·实验研究·

基于液质联用技术和植物代谢组学的猕猴桃根与猕猴桃藤的化学成分差异分析

甄亚钦[1,2,3],王　相[1,2,3],李　宁[1,2,3],高　乐[1,2,3],牛丽颖[1,2,3],田　伟[1,2,3*],王鑫国[1,2,3*]
(1 河北中医药大学,石家庄 050091; 2 河北省中药配方颗粒技术创新中心,石家庄 050091;
3 中药材品质评价与标准化河北省工程研究中心,石家庄 050091)

[摘要] **目的**:建立猕猴桃根与猕猴桃藤中化学成分的定性分析方法,系统比较猕猴桃根与猕猴桃藤的化学成分异同。**方法**:采用液质联用技术,应用负离子扫描模式,获取猕猴桃根与猕猴桃藤样品的高分辨质荷比及离子响应强度信息;利用主成分分析(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)对预处理后的数据集进行多变量统计分析,筛选出两者间的差异性成分。**结果**:猕猴桃根与猕猴桃藤所含化学成分相似,主要为三萜类、黄酮类和苯丙素类化合物,但含量上存在一定差异,筛选得到31个差异成分,猕猴桃根中积雪草酸等三萜类化合物、儿茶素等黄酮类化合物的含量高于猕猴桃藤,秦皮苷、秦皮乙素等5个差异化合物在猕猴桃藤中的含量相对较高。**结论**:本研究明确了猕猴桃根与猕猴桃藤所含化学成分的异同,猕猴桃根中掺入猕猴桃藤会影响其品质。本研究的开展对于确保猕猴桃根的品质、指导临床用药以及开发猕猴桃根和猕猴桃藤药用资源具有重要意义。

[关键词] 猕猴桃;根;藤;超高效液相色谱-四极杆-飞行时间串联质谱;化学成分;品质评价
[中图分类号] R965　　[文献标志码] A　　[文章编号] 1003－3734(2026)09－0960－09

Comparative analysis of chemical variability between root and vine of *Actinidia chinensis* Planch. based on UPLC-Q-TOF-MS/MS technique and plant metabolomics

ZHEN Ya-qin[1,2,3], WANG Xiang[1,2,3], LI Ning[1,2,3], GAO Le[1,2,3], NIU Li-ying[1,2,3], TIAN Wei[1,2,3*], WANG Xin-guo[1,2,3*]
(1 *Hebei University of Chinese Medicine*, *Shijiazhuang* 050091, *China*; 2 *Hebei TCM Formula Granule Innovation Center*, *Shijiazhuang* 050091, *China*; 3 *Hebei TCM Quality Evaluation & Standardization Engineering Research Center*, *Shijiazhuang* 050091, *China*)

[**Abstract**] **Objective**: To establish a qualitative analytical method for the chemical constituents in the root and vine of *Actinidia chinensis* Planch, and to systematically compare the similarities and differences between them. **Methods**: LC-MS was performed in negative ion mode to acquire high-resolution mass-to-charge ratios and ion intensity data of the samples from the root and vine of *Actinidia chinensis* Planch. Principal component analysis (PCA) and orthogonal partial least squares-discriminant analysis (OPLS-DA) were applied to the preprocessed dataset to rapidly identify differential components between the two samples. **Results**: The chemical compositions of

[基金项目] 国家中医药管理局科技项目(GZY-KJS-2023-030);河北省重点研发计划项目(23372502D)
[作者简介] 甄亚钦,女,硕士,高级实验师,主要从事中药材质量评价研究。E-mail: zhenyaqin@hebcm.edu.cn。
[通讯作者] *田伟,男,硕士,高级实验师,主要从事中药分析与质量评价研究。E-mail: tianwei@hebcm.edu.cn。*王鑫国,男,教授,博士生导师,主要从事中药分析及药效物质基础研究。E-mail: wangxinguo@hebcm.edu.cn。
[DOI]10.20251/j.cnki.1003-3734.2026.09.009

root and vine were similar, primarily consisting of triterpenoids, flavonoids and phenylpropanoids, but with certain differences in content. Multivariate analysis identified 31 differential components. The root showed higher contents of triterpenoids (e. g., asiatic acid) and flavonoids (e. g., catechin) than the vine, while five differential compounds, including fraxin and aesculetin, were relatively more abundant in the vine. **Conclusion**: This study clarifies the similarities and differences in chemical composition between the root and vine of *Actinidia chinensis* Planch. The admixture of vine into the root was found to compromise its quality. This study provides significant implications for ensuring the quality of root of *Actinidia chinensis* Planch., guiding clinical medication, and facilitating the medicinal development of both root and vine resources.

[**Key words**] *Actinidia chinensis* Planch.; root; vine; UPLC-Q-TOF-MS/MS; chemical composition; quality evaluation

猕猴桃根为猕猴桃科植物猕猴桃(*Actinidia chinensis* Planch.)的干燥根,又名藤梨根、阳梨根、阳桃根,其药用历史悠久,常以单方或复方应用于临床,对多种恶性肿瘤(如宫颈癌、食道癌、胃癌、肝癌等)具有治疗作用[1-3]。临床研究数据显示,猕猴桃根在抗肿瘤方剂中的应用频率较高。据浙江省肿瘤医院统计,该药材已连续多年位列抗肿瘤常用药物前10名[4-5]。猕猴桃根在《北京市中药饮片炮制规范》2023年版、《陕西省药材标准》2015年版、《湖北省中药材质量标准》2018年版等地方标准中均有收录,且明确规定药用部位为根部[6-8]。值得关注的是,《贵州省中药、民族药药材标准》2019年版在收载该药材时有所扩展,除根部外还将藤茎纳为药用部位,且在功能主治、用法用量、性味归经等方面与猕猴桃根基本一致[9]。

20世纪90年代以来,由于过度采挖导致猕猴桃根资源短缺,其药用部位逐渐扩展至根茎[4,10-12]。市场调研发现,当前流通的药材中常混有猕猴桃藤,部分批次甚至以藤茎为主。从性状特征来看,这类饮片通常髓部明显,外皮粗糙且质地坚硬。目前研究主要集中在猕猴桃根的化学成分、药理作用和临床应用方面[1-5,12],关于猕猴桃藤的研究鲜有报道。现有研究尚未明确猕猴桃根与猕猴桃藤在化学成分上的差异,根茎或茎枝是否能替代根入药,其临床疗效与安全性也缺乏充分依据[13]。为阐明二者化学成分的具体差异,开展系统的比较研究具有重要的现实意义。本研究基于超高效液相色谱-四极杆-飞行时间串联质谱(UPLC-Q-TOF-MS/MS)技术,结合植物代谢组学方法,对数据进行多元统计分析,对猕猴桃根和藤的化学成分进行系统性比较,揭示其化学物质基础的变化规律[14]。研究结果不仅为阐明猕猴桃根与藤的药用物质基础提供科学依据,同时为这一药用资源的综合开发利用奠定数据基础。

材　　料

1　仪器

Triple TOF 6600$^+$型质谱仪(美国SCIEX公司),超高效液相色谱ACQUITY H-Class系统(美国Waters公司),Sciex OS工作站;TB－215D型、BSA224S－CW型电子分析天平(北京赛多利斯公司);KQ－250型超声波清洗器(昆山市超声仪器有限公司);FW177型中药粉碎机(天津市泰斯特仪器有限公司)。

2　试剂

对照品:绿原酸(批号:110753-202119,含量:96.3%)、咖啡酸(批号:110885-201703,含量:99.7%)、木犀草苷(批号:111720-202111,含量:96.6%)、芹菜素(批号:111901-202004,含量:99.4%)、原儿茶醛(批号:110810-201007,含量:98.2%)、木犀草素(批号:111520-201605,含量:99.6%)、异槲皮苷(批号:111809-201804,含量:97.2%)、槲皮苷(批号:111538-201606,含量:90.6%)、齐墩果酸(批号:110709-201808,含量:91.1%)、熊果酸(批号:110742-201823,含量:99.9%)均购自中国食品药品检定研究院;科罗索酸(批号:PS012463,含量:98%)、对羟基苯甲酸(批号:PS1219,含量:98%)、香草酸(批号:PS1367,含量:98%)、新绿原酸(批号:PS000974,含量:98%)、隐绿原酸(批号:PS001110,含量:98%)、马钱苷酸(批号:PS010680,含量:98%)、儿茶素(批号:PS021023,含量:98%)、表儿茶素(批号:PS010583,含量:98%)、原花青素B1(批号:PS010162,含量:97%)、原花青素B2(批号:PS011522,含量:98%)、异绿原酸A(批号:PS001052,

含量:98%)、异绿原酸 C(批号:PS001057,含量:98%)、白桦脂酸(批号:PS011682,含量:98.0%)、山楂酸(批号:PS011005,含量:98.0%)均购自成都普思生物科技有限公司;原儿茶酸(成都德思特生物技术有限公司,批号:DST200629-081,含量:98.0%)。乙腈、甲醇、甲酸均为质谱纯(美国 Fisher Chemical 公司);其他试剂均为分析纯;水为蒸馏水(广州屈臣氏食品饮料有限公司)。

3 药材

15 批猕猴桃根(S1 ~ S15)和 15 批猕猴桃藤(S16 ~ S30)样品均购自药材市场,经河北省医疗器械检验研究院段吉平主任药师鉴定,分别为猕猴桃科植物猕猴桃(*Actinidia chinensis* Planch.)的干燥根及干燥藤,样品信息见表 1。

表 1 样品信息表

编号	产地	批号	样品名	编号	产地	批号	样品名
S1	湖南	20230501	猕猴桃根	S16	江西	20230601	猕猴桃藤
S2	湖南	20230502	猕猴桃根	S17	江西	20230602	猕猴桃藤
S3	湖南	20230503	猕猴桃根	S18	河南	20230603	猕猴桃藤
S4	河南	20230504	猕猴桃根	S19	湖北	20230604	猕猴桃藤
S5	河南	20230505	猕猴桃根	S20	湖北	20230605	猕猴桃藤
S6	河南	20230506	猕猴桃根	S21	湖北	20230606	猕猴桃藤
S7	河南	20230507	猕猴桃根	S22	河南	20230607	猕猴桃藤
S8	江西	20230508	猕猴桃根	S23	河南	20230608	猕猴桃藤
S9	江西	20230509	猕猴桃根	S24	河南	20230609	猕猴桃藤
S10	江西	20230510	猕猴桃根	S25	河南	20230610	猕猴桃藤
S11	黑龙江	20230511	猕猴桃根	S26	黑龙江	20230611	猕猴桃藤
S12	黑龙江	20230512	猕猴桃根	S27	黑龙江	20230612	猕猴桃藤
S13	湖北	20230513	猕猴桃根	S28	湖南	20230613	猕猴桃藤
S14	湖北	20230514	猕猴桃根	S29	湖南	20230614	猕猴桃藤
S15	陕西	20230515	猕猴桃根	S30	湖南	20230615	猕猴桃藤

方法与结果

1 色谱条件

采用 ACQUITY UPLC HSS T3 色谱柱(100 mm × 2.1 mm,1.8 μm);流动相乙腈(A)-0.1% 甲酸水(B);梯度洗脱(0 ~ 2 min,10% A;2 ~ 10 min,10% ~ 20% A;10 ~ 15 min,20% ~ 40% A;15 ~ 30 min,40% ~ 45% A;30 ~ 33 min,45% ~ 60% A;33 ~ 35 min,60% ~ 90% A;35 ~ 38 min,90% A;38 ~ 40 min,90% ~ 10% A);流速:0.4 mL·min^{-1};柱温:40 ℃;进样量:2 μL。

2 质谱条件

采用 ESI 负离子模式采集。MS1 条件:扫描范围 *m/z* 100 ~ 1 500;雾化气 50 psi;加热气 50 psi;帘气(CUR)35 psi;离子源温度 550 ℃;源喷射电压 −4 500 V;解簇电压 −80 V;碰撞能量 −10 eV;累积时间 100 ms。信息依赖采集:对超过 50 cps 的 10 个响应最强峰进行 MS2 采集,开启动态背景扣除。MS2 条件:扫描范围 *m/z* 100 ~ 1 500;解簇电压 −80 V;解簇电压 −40 eV;碰撞能量扩展 ±20 eV。实验过程采用自动校准。

3 样品的制备方法

3.1 对照品溶液的制备 分别取各对照品适量,加甲醇配成浓度约为 20 μg·mL^{-1}的对照品溶液,用于定性分析。

3.2 供试品溶液的制备 取 15 批猕猴桃根和 15 批猕猴桃藤样品适量,粉碎后过 4 号筛,分别精密称取 0.5 g,置具塞锥形瓶中,加入 75% 甲醇 25 mL,称定质量,超声处理 40 min,取出,放冷,再称定质量,补足减失的重量,摇匀,滤过即得。

3.3 质控溶液的制备 分别取相同量的不同批次的猕猴桃根和猕猴桃藤样品粉末混合均匀后作为质控样品(QC),精密称取 0.5 g 质控样品按供试品溶液制备方法制备质控溶液。

4 UPLC-Q-TOF-MS/MS 对猕猴桃根与猕猴桃藤化学成分的定性研究

分别制备不同批次猕猴桃根和猕猴桃藤供试品溶液,按确定的色谱质谱条件进样分析,猕猴桃根和猕猴桃藤负离子模式全扫描总离子流图见图 1,将总

离子流图数据文件处理后导入国家药典委员会发布的相似度评价软件，色谱峰的匹配度较高，两者的相似度大于0.9，表明两者具有较强的相似性。根据样品数据的精准质荷比、二级碎片离子信息，结合对照品、数据库和文献信息对猕猴桃根和猕猴桃藤进行定性分析[15]，猕猴桃根和猕猴桃藤的化学成分鉴定见表2。猕猴桃根与猕猴桃藤中主要成分大致相同，主要包括积雪草酸、羟基积雪草酸等三萜类化合物，儿茶素、表儿茶素、原花青素（包括A型、B型、C型）等黄酮类化合物以及秦皮苷、秦皮甲素、秦皮乙素等苯丙素类化合物[1-2,16]。猕猴桃属植物中普遍存在12-烯-28-乌苏酸三萜类化合物，且在C-2、C-3、C-23或C-24位多具有羟基取代，根据文献报道目前从藤梨根中已分离鉴定了60种乌苏烷型三萜类化合物[1,17-19]。

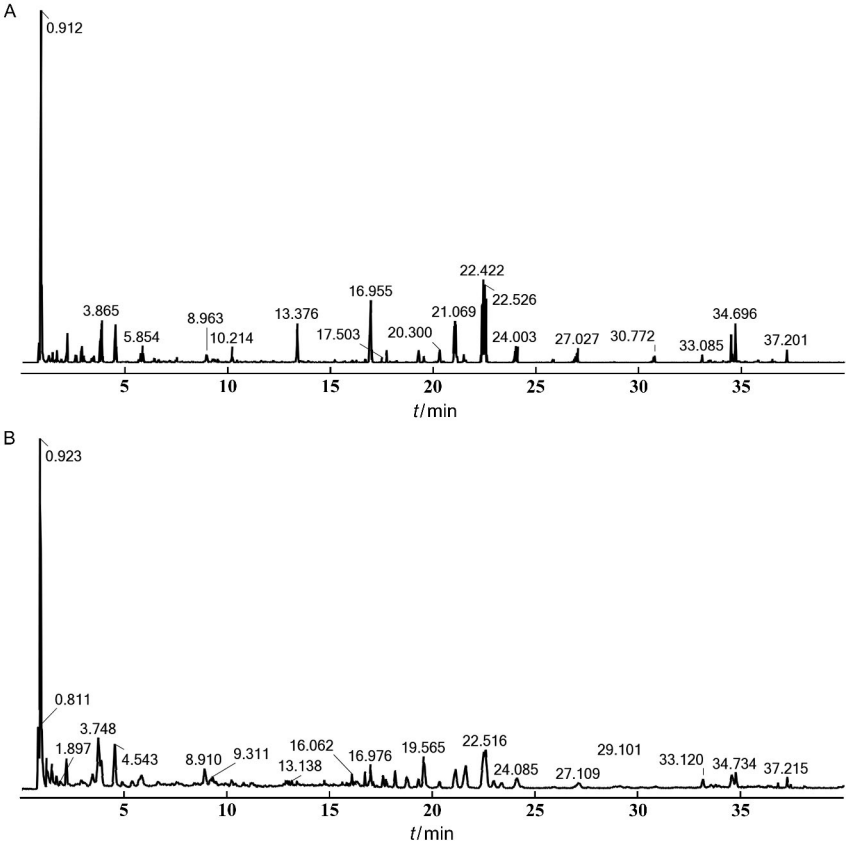


图1 猕猴桃根（A）与猕猴桃藤（B）总离子流图

表2 猕猴桃根与猕猴桃藤化学成分鉴定结果（负离子模式）

序号	t_R/min	分子式	化合物	测量值（*m/z*）	理论值（*m/z*）	碎片离子（*m/z*）
1	0.845	$C_6H_{14}N_4O_2$	*L*-精氨酸	173.104 63	173.104 4	131.082 8
2	0.904	$C_4H_7NO_4$	*L*-天门冬氨酸	132.030 14	132.030 23	132.029 8
3	0.907	$C_{12}H_{22}O_{11}$	蔗糖	341.108 80	341.108 94	341.109 5、179.056 6、119.035 3、101.024 6
4	0.911	$C_6H_{12}O_6$	肌醇	179.056 26	179.056 11	179.056 0
5	0.940	$C_7H_{12}O_6$	奎宁酸	191.056 28	191.056 11	111.009 3
6[a]	0.990	$C_6H_8O_7$	柠檬酸	191.020 21	191.019 73	111.009 4
7	1.21	$C_6H_{13}NO_2$	*L*-亮氨酸	130.087 42	130.087 35	—
8[a]	1.223	$C_4H_6O_4$	琥珀酸	117.019 38	117.019 33	117.020 0
9[a]	1.231	$C_{16}H_{24}O_{10}$	马钱苷酸	375.128 83	375.129 67	213.078 5、113.022 9、169.085 6
10[a]	1.305	$C_7H_6O_3$	对羟基苯甲酸	137.024 32	137.024 42	108.021 1
11[a]	1.470	$C_8H_8O_4$	香草酸	167.035 13	167.034 98	152.011 9
12[a]	1.886	$C_{16}H_{18}O_9$	新绿原酸	353.087 59	353.087 81	191.056 5、179.035 1、135.045 3

续表 2

序号	t_R/min	分子式	化合物	测量值(*m/z*)	理论值(*m/z*)	碎片离子(*m/z*)
13	1.919	$C_{21}H_{24}O_{11}$	表儿茶素-5-*O*-β-*D*-吡喃葡萄糖苷	451.124 46	451.124 59	289.072 8、245.081 7、205.051 6、149.024 4
14[a]	2.005	$C_7H_6O_4$	原儿茶酸	153.019 40	153.019 33	109.030 2
15	2.183	$C_{30}H_{26}O_{12}$	原花青素 B1	577.134 65	577.135 15	451.103 8、407.078 0、289.072 5、245.081 2、125.025 2
16	2.196	$C_9H_6O_4$	瑞香素	177.019 45	177.019 33	177.017 4、133.029 0
17	2.196	$C_{15}H_{16}O_9$	秦皮甲素	339.072 45	339.072 16	177.020 2、133.030 4、105.035 1
18[a]	2.645	$C_{30}H_{26}O_{12}$	原花青素 B3	577.135 29	577.135 15	577.134 6、451.105 7、407.079 5、289.073 0、245.082 2、125.024 6
19	2.748	$C_9H_8O_3$	4-香豆酸	163.040 11	163.040 07	119.050 2、117.034 5
20	2.748	$C_{16}H_{18}O_8$	5-*O*-对香豆酰基奎宁酸	337.093 22	337.092 89	191.056 2、163.040 5、119.050 4
21[a]	2.892	$C_7H_6O_3$	原儿茶醛	137.024 53	137.024 42	108.021 5、119.013 9、136.016 9、137.024 8
22[a]	2.893	$C_{15}H_{14}O_6$	儿茶素	291.086 85	291.086 31	123.046 3
23[a]	3.017	$C_{16}H_{18}O_9$	绿原酸	353.088 01	353.087 81	191.056 5
24	3.069	$C_{10}H_8O_4$	东莨菪内酯	191.035 10	191.034 98	191.106 3,176.013 2
25[a]	3.583	$C_{30}H_{26}O_{12}$	原花青素 B4	577.135 19	577.135 15	577.135 7、451.104 0、407.078 1、289.072 4、161.024 9、125.024 8
26	3.774	$C_{16}H_{18}O_{10}$	秦皮苷	369.082 56	369.082 72	369.082 4、207.030 2、192.006 6、163.003 6
27	3.814	$C_9H_6O_4$	秦皮乙素	177.019 45	177.019 33	177.018 7、149.024 5、133.028 5、105.034 2
28[a]	3.847	$C_{30}H_{26}O_{12}$	原花青素 B2	577.134 65	577.135 15	451.103 8
29	4.34	$C_{16}H_{18}O_8$	3-*O*-对香豆酰基奎宁酸	337.092 47	337.092 89	173.044 7、119.049 8、102.948 5
30[a]	4.398	$C_{16}H_{18}O_9$	隐绿原酸	353.087 81	353.087 81	191.056 5
31[a]	4.523	$C_{15}H_{14}O_6$	表儿茶素	289.071 99	289.071 76	245.082 6
32[a]	4.582	$C_9H_8O_4$	咖啡酸	179.035 15	179.034 98	135.045 7
33	4.741	$C_7H_6O_2$	苯甲酸	121.029 60	121.029 50	103.920 5
34	5.013	$C_{16}H_{18}O_8$	4-*O*-对香豆酰基奎宁酸	337.092 81	337.092 89	173.046 4、163.039 4、119.050 5
35	5.242	$C_{16}H_{18}O_8$	1-*O*-对香豆酰基奎宁酸	337.092 86	337.092 89	—
36	5.428	$C_{10}H_8O_5$	秦皮素	207.029 88	207.029 90	192.006 4、164.010 8、175.003 9
37	5.901	$C_{45}H_{38}O_{18}$	原花青素 C1	865.199 08	865.198 54	865.204 1、739.170 3、577.136 3、407.078 0、287.057 1、161.024 9、125.024 8
38[a]	6.334	$C_{17}H_{24}O_{11}$	断氧化马钱苷	403.124 38	403.124 59	165.054 1、139.002 9、121.029 3
39	7.111	$C_9H_6O_3$	7-羟基香豆素	161.024 56	161.024 42	133.030 2、117.031 9、105.033 2
40[a]	8.567	$C_{15}H_{10}O_6$	木犀草素	285.039 67	285.040 46	121.028 2、109.030 0
41[a]	8.859	$C_{27}H_{30}O_{16}$	芦丁	609.146 13	609.146 11	301.035 6、300.027 9、271.025 6
42	9.011	$C_{30}H_{26}O_{12}$	原花青素二聚体 B 型	577.134 64	577.135 15	577.132 1、451.102 6、407.076 5、289.071 5、161.023 9、125.024 1
43[a]	9.342	$C_{21}H_{20}O_{12}$	异槲皮苷	463.087 69	463.088 20	300.028 4、271.024 4
44	9.351	$C_{30}H_{24}O_{12}$	原花青素 A 型	575.119 00	575.119 50	575.121 1、449.086 8、285.041 2
45	9.423	$C_{21}H_{20}O_{11}$	槲皮苷	447.092 08	447.093 29	301.034 7、300.026 9、271.024 2、255.029 0、151.003 1
46[a]	10.913	$C_{25}H_{24}O_{12}$	异绿原酸 A	515.119 01	515.119 50	353.086 9、191.057 0、179.034 8、135.044 6
47[a]	11.175	$C_{21}H_{20}O_{11}$	木犀草苷	447.092 70	447.093 29	301.035 8、300.029 2、271.026 2、151.003 5、243.030 6
48[a]	12.014	$C_{25}H_{24}O_{12}$	异绿原酸 C	515.118 51	515.119 50	353.085 7、191.056 1、179.034 6、173.045 2、135.045 6

续表 2

序号	t_R/min	分子式	化合物	测量值(*m/z*)	理论值(*m/z*)	碎片离子(*m/z*)
49	13.373	$C_{36}H_{56}O_{11}$	2α,3β,23,30-四羟基乌苏烷-12,18-二烯-28-*O*-β-*D*-吡喃葡萄糖苷	663.375 59	663.374 99	663.373 6、573.268 8、471.311 5、119.033 5
50	13.413	$C_{36}H_{58}O_{11}$	四羟基三萜酸苷	665.390 17	665.390 64	459.346 1、101.023 4
51[a]	15.205	$C_{15}H_{10}O_5$	芹菜素	269.044 72	269.045 55	151.004 1、117.034 9
52	15.690	$C_{30}H_{48}O_6$	四羟基三萜酸 1	503.336 95	503.337 81	503.336 5
53	16.910	$C_{30}H_{48}O_6$	四羟基三萜酸 2	503.337 70	503.337 81	503.339 3、485.327 5
54[a]	17.006	$C_{30}H_{48}O_6$	四羟基三萜酸 3(羟基积雪草酸)	503.337 50	503.337 81	503.338 1
55	17.117	$C_{30}H_{48}O_6$	四羟基三萜酸 4	503.337 45	503.337 81	503.338 1
56	17.754	$C_{30}H_{48}O_6$	四羟基三萜酸 5	503.337 36	503.337 81	503.340 7、485.329 4
57	18.761	$C_{30}H_{48}O_6$	四羟基三萜酸 6	503.337 57	503.337 81	503.338 3
58	19.596	$C_{30}H_{48}O_6$	四羟基三萜酸 7	503.337 35	503.337 81	503.337 9
59	19.797	$C_{30}H_{44}O_5$	覆盆子酸	483.310 65	483.311 60	471.307 6、439.321 3、437.301 1
60	21.173	$C_{30}H_{48}O_5$	三羟基三萜酸 1	487.342 92	487.342 43	487.345 1
61	22.590	$C_{30}H_{48}O_5$	三羟基三萜酸 2(积雪草酸)	487.342 27	487.342 90	487.345 2
62	23.014	$C_{30}H_{48}O_5$	三羟基三萜酸 3	487.342 49	487.342 43	487.3450
63	23.360	$C_{30}H_{48}O_5$	三羟基三萜酸 4	487.342 42	487.342 43	487.345 8
64	24.117	$C_{30}H_{48}O_5$	三羟基三萜酸 5	487.342 90	487.342 43	487.345 0
65	24.153	$C_{30}H_{48}O_5$	三羟基三萜酸 6	487.342 90	487.342 43	487.345 0
66	27.168	$C_{30}H_{48}O_5$	三羟基三萜酸 7	487.343 03	487.342 43	487.344 2
67	33.149	$C_{39}H_{52}O_7$	蜡果杨梅酸 A	631.364 01	631.364 03	145.030 1
68	33.517	$C_{30}H_{48}O_4$	二羟基三萜酸 1	471.347 33	471.347 98	471.348 1
69	33.743	$C_{30}H_{48}O_4$	二羟基三萜酸 2	471.347 52	471.347 98	471.350 1
70	34.402	$C_{30}H_{48}O_4$	二羟基三萜酸 3	471.347 11	471.347 98	471.348 8
71	34.536	$C_{39}H_{54}O_7$	3β-香豆素酰基-2α,24-23-二羟基乌苏酸	633.380 06	633.379 68	633.380 9、145.029 6
72	34.610	$C_{30}H_{48}O_4$	二羟基三萜酸 4	471.347 60	471.347 98	471.348 1
73[a]	34.743	$C_{30}H_{48}O_4$	山楂酸(二羟基三萜酸 5)	471.346 12	471.347 98	471.347 4
74[a]	35.838	$C_{30}H_{48}O_4$	科罗索酸(二羟基三萜酸 6)	471.346 12	471.347 98	471.347 4
75	36.433	$C_{39}H_{54}O_6$	高加蓝花楹三萜酸	617.383 16	617.384 76	145.029 1
76	36.503	$C_{39}H_{54}O_6$	高加蓝花楹三萜酸	617.383 82	617.384 76	617.386 5、145.028 8
77[a]	36.996	$C_{30}H_{48}O_3$	白桦脂酸	455.351 84	455.353 07	455.352 3
78[a]	37.163	$C_{30}H_{48}O_3$	齐墩果酸	455.351 84	455.353 07	455.352 3
79[a]	37.163	$C_{30}H_{48}O_3$	熊果酸	455.351 25	455.353 07	455.353 6
80	37.671	$C_{30}H_{46}O_3$	路路通酸	453.335 56	453.337 42	453.336 9
81	38.061	$C_{16}H_{32}O_2$	棕榈酸	255.232 72	255.232 95	255.232 8
82	39.764	$C_{18}H_{36}O_2$	硬脂酸	283.263 69	283.264 25	283.262 8、266.958 5

a:与对照品进行进一步确认

本研究采用液质联用技术检测出 3 个羟基三萜酸色谱峰、6 个二羟基三萜酸色谱峰、7 个三羟基三萜酸色谱峰和 7 个四羟基三萜酸色谱峰。由于同分异构体在采用液质联用技术分析时会出现相同的准分子离子峰和相似的特征碎片,因此无法准确判断这些化合物的保留时间,在表 2 中分别采用二羟基三萜酸 1 ~6、三羟基三萜酸 1 ~7 和四羟基三萜酸 1 ~7 指代。通过与对照品比对,指认了山楂酸、科罗索酸、白桦脂酸、齐墩果酸和熊果酸,结合猕猴桃根指纹图谱和含量测定的文献推测保留时间约 17.0、22.6 和 23.0 min 的色谱峰对应的化合物分别为羟基积雪草酸、积雪草酸和 2α,3α,24-三羟基-12-烯-28-乌苏酸[16]。

5 UPLC-Q-TOF-MS/MS 对猕猴桃根和猕猴桃藤的化学成分差异性研究

原始数据使用 ME 代谢组学处理软件(大连达

硕公司）进行预处理，将所得数据使用 Simca-p 14.0 软件进行分析，根据 $P<0.05$、VIP≥2.0、FC≥1.5 或≤0.75，寻找差异化学成分，从整体到部分更全面分析猕猴桃根和猕猴桃藤化学成分的差异[20-22]。

5.1 主成分分析（principal component analysis，PCA） 通过 PCA 模型对样本数据进行聚类特征解析，结果显示质控样本呈紧密聚集状态，模型解释率参数 $R^2X=0.728$，预测能力参数 $Q^2=0.559$，证实该分析模型具有可靠的稳定性[23-24]，PCA 得分图见图 2。结果显示，猕猴桃根和猕猴桃藤样品区分明显，提示猕猴桃根与猕猴桃藤化学物质基础存在一定差异。此外，15 批猕猴桃根样品在图中聚集在 2 个区域，可能是由于地理环境、采收期、生长年限等因素不同导致不同批次猕猴桃根的化学成分存在差异。

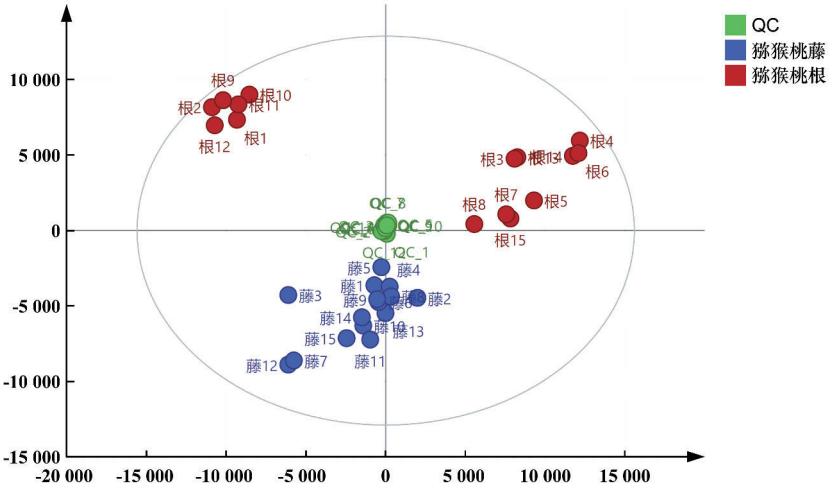


图 2 样品 PCA 得分图

5.2 正交偏最小二乘法-判别分析（orthogonal partial least squares-discriminant analysis，OPLS-DA） 为识别猕猴桃根与猕猴桃藤之间的差异化学成分，采用 OPLS-DA 分析法增强组间区分度，降低组内无关变量干扰。模型验证结果（$R^2X=0.538$，$R^2Y=0.756$，$Q^2=0.567$）表明，模型具有良好的稳定性和可靠性。经 200 次置换检验验证，模型未呈现过拟合现象，预测能力较好[23,25-26]。OPLS-DA 结果显示，猕猴桃根与猕猴桃藤得到了更明显的区分，得分图见图 3，含量的 VIP 值见图 4。根据筛选原则，共筛选出 31 个差异性成分，结合表 2 鉴定了其中 15 个化学成分。

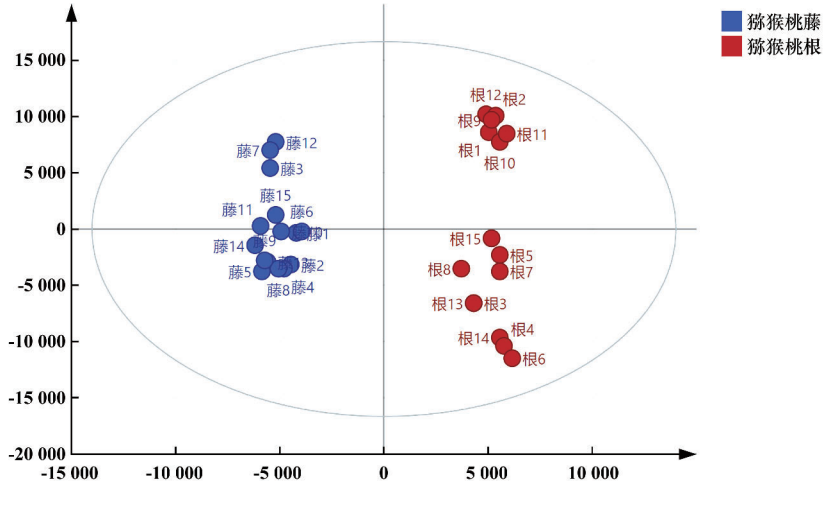


图 3 样品 OPLS-DA 得分散点图

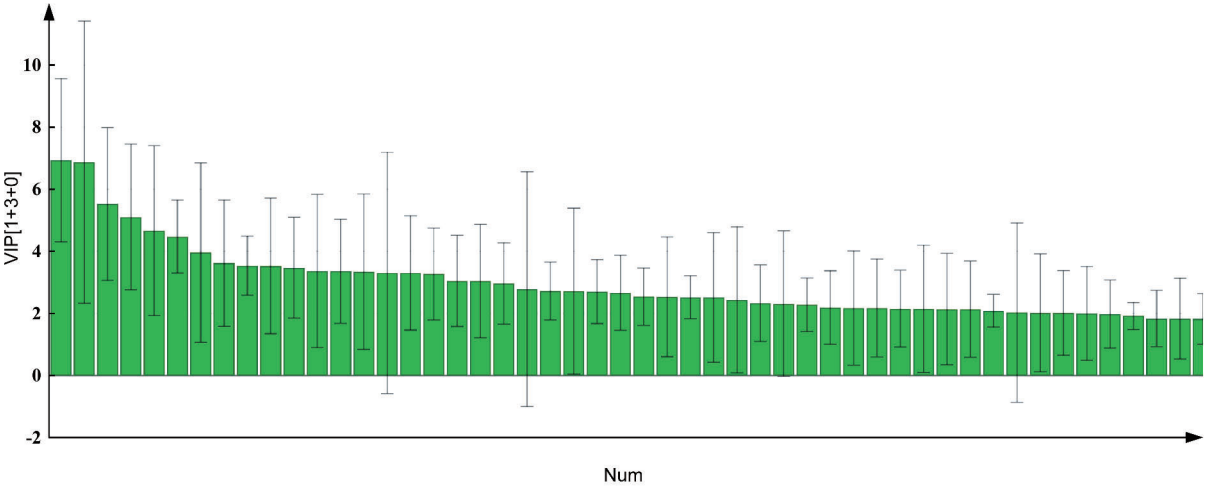


图 4　OPLS-DA 模型中含量的 VIP 值

5.3　差异化合物的热图分析　将筛选出的 31 个差异化合物在各样本中的相对含量采用热图进行展示，见图 5。结果表明，31 个差异成分中 26 个成分在猕猴桃根中的平均含量相对更高。儿茶素、原花青素类化合物等黄酮类成分在猕猴桃根中的含量较高；积雪草酸、羟基积雪草酸等三萜酸类成分在猕猴桃根中的相对含量较高，但也有少数的三萜酸在猕猴桃藤中含量较高。苯丙素类成分秦皮苷、秦皮乙素在猕猴桃藤中的含量相对较高，而 5-*O*-对香豆酰基奎宁酸在猕猴桃根中的含量较高。

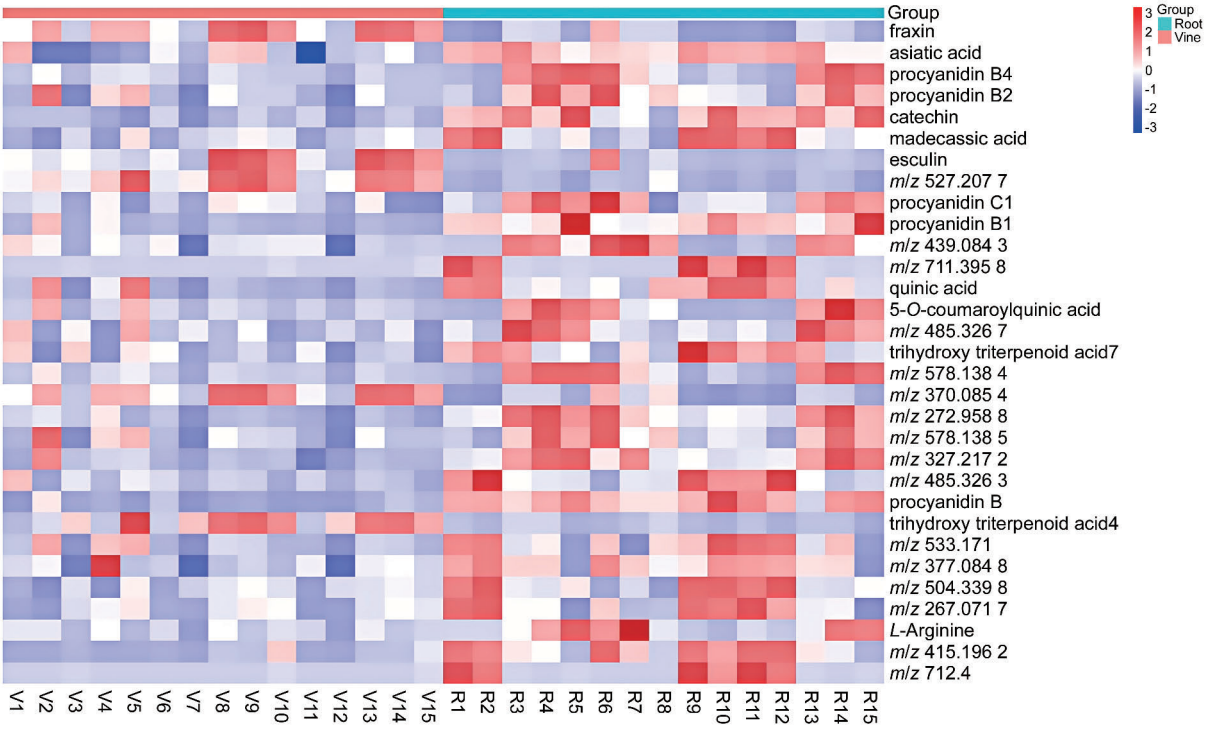


图 5　猕猴桃根与猕猴桃藤组间差异化合物热图分析

讨　论

传统采挖方式对植物根系的一次性利用严重破坏了野生资源。随着药用需求持续增长，过度采挖导致资源自然更新受阻，野生种群数量锐减，不仅威胁药材的稳定供应，更影响了资源的可持续利用。

以猕猴桃根为例,其原料主要依赖野生资源。近年来,由于市场需求激增,在根部资源紧缺的情况下,药用部位已扩展至根茎及部分茎枝[11]。市场调研显示,当前流通的药材中猕猴桃藤占比显著增加,部分批次甚至以藤茎为主要成分。但猕猴桃根与猕猴桃藤的化学成分与临床疗效是否等同,尚缺乏理论依据,因此有必要对猕猴桃根和猕猴桃藤开展充分的比较研究。本研究基于液质联用技术,系统分析了猕猴桃根和藤的化学组成特征,通过高分辨质谱数据实现成分的快速鉴定。结合植物代谢组学多元统计分析方法,建立差异标志物的筛选策略,揭示两者间的特征性化学成分差异[21],通过高分辨质谱数据比对和文献验证,最终鉴定出 15 个具有显著差异的化合物。化学组成分析表明,猕猴桃根与藤茎所含化学成分相似,都主要含有三萜类、黄酮类、苯丙素类等化学成分,但仍存在一定差异:猕猴桃根中三萜类成分和黄酮类成分的含量高于猕猴桃藤,而猕猴桃藤中秦皮苷和秦皮乙素等苯丙素类成分的含量高于猕猴桃根。猕猴桃根与猕猴桃藤中儿茶素、表儿茶素、原花青素等黄酮类具有抗肿瘤、抗氧化等多种药理作用[27],积雪草酸等五环三萜酸类化合物具有抗肿瘤、抗炎等作用,秦皮苷、秦皮乙素等苯丙素类化合物具有抗菌、抗炎、抗肿瘤等作用[28-29],这些药理作用与猕猴桃根的临床作用一致,是其发挥药效的重要物质基础。本研究表明猕猴桃根中所含黄酮类和五环三萜类化合物的含量均高于猕猴桃藤,猕猴桃根药材中掺入猕猴桃藤可能会导致药材品质下降、临床疗效降低。本研究仍存在一定的局限性,所选样品虽涵盖多个产地,但野生资源的个体差异可能对化学成分产生影响。猕猴桃根样品在 PCA 得分图中分布在 2 个区域,表明其化学成分存在差异,但影响因素尚未明确。此外,本研究聚焦于化学成分差异,但药效差异仍需通过体内外活性实验加以验证,以明确化学成分差异与临床疗效的关联。

综上所述,猕猴桃根与藤中所含大类成分相似,若要开发猕猴桃藤的药用价值,需进一步对猕猴桃根与猕猴桃藤的安全性和有效性进行对比研究,以确定猕猴桃藤的安全有效剂量。

[参 考 文 献]

[1] 王亚新, 侯国栋, 关永霞, 等. 藤梨根化学成分和药理作用研究进展[J]. 中华中医药学刊, 2025, 43(3): 30-41, 287.

[2] 陈方超, 高守红, 王志鹏, 等. 基于 UHPLC-Q-TOF-MS/MS 技术鉴定藤梨根的化学成分[J]. 中国药房, 2020, 31(14): 1725-1731.

[3] 周慧. 猕猴桃根配伍石韦抑制前列腺癌细胞增殖的网络药理预测与实验验证[D]. 济南: 山东中医药大学, 2023.

[4] 徐一新. 中药藤梨根和猫人参活性成分研究[D]. 上海: 第二军医大学, 2010.

[5] 徐一新, 项昭保, 陈海生. 猕猴桃属植物化学成分和生物活性研究进展[J]. 解放军药学学报, 2011, 27(2): 164-170.

[6] 北京市药品监督管理局. 北京市中药饮片炮制规范[S]. 2023.

[7] 陕西省食品药品监督管理局. 陕西省药材标准 2015 年版[M]. 西安: 陕西科学技术出版社, 2016: 92-93.

[8] 湖北省药品监督管理局. 湖北省中药材质量标准 2018 年版[M]. 北京: 中国医药科技出版社, 2019.

[9] 贵州省药品监督管理局. 贵州省中药民族药药材标准[M]. 贵阳: 中国医药科技出版社, 2019: 346.

[10] 陆胤. 中草药猫人参的活性评价及其功能性产品的开发[D]. 杭州: 浙江大学, 2007.

[11] 赵云鹏. 抗肿瘤中草药猫人参的种质鉴别及其与近缘种的活性比较研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2006.

[12] 王忠壮, 宋嬿, 胡晋红, 等. 藤梨根与猫人参的性状鉴别及其临床应用[J]. 药学服务与研究, 2005, 5(2): 134-137.

[13] 胡倩南, 田春芳, 魏朝法, 等. 基于 UPLC-Q-TOF-MS 技术结合化学计量学的毛叶香茶菜不同部位化学成分研究[J]. 中国中药杂志, 2024, 49(9): 2478-2488.

[14] 田淑云, 廖朝华, 周紫薇, 等. 植物代谢组学在药材质量评价中的研究进展与展望[J]. 药学学报, 2022, 57(6): 1734-1749.

[15] 曾志浩, 肖观林, 贾灿潮, 等. 超高效液相色谱-四极杆-飞行时间质谱分析匙羹藤化学成分[J]. 中国新药杂志, 2024, 33(15): 1595-1607.

[16] 陈方超. 藤梨根化学成分的定性定量检测方法研究[D]. 上海: 上海中医药大学, 2020.

[17] 崔莹. 猕猴桃属植物化学成分及药理活性研究进展[J]. 西安文理学院学报(自然科学版), 2011, 14(4): 21-25.

[18] 崔莹. 中华猕猴桃根的化学成分研究[D]. 杨凌: 西北农林科技大学, 2007.

[19] 张云. 猕猴桃多酚分离鉴定及抗氧化活性研究[D]. 长沙: 中南林业科技大学, 2019.

[20] 乐娜, 付祥郴, 李一芃, 等. 基于超高效液相色谱-四极杆-飞行时间质谱技术分析臻源胶囊的化学成分[J]. 世界中医药, 2025, 20(20): 3600-3608.

[21] 刘佳星, 李佳涵, 杜晨晖, 等. 经典名方酸枣仁汤对 PCPA 致失眠大鼠的血清代谢组学研究[J]. 中国中药杂志, 2022, 47(6): 1632-1641.

[22] 黄玉, 余欢迎, 熊俊伟, 等. UHPLC-Q-TOF-MS 技术结合多元统计分析研究菟丝子盐炙前后化学成分变化[J]. 中国新药杂志, 2022, 31(15): 1542-1552.

[23] 高文雅. 基于多组学技术的黄连解毒汤治疗阿尔茨海默病的作用机制研究[D]. 北京: 中国中医科学院, 2024.

[24] 文旺, 李莉, 李德坤, 等. 基于液质联用技术和植物代谢组学的甘草炮制品化学成分差异性分析[J]. 中国实验方剂学杂志, 2020, 26(17): 104-110.

[25] 彭岚. 基于液质联用技术的重型再生障碍性贫血患者血浆代谢组学分析[D]. 天津: 天津医科大学, 2019.

[26] 谢凤凤, 黎理, 韦安达, 等. 基于广泛靶向代谢组学的火炭母和硬毛火炭母次生代谢产物差异性分析[J]. 中药材, 2022, 45(1): 101-107.

[27] 杨代晓, 陈晓静, 胡秋菊, 等. 液相色谱-质谱联用法分析葡萄籽提取物中的 5 种多酚类成分[J]. 药物分析杂志, 2016, 36(8): 1330-1337.

[28] 吴松涛. 秦皮抗肿瘤活性成分筛选及其抑制 Warburg 效应的分子机制研究[D]. 武汉: 湖北中医药大学, 2020.

[29] 玉华, 包文强, 毕力格图, 等. 蒙药铁杆蒿中 12 个指标成分的同时测定[J]. 药物分析杂志, 2019, 39(6): 1036-1041.

编辑:毕晓帆/接受日期:2025-06-27