

基于代谢组学的不同山药种质资源的化学比较

王晓民¹, 胡晓丽¹, 许爱玲¹, 关望辉¹, 韩丽丽¹, 张鹏飞¹, 李震宇^{2*}

1. 山西农业大学棉花研究所, 山西 运城 044000

2. 山西大学 中医药现代研究中心, 山西 太原 030006

摘要: 目的 对不同品种的山药 *Dioscoreae Rhizoma* 进行比较, 揭示其化学成分差异, 为山药品种定向选育提供依据。方法 收集 8 批不同种质的山药资源, 对其农艺性状进行测定与比较; 采用超高效液相色谱-四极杆-飞行时间串联质谱 (UPLC-Q-TOF-MS/MS) 非靶向代谢组学技术, 系统解析其化学成分。通过主成分分析与聚类热图分析、相关性图等多种分析方法, 解析不同品种间的代谢产物差异及其与农艺性状的关联性。**结果** 8 批山药在产量、块茎形态等指标差异显著。基于高分辨质谱共鉴定 8 批山药中共有成分肽类、氨基酸类、黄酮类、皂苷类等化学成分 164 种。主成分分析表明, 8 批不同的山药种质资源存在显著差异, 晋山药、太谷山药、双棒山药、麻山药中皂苷类成分相对较高, 而太谷山药、晋山药、麻山药在黄酮类成分具有相似的化学特征。聚类热图分析揭示了潜在的化学标志物, 可以为不同品种间的快速鉴别提供依据。铁棍山药和山东细毛这类药食兼用山药与其他品种的化学差异可能体现在氨基酸和肽类方面。相关性图表明茎粗与皂苷类成分显著正相关; 零余子重则与皂苷、黄酮正相关, 与氨基酸和肽类负相关。**结论** 8 批山药存在不同的化学特征, 所揭示的化学差异为定向选育山药药用和食用专用品种提供了科学依据。

关键词: 山药; 薯蓣; 代谢组学; UPLC-Q-TOF-MS/MS; 种质资源; 化学比较

中图分类号: R284.1 文献标志码: A 文章编号: 0253-2670(2026)09 - 3300 - 13

DOI:10.7501/j.issn.0253-2670.2026.09.004

Chemical comparison of different *Dioscoreae Rhizoma* germplasm resources based on metabolomics

WANG Xiaomin¹, HU Xiaoli¹, XU Ailing¹, GUAN Wanghui¹, HAN Lili¹, ZHANG Pengfei¹, LI Zhenyu²

1. Cotton Research Institute, Shanxi Agricultural University, Yuncheng 044000, China

2. Modern Research Center for Traditional Chinese Medicine, Shanxi University, Taiyuan 030006, China

Abstract: Objective To compare different varieties of *Dioscoreae Rhizoma* and reveal their chemical differences, providing a basis for targeted breeding of *Dioscoreae Rhizoma* varieties. **Methods** Eight batches of *Dioscoreae Rhizoma* materials with different germplasms were collected, their agronomic traits were measured and compared. Subsequently, ultra-high performance liquid chromatography coupled with quadrupole time-of-flight tandem mass spectrometry (UPLC-Q-TOF-MS/MS)-based untargeted metabolomic approach was employed to systematically analyze their chemical compositions. Multivariate statistical methods, including principal component analysis (PCA), cluster heatmap analysis and correlation plots, were used to dissect the metabolic product differences among varieties and their associations with agronomic traits. **Results** The eight batches of *Dioscoreae Rhizoma* showed significant differences in indicators such as yield and tuber morphology. Based on high-resolution mass spectrometry, 164 chemical components were identified across the eight batches of *Dioscoreae Rhizoma*, including peptides, amino acids, flavonoids, and saponins. PCA indicated significant differences among the eight batches of *Dioscoreae Rhizoma* germplasm resources. Saponin levels were relatively high in Jin *Dioscoreae Rhizoma*, Taigu *Dioscoreae Rhizoma*, Shuangbang *Dioscoreae Rhizoma*, and Ma *Dioscoreae Rhizoma*, while Taigu *Dioscoreae Rhizoma*, Jin *Dioscoreae Rhizoma*, and Ma *Dioscoreae Rhizoma* exhibited similar chemical

收稿日期: 2025-12-09

基金项目: 国家农业农村部现代农业产业技术体系山药运城综合试验站 (CARS-21); 山药种质资源创制与新品种选育研究 (YCKJ-2023014); 国家中医药管理局青年岐黄学者培养项目 (2022-256)

作者简介: 王晓民, 副研究员, 从事山药育种与栽培工作。E-mail: mhswxm@163.com

*通信作者: 李震宇, 博士生导师, 研究方向为中药质控和代谢组学研究。E-mail: lizhenyu@sxu.edu.cn

characteristics in terms of flavonoids. Cluster heatmap analysis revealed potential chemical markers, providing a basis for rapid discrimination among different varieties. The chemical differences between medicinal-edible *Dioscoreae Rhizoma* varieties such as Tiegun *Dioscoreae Rhizoma* and Shandong Ximao and other varieties may be related with amino acids and peptides. The correlation network indicated that stem diameter was significantly positively correlated with saponins, while bulbils weight showed positive correlations with saponins and flavonoids but negative correlations with amino acids and peptides. **Conclusion** The eight different batches of *Dioscoreae Rhizoma* possess distinct chemical characteristics, which provide a scientific basis for the targeted breeding of medicinal and edible-specific *Dioscoreae Rhizoma* varieties.

Key words: *Dioscoreae Rhizoma*; *Dioscorea opposita* Thunb.; metabolomics; UPLC-Q-TOF-MS/MS; germplasm resources; chemical comparisons

山药 *Dioscoreae Rhizoma* 为薯蓣科 (*Dioscoreaceae*) 薯蓣属 *Dioscorea* L. 薯蓣 *Dioscorea opposita* Thunb. 的干燥根茎, 始载于《神农本草经》, 被列为上品, 其营养价值丰富, 富含蛋白质, 氨基酸, 淀粉, 钙、镁、铁、锌等^[1], 具有补脾养胃、生津益肺、补肾涩精的功效^[2]。山药被列入中华人民共和国卫生部第一批公布的既是食品又是药品的名单之中, 属于典型的药食同源中药材, 也是我国出口创汇的重要产品。据不完全统计, 全国鲜山药总产值 1 786 亿元, 是特色产业中的千亿元产业。

在中国, 山药种质资源丰富, 几乎所有省份都有种植, 其中包括大量的地方品种。已有研究采用农艺性状、扩增片段长度多态性等方法对山药种质资源的分类、评价和利用做了研究^[3]。近年来, 代谢组学在不同品种山药化学成分的比较方面研究不断深入。腊贵晓等^[4]采用代谢组学方法对铁棍山药和太谷山药的代谢成分进行分析, 发现有 8 种差异代谢物质; 安莉等^[5]利用代谢组学筛选出太谷山药和铁棍山药之间的差异代谢物, 并建立了用于太谷山药和铁棍山药品种鉴别的最小绝对收缩和选择算法 (least absolute shrinkage and selection operator, LASSO) 回归预测模型, 为山药的鉴别提供了新的思路。魏亮等^[6]基于代谢组学技术比较不同产地铁棍山药的化学成分差异, 为道地山药的产

地鉴别提供了理论依据。

本研究收集了 8 批种植于同一试验田的不同山药种质资源, 首先进行农艺性状比较, 然后采用液相色谱-质谱联用 (LC-MS) 技术对山药的化学成分进行系统鉴定, 最后采用代谢组学技术比较 8 批不同种质资源山药的化学差异, 以期作为山药的品种选育提供依据。

1 仪器与材料

ExionLC™AD (AB SCIEX 公司), 5600 QTOF 质谱仪 (AB SCIEX 公司), KQ 5200E 型超声波清洗器 (昆山市超声仪器有限公司), 色谱柱 Waters Acquity UPLC HSST3 (100 mm×2.1 mm, 1.8 μm), 微孔滤膜 (津腾尼龙 66, 0.22 μm)。质谱级甲醇、甲酸和乙腈 (Fisher 公司)、超纯水。

从山西、河北、河南、山东不同地区收集 8 批不同的山药种质资源, 均种植于山西农业大学棉花研究所南化农场试验田, 由山西省农业科学院棉花研究所王晓民副研究员鉴定为薯蓣 *Dioscorea opposita* Thunb. 的块茎, 具体信息见表 1。每个山药品种均随机取样 5 根, 每根取中间 2 段, 研磨成粉状, 然后将粉末混匀取样。

2 方法

2.1 样品制备

将山药样本真空冷冻低温干燥, 将冻干样品研

表 1 8 批不同山药种质资源

Table 1 Eight batches of diverse *Dioscoreae Rhizoma* germplasm resources

编号	种质资源名称	来源地	经纬度	茎粗/mm	零余子重/g	单株产量/g	块茎长度/cm	块茎宽度/cm
1	晋山药 1 号	山西汾阳	111.8°E, 37.3°N	3.94	2.09	896.5	106.1	4.43
2	太谷山药	山西太谷	112.7°E, 37.5°N	2.48	3.12	493.5	119.3	2.71
3	山东细毛山药	山东新城	118.1°E, 36.9°N	2.89	1.96	621.4	147.2	2.68
4	白玉山药	河北永清	116.6°E, 39.4°N	2.85	2.12	977.8	93.5	4.02
5	双棒山药	河北永清	116.6°E, 39.4°N	3.50	1.96	806.5	91.9	3.66
6	麻山药	河北蠡县	115.5°E, 38.6°N	3.37	2.09	1 008.3	138.3	3.32
7	铁棍山药	河北永清	116.6°E, 39.4°N	2.24	1.17	512.6	115.8	2.25
8	垆土铁棍山药	河南温县	113.1°E, 34.9°N	2.22	1.14	503.3	97.5	2.76

磨至粉末状,过四号筛。称取 1.0 g,加入 5 mL 甲醇-水(1:1)超声提取 30 min,在 10 000 r/min 的条件下离心 10 min,吸取上清液后,再次 10 000 r/min 下离心 10 min,吸取上清液,过 0.22 μm 微孔滤膜后进样。每批样本设 3 个重复,用于后续分析。

2.2 色谱条件

色谱柱 Waters Acquity UPLC HSST3 柱(100 mm \times 2.1 mm, 1.8 μm),柱温 40 $^{\circ}\text{C}$,流动相为 0.05% 甲酸水(A)-乙腈(B),梯度洗脱:0~1.0 min, 3% B; 1.0~10 min, 3%~30% B; 10~20 min, 30%~90% B; 20~26 min, 90%~99% B; 体积流量 0.3 mL/min,进样量 3 μL 。

2.3 质谱条件

电喷雾离子源(ESI),正、负离子模式,喷雾电压(IS)为+5 500 V、-4 500 V;离子源温度(TEMP)为 500 $^{\circ}\text{C}$;气帘气(CUR)为 241 kPa;雾化气(GS1)和辅助气(GS2)均为 379 kPa。

2.4 数据处理

采用 SCIEX OS 软件采集并处理质谱数据。基于高分辨质谱提供的精确分子量与二级碎片信息,并结合 MSDIAL、PubChem、HMDB 等数据库及相关文献的质谱数据对化合物进行指认。使用 XCMS R 代码包对 8 批山药正负离子数据进行峰提取。使用迈维云平台(Metware Cloud)进行相关性热图的绘制,使用 SIMCA-P14.1 软件进行代谢产物的主成分分析(principal component analysis, PCA),使用微生信-在线生物信息学分析、可视化云平台进行每类化合物聚类热图的绘制。

3 结果与分析

3.1 不同山药农艺性状的比较

8 批山药的外观特征图如图 1 所示,可见所有

材料均为长山药类型。农艺性状见表 1。晋山药 1 号为山西农业大学经济作物研究所通过化学诱变及系统选育而成的山药品种,2014 年通过山西省农作物品种审定委员会认定。该品种块茎较粗,单株产量 896.5 g,长 106.1 cm,宽 4.43 cm,芦头短粗,根毛较少,表皮土黄色,表面光滑,肉色乳白色,断面颗粒感强,以食用为主。太谷山药为山西省种植历史悠久的地方品种,块茎细长,单株产量 493.5 g,长 119.3 cm,宽 2.71 cm,芦头细长,根毛较少,表皮米黄色有红斑,表面光滑,肉色黄白色,肉质细腻,药食兼用。

山东细毛山药主要产于山东省桓台县新城镇和济宁地区嘉祥县,块茎细长,单株产量 621.4 g,长 147.2 cm,宽 2.68 cm,芦头特别细长,根毛较少,表皮浅褐色,表面较光滑,肉色乳白色,药食兼用。白玉山药种植范围较广,主要在江西省的万安和崇义、湖南益阳、安徽黄山、福建、广东、广西、四川、陕西和河北等省,该品种块茎粗,芦头长,单株产量 977.8 g,长 93.5 cm,宽 4.02 cm,根毛较少,表皮浅褐色,表面较光滑,肉色乳白色,断面颗粒感强,以食用为主。双棒山药是在长期自然和人工选择下形成的农家品种,主要在河北的衡水、安平县、邯郸、邱县、保定、蠡县以及山东、河南等省份种植,单株块茎 1~2 个,块茎较粗,芦头较短,单株产量 806.5 g,长 91.9 cm,宽 3.66 cm,根毛较多,表皮浅褐色,表面光滑,肉色乳白色,断面颗粒感强,以食用为主。麻山药主要栽培于河北省蠡县,块茎较粗,芦头细长,单株产量 1 008.3 g,长 138.3 cm,宽 3.32 cm,根毛多且密,表皮浅褐色带红斑,表面光滑,肉色乳白色,断面颗粒感强,以食用为主。

铁棍山药和垆土铁棍主要种植于山西省南部沿黄县市和河南省温县,由于栽培模式的不同,山药



图 1 8 批不同山药外观特征比较

Fig. 1 Comparison of appearance characteristics of eight different batches of *Dioscoreae Rhizoma*

块茎有一定区别，垆土铁棍山药较短，表皮颜色较深，表面有瘤状突起，但都属于药食兼用型山药。墟沟栽培的铁棍山药单株产量 512.6 g，长 115.8 cm，宽 2.25 cm，根毛较少，表皮浅褐色发红，表面光滑，肉色乳白色，肉质致密、干、绵。实沟栽培的垆土铁棍单株产量 503.3 g，长 97.5 cm，宽 2.76 cm，根毛较多，表皮褐色发红，表面有瘤状突起，肉色乳白色，肉质致密、干、绵。

综上，晋山药 1 号、白玉山药、双棒山药和麻山药均为食用为主的山药，其特征是块茎较粗，约 3.3~4.5 cm，平均 3.9 cm；太谷山药、山东细毛、

铁棍山药和垆土铁棍均为药食兼用的山药，其特征是块茎较细，约 2.2~2.8 cm，平均 2.6 cm。结合产量数据来看，块茎粗细与产量存在相关性，即块茎较粗的产量较高（单株产量在 800~1 000 g），这类山药以食用为主，而块茎较细的山药品种产量较低（单株产量 500~600 g），药食兼用。

3.2 山药代谢产物鉴定与比较分析

采用液相色谱-质谱联用法，8 批山药共检测到 164 种共有代谢产物，其中包括皂苷类 19 种、黄酮类 14 种、氨基酸 13 种、肽类 53 种、脂质 9 种、其他 56 种（表 2）。

表 2 山药已鉴定成分的 MS 数据

Table 2 MS data of chemical components identified in *Dioscoreae Rhizoma*

编号	化合物名称	分子式	离子模式	<i>t</i> _R /min	理论值 <i>m/z</i>	实测值 <i>m/z</i>	误差	碎片离子	分类
1	Ser-Phe	C ₁₂ H ₁₆ N ₂ O ₄	[M+H] ⁺	0.70	253.118 3	253.118 5	0.7	235.104 5, 166.085 8, 120.080 7, 60.044 5	肽类
2	亚精胺	C ₇ H ₁₉ N ₃	[M+H] ⁺	0.76	146.165 2	146.164 7	-3.5	72.080 6, 84.080 6, 112.112 0, 146.163 5	脂质
3	赖氨酸	C ₆ H ₁₄ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	0.82	147.112 8	147.112 5	-2.5	130.086 0, 84.080 4, 56.049 4, 55.053 8	氨基酸
4	精氨酸	C ₆ H ₁₄ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	0.91	175.119 0	175.118 7	-1.2	70.064 5, 112.086 4, 116.069 7, 130.096 8, 175.118 2	氨基酸
5	脯氨酸	C ₅ H ₉ NO ₂	[M+H] ⁺	0.93	116.070 6	116.069 8	-7.3	116.071 5, 70.064 9, 68.0481	氨基酸
6	组氨酸	C ₆ H ₉ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	0.94	156.076 8	156.076 7	-0.4	156.075 7, 110.070 9, 83.060 0, 95.060 3	氨基酸
7	葫芦巴碱	C ₇ H ₇ NO ₂	[M+H] ⁺	0.98	138.055 0	138.054 5	-3.4	80.0491, 93.056 4, 120.045 5, 138.054 4	其他
8	N _α -单甲基-L-精氨酸乙酸盐	C ₇ H ₁₆ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	0.98	189.134 6	189.134 4	-1.4	70.064 6, 74.071 1, 116.070 2, 144.112 6, 158.091 9, 189.134 9	其他
9	尿囊素	C ₄ H ₆ N ₄ O ₃	[M+H] ⁺	1.01	159.051 3	159.050 7	-0.8	159.075 4, 61.039 6, 99.018 2, 73.039 6	其他
10	L-2-哌啶酸	C ₆ H ₁₁ NO ₂	[M+H] ⁺	1.19	130.086 3	130.086 0	-1.9	56.049 3, 82.065 3, 84.080 6, 130.086 7	其他
11	山柰酚	C ₁₅ H ₁₀ O ₆	[M+H] ⁺	1.30	287.055 0	287.054 5	-1.6	287.065 9, 286.141 5	黄酮类
12	Val-Arg	C ₁₁ H ₂₃ N ₅ O ₃	[M+H] ⁺	1.39	274.187 4	274.187 5	0.4	274.187 5, 175.118 1, 70.064 9, 72.080 7	肽类
13	单磷酸腺苷	C ₁₀ H ₁₄ N ₅ O ₇ P	[M+H] ⁺	1.42	348.070 4	348.070 7	0.9	97.028 2, 119.035 5, 136.061 2, 348.070 4	其他
14	甲硫氨酸	C ₅ H ₁₁ NO ₂ S	[M+H] ⁺	1.43	150.058 3	150.057 8	-3.5	74.022 9, 87.025 6, 104.051 8, 150.057 8	氨基酸
15	谷胱甘肽	C ₁₀ H ₁₇ N ₃ O ₆ S	[M+H] ⁺	1.52	308.091 1	308.091 5	1.4	58.994 7, 76.021 3, 84.044 1, 116.016 3, 130.049 8, 162.021 8, 308.091 0	肽类
16	缬氨酸	C ₅ H ₁₁ NO ₂	[M+H] ⁺	1.57	118.086 3	118.085 8	-3.8	55.054 0, 72.080 4	氨基酸
17	Val-Glu	C ₁₀ H ₁₈ N ₂ O ₅	[M+H] ⁺	1.64	247.128 9	247.128 7	-0.5	247.129 2, 148.060 7, 84.043 6, 72.080 3	肽类
18	Val-Gln	C ₁₀ H ₁₉ N ₃ O ₄	[M+H] ⁺	1.74	246.144 8	246.144 7	-0.4	147.076 5, 84.043 6, 72.080 4	肽类
19	烟酸(维生素 B3)	C ₆ H ₅ NO ₂	[M+H] ⁺	1.85	124.039 3	124.039 0	-2.3	124.039 4, 80.049 5, 78.034 1	其他
20	Pro-Ala	C ₈ H ₁₄ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	1.90	187.107 7	187.107 5	-1.1	187.109 5, 159.072 5, 116.069 9, 70.064 7	肽类
21	Pro-Val	C ₁₀ H ₁₈ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	1.96	215.139 0	215.138 1	-4.1	215.137 1, 72.081 5, 70.065 7	肽类
22	Leu-His	C ₁₂ H ₂₀ N ₄ O ₃	[M+H] ⁺	2.12	269.160 8	269.161 0	0.6	269.160 7, 223.154 6, 156.075 6, 110.071 1	肽类
23	尿嘧啶	C ₄ H ₄ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	2.15	113.034 6	113.034 0	-5.0	68.014 0, 70.027 6, 95.021 9, 113.033 7	其他
24	氧化型谷胱甘肽	C ₂₀ H ₃₂ N ₆ O ₁₂ S ₂	[M+H] ⁺	2.20	613.159 2	613.159 7	0.8	613.159 6, 130.049 2, 179.047 1, 199.071 7	肽类
25	Leu-Arg	C ₁₂ H ₂₅ N ₅ O ₃	[M+H] ⁺	2.38	288.203 0	288.202 8	-0.9	288.203 1, 175.118 9, 116.069 3, 86.095 4, 70.064 4	肽类
26	多巴胺	C ₈ H ₁₁ NO ₂	[M+H] ⁺	2.39	154.086 3	154.086 1	-0.8	91.054 1, 119.049 0, 137.059 5, 154.097 3	其他
27	Cyclo(His-Pro)	C ₁₁ H ₁₄ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	2.43	235.119 0	235.119 1	0.3	235.118 8, 207.123 2, 110.070 2, 70.064 3	肽类

表2 (续)

编号	化合物名称	分子式	离子模式	t_R/min	理论值 m/z	实测值 m/z	误差	碎片离子	分类
28	去甲猪毛菜碱	$\text{C}_{10}\text{H}_{13}\text{NO}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	2.44	180.101 9	180.101 8	-0.7	127.053 5, 145.064 7, 163.075 4, 180.101 8	其他
29	Ile-Lys	$\text{C}_{12}\text{H}_{25}\text{N}_3\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	2.46	260.196 9	260.197 1	0.8	260.197 5, 147.113 8, 86.096 3, 84.080 5	肽类
30	异亮氨酸	$\text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	2.50	132.101 9	132.101 5	-2.7	56.049 3, 69.069 3, 86.095 7, 132.101 8	氨基酸
31	Ile-His	$\text{C}_{12}\text{H}_{20}\text{N}_4\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	2.63	269.160 8	269.161 4	2.3	269.160 4, 223.155 0, 156.075 8, 110.070 7	肽类
32	酪胺	$\text{C}_8\text{H}_{11}\text{NO}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	2.64	138.091 3	138.090 9	-2.9	77.037 9, 91.053 5, 103.053 5, 121.064 1	其他
33	S-腺苷基高半胱氨酸	$\text{C}_{14}\text{H}_{20}\text{N}_6\text{O}_5\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	2.67	385.128 9	385.128 6	-0.6	88.021 4, 134.026 9, 136.061 8, 385.130 2	其他
34	酪氨酸	$\text{C}_9\text{H}_{11}\text{NO}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	2.72	182.081 2	182.081 0	-0.9	123.043 8, 91.053 9, 95.048 9, 119.048 9	氨基酸
35	环磷酸鸟苷	$\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{N}_5\text{O}_7\text{P}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	2.92	346.054 7	346.055 0	0.7	110.034 7, 135.029 6, 152.056 1	其他
36	Leu-Gln	$\text{C}_{11}\text{H}_{21}\text{N}_3\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	2.96	260.160 5	260.160 6	0.6	147.075 6, 130.048 6, 84.043 1	肽类
37	Glu-Val	$\text{C}_{10}\text{H}_{18}\text{N}_2\text{O}_5$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	2.98	247.128 9	247.129 3	1.7	229.119 0, 118.085 2, 84.043 7, 72.080 2	肽类
38	腺苷	$\text{C}_{10}\text{H}_{13}\text{N}_5\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	3.11	268.104 0	268.104 5	1.7	119.034 5, 136.060 8, 268.104 1	其他
39	Ile-Arg	$\text{C}_{12}\text{H}_{25}\text{N}_5\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	3.27	288.203 0	288.202 7	-0.1	288.202 7, 175.119 4, 112.085 7, 86.096 8, 70.064 2	肽类
40	鸟苷	$\text{C}_{10}\text{H}_{13}\text{N}_5\text{O}_5$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	3.49	284.098 9	284.099 1	0.4	110.035 2, 135.030 0, 152.056 2	其他
41	Val-Val	$\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	4.04	217.154 7	217.154 9	1.1	217.153 9, 118.085 1, 72.080 3, 55.053 5	肽类
42	Cyclo(Pro-Pro)	$\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	4.16	195.112 8	195.112 9	0.7	195.114 8, 167.118 3, 98.060 9, 70.063 9	肽类
43	苯丙氨酸	$\text{C}_9\text{H}_9\text{NO}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	4.31	166.086 3	166.086 0	-1.4	91.053 4, 103.053 2, 120.080 0, 166.086 9	氨基酸
44	Val-Pro	$\text{C}_{10}\text{H}_{18}\text{N}_2\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	4.45	215.139 0	215.138 8	-1.2	215.128 6, 116.069 6, 72.080 1, 70.064 6	肽类
45	γ -Glu-val	$\text{C}_{10}\text{H}_{18}\text{N}_2\text{O}_5$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	4.58	247.128 9	247.129 1	1.0	247.125 9, 118.086 1, 84.044 4, 72.079 7	肽类
46	Ser-Leu	$\text{C}_9\text{H}_{18}\text{N}_2\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	4.69	219.133 9	219.134 0	0.2	219.134 1, 132.101 3, 86.096 1, 60.044 3	肽类
47	Gly-Ala-Leu	$\text{C}_{11}\text{H}_{21}\text{N}_3\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	4.94	260.160 5	260.160 6	0.5	260.065 6, 132.101 2, 86.095 2	肽类
48	维生素 B5	$\text{C}_9\text{H}_7\text{NO}_5$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.02	220.118 0	220.117 9	-0.2	220.117 9, 124.075 4, 98.023 4, 72.044 3	其他
49	Ala-Leu	$\text{C}_9\text{H}_{18}\text{N}_2\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.02	203.139 0	203.138 9	-0.5	203.140 6, 185.131 3, 132.101 0, 86.095 7	肽类
50	Gln-Leu	$\text{C}_{11}\text{H}_{21}\text{N}_3\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.08	260.160 5	260.160 2	-1.2	243.134 9, 132.101 5, 86.095 8, 84.043 8	肽类
51	Thr-Leu	$\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.08	233.149 6	233.149 8	0.9	233.150 2, 132.101 4, 86.096 6, 74.059 0	肽类
52	Cyclo(Glu-Leu)	$\text{C}_{11}\text{H}_{18}\text{N}_2\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.28	243.133 9	243.134 3	1.4	243.124 9, 86.094 9, 84.044 0	肽类
53	Pro-His	$\text{C}_{11}\text{H}_{16}\text{N}_4\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.31	253.129 5	253.129 6	0.4	253.131 1, 236.103 1, 190.097 4, 70.064 8	肽类
54	Tyr-Pro	$\text{C}_{14}\text{H}_{18}\text{N}_2\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.38	279.133 9	279.134 7	2.6	279.130 9, 136.075 3, 116.070 9, 70.065 8	肽类
55	Thr-Phe	$\text{C}_{13}\text{H}_{18}\text{N}_2\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.40	267.133 9	267.133 8	-0.3	267.132 7, 120.081 8, 91.052 7, 84.044 1	肽类
56	Asp-Leu	$\text{C}_{10}\text{H}_{18}\text{N}_2\text{O}_5$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.48	247.128 9	247.128 9	0.1	247.131 6, 132.101 8, 88.039 3, 86.096 4	肽类
57	Thr-Ile	$\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.74	233.149 6	233.149 5	-0.4	233.153 9, 132.101 3, 86.096 8, 74.059 5	肽类
58	Phe-Thr	$\text{C}_{13}\text{H}_{18}\text{N}_2\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.79	267.133 9	267.133 7	-0.9	267.133 9, 103.053 9, 91.054 4, 84.043 6	肽类
59	Leu-Pro	$\text{C}_{11}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.85	229.154 7	229.154 6	-0.3	229.156 2, 116.071 2, 86.096 6, 70.065 0	肽类
60	Val-Leu	$\text{C}_{11}\text{H}_{22}\text{N}_2\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.87	231.170 3	231.170 4	0.4	231.170 2, 132.103 0, 86.095 1, 72.080 0	肽类
61	吡啶-3-甲醛	$\text{C}_5\text{H}_7\text{NO}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.95	146.060 0	146.059 7	-2.4	146.060 7, 118.065 4, 117.057 1, 91.054 0	其他
62	色氨酸	$\text{C}_{11}\text{H}_{12}\text{N}_2\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	5.96	205.097 2	205.097 2	0.3	118.063 6, 144.079 2, 146.058 7, 188.069 7	氨基酸
63	Ala-Phe	$\text{C}_{12}\text{H}_{16}\text{N}_2\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	6.01	237.123 4	237.122 9	-1.9	191.009 3, 166.086 2, 120.080 2	肽类
64	Ile-Pro	$\text{C}_{11}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	6.10	229.154 7	229.154 8	0.7	229.154 6, 116.070 4, 86.096 2, 70.064 9	肽类
65	香草酸	$\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	6.11	169.049 5	169.049 5	-0.4	169.069 1, 153.066 2, 151.041 3	其他
66	Leu-Val	$\text{C}_{11}\text{H}_{22}\text{N}_2\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	6.11	231.170 3	231.170 0	-1.3	231.175 1, 100.077 7, 86.097 4, 69.070 5	肽类
67	Gly-Phe	$\text{C}_{11}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	6.29	223.107 7	223.106 8	-3.9	166.087 1, 120.080 1, 103.053 9	肽类
68	Cyclo(Glu-Phe)	$\text{C}_{14}\text{H}_{16}\text{N}_2\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	6.39	277.118 3	277.118 8	1.7	276.078 2, 120.079 4, 84.043 4	肽类
69	Val-Ile	$\text{C}_{11}\text{H}_{22}\text{N}_2\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	6.44	231.170 3	231.170 3	0.1	231.172 5, 185.161 2, 132.101 3, 86.095 6	肽类
70	犬尿酸	$\text{C}_{10}\text{H}_7\text{NO}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	6.52	190.049 9	190.049 8	-0.3	89.038 1, 116.048 8, 144.043 9, 190.051 6	其他
71	Glu-Ile	$\text{C}_{11}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_5$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	6.61	261.144 5	261.144 8	1.0	261.143 6, 132.100 9, 86.096 1, 84.044 2	肽类

表2 (续)

编号	化合物名称	分子式	离子模式	<i>t_R</i> /min	理论值 <i>m/z</i>	实测值 <i>m/z</i>	误差	碎片离子	分类
72	咖啡酸	C ₉ H ₈ O ₄	[M+H] ⁺	6.88	181.049 5	181.049 6	0.3	179.080 1, 145.083 5, 181.046 1	其他
73	Leu-Tyr	C ₁₅ H ₂₂ N ₂ O ₄	[M+H] ⁺	7.04	295.165 2	295.065 4	0.6	295.164 0, 136.074 8, 91.053 8, 86.097 3	肽类
74	Gln-Val-Ile	C ₁₆ H ₃₀ N ₄ O ₅	[M+H] ⁺	7.32	359.228 9	359.229 1	0.6	359.229 6, 228.136 3, 132.101 7, 129.063 8	肽类
75	Thr-Trp	C ₁₅ H ₁₉ N ₃ O ₄	[M+H] ⁺	7.37	306.144 8	306.145 3	1.4	306.146 0, 205.098 2, 159.093 6, 74.061 2	肽类
76	Phe-Pro	C ₁₄ H ₁₈ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	7.59	263.139 0	263.140 6	5.9	263.143 2, 120.079 5, 116.070 3, 70.064 7	肽类
77	原花青素 B2	C ₃₀ H ₂₆ O ₁₂	[M+H] ⁺	7.82	579.149 7	579.149 8	0.1	127.038 4, 287.054 6, 409.092 8, 427.102 2	黄酮类
78	Ile-Leu	C ₁₂ H ₂₄ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	7.86	245.186 0	245.186 5	2.3	132.100 9, 86.096 5	肽类
79	Glu-Trp	C ₁₆ H ₁₉ N ₃ O ₅	[M+H] ⁺	8.01	334.139 8	334.140 1	0.9	334.140 8, 205.096 6, 159.091 5, 84.044 2	肽类
80	Leu-Ile	C ₁₂ H ₂₄ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	8.09	245.186 0	245.186 2	0.9	245.191 2, 86.095 6, 69.069 5	肽类
81	儿茶素	C ₁₅ H ₁₄ O ₆	[M+H] ⁺	8.14	291.086 3	291.086 9	2.2	123.043 1, 161.058 7, 207.064 6, 291.086 3	黄酮类
82	表儿茶素	C ₁₅ H ₁₄ O ₆	[M+H] ⁺	8.14	291.086 3	291.086 5	0.6	123.044 1, 165.054 7, 291.086 8	黄酮类
83	Leu-Leu	C ₁₂ H ₂₄ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	8.19	245.186 0	245.186 1	0.5	245.186 6, 132.101 2, 86.095 6	肽类
84	香橙素	C ₁₅ H ₁₂ O ₆	[M+H] ⁺	8.25	289.070 7	289.070 3	-1.3	289.161 0, 243.066 5, 215.071 2, 153.018 7	黄酮类
85	芹菜素	C ₁₅ H ₁₀ O ₅	[M+H] ⁺	8.50	271.060 1	271.060 3	0.6	271.061 5, 215.061 5, 197.056 9, 153.016 7	黄酮类
86	Ile-Ile	C ₁₂ H ₂₄ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	8.53	245.186 0	245.188 7	-1.6	132.100 2, 86.096 4, 70.063 1	肽类
87	Leu-Trp	C ₁₇ H ₂₃ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	9.64	318.181 2	318.181 5	1.0	318.179 4, 301.154 4, 205.098 2, 86.096 0	肽类
88	异牡荆素	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₀	[M+H] ⁺	9.78	433.112 9	433.113 0	0.2	433.114 1, 397.091 1, 367.083 1, 337.071 8	黄酮类
89	槲皮素	C ₁₅ H ₁₀ O ₇	[M+H] ⁺	9.95	303.049 9	303.050 2	0.8	153.016 4, 165.015 2, 257.044 7, 303.050 0	黄酮类
90	Phe-Phe	C ₁₈ H ₂₀ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	10.45	313.154 7	313.154 6	-0.3	313.155 6, 166.085 9, 120.079 9, 103.054 4	肽类
91	伪原纤细薯蓣皂苷	C ₅₁ H ₈₂ O ₂₂	[M+H] ⁺	10.59	1 047.537 1	1 047.536 1	-0.9	1047.533 2, 885.485 6, 271.205 2, 147.063 2, 129.050 0	皂苷类
92	反式阿魏酰酰胺	C ₁₈ H ₁₉ NO ₄	[M+H] ⁺	12.38	314.138 7	314.139 1	1.3	117.033 5, 145.028 0, 177.054 2, 314.138 3	其他
93	伪原薯蓣皂苷	C ₅₁ H ₈₂ O ₂₁	[M+H] ⁺	12.39	1 031.542 1	1 031.537 4	-4.6	1 031.539 3, 869.487 4, 725.376 6, 577.376 7, 415.320 7, 253.195 4, 147.066 9	皂苷类
94	延龄草苷	C ₃₃ H ₅₂ O ₈	[M+H] ⁺	12.43	577.373 5	577.373 3	-0.4	577.376 1, 271.206 4, 253.195 1, 157.102 4	皂苷类
95	迷迭香	C ₂₀ H ₂₄ O ₅	[M+H] ⁺	13.16	345.169 7	345.1713	4.9	345.185 9, 177.091 1, 137.059 5	其他
96	三角叶薯蓣皂苷	C ₄₅ H ₇₂ O ₁₇	[M+Na] ⁺	14.15	907.466 2	907.464 0	-2.4	907.464	皂苷类
97	丹皮酚	C ₉ H ₁₀ O ₃	[M+H] ⁺	14.25	167.070 3	167.069 9	-2.3	167.069 9, 149.058 6, 125.059 7, 91.055 3	其他
98	N-十二烷基乙醇胺	C ₁₆ H ₃₃ NO ₂	[M+H] ⁺	14.49	274.274 1	274.274 3	0.8	70.064 3, 88.074 6, 106.085 3, 212.237 4, 230.247 5, 256.262 6, 274.273 9	脂质
99	山药素III	C ₁₅ H ₁₆ O ₃	[M+H] ⁺	14.67	245.117 2	245.117 7	2.0	121.064 6, 137.059 1, 151.075 5, 245.117 1	其他
100	2,2'-(十四烷基亚氨基)二乙醇	C ₁₈ H ₃₉ NO ₂	[M+H] ⁺	15.52	302.305 4	302.305 5	0.6	70.064 5, 88.075 6, 106.086 6, 240.268 6, 258.276 3, 284.294 1, 302.305 4	脂质
101	尿苷	C ₉ H ₁₂ N ₂ O ₆	[M+H] ⁺	15.65	245.076 8	245.078 5	7.1	115.029 4, 57.070 5, 245.072 7, 133.014 7	其他
102	D-赤式-二氢鞘氨醇	C ₁₈ H ₃₉ NO ₂	[M+H] ⁺	16.08	302.305 4	302.306 4	3.5	284.295 9, 254.283 3, 95.084 9	脂质
103	戊唑醇	C ₁₆ H ₂₂ CLN ₃ O	[M+H] ⁺	16.32	308.152 4	308.152 7	1.0	70.040 0, 125.014 4, 165.045 7, 308.154 1	其他
104	薯蓣皂素	C ₂₇ H ₄₂ O ₃	[M+H] ⁺	16.42	415.320 7	415.320 2	-1.2	415.321 4	皂苷类
105	LPC(15:0)	C ₂₃ H ₄₈ NO ₇ P	[M+H] ⁺	16.68	482.324 1	482.324 1	0	86.096 4, 104.106 2, 184.073 1, 299.256 8, 482.323 7	脂质
106	LPC(18:2(0:0))	C ₂₆ H ₅₀ NO ₇ P	[M+H] ⁺	16.88	520.339 8	520.339 9	0.2	166.062 1, 184.072 9, 502.329 5, 520.238 9	脂质
107	薯蓣皂苷	C ₄₅ H ₇₂ O ₁₆	[M+H] ⁺	19.24	869.489 3	869.492 5	3.6	869.4947, 870.4967, 415.9281	皂苷类
108	PC(16:0/18:1(9Z))	C ₄₂ H ₈₂ NO ₈ P	[M+Na] ⁺	19.71	782.567 0	782.565 8	-1.6	146.9816, 599.4997, 723.4809, 782.5628	脂质
109	Val-Phe	C ₁₄ H ₂₀ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	8.40	265.154 7	265.154 8	0.5	265.157 4, 166.086 9, 120.080 8, 72.080 3	肽类
110	谷氨酰胺	C ₅ H ₁₀ N ₂ O ₃	[M-H] ⁻	0.89	145.061 9	145.062 3	3.3	84.045 8, 101.072 6, 127.051 3, 145.061 4	氨基酸
111	果糖	C ₆ H ₁₂ O ₆	[M-H] ⁻	0.94	179.056 1	179.056 2	0.4	71.015 4, 89.024 9, 101.024 2, 113.024 6	其他
112	蔗糖	C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	[M-H] ⁻	0.96	341.108 9	341.109 3	1.0	341.109 0, 179.055 3, 119.035 5, 89.025 3	其他

表2 (续)

编号	化合物名称	分子式	离子模式	<i>t_R</i> /min	理论值 <i>m/z</i>	实测值 <i>m/z</i>	误差	碎片离子	分类
113	海藻糖	C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	[M-H] ⁻	0.97	341.108 9	341.109 0	0.3	71.015 4, 89.025 1, 113.024 2, 179.055 8	其他
114	苹果酸	C ₄ H ₆ O ₅	[M-H] ⁻	1.00	133.014 3	133.015 0	5.7	59.015 9, 71.015 2, 89.025 0, 133.014 4	其他
115	泛酸	C ₄ H ₆ O ₅	[M-H] ⁻	1.00	133.014 3	133.015 0	5.7	71.015 2, 115.003 9, 133.014 4	其他
116	枸橼酸	C ₆ H ₈ O ₇	[M-H] ⁻	1.10	191.019 7	191.020 4	3.4	87.008 9, 111.008 6, 129.018 9, 191.018 5	其他
117	尿嘧啶核苷酸	C ₉ H ₁₃ N ₂ O ₉ P	[M-H] ⁻	1.36	323.028 6	323.028 9	1.0	96.969 6, 138.979 3, 150.979 7, 323.027 4	其他
118	腺苷-3'-磷酸	C ₁₀ H ₁₄ N ₅ O ₇ P	[M-H] ⁻	1.37	346.055 8	346.055 9	0.3	78.960 0, 134.047 2, 211.001 5, 346.055 9	其他
119	柠檬酸	C ₅ H ₆ O ₄	[M-H] ⁻	1.49	129.019 3	129.020 3	3.1	85.029 7, 129.017 6	其他
120	阿糖尿苷	C ₉ H ₁₂ N ₂ O ₆	[M-H] ⁻	1.58	243.062 3	243.062 3	0.1	82.030 8, 110.024 5, 122.023 9, 243.063 6	其他
121	L-间酪氨酸	C ₉ H ₁₁ NO ₃	[M-H] ⁻	1.74	180.066 6	180.066 7	0.6	72.010 8, 93.035 7, 119.050 0, 180.065 5	氨基酸
122	鸟苷酸	C ₁₀ H ₁₄ N ₅ O ₈ P	[M-H] ⁻	2.20	362.050 7	362.050 7	-0.1	78.959 8, 133.015 8, 211.001 4, 362.052 0	其他
123	5-羟甲基糠醛	C ₆ H ₆ O ₃	[M-H] ⁻	2.91	125.024 4	125.024 9	3.9	125.021 2	其他
124	1-没食子酸酐葡萄糖	C ₁₃ H ₁₆ O ₁₀	[M-H] ⁻	3.47	331.067 1	331.067 2	0.3	125.025 6, 168.006 2, 331.066 1	其他
125	原儿茶酸	C ₇ H ₆ O ₄	[M-H] ⁻	4.49	153.019 3	153.019 7	2.6	65.006 0, 81.035 3, 91.018 7, 153.019 2	其他
126	葡萄糖基丁香酸	C ₁₅ H ₂₀ O ₁₀	[M-H] ⁻	5.41	359.098 4	359.098 6	0.6	182.024 3, 197.043 3, 359.099 0	其他
127	原儿茶醛	C ₇ H ₆ O ₃	[M-H] ⁻	5.64	137.024 4	137.024 9	3.5	108.021 8, 119.012 7, 136.015 1	其他
128	表没食子儿茶素	C ₁₅ H ₁₄ O ₇	[M-H] ⁻	5.73	305.066 7	305.066 7	0.1	83.017 7, 109.031 9, 165.018 0, 179.033 0, 191.067 2, 219.067 2, 305.068 8	黄酮类
129	红果酸	C ₁₁ H ₁₂ O ₆	[M-H] ⁻	6.36	239.056 1	239.056 1	-0.2	149.061 2, 177.055 3, 179.034 5, 239.056 3	其他
130	原花青素 B1	C ₃₀ H ₂₆ O ₁₂	[M-H] ⁻	6.64	577.135 2	577.135 1	-0.1	125.024 0, 289.071 6, 407.077 9, 577.137 7	黄酮类
131	丁香酸	C ₉ H ₁₀ O ₅	[M-H] ⁻	7.03	197.045 6	197.045 7	1	95.015 0, 123.008 7, 182.020 9, 197.045 1	其他
132	报春黄苷	C ₂₁ H ₂₂ O ₁₁	[M-H] ⁻	7.21	449.108 9	449.109 1	0.3	243.065 8, 259.061 0, 287.056 7, 449.109 6	黄酮类
133	N-乙酰-DL-亮氨酸	C ₈ H ₁₅ NO ₃	[M-H] ⁻	7.27	172.097 9	172.098 1	0.8	58.038 4, 128.107 2, 130.086 8, 172.096 2	氨基酸
134	苯丙酮酸	C ₉ H ₈ O ₃	[M-H] ⁻	8.22	163.040 1	163.040 3	1.6	93.034 7, 117.034 5, 119.050 3, 163.039 6	其他
135	芦丁	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₆	[M-H] ⁻	8.53	609.146 1	609.145 5	-1.0	300.027 4, 301.033 1, 609.147 3	黄酮类
136	阿魏酸	C ₁₀ H ₁₀ O ₄	[M-H] ⁻	8.84	193.050 6	193.050 6	0	106.042 9, 134.036 8, 178.025 9, 193.049 2	其他
137	异槲皮素	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₂	[M-H] ⁻	8.88	463.088 2	463.087 3	-1.8	255.028 6, 271.024 6, 301.034 6, 463.087 8	黄酮类
138	金丝桃苷	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₂	[M-H] ⁻	8.89	463.088 2	463.087 8	-0.9	151.002 3, 255.029 3, 301.035 8, 463.087 0	黄酮类
139	hypoglucosin F	C ₅₁ H ₈₄ O ₂₃	[M+HCOO] ⁻	9.41	1 109.538 5	1 109.539 2	0.6	1109.543 4, 1063.536 0	皂苷类
140	9-(2,3-dihydroxypropoxy)-9-oxononanoic acid	C ₁₂ H ₂₂ O ₆	[M-H] ⁻	9.52	261.134 4	261.134 4	0	97.065 5, 123.082 1, 125.097 5, 261.135 8	其他
141	kuzubutenolide A	C ₂₃ H ₂₄ O ₁₀	[M-H] ⁻	9.67	459.129 7	459.130 0	0.8	205.049 5, 233.044 7, 339.089 5, 459.137 0	其他
142	(3R,5R)-3,5-dihydroxy-1,7-bis (4-hydroxyphenyl)heptane-3-O-β-D-glucopyranoside	C ₂₅ H ₃₄ O ₉	[M-H] ⁻	10.14	477.213 0	477.212 7	-0.7	477.213 6, 315.158 8, 149.061 1	皂苷类
143	墨沙酮	C ₁₅ H ₁₂ O ₆	[M-H] ⁻	10.48	287.056 1	287.056 2	0.1	81.034 8, 125.023 2, 177.054 5, 215.071 9	其他
144	dioscoroside E2	C ₂₇ H ₃₈ O ₁₁	[M-H] ⁻	10.54	537.234 1	537.234 5	0.6	537.236 2, 375.181 0, 179.066 6, 135.043 7	皂苷类
145	dioscoroside D	C ₅₁ H ₈₂ O ₂₂	[M+HCOO] ⁻	11.55	1 091.528 0	1 091.5325	4.2	1091.561 3, 1027.525 4, 881.434 5, 735.378 6	皂苷类
146	hannokinol	C ₁₉ H ₂₄ O ₄	[M-H] ⁻	11.55	315.160 2	315.160 4	0.6	93.035 2, 147.080 9, 149.060 5, 315.160 3	其他
147	脱落酸	C ₁₅ H ₂₀ O ₄	[M-H] ⁻	11.68	263.128 9	263.128 9	-0.1	122.038 9, 138.069 0, 153.090 9, 204.115 8	其他
148	dioscoroside B2	C ₅₁ H ₈₀ O ₂₂	[M+HCOO] ⁻	11.72	1 095.559 3	1 095.554 7	-4.1	1095.540 1, 1049.548 8	皂苷类
149	原薯蓣皂苷	C ₅₁ H ₈₄ O ₂₂	[M-H] ⁻	11.73	1 047.538 2	1 047.536 2	-1.9	1047.538 7, 901.482 3, 755.437 3	皂苷类
150	原新薯蓣皂苷	C ₅₁ H ₈₀ O ₂₂	[M+HCOO] ⁻	11.74	1 093.543 6	1 093.547 5	3.5	1093.550 4, 1047.544 2, 901.495 7, 755.439 8, 593.367 5	皂苷类
151	癸二酸	C ₁₀ H ₁₈ O ₄	[M-H] ⁻	11.85	201.113 2	201.113 3	0.4	139.112 0, 157.121 3, 183.102 4, 201.112 3	其他
152	黄山药皂苷 A1	C ₄₅ H ₇₄ O ₁₈	[M+HCOO] ⁻	11.94	947.485 7	947.485 9	0.2	947.477 1, 901.487 0, 755.426 0, 593.370 1	皂苷类

表 2 (续)

编号	化合物名称	分子式	离子模式	t _R /min	理论值 m/z	实测值 m/z	误差	碎片离子	分类
153	dioseptomloside A	C ₄₅ H ₇₄ O ₁₈	[M+HCOO] ⁻	11.94	947.485 7	947.489 0	3.4	947.476 7, 901.489 4, 739.439 6	皂苷类
154	黄苦木素 B	C ₂₁ H ₂₈ O ₆	[M-H] ⁻	12.03	375.181 3	375.181 3	0.1	135.045 1, 179.069 5, 375.181 0	其他
155	spongioside B	C ₅₃ H ₈₆ O ₂₃	[M+HCOO] ⁻	12.11	1 135.554 2	1 135.552 8	-1.3	1135.562 7, 1089.546 3	皂苷类
156	甲基原薯蓣皂苷	C ₅₂ H ₈₆ O ₂₂	[M+HCOO] ⁻	12.38	1 107.559 3	1 107.562 6	3.0	1107.597 9, 1061.561 3, 915.532 9	皂苷类
157	沙苑子苷 B/纤细薯蓣皂苷	C ₄₅ H ₇₂ O ₁₇	[M+HCOO] ⁻	12.66	929.475 2	929.477 0	2.0	929.487 6, 883.468 5, 737.436 9	皂苷类
158	六氢姜黄素	C ₂₁ H ₂₆ O ₆	[M-H] ⁻	12.76	373.165 7	373.165 7	0.2	164.047 0, 179.071 9, 193.086 7, 373.162 9	其他
159	茉莉酸	C ₁₂ H ₁₈ O ₃	[M-H] ⁻	13.07	209.118 3	209.118 4	0.5	59.015 0, 109.059 5, 165.054 4, 209.114 3	其他
160	dioscorol B	C ₁₇ H ₁₄ O ₇	[2M-H] ⁻	13.59	659.140 6	659.141 1	0.7	659.256 4, 329.233 8, 311.220 8	皂苷类
161	十二烷基硫酸钠	C ₁₂ H ₂₆ O ₄ S	[M-H] ⁻	17.96	265.147 9	265.148 0	0.3	79.958 1, 96.960 0, 265.145 9	其他
162	9(S)-羧基十二酸	C ₁₈ H ₃₂ O ₃	[M-H] ⁻	18.15	295.227 9	295.227 9	0.3	171.101 4, 233.225 5, 277.215 2, 295.225 3	其他
163	γ-亚麻酸	C ₁₈ H ₃₀ O ₂	[M-H] ⁻	20.62	277.217 3	277.217 4	0.3	259.205 1, 277.214 7	脂质
164	亚油酸	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	[M-H] ⁻	21.47	279.233 0	279.233 2	1.0	261.220 5, 279.230 5	脂质

3.2.1 皂苷类次级代谢产物鉴定 在 8 批山药中共检测到 19 种皂苷类化合物, 这些皂苷类化合物母核主要为螺旋甾烷醇、呋甾烷醇和异螺旋甾烷醇, 糖苷键断裂以后产生葡萄糖 (Glc, 162) 和鼠李糖 (Rha, 146) 的中性丢失, 薯蓣皂苷和伪原薯蓣皂苷为例进行解析。薯蓣皂苷的准分子离子峰为 m/z 869.492 5 [M+H]⁺, 丢失 Rha 和 Glc 基团后得到碎片离子 m/z 415.928 1 [M+H-2Rha-Glc]⁺, 通过与文献报道数据^[7]对比, 推测该化合物为薯蓣皂苷。伪原薯蓣皂苷的准分子离子峰为 m/z 1 031.537 4 [M+H]⁺, 丢失 Glc 观测到 m/z 869.487 4 [M+H-Glc]⁺ 的碎片离子, 接着丢失 Rha 和 Glc 产生 m/z 577.376 7 [M+H-2Rha-Glc]⁺ 和 m/z 415.320 7 [M+H-2Rha-2Glc]⁺, 五元呋喃环开环裂解发生 C₈H₁₆O₂ (144) 的中性丢失, 进而产生 m/z 725.376 6 [M+H-Glc-C₈H₁₆O₂]⁺ 的碎片离子, m/z 415.320 7 [M+H-2Rha-2Rha]⁺ 的碎片离子连续丢失 C₈H₁₆O₂ (144) 和 H₂O (18) 产生 m/z 253.195 4, 参照文献报道^[7], 推测该化合物为伪原薯蓣皂苷。采用上述鉴定方法, 从山药中共鉴定出 19 个皂苷类化合物。

3.2.2 黄酮类次级代谢产物鉴定 在 8 批山药中共检测到 14 种黄酮类化合物, 在软电离条件下, 黄酮类化合物母核的质谱裂解通常发生在 C 环上^[8-9], 以 CO 中性丢失及逆-狄尔斯-阿尔德反应 (RDA) 裂解为主, 以槲皮素和芦丁为例进行解析。槲皮素的准分子离子峰 m/z 303.050 2 失去 1 分子 H₂O 得到 m/z 285.043 7 [M+H-H₂O]⁺, 进一步失去 CO 得到 m/z 257.044 7 [M+H-H₂O-CO]⁺; 或其一级离子失去 CO 再进一步失去 C₆H₆O₂ 得到 m/z 165.019 1 [M+H-CO-C₆H₆O₂]⁺, 槲皮素的 C 环发生 RDA

裂解产生 m/z 153.016 4 的碎片离子。芦丁的母离子为 m/z 609.145 5 [M-H]⁻, 其二级碎片有 m/z 301.033 1、151.001 5, m/z 301.034 3 为母离子 [M-H]⁻ 脱掉鼠李糖和葡萄糖形成的特征碎片, [M-H-Rha-Glc]⁻ 碎片 RDA 裂解后形成 m/z 151.001 5 碎片, 参照文献报道^[9], 推测该化合物为芦丁。利用上述鉴定方法, 在山药中共检测到 14 种黄酮类化合物。

3.2.3 氨基酸类和肽类初级代谢产物鉴定 在 8 批山药中共检测到 13 种氨基酸类化合物, 氨基酸类化合物主要产生质量损失 NH₃ (17)、CO+H₂O (46) 的质谱碎片。如 Lysine 的准分子离子峰为 m/z 147.112 5 [M+H]⁺, 失去 NH₃ 和 CO、H₂O 后产生 m/z 130.086 0 [M+H-NH₃]⁺ 和 m/z 84.080 4 [M+H-NH₃-CO-H₂O]⁺ 的碎片离子^[10]。

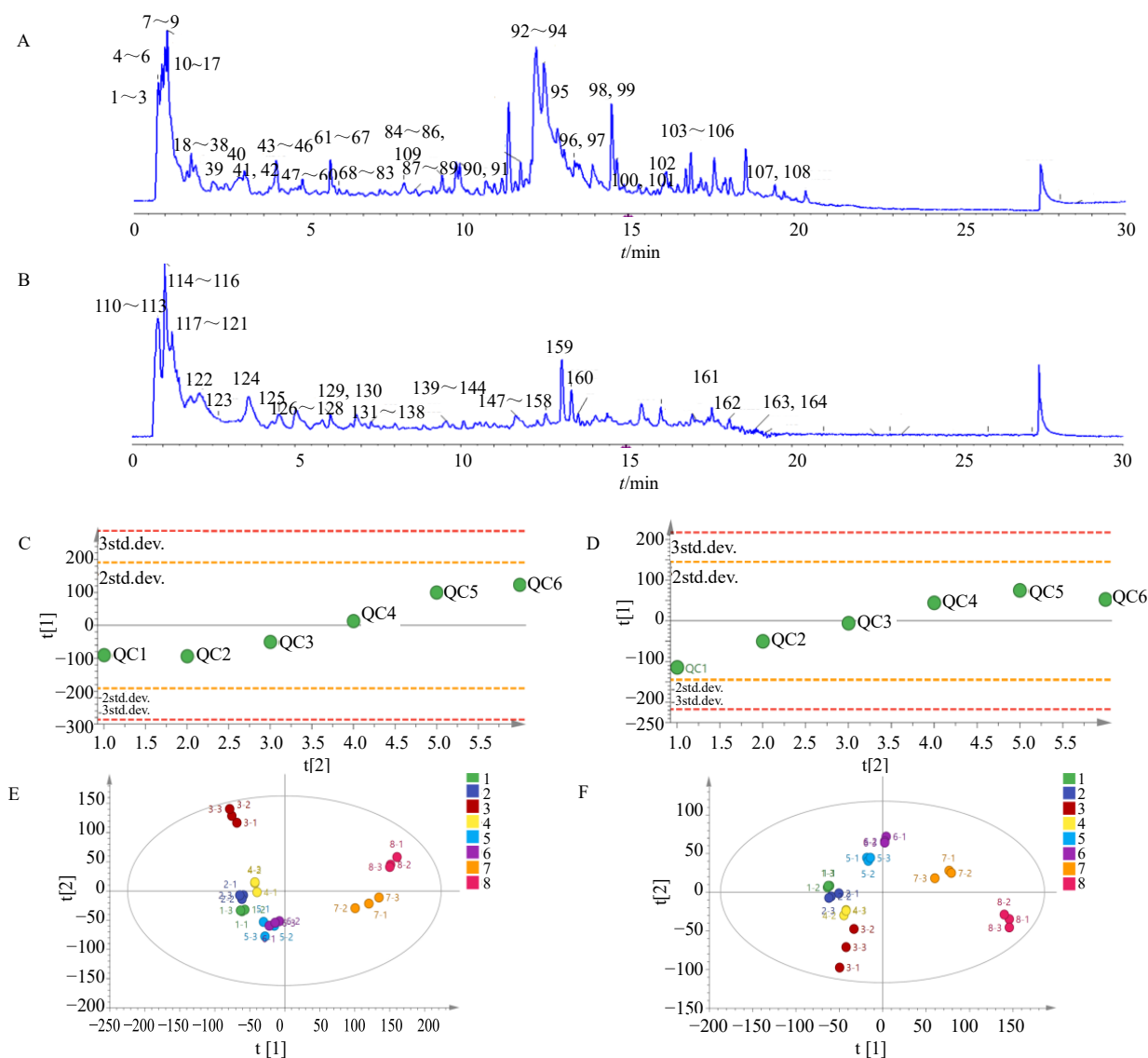
肽在正离子模式下质子化, 质子最初位于 N 端或碱性残基侧链上, 但由于内部裂解, 它可以沿着主链移动, 在不同的位点断裂, 形成一系列失去氨基酸残基、CO、H₂O 和 NH₃ 的碎片离子^[11-12]。如 Val-Glu 的准分子离子峰为 m/z 247.129 2 [M+H]⁺, 在肽键处断裂失去缬氨酸 (Val) 产生 m/z 148.060 7 [M+H-Val]⁺ 的碎片离子, 接着失去 H₂O 后产生 m/z 130.048 6 [M+H-Val-H₂O]⁺ 的碎片离子, 再连续失去 CO、H₂O 和 NH₃ 后产生碎片离子 m/z 84.043 6 [M+H-H₂O-Val-CO-H₂O]⁺, 或失去 1 分子谷氨酸 (Glu) 残基及 CO 后产生碎片离子 m/z 72.080 3 [M+H-Glu-CO]⁺。

在正离子模式下, 环二肽的裂解主要是环内肽键断裂形成一系列失去羰基和氨基酸残基的碎片离子^[13]。以 Cyclo(His-Pro)为例, 在正离子模式下其准分子离子峰为 m/z 235.118 8 [M+H]⁺, 二级谱图

中可见失去 CO 后形成 m/z 207.123 2 $[M+H-CO]^+$ 的特征离子, 失去脯氨酸残基 m/z 138.063 7 $[M+H-C_5H_7NO]^+$ 的碎片离子以及进一步失去 CO 后形成 m/z 110.070 2 $[M+H-C_3H_7NO-CO]^+$, 或者失去组氨酸残基及 CO 后形成 m/z 70.064 3 $[M+H-C_6H_7N_3O-CO]^+$ 的碎片离子。根据上述鉴定方法, 在山药中共检测到 53 种肽类化合物, 包括 45 个直链二肽、4 个环二肽和 4 个三肽。这些肽类组成氨基酸中 Val、Leu 和 Ile 这些支链氨基酸出现频次最高, 含有这 3 种氨基酸的二肽占总数的 68%。

3.2.4 不同山药的代谢组学比较 对 8 批山药提取

物进行 LC-MS 检测, 其正离子模式下提取到 27 537 个特征峰, 负离子模式下提取到 14 281 个特征峰, 其正负离子模式下的总离子流图如图 2-A、B 所示。在正离子 (图 2-C) 和负离子 (图 2-D) 模式下, 6 个 QC 样本 (QC1~QC6) 均落在 2 倍标准差范围内, 表明仪器的精密度良好。进一步进行多元统计分析, 正离子和负离子模式 PCA 分析结果如图 2-E、F 所示, 结果表明, 8 批山药的化学成分存在显著差异。其中, 7 和 8 号样本为铁棍山药, 位于散点图的右侧, 与其他山药存在明显区别。此外, 3 号样本山东细毛与其他山药也存在显著区别。3、7、



A、B-正、负离子模式下的总离子流图; C、D-QC 样品正、负离子 PCA 图; E、F-8 批山药样品正、负离子 PCA 图。

A, B-total ion chromatogram under positive and negative ion modes; C, D-PCA analysis charts of QC samples in positive ion and negative ion modes; E, F-PCA plots of eight batches of yam samples in positive ion and negative ion modes.

图 2 8 批山药代谢组学分析结果

Fig. 2 Metabolomics analysis of eight batches of *Dioscoreae Rhizoma*

8号山药样本均为药食兼用的细长型山药，单株产量较低。因此，基于液质数据的散点图所提示的8批不同山药的化学差异与山药的产量及用途相关。

3.2.5 山药不同类型成分的比较

(1) 尿囊素：尿囊素是山药的质量评价指标之一，具有镇静、滋润皮肤、促进细胞生长、促进皮肤伤口愈合^[14-15]，同时具有降低血压、防止心律失常、松弛血管平滑肌、抑制血小板聚集等活性^[16-17]。8批山药中尿囊素相对含量散点图如图3所示，尿囊素在山东细毛山药（编号3）样本中显著高于其他山药，可以考虑作为山东细毛山药的化学标志物。尿囊素在麻山药（编号6）、白山山药（编号4）和铁棍山药（编号7和8）的相对含量也较高，而在晋山药1号（编号1）、太谷山药（编号2）和双棒山药（编号5）山药样本中相对较低。

(2) 皂苷类：皂苷类成分是山药的重要活性成分，与山药的功效密切相关。文献报道山药中皂苷类成分具有保护肝脏、降血糖、抗炎、免疫调节等作用^[18-19]。薯蓣皂苷是山药皂苷的代表性成分，具有降尿酸、免疫调节、抗氧化、肾脏保护等多种药理作用^[20-21]。本研究借助高分辨质谱技术在山药中鉴定出19种甾体皂苷类成分。如图3所示，晋山药1号（编号1）和太谷山药（编号2）薯蓣皂苷相对含量明显较高。

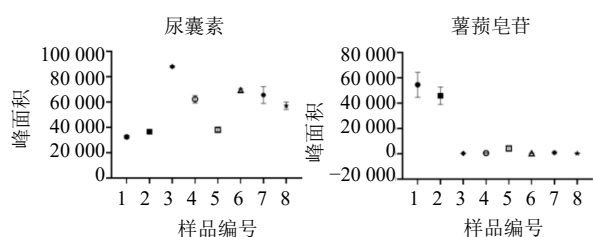


图3 8批山药尿囊素和薯蓣皂苷相对含量散点图

Fig. 3 Scatter plots of relative content of allantoin and dioscin in eight batches of *Dioscoreae Rhizoma*

皂苷类聚类热图（图4-A）显示，晋山药1号（编号1）、太谷山药（编号2）、双棒山药（编号5）和麻山药（编号6）中皂苷类成分含量显著高于其他山药。此外，垆土铁棍（编号8）中部分皂苷类成分相对含量较高，且与其他品种（晋山药1号、太谷山药、双棒山药、麻山药）不同，其含量较高的皂苷主要为 Dioscoroside E2、延龄草苷，这2个成分可以考虑作为垆土铁棍山药的化学标志物。

(3) 黄酮类：共检测到14个黄酮类成分，主要是黄酮类、二氢黄酮醇类、黄烷醇类、黄酮醇类。山

药中黄酮类成分具有降血糖、抗氧化的作用^[22-24]。如聚类热图（图4-B）所示，晋山药1号（编号1）、太谷山药（编号2）和麻山药（编号6）中黄酮特征接近，含量较高的化合物主要是表儿茶素、儿茶素、芹菜素、原花青素 B1、原花青素 B2、山柰酚和异牡荆素，以黄烷醇类为主；垆土铁棍（编号8）中黄酮含量也较高，但与晋山药1号（编号1）和太谷山药（编号2）的黄酮组成不同，含量较高的黄酮类化合物主要是异槲皮素、金丝桃苷、槲皮素、报春黄苷、香橙素和芦丁，以黄酮醇类为主。晋山药1号（编号1）中的原花青素 B2、麻山药（编号6）中的表没食子儿茶素和太谷山药（编号2）中的山柰酚相对含量显著高于其他山药，可以为不同品种间的鉴别标志物。

(4) 氨基酸和肽类：氨基酸与肽类成分是山药营养价值的重要成分。如图4-C所示，铁棍山药（编号7）的氨基酸整体含量相对较高，主要是精氨酸（arginine）、异亮氨酸（isoleucine）、苯丙氨酸（phenylalanine）、组氨酸（histidine）、3-羟基苯丙氨酸（3-hydroxyphenylalanine）、脯氨酸（proline）、谷氨酸（glutamine）、缬氨酸（valine）、色氨酸（tryptophan）；此外，酪氨酸（tyrosine）在山东细毛（编号3）山药中显著高于其他样本，色氨酸（tryptophan）在铁棍山药（编号7）中显著高于其他样本，可以考虑这2个化合物作为这2个品种潜在的化学标志物。

如图4-D所示，8批不同的山药具有不同的肽谱特征。如 Glu-Trp、Ile-Arg、谷胱甘肽、Glu-Trp、Glu-Ile、Val-Arg 在铁棍山药（编号7）中显著高于其他山药，主要为谷氨酸（Glu）与其他氨基酸构成的直链二肽；Leu-Leu、Ile-Leu、Ile-Ile、Leu-Trp、Val-Ile、Ser-Leu、Leu-Ile 等二肽类成分在垆土铁棍（编号8）中显著高于其他批山药，主要为亮氨酸或异亮氨酸与其他氨基酸形成的二肽。此外，山东细毛（编号3）山药中 Thr-Trp、Phe-Phe、Phe-Pro、Thr-Phe、Phe-Thr、Cyclo(His-Pro) 等二肽类成分相对含量较高，这些二肽主要由脯氨酸（Pro）或苯丙氨酸（Phe）、色氨酸（Trp）与其他氨基酸构成。山东细毛（编号3）、铁棍山药（编号7）、垆土铁棍（编号8）均为药食兼用山药，因此，二肽类成分可能是药食兼用山药的化学特征之一。

3.3 农艺性状与代谢组学关联性分析

为解析山药农艺表型与化学成分的关系，本研究对农艺性状与山药不同类型的代谢产物进行了关联性分析。相关性分析（图5）显示，大部分皂

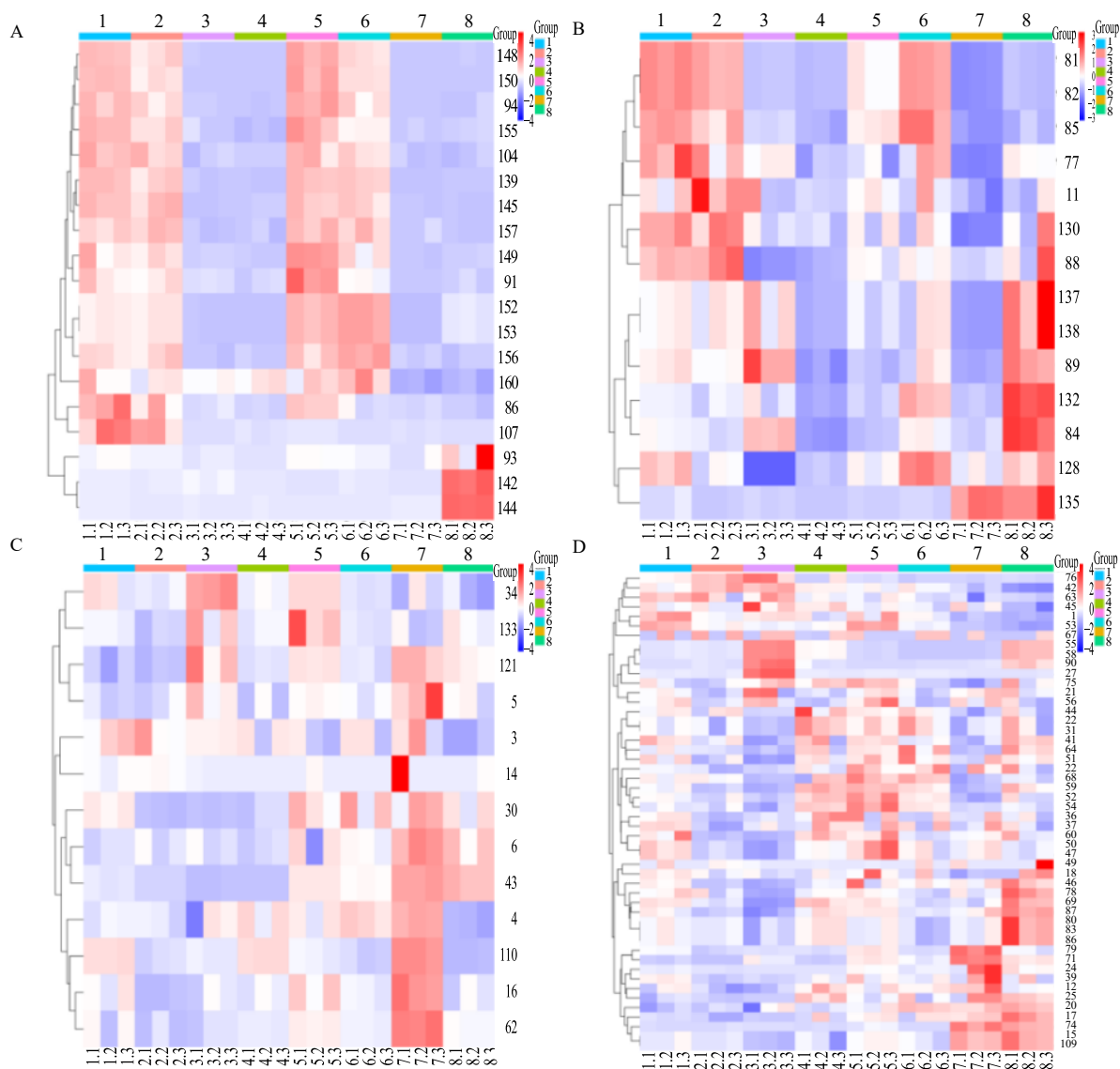


图 4 8批山药中皂苷类 (A)、黄酮类 (B)、氨基酸类 (C) 和肽类 (D) 化合物聚类热图分析

Fig. 4 Cluster heat map analysis of saponins (A), flavonoids (B), amino acids (C), and peptides (D) in eight batches of *Dioscoreae Rhizoma*

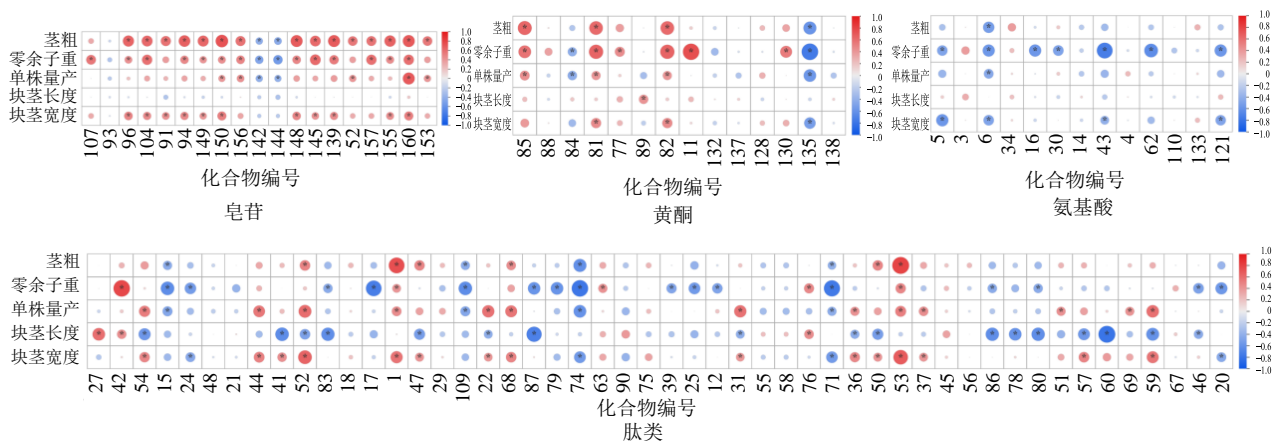


图 5 皂苷、黄酮、氨基酸与肽类成分和农艺性状的相关性

Fig. 5 Correlation plots between saponins, flavonoids, aminoacids, peptides and agronomic traits

苷类成分与茎粗、零余子重、单株产量、块茎宽度均呈显著正相关 (Mantel'sr >0.4 , $P<0.05$), 其中与茎粗的关联最为紧密, Mantel'sr 值在 0.55~0.80 ($P<0.05$); 部分黄酮类成分与零余子重呈显著正相关; 部分氨基酸与肽类成分与零余子重呈显著负相关; 此外, 部分肽类成分与块茎宽度呈显著正相关。综上, 茎粗、零余子重与多种代谢产物的积累显著相关, 表明它们可能是连接山药农艺表型与次生代谢特征的核心性状, 其测定对于定向选育特定代谢特征的品种具有指导意义。

4 讨论

本研究对种植于山西运城试验田的 8 批不同山药种质资源进行了比较。8 批山药在外观性状和产量上均存在显著差异。通过质谱裂解规律解析与文献比对, 共鉴定肽类、氨基酸类、黄酮类及皂苷类等 164 种共有成分。PCA 显示, 8 批山药种质资源存在显著区别, 其中铁棍山药作为公认的道地山药, 与其他山药品种呈现明显特异性, 山东细毛作为药食兼用的品种也与其他山药存在化学差异。2 种铁棍山药和山东细毛与其他山药品种的化学差异可能体现在氨基酸和肽类方面。此外, 晋山药、太谷山药、双棒山药、麻山药中皂苷类成分相对较高, 而太谷山药、晋山药、麻山药在黄酮类成分上具有相似的化学特征。这些特异性成分将来可以作为潜在的化学标志物, 用于不同品种间的快速鉴别, 但还需要大样本的验证。关联分析表明, 山药农艺性状与代谢产物积累存在特异性关联, 茎粗和零余子重是关键性状, 茎粗与皂苷类成分显著正相关; 零余子重则与皂苷、黄酮正相关, 与氨基酸和肽类负相关; 这些发现为通过表型性状定向选育代谢特征明确的山药品种提供了依据。多糖是山药的重要活性成分, 本研究未涉及多糖的比较, 在今后研究中, 将对不同品种山药的多糖类进行系统比较, 为定向选育药用型与食用型山药新品种提供科学依据。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] Li Y, Ji S Y, Xu T, et al. Chinese yam (*Dioscorea*): Nutritional value, beneficial effects, and food and pharmaceutical applications [J]. *Trends Food Sci Technol*, 2023, 134: 29-40.
- [2] 中国药典 [S]. 一部. 2020: 50.
- [3] 赵圆. 山药 (*Dioscorea* spp.) 种质资源遗传多样性分析及指纹图谱构建 [D]. 呼和浩特: 内蒙古农业大学, 2022.
- [4] 腊贵晓, 理向阳, 郭红霞, 等. 铁棍山药和太谷山药代谢成分差异研究 [J]. *河南农业科学*, 2017, 46(5): 116-119.
- [5] 安莉, 周娟, 马婧玮, 等. 代谢组学结合 LASSO 回归机器学习方法识别太谷山药和铁棍山药中的差异标志物 [J]. *食品工业科技*, 2024, 45(18): 1-8.
- [6] 魏亮, 张超楠, 李科研, 等. 基于核磁共振代谢组学技术比较不同产地铁棍山药的化学成分差异 [J]. *分析测试学报*, 2022, 41(5): 774-780.
- [7] Avula B, Wang Y H, Wang M, et al. Characterization of steroidal saponins from *Dioscorea villosa* and *D. cayenensis* using ultrahigh performance liquid chromatography/electrospray ionization quadrupole time-of-flight mass spectrometry [J]. *Planta Med*, 2014, 80(4): 321-329.
- [8] Ma Y L, Li Q M, Van den Heuvel H, et al. Characterization of flavone and flavonol aglycones by collision-induced dissociation tandem mass spectrometry [J]. *Rapid Commun Mass Spectrom*, 1997, 11(12): 1357-1364.
- [9] 杨林军, 谢彦云, 李志锋, 等. UPLC/Q-TOF-MS/MS 分析中华常春藤中的化学成分 [J]. *中草药*, 2016, 47(4): 566-572.
- [10] 渠琛玲, 张寒琦, 张华蓉, 等. 电喷雾质谱法研究氨基酸的质谱碎裂及其与人参皂苷 Rb₃ 的相互作用 [J]. *高等学校化学学报*, 2008, 29(9): 1721-1726.
- [11] Tran N H, Zhang X, Xin L, et al. De novo peptide sequencing by deep learning [J]. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2017, 114(31): 8247-8252.
- [12] O'Keefe M B, FitzGerald R J. Identification of short peptide sequences in complex milk protein hydrolysates [J]. *Food Chem*, 2015, 184: 140-146.
- [13] Jia J, Yao J L, Kong J, et al. 2, 5-Diketopiperazines: A review of source, synthesis, bioactivity, structure, and MS fragmentation [J]. *Curr Med Chem*, 2023, 30(9): 1060-1085.
- [14] Guo Y C, Cao S X, Zong X K, et al. ESI-MSⁿ study on the fragmentation of protonated cyclic-dipeptides [J]. *J Spectrosc*, 2009, 23(3/4): 580182.
- [15] 樊靓, 汤尚文, 余海忠, 等. 山药中尿囊素研究进展 [J]. *现代农业科技*, 2015(3): 308-308.
- [16] 顾文珍, 秦万章. 尿囊素的作用及其临床应用 [J]. *新药与临床*, 1990, 9(4): 232-234.
- [17] Ma J N, Kang S Y, Meng X L, et al. Effects of rhizome extract of *Dioscorea batatas* and its active compound, allantoin, on the regulation of myoblast differentiation and mitochondrial biogenesis in C₂C₁₂ myotubes [J]. *Molecules*, 2018, 23(8): 2023.
- [18] Yang S, Sun X J, Liu D F, et al. Allantoin ameliorates dopaminergic neuronal damage in MPTP-induced Parkinson's disease mice via regulating oxidative damage,

- inflammation, and gut microbiota disorder [J]. *Food Funct*, 2024, 15(18): 9390-9408.
- [19] 范晓阳, 侯彦婕, 贾世艳, 等. 山药化学成分及皂苷类成分药理作用的研究进展 [J]. 中医药信息, 2021, 38(9): 79-84.
- [20] Tang Y N, Pang Y X, He X C, *et al*. UPLC-QTOF-MS identification of metabolites in rat biosamples after oral administration of *Dioscorea* saponins: A comparative study [J]. *J Ethnopharmacol*, 2015, 165: 127-140.
- [21] Hwang J T, Park K S, Ryuk J A, *et al*. Development of an oriental medicine discrimination method through analysis of steroidal saponins in *Dioscorea nipponica* Makino and their anti-osteosarcoma effects [J]. *Molecules*, 2019, 24(22): 4022.
- [22] 杨雁, 孙羽灵, 孙建梅, 等. 山药活性成分药理作用研究进展 [J]. 中国野生植物资源, 2022, 41(12): 55-60.
- [23] Liu Y X, Li H F, Fan Y Y, *et al*. Antioxidant and antitumor activities of the extracts from Chinese yam (*Dioscorea opposita* Thunb.) flesh and peel and the effective compounds [J]. *J Food Sci*, 2016, 81(6): H1553-H1564.
- [24] 刘文全, 罗怡, 朱守虎, 等. 山药总黄酮的提取及抗氧化活性研究 [J]. 农产品加工, 2021(12): 9-12.

[责任编辑 王文倩]