷脂酰肌醇 3-激酶复合物 IA 类、神经元细胞体等 CC; 磷酸转移酶活性、激酶活性等 MF 来发挥作用。KEGG 通路富集分析共获得 $P < 0.05$ 的通路 198 条, 筛选与证候相关的通路共 70 条, 取前 20 条通路进行可视化(图 4), 分析发现主要涉及参与如血液流变学调节 (fluid shear stress and atherosclerosis、lipid and atherosclerosis 等), 血管功能调节 (HIF-1 等), 神经系统调节 (neuroactive ligand、neurotrophin 等), 内分泌调节 (Prolactin、relaxin、endocrine resistance 等), 炎症-免疫调节 (TNF、NF- κ B、Th17 cell differentiation 等), 细胞功能、细胞稳态调节 (PI3K-Akt、FoxO、EGFR tyrosine kinase inhibitor resistance 等) 等相关通路。

3.5 身痛逐瘀汤干预痹证的现代医学疾病

将筛选得到的“方-证”共同靶点映射到现代医学症状, 按照 P 值升序排列, 结果表明, 共同靶点可显著改善疼痛、骨痛、免疫、类风湿关节炎 (RA) 等现代医学症状(图 5)。症状与痹证相关疾病关联结果主要涉及 RA、强直性脊柱炎 (AS) 等结缔组织病及自身免疫性疾病, 膝关节骨性关节炎、腰椎间盘突出症等骨关节病, 腰背肌筋膜炎、外伤后遗疼痛等软组织疾病, 痛风性关节炎、骨质疏松症等代谢性疾病(图 6)。

3.6 身痛逐瘀汤异病同治的作用机制

基于共有靶点的信号通路富集与进一步关联分析表明, 身痛逐瘀汤可通过调控免疫炎症反应、改善血液流变学状态、发挥骨保护作用及调节神经系统功能 (镇痛) 等多重药理机制实现异病同治, 其“靶点-通路-药理作用-疾病”调控网络如图 7 所示。

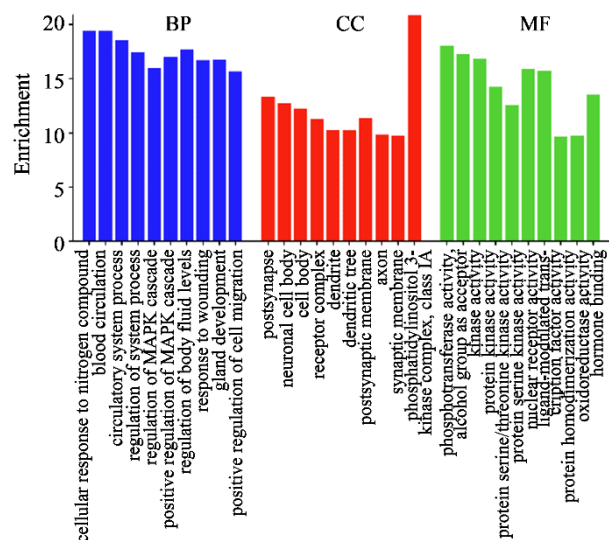


图 3 GO 功能分析

Fig. 3 GO function analysis diagram

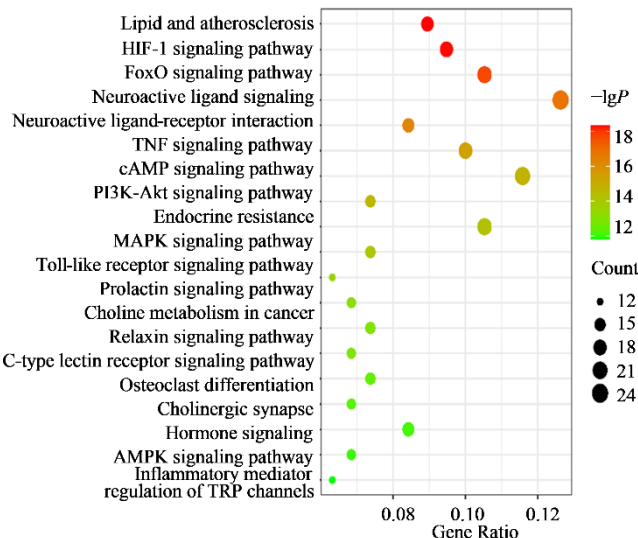


图 4 KEGG 通路富集

Fig. 4 Enrichment diagram of KEGG pathway

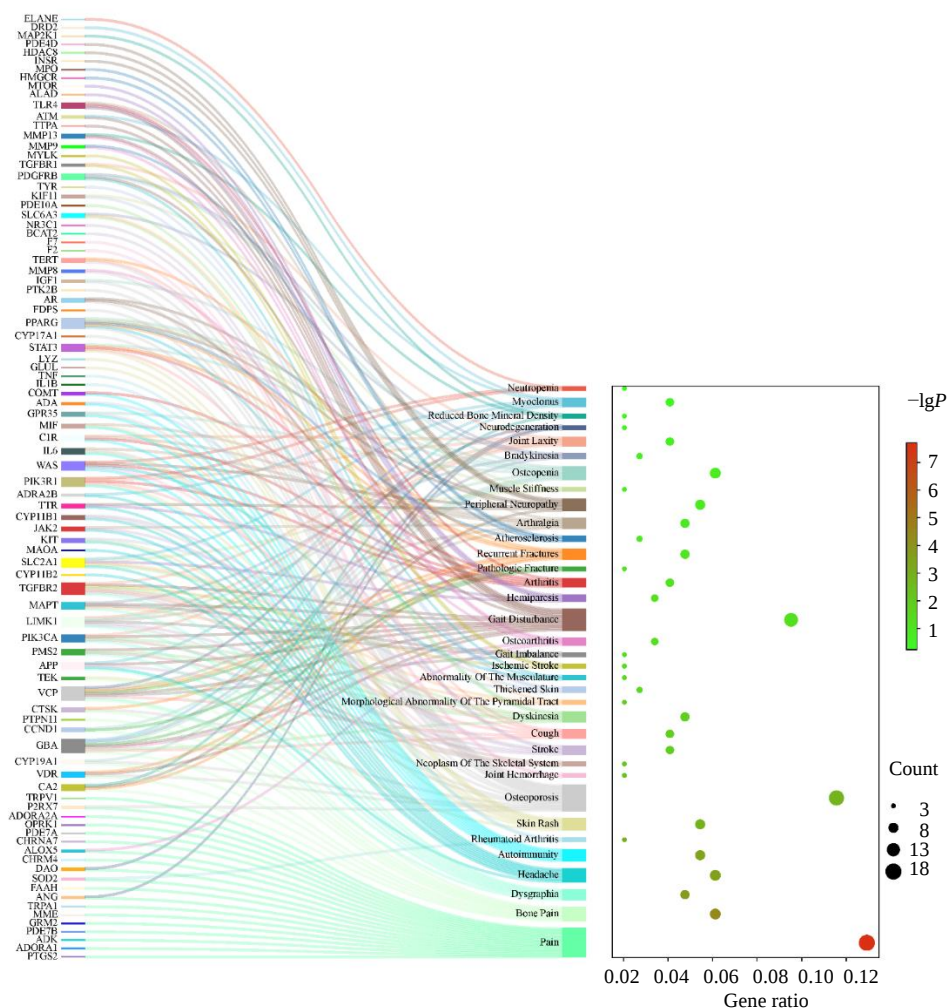


图 5 现代医学症状映射

Fig. 5 Modern medicine symptom mapping diagram

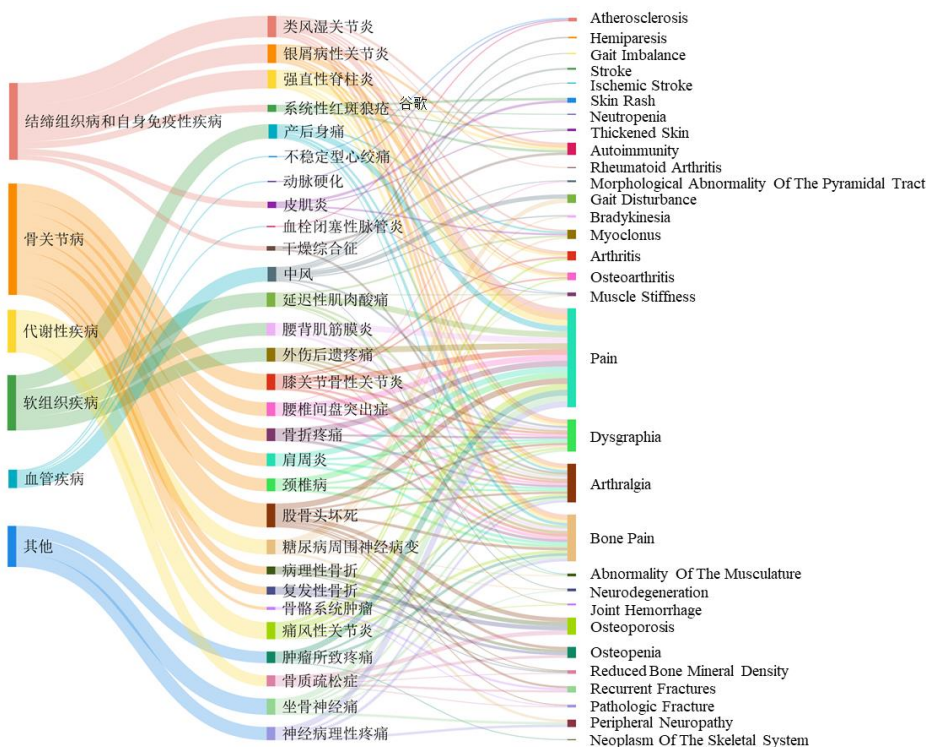


图 6 疾病-症状关联图

Fig. 6 Disease-symptom association network

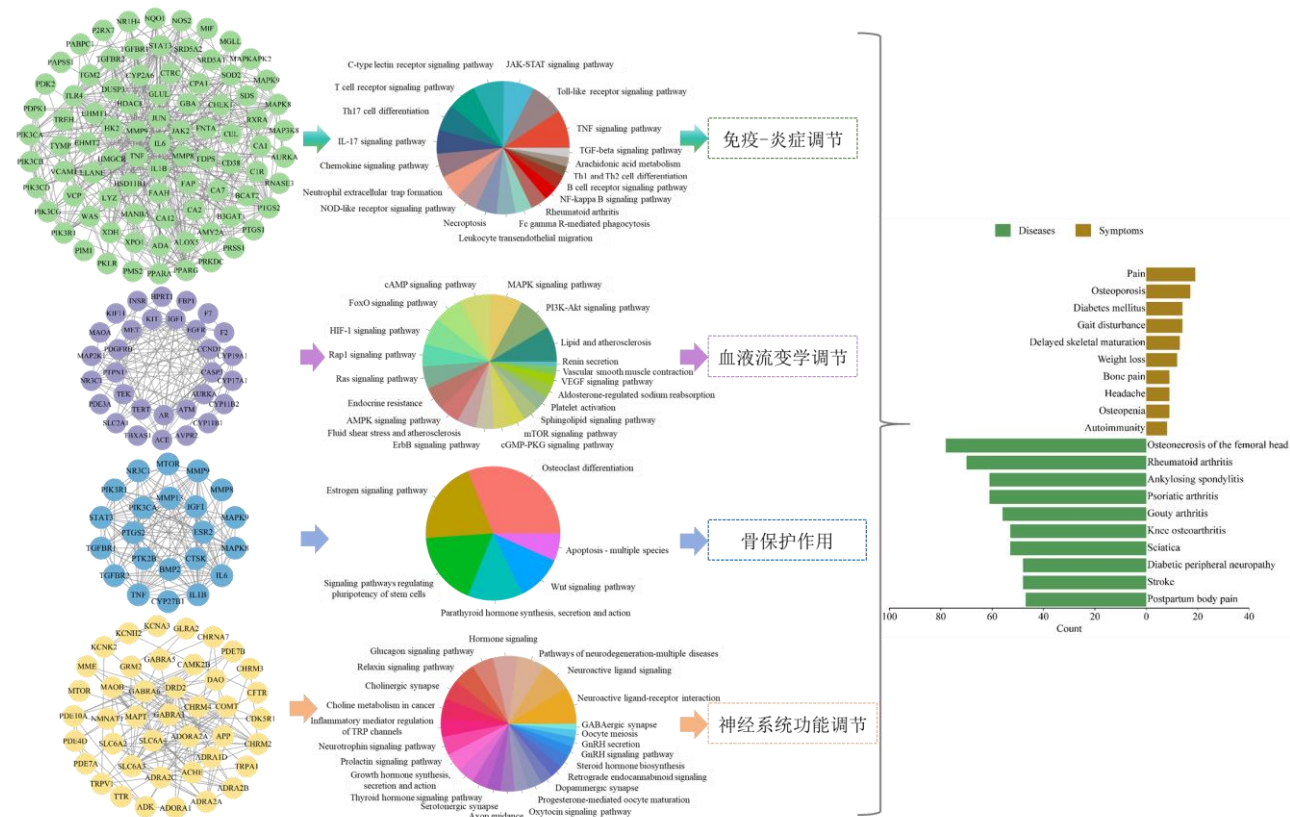


图 7 身痛逐瘀汤异病同治作用机制网络图

Fig. 7 Network diagram of "treating different diseases with same therapy" mechanism of Shentong Zhuuyu Decoction

3.7 身痛逐瘀汤治疗不同疾病的临床报道

为评估身痛逐瘀汤“异病同治”的潜在临床基础,通过检索中国学术期刊全文数据库(CNKI),收集并整理了部分该方在 RA、AS、腰椎间盘突出及膝骨关节炎等疾病中的临床应用报道^[19-25]。汇总文献表明,身痛逐瘀汤在上述不同疾病中均展现出一定的治疗应用,从而为其“异病同治”的推论提供了初步的临床佐证。

4 讨论

痹有闭阻不通之意。中医典籍中,痹证又有“痹”“痹病”“痛风”“风湿”“历节”等称呼,均系泛指由于人体正气不足,腠理疏松,风、寒、湿、热等外邪单独或合并为患,或因内生痰浊、淤血、毒热等,痹阻经筋、骨髓,致使肢体、肌肉、关节疼痛、重着、麻木、肿胀、屈伸不利,甚至造成关节的变形,或累及内脏为特征的一类病证的总称^[1]。根据临床特征,痹证相关疾病包括现代医学的风湿性关节炎、RA、风湿热、雷诺病、系统性红斑狼疮、神经痛、骨质增生、AS、骨关节炎、肌肉劳损等疾病。其发生机制主要是患者内环境紊乱,加之外界环境的影响,感染致病微生物以及发生免疫反应、炎症反应,伤害性感受器阈值降低而引发的外周敏化,使局部血液供应和神经调节发生改变,从而出现了痹证的诸多表现^[26]。瘀血痹证的治疗多以活血化瘀,通络止痛为治疗原则,用药多配伍活血药。古籍有关瘀血痹证的记载较为丰富,尤其是明清时期,有了重大发展,代表方如《医林改错》之身痛逐瘀汤。该方组方严谨,由 12 味药材组成^[27],其中桃仁、红花、当归和川芎共为君药,共奏活血化瘀、补血行气止痛之功;没药、五灵脂、秦艽、香附、羌活为臣药,共同发挥祛风除湿、行气活血、舒经止痛的作用,以助君药活血散瘀止痛之功;牛膝和地龙亦为佐药,共同发挥舒筋活络,补益肝肾的作用;甘草则调和诸药,使全方活血而不伤正、行气而不耗阴,共成“活血通络、祛风除湿、兼顾扶正”的配伍体系。身痛逐瘀汤既以辛温行血、苦甘通瘀为主,又以咸通络、平性调和为辅,实现活血而不妄行、通络而不伤正,对气滞血瘀型痹证的临床治疗具有重要的应用价值。传统的网络药理学侧重于从“疾病-方剂”的关联网络预测药物的作用机制,忽略了“证型”在疾病诊疗中的重要地位。基于此,本研究采用“方-证”关联思路利用网络药理学对身痛逐瘀汤治疗痹证及异病同治的作用机制进行分析。

在“免疫-炎症”调节方面,免疫-炎症调控网络失衡是痹证发生发展的核心病理环节,与中医“正邪交争、经络痹阻、痰瘀互结”的病机演化密切相关,炎症因子的过量释放、免疫细胞的异常活化,会导致组织充血水肿、代谢紊乱,从而加重患者体内瘀血阻滞。如 RA 和 AS 均为自身免疫性疾病,发病机制均以免疫-炎症紊乱、正气亏虚、邪痹经络为核心。IL-1 β 、IL-6 和 TNF- α 是公认的在 RA 发生发展过程中发挥重要作用的促炎症细胞因子,参与关节滑膜炎状态的诱导维持及破骨细胞的活化促进等过程,最终导致关节软骨与骨的侵蚀和破坏;此外,“致病性”辅助性 T 细胞(Th)17 可分泌 IL-17A、IL-22 和粒细胞-巨噬细胞集落刺激因子,其中 IL-17A 可协同并释放多种促炎症细胞因子,刺激多种趋化因子配体参与血管翳的形成,加重关节滑膜炎,破坏关节骨与软骨^[28]。身痛逐瘀汤中来源于川芎和当归中的洋川芎内酯 A 与 Z-藁本内酯、红花中的槲皮素与山柰酚、羌活中的异欧前胡素、秦艽中的龙胆苦苷与獐芽菜苦苷、牛膝中的 β -蜕皮甾酮和牛膝皂苷、五灵脂中的五灵脂三萜酸、甘草中的甘草酸可通过扶正固本、祛邪通络达到“免疫-炎症”调节作用,可作用于 IL6、TNF、IL1B、IL-17、磷脂酰肌醇 3-激酶调节亚基 1 (PIK3R1)、雷帕霉素靶蛋白(mTOR)、PTGS2、MMP9 等靶点,参与调节 TNF、Th17 cell differentiation、IL-17、NF- κ B、PI3K-Akt 等信号通路。

在调节血液流变学方面,瘀血既是痹证发展过程中形成的重要病理结果,同时是痹证的重要病因之一^[29],贯穿疾病始终。现代研究表明,气滞血瘀型痹证如 RA、痛风性关节炎、骨关节炎患者多伴随血小板功能和凝血纤溶系统指标异常,呈现中医“血瘀证”的典型特征,其本质为西医学所言血液高凝状态,体现为血液“浓、黏、凝、聚”的病理状态,恰是“气血运行不畅、瘀血阻滞经络”的客观表现^[30]。RA 等发病进程中 TNF- α 和 IL-17 等炎症因子会诱导 NF- κ B 信号通路的异常激活,进而诱导 IL-1、血管内皮生长因子(VEGF)等大量释放,导致血管内皮受损、血小板异常活化,启动血小板黏附、聚集、释放等病理反应,参与止血凝血及血管修复过程,最终引发微循环障碍^[31];环鸟苷酸-蛋白激酶 G(cGMP-PKG)信号通路以 cGMP 为第二信使,通过激活 PKG 转导信号,可抑制血小板聚集,发挥活血行滞之效^[32];同时有研究显示, Lipid and

atherosclerosis 通路及 Fluid shear stress and atherosclerosis 通路均与血管内皮功能密切相关, 调节流体剪切应力减轻内皮细胞损伤, 可能是活血祛瘀的重要机制^[33]。身痛逐瘀汤中来源于如桃仁中的苦杏仁苷、川芎和当归中的阿魏酸与藁本内酯、红花中的羟基红花黄色素 A 与山柰酚、五灵脂中的五灵脂三萜酸、没药中的 myrrheterpenoid O 可通过活血行滞、化瘀通络达到调节血液流变学的功效, 主要作用于 IL-17、TNF- α 、血栓素 A 合酶 1 (TBXAS1)、凝血因子 II (F2)、MMP9 等靶点, 参与调节 Lipid and atherosclerosis、Fluid shear stress and atherosclerosis、VEGF、Platelet activation、cGMP-PKG 等信号通路。

在骨保护方面, 痹证相关骨科疾病如 RA、骨关节炎、痛风性关节炎病程中均以“肝肾亏虚、邪痹骨络、痰瘀伤骨”为核心病机, 骨骼结构与功能损伤导致骨破坏、骨流失加重, 最终引发关节畸形、活动障碍, 故骨保护是阻断病情恶化、维持关节功能的关键^[34]。骨破坏机制与破骨细胞及成骨细胞之间平衡被打破密切相关, “滑膜炎”“滑膜增生”“骨及软骨下骨质破坏”被认为是 RA 三大核心病理特征, PI3K/Akt 通路均参与其中, 通过上调各类趋化因子表达, 增加破骨细胞数量及迁移力, 加速骨质侵蚀, 是破骨细胞异常活化的关键纽带^[35]; Wnt 蛋白调控骨稳态及新骨形成, 其介导的 Wnt/ β -catenin 通路可通过下调胞内 β -catenin 水平, 阻断下游炎症因子的激活, 发挥护骨作用^[36]; 细胞因子在 RA 骨质破坏中扮演着复杂的角色, TNF- α 作为核心“邪毒”因子, 可与其他促炎因子形成连锁反应, 通过直接或间接上调 RANKL 表达, 诱导破骨细胞活化, 加重骨损伤^[37]。身痛逐瘀汤中来源于如桃仁中的苦杏仁苷与 O- β -D-龙胆二糖基-D-(-)-扁桃酰胺, 川芎和当归中的洋川芎内酯 A、洋川芎内酯 I 与藁本内酯, 红花中的红花炔苷与山柰酚, 秦艽中的龙胆苦苷与獐牙菜苦苷, 羌活中的羌活醇与异欧前胡素, 牛膝中的 β -蜕皮甾酮和牛膝皂苷 C, 五灵脂中的五灵脂三萜酸, 香附中的香附烯酮、没药中的没药酮和 myrrheterpenoid O 等可通过祛邪通络、填精益髓起到骨保护作用, 主要作用于 TNF- α 、磷脂酰肌醇 4,5-二磷酸 3-激酶催化亚基 α (PIK3CA)、PIK3R1、MMP13、JUN 等靶点, 参与调节 TNF、Osteoclast differentiation、Wnt、PI3K-Akt、Estrogen 等信号通路。

在神经系统调节方面, 中医认为“肝主筋、肾主骨、心主脉、经络通于脏腑肢节”, 痹证日久邪恋经络、损伤正气, 必然累及筋脉、脑髓, 引发神经系统功能失常, 一方面经络痹阻, 筋脉失养, 表现为肢体麻木、感觉减退、刺痛或灼痛; 另一方面久病及肾, 髓海不足, 表现为痛觉敏感化^[38]。从病理机制来看, 神经系统免疫炎症反应是痹证神经损伤的核心诱因。受损神经细胞与外周免疫细胞释放的 IL-1 β 、IL-17 等促炎因子, 可致局部脉络淤滞、伤害感受器兴奋性增高、信号传导阈值降低, 进而引发痛觉过敏、痛阈下降; 神经损伤后, 脊髓背角辣椒素受体瞬时受体电位香草酸亚型 1 (TRPV1) 功能上调, 这使得谷氨酸、P 物质等神经递质产物释放, 协同兴奋背角神经元, 加重中枢敏化^[39]; 神经痛进展中, 脊髓背角小胶质细胞异常活化并释放炎症细胞因子, 表现为脊髓 OX-42 免疫阳性物质及磷酸化 p38 蛋白表达上调, 而 p38 丝裂原活化蛋白激酶 (p38/MAPK) 通路作为细胞内应激反应通路, 其异常激活会加剧炎症与疼痛传导^[40]; 环腺苷酸 (cAMP) 信号通路可介导细胞外信号向细胞内转化, 调控中枢神经元兴奋性与突触可塑性, 其持续激活可维持感觉神经元过度兴奋、行为痛觉过敏^[41]。身痛逐瘀汤中来源于川芎和当归中的洋川芎内酯 A 和藁本内酯、红花中的红花炔苷与槲皮素、牛膝中的 β -蜕皮甾酮、五灵脂中的五灵脂三萜酸、香附中的 α -香附酮、没药中的没药酮和 myrrheterpenoid O 等化学成分可通过调和气血、安神定痛达到调节神经敏感性的功效, 主要作用于 IL-1 β 、IL-17、腺苷 A1 受体 (ADORA1)、磷酸二酯酶 3A (PDE3A)、TRPV1、瞬时受体电位锚蛋白 1 (TRPA1)、前列腺素内过氧化物合酶 1 (PTGS1) 等靶点, 参与调节 Inflammatory mediator regulation of TRP channels、cAMP signaling pathway、Neuroactive ligand signaling、Serotonergic synapse、Neuroactive ligand-receptor interaction 等通路。

本研究立足中医“整体观念”与“辨证论治”核心理论, 紧扣痹证“本虚标实、邪痹经络、痰瘀互结”的核心病机, 利用网络药理学系统揭示了身痛逐瘀汤治疗痹证的多成分-多靶点-多通路协同作用模式, 该方通过同步干预免疫-炎症失衡、血液流变学异常、骨代谢紊乱及神经系统功能失调等核心病理环节, 最终实现“祛邪通络、扶正固本、调和气血”, 发挥“异病同治”的内在机制 (图 8)。本研

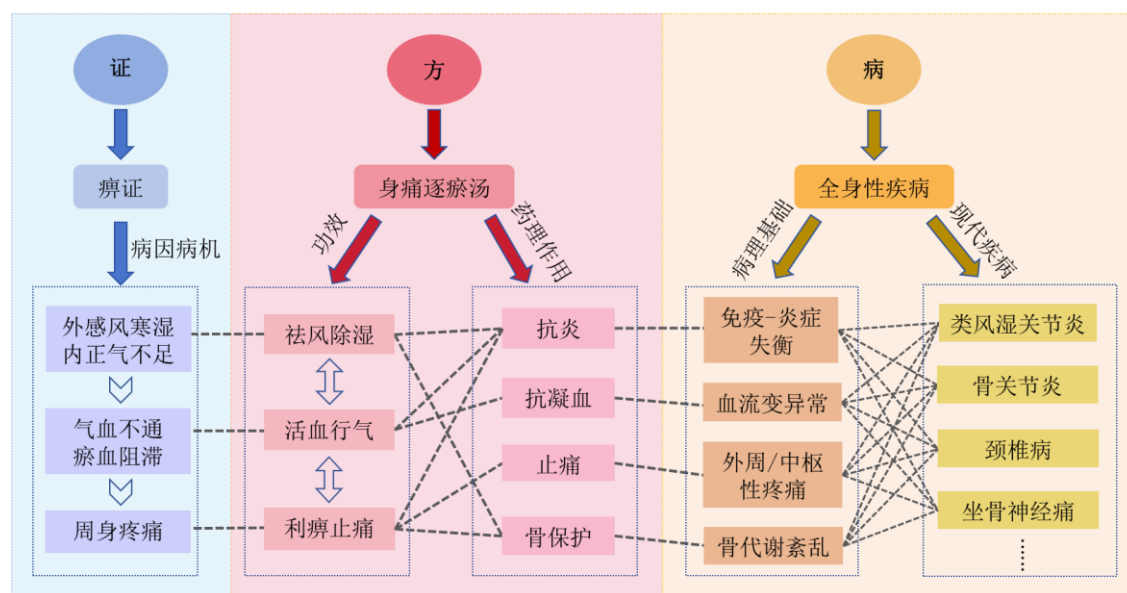


图 8 身痛逐瘀汤治疗痹证结构示意图

Fig. 8 Structural diagram of Shentong Zhuyu Decoction for treating bi syndrome

究不仅为身痛逐瘀汤“化瘀不伤正、扶正不滞邪”的配伍精髓及传统功效提供了现代科学佐证，也为该经典名方的临床精准辨证应用、二次开发及后续体内外机制验证研究奠定了坚实基础，为中医药治疗痹证的现代化、科学化研究提供了新思路与新范式。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 梁振科. 痹证中医证治规律研究 [D]. 南京: 南京中医药大学, 2012.
Liang Z K. Bi-syndrome TCM diagnosis and therapy regularity research [D]. Nanjing: Nanjing University of Chinese Medicine, 2012.
- [2] 王清任. 医林改错 [M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1966: 45.
Wang Q R. Correction of Errors in Medical Works [M]. Shanghai: Shanghai Scientific and Technical Publishers, 1966: 45.
- [3] 刘俏, 段崇波, 施娜娜, 等. 身痛逐瘀汤加味结合针灸治疗原发性骨质疏松症血瘀气滞证临床观察 [J]. 实用中医药杂志, 2025, 41(7): 1361-1363.
Liu Q, Duan C B, Shi N N, et al. Clinical observation on the treatment of primary osteoporosis with blood stasis and qi stagnation by Shentong Zhuyu Decoction combined with acupuncture [J]. J Pract Tradit Chin Med, 2025, 41(7): 1361-1363.
- [4] 李扬. 基于网络药理学和分子对接探讨身痛逐瘀汤治

疗骨质疏松症的机制研究 [D]. 武汉: 湖北中医药大学, 2022.

Li Y. Mechanism research of Shentong Zhuyu Decoction in the treatment of osteoporosis based on network pharmacology [D]. Wuhan: Hubei University of Chinese Medicine, 2022.

- [5] 胡福利, 罗建, 孟霄, 等. 基于指纹图谱与网络药理学研究补骨脂盐炙对四神丸活性成分影响 [J]. 中草药, 2025, 56(24): 8932-8943.
Hu F L, Luo J, Meng X, et al. Effect of salt-processed *Psoraleae Fructus* on active components of Sishen Wan based on fingerprint and network pharmacology [J]. Chin Tradit Herb Drugs, 2025, 56(24): 8932-8943.
- [6] 国家中医药管理局综合司, 国家药品监督管理局综合司. 关于发布《古代经典名方关键信息表(“竹叶石膏汤”等 25 首方剂)》的通知: 国中医药综科技函(2023)154 号 [EB/OL]. (2023-07-28) [2026-09-10]. <http://www.natcm.gov.cn/kejisi/gongzuodongtai/2023-07-28/31404.html>.
General Office of National Administration of Traditional Chinese Medicine, General Office of National Medical Products Administration. Notice on issuing the Key Information Table of Ancient Classic Prescriptions (25 prescriptions including Zhuye Shigao Decoction) [EB/OL]. (2023-07-28) [2026-09-10]. <http://www.natcm.gov.cn/kejisi/gongzuodongtai/2023-07-28/31404.html>.
- [7] 蔺海生, 申建军, 李兴勇, 等. 身痛逐瘀汤化学成分、药理作用及临床应用研究进展 [J]. 河南中医, 2025, 45(12): 1937-1944.

- Lin H S, Shen J J, Li X Y, et al. Research progress on the chemical components and pharmacological effects and clinical applications of generalized pain stasis-expelling decoction [J]. Henan Tradit Chin Med, 2025, 45(12): 1937-1944.
- [8] 艾楠, 刘星宇, 王馨晨, 等. 红花化学成分和药理作用的研究进展 [J]. 华西药理学杂志, 2025, 40(4): 461-465.
- Ai N, Liu X Y, Wang X C, et al. Research progress on chemical components and pharmacological effects of *Carthami Flos* [J]. West China J Pharm Sci, 2025, 40(4): 461-465.
- [9] 刘现磊, 李琨, 孙文静, 等. 川芎化学成分、药理作用及质量标志物的预测分析 [J]. 中国新药杂志, 2025, 34(15): 1569-1576.
- Liu X L, Li K, Sun W J, et al. Chemical components and pharmacological action of *Ligusticum Chuanxiong* and predictive analysis on its quality markers [J]. Chin J New Drugs, 2025, 34(15): 1569-1576.
- [10] 哈瑞雯, 周海燕, 白杨, 等. 没药化学成分研究进展 [J]. 中国现代中药, 2022, 24(7): 1374-1386.
- Ha R W, Zhou H Y, Bai Y, et al. Chemical components of Myrrha: A review [J]. Mod Chin Med, 2022, 24(7): 1374-1386.
- [11] 吴秀蓉, 肖朝江, 沈怡, 等. 植物来源抗疟倍半萜类天然产物研究 (1972—2022) [J]. 有机化学, 2023, 43(8): 2764-2789.
- Wu X R, Xiao C J, Shen Y, et al. Research progress on antimalarial natural sesquiterpenoids from plants from 1972 to 2022 [J]. Chin J Org Chem, 2023, 43(8): 2764-2789.
- [12] 杨文龙, 申子晴, 梁丽娟, 等. 五灵脂化学成分及药理作用的研究进展 [J]. 中成药, 2025, 47(10): 3371-3379.
- Yang W L, Shen Z Q, Liang L J, et al. Research progress on chemical constituents and pharmacological effects of *Troglodyterori* [J]. Chin Tradit Pat Med, 2025, 47(10): 3371-3379.
- [13] 彭乔佳. 中药羌活两种基原植物的主要活性成分差异及其体外抗炎比较研究 [D]. 雅安: 四川农业大学, 2025.
- Peng Q J. A comparative study on the differences of the main active components of two original plants of the traditional Chinese medicine Qianghuo and their anti-inflammatory effects *in vitro* [D]. Ya'an: Sichuan Agricultural University, 2025.
- [14] 商烨. 地龙活血化瘀功效相关的活性质量标志物筛选研究 [D]. 天津: 天津中医药大学, 2022.
- Shang Y. Study on quality marker of pheretima related promoting blood circulation and removing blood stasis activity [D]. Tianjin: Tianjin University of Traditional Chinese Medicine, 2022.
- [15] 张艳, 曹唯仪, 张艳虹, 等. 基于 UPLC-Q-TOF-MS-E 技术分析栀子-川芎药对化学成分及入血成分 [J]. 中药材, 2022, 45(7): 1638-1643.
- Zhang Y, Cao W Y, Zhang Y H, et al. Analysis of chemical components and blood components of *Gardenia-Chuanxiong* drug pair based on UPLC-Q-TOF-MS-E technology [J]. J Chin Med Mater, 2022, 45(7): 1638-1643.
- [16] 陈梅. 芍药甘草汤入血成分的研究 [D]. 南京: 南京中医药大学, 2010.
- Chen M. Study on constituents absorbed into blood after oral administration of Shao-yao Gan-cao Tang [D]. Nanjing: Nanjing University of Chinese Medicine, 2010.
- [17] 韩永光, 谭雅兰, 张超云, 等. 牛膝化学成分和药理作用研究进展及其质量标志物 (Q-Marker) 预测分析 [J]. 天然产物研究与开发, 2024, 36(8): 1432-1444.
- Han Y G, Tan Y L, Zhang C Y, et al. Research progress on chemical components and pharmacological effects of *Achyranthes bidentata* and prediction and analysis of its quality markers [J]. Nat Prod Res Dev, 2024, 36(8): 1432-1444.
- [18] 于明. 香附抗炎镇痛药效物质基础和质量控制研究 [D]. 济南: 山东中医药大学, 2023.
- Yu M. Study on pharmacodynamic substances and quality control method of *Rhizoma Cyperi* [D]. Jinan: Shandong University of Traditional Chinese Medicine, 2023.
- [19] 杜健, 杨铭, 李成. 身痛逐瘀汤治疗类风湿关节炎瘀血阻络证的临床观察 [J]. 黑龙江中医药, 2012, 41(5): 18-19.
- Du J, Yang M, Li C. Clinical observation on Shentong Zhuyu decoction in the treatment of rheumatoid arthritis with blood stasis blocking collateral syndrome [J]. Heilongjiang J Tradit Chin Med, 2012, 41(5): 18-19.
- [20] 李军, 刘强, 颜旺军. 身痛逐瘀汤加味对类风湿关节炎患者血液流变学与微循环的影响 [J]. 中医药学报, 2010, 38(3): 100-103.
- Li J, Liu Q, Xie W J. Shentongzhuyu decoction have influence upon blood rheology and microcirculation of rheumatoid arthritis patients [J]. Acta Chin Med Pharmacol, 2010, 38(3): 100-103.
- [21] 丁晓明, 刘建民, 牟艳杰, 等. 身痛逐瘀汤联合小针刀治疗强直性脊柱炎患者的疗效及对血清 BALP、CX3CL1、sPD-1 的影响 [J]. 临床和实验医学杂志, 2026, 25(2): 147-151.
- Ding X M, Liu J M, Mou Y J, et al. Efficacy of Shentong Zhuyu Decoction combined with small needle knife on

- ankylosing spondylitis patients and its impacts on serum BALP, CX3CL1, sPD-1 [J]. J Clin Exp Med, 2026, 25(2): 147-151.
- [22] 张冰彬, 董克芳. 身痛逐瘀汤加减治疗中轴型强直性脊柱炎的临床观察 [J]. 中医临床研究, 2019, 11(31): 57-59.
Zhang B B, Dong K F. Observation on treating Axia-ankylosing spondylitis with the Shentong Zhuyu decoction [J]. Clin J Chin Med, 2019, 11(31): 57-59.
- [23] 江占亮. 身痛逐瘀汤治疗腰椎间盘突出症(瘀血阻滞型)的疗效观察 [D]. 长春: 长春中医药大学, 2022.
Jiang Z L. Therapeutic effect of Shentong Zhuyu Decoction on lumbar disc herniation (blood stasis block type) [D]. Changchun: Changchun University of Chinese Medicine, 2022.
- [24] 卢贵财, 关子欣, 郭家威. 身痛逐瘀汤对腰椎间盘突出症患者临床疗效、疼痛程度分析 [J/OL]. 心电图杂志(电子版), 2019, 8(2): 70-72.
Lu G C, Guan Z X, Guo J W. Analysis of clinical efficacy and pain degree of Shentong Zhuyu Decoction on patients with lumbar disc herniation [J/OL]. J Electrocardiogram Electron Ed, 2019, 8(2): 70-72.
- [25] 陈永威, 杨学义. 身痛逐瘀汤治疗膝骨关节炎的作用机制及临床研究进展 [J]. 中医学, 2026, 15(3): 260-267.
Chen Y W, Yang X Y. Shentong Zhuyu decoction for knee osteoarthritis: Mechanism of action and advances in clinical research [J]. Tradit Chin Med, 2026, 15(3): 260-267.
- [26] 张丽锋. 痹证的证治经验 [J]. 中国医药指南, 2014, 12(23): 284-285.
Zhang L F. Experience in syndrome differentiation and treatment of arthralgia syndrome [J]. Guide China Med, 2014, 12(23): 284-285.
- [27] 刘艳梅, 陶晨璐, 刘闪闪, 等. 经典名方身痛逐瘀汤基准样品量值传递研究 [J]. 中草药, 2025, 56(13): 4654-4667.
Liu Y M, Tao C L, Liu S S, et al. Research on quantitative transmitting of classical prescription Shentong Zhuyu Decoction substance benchmark [J]. Tradit Chin Herb Drugs, 2025, 56(13): 4654-4667.
- [28] 谢晨栖, 贾萍, 胡兰. 类风湿关节炎发病机制及药物治疗的研究进展 [J]. 中国现代医生, 2024, 62(20): 145-148.
Xie C X, Jia P, Hu L. Research progress on pathogenesis and drug therapy of rheumatoid arthritis [J]. China Mod Dr, 2024, 62(20): 145-148.
- [29] 韦小双. 冯兴华教授运用身痛逐瘀汤治疗痹病经验探析 [D]. 北京: 北京中医药大学, 2012.
Wei X S. Analysis of Professor Feng Xinghua's experience in treating arthralgia syndrome with Shentong Zhuyu Decoction [D]. Beijing: Beijing University of Chinese Medicine, 2012.
- [30] 王帆帆, 刘健, 方妍妍, 等. 中医药改善类风湿关节炎血瘀证的研究进展 [J]. 风湿病与关节炎, 2022, 11(9): 74-77.
Wang F F, Liu J, Fang Y Y, et al. Research progress in improving blood stasis syndrome of rheumatoid arthritis with traditional Chinese medicine [J]. Rheum Arthritis, 2022, 11(9): 74-77.
- [31] 周迎晨, 封彦飞, 田诗旸, 等. 基于网络药理学和分子对接探究丹参治疗血瘀证的分子机制 [J]. 动物医学进展, 2025, 46(8): 51-57.
Zhou Y C, Feng Y F, Tian S Y, et al. Exploring the molecular mechanism of Salvia miltiorrhiza in the treatment of blood stasis based on network pharmacology and molecular docking [J]. Prog Vet Med, 2025, 46(8): 51-57.
- [32] Gambaryan S. The role of NO/sGC/cGMP/PKG signaling pathway in regulation of platelet function [J]. Cells, 2022, 11(22): 3704.
- [33] 黄宏, 肖珉, 李婕, 等. 从“瘀热”理论探讨流体剪切应力与动脉粥样硬化的关系 [J]. 中医临床研究, 2023, 15(32): 30-34.
Huang H, Xiao M, Li J, et al. Discussion on the relationship between fluid shear stress and atherosclerosis from the theory of stagnant-heat [J]. Clin J Chin Med, 2023, 15(32): 30-34.
- [34] 张磊, 吴沅峰, 王朝旭, 等. 从毒论治风湿病骨与软骨损害的临床探析 [J]. 天津中医药, 2017, 34(4): 232-235.
Zhang L, Wu Y H, Wang C X, et al. Clinical analysis of treating bone and cartilage damage of rheumatic diseases from toxin [J]. Tianjin J Tradit Chin Med, 2017, 34(4): 232-235.
- [35] 王伟强. 温阳益肾通络方对类风湿关节炎风寒湿痹证之骨破坏的临床研究 [D]. 昆明: 云南中医药大学, 2022.
Wang W Q. Clinical study of Wenyang Yishen Tongluo Decoction on bone destruction of rheumatoid arthritis with wind-cold-dampness arthralgia syndrome [D]. Kunming: Yunnan University of Traditional Chinese Medicine, 2022.
- [36] 张曙琼, 邵粉丽, 孙洋. 强直性脊柱炎发病机制及药物调控研究进展 [J]. 中国药理学通报, 2022, 38(12): 1761-1766.
Zhang S Q, Shao F L, Sun Y. Advances in mechanisms for ankylosing spondylitis and drug regulation [J]. Chin

- Pharmacol Bull, 2022, 38(12): 1761-1766.
- [37] Shao Z G, Wang T Q, Yan X M, et al. Identification of a RANKL/TNF- α dual-inhibitor as a potential disease-modifying agent for the treatment of knee osteoarthritis [J]. J Med Chem, 2025, 68(10): 10216-10237.
- [38] 张仕衡, 杨宇峰, 石岩. 痹证之病因病机理论框架结构研究 [J]. 辽宁中医药大学学报, 2020, 22(11): 54-56.
Zhang S H, Yang Y F, Shi Y. Study on theoretical framework of etiology and pathogenesis of *bi* syndrome [J]. J Liaoning Univ Tradit Chin Med, 2020, 22(11): 54-56.
- [39] 张瑛, 王韵. TRPV1: 一种同时参与慢性痛外周敏化和疼痛中枢调制的重要分子 [J]. 生理学报, 2017, 69(5): 677-684.
Zhang Y, Wang Y. TRPV1: An important molecule involved in the peripheral sensitization during chronic pain and central pain modulation [J]. Acta Physiol Sin, 2017, 69(5): 677-684.
- [40] 钟义. 基于 RNA-seq 探究身痛逐瘀汤对神经病理性疼痛的潜在作用靶点 [D]. 武汉: 湖北中医药大学, 2020.
Zhong Y. Exploring the potential target of Shentong Zhuyu Decoction on neuropathic pain based on RNA-seq technology [D]. Wuhan: Hubei University of Chinese Medicine, 2020.
- [41] 张媛婧, 刘春华, 胡慧敏, 等. 基于网络药理学和分子对接预测身痛逐瘀汤治疗神经病理性疼痛的作用机制研究 [J]. 中国疼痛医学杂志, 2024, 30(4): 263-273.
Zhang Y J, Liu C H, Hu H M, et al. Prediction of the mechanism of Shentong Zhuyu Decoction in treating neuropathic pain based on network pharmacology and molecular docking [J]. Chin J Pain Med, 2024, 30(4): 263-273.

[责任编辑 齐静雯]