

# 基于 UPLC-Q-Exactive-MS/MS 技术探讨泻白散中甘草和粳米配伍的科学内涵

张媛璐, 王锐, 刘宇心, 王新蕊, 邱野, 李军鸽\*, 邱智东\*

长春中医药大学, 吉林 长春 130117

**摘要:** **目的** 探究泻白散中佐使药甘草和粳米配伍的合理性和科学性。**方法** 按照古代工艺制备泻白散, 采用 UPLC-Q-Exactive-MS/MS 技术, 对泻白散全方、缺甘草方、缺粳米方、缺甘草和粳米方样品开展化学成分研究, 确定共有化学成分和差异化学成分, 以泻白散全方化学成分为基础, 以共有桑白皮和地骨皮的化学成分为研究对象, 进行成分归类研究, 通过计算各类成分峰面积占总峰面积的相对权重, 研究 4 组样品中化学成分种类的动态变化规律, 结合主成分分析 (principal component analysis, PCA) 和正交偏最小二乘法-判别分析 (orthogonal partial least squares-discriminant analysis, OPLS-DA) 筛选影响显著变化的化学成分, 确定甘草和粳米药对在泻白散中配伍后化学成分种类的变化和影响变化的差异成分, 确定差异化合物。**结果** 泻白散全方共鉴定化学成分 158 个, 包括黄酮类、有机酸类、生物碱类、三萜类及皂苷类、香豆素类、杂环、苯及取代物类、核苷类、酚类、醌类、有机氧化物类以及其他类共 13 类化合物。其中 158 个成分中归属于共有药材桑白皮、地骨皮的化学成分 125 个, 经筛选后确定差异成分 22 个。粳米能促进有机酸类、酚类化合物溶出, 抑制黄酮类、生物碱类、其他类化合物的溶出。甘草能促进黄酮类、生物碱类、酰胺类化合物的溶出, 抑制有机酸类和杂环类化合物的溶出, 甘草和粳米对黄酮类和生物碱类有相互制衡的作用。缺甘草和粳米方与泻白散全方对比, 黄酮类、生物碱类相对权重降低, 可见甘草和粳米配伍后泻白散化学成分发生变化, 根据 PCA 和 OPLS-DA 结果, 以变量重要性投影 (variable importance in projection, VIP) 值 >1 为筛选条件, 确定影响成分变化的 28 主要种差异化学成分, 包括 boldenone undecylenate、甜菜碱、桑皮苷 A、L-焦谷氨酸、L-脯氨酸、地骨皮甲素等。**结论** 泻白散中甘草和粳米配伍具有合理性和科学性, 二者配伍有助于方中黄酮类和生物碱类成分释放均衡, 故甘草和粳米对泻白散处方药味加减缺一不可, 为后续泻白散处方研究及制剂研发奠定基础。

**关键词:** 经典名方; 泻白散; 甘草; 粳米; 桑白皮; 地骨皮; UPLC-Q-Exactive-MS/MS 技术; 变量重要性投影; boldenone undecylenate; 甜菜碱; 桑皮苷 A; L-焦谷氨酸; L-脯氨酸; 地骨皮甲素

中图分类号: R283.6 文献标志码: A 文章编号: 0253-2670(2025)19-7003-16

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2025.19.013

## Exploring scientific connotations of compatibility of *Glycyrrhizae Radix et Rhizoma* and *Oryzae Sativae Semen* in Xiebai San based on UPLC-Q-Exactive-MS/MS technology

ZHANG Yuanlu, WANG Rui, LIU Yuxin, WANG Xinrui, QIU Ye, LI Junge, QIU Zhidong

Changchun University of Traditional Chinese Medicine, Changchun 130117, China

**Abstract: Objective** Explore the rationality and scientificity of the compatibility of the assistant and envoy herbs, Gancao (*Glycyrrhizae Radix et Rhizoma*, GRR) and Jingmi (*Oryzae Sativae Semen*, OSS), in Xiebai San (泻白散). **Methods** Prepare Xiebai San according to ancient craftsmanship. Utilize UPLC-Q-Exactive-MS/MS technology to conduct a study on the chemical components of samples of the complete Xiebai San formula, the formula lacking GRR, the formula lacking OSS, and the formula lacking both GRR and OSS. Identify the common chemical components and the differential chemical components. Based on the chemical constituents of the complete Xiebai Powder formula, the chemical constituents of the shared Sangbaipi (*Mori Cortex*) and Digupi (*Lycii Cortex*) were

收稿日期: 2025-05-26

基金项目: 国家青年科学基金项目 (82404842)

作者简介: 张媛璐 (2002—), 女, 吉林白城人, 硕士研究生, 从事中药药剂学研究。Tel: (0431)86763972 E-mail: 15844675576@163.com

\*通信作者: 李军鸽 (1990—), 女, 吉林柳河人, 实验师, 从事中药制剂与新药开发研究。Tel: (0431)86763972 E-mail: 407332695@qq.com

邱智东 (1965—), 男, 吉林长岭人, 教授, 从事中药基础研究与新药研发。Tel: (0431)86763972 E-mail: qzdczy@163.com

used as the research objects to carry out the constituent categorization study, and by calculating the relative weights of the peak areas of each type of constituents to the total peak area, we studied the dynamic change pattern of the types of chemical constituents in the four groups of samples, and combined with the principal component analysis (PCA) and the orthogonal partial least squares-discriminant analysis (OPLS-DA) to screen for the influence of the significant changes of the chemical components, to determine the changes in chemical component species and the differential components affecting the changes after the pairing of licorice and japonica rice in diarrhea white powder, and to identify the differential compounds. **Results** A total of 158 chemical components were identified in the complete Xiebai San formula, including 13 classes of compounds such as flavonoids, organic acids, alkaloids, triterpenoids and saponins, coumarins, heterocycles, benzene and its substitutes, nucleosides, phenols, quinones, organic oxides, and others. Among the 158 components, 125 chemical components were attributed to the common herbs *Mori Cortex* and *Lycii Cortex*, and 22 differential components were identified after screening. OSS can promote the dissolution of organic acids and phenols while inhibiting the dissolution of flavonoids, alkaloids, and other compounds. GRR can promote the dissolution of flavonoids, alkaloids, and amides while inhibiting the dissolution of organic acids and heterocycles. GRR and OSS have a mutually restrictive effect on flavonoids and alkaloids. Compared with the complete Xiebai San formula, the relative weights of flavonoids and alkaloids decreased in the formula lacking both GRR and OSS. It can be seen that the chemical components of Xiebai San changed after the compatibility of GRR and OSS. According to the results of PCA and OPLS-DA, with the variable importance in projection (VIP) value > 1 as the screening criterion, 28 main differential chemical components that affect the component changes were determined, including boldenone undecylenate, betaine, mulberroside A, *L*-pyroglutamic acid, *L*-proline, and kukoamine A. **Conclusion** The compatibility of GRR and OSS in Xiebai San is rational and scientific. Their combination helps to achieve a balanced release of flavonoids and alkaloids in the formula. Therefore, both GRR and OSS are indispensable when adding or subtracting herbs in the Xiebai San prescription. This study lays a foundation for subsequent research on the Xiebai San prescription and the development of its preparations.

**Key words:** classical famous prescription; Xiebai San; *Glycyrrhizae Radix et Rhizoma*; *Oryzae Sativae Semen*; *Mori Cortex*; *Lycii Cortex*; UPLC-Q-Exactive-MS/MS technology; variable importance projection; boldenone undecylenate; betaine; mulberroside A; *L*-pyroglutamic acid; *L*-proline; kukoamine A

泻白散是 2018 年国家药品监督管理局下发的《古代经典名方目录（第一批）》100 首之一<sup>[1]</sup>，其记载于宋代钱乙的《小儿药证直诀》<sup>[2]</sup>，处方由桑白皮、地骨皮、甘草和粳米 4 味中药组成，具有清泄肺热、止咳平喘之功效。为治小儿肺盛、气急喘咳的中药经典方剂<sup>[3-4]</sup>。明代李时珍曾将其称为“泻肺诸方之准绳”。方中桑白皮为君药，其性寒，味辛甘，清泄肺热、化痰止咳的作用；地骨皮为臣药，性寒味甘，可清肺火，具有养阴的功效。甘草、粳米味甘性平，能缓解桑白皮、地骨皮这 2 味中药的药性，为佐使药，4 味中药合用可起到标本兼治的作用<sup>[5-7]</sup>。处方中粳米为禾本科稻属植物稻（粳稻）*Oryza sativa* L. 去壳的种仁，味甘性平，入脾、胃经，含淀粉、蛋白质等多种营养成分，具补中益气、除烦止泻之功<sup>[8-9]</sup>。甘草为豆科甘草属植物甘草 *Glycyrrhiza uralensis* Fisch. 的干燥根与根茎，味甘性平，入心、肺、胃经，具有补脾益气、祛痰止咳、调和诸药之功<sup>[10-11]</sup>。泻白散中粳米清肺养胃，与甘草配伍起培土生金之效<sup>[12-13]</sup>。

目前，随着国家经典名方复方制剂新药的研发思路和方法逐渐趋于完善，许多经典名方复方制剂已获得审批上市资格，如苓桂术甘汤、芍药甘草汤、

枇杷清肺饮等，但还有部分经典名方制剂研发遇到各种技术瓶颈，如处方药味特殊性质不利于剂型转化等问题，这些经典名方值得研究者们重点关注。泻白散含有特殊药味粳米，在制剂研究过程中发现，粳米药味不易滤过，煎煮时间长易粘连糊底，不利于剂型转化和规模生产，导致经典名方泻白散制剂开发受阻，目前有关泻白散中粳米存在的必要性有争议，有研究报道<sup>[14]</sup>，通过对比加减粳米所得汤剂的理化性质，发现泻白散中粳米降低了活性成分的溶出，对汤剂加热过程中主要活性成分的热稳定性没有影响，增加了泻白散样品冻干粉复溶后不溶物的含量等不利于制剂开发的因素，建议泻白散在古代经典名方复方制剂开发时可以去除粳米。从配伍角度来看，泻白散中甘草和粳米同属“佐使”之药对<sup>[15-16]</sup>，简单从物理角度考虑去除粳米的科学依据不足。

甘草与粳米药对在配伍后化学成分方面对泻白散的影响未见报道。故本研究利用 UPLC-Q-Exactive-MS/MS 技术对泻白散的化学成分展开探究，结合中药成分数据库、高分辨质谱信息库以及相关参考文献，对化学成分进行鉴定。通过主成分分析（principal component analysis, PCA）、正交偏

最小二乘法-判别分析 (orthogonal partial least squares-discriminant analysis, OPLS-DA) 等方法找到影响成分变化的差异化合物, 来探究佐使药甘草和粳米配伍的科学性与合理性。为经典名方泻白散处方研究和制剂开发提供依据, 也为其他含有特殊药材的经典名方研究提供思路。

## 1 仪器与材料

### 1.1 仪器

Q-Exactive HF 型高分辨质谱、Thermo Vanquish UHPLC 型超高效液相色谱仪, 美国赛默飞世尔科技公司; AUW120D 型电子分析天平, 日本岛津公司; KQ-100DE 型台式数控超声波清洗器, 昆山市超声仪器有限公司; TGL-16M 型高速冷冻离心机, 长沙高新技术产业开发区湘仪离心机仪器有限公司; JXFSTPRP-48 型全自动样品快速研磨仪, 上海净信实业发展有限公司; FD-1A-50 型冷冻干燥机, 上海比朗仪器制造有限公司; JC-2500 型多管旋混仪, 金坛区白塔金昌实验仪器厂。

### 1.2 试药与药材

对照品地骨皮乙素, 批号 P23F12F139847, 质量分数 98.0%, 购自上海源叶生物科技有限公司; 对照品甘草苷 (批号 111610-201908, 质量分数 95.0%)、甘草酸 (批号 110731-202122, 质量分数 94.4%)、绿原酸 (批号 110753-202119, 质量分数 96.3%)、桑皮苷 A (批号 112086-202402, 质量分数 96.4%), 均购自中国食品药品检定研究院; 甲醇、乙腈、异丙醇均购于德国默克集团; 2-氯苯丙氨酸, 上海源叶生物科技有限公司; 甲酸, 成都西亚化工股份有限公司; 以上试剂均为质谱纯。水为超纯水。

炒桑白皮 (批号 XS-20220423-01~03, 产地河南省温县武德镇)、焙地骨皮 (批号 XD-20220421-01~03; 产地宁夏回族自治区中宁县宁安镇)、炒甘草 (批号 XG-20220620-01~03, 产地内蒙古赤峰市松山区当铺地满族乡)、粳米 (批号 XJ-20220714-01~03, 产地河北省保定市安国市大五女镇), 以上药材均购自吉林国安药业有限公司, 由长春中医药大学药学院中药鉴定与炮制教研室主任翁丽丽教授鉴定, 桑白皮为桑科桑属植物桑 *Morus alba* L. 的干燥根皮, 地骨皮为茄科枸杞属植物宁夏枸杞 *Lycium barbarum* L. 的干燥根皮, 甘草为豆科甘草属植物甘草 *G. uralensis* Fisch. 的干燥根和根茎。粳米为禾本科稻属植物稻 (粳稻) *O. sativa* L. 的去壳的种仁。

## 2 方法与结果

### 2.1 样品的制备

《小儿药证直诀》原文记载: “地骨皮 (洗去土, 焙)、桑白皮 (细锉炒黄) 各一两、甘草 (炙) 一钱。上剉散, 入粳米一撮, 水二小盏, 煎七分, 食前服”。经现代剂量考证和换算, 泻白散全方 (A) 样品制备: 取炒桑白皮 8.86 g、焙地骨皮 8.86 g、炒甘草 0.89 g、粳米 6 g, 加水 900 mL, 煎药壶武火煎至沸腾后文火保持微沸 18 min, 100 目滤布趁热滤过, 所得滤液约 540 mL。缺甘草方 (B) 样品制备: 取炒桑白皮 8.86 g、焙地骨皮 8.86 g、粳米 6 g, 加水 900 mL, 煎药壶武火煎至沸腾后文火保持微沸 18 min, 100 目滤布趁热滤过, 所得滤液约 540 mL。缺粳米方 (C) 样品制备: 取炒桑白皮 8.86 g、焙地骨皮 8.86 g、炒甘草 0.89 g, 加水 900 mL, 煎药壶武火煎至沸腾后文火保持微沸 18 min, 100 目滤布趁热滤过, 所得滤液约 540 mL。缺甘草和粳米方 (D) 样品制备: 取炒桑白皮 8.86 g, 焙地骨皮 8.86 g, 加水 900 mL, 煎药壶武火煎至沸腾后文火保持微沸 18 min, 100 目滤布趁热滤过, 所得滤液约 540 mL。每个方制备 3 批样品。

### 2.2 基于 UPLC-Q-Exactive-MS/MS 技术的化学成分分析

**2.2.1 供试品溶液制备** 分别吸取“2.1”项下各样品溶液 0.5 mL, 置于 2 mL 离心管中, 加 1 mL 甲醇涡旋 10 min 混匀样品, 4 °C 下 12 000 r/min 离心 (离心半径 3.8 cm) 10 min, 取上清液, 0.22 μm 滤膜滤过, 滤液加 100 μg/mL 内标溶液 (2-氯苯丙氨酸), 制成质量浓度为 1 mg/L 的溶液, 备用。

**2.2.2 混合对照品溶液制备** 分别称取甘草苷、甘草酸、绿原酸、地骨皮乙素和桑皮苷 A 对照品适量, 制成各含 0.1 mg/mL 的混合对照品溶液, 备用。

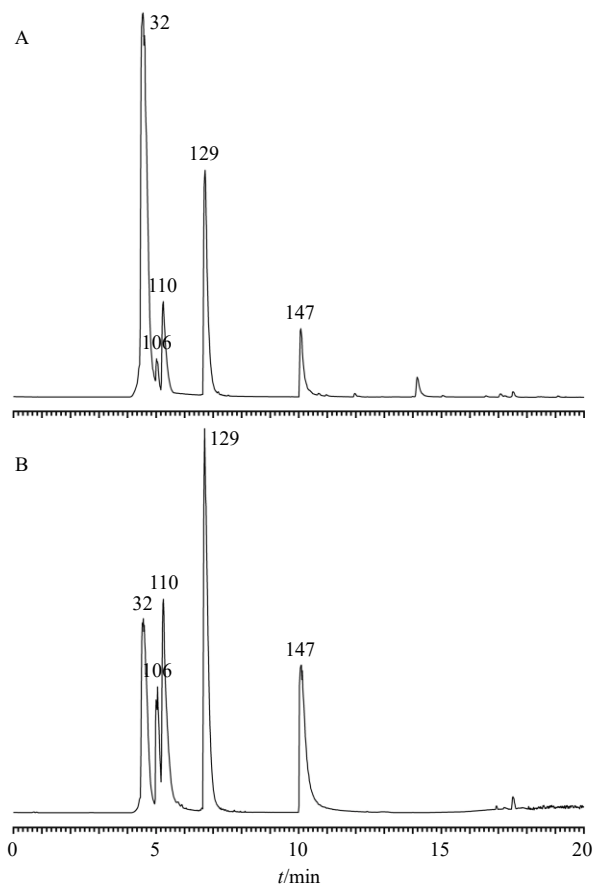
**2.2.3 色谱条件** 色谱柱为 Zorbax Eclipse C<sub>18</sub> 柱 (100 mm×2.1 mm, 1.8 μm); 流动相为 0.1% 甲酸水溶液-乙腈, 梯度洗脱: 0~6 min, 5%~30% 乙腈; 6~12 min, 30%~78% 乙腈; 12~17 min, 78%~95% 乙腈; 17~20 min, 95%~5% 乙腈; 进样量 2 μL; 体积流量 0.3 mL/min; 柱温 30 °C。

**2.2.4 质谱条件** 正、负离子模式参数: 加热器温度 325 °C; 鞘气体积流量 45 arb; 辅助气体积流量 15 arb; 吹扫气流速 1 arb; 电喷雾电压 3.5 kV; 毛细管温度 330 °C; S-Lens RF Level 55%; 扫描模式: 一级全扫描 ( $m/z$  100~1 500), 二级质谱扫描 (dd-

MS<sup>2</sup>, Top N=5); 分辨率 120 000 (一级质谱) 和 60 000 (二级质谱); 高能量碰撞解离 (high energy collision dissociation, HCD) 碰撞模式。

**2.2.5 样品测定与数据处理** 取“2.2.1”项下各供试品溶液和“2.2.2”项下混合对照品溶液, 按照“2.2.3”和“2.2.4”项下条件进行测定分析, 记录总离子流图。结果如图 1、2 所示。在 UPLC-Q-Exactive-MS/MS 的正、负离子模式下, 运用 Compound Discoverer 3.3 软件, 对全方供试品溶液有关数据进行保留时间校正、峰识别及峰提取等处理操作。借助二级质谱所提供的信息, 筛选质量误差 ( $\delta$ ) 为  $\pm 5$  范围内的化合物, 利用 Thermo mzCloud 在线数据库与 Thermo mzValut 本地数据库, 将分析结果与 Web of Science、PubMed、Mass Bank 等文献中的数据进行比对验证。

**2.2.6 化学成分分析** 泻白散全方 A 中共鉴定 158



32-地骨皮乙素; 106-桑皮苷 A; 110-绿原酸; 129-甘草苷; 147-甘草酸。

32-kukoamine B; 106-morin A; 110-chlorogenic acid; 129-liquiritin; 147-glycyrrhizic acid.

图 1 混合对照品的正 (A)、负 (B) 离子模式总离子流图

Fig. 1 Total ion flow diagram of positive (A) and negative (B) ion modes of mixed reference substances

个化学成分, 其中包括 50 个有机酸类、30 个黄酮类、15 个三萜及皂苷类、14 个杂环类、10 个生物碱类、10 个香豆素类、9 个苯及其取代物类、3 个核苷类、3 个酰胺类、2 个醌类、1 个酚类、1 个有机氧化物类和 10 个其他类化合物。结果见表 1。

方中主要化合物结构裂解途径以化合物 **129**、**111**、**39** 为例, 化合物 **129** 为  $t_R=6.718$  min, 负离子模式  $[M-H]^-$   $m/z$  为 417.126 5 ( $\delta$  0.26), 深入剖析推测出其分子式为  $C_{21}H_{22}O_9$ , 推断化合物丢失了 1 分子葡萄糖得到  $m/z$  255.066 2 碎片离子, 苷元进一步发生 CRA 裂解, 得到  $m/z$  135.008 1、119.049 4 2 个碎片离子, 结合对照品及相关文献资料<sup>[17-18]</sup>, 确认该化合物为黄酮类化合物甘草苷, 裂解情况如图 3 所示。化合物 **110** 为  $t_R=5.392$  min, 负离子模式  $[M-H]^-$   $m/z$  为 353.095 2 ( $\delta$  0.37), 深入剖析推测出其分子式为  $C_{16}H_8O_9$ , 推测裂解过程可能为①丢失 1 分子  $C_7H_{10}O_5$  得到  $m/z$  179.034 4 离子碎片, 碎片进一步分别丢失 1 分子  $CO_2$  生成  $m/z$  135.044 4 碎片离子。②环开裂形成  $m/z$  191.055 6 离子碎片, 进一步丢失 1 分子  $H_2O$  形成  $m/z$  173.045 0 离子碎片。结合对照品及相关文献<sup>[19-20]</sup>资料, 确认该化合物为有机酸类化合物绿原酸。裂解情况如图 4 所示。化合物 **39** 为  $t_R=5.140$  min, 正离子模式  $[M+H]^+$   $m/z$  为 531.310 1 ( $\delta$  -0.73), 分子式为  $C_{28}H_{42}N_4O_6$ , 其裂解过程可能是①发生  $N_1$  位酰胺键断裂生产  $m/z$  367.270 0、165.054 6 2 个碎片离子, ②在肽键处断裂, 生成碎片离子  $m/z$  165.054 6 离子碎片。③发生  $N_5$  位酰胺键断裂生产  $m/z$  222.112 3 离子, 碎片进一步断裂酰胺键形成  $m/z$  165.054 6。结合对照品及相关文献资料<sup>[21-22]</sup>, 确认该化合物为生物碱类化合物地骨皮乙素。裂解情况如图 5 所示。

**2.2.7 化学成分种类分析** 由于 A、B、C、D 4 个方中都有君药桑白皮和臣药地骨皮, 故将“2.2.6”项下鉴定的 158 个成分中归属于共有药材桑白皮、地骨皮的 125 个化学成分进行种类分析, 为确保 4 组样品比较的准确性和可靠性, 计算各方中不同成分峰面积值在总峰面积中的比值, 即峰面积相对权重, 结果见表 2。确保在相同的分析维度上, 研究各组化学成分种类的动态变化规律, 以泻白散全方为基础, 对已鉴定出的 13 类化合物, 进行分析, B 组和 A 组比较, 机酸类、酚类化合物相对权重值增大, 黄酮类、生物碱类、其他类相对权重值减小, 说明粳米可以促进有机酸类、酚类化合物溶出, 抑

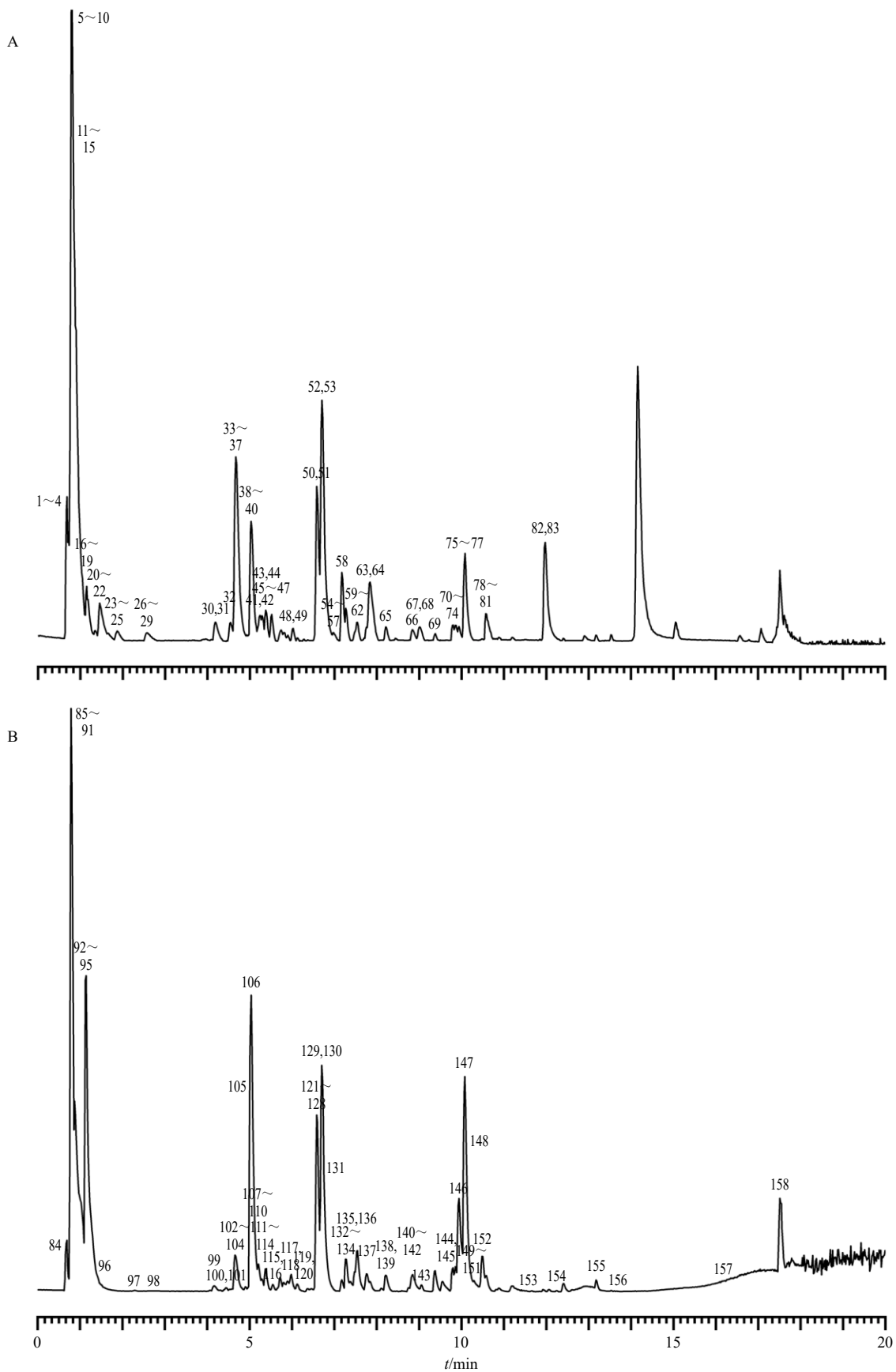


图 2 泻白散全方的正 (A)、负 (B) 离子模式总离子流图

Fig. 2 Total ion flow diagram of positive (A) and negative (B) ion modes of complete Xiebai powder formula

表1 泻白散全方化学成分分析鉴定结果

Table 1 Results of chemical composition analysis and identification of complete Xiebai powder formula

峰号	$t_R$ / min	名称	分子式	$M_w$ ( $m/z$ )	离子 模式	离子碎片 ( $m/z$ )	误差 ( $\times 10^{-6}$ )	化合物分类	归属药材
1	0.69	亚氨基二甲硫醇 <sup>[23]</sup>	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> NS <sub>2</sub>	109.001 6	[M+H] <sup>+</sup>	86.993 1, 82.014 3, 68.982 7	-3.33	其他类	桑白皮
2	0.73	1-脱氧野尻霉素 <sup>[24]</sup>	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>4</sub>	163.084 5	[M+H] <sup>+</sup>	146.081 1, 128.070 6, 110.060 3	0.49	生物碱类	桑白皮
3	0.77	DL-精氨酸 <sup>[24]</sup>	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	174.111 7	[M+H] <sup>+</sup>	158.092 4, 130.097 5, 116.070 8	0.21	有机酸类	桑白皮、地骨皮、甘草
4	0.77	胆碱 <sup>[23]</sup>	C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> NO	103.100 0	[M+H] <sup>+</sup>	94.255 0, 87.633 0, 75.679 9	3.20	有机酸类	桑白皮、地骨皮、甘草
5	0.80	N-羟基丁二酰亚胺 <sup>[23]</sup>	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	115.027 0	[M+H] <sup>+</sup>	102.586 2, 94.393 1, 70.065 8	0.39	杂环类	地骨皮
6	0.80	L-天门冬氨酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>4</sub>	133.037 5	[M+H] <sup>+</sup>	116.070 8, 98.060 4, 68.050 1	-0.01	有机酸类	桑白皮、地骨皮、甘草
7	0.80	蔗糖 <sup>[25]</sup>	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub>	342.115 9	[M+H] <sup>+</sup>	321.049 0	-0.94	其他类	桑白皮、甘草
8	0.80	甜菜碱 <sup>[26]</sup>	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	117.079 2	[M+H] <sup>+</sup>	102.838 0, 59.073 6	1.45	生物碱类	桑白皮、地骨皮
9	0.80	dimethyl 3,3'-heptadec-1-ene-1,1-diylbis (5-bromo-6-methoxybenzoate) <sup>[23]</sup>	C <sub>35</sub> H <sub>48</sub> Br <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	722.178 5	[M+H] <sup>+</sup>	362.096 5, 281.070 3, 272.065 0, 200.044 1, 191.038 7, 182.033 4	-4.46	苯及其取代衍生物	桑白皮、地骨皮
10	0.81	L-脯氨酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	115.063 5	[M+H] <sup>+</sup>	102.157 8, 98.060 4, 70.065 7	1.86	有机酸类	地骨皮
11	0.82	N-甲基己内酰胺 <sup>[23]</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> NO	127.099 8	[M+H] <sup>+</sup>	110.096 7, 93.076 1, 82.065 6	0.50	酰胺类	地骨皮
12	0.87	D-哌可酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	129.079 1	[M+H] <sup>+</sup>	84.081 3, 70.065 7	0.73	有机酸类	桑白皮、地骨皮
13	0.91	N-[(1S)-1-carboxy-3-methylbutyl] carbamoyl]-L-glutamic acid <sup>[23]</sup>	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	304.126 8	[M+H] <sup>+</sup>	287.123 4, 269.112 9, 227.102 5, 191.081 3	-0.95	有机酸类	桑白皮、地骨皮
14	1.10	4-胍基丁酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	145.085 1	[M+H] <sup>+</sup>	128.080 6, 104.070 9, 87.044 5	-0.34	有机酸类	桑白皮、地骨皮
15	1.14	水苏碱 <sup>[23]</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>	143.094 6	[M+H] <sup>+</sup>	126.091 4, 102.055 3, 84.081 3	-0.03	生物碱类	地骨皮
16	1.19	盐酸水苏碱 <sup>[23]</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>	143.094 7	[M+H] <sup>+</sup>	102.055 3, 84.081 3	0.21	生物碱类	地骨皮
17	1.21	L-焦谷氨酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	129.042 7	[M+H] <sup>+</sup>	84.044 9	0.76	有机酸类	桑白皮、地骨皮
18	1.26	谷氨酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>4</sub>	147.053 1	[M+H] <sup>+</sup>	130.028 8, 102.055 3, 84.044 8	-0.34	有机酸类	桑白皮、地骨皮、甘草
19	1.32	鸟苷 <sup>[26]</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>5</sub> O <sub>5</sub>	283.091 6	[M+H] <sup>+</sup>	152.056 7	-0.30	核苷类	桑白皮
20	1.37	L-亮氨酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>	131.094 6	[M+H] <sup>+</sup>	90.903 8, 86.097 0, 69.070 5	0.04	有机酸类	地骨皮、甘草
21	1.39	脯氨酸-亮氨酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	228.147 4	[M+H] <sup>+</sup>	193.097 3, 175.086 7, 142.086 3	0.20	有机酸类	桑白皮、地骨皮
22	1.46	4-[(butylcarbamoyl)amino]-1-ethyl- 1H-pyrazole-5-carboxamide <sup>[23]</sup>	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	253.153 8	[M+H] <sup>+</sup>	237.134 5, 195.112 8, 194.128 9	-0.33	有机酸类	桑白皮、地骨皮
23	1.69	杜帕西坦 <sup>[23]</sup>	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	282.132 7	[M+H] <sup>+</sup>	265.129 3, 248.102 9, 206.081 2, 162.091 3, 134.096 4, 112.087 2, 70.065 7	-0.55	有机酸类	桑白皮、地骨皮
24	1.81	6-甲氧基喹啉 <sup>[23]</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> NO	159.068 5	[M+H] <sup>+</sup>	132.044 5, 113.963 9, 72.937 8	0.31	有机酸类	桑白皮
25	1.83	去甲基槟榔碱 <sup>[23]</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	141.079 0	[M+H] <sup>+</sup>	96.081 2, 81.070 4	0.28	生物碱类	地骨皮
26	2.33	异烟酸甲酯 <sup>[23]</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	137.047 7	[M+H] <sup>+</sup>	124.252 4, 110.060 3, 96.938 0	0.15	杂环类	地骨皮
27	2.49	2-羟基-4,6-二甲基嘧啶 <sup>[23]</sup>	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	124.063 8	[M+H] <sup>+</sup>	97.028 9, 82.065 7	1.42	杂环类	地骨皮
28	2.58	5-羟甲基糠醛 <sup>[23]</sup>	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	126.031 9	[M+H] <sup>+</sup>	109.028 7, 81.034 0	1.53	其他类	桑白皮
29	3.06	香草酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	168.042 3	[M+H] <sup>+</sup>	151.038 9, 125.059 8, 111.044 3, 93.033 9	0.12	有机酸类	地骨皮、甘草
30	4.10	曲酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	142.026 6	[M+H] <sup>+</sup>	69.034 1	0.23	杂环类	地骨皮
31	4.53	对甲氧基苯甲醛 <sup>[23]</sup>	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	136.052 5	[M+H] <sup>+</sup>	122.036 3, 94.041 8	0.27	苯及其取代衍生物	桑白皮、地骨皮
32	4.55	地骨皮乙素*	C <sub>28</sub> H <sub>42</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub>	530.310 1	[M+H] <sup>+</sup>	367.270 0, 293.185 6, 222.112 3, 165.054 6	-0.73	生物碱类	地骨皮
33	4.59	吡啶-3-丙烯酸 <sup>[26]</sup>	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	187.063 4	[M+H] <sup>+</sup>	146.060 0, 118.065 3	0.40	有机酸类	桑白皮、地骨皮、甘草
34	4.71	3-(2,4-dimethoxyphenyl)-1-(6-ethoxy-2,2- dimethyl-3,4-dihydro-2H-chromen-4-yl)- 1-[2-(4-morpholinyl)ethyl]urea <sup>[23]</sup>	C <sub>28</sub> H <sub>39</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	513.283 5	[M+H] <sup>+</sup>	222.112 4, 129.138 6, 123.044 1, 112.112 3	-0.72	杂环类	地骨皮
35	4.80	N-benzyl-5-piperidone <sup>[23]</sup>	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> NO	189.115 4	[M+H] <sup>+</sup>	148.075 6, 120.081 0, 91.054 7	-0.08	生物碱类	地骨皮
36	4.82	七叶亭 <sup>[23]</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	178.026 6	[M+H] <sup>+</sup>	135.044 0	-0.13	香豆素类	桑白皮
37	4.85	木犀草素 <sup>[23]</sup>	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> O <sub>6</sub>	286.047 5	[M+H] <sup>+</sup>	217.049 6, 153.018 2	-0.72	黄酮类	地骨皮
38	5.03	苯甲酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	122.036 8	[M+H] <sup>+</sup>	108.076 7, 95.049 6, 77.039 2	0.06	有机酸类	桑白皮、地骨皮

表 1 (续)

峰号	<i>t<sub>R</sub></i> / min	名称	分子式	<i>M<sub>w</sub></i> ( <i>m/z</i> )	离子 模式	离子碎片 ( <i>m/z</i> )	误差 (×10 <sup>-6</sup> )	化合物分类	归属药材
39	5.05	7-甲氧基香豆素 <sup>[26]</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	176.047 3	[M+H] <sup>+</sup>	145.028 4, 117.033 7	-0.03	香豆素类	桑白皮
40	5.15	2-naphthylamine <sup>[23]</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N	143.073 5	[M+H] <sup>+</sup>	117.070 1, 115.054 4, 103.054 5	0.14	醌类	地骨皮
41	5.26	7-羟基香豆素 <sup>[26]</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	162.031 7	[M+H] <sup>+</sup>	145.028 3, 135.044 0, 117.033 6, 107.033 6	-0.06	香豆素类	桑白皮
42	5.31	邻苯二甲酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	134.036 8	[M+H] <sup>+</sup>	117.033 8, 107.049 4, 89.039 0	0.32	苯及其取代衍生物	桑白皮
43	5.44	东莨菪苷 <sup>[26]</sup>	C <sub>16</sub> H <sub>18</sub> O <sub>9</sub>	354.094 8	[M+H] <sup>+</sup>	193.049 6, 178.026 0, 149.058 9	-0.74	香豆素类	桑白皮、地骨皮
44	5.44	异甘草素 <sup>[26]</sup>	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	256.073 4	[M+H] <sup>+</sup>	239.070 2, 211.075 4, 147.044 0, 137.023 3	-0.79	黄酮类	甘草
45	5.56	2,2'-((isopropylimino)bis[(2-hydroxy-3,1-propanediyl)oxy-4,1-phenylene]) diacetamide <sup>[23]</sup>	C <sub>25</sub> H <sub>33</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	473.252 5	[M+H] <sup>+</sup>	236.127 9, 222.112 3, 165.054 5, 123.044 1	-0.19	苯及其取代衍生物	桑白皮
46	5.61	大黄素甲醚 <sup>[23]</sup>	C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> O <sub>5</sub>	284.068 4	[M+H] <sup>+</sup>	267.064 9, 257.080 6, 239.070 1, 211.075 3	-0.36	醌类	地骨皮
47	5.62	对甲氧基苯乙酮 <sup>[23]</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	150.068 1	[M+H] <sup>+</sup>	123.080 6, 105.070 2	0.30	其他类	桑白皮、地骨皮
48	5.90	香豆素 <sup>[26]</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	146.036 8	[M+H] <sup>+</sup>	119.049 3, 91.054 7	-0.19	香豆素类	地骨皮
49	6.00	柚皮苷查耳酮 <sup>[23]</sup>	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> O <sub>5</sub>	272.068 2	[M+H] <sup>+</sup>	153.018 2, 147.044 0	-1.19	黄酮类	甘草
50	6.56	毛蕊异黄酮苷 <sup>[26]</sup>	C <sub>22</sub> H <sub>22</sub> O <sub>10</sub>	446.121 1	[M+H] <sup>+</sup>	285.075 4	-0.36	黄酮类	甘草
51	6.59	牡荆素 <sup>[26]</sup>	C <sub>21</sub> H <sub>20</sub> O <sub>10</sub>	432.105 3	[M+H] <sup>+</sup>	415.102 1, 397.091 5, 337.070 3, 313.070 3, 283.059 9	-0.78	黄酮类	桑白皮
52	6.72	2,6-二羟基苯甲酸 <sup>[26]</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	154.026 6	[M+H] <sup>+</sup>	137.023 3, 113.963 9, 72.937 7	0.02	苯及其取代衍生物	桑白皮
53	6.87	6,7-二羟基-4-甲基香豆素 <sup>[26]</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	192.042 4	[M+H] <sup>+</sup>	149.023 3	0.77	香豆素类	地骨皮
54	6.93	桑辛素 <sup>[26]</sup>	C <sub>19</sub> H <sub>18</sub> O <sub>5</sub>	326.115 3	[M+H] <sup>+</sup>	281.113 7, 253.049 6, 225.054 3, 171.102 2	-0.35	黄酮类	桑白皮
55	6.98	东莨菪内酯 <sup>[26]</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	192.042 4	[M+H] <sup>+</sup>	178.026 0, 165.054 6, 133.028 4	0.53	香豆素类	桑白皮
56	7.11	4'-甲氧基-3,5,7-三羟基黄酮 <sup>[23]</sup>	C <sub>16</sub> H <sub>14</sub> O <sub>6</sub>	302.078 9	[M+H] <sup>+</sup>	193.049 6, 165.054 6, 139.038 9	-0.42	黄酮类	桑白皮
57	7.16	芹菜苷 <sup>[23]</sup>	C <sub>26</sub> H <sub>28</sub> O <sub>14</sub>	564.148 0	[M+H] <sup>+</sup>	475.172 1, 433.112 9, 271.059 9, 208.132 4	0.23	黄酮类	地骨皮
58	7.18	cyclo(D-leucyl-L-leucyl-L-leucyl-L-leucyl-L-leucyl-L-leucyl-L-leucyl) <sup>[23]</sup>	C <sub>36</sub> H <sub>66</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>	678.503 8	[M+H] <sup>+</sup>	661.500 7, 452.359 0, 336.227 7, 210.148 7, 182.153 9, 100.112 4	-0.82	有机酸类	桑白皮、地骨皮、甘草
59	7.35	N-苄基甲酰胺 <sup>[23]</sup>	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> NO	135.068 4	[M+H] <sup>+</sup>	119.049 3, 91.054 7	-0.25	苯及其取代衍生物	地骨皮
60	7.49	香叶木素 <sup>[23]</sup>	C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>	300.063 3	[M+H] <sup>+</sup>	163.038 9	-0.24	黄酮类	桑白皮
61	7.64	黄豆黄苷 <sup>[23]</sup>	C <sub>22</sub> H <sub>22</sub> O <sub>10</sub>	446.121 2	[M+H] <sup>+</sup>	285.075 5	-0.32	黄酮类	甘草
62	7.75	N-(2,4-二甲基苯基)甲酰胺 <sup>[23]</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> NO	149.084 1	[M+H] <sup>+</sup>	122.060 2	0.19	苯及其取代衍生物	桑白皮
63	7.85	芹菜素-7-O-葡萄糖醛酸苷 <sup>[23]</sup>	C <sub>21</sub> H <sub>18</sub> O <sub>11</sub>	446.084 6	[M+H] <sup>+</sup>	285.075 3, 271.059 9	-0.66	黄酮类	甘草
64	7.85	芒柄花苷 <sup>[23]</sup>	C <sub>22</sub> H <sub>22</sub> O <sub>9</sub>	430.126 1	[M+H] <sup>+</sup>	269.080 6	-0.60	黄酮类	甘草
65	8.53	甘草查耳酮B <sup>[26]</sup>	C <sub>16</sub> H <sub>14</sub> O <sub>5</sub>	286.083 9	[M+H] <sup>+</sup>	269.080 6, 245.080 7, 193.049 6, 121.028 5, 107.049 4	-0.75	黄酮类	甘草
66	8.64	小檗碱 <sup>[23]</sup>	C <sub>20</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>4</sub>	335.115 6	[M+H] <sup>+</sup>	321.099 4, 292.096 6	-0.60	生物碱类	地骨皮
67	9.00	毛蕊异黄酮 <sup>[26]</sup>	C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> O <sub>5</sub>	284.068 2	[M+H] <sup>+</sup>	270.052 1, 253.049 4	-0.82	黄酮类	甘草
68	9.07	2,4-二羟基-6-甲基苯甲酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	168.042 3	[M+H] <sup>+</sup>	151.038 9	-0.01	有机酸类	桑白皮
69	9.38	泽泻醇C-23-醋酸酯 <sup>[23]</sup>	C <sub>32</sub> H <sub>48</sub> O <sub>6</sub>	528.345 0	[M+H] <sup>+</sup>	469.331 1, 315.195 3, 233.153 5, 187.148 2, 135.116 8	-0.10	三萜类及皂苷类	甘草
70	9.80	皂皮酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>30</sub> H <sub>46</sub> O <sub>5</sub>	486.334 0	[M+H] <sup>+</sup>	423.325 4, 317.210 9, 235.169 2, 189.163 7, 175.148 2	-1.17	三萜类及皂苷类	甘草
71	9.87	甘草皂苷G2 <sup>[23]</sup>	C <sub>42</sub> H <sub>62</sub> O <sub>17</sub>	838.397 9	[M+H] <sup>+</sup>	645.363 0, 487.341 5, 469.331 0, 451.320 4, 141.018 1	-1.02	三萜类及皂苷类	甘草
72	9.87	莪术烯醇 <sup>[23]</sup>	C <sub>15</sub> H <sub>22</sub> O <sub>2</sub>	234.161 8	[M+H] <sup>+</sup>	217.158 6, 199.148 1, 121.101 3, 107.085 8, 93.070 3	-0.99	三萜类及皂苷类	甘草
73	9.87	光甘草内酯 <sup>[23]</sup>	C <sub>30</sub> H <sub>44</sub> O <sub>4</sub>	468.323 6	[M+H] <sup>+</sup>	451.320 4, 439.320 5, 423.325 4, 217.158 7	-0.79	三萜类及皂苷类	甘草
74	9.96	4-甲氧基水杨醛 <sup>[23]</sup>	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	152.047 3	[M+H] <sup>+</sup>	125.059 8, 110.036 5, 93.033 9	-0.30	酚类	地骨皮
75	10.08	boldenone undecylenate <sup>[23]</sup>	C <sub>30</sub> H <sub>44</sub> O <sub>3</sub>	452.328 5	[M+H] <sup>+</sup>	407.330 6, 189.163 8	-1.13	其他类	桑白皮
76	10.08	甘草次酸 <sup>[26]</sup>	C <sub>30</sub> H <sub>46</sub> O <sub>4</sub>	470.339 1	[M+H] <sup>+</sup>	453.336 1, 425.340 9, 407.330 5, 317.210 9, 235.169 2, 217.158 7	-1.08	三萜类及皂苷类	甘草
77	10.15	甘草酸3-O-葡萄糖苷 <sup>[23]</sup>	C <sub>36</sub> H <sub>54</sub> O <sub>10</sub>	646.371 2	[M+H] <sup>+</sup>	453.335 7, 435.325 4, 357.241 9, 217.158 6, 95.085 9	-0.71	三萜类及皂苷类	甘草
78	10.58	十二烷基二乙醇胺 <sup>[23]</sup>	C <sub>16</sub> H <sub>35</sub> NO <sub>2</sub>	273.266 5	[M+H] <sup>+</sup>	256.263 3	-0.87	杂环类	地骨皮
79	10.63	糖脂 <sup>[23]</sup>	C <sub>18</sub> H <sub>39</sub> NO <sub>3</sub>	317.292 7	[M+H] <sup>+</sup>	256.263 2	-1.02	杂环类	地骨皮

表 1 (续)

峰号	$t_R$ / min	名称	分子式	$M_w$ ( $m/z$ )	离子 模式	离子碎片 ( $m/z$ )	误差 ( $\times 10^{-6}$ )	化合物分类	归属药材
80	10.68	<i>N</i> -[(1-isopropyl-1 <i>H</i> -imidazol-5-yl)methyl]- <i>N</i> -[(1'-methyl-1,4'-bipiperidin-4-yl) methyl]ethanamine <sup>[23]</sup>	C <sub>21</sub> H <sub>39</sub> N <sub>5</sub>	361.318 8	[M+H] <sup>+</sup>	344.315 5, 256.263 2	-4.87	杂环类	地骨皮
81	10.92	光甘草酮 <sup>[23]</sup>	C <sub>20</sub> H <sub>16</sub> O <sub>5</sub>	336.099 4	[M+H] <sup>+</sup>	295.059 9, 283.059 9, 267.065 0	-1.07	黄酮类	甘草
82	11.41	二氢山芹醇 <sup>[23]</sup>	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> O <sub>4</sub>	246.089 1	[M+H] <sup>+</sup>	191.033 9	-0.46	香豆素类	甘草
83	11.98	2,4-二甲苯甲醛 <sup>[23]</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O	134.073 2	[M+H] <sup>+</sup>	115.054 5, 107.085 9, 91.054 7	0.59	苯及其取代 衍生物	桑白皮
84	0.69	4-[(trifluoromethyl)sulfanyl]phenyl dihydrogen phosphate <sup>[23]</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> F <sub>3</sub> O <sub>4</sub> PS	273.966 3	[M-H] <sup>-</sup>	216.968 8, 158.977 9, 130.982 9, 114.987 9	-4.82	有机酸类	桑白皮、地骨皮
85	0.79	黏酸 <sup>[27]</sup>	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O <sub>8</sub>	210.037 3	[M-H] <sup>-</sup>	191.019 3, 152.917 0, 133.013 6, 85.028 5	-1.40	有机酸类	桑白皮、地骨皮
86	0.80	2-[(6-acetamido-3-pyridinyl)sulfanyl]- <i>N</i> -(4-fluorophenyl)benzamide <sup>[23]</sup>	C <sub>20</sub> H <sub>16</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S	381.093 1	[M-H] <sup>-</sup>	342.112 3, 217.029 5, 179.055 4, 119.034 1, 89.023 4	-4.17	苯及其取代 衍生物	桑白皮、地骨皮
87	0.81	(1 <i>S</i> ,5 <i>R</i> )-7-oxo-2-[[3-(3 <i>S</i> )-2-oxo-3-pyrrolidinyl] carbamoyl]-2,6-diazabicyclo[3.2.0]heptane- 6-sulfonic acid <sup>[23]</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub> S	318.062 0	[M-H] <sup>-</sup>	225.007 2, 164.985 7, 80.964 1	-4.46	有机酸类	桑白皮、地骨皮
88	0.81	1-deoxy-1-[(2,6,8-trioxo-7-[3-(phosphonooxy) propyl]-1,2,3,6,7,8-hexahydro-9 <i>H</i> -purin- 9-yl]- <i>D</i> -ribose <sup>[23]</sup>	C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> N <sub>4</sub> O <sub>11</sub> P	440.093 1	[M-H] <sup>-</sup>	96.968 7, 78.958 0	-3.11	杂环类	地骨皮
89	0.81	(2 <i>E</i> ,6 <i>E</i> )-8-anilino-3,7-dimethyl-2,6-octadien- 1-yl trihydrogen diphosphate <sup>[23]</sup>	C <sub>16</sub> H <sub>25</sub> NO <sub>7</sub> P <sub>2</sub>	405.111 8	[M-H] <sup>-</sup>	61.987 3	2.99	三萜及皂苷	甘草
90	0.82	戊二酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	132.041 7	[M-H] <sup>-</sup>	114.018 8, 92.024 1, 88.039 4, 70.008 0	-4.00	有机酸类	桑白皮、地骨皮
91	0.91	cefsulodin <sup>[23]</sup>	C <sub>17</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub> S <sub>2</sub>	440.084 1	[M-H] <sup>-</sup>	96.959 2, 78.958 0	3.75	酰胺类	地骨皮
92	1.14	柠檬酸 <sup>[26]</sup>	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O <sub>7</sub>	192.026 5	[M-H] <sup>-</sup>	129.018 6, 111.007 9, 87.007 7, 85.028 4	-2.52	有机酸类	桑白皮、地骨皮、 甘草
93	1.16	尿苷 <sup>[26]</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	244.069 4	[M-H] <sup>-</sup>	200.056 1, 152.034 7, 110.023 9	-0.59	核苷类	甘草
94	1.21	4-氧代脯氨酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	129.042 0	[M-H] <sup>-</sup>	115.876 4, 113.435 7, 101.132 9, 94.404 2	-4.32	有机酸类	桑白皮、地骨皮
95	1.24	<i>L</i> -酪氨酸 <sup>[26]</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>3</sub>	181.073 4	[M-H] <sup>-</sup>	163.039 4, 152.917 0, 119.049 4, 93.033 6, 72.008 0	-2.59	有机酸类	地骨皮、甘草
96	1.32	巴豆苷 <sup>[26]</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>5</sub>	283.091 8	[M-H] <sup>-</sup>	150.041 5, 133.014 9	0.42	核苷类	地骨皮
97	2.23	<i>L</i> -苯丙氨酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	165.078 4	[M-H] <sup>-</sup>	147.044 5, 103.054 4, 72.008 0, 61.987 3	-3.35	有机酸类	桑白皮、地骨皮、 甘草
98	2.70	水杨酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	138.031 0	[M-H] <sup>-</sup>	108.020 8, 93.033 7, 86.521 1	-4.90	有机酸类	地骨皮、甘草
99	4.42	1-咖啡酰奎宁酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>16</sub> H <sub>18</sub> O <sub>9</sub>	354.095 2	[M-H] <sup>-</sup>	191.055 8	0.45	有机酸类	地骨皮
100	4.53	对羟基苯甲醛 <sup>[26]</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	122.036 2	[M-H] <sup>-</sup>	108.020 8, 93.033 6, 61.534 8	-4.93	有机酸类	桑白皮、地骨皮
101	4.54	<i>L</i> -色氨酸 <sup>[26]</sup>	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	204.089 5	[M-H] <sup>-</sup>	159.092 2, 142.065 5, 116.049 8, 74.023 7	-1.96	有机酸类	地骨皮
102	4.63	地骨皮甲素 <sup>[26]</sup>	C <sub>28</sub> H <sub>42</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub>	530.310 7	[M-H] <sup>-</sup>	407.266 5, 365.255 8, 121.028 7	0.47	生物碱类	地骨皮
103	4.63	<i>N</i> -[(benzyloxy)carbonyl]- <i>L</i> -seryl- <i>L</i> -serylglycyl- <i>N</i> -[(2 <i>S</i> )-4-methyl-1-oxo-2-pentanyl]- <i>L</i> - leucinamide <sup>[23]</sup>	C <sub>28</sub> H <sub>43</sub> N <sub>3</sub> O <sub>9</sub>	593.306 5	[M-H] <sup>-</sup>	407.266 4, 365.255 8, 61.987 2	0.67	有机酸类	桑白皮、地骨皮
104	4.81	秦皮甲素 <sup>[26]</sup>	C <sub>15</sub> H <sub>16</sub> O <sub>9</sub>	340.079 5	[M-H] <sup>-</sup>	219.029 8, 177.018 9	0.09	香豆素类	桑白皮
105	5.02	7-(4-[[[(3 <i>Z</i> )-5-chloro-3-(isonicotinoylhydrazono)- 2-oxo-2,3-dihydro-1 <i>H</i> -indol-1-yl]methyl]-1- piperazinyl]-1-ethyl-6-fluoro-4-oxo-1,4- dihydro-3-quinolinecarboxylic acid <sup>[23]</sup>	C <sub>31</sub> H <sub>27</sub> ClFN <sub>7</sub> O <sub>5</sub>	631.175 1	[M-H] <sup>-</sup>	567.172 1, 243.066 1	0.76	杂环类	地骨皮
106	5.05	桑皮苷 A <sup>*</sup>	C <sub>26</sub> H <sub>32</sub> O <sub>14</sub>	568.179 4	[M-H] <sup>-</sup>	405.119 2, 243.066 2, 225.055 5, 199.076 0	0.31	其他类	桑白皮
107	5.20	ε-clofazimine <sup>[23]</sup>	C <sub>27</sub> H <sub>22</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	472.121 9	[M-H] <sup>-</sup>	219.029 6, 177.018 8	-0.64	杂环类	桑白皮、地骨皮



表 1 (续)

峰号	<i>t</i> <sub>R</sub> / min	名称	分子式	<i>M</i> <sub>w</sub> ( <i>m/z</i> )	离子 模式	离子碎片 ( <i>m/z</i> )	误差 (×10 <sup>-6</sup> )	化合物分类	归属药材
108	5.20	虎杖苷 <sup>[23]</sup>	C <sub>20</sub> H <sub>22</sub> O <sub>8</sub>	390.131 7	[M-H] <sup>-</sup>	227.071 1	0.48	其他类	桑白皮
109	5.25	右旋奎宁酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>	192.062 9	[M-H] <sup>-</sup>	111.007 9, 87.007 7, 85.028 5	-2.53	有机酸类	桑白皮、地骨皮
110	5.26	绿原酸*	C <sub>16</sub> H <sub>18</sub> O <sub>9</sub>	354.095 2	[M+H] <sup>+</sup>	191.055 6, 179.034 4, 173.045 0, 135.044 4	0.37	有机酸类	桑白皮、地骨皮
111	5.38	2-[2-(4-amino-1,2,5-oxadiazol-3-yl)-1 <i>H</i> -benzimidazol-1-yl]- <i>N</i> '-[(5-{4-nitro-3-methylphenyl}-2-furyl)methylene]acetohydrazide <sup>[23]</sup>	C <sub>23</sub> H <sub>18</sub> N <sub>8</sub> O <sub>5</sub>	486.137 7	[M-H] <sup>-</sup>	305.114 4, 203.118 6, 189.066 5, 101.023 5	-4.87	杂环类	地骨皮
112	5.40	异菴苣蓉 <sup>[23]</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	192.041 8	[M-H] <sup>-</sup>	176.010 9, 111.007 9, 102.947 9, 87.007 7	-2.42	香豆素类	桑白皮
113	5.48	栀子苷 <sup>[23]</sup>	C <sub>17</sub> H <sub>24</sub> O <sub>10</sub>	388.137 4	[M-H] <sup>-</sup>	225.076 6, 165.055 1, 59.012 7	1.04	三萜及皂苷	甘草
114	5.50	3,4-二羟基苯甲酸乙酯 <sup>[23]</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	182.057 4	[M-H] <sup>-</sup>	137.060 0, 121.028 7, 109.028 6, 59.012 7	-2.80	其他类	地骨皮
115	5.57	间苯二甲酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	166.026 0	[M-H] <sup>-</sup>	121.028 7, 93.033 6, 59.012 7	-3.56	有机酸类	桑白皮、地骨皮
116	5.57	庚二酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	160.073 0	[M-H] <sup>-</sup>	115.075 6, 97.064 9, 95.049 3	-3.66	有机酸类	桑白皮、地骨皮、甘草
117	5.72	巴利森苷 <sup>[23]</sup>	C <sub>32</sub> H <sub>40</sub> O <sub>19</sub>	728.217 3	[M-H] <sup>-</sup>	423.093 6, 397.113 9, 217.050 3	1.27	有机氧化合物	桑白皮、地骨皮、甘草
118	5.85	原儿茶酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	154.025 9	[M-H] <sup>-</sup>	109.028 6, 67.017 8, 65.038 6	-4.44	有机酸类	地骨皮、甘草
119	5.92	二氢田基黄苷 <sup>[23]</sup>	C <sub>21</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub>	450.116 5	[M-H] <sup>-</sup>	287.056 2, 161.023 7, 125.023 6, 60.332 7	0.54	黄酮类	桑白皮
120	5.93	没食子酸辛酯 <sup>[23]</sup>	C <sub>15</sub> H <sub>22</sub> O <sub>5</sub>	282.146 7	[M-H] <sup>-</sup>	237.149 5, 201.128 1, 171.117 3, 123.080 7	-0.01	有机酸类	桑白皮、地骨皮
121	6.12	氧化白藜芦醇 <sup>[23]</sup>	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	244.073 3	[M-H] <sup>-</sup>	199.076 0, 175.075 9, 159.044 5	-0.99	其他类	桑白皮
122	6.13	白皮杉醇葡萄糖苷 <sup>[23]</sup>	C <sub>20</sub> H <sub>22</sub> O <sub>9</sub>	406.126 6	[M-H] <sup>-</sup>	243.066 2, 225.055 6, 175.075 9	0.57	其他类	桑白皮
123	6.22	异瓣皮苷 <sup>[23]</sup>	C <sub>21</sub> H <sub>20</sub> O <sub>12</sub>	464.096 0	[M-H] <sup>-</sup>	301.035 4, 229.050 5, 151.003 0, 125.023 6	1.16	黄酮类	桑白皮
124	6.38	(1 <i>S</i> )-1,5-anhydro-2- <i>O</i> -(6-deoxy- <i>α</i> - <i>L</i> -mannopyranosyl)-1-[5,7-dihydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)-4-oxo-4 <i>H</i> -chromen-6-yl]- <i>D</i> -glucitol <sup>[23]</sup>	C <sub>27</sub> H <sub>30</sub> O <sub>14</sub>	578.164 1	[M-H] <sup>-</sup>	457.114 2, 383.077 4, 353.066 8	0.90	黄酮类	桑白皮
125	6.44	5,7-二羟基色原酮 <sup>[23]</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	178.026 1	[M-H] <sup>-</sup>	133.028 8, 109.028 6, 89.038 6	-2.93	杂环类	地骨皮
126	6.59	甘草苷元-7- <i>O</i> -β- <i>D</i> -芹糖-4'- <i>O</i> -β- <i>D</i> -葡萄糖苷 <sup>[23]</sup>	C <sub>26</sub> H <sub>30</sub> O <sub>13</sub>	550.169 0	[M-H] <sup>-</sup>	417.119 4, 255.066 2, 135.008 0, 119.049 4	0.59	黄酮类	甘草
127	6.62	辛二酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O <sub>4</sub>	174.088 6	[M-H] <sup>-</sup>	129.091 3, 111.080 7, 83.049 2	-3.55	有机酸类	桑白皮、地骨皮、甘草
128	6.64	对羟基肉桂酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	164.046 7	[M-H] <sup>-</sup>	119.049 4	-4.07	有机酸类	桑白皮、甘草
129	6.71	甘草苷*	C <sub>21</sub> H <sub>22</sub> O <sub>9</sub>	418.126 5	[M-H] <sup>-</sup>	255.066 2, 135.008 1, 119.049 4	0.26	黄酮类	甘草
130	6.72	甘草素 <sup>[26]</sup>	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	256.073 5	[M-H] <sup>-</sup>	219.845 2, 153.018 7, 135.008 3, 119.049 4, 91.017 9	-0.14	黄酮类	甘草
131	6.97	阿魏酸 <sup>[26]</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	194.057 4	[M-H] <sup>-</sup>	178.026 6, 149.060 1, 134.036 6	-2.67	有机酸类	地骨皮、甘草
132	7.19	花旗松素 <sup>[23]</sup>	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> O <sub>7</sub>	304.058 4	[M-H] <sup>-</sup>	177.018 8, 125.023 6	0.21	黄酮类	桑白皮
133	7.29	枸杞素A <sup>[23]</sup>	C <sub>42</sub> H <sub>51</sub> N <sub>9</sub> O <sub>12</sub>	873.366 5	[M-H] <sup>-</sup>	501.210 5, 471.199 9, 387.167 5, 260.104 0, 203.082 2, 170.092 9, 153.066 3, 99.019 0	0.93	生物碱类	地骨皮
134	7.35	柚皮素-7- <i>O</i> -葡萄糖苷 <sup>[23]</sup>	C <sub>21</sub> H <sub>22</sub> O <sub>10</sub>	434.121 5	[M-H] <sup>-</sup>	271.061 3, 177.018 7, 151.003 0	0.44	黄酮类	甘草
135	7.54	壬二酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> O <sub>4</sub>	188.104 3	[M-H] <sup>-</sup>	125.096 4, 97.064 9	-2.76	有机酸类	桑白皮
136	7.58	4-吡啶甲醛 <sup>[23]</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> NO	145.052 1	[M-H] <sup>-</sup>	126.034 2, 116.049 8, 89.043 2, 54.985 1	-4.82	杂环类	地骨皮
137	7.77	异甘草苷 <sup>[26]</sup>	C <sub>21</sub> H <sub>22</sub> O <sub>9</sub>	418.126 8	[M-H] <sup>-</sup>	255.066 4, 148.016 0, 135.008 1, 119.049 5	0.91	黄酮类	甘草
138	8.25	枸杞素B <sup>[23]</sup>	C <sub>44</sub> H <sub>52</sub> N <sub>10</sub> O <sub>11</sub>	896.382 7	[M-H] <sup>-</sup>	501.210 7, 471.199 9, 410.183 5, 260.103 9, 203.082 2, 153.066 3, 99.019 1	1.08	有机酸类	地骨皮
139	8.76	3-叔丁基己二酸 <sup>[26]</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O <sub>4</sub>	202.120 1	[M-H] <sup>-</sup>	183.102 2, 139.112 1	-2.06	有机酸类	桑白皮、地骨皮
140	8.80	刺芒柄花素 <sup>[23]</sup>	C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	268.073 6	[M-H] <sup>-</sup>	252.042 9, 223.133 8	0.11	黄酮类	甘草
141	8.82	射干苷元 <sup>[23]</sup>	C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>	300.063 4	[M-H] <sup>-</sup>	284.032 8, 256.037 8	-0.05	黄酮类	甘草
142	8.88	6-deoxyhexopyranosyl-(1→4)-[hexopyranosyl-(1→6)]-1- <i>O</i> -[27-hydroxy-3,27,28-trioxolup-20(29)-en-28-yl]hexopyranose <sup>[23]</sup>	C <sub>48</sub> H <sub>74</sub> O <sub>19</sub>	954.483 1	[M-H] <sup>-</sup>	351.056 9, 193.034 9, 113.023 6, 71.012 7	0.68	三萜类及皂苷类	甘草

表 1 (续)

峰号	<i>t</i> <sub>R</sub> / min	名称	分子式	<i>M</i> <sub>w</sub> ( <i>m/z</i> )	离子 模式	离子碎片 ( <i>m/z</i> )	误差 (×10 <sup>-6</sup> )	化合物分类	归属药材
143	9.00	4-甲氧基水杨酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	168.041 7	[M-H] <sup>-</sup>	152.010 9, 123.044 4, 108.020 8	-3.62	有机酸类	桑白皮、地骨皮
144	9.80	柚皮素 <sup>[23]</sup>	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> O <sub>5</sub>	272.068 5	[M-H] <sup>-</sup>	177.018 8, 151.003 0, 119.049 4, 107.013 0, 93.033 6	-0.02	黄酮类	桑白皮、地骨皮
145	9.88	quinone rifampicin <sup>[23]</sup>	C <sub>43</sub> H <sub>56</sub> N <sub>4</sub> O <sub>12</sub>	820.389 1	[M-H] <sup>-</sup>	351.057 0, 193.034 9, 175.024 3, 113.023 6, 85.028 4	-0.46	酰胺类	地骨皮
146	9.94	(15 <i>Z</i> )-9,12,13-trihydroxy-15-octadecenoic acid <sup>[23]</sup>	C <sub>18</sub> H <sub>34</sub> O <sub>5</sub>	330.240 7	[M-H] <sup>-</sup>	229.144 3, 211.133 6, 171.102 1, 139.112 1	0.31	有机酸类	桑白皮、地骨皮
147	10.09	甘草酸 <sup>*</sup>	C <sub>42</sub> H <sub>62</sub> O <sub>16</sub>	822.405 6	[M+H] <sup>+</sup>	351.056 9, 193.035 1, 175.024 1, 113.023 5	2.19	三萜类及皂苷类	甘草
148	10.19	川楝素 <sup>[23]</sup>	C <sub>30</sub> H <sub>38</sub> O <sub>11</sub>	574.241 9	[M-H] <sup>-</sup>	531.223 9, 425.197 3, 407.186 8	0.77	三萜类及皂苷类	桑白皮、地骨皮
149	10.28	6-deoxy- $\alpha$ -L-mannopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 3)-[ $\beta$ -D-glucopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)]-1-O-[3,2'-dihydroxy-27,28-dioxolup-20(29)-en-28-yl]- $\beta$ -D-glucopyranose <sup>[23]</sup>	C <sub>48</sub> H <sub>76</sub> O <sub>19</sub>	956.499 3	[M-H] <sup>-</sup>	497.115 2, 321.082 6, 113.023 6, 72.992 0	1.23	三萜类及皂苷类	甘草
150	10.35	十二烷二酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>4</sub>	230.151 6	[M-H] <sup>-</sup>	211.133 7, 167.143 6, 144.127 3	-1.01	有机酸类	桑白皮、地骨皮
151	10.39	甘草酸二铵 <sup>[23]</sup>	C <sub>42</sub> H <sub>62</sub> O <sub>16</sub>	822.404 9	[M-H] <sup>-</sup>	351.057 0, 193.034 9, 113.023 6, 85.028 5	1.31	三萜类及皂苷类	甘草
152	10.55	黄麻脂肪酸F <sup>[23]</sup>	C <sub>18</sub> H <sub>32</sub> O <sub>5</sub>	328.225 1	[M-H] <sup>-</sup>	229.144 3, 211.133 6, 171.102 1	0.34	有机酸类	桑白皮、地骨皮
153	11.30	淫羊藿素 <sup>[26]</sup>	C <sub>21</sub> H <sub>20</sub> O <sub>6</sub>	368.126 0	[M-H] <sup>-</sup>	298.048 3	0.10	黄酮类	地骨皮
154	12.25	光甘草定 <sup>[26]</sup>	C <sub>20</sub> H <sub>20</sub> O <sub>4</sub>	324.136 2	[M-H] <sup>-</sup>	201.091 6, 135.044 4, 121.028 7, 109.028 6	0.07	黄酮类	甘草
155	13.21	13 <i>S</i> -羟基十八碳二烯酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>18</sub> H <sub>32</sub> O <sub>3</sub>	296.235 1	[M-H] <sup>-</sup>	277.217 4, 195.138 7, 171.102 1	-0.04	有机酸类	桑白皮、地骨皮
156	13.54	桑辛素 <sup>[26]</sup>	C <sub>25</sub> H <sub>24</sub> O <sub>6</sub>	420.157 5	[M-H] <sup>-</sup>	350.079 8, 309.113 3, 197.113 3, 191.070 9, 121.028 7, 109.028 6	0.49	黄酮类	桑白皮
157	16.16	齐墩果酸 <sup>[23]</sup>	C <sub>30</sub> H <sub>48</sub> O <sub>3</sub>	456.360 5	[M-H] <sup>-</sup>	299.075 0, 166.099 0	0.23	三萜及皂苷类	甘草
158	17.52	butyl 4,4-bis(tert-butylperoxy)valerate <sup>[23]</sup>	C <sub>17</sub> H <sub>34</sub> O <sub>6</sub>	334.236 1	[M-H] <sup>-</sup>	275.150 6	1.53	有机酸类	桑白皮、地骨皮、甘草

*M*<sub>w</sub>-理论相对分子质量; \*经对照品比对确认。

*M*<sub>w</sub>-theoretical relative molecular mass; \* was confirmed by comparison of reference substance.

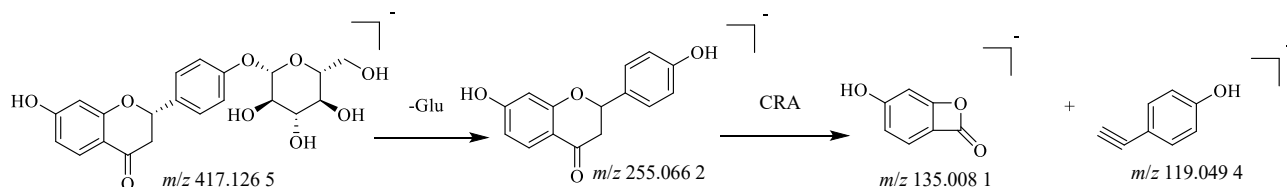


图 3 甘草苷负离子模式下的裂解途径

Fig. 3 Fragmentation pathway of liquiritin in negative ion mode

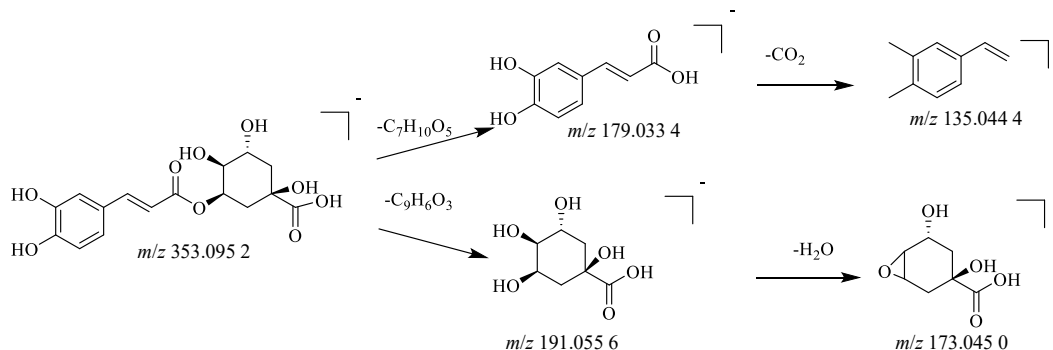


图 4 绿原酸负离子模式下的裂解途径

Fig. 4 Fragmentation pathway of chlorogenic acid in negative ion mode

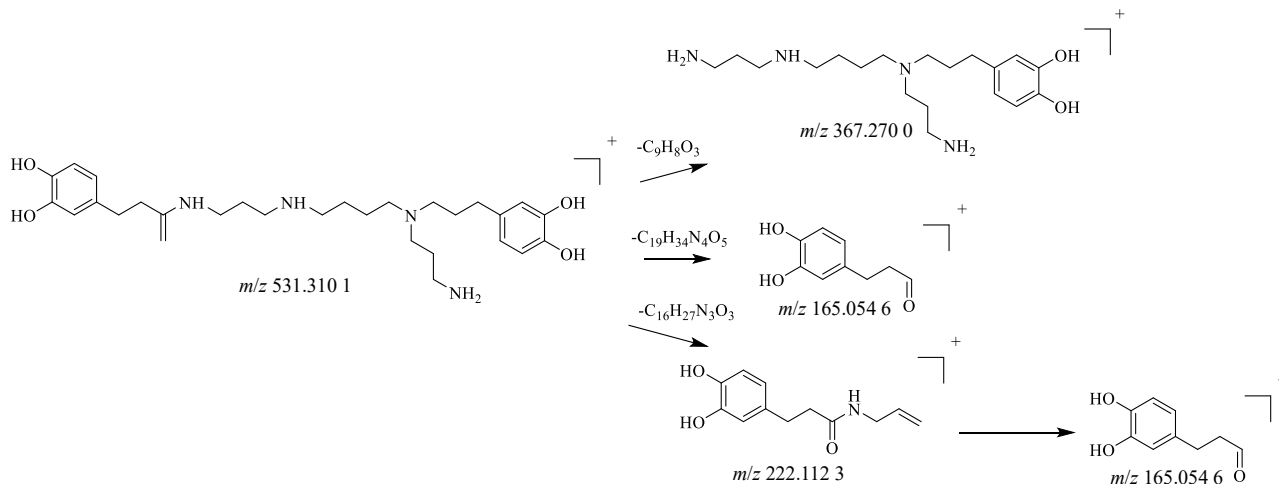


图 5 地骨皮乙素正离子模式下的裂解途径

Fig. 5 Fragmentation pathway of kukoamine B in positive ion mode

表 2 A~D 方中不同化学成分种类相对权重结果

Table 2 Results of relative weights of different chemical component types in formulas A—D

化合物 分类	相对权重/%											
	A1	A2	A3	B1	B2	B3	C1	C2	C3	D1	D2	D3
苯及其取代物	1.93	1.13	1.21	2.04	2.32	2.54	2.21	2.28	2.16	2.35	2.25	2.37
酚类	0.08	0.11	0.10	0.08	0.15	0.13	0.05	0.09	0.02	0.07	0.04	0.06
核苷类	0.13	0.12	0.22	0.11	0.32	0.21	0.11	0.19	0.21	0.11	0.10	0.17
黄酮类	0.74	0.86	0.79	0.49	0.55	0.43	1.04	1.02	1.17	0.59	0.64	0.48
醌类	0.17	0.24	0.27	0.22	0.20	0.32	0.21	0.31	0.28	0.25	0.23	0.20
三萜及皂苷	0.01	0.12	0.18	0	0	0	0	0	0	0.01	0.01	0
生物碱类	12.02	11.92	11.86	11.04	11.14	10.93	12.79	12.84	12.70	11.38	11.42	11.45
酰胺类	3.87	3.21	3.98	3.35	3.41	3.25	5.10	5.13	5.23	3.75	3.84	3.82
香豆素类	2.36	2.32	2.41	2.47	2.33	2.51	2.35	2.43	2.39	2.61	2.73	2.53
有机酸类	32.37	33.42	31.23	34.80	34.73	34.98	31.19	31.17	31.24	32.60	32.58	32.51
有机氧化物	0.01	0.15	0.07	0.01	0.04	0.02	0.01	0.05	0.03	0.01	0.02	0.01
杂环类	13.48	13.44	13.54	13.36	13.43	13.53	12.57	12.62	12.74	13.64	13.76	13.73
其他类	32.85	32.81	33.03	32.01	32.21	32.11	32.37	32.31	32.41	32.62	32.56	32.69

A1~A3 为泻白散全方样品 1~3; B1~B3 为缺甘草方样品 1~3; C1~C3 为缺粳米方样品 1~3; D1~D3 为缺甘草和粳米方样品 1~3。

A1—A3 are samples 1—3 of complete Xiebai powder formula; B1—B3 are samples 1—3 of the formula without *Glycyrrhizae Radix et Rhizoma*; C1—C3 are samples 1—3 of the formula without *Oryzae Sativae Semen*; D1—D3 are samples 1—3 of the formula without *Glycyrrhizae Radix et Rhizoma* and *Oryzae Sativae Semen*.

制黄酮类、生物碱类、其他类化合物的溶出。C 组与 A 组比较，黄酮类、生物碱类、酰胺类化合物相对权重值增大，有机酸类和杂环类相对权重值减小，说明甘草促进黄酮类、生物碱类、酰胺类化合物的溶出，抑制有机酸类和杂环类化合物的溶出。D 组与 A 组进行对比时，黄酮类、生物碱类相对权重降低，说明甘草和粳米配伍影响着泻白散主要成分的变化，同时泻白散中佐使药甘草和粳米配伍对黄酮类和生物碱类起到相互制衡的作用，使黄酮类和生物碱类化学成分溶出达到平衡。进一步证明粳

米的加入必不可少，甘草虽然在方中用量较少，但也发挥重要作用。

### 2.3 多元统计分析

**2.3.1 PCA** 为了筛选甘草和粳米配伍后影响成分变化的关键化合物，将鉴定出共有药材桑白皮、地骨皮的 125 个化学成分的质谱峰峰面积导入 SIMCA 14.1 软件进行 PCA，结果见图 6，A 单独聚为一类，B 和 D 聚为一类，C 单独聚为一类。可见 A 方与其他各方之间的整体化学成分发生了变化。A 与 D 未聚为一类，可证明佐使药甘草和粳米配伍

对归属于共有药材桑白皮、地骨皮的 125 个化学成分含量的影响较大。

B 和 D 共同缺甘草，二者聚为一类，虽 B 方中有粳米，但由于粳米的主要成分为蛋白质、多糖等大分子物质，且无具体的归属化合物，故 B 和 D 对全方化学成分影响作用相似，因此聚为一类。

C 和 D 共同缺粳米，未聚为一类，也初步说明甘草对共有化学成分含量的变化起着主要作用。

**2.3.2 OPLS-DA** 将 PCA 数据进行后续 OPLS-DA，针对 125 个化学成分进行深入探讨，如图 7-a，在模型下  $R^2=0.949$ ， $R^2_Y=0.997$ ， $Q^2=0.990$ ，证明模型具有较好的组间差异性。为避免 OPLS-DA 模型出现过拟合而影响分析结果的准确性，进一步进行

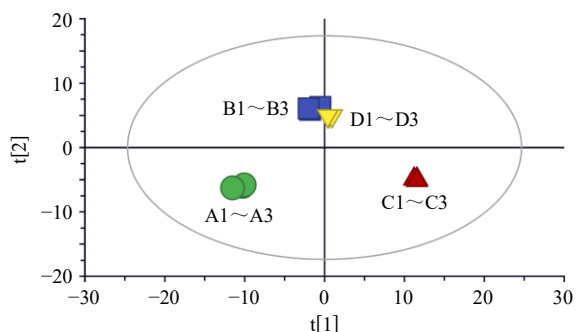


图 6 PCA 得分图

Fig. 6 PCA score plot

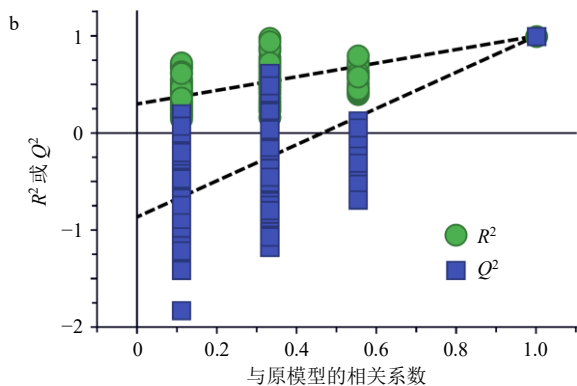
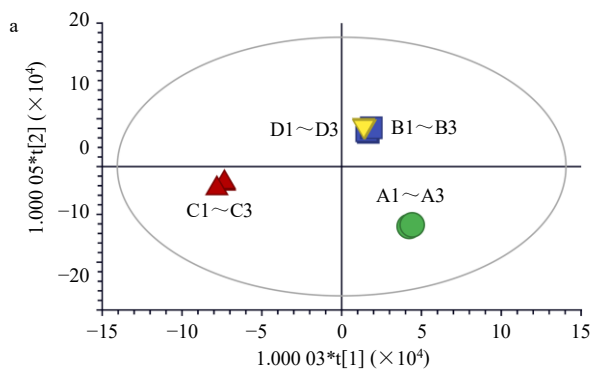


图 7 OPLS-DA 得分图 (a) 和置换检验图 (b)

Fig. 7 OPLS-DA score plot (a) and permutation test plot (b)

置换检验，结果见图 7-b，经检验，建立的模型有效、稳定、可靠，可用于共有成分中差异化化合物的筛选。

结合变量重要性投影 (variable importance in the projection, VIP) 进行分析，VIP 值越大，表明该化学成分对样品的影响越显著，以  $VIP>1$  为筛选标准，对差异成分进行筛选，共得到 28 个化学成分，提示这 28 个化学成分是影响不同方中化学成分变化的关键化合物，包括 boldenone undecylenate、甜菜碱、桑皮苷 A、L-焦谷氨酸、L-脯氨酸、地骨皮甲素等。如图 8 和表 3 所示，这些化合物主要为有机酸类、生物碱类、杂环类、酰胺类、其他类。桑皮苷 A 和地骨皮甲素是特征差异成分之一，其中桑皮苷 A 是桑白皮主要成分，归属于其他类化合物，地骨皮甲素是地骨皮主要成分，属于生物碱类化合物，在前期比较分析实验中，甘草和粳米的加入对桑白皮代表性成分桑皮苷 A 和地骨皮代表性成分地骨皮乙素的含量进行定量研究，结果发现与全方比，缺甘草方中桑皮苷 A 含量降低，地骨皮乙素含量降低，缺粳米方中桑皮苷 A 含量升高，地骨皮乙素含量升高，这与粳米可以抑制生物碱类、其他类等化合物的溶出。甘草可以促进生物碱类等化合物的溶出结论相符。这几类化合物的溶出和抑制都与甘草和粳米配伍影响有关，也从侧面反映了甘草和粳米配伍对君臣药桑白皮和地骨皮化学成分有重要作用，为后期研究泻白散质量控制中化学指标筛选提供参考。

**2.4 差异性成分分析**

基于泻白散全方鉴定结果，将归属于共有药材桑白皮和地骨皮的 125 个化学成分进行 PCA 及 OPLS-DA，经筛选确定 A~D 方中差异性化合物共 22 种。结果见表 4。这些差异化学成分大多数属于

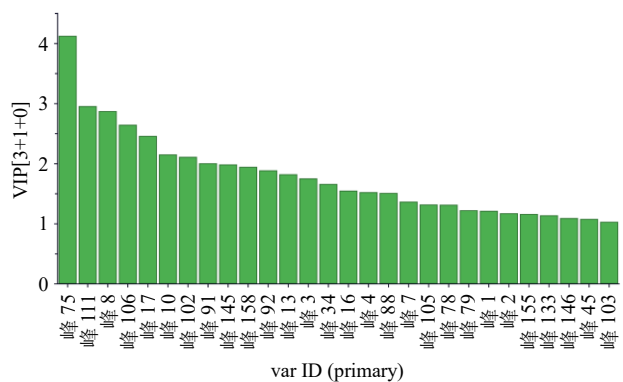


图 8 化合物 VIP>1 图

Fig. 8 Plot of compounds with VIP > 1

表3 VIP>1的化合物信息

Table 3 Information of compounds with VIP > 1

峰号	化学成分	VIP值	分类	归属药材
75	boldenone undecylenate <sup>[23]</sup>	4.13	其他类	桑白皮
111	2-[2-(4-amino-1,2,5-oxadiazol-3-yl)-1 <i>H</i> -benzimidazol-1-yl]- <i>N'</i> -[(5-{4-nitro-3-methylphenyl}-2-furyl)methylene]acetohydrazide <sup>[23]</sup>	2.96	杂环类	地骨皮
8	甜菜碱 <sup>[26]</sup>	2.88	生物碱类	桑白皮、地骨皮
106	桑皮昔A <sup>[26]</sup>	2.65	其他类	桑白皮
17	<i>L</i> -焦谷氨酸 <sup>[23]</sup>	2.46	有机酸类	桑白皮、地骨皮
10	<i>L</i> -脯氨酸 <sup>[23]</sup>	2.15	有机酸类	地骨皮
102	地骨皮甲素 <sup>[26]</sup>	2.12	生物碱类	地骨皮
91	cefsulodin <sup>[23]</sup>	2.01	酰胺类	地骨皮
145	quinone rifampicin <sup>[23]</sup>	1.99	酰胺类	地骨皮
158	butyl 4,4-bis(tert-butylperoxy)valerate <sup>[23]</sup>	1.95	有机酸类	桑白皮、地骨皮、甘草
92	柠檬酸 <sup>[26]</sup>	1.89	有机酸类	桑白皮、地骨皮、甘草
13	<i>N</i> -{[(1 <i>S</i> )-1-carboxy-3-methylbutyl]carbamoyl}- <i>L</i> -glutamic acid <sup>[23]</sup>	1.83	有机酸类	桑白皮、地骨皮
3	<i>DL</i> -精氨酸 <sup>[25]</sup>	1.76	有机酸类	桑白皮、地骨皮、甘草
34	3-(2,4-dimethoxyphenyl)-1-(6-ethoxy-2,2-dimethyl-3,4-dihydro-2 <i>H</i> -chromen-4-yl)-1-[2-(4-morpholinyl)ethyl]urea <sup>[23]</sup>	1.66	杂环类	地骨皮
16	盐酸水苏碱 <sup>[23]</sup>	1.55	生物碱类	地骨皮
4	胆碱 <sup>[23]</sup>	1.53	有机酸类	桑白皮、地骨皮、甘草
88	1-deoxy-1-{2,6,8-trioxo-7-[3-(phosphonoxy)propyl]-1,2,3,6,7,8-hexahydro-9 <i>H</i> -purin-9-yl}- <i>D</i> -ribose <sup>[23]</sup>	1.51	杂环类	地骨皮
7	蔗糖 <sup>[25]</sup>	1.37	其他类	桑白皮、甘草
105	7-(4-[(3 <i>Z</i> )-5-chloro-3-(isonicotinoylhydrazono)-2-oxo-2,3-dihydro-1 <i>H</i> -indol-1-yl]methyl)-1-piperazinyl)-1-ethyl-6-fluoro-4-oxo-1,4-dihydro-3-quinolinecarboxylic acid <sup>[23]</sup>	1.32	杂环类	地骨皮
78	十二烷基二乙醇胺 <sup>[23]</sup>	1.32	杂环类	地骨皮
79	糖脂 <sup>[23]</sup>	1.23	杂环类	地骨皮
1	亚氨基二甲硫醇 <sup>[23]</sup>	1.22	其他类	桑白皮
2	1-脱氧野尻霉素 <sup>[24]</sup>	1.18	生物碱类	桑白皮
155	13 <i>S</i> -羟基十八碳二烯酸 <sup>[23]</sup>	1.16	有机酸类	桑白皮、地骨皮
133	枸杞素A <sup>[23]</sup>	1.14	生物碱类	地骨皮
146	(15 <i>Z</i> )-9,12,13-trihydroxy-15-octadecenoic acid <sup>[23]</sup>	1.10	有机酸类	桑白皮、地骨皮
45	2,2'-{(isopropylimino)bis[(2-hydroxy-3,1-propanediyl)oxy-4,1-phenylene]} diacetamide <sup>[23]</sup>	1.08	苯及其取代 衍生物	桑白皮
103	<i>N</i> -[(benzyloxy)carbonyl]- <i>L</i> -seryl- <i>L</i> -serylglycyl- <i>N</i> -[(2 <i>S</i> )-4-methyl-1-oxo-2-pentanyl]- <i>L</i> -leucinamide <sup>[23]</sup>	1.03	有机酸类	桑白皮、地骨皮

黄酮类化合物、三萜及皂苷类、有机酸类化合物。A与B对比,发现方中甘草的加入会使君药桑白皮和臣药地骨皮产生新的成分,包括牡荆素、芹菜昔、香叶木素、柚皮素、淫羊藿素等黄酮类成分,盐酸水苏碱和小檗碱等生物碱类成分,消失的成分包括β-丙氨酸二乙酸、白藜芦醇、丁内未利葡萄糖苷、紫花前胡醇等;A与C对比,发现方中粳米的加入也会使君药桑白皮和臣药地骨皮产生新的成分,包

括6-甲氧基喹啉、阿魏酸、川楝素,消失的成分为桑黄酮;A与D对比,即方中甘草和粳米配伍,君药和臣药中新产生的成分与方中加入甘草的相似,区别在于又新产生了*L*-焦谷氨酸、6-甲氧基喹啉化合物。这些结果表明甘草和粳米配伍对组方化学成分的变化有影响,进而可能影响泻白散的功效,如甘草和粳米配伍后所增加的*L*-焦谷氨酸和阿魏酸均属于有机酸类,现代药理学研究表明<sup>[28]</sup>,有机酸

表4 A~D组中差异性成分结果

Table 4 Results of differential components among groups A—D

序号	成分	离子模式	tr/min	化合物分类	化学式	相对分子质量(m/z)	归属药材	是否含有该差异性成分(有√)			
								A	B	C	D
1	β-丙氨酸二乙酸	[M-H] <sup>-</sup>	0.81	有机酸类	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>6</sub>	205.058 6	-	-	√	-	√
2	白藜芦醇	[M-H] <sup>-</sup>	6.68	其他类	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	228.078 6	-	-	√	-	√
3	对乙酰氨基酚	[M-H] <sup>-</sup>	6.67	酚类	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	151.063 3	-	-	√	-	√
4	丁内未利葡萄糖苷	[M-H] <sup>-</sup>	8.83	有机氧化合物	C <sub>2</sub> H <sub>24</sub> O <sub>9</sub>	408.142 2	-	-	√	-	√
5	紫花前胡醇	[M+H] <sup>+</sup>	8.89	香豆素类	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> O <sub>4</sub>	240.089 2	-	-	√	-	√
6	大黄素-8-O-β-D-吡喃葡萄糖苷	[M-H] <sup>-</sup>	8.95	醌类	C <sub>21</sub> H <sub>20</sub> O <sub>10</sub>	432.105 7	-	-	√	-	√
7	桑黄酮	[M-H] <sup>-</sup>	12.12	黄酮类	C <sub>25</sub> H <sub>26</sub> O <sub>6</sub>	422.173 2	-	-	-	√	√
8	黏酸	[M-H] <sup>-</sup>	0.79	有机酸类	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O <sub>8</sub>	210.037 3	桑白皮、地骨皮	√	-	√	-
9	盐酸水苏碱	[M+H] <sup>+</sup>	1.19	生物碱类	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> ClNO <sub>2</sub>	143.094 7	地骨皮	√	-	√	-
10	L-焦谷氨酸	[M+H] <sup>+</sup>	1.21	有机酸类	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	129.042 7	桑白皮、地骨皮	√	√	√	-
11	6-甲氧基喹啉	[M+H] <sup>+</sup>	1.81	有机酸类	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> NO	159.068 5	桑白皮	√	√	-	-
12	L-色氨酸	[M-H] <sup>-</sup>	4.54	有机酸类	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	204.089 5	地骨皮	√	-	√	√
13	(1S)-1,5-anhydro-2-O-(6-deoxy-α-L-mannopyranosyl)-1-[5,7-dihydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)-4-oxo-4H-chromen-6-yl]-D-glucitol	[M-H] <sup>-</sup>	6.38	黄酮类	C <sub>27</sub> H <sub>30</sub> O <sub>14</sub>	578.164 1	桑白皮	√	-	√	-
14	牡荆素	[M+H] <sup>+</sup>	6.59	黄酮类	C <sub>21</sub> H <sub>20</sub> O <sub>10</sub>	432.105 3	桑白皮	√	-	√	-
15	阿魏酸	[M-H] <sup>-</sup>	6.97	有机酸类	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	194.057 4	地骨皮、甘草	√	√	-	√
16	芹菜苷	[M+H] <sup>+</sup>	7.16	黄酮类	C <sub>26</sub> H <sub>28</sub> O <sub>14</sub>	564.148 0	地骨皮	√	-	√	-
17	4'-甲氧基-3,5,7-三羟基黄酮	[M+H] <sup>+</sup>	7.11	黄酮类	C <sub>16</sub> H <sub>14</sub> O <sub>6</sub>	302.078 9	桑白皮	√	-	√	-
18	香叶木素	[M+H] <sup>+</sup>	7.49	黄酮类	C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>	300.063 3	桑白皮	√	-	√	-
19	小檗碱	[M+H] <sup>+</sup>	8.64	生物碱类	C <sub>20</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>4</sub>	335.115 6	地骨皮	√	-	√	-
20	柚皮素	[M-H] <sup>-</sup>	9.80	黄酮类	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> O <sub>5</sub>	272.068 5	桑白皮、地骨皮	√	-	√	-
21	川楝素	[M-H] <sup>-</sup>	10.19	三萜及皂苷	C <sub>30</sub> H <sub>38</sub> O <sub>11</sub>	574.241 9	桑白皮、地骨皮	√	-	-	√
22	淫羊藿素	[M-H] <sup>-</sup>	11.30	黄酮类	C <sub>21</sub> H <sub>20</sub> O <sub>6</sub>	368.126 0	地骨皮	√	-	√	-

类成分具有抗炎、抗氧化、抗肿瘤等作用。已有研究报道泻白散中有机酸成分具有良好的抗炎效果，在治疗肺病上有效<sup>[29]</sup>。

### 3 讨论

经典名方泻白散由炒桑白皮、焙地骨皮、炒甘草、粳米4味中药组成，每味药的性味归经决定了泻白散方剂的整体药性，从全方药性来看，桑白皮、地骨皮具有凉性、清热解暑的功效，适用于肺热咳嗽、皮肤蒸热等症状。甘草粳米配伍甘平养胃，可预防在肺热化前，损伤脾胃，发挥协同效应。全方甘寒清润，重在“清泻肺热”，既要照顾脾胃，又要防止寒伤阴病。从全方功效来看，桑白皮泻实火，地骨皮偏清虚热，两者合用覆盖肺热虚实。从全方成分活性来看，桑白皮含有桑皮苷和黄酮类成分，具有抗炎、舒张支气管的作用。地骨皮含有具有清

热解毒、调节免疫功能的成分，如地骨皮甲素、地骨皮乙素、甜菜碱等。甘草中含有的甘草酸具有止咳及抗炎的功效。粳米多糖可以起到保护胃肠粘膜的作用。全方化学成分多样，主要包括黄酮类、有机酸类、生物碱类等多种化学成分<sup>[30-31]</sup>。现代临床常用来治疗呼吸系统疾病<sup>[32]</sup>，如小儿肺炎、慢性支气管炎、咳嗽、哮喘等。泻白散复方制剂的研发对填补儿童用药品种具有实际意义，但由于方中含有粳米这特殊药味使泻白散制剂开发受阻，粳米在煎煮过程中不利于大规模生产，又因甘草在处方中用量较少，因此有研究建议重新调整处方，或去除粳米，或另煎粳米，或提高甘草用量等，本着遵古研发经典名方的思路，急需从配伍角度出发探究处方中甘草和粳米加减对泻白散化学成分的具体影响，证明甘草和粳米配伍的科学性和必要性。

粳米由于缺乏可鉴定的特征性化学成分,目前尚无法对粳米中化学成分进行准确的归类。本研究利用 UPLC-Q-Exactive-MS/MS 技术分析泻白散的化学成分,因 A~D 方中共有君药桑白皮和臣药地骨皮,故将共有药材桑白皮和地骨皮的 125 个化学成分进行 PCA 及 OPLS-DA 筛选后确定出 22 种差异性化合物包括黄酮类、三萜及皂苷类、有机酸类化合物。结果表明,甘草和粳米配伍后会产生新的成分,包括牡荆素、芹菜苷、香叶木素、柚皮素、淫羊藿素、盐酸水苏碱、小檗碱、L-焦谷氨酸、6-甲氧基喹啉等化合物。

粳米可以促进有机酸类、酚类化合物溶出,抑制黄酮类、生物碱类、其他类化合物的溶出。甘草可以促进黄酮类、生物碱类、酰胺类化合物的溶出,抑制有机酸类和杂环类化合物的溶出。这与有关文献报道结论一致,如在白虎汤方剂中将粳米、甘草、石膏与知母 4 味药物不同配伍对黄酮类成分芒果苷含量的影响研究发现<sup>[33]</sup>,粳米与知母和石膏配伍较知母和石膏配伍黄酮成分芒果苷的含量降低,甘草与知母和石膏配伍较知母和石膏配伍黄酮成分芒果苷的含量增加,白虎汤全方与知母和石膏比较芒果苷含量变化不大。

文献提示可能是由于粳米中淀粉吸附了黄酮类成分或与其反应生成沉淀,使其含量降低,甘草中的皂苷成分对黄酮类成分有助溶作用,使其含量升高,当粳米和甘草同时配伍时黄酮类成分变化不大。如在基于分子自组装的甘草配伍研究中<sup>[34]</sup>,甘草配伍缓和药性的机制与自组装聚集体改变化学成分物理结构、存在形式有关,文献提示甘草中甘草酸自组装体系对葛根素等多种黄酮类成分具有增溶及促吸收作用,甘草酸可以与生物碱类成分发生分子络合组装形成沉淀,降低生物碱的溶解,达到缓性机制。可见甘草和粳米配伍确实会影响着泻白散主要成分的变化,对黄酮类和生物碱类起到相互制衡的作用,确保黄酮类和生物碱类化学成分溶出达到平衡具有一定的科学性。

基于多元统计分析筛选影响成分变化的主要 28 种差异化学成分,包括 boldenone undecylenate、甜菜碱、桑皮苷 A、L-焦谷氨酸、L-脯氨酸、地骨皮甲素等,这些成分为后期研究泻白散质量控制提供参考<sup>[35]</sup>。后期会以甘草和粳米配伍产生的新成分为研究对象,开展药效研究,从药理学完善甘草和粳米配伍的合理性和科学性。另外,从药性的角度

推测,君药桑白皮和臣药地骨皮二者药性属寒,甘草和粳米配伍有利于缓解桑白皮和地骨皮的寒凉之性,因此,粳米的加入必不可少,甘草虽然在方中用量较少,但也发挥重要作用。目前研究为终点检测,后续会引入时间梯度动态采样,来探讨甘草、粳米在煎煮过程中对泻白散成分释放、转化、降解的动态影响,进一步揭示配伍对成分迁移转化的实时调控机制。

总之泻白散中甘草和粳米配伍具有一定的科学性,体现了在君臣佐使的配伍原则中,佐使药的用法在配伍中占有重要地位。至于粳米对煎液的影响还需开展深入研究,寻找新的解决方式,故在开发经典名方泻白散研究时应遵循传统配伍煎煮方法,才能使得泻白散得以发挥更好的治疗作用。

**利益冲突** 所有作者均声明不存在利益冲突

#### 参考文献

- [1] 国家中医药管理局. 国家中医药管理局关于发布《古代经典名方目录(第一批)》的通知 [EB/OL]. (2018-04-13) [2025-04-21]. <http://kjs.satcm.gov.cn/zhengcewenjian/2018-04-16/7107.html>.
- [2] 钱乙,郭君双. 小儿药证直诀 [M]. 北京:人民卫生出版社:2023:104.
- [3] 李玉丽. 经典名方泻白散方义衍变及本草考证探究 [D]. 长沙:湖南中医药大学,2020.
- [4] 崔翠翠,孙建新,刘元昆. 泻白散研究进展 [J]. 中国民间疗法,2024,32(9):120-123.
- [5] 李莉,文旺,周焜焜,等. 泻白散及其主药体外抗氧化活性研究 [J]. 药物评价研究,2020,43(10):2009-2014.
- [6] 杨宗统,徐东川,刘瑾,等. 基于非靶向代谢组学和肠道菌群探究经典名方泻白散对过敏性哮喘大鼠的保护作用 [J]. 中国实验动物学报,2024,32(2):177-189.
- [7] 向泽栋,李震,张兵,等. 基于网络药理学和分子对接技术探讨经典名方泻白散治疗肺炎的潜在作用机制 [J]. 世界科学技术—中医药现代化,2021,23(6):1812-1820.
- [8] 覃芳芳,丘琴,韦红杏,等. 泻白散的研究进展及质量标志物(Q-Marker)预测分析 [J/OL]. 中华中医药学刊,(2024-12-20) [2025-04-10]. <https://link.cnki.net/urlid/21.1546.R.20241220.1605.002>.
- [9] 卢水,姜德友. 粳米方药考略 [J]. 中国医药导报,2024,21(9):141-144.
- [10] 王锐,邱智东,刘滢,等. Box-Behnken 响应面结合 FAHP-熵权法和基准关联度优化经典名方泻白散的提取工艺 [J]. 中草药,2023,54(18):5923-5932.
- [11] 方妍. 经典名方泻白散标准汤剂的研究 [D]. 长春:长春中医药大学,2020.

- [12] 张晨, 蒲翔, 曾宪法, 等. 基于“培土生金”理论探讨粳米-甘草配伍在儿童肺炎中的防治思路 [J]. 贵州中医药大学学报, 2024, 46(1): 1-4.
- [13] 周奕. 基于“甘能缓”理论的药食同源甘味药及其药对配伍规律研究 [D]. 福州: 福建中医药大学, 2021.
- [14] 曾文莉, 代云桃, 刘艳, 等. 以泻白散为例探讨经典名方复方制剂开发中粳米对汤剂理化性质的影响 [J]. 时珍国医国药, 2024, 35(10): 2389-2394.
- [15] 么春旭, 张静泽, 刘岱琳. 经典名方泻白散研究进展及质量标志物的预测分析 [J]. 天津中医药大学学报, 2024, 43(4): 341-347.
- [16] 马天宇, 肖智杰, 段卓然, 等. 泻白散质量标志物的发现及其作用机制预测分析 [J]. 中国药事, 2024, 38(2): 189-200.
- [17] 赵一颖. 芍药甘草汤治疗类风湿关节炎的药效及作用机制研究 [D]. 北京: 北京中医药大学, 2023.
- [18] 龚春霞, 蒋叶珂, 潘凌宇, 等. 基于UPLC-QE-MS技术分析甘姜苓术配方颗粒的化学成分 [J]. 现代中药研究与实践, 2023, 37(6): 44-50.
- [19] Yalkun I, Wan H F, Ye L L, *et al.* Qualitative and quantitative analysis of chemical components in Yinhu Pinggan Granule with high-performance liquid chromatography coupled with Q-exactive mass spectrometry [J]. *Molecules*, 2024, 29(10): 2300.
- [20] 高文雅. 经典名方清心莲子饮物质基础及其干预糖尿病肾病模型疗效评价研究 [D]. 北京: 中国中医科学院, 2021.
- [21] 马晓云. 五味降压方化学成分研究及基于代谢的药效物质基础研究方法初探 [D]. 北京: 北京中医药大学, 2017.
- [22] 何坤明. 宝儿康散犬灌胃给药后的血浆暴露物质研究 [D]. 武汉: 湖北大学, 2017.
- [23] 赵按熠. 经典名方泻白散抗 LPS 诱导肺炎的作用机制和药效物质基础研究 [D]. 北京: 中国中医科学院, 2024.
- [24] 沈小月, 宋敏, 杭太俊. LC-MS 法鉴定桑叶中生物碱类成分 [J]. 药物分析杂志, 2016, 36(10): 1737-1744.
- [25] 张玉, 董文婷, 霍金海, 等. 基于 UPLC-Q-TOF-MS 技术的广地龙化学成分分析 [J]. 中草药, 2017, 48(2): 252-262.
- [26] 徐东川, 隋在云, 杨青, 等. 泻白散化学成分的高效液相色谱-四级杆飞行时间串联质谱法分析 [J]. 中华中医药学刊, 2022, 40(9): 251-258.
- [27] 赵晓梅, 程宇欣, 梁彩霞, 等. 基于 UPLC-Q-TOF-MS/MS 技术的吴茱萸化学成分分析 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2021, 27(6): 113-126.
- [28] Li D, Rui Y X, Guo S D, *et al.* Ferulic acid: A review of its pharmacology, pharmacokinetics and derivatives [J]. *Life Sci*, 2021, 284: 119921.
- [29] Ye H, He B B, Zhang Y J, *et al.* Herb-symptom analysis of Erchen decoction combined with Xiebai Powder formula and its mechanism in the treatment of chronic obstructive pulmonary disease [J]. *Front Pharmacol*, 2023, 14: 1117238.
- [30] 王彦, 高艳, 罗菊元, 等. 泻白散的物质基准量值传递分析 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2021, 27(21): 1-9.
- [31] 王彦帅, 丁浩强, 郑鑫杰, 等. 经典名方泻白散物质基准 HPLC 指纹图谱的建立及 3 种指标成分含量测定 [J]. 中草药, 2020, 51(11): 2946-2953.
- [32] 许悦, 马富智, 阿依曼·叶尔江, 等. 空间代谢组学揭示泻白散改善肺-脑轴代谢治疗肺热咳嗽 [J/OL]. 中国实验方剂学杂志, (2025-08-28) [2025-09-18]. <https://doi.org/10.13422/j.cnki.syfjx.20251701>.
- [33] 卢林, 吴君金, 马强, 等. UPLC 研究白虎汤不同配伍对芒果苷含量的影响 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2011, 17(9): 35-37.
- [34] 陈芳雯, 王凤霞, 张双辰, 等. 基于分子自组装的甘草配伍机制及其创新制剂设计与应用研究进展 [J]. 药学学报, 2025, 60(7): 2158-2166.
- [35] 张会敏, 杨宗统, 苏本正, 等. 高效液相色谱指纹图谱评价泻白散及其 3 种单味药内在质量 [J]. 化学分析计量, 2021, 30(9): 48-53.

[责任编辑 郑礼胜]