DOI:10.13193/j.issn.1673-7717.2025.03.039

基于谱效关联技术的中药质量控制研究进展

张建锋[1,2],侯长周[2],侯晓杰[2],安海[1],张石宇[3]
(1.贵州威利德制药有限公司,贵州 贵阳 550016;2.贵州中医药大学药学院,贵州 贵阳 550025;
3.贵州中医药大学第一附属医院,贵州 贵阳 550001)

摘要:对国内外有关谱效关联研究论文进行分析研究,在谱效关联技术中主要运用色谱法、电感耦合、等离子体质谱法、紫外分光光度法等,对单味中药、中药复方制剂、中药饮片的抗菌、抗炎、抗氧化等方面进行谱效关联研究,通过离体细胞、细菌及在体动物等生物活性评价模型,采用偏最小二乘法、灰色关联度法、相似性分析法、层次聚类分析法、主成分分析法及双变量分析法等方法,探究了中药的药效物质基础,为中药的质量控制提供了新的方法。谱效关联技术在中药质量控制过程中,还存在以下不足:一是研究指纹图谱色谱峰中各化学成分的相互作用对中药药效的影响报道较少;二是针对同种疾病,各单个或综合的数据处理方法之间缺乏差异性比较,不同的分析方法可能存在差异,导致谱效关联结果出现偏颇。如果能在解决以上两个问题的基础上,进一步对相应活性成分作靶点和通路研究,将能更加全面、系统地对中药药效机理进行剖析,助力中药高质量发展。

关键词:中药质量控制;谱效关联;指纹图谱;生物活性模型;谱效分析方法
中图分类号:R284.1 **文献标志码**:A **文章编号**:1673-7717(2025)03-0205-06

Research Progress of Traditional Chinese Medicine Quality Control Based on Spectrum-effect Correlation Technology

ZHANG Jianfeng[1,2], HOU Changzhou[2], HOU Xiaojie[2], AN Hai[1], ZHANG Shiyu[3]
(1. Guizhou Valid Pharmaceutical Co. Ltd, Guiyang 550016, Guizhou, China;
2. School of Pharmacy, Guizhou University of Traditional Chinese Medicine, Guiyang 550025, Guizhou, China;
3. The First Affiliated Hospital, School of Pharmacy of Guizhou University, Guiyang 550001, Guizhou, China)

Abstract: Analyzes and studies the relevant spectrum effect association research papers at home and abroad, think, Spectral effect correlation technology mainly uses chromatography, inductive coupling, plasma mass spectrometry, ultraviolet spectrophotometry, The correlation study of single Chinese medicine, compound preparation of Chinese medicine: antibacterial, anti-inflammatory and antioxidant, Through the biological activity evaluation model of in vitro cells, bacteria and in vivo animals, Using partial least squares method, gray correlation degree method, similarity analysis method, hierarchical clustering analysis method, principal component analysis method and bivariate analysis method, Exploring the medicinal substance basis of traditional Chinese medicine, Prova new methods for quality control of TCM. Based on the research results of TCM, two conclusions are obtained. First, the influence of the interaction of chemical components on the data analysis method of the same disease. On the basis of the existing spectrum effect correlation research, the above two aspects are expected to provide more comprehensive and systematic quality control of TCM and help the high-quality development of TCM.

Keywords: quality control of traditional Chinese medicine; spectral effect association; fingerprint map; biological activity model; spectrum effect analysis method

基金项目:国家自然科学基金项目(82360816);贵州省十大工业(健康医药)产业振兴专项(黔财工〔2020〕247号);贵州省中医药管理局中医药、民族医药科学技术研究专项(QZYY-2024-188);贵阳国家高新区企业质量提升项目(筑高新质量发〔2023〕1号);贵州中医药大学研究生教育创新计划项目(YCXKYS2023034)
作者简介:张建锋(1981-),男,山东郓城人,高级工程师、副主任药师,硕士研究生导师,研究方向:中药关键工艺技术及质量评价。
通讯作者:安海(1980-),男,贵州德江人,高级工程师,研究方向:药品工艺技术及检验检测。E-mail:605128843@qq.com。

中药是中华中医药的重要组成成分,在防病治病上起着重大作用。中药质量控制是保证其安全、有效、均一、可控的前提,截至目前,质控模式已由传统的经验鉴别,转到经验鉴别与色谱、光谱等定性定量分析相结合的鉴别方法[1]。生物测定的中药质量控制、有效成分群、质量标志物等质控模式提出以来,中药的质量控制取得长足发展[2-4]。中药指纹图谱是将中药经过适当的方法处理后,采用一定手段,表征中药整体化学成分的性质,具有一定的模糊性,该特点与中药多成分、多靶点、多通路发挥作用的特点相契合,广泛用于中药材、中药饮片、中药复方制剂的质量控制[5]。但中药指纹图谱仅对中药真伪优劣进行评价,其成分与疗效的关系并无体现。若代表质

量控制的化学成分与疗效之间没有任何联系，中药于临床治病救人方面将无任何意义。2002 年，李戎[6]创建谱效学关系，建立了化学成分和药效之间的桥梁，为中药的内在质量控制提供有效的方法。中药谱效关联主要程序包括建立指纹图谱、选择药效评价模式、选择分析方法。本文主要从中药质量控制模式，谱效关联分析方法构建及基于谱效关联的中药质量控制 3 个方面进行文献总结，以期为中药质量控制的相关研究提供参考。

1 中药质量控制模式

在中药发展过程中，中药质量控制一直是其高质量发展的痛点和堵点，一直制约着中药的国际化进程。中药有复杂的化学成分、作用靶点和机制，以单一化学成分对其质量控制并不符合中药的特点，基于多成分的中药质量控制主要有：基于生物学的中药质量控制见表 1；多成分整体分析的中药质量控制见表 2；其他类中药质量控制见表 3。

2 谱效关联分析方法构建

中药谱效关联技术分析方法见插页 XLⅢ图 1，是原料药物经过粉碎、筛析、精制等手段进行纯化，采用色谱法、光谱法、质谱法等建立中药的指纹图谱，得到特征化学的色谱峰，选用细胞、离体组织、器官或在体动物实验作为生物效应评价模型，对各峰所对应的化学成分进行分析，并通过灰色关联度法、相似性分析法、层次聚类分析等方法，判断中药中各色谱峰对药效的贡献大小，以此确定中药发挥药效的物质基础，阐明其作用机制。

3 基于谱效关联技术的中药质量控制

3.1 基于高效气相色谱 - 质谱（GC - MS）联用的谱效关联中药质量控制

气相色谱（GC）法以气体为流动相，具有高效快速、高选择性、高灵敏度、样品用量少、方法稳定性好等特点。挥发油是中药化学成分中的重要组成部分，具有一定的抗炎、抗菌等作用，气质联用可更好地用于挥发油的鉴定。刘昱[23]基于该方法探究艾叶挥发油与抑菌效果的相关性，结果表明，樟脑和龙脑为艾叶挥发油抑菌活性的质量标志物，可为艾叶质量标准的建立提供依据。中药具有寒、热、温、凉、平四性，依据寒者热之，热者寒之的中医诊治理论，药性在中医理论体系中具有重要意义。菊科植物苍术具有热燥湿健脾，祛风散寒、发表、明目的作用，性味辛，具有一定的燥性，为探究其性味与挥发性成分的谱效关系，瞿领航等[24]以大鼠日均饮水量、全血黏度、肾脏中水通道蛋白 2（AQP2）量为苍术燥性效应药效指标，集合正交偏最小二乘法探究苍术挥发油燥谱效关系，结果表明 β - 桉叶醇、马兜铃烯、异愈创木醇为苍术燥性物质基础，进一步阐述了成分与药效的关系，为中医守正创新提供了新的视角。

3.2 基于高效液相色谱（HPLC）谱效关联的中药质量控制

3.2.1 单味中药 HPLC 质量控制 HPLC 单味中药的质量控制，主要运用了灰色关联度、偏最小二乘法、聚类分析、主成分

表 1 基于生物学的中药质量控制

质量控制模式	特点	参考文献	期刊	年限
基于生物活性的中药质量控制	不以中药复杂的化学体系为切入点，而是将复杂的中药成分作为“黑箱”，直接以药效为切入点评价药材品质	[7]	江西中医药大学	2019
DNA 分子标记技术	分子由于插入、缺失、重排、倒位、易位等机制而产生的多态性，能精准地揭示植物遗传物质的变异	[8]	Mod Chin Med（中国现代中药）	2019
分子生物学技术	专属性高、靶标性强	[9]	Chin Tradit Herb Drugs（中草药）	2022
聚酶链式反应	通过监测内源性代谢物的变化来评价中药对机体产生的整体效应	[10]	药学学报	2023

表 2 多成分整体分析的中药质量控制

质量控制模式	特点	参考文献	期刊	年限
谱效关联	建立了峰与疗效之间的关系，确定与疗效相关的质量标志物	[11]	中国现代中药	2020
网络药理学	构建“成分 - 疾病 - 靶点”关系网，预测关键化学成分，再围绕其建立质量评价	[12]	EvidBased Complement Alternat Med	2021
一测多评	采用一种对照品作为参照物，并建立参照物与各待测组分之间的校正因子（RCF），从而达到通过使用一个对照品即可对多指标进行测定的质控技术	[13]	中国实验方剂学杂志	2021
双标多测	2 个对照品，分别用双标线性校正法进行色谱峰定性和 RCF 定量	[14]	中国新药杂志	2022
对照提取物的应用	特定提取工艺制备的含有多种有效成分或指标成分	[15]	中草药	2023
中药指纹图谱	对化学成分进行系统的、整体的、专属的表征，尽可能全面地模糊地反映中药质量情况，符合中药复杂体系的特点	[16]	中药药理与临床	2023

表 3 其他类中药质量控制

质量控制模式	特点	参考文献	期刊	年限
基于 Q - Maker 的中药质量控制	以中医理论为基础、以有效性为核心、以成分的特有性为依据，从可测性及可传递溯源等方面为中药质量监管提供参考依据	[17]	中草药	2019
数字化指纹	利用数学原理或方法对指纹图谱本质特征进行定义、表达、重组、模拟等处理的过程	[18]	分析测试学报	2020
基于道地性和现代生产规范性	道地药材质优效佳，知名度高；生产规范性可保障产品质量	[19]	中国现代中药	2020
临床药用特点的质控标准	基于疾病不同阶段，以中药功效为抓手的中药质量评价方法，分阶段进行“药性 - 功效成分 - 功效 - 作用机制”的药性与功效的关联性研究	[20]	药学学报	2021
基于中药对照制剂的中成药质量等级评价	采用道地、优质、规范加工的原料药材（饮片）和辅料，严格按照制法和生产工艺规程，并遵循药品生产质量管理规范制备的实物对照	[21]	沈阳药科大学学报	2021
数字标本馆	各种原标本形态转化成数字信息进行存储，以计算机技术进入标本馆并提供服务	[22]	中国药学杂志	2022

分析等方法对 17 种中药进行抗氧化、抗菌、抗炎、抗凝血研究(表 4),由表 4 可知,单味中药的抗氧化研究,主要运用谱效关联法和偏最小二乘法进行数据处理;单味中药抗菌、抗炎方面的研究,主要基于灰色关联度法集合其他一种或两种以上方法进行分析,相较抗氧化研究的分析方法更加丰富。另外有学者还对甘草、郁金、三七、栀子、荆芥进行研究,采用两种或两种以上分析方法(主成分分析、灰色关联分析、偏最小二乘法和多元线性回归等),分别研究了补脾益气、降血脂、活血化瘀、利胆、抗炎、抗肿瘤作用,找出了上述中药中对药效贡献率较大的色谱峰,阐明了个中药的物质基础,一定程度上为中药的质量控制及中医药现代化的发展奠定了基础[37-41]。

3.2.2 中药复方制剂 HPLC 质量控制 在中药复方制剂质量控制中,主要研究对象有传统汤剂、胶囊剂及口服液体制剂。王莹等[42]用灰色关联分析探讨芍药甘草汤抗癫痫作用,认为芍药内酯苷、芍药苷、甘草苷等成分为其抗癫痫的物质基础。黄广伟[43]结合偏最小二乘回归分析方法,认为芩苏胶囊抑菌药效是迷迭香酸、丹酚酸 B、苦参碱、汉黄芩素等多种化学成分对多种细菌共同发挥作用。刘肖雁[44]结合网络药理学和入血成分鉴定,初步确定了芹糖甘草苷、芍药内酯苷和壬二酸为参枝苓口服液(SZL)质量标志物,该方法具有快速分析及发现质量标志物的特点,对完善中药质量控制和评价方法具有重要意义。

3.2.3 中药饮片 HPLC 质量控制 在基于高效液相色谱谱效关联的中药炮制研究中,杜伟锋[45]对延胡索镇痛谱效关联度分析表明,阿片碱、盐酸巴马汀等 7 种化学成分为醋延胡索炮制质量控制成分。帖晓燕[46]采用灰色关联度分析方法探索甘草蒸制前后高乌头石油醚部位行气作用谱效关系,认为行气作用是各成分相互协作的结果。杨莹等[47]发现川续断皂苷Ⅵ和绿原酸、马钱苷是续断发汗前后对骨细胞增殖活性降低的主要物质基础。

3.3 基于 UPLC 谱效关联中药质量控制

3.3.1 单味中药 UPLC 质量控制 超高效液相色谱(UPLC)法是一种以小颗粒填充色谱柱和超高压系统的新型液相色谱技术,与传统的 HPLC 相比,具有高分离度、高速度和高灵敏度的优点。基于 UPLC 单味中药的研究,有学者基于 UPLC-MS 与灰色关联统计方法,分别对忍冬[48]、吴茱萸[49]、艾纳香[50]进行药效物质基础探究;在此分析方法基础上,忍冬[51]等采用小二乘回归分析对扁担藤研究。另外张王宁,QI J 等基于灰色关联度,采用正交偏最小二乘判分别(OPLS-DA)研究了风轮菜[52]、黄芪[53],具体研究方法及结果见表 5。

3.3.2 中药复方制剂 UPLC 中药质量控制 在中药复方制剂研究方面,文献主要对芍药甘草汤、柴芩承气汤等 6 种中药复方制剂进行报道,具体使用的生物评价模型,分析方法及研究成果见表 6。

3.3.3 中药饮片 UPLC 质量控制 中药饮片方面,时艳杰[60]认为射干有 14 个共有蜂可能是抑制耐甲氧西林金黄色葡萄球菌起的药效物质基础。对于栀子谱效关联研究,李会芳[61]发现栀子炮制后栀子苷与西红花苷Ⅰ含量降低与降低肝肾毒性

表 4 单味中药抗氧化、抗菌、抗炎的质量控制

生物效应	中药	生物活性模型	谱效分析方法	有效成分群	参考文献
抗氧化	黄精	DPPH 自由基	灰色关联度分析	乙醇提取物抗氧化作用较强,但 75% 乙醇提取物最强	[25]
	余甘子	DPPH 自由	灰色关联分析法	余甘子黄酮类成分与清除 DPPH 自由基作用增强具有相关性	[26]
	茜草	DPPH 自由,肝肿瘤细胞	灰色关联度分析	大叶茜草素、新橙皮苷、山柰酚、茜草素	[27]
	红药子	自由基	采用偏最小二乘法(PLS)	绿原酸、岩白菜素、隐绿原酸为红药子抗氧化的物质基础	[28]
抗菌	黄芩	细菌	过灰色关联分析和偏最小二乘回归分析	5 种活性成分	[29]
	竹叶椒	菌群	相似度评价、聚类分析(HCA)和主成分分析(PCA)	柠檬烯侧柏醇	[30]
抗炎	铁皮石斛	一氧化氮抑制活性模型	相似性分析(SA)和层次聚类分析、灰色关联分析	麦芽四糖、麦芽五糖、麦芽六糖和甘露糖六糖与抗炎作用有关	[31]
	金银花	内毒素	双变量和主成分分析方法的相似性分析(SA)和层次聚类分析(HCA)	新绿原酸、绿原酸、隐绿原酸和异绿原酸 A、B 和 C	[32]
	藤茶	炎症模型	灰色关联度	杨梅素,二氢杨梅素	[33-34]
	当归	血小板	灰色关联度	参金内酯 I 和阿魏酸	[35]
	瓜蒌子	凝血酶	邓氏关联度计算法	明瓜蒌子及其壳、仁有共同的物质基础	[36]

表 5 UPLC 谱效关联技术在单味中药中的运用

中药	生物活性模型	谱效分析方法	有效成分群
黄芪	阿霉素肾病大鼠	采用灰色关联度分析法与偏最小二乘回归分析	黄芪皂苷Ⅰ、黄芪皂苷Ⅱ、黄芪皂苷Ⅲ、黄芪甲苷、Kumatakenin(黄酮类)、2-羟基-二甲氧基异黄酮为主要药效成分群
艾纳香	大鼠(炎症)	灰色关联	3-O-咖啡酰基奎宁酸和 3,5-O-二咖啡酰基奎宁酸
扁担藤	小鼠耳肿胀和棉球肉芽肿为炎症模型	小二乘回归分析及灰色关联度分析法	原儿茶酸,抗炎作用是多种成分协同作用的结果
酸枣仁	大鼠	UPLC-Q-TOF-MS,灰色关联统计方法	斯皮诺素、山茶苷 B、6‴-阿魏酰斯皮诺素
吴茱萸	大鼠	灰色关联统计方法	檬苦素、吴茱萸碱、吴茱萸次碱
藜芦	大鼠	采用灰色关联分析(GRA)和正交偏最小二乘	橙皮苷、柚皮素、芹菜素、柴胡皂苷 a 对 TEC 的抗 AUB 活性起主要作用

表 6 UPLC 谱效关联技术的中药复方制剂质量控制

中药复方	生物活性模型	谱效分析方法	有效成分群	参考文献
芍药甘草汤	大鼠	灰色关联度及最小二乘回归分析	芍药内酯苷、芍药苷等 9 种成分	[54]
柴芩承气汤	小鼠	结合相似性、层次聚类分析(HCA)和主成分分析(PCA),Pearson 分析	大黄素、大黄酸、芦荟大黄素、厚朴酚等被认为是初级筛选中的 Q 质量标志物	[55]
半夏泻心汤	小鼠	Pearson 和 Gray 相关分析	黄连素、小檗碱、巴马汀 等多种成分共同作用	[56]
注射用双黄连组方	大鼠	偏最小二乘法	阿魏酸、咖啡酸甲酯	[57]
双黄连注射液	大鼠	回归分析和相关性分析	确定峰 5、6、11、12、17 为可能的类过敏性药物	[58]
四君子汤	离体细胞	聚类分析、典型相关分析	参皂苷 Ro 和人参皂苷 Rg1	[59]

有关。周正繁[62]用正交偏最小二乘法探究半夏炮制品的药效物质基础,认为其氨基酸、生物碱和核苷等,可能与其抗炎活性有关。

3.4 其他

其他谱效关联技术研究,主要运用高效凝胶色谱法、电感耦合等离子体质谱法、紫外分光光度法,分别对枸杞子多糖抗炎、无机元素抗肿瘤,女贞化学成分黄嘌呤氧化酶的体外抑制活性等方面进行研究,阐明了与疾病相关的药效物质基础[63-65]。

4 总结与展望

基于谱效关联的中药质量控制,是在中药指纹图谱的基础上,研究色谱峰与生物效应之间的关系,是指纹图谱研究的更高阶段。本文对近 5 年来有关单味中药、中药饮片、中药复方制剂的谱效关联质量控制进行分类整理,发现有关学者基于灰色关联度法并集合其他分析方法,通过离体细胞、细菌及在体动物等生物活性评价模型对色谱谱效关联技术报道较多,电感耦合、等离子体质谱法、紫外分光光度法等谱效关联报道较少,且以上研究主要集中阐述指纹图谱各色谱峰对特定疾病生物效应的贡献大小,以排名靠前的化学成分作为治疗疾病的药效物质基础,但中药药疗是各化学成分之间相互作用的结果,具有整体性,在中药指纹图谱研究的基础上,研究各色谱峰之间相互作用对疾病的影响将具有重要意义;对于谱效关联的生物评价模式,大量文献对同种疾病使用不同分析方法进行报道,但同种疾病数据分析方法间的差异性研究很少报道。另外,在明确特定疾病相应化学成分群的基础上,通过药理学实验,进一步挖掘化学成分相应的作用靶点和通路,将更全面地对中药药效物质基础进行剖析,讲清楚中药是什么、为什么、怎样起作用,对加速中药现代化、国际化进程具有非凡意义。

参考文献

[1] 马双成,王莹,魏锋. 我国中药质量控制模式十年来的实践与探索[J]. 中国药学杂志,2023,58(1):2-9.
[2] 李寒冰,吴宿慧,唐进法,等. 中药质量生物标志物研究进展[J]. 中草药,2019,50(19):4556-4561.
[3] 薛静波,彭渊,刘洪亮,等. 基于关键细胞信号转导效应靶标建立抗肝纤维化中药的生物活性评价与质量控制新方法[J]. 世界科学技术-中医药现代化,2020,22(4):1213-1218.
[4] 刘昌孝,陈士林,肖小河,等. 中药质量标志物(Q-Marker):中药产品质量的新概念[J]. 中草药,2016,47(9):1443-1457.
[5] 华小黎,王新桂. 指纹图谱与谱-效关联技术在中药质量评价中的应用与研究[J]. 内蒙古中医药,2014,33(30):127-128.
[6] 李戎,闫智勇,李文军,等. 创建中药谱效关系学[J]. 中医教育,2002(2):62.
[7] 杨晓娟. 妇科千金胶囊质量生物评价与整合控制研究[D]. 南昌:江西中医药大学,2019.
[8] 姚辉,张辉,陈士林.《中国药典》收载动物药材 DNA 条形码鉴定研究策略与方法[J]. 中国现代中药,2019,21(9):1137-1146.
[9] 赵露颖,施梦瑶,张巧艳,等. 道地药材品质特征及形成机制研究进展[J]. 中草药,2022,53(21):6931-6947.
[10] 程鹏飞,王涛,陈聪聪,等. 基于植物代谢组学和靶标定量分析研究山西不同产地黄芩叶化学成分差异[J]. 药学学报,2023,58(7):1867-1879.
[11] 晏朝操,张建锋. 基于谱效关联技术的中药研究现状[J]. 中国现代中药,2020,22(10):1735-1740.
[12] DING Y Y,PING Y X,FAN Y L, et al. To explore the mechanism and equivalent molecular group of radix astragali and semen lepidii in treating heart failure based on network pharmacology[J]. Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine, 2021(20):1-9.
[13] 巨珊珊,李耀磊,林志健,等. 中药质量控制模式的现状分析与思考[J]. 中国实验方剂学杂志,2022,28(18):269-274.
[14] 陈晶,陈有根,王京辉,等. 双标多测法同时测定参苏感冒片中 8 个成分[J]. 中国新药杂志,2023,32(1):86-92.
[15] 刘刚,刘金梅,穆开朗,等. 2-异丁基苹果酸葡萄糖氧基苄酯类对照提取物在白及质量控制中的应用研究[J]. 中草药,2023,54(4):1260-1266.
[16] 张海潮,周融融,谢谊,等. 基于 HPLC 指纹图谱及网络药理学技术探究槐花散抗溃疡性结肠炎的作用机制[J]. 中药药理与临床,2023,39(3):7-14.
[17] 郝敏,童黄锦,张季,等. 中药饮片质量标志物(Q-marker)研究:莪术饮片质量评价研究及质量标准探讨[J]. 中草药,2019,50(19):4673-4682.
[18] 吴惠勤,黄芳,黄晓兰,等. 沉香的高效液相色谱-四极杆-飞行时间质谱数字化指纹图谱研究[J]. 分析测试学报,2020,39(1):89-98.
[19] 程显隆,郭晓晗,李明华,等. 道地性和生产规范性是中药材质量属性形成的关键[J]. 中国现代中药,2020,22(7):991-995.
[20] 孙昱,徐敢,马双成. 中药质量整体评价研究思路探讨[J]. 药学学报,2021,56(7): 1749-1750.
[21] 聂黎行,钱秀玉,张毅,等. 中成药质量等级标准研究原则和方法的探讨[J]. 沈阳药科大学学报,2021,38(12):1327-1333.
[22] 石佳,巫明慧,康帅,等. 覆盆子的性状和显微鉴定研究与数字化表征[J]. 中国药学杂志,2022,57(6):420-427.
[23] 刘婧,黄潇,付小梅,等. 基于主成分因子加权和灰色关联分析法的栀子利胆作用谱效关系分析[J]. 中国实验方剂学杂志,2020,26(14):135-142.
[24] 瞿领航,曹国胜,涂济源,等. 基于灰色关联度与正交偏最小二乘法分析的苍术挥发油燥性谱效关系研究[J]. 中草药,2019,50(1):150-156.
[25] 赵秋华,潘乔丹,何柔柔,等. 基于灰色关联分析法探讨黄精提取物抗氧化的谱效关系[J]. 亚太传统医药,2022,18(1):62-66.
[26] 裴河欢,吴超权,余芳,等. 盐炙对广西余甘子中黄酮类成分清

除 DPPH 自由基谱效关系的影响[J]. 中国医院药学杂志,2021,41(15):1507 - 1513,1550.
[27] 李慧,包永睿,王帅,等. 基于灰色关联分析的茜草醇提物抗氧化、抗肝癌谱效关系研究[J]. 中南药学,2019,17(6):815 - 819.
[28] 曹阳洋,张亚杰,崔方,等. 基于 HPLC - DAD 指纹图谱和化学计量法分析的红药子抗氧化活性谱效关联研究[J]. 中国药事,2022,36(8):943 - 953.
[29] ZHEN H,YI Y,HAILI Y, et al. Screening antibacterial constituents of scutellaria radix based on spectrum - effect relationships between HPLC fingerprints and the inhibition of oral bacteria[J]. Journal of chromatographic science,2023(12):74 - 84.
[30] 李毛加,沙玉茹,罗晓敏,等. 基于谱效关联分析筛选竹叶椒挥发油抗菌质量标志物[J]. 中草药,2021,52(20):6268 - 6273.
[31] RUIMIN L,SONGSHAN S,SI X, et al. Quality markers of dendrobium officinale by "oligosaccharide - spectrum - effect" relationships [J]. Frontiers in nutrition,202(43)2:1 - 14.
[32] DING J X,LIU C,LIU X W,et al. Identification o f compounds with antipyretic effects and anti - endotoxin activity in different species o f Lonicera japonica using spectrum - effect correlation[J]. Exp Ther Med,2021,22(1):665.
[33] 刘雯,覃洁萍,潘真真,等. 基于灰色关联分析的藤茶提取物体外抗炎作用的谱 - 效关系研究[J]. 中国医院药学杂志,2021,41(20):2071 - 2075.
[34] 刘雯,刘云,刘进宝,等. 基于灰色关联分析的藤茶不同极性部位在小鼠体内抗炎作用的谱 - 效关系研究[J]. 中国药房,2020,31(19):2382 - 2386.
[35] ZHANG K,SHEN X,YANG L,et al. Exploring the Q - markers of Angelica sinensis (Oliv) Diels of anti - platelet aggregation activity based on spectrum - effect relationships[J]. Biomed Chromatogr,2022,36(9):5422.
[36] 鄢海燕,邹纯才. 基于谱效整合分子对接技术研究瓜蒌子及其壳、仁抗凝血的物质基础及作用机制[J]. 中国中药杂志,2022,47(5):1370 - 1382.
[37] WENXIN X,QIANSONG L,HAO Z, et al. Study on the spectrum - effect relationship of the traditional effect of saponins in fisch[J]. International Journal of Analytical Chemistry,2021(40):1 - 9.
[38] LIU M,WU Y,HUANG S,et al. Spectrum - effect relationship between HPLC finge rprints and hypolipidemic effect of Curcuma aromatica [J]. Biomed Chroma1,201832(7):e4220.
[39] 毕天琛,杨国宁,刘蓓,等. 北柴胡饮片及其配方颗粒的指纹图谱建立和化学模式识别[J]. 中国医药工业杂志,2023,54(11):1593 - 1600.
[40] 黄潇,刘婧,吴建华,等. 基于灰色关联法分析栀子提取物抗炎作用谱效关系[J]. 中成药,2020,42(1):233 - 237.
[41] 贾梦楠,王帅,李天娇,等. 基于谱效关系的荆芥穗药效部位治疗结肠癌药效质量标志物研究[J]. 亚太传统医药,2022,18(8):33 - 38.
[42] 王莹,吴红杰,管庆霞,等. 基于灰色关联分析法探索芍药甘草汤对癫痫小鼠脑保护作用的谱效关系[J]. 中国实验方剂学杂志,2020,26(16):56 - 62.
[43] 黄广伟,陈淮臣,刘渝,等. 基于灰色关联度和偏最小二乘回归分析的芩苏胶囊抑菌谱效关系研究[J]. 药物评价研究,2022,45(6):1060 - 1069.
[44] 刘肖雁,姜文文,蒋海强,等. 基于"谱 - 效 - 代"关联的参枝苓口服液质量标志物的初步研究[J]. 中草药,2019,50(19):4603 - 4612.
[45] 杜伟锋,孙海英,洪浩,等. 基于谱效关系的醋延胡索炮制前后特征成分研究[J]. 中草药,2021,52(20):6178 - 6187.
[46] 帖晓燕,戴海蓉,辛国雄,等. 基于灰色关联分析研究甘草汁蒸制前后高乌头石油醚部位行气作用谱效关系[J]. 中草药,2021,52(5):1303 - 1311.
[47] 杨莹,康显杰,杜伟锋,等. 续断"发汗"前后 HPLC 指纹图谱与细胞增殖分化药效的谱效关系研究[J]. 中草药,2019,50(16):3909 - 3916.
[48] 杨柯楠,韩燕雨,孙启慧,等. 忍冬果实谱效关系研究[J]. 中华中医药学刊,2022,40(7):114 - 117,268 - 270.
[49] 惠慧,陈祺松,田港,等. 基于谱效关联分析的吴茱萸抗炎活性的质量标志物研究[J]. 中草药,2021,52(9):2589 - 2596.
[50] 汪洋,彭潇,何燕玲,等. 基于灰色关联分析探索艾纳香非挥发性部位的抗炎活性谱效关系[J]. 中国实验方剂学杂志,2019,25(4):180 - 186.
[51] QI J,ZHANG Q,LI L,et al. Spectrum - effect relations hip bet ween UPLC - Q - TOF - MS fingerprint and anti - AUB effect of Clinopodium chinense (B enth.) O. Kuntze [J]. Pharm Biomed Anal,2022,217:114828.
[52] 张王宁. 基于谱效相关辨识黄芪在防己黄芪汤干预阿霉素肾病大鼠的药效成分群[D]. 太原:山西大学,2019.
[53] 丘琴,卢显兴,阮必高,等. 基于灰色关联度和偏最小二乘回归分析的扁担藤抗炎谱效关系研究[J]. 中药材,2021,44(2):369 - 373.
[54] 王倩. 芍药甘草汤抗肝损伤谱效关联研究[D]. 石家庄:河北中医学院,2021.
[55] LIANG G,YANG J,LIU T,et al. A multi - strategy platform for quality contr ol and Q - markers screen of Chaiqin chengqi decoction [J]. Phytomedicine,2021,85:153525.
[56] SHI J W,LI Z Z,WU J S,et al. Identification o f the bioactive components of Banxia Xiexin Decoction that protect against CPT - 11 - i nduced intestinal toxicity via UPLC - based spectrum - effect relationship analyses[J]. J Eth nopharmacol,2021,266:113421.
[57] 冯宇飞,常书源,张宁宁,等. 注射用双黄连致类过敏作用的谱效关系分析[J]. 药物分析杂志,2020,40(9):1589 - 1598.
[58] FENG Y F,JING Z X,LI Y J,et al. Screening anaphylactoid components of Shuang Hu ang Lian Basic Traditional Chinese MedicineInjection by analyzing spectrum - e ffect r elationships coupled with UPLC - TOF - MS [J]. Biomedical Chromatography, 2019, 32):e4376.
[59] ZHOU X W,LI Y,ZHANG M Y,et al. Spectrum Effect Relationship between UPLC F ingerprints and Antilung Cancer Effect of Si Jun Zi Tang [J]. Evidence - based comple mentary and alternative medicine:eCAM,2019,2019:7282681.
[60] 时艳杰,赵玥,张颖,等. 基于灰色关联分析方法对射干米泔水炮制品抑制耐甲氧西林金黄色葡萄球菌谱 - 效关系的研究[J]. 时珍国医国药,2022,33(8):1882 - 1885.
[61] 李会芳,刘静婷,郎霞,等. 基于偏最小二乘法关联分析栀子不同炮制品化学成分与肝肾毒性[J]. 药物评价研究,2021,44(9):1890 - 1896.
[62] 周正繁,王梦玲,梅之南,等. 基于非靶向代谢组学的半夏及其炮制品抗炎活性药效物质基础研究[J]. 中国药师,2022,25(12):2149 - 2157.
[63] 张鑫,刘洋,程亚茹,等. 枸杞多糖分子量分布测定与抗炎活性关联研究[J]. 北京中医药大学学报,2020,43(11):959 - 964.
[64] 陈祥晖,崔琳琳,包永睿,等. 基于灰色关联度不同产地硝石抗肿瘤作用谱效关系研究[J]. 辽宁中医药大学学报,2019,21(4):61 - 65.
[65] GAO S,CHEN H,ZHOU X. Study on the spectrum - effect relationship of the xanthine oxid ase inhibitory activity of Ligustrum lucidum [J]. J Sep Sci,2019,42(21):3281 - 3292.

基于谱效关联技术的中药质量控制研究进展

(正文见 205 – 209 页)

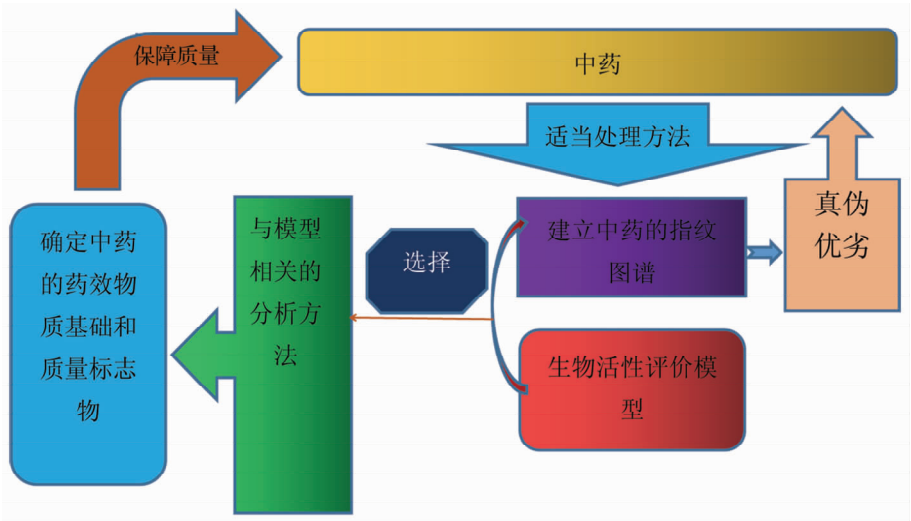


图 1 谱效关联流程及原理

ChatGPT 在风湿科中医电子病历症状信息预处理中的应用

(正文见 24 – 29 页)

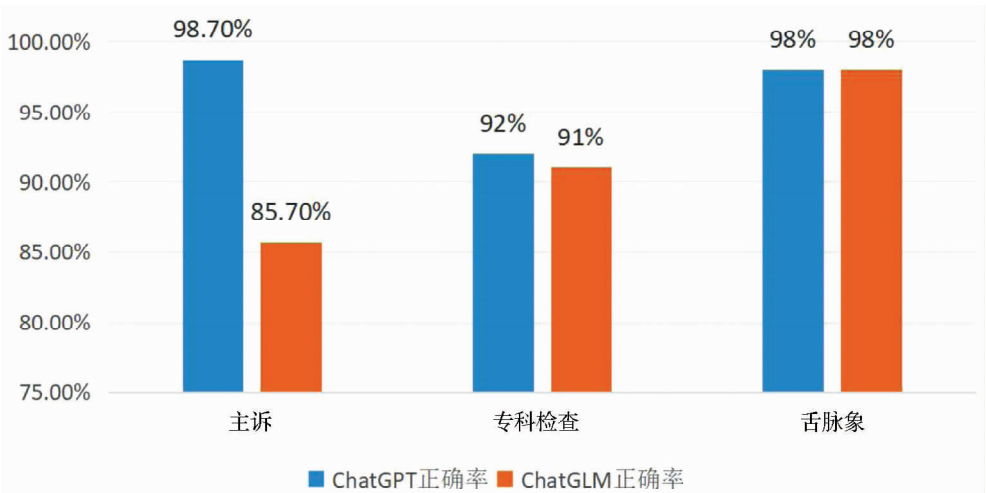


图 1 ChatGPT 与 ChatGLM 结果正确率比较