

· 中药研究 ·

基于非靶向代谢组学分析不同基原木通的
差异代谢物李静¹, 胡婷婷¹, 李巧月¹, 李金洋¹, 徐秀泉^{1,2}, 庞宇凡¹

1. 亳州学院, 安徽 亳州 236800; 2. 亳州学院中药原料产品研发安徽普通高校重点实验室, 安徽 亳州 236800

摘要 目的: 基于代谢组学方法探究不同基原木通(木通、白木通和三叶木通)的差异代谢物, 筛选基原鉴别的主要代谢物。方法: 利用 UPLC-Q-TOF-MS 代谢组学技术结合多元统计分析策略, 系统考察不同基原木通的化学组成特征, 比较 3 种基原木通的代谢物差异, 并借助数据库对潜在的差异标志物进行鉴定。结果: 负离子模式下共鉴定得到 691 个化合物, 脂质类、有机酸及其衍生物和黄酮类是主要的代谢物, 差异代谢物主要显著富集于黄酮类生物合成通路。3 组之间共有差异代谢物 11 个, 其中黄酮类(3 个, 27.27%) 和脂质类(3 个, 27.27%) 占最大比例, 结合差异倍数, 将芦丁、原花青素 B2、异鼠李素-3-O-芸香糖苷作为 3 个基原区分的差异代谢物。结论: UPLC-Q-TOF-MS 代谢组学技术可阐明不同基原木通化学成分差异, 为分析不同基原木通差异性提供思路, 为木通药材的质量控制、评价及临床使用提供更加全面和科学的参考。

关键词 木通; 基原; 代谢组学; 差异代谢物; 黄酮类

中图分类号: R284.1

文献标识码: A

文章编号: 1002-2392(2026)05-0028-08

DOI: 10.19664/j.cnki.1002-2392.260092

中药的多基原现象是导致中药临床疗效波动的重要因素, 多基原中药为不同种药用植物作为同一种中药入药^[1], 不同基原的遗传信息和生存环境会影响药材的生物合成和代谢途径, 导致其化学成分谱和生物活性产生明显分化, 从而影响临床药效^[2]。味连和雅连均为中药黄连的基原, 雅连对复发性口疮的疗效优于味连^[3], 而味连抗内毒素的作用优于雅连^[4]。不同基原的川贝母在祛痰方面也存在显著差异, 太白贝母 > 暗紫贝母, 并且太白贝母减轻小鼠咳嗽反应的作用也较佳^[5]。不同藏药佐摸兴活血化瘀作用总体表现为昌都锦鸡儿 > 鬼箭锦鸡儿白色心材 > 鬼箭锦鸡儿棕色心材^[6]。因此, 中药基原是临床用药有效性和安全性的因素之一, 对临床疗效的影响是不容忽视的问题。

木通是典型的多基原中药, 《中华本草》《中国药典》等均将木通、三叶木通和白木通^[7-8] 同收录, 具有广泛的临床应用价值, 主要用于治疗胸中烦热、咽喉疼

痛、五淋、水肿、周身挛痛、经闭乳少等。药理研究进一步揭示了木通具有抗炎、抗肿瘤、抗血栓、抗氧化等多种活性, 具有显著的药用和食用价值^[9]。木通化学成分复杂, 其中三萜及三萜皂苷类、酚醇及其苷类、咖啡酰奎尼酸类等为活性成分^[10-13]。在质量控制方面, 2020 版药典中采用色谱法以单一成分-木通苯乙醇苷 B 的含量为指标, 无法全面评价不同基原木通的质量差异, 因此筛选不同基原木通的差异代谢物, 对木通质量评价具有重要意义。

非靶向代谢组学可用于筛选差异代谢物、品种(品系)鉴定和遗传基础等研究, 具有分辨率高、灵敏度高的优势, 被广泛用于多成分复杂体系的植物药材分析^[14]。Fan 等^[15] 采用代谢组学分析方法, 鉴定调控多基原黄连种质资源差异的关键生物标志物。曾丽珊等^[16] 经代谢组学技术分析测定凉粉草不同栽培品系的差异代谢物, 解析凉粉草的主要代谢成分, 为其品系鉴别和资源开发提供参考。

因此, 本研究采用非靶向代谢组学策略对 3 种基原木通表征次生代谢产物谱系, 通过整合多元统计方法解析差异化合物, 为不同基原木通药材的药效差异性提供科学依据。

收稿日期: 2024-10-17 修回日期: 2025-07-30

基金项目: 安徽省高校自然科学研究项目(2023AH040316, 2024AH051306);

亳州学院创新创业训练项目(2023XJXM120, 2023XTXM088)

作者简介: 李静(1988-), 女, 硕士, 讲师, 研究方向: 中药资源开发。

1 材料与方法

1.1 药品

样品均采于河南驻马店确山县,经亳州学院孟祥松教授鉴定,每个基原设3个重复,样品采集信息见表1。

表1 木通样品采集信息

样品编号	基原	采集地点
MT1 – MT3	木通	河南驻马店确山县
BMT1 – BMT3	白木通	河南驻马店确山县
SYMT1 – SYMT3	三叶木通	河南驻马店确山县

1.2 试剂与仪器

AB Triple TOF 6600 质谱仪(美国 AB SCIEX 公司);Agilent 1290 Infinity LC 超高压液相色谱仪(美国 Agilent 公司);Eppendorf 5430R 低温高速离心机(德国 Eppendorf 公司);ILCE – 6500 相机(日本 Sony 公司)。

乙腈(德国 MERK 公司,1499230 – 935);乙酸铵(美国 Sigma 公司,73594);甲醇(美国 Fisher 公司,A456 – 4);氨水(美国 Fisher 公司,A470 – 500)。

1.3 方法

1.3.1 不同基原木通的形态特征对比

选取木通、白木通和三叶木通藤茎,置于相机微距系统下观察不同基原木通的形态特征区别。

1.3.2 样品溶液的制备

于4℃下解冻样品,精密称定40 mg,以甲醇 – 乙腈 – 水(2:2:1)为萃取体系进行涡旋混合,冰浴超声处理30 min, – 20℃低温沉淀(10 min),随后于4℃条件下11 230 r/min 高速离心20 min,取上清液真空干燥;经真空浓缩干燥后,采用乙腈 – 水(1:1)复溶,经二次涡旋均质及同参数离心(11 230 r/min,15 min,4℃)后收集上清液用于后续分析。

1.3.3 液相色谱条件

选用HILIC色谱柱(1.7 μm,2.1 mm × 100 mm),柱温为25℃,流速为0.5 mL/min,进样量为2 μL;流动相:水 + 25 mmol/L 乙酸铵 + 25 mmol/L 氨水(A) – 乙腈(B);梯度洗脱:0 ~ 0.5 min,95% B;0.5 ~ 7 min,65% B;7 ~ 8 min,40% B;8 ~ 9 min,40% B;9 ~ 9.1 min,95% B;9.1 ~ 12 min,95% B,全流程样品于4℃自动进样器保存。

1.3.4 质谱条件

基于AB TRIPLE TOF 6600 质谱平台建立双极性检测模式:负离子模式下ESI源参数优化为雾化气体(GAS1/GAS2:60 PSI)、气帘气体(30 PSI)、离子源温度(600℃)、喷雾电压(– 5 500 V)。数据采集采用动态排除策略(Δ4 DA,10次/循环),一级质谱扫描范围60 ~ 1 000 DA(0.20 S/SP),触发二级碎裂(CE:35 ± 15 EV,DP:– 60 V)覆盖25 ~ 1 000 DA范围(0.05 S/SP)。

1.3.5 数据处理与分析

基于XCMS平台进行代谢物注释及数据标准化处理,通过非监督性主成分分析(PCA)与监督性正交偏最小二乘判别分析(OPLS – DA)构建分类模型。设定VIP值>1且P<0.05为显著性阈值筛选特征代谢物,结合KEGG数据库进行代谢通路富集分析及拓扑学验证,筛选与差异代谢物关联性最高的代谢通路。

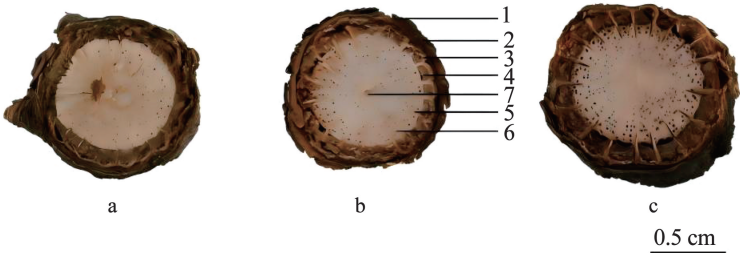
2 结果

2.1 不同基原木通药材性状对比

木通:木栓层(黄棕色)较薄,皮层(灰绿色)明显。中柱鞘呈明显海绵状,其韧皮部呈灰绿色海绵状,厚度与木栓层、皮层及中柱鞘总厚度接近。皮部(黄棕色)较厚,可见浅黄色颗粒状沉积。木质部为黄白色,导管密度高但分布不均匀,缺乏典型同心环状排列。射线狭窄且呈放射状^[17]。髓部呈淡黄或棕黄色,体积较小且偶见中空。见图1a。

三叶木通:皮层(棕褐色)明显^[18]。中柱鞘界限清晰,韧皮部呈浅棕色疏松结构,其厚度与木栓层、皮层及中柱鞘的总厚度相当。木质部导管密集排列,成典型同心环状排列,射线明显较宽。髓部呈淡黄或棕黄色,体积较小且偶见中空。见图1b。

白木通:断面为黄褐色,木栓层(褐色)较薄。皮部(黄棕色)较厚,中柱鞘界限清晰,韧皮部呈棕褐色疏松结构且厚度大于木栓层、皮层及中柱鞘的总厚度。木质部为高密度微孔导管形态(黄白色),导管孔呈典型同心环状^[19]。射线较宽且排列无序,间杂灰黄色放射状纹理。中央髓部呈圆形,偶见中空,色泽为黄白或棕黄色。见图1c。



注:1. 木栓层;2. 皮层;3. 中柱鞘;4. 韧皮部;5. 射线;6. 木质部;7. 髓。

图1 不同基原木通药材性状对比

2.2 质控结果分析

为了确定代谢物的差异,使用 UPLC - MS/MS 对不同基原木通进行非靶向代谢组学分析,在负离子模式下对混样质控 QC 样品进行检测,结果显示质控样本的 TIC 曲线重叠性好,表明实验条件稳定,数据可

靠,见图 2。通过 PCA 模型对所有样品分析结果进行监控,见图 3, QC 样品的 PC1 SCORES 集中在负 3 个标准差范围内,说明这些样品在 PC1 方向上的变异非常小,进一步证实了实验的稳定性和分析方法的重复性。

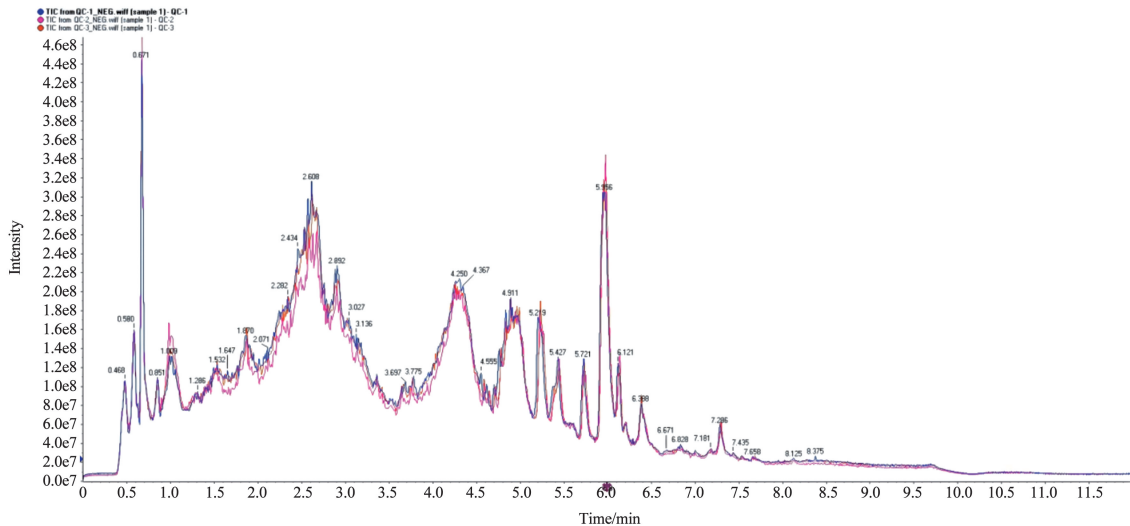


图 2 负离子模式 QC 样本总离子流重叠谱图

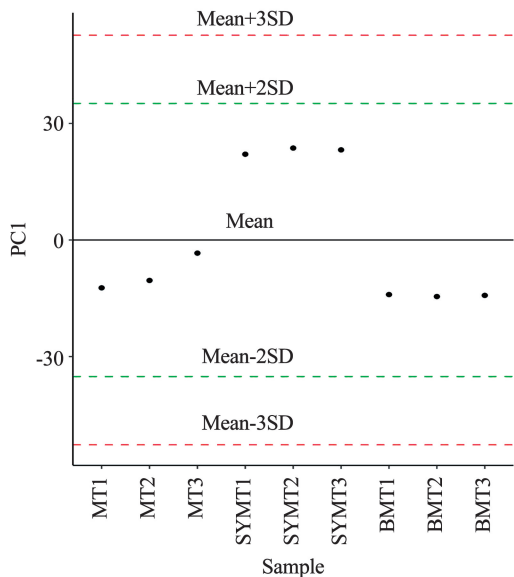


图 3 各样本点 PC1 控制图

2.3 代谢物定性结果

经与公共数据库比对,共鉴定 691 个化合物,统计各样本中各代谢物的含量百分比,为直观呈现不同基原木通差异代谢物的组成,采用堆叠柱状图对代谢物丰度进行可视化分析(见图 4),该图重点展示相对含量前 20 位的关键代谢物,其余低丰度成分统一整合为“其他”类别,以突显优势代谢物的分布特征。将代谢物用 KEGG 数据库 BR08001 进行注释,见图 5,有 15 类,其中脂质类 222 个、有机酸及其衍生物 59 个、

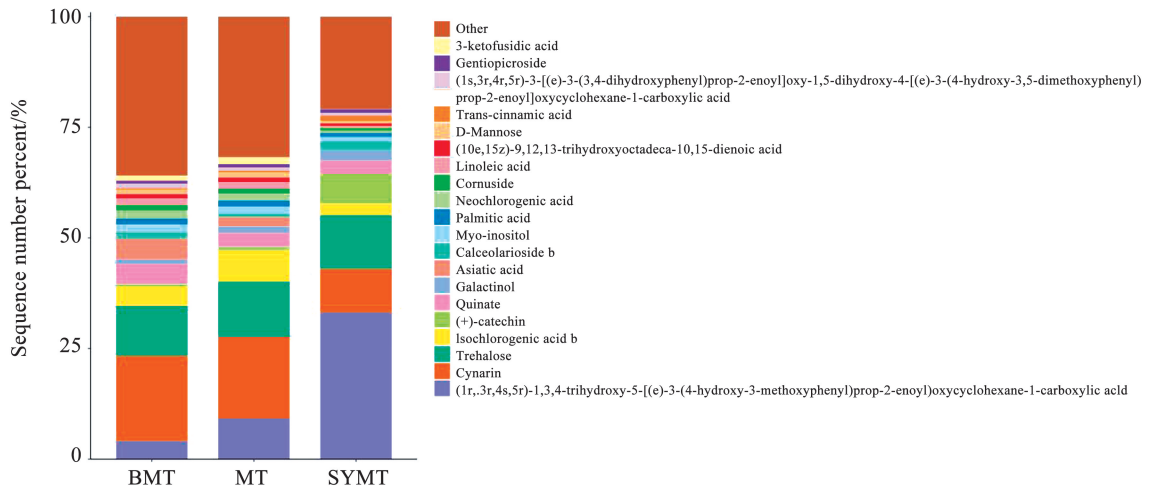
黄酮类 59 个、有机杂环化合物 52 个、类固醇及衍生物 33 个、肉桂酸及其衍生物 18 个、酚类 18 个、核苷酸及衍生物 12 个、香豆素及其衍生物 8 个、吡啶及其衍生物 7 个、木质素类 3 个、醌类 3 个。其中,脂质类、有机酸及其衍生物和黄酮类为主要的代谢物,这三类物质可认为是不同基原木通主要成分。

2.4 不同基原木通 PCA

为分析不同组别(木通、白木通、三叶木通)的样品代谢差异和组内变异性,对各组样品进行 PCA 分析。见图 6,除个别样品外,3 个基原组内样品分布较为集中,体现了较好的样品重复性;各组间样品分离,不同组别的样品在代谢特征上存在显著差异。

2.5 不同基原木通 OPLS - DA

为进一步解析多基原木通种质资源的特征性代谢差异,采用正交偏最小二乘判别法(OPLS - DA)筛选各组不同基原木通的差异。该算法通过对样品中所有低相对分子质量代谢物进行正交偏最小二乘判别分析,有效滤除非特异性代谢波动干扰,精准锁定与基原分化显著相关的差异变量簇^[20]。白木通与木通组间 R^2X 、 R^2Y 、 Q^2Y 值分别为 0.739,0.999,0.917;白木通与三叶木通组间 R^2X 、 R^2Y 、 Q^2Y 值分别为 0.768,0.999,0.988;木通与三叶木通组间 R^2X 、 R^2Y 、 Q^2Y 值分别为 0.784,0.999,0.978。结果见图 7,负离子模式下,木通、白木通和三叶木通都能很好地分开,相同样品组内高度聚合。



注: BMT. 白木通; MT. 木通; SYMT. 三叶木通。

图 4 含量前 20 的代谢物百分比堆积柱形图

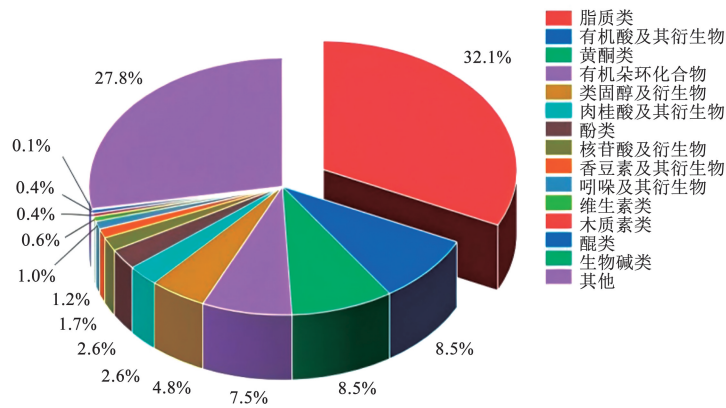
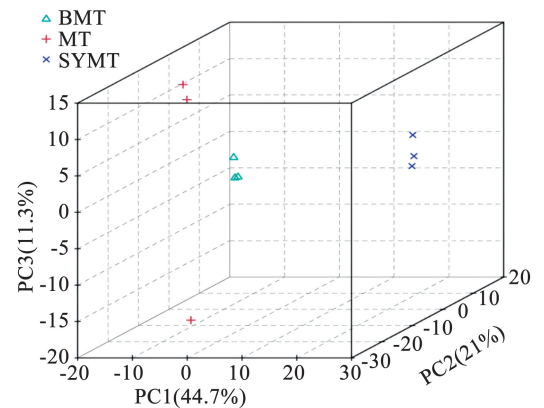
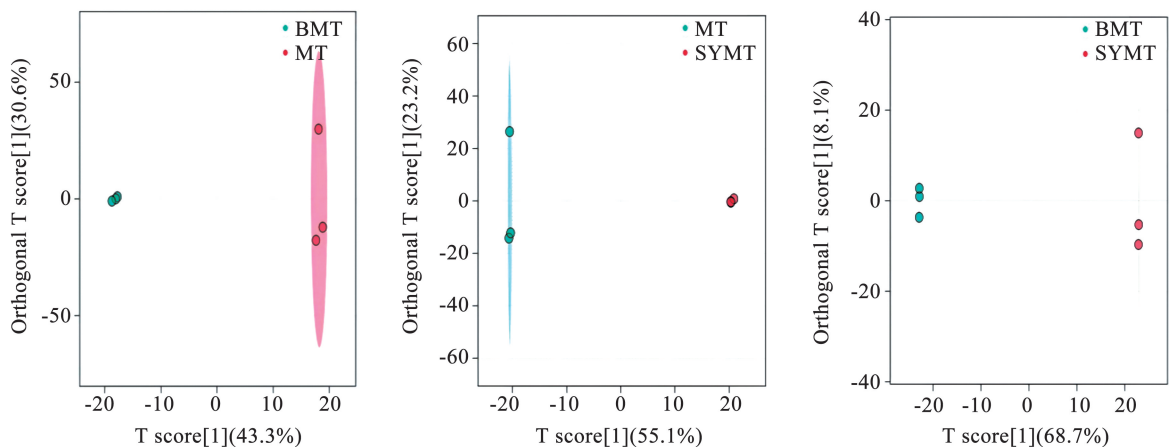


图 5 代谢物的分类图



注: BMT. 白木通; MT. 木通; SYMT. 三叶木通。

图 6 不同基原木通样品 PCA 结果



注: BMT. 白木通; MT. 木通; SYMT. 三叶木通。

图 7 不同基原木通 OPLS-DA 得分图

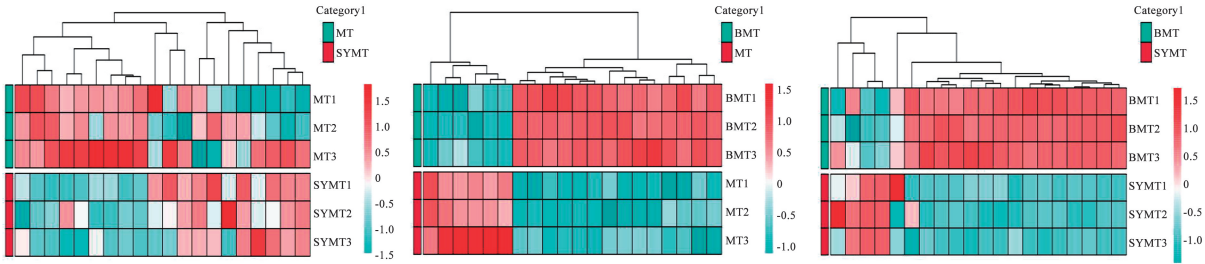
2.6 差异代谢物的分析

基于 OPLS - DA 分析结果,以 VIP 值 > 1 (可变重要度投影)和差异多重度 FC 值 (FOLD - CHANGE) ≥ 2.0 筛选出各组差异代谢物,BMT *vs* MT 差异代谢物较少,以糖代谢、皂苷类下调,萜类上调为主;MT *vs* SYMT 差异幅度较大,萜类化合物、脂类化合物下调,木脂素类显著上调;BMT*vs*SYMT 差异最显著,甾体类、生物碱类下调,多酚类、醌类化合物上调,3 组差异各有侧重,可用于筛选差异代谢物,结果如表 2。

表 2 各组中差异代谢物上调、下调化合物数

	BMT <i>vs</i> MT	BMT <i>vs</i> SYMT	MT <i>vs</i> SYMT
差异代谢物总数	64	251	186
上调化合物数	30	117	100
下调化合物数	34	134	86

同一基原木通(木通、白木通和三叶木通)各自聚集为一类,这表明样品在代谢特征上具有很高的重复性,同时不同基原木通间又存在显著的代谢差异,见图 8。



注: BMT. 白木通; MT. 木通; SYMT. 三叶木通。

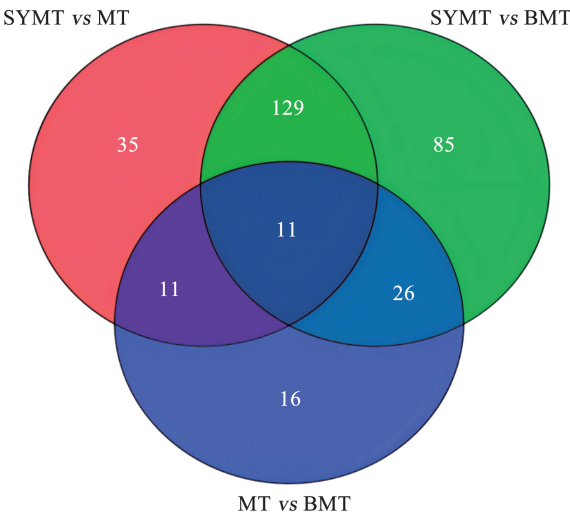
图 8 不同基原木通样品差异代谢物聚类热图

差异代谢物韦恩图分析结果,见图 9,MT *vs* BMT、MT *vs* SYMT、BMT *vs* SYMT 组间分别有 16、35 和 85 个特异差异代谢物。MT *vs* SYMT 与 BMT *vs* SYMT 共有差异代谢物最多,为 140 个,MT *vs* BMT 与 MT *vs* SYMT、SYMT *vs* BMT 与 MT *vs* BMT 共有差异代谢物分别为 22 个和 37 个,表明木通和白木通之间的代谢物

具有较高的相近性。3 组之间共有差异代谢物 11 个,见表 3,其中黄酮类(3 个,27. 27%) 和脂质类(3 个,27. 27%) 占最大比例,其次是有机酸及衍生物 1 个、类固醇及衍生物 1 个、吡啶及衍生物 1 个。从数据上分析,11 个差异代谢物与 691 个代谢物的百分比排列顺序近乎相同。

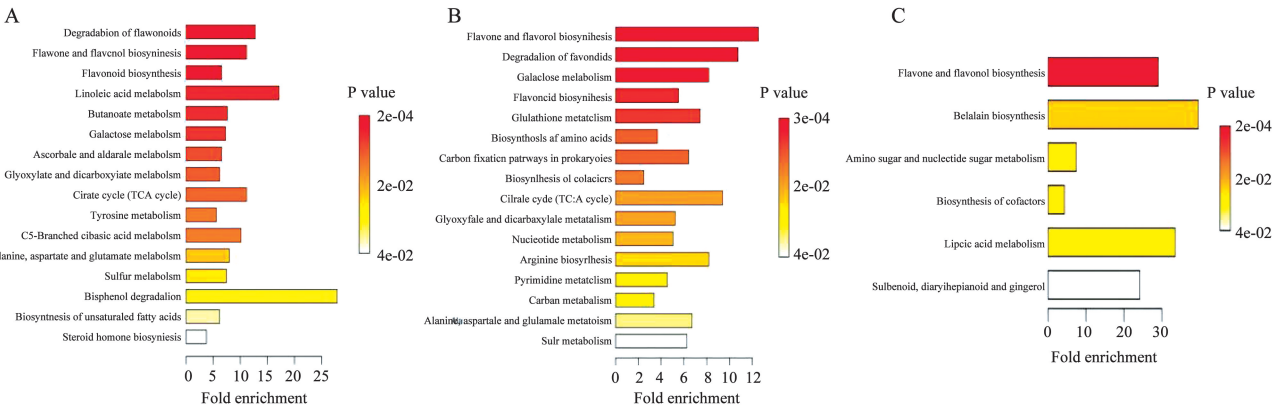
表 3 3 组间共有差异代谢物

化合物	m/z	参数			分类
		FC	log2(FC)	P 值	
苞片素	329. 10	0. 17	- 2. 57	0. 011	黄酮类
2 - heptyl - 4 - hydroxyquinoline n - oxide	517. 31	0. 06	- 3. 96	0. 006	喹啉及其衍生物
丙酸倍氯米松	519. 21	0. 31	- 1. 70	0. 005	类固醇及衍生物
苯丁酸氮芥	609. 14	0. 14	- 2. 86	0. 001	其他
人参皂苷 RO	955. 49	3. 10	1. 63	<0. 001	脂质类
常春藤皂苷 B	733. 45	42. 60	5. 41	0. 011	脂质类
异鼠李素 - 3 - O - 芸香糖苷	623. 16	3. 12	1. 64	<0. 001	黄酮类
苜蓿酸	663. 37	0. 10	- 3. 35	<0. 001	有机酸及衍生物
(6 - Hydroxy - 1 - [2 - (morpholin - 4 - yl) ethyl] - 1H - indol - 3 - yl) (naphthalen - 1 - yl) methanone	399. 16	0. 23	- 2. 12	0. 007	吡啶及其衍生物
竹节香附素 A	895. 50	83. 49	6. 38	0. 006	脂质类
芸香甙	609. 14	0. 15	- 2. 77	0. 002	黄酮类



注: BMT. 白木通; MT. 木通; SYMT. 三叶木通。

图 9 不同基原木通的差异代谢物韦恩图



注: BMT. 白木通; MT. 木通; SYMT. 三叶木通; A. MT *vs* BMT; B. SYMT *vs* BMT; C. MT *vs* SYMT。

图 10 不同基原木通的差异代谢物 KEGG 富集图

在 MT *vs* BMT 组中,黄酮类差异代谢物有 5 个,为异鼠李素-3-O-芸香糖苷、芦丁、水仙苷、鼠李黄素、银杏素,其中差异倍数最大的是异鼠李素-3-O-芸香糖苷,见表 4。在 SYMT *vs* BMT 组中,黄酮类差异代谢物有 24 个,其中差异倍数最大的是原花青素 B2,其次是黄颜木素、(+)-儿茶素,见表 5。在 MT *vs* SYMT 组中,黄酮类差异代谢物有 15 个,其中差异倍数最大的是芦丁,其次是原花青素 B2、黄颜木素,见表 6。因此,可考虑将芦丁作为区分木通与三叶木通的差异代谢物,原花青素 B2 作为区分三叶木通和白

2.7 不同基原木通差异代谢物通路的分析

基于 KEGG 功能注释体系,见图 10,每组标识显著性强的前 20 条通路,揭示不同基原木通代谢调控网络异质性。MT *vs* BMT 组中,差异代谢物主要富集在类黄酮的降解,黄酮和黄酮醇的生物合成、类黄酮的生物合成;SYMT *vs* BMT 组中,差异代谢物主要富集在黄酮和黄酮醇的生物合成、类黄酮的降解、半乳糖的代谢等代谢途径;MT *vs* SYMT 组中,差异代谢物主要富集在黄酮和黄酮醇的生物合成、甜菜碱生物合成、氨基酸和核苷酸糖代谢等代谢途径。不同基原木通差异代谢物通路存在一定的差异,3 组中共有的显著性代谢途径为黄酮和黄酮醇的生物合成,表明不同基原木通显著差异集中在黄酮类代谢物。

木通的差异代谢物;将异鼠李素-3-O-芸香糖苷作为区分木通与白木通的差异代谢物。

表 4 MT *vs* BMT 组黄酮类差异代谢物

差异代谢物	log ₂ (FC)	P 值	VIP
异鼠李素-3-O-芸香糖苷	3.52	0.001	1.50
芦丁	3.25	0.002	1.47
水仙苷	2.03	0.007	1.48
鼠李黄素	1.25	0.024	1.36
银杏素	1.04	0.038	1.48

表 5 BMT vs SYMT 组黄酮类差异代谢物

差异代谢物	log2(FC)	P 值	VIP
原花青素 B2	5.96	<0.001	1.19
黄颜色素	5.30	<0.001	1.23
(+) - 儿茶素	4.54	<0.001	1.23
原花青素 C1	4.18	<0.001	1.19
山奈酚 - 7 - 葡萄糖苷	3.92	<0.001	1.24
芦丁	-2.77	<0.001	1.21
花旗松素	2.67	0.001	1.21
(-) - 儿茶素	2.65	0.001	1.22
染料木黄酮	2.58	0.001	1.23
槲皮素 3 - 葡萄糖苷	-2.16	0.001	1.22
鼠李黄素	1.99	0.002	1.20
根皮苷	-1.79	0.003	1.04
紫杉叶素	1.72	0.003	1.16
异鼠李素 - 3 - O - 芸香糖苷	1.64	0.004	1.22
水仙苷	1.71	0.004	1.04
斯皮诺素 b	1.60	0.004	1.18
黄豆黄甙	-1.45	0.005	1.07
芹菜素 7 - 葡萄糖苷	1.30	0.008	1.12
3'- 羟基鱼藤酮	1.28	0.008	1.14
高车前草素	-1.14	0.015	1.21
夏佛托苷	-1.02	0.021	1.15
落新妇苷	-1.00	0.022	1.07
氯化花青苷	0.82	0.042	1.18
银杏素	0.80	0.044	1.01

表 6 MT vs SYMT 组黄酮类差异代谢物

差异代谢物	log2(FC)	P 值	VIP
芦丁	-6.02	<0.001	1.38
原花青素 B2	5.88	<0.001	1.39
黄颜色素	5.32	<0.001	1.37
(+) - 儿茶素	3.78	<0.001	1.35
原花青素 c1	3.57	0.001	1.38
山奈酚 - 7 - 葡萄糖苷	3.49	0.001	1.39
花旗松素	2.77	0.003	1.26
染料木黄酮	2.49	0.004	1.35
(-) - 儿茶素	2.41	0.005	1.35
紫杉叶素	2.41	0.005	1.37
槲皮素 3 - 葡萄糖苷	-2.12	0.008	1.27
高车前草素	-1.94	0.008	1.10
异鼠李素 - 3 - O - 芸香糖苷	-1.88	0.010	1.35
水仙苷	-1.44	0.024	1.38
斯皮诺素 b	1.05	0.049	1.07

3 讨论

代谢组学通过代谢通量动态追踪与生物合成途径逆向解析,实现了从传统性状鉴别到分子机制阐释的

方法学跨越,已在中药品种品质评价中广泛应用^[21]。本研究利用 UPLC - Q - TOF - MS 策略对 3 个不同基原木通样品进行成分分析,发现基原之间代谢物存在差异。目前,对木通的研究多集中在抗癌、抗水肿、抗菌消炎等方面,且在 3 个基原木通在抗肿瘤方面存在差异,白木通侧重在鼻咽癌和肝癌,三叶木通侧重在胃癌,木通(五叶木通)侧重在乳腺癌^[22],这与研究结果相吻合,基原间成分差异导致功效差异,为此,临床使用时要有区分。

此外,芦丁、原花青素 B2、异鼠李素 - 3 - O - 芸香糖苷作为区分 3 个基原木通的差异代谢物。药理研究表明,芦丁具有广泛的药理活性,其包括抗过敏、抗炎和血管活性、抗肿瘤、抗菌、抗病毒和抗原性^[23]。在原花青素中,原花青素 B2(Proanthocyanidins B2,PC-B2)是一种 B 型 PC 二聚体,具有很强的抗氧化、抗炎和神经保护等多种生物活性^[24]。异鼠李素 - 3 - O - β - D - 芸香糖苷也具有抗氧化、抗肿瘤和抗病毒等多种药理作用^[25]。不同基原的木通在化学成分上存在差异,其差异代谢物显著富集在类黄酮生物合成通路,推测该木通在抗氧化、抗肿瘤和抗血栓方面存在差异。后期将在此基础上对不同基原木通的药理活性进行研究,以期为木通基原区分、质量评价及资源的合理开发利用提供数据支持。

参考文献:

[1] 赵江怡,唐进程,陈欣欣,等. 基于拟靶向代谢组学的 3 种基原大黄的差异成分研究[J]. 中国中药杂志,2024,49(9):2393-2401.

[2] 李真. 不同基原淫羊藿化学成分差异及谱效关系研究[D]. 长春: 吉林大学,2023.

[3] 曾洁萍,丁红,阎博华,等. 雅连、味连治疗复发性口腔溃疡疗效差异性——分层区组、随机双盲、平行对照、多中心临床试验报告[J]. 中国实验方剂学杂志,2011,17(20):265-268.

[4] 赵云龙,冯蓓,周宜,等. 雅连和味连对内毒素致小鼠死亡率的影响[J]. 辽宁中医杂志,2011,38(7):1448-1449.

[5] 沈力,马羚,刘书显,等. 太白贝母与暗紫贝母镇咳祛痰药理作用比较研究[J]. 实用中医药杂志,2012,28(9):784-785.

[6] 袁茂华,陶静,高必兴,等. 不同基原、性状藏药佐模兴对热毒血瘀证模型大鼠的影响[J]. 中国现代应用药学,2024,41(5):599-605.

[7] 郑毅,金孝锋. 木通科植物资源开发利用研究进展[J]. 中国野生植物资源,2021,40(10):83-86,108.

[8] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典(一部)[M]. 北京:中国医药科技出版社,2020:65-66.

[9] MACIAG D,DOBROWOLSKA E,SHARAFAN M,et al. Akebia quinata and Akebia trifoliata - a review of phytochemical composition,ethnopharmacological approaches and biological studies[J]. J Ethnopharmacol,2021,280:114486.

[10] 李磊,刁锴,欧金梅,等. 五叶木通藤茎三萜皂苷类成分分布规律研究[J]. 安徽中医药大学学报,2017,36(5):77-80.

- [11] 柳岳超,李洪亮,曾小华,等. 三叶木通藤茎的化学成分和药理作用研究进展[J]. 上海中医药大学学报,2020,34(3):99–106.
- [12] 郭林新,马养民,乔珂,等. 三叶木通化学成分及其抗氧化活性[J]. 中成药,2017,39(2):338–342.
- [13] 李梓茵,李钰洁,付志博,等. 木通 UPLC 指纹图谱及多指标成分含量测定[J]. 中成药,2022,44(12):3909–3914.
- [14] ZHAO S Y, LIU Z L, SHU Y S, et al. Chemotaxonomic classification applied to the identification of two closely – related *Citrus* TCMs using UPLC – Q – TOF – MS – based metabolomics[J]. *Molecules*, 2017, 22(10):1721.
- [15] FAN G, TAO L H, YUE Q H, et al. Metabolic discrimination of rhizoma coptidis from different species using 1H NMR spectroscopy and principal component analysis[J]. *Planta Med*, 2012, 78(6):641–648.
- [16] 曾丽珊,尤健开,王艳鸽,等. 基于 UPLC – Q – TOF – MS 的凉粉草不同栽培品系代谢物分析[J]. 中药新药与临床药理, 2023, 34(11):1592–1599.
- [17] 杨西萌,李桂香,潘玉芳,等. 三叶木通种质资源形态学标记的遗传多样性分析[J]. 西南大学学报(自然科学版), 2022, 44(9):32–40.
- [18] 郑立红,李淑莉. 三种木通的鉴别研究[J]. 中国中医基础医学杂志, 2014, 20(10):1410–1411.
- [19] 张桐,王玥玥,王康宇,等. 基于化学模式识别法的不同品种木通药材指纹图谱研究[J]. 药物分析杂志, 2021, 41(9):1590–1597.
- [20] 李少辉,赵巍,刘松雁,等. SDE – GC – MS 结合 OPLS – DA 分析不同生态区谷子品种香气特征[J]. 中国农业科学, 2023, 56(13):2586–2596.
- [21] 赛牙热木·哈力甫,李创新,徐开伟,等. 基于非靶向代谢组学分析雪岭杉响应畸形金锈菌侵染的代谢物变化[J]. 中南林业科技大学学报, 2025, 45(8):132–143.
- [22] 曹琳娜,彭佩克,潘志强. 木通属植物提取物抗肿瘤作用的研究进展[J]. 中草药, 2022, 53(13):4187–4197.
- [23] NEGAHDARI R, BOHLOULI S, SHARIFI S, et al. Therapeutic benefits of rutin and its nanoformulations[J]. *Phytother Res*, 2021, 35(4):1719–1738.
- [24] MA L, LI C X, LIAN S, et al. Procyanidin B2 alleviates liver injury caused by cold stimulation through Sonic hedgehog signalling and autophagy[J]. *J Cell Mol Med*, 2021, 25(16):8015–8027.
- [25] 林文振,李坤平,曾玉冰,等. UPLC – ESI – Q – TOF – MS/MS 分析异鼠李素 – 3 – O – β – D – 芸香糖苷大鼠肠道菌群代谢产物的研究[J]. 中国实验方剂学杂志, 2012, 18(20):140–143.

Analysis of Differential Metabolites in Akebia Species from Different Origins Based on Untargeted Metabolomics

LI Jing¹, HU Tingting¹, LI Qiaoyue¹, LI Jinyang¹, XU Xiuquan^{1,2}, PANG Yufan¹

1. Bozhou University, Bozhou 236800, China; 2. Anhui Key Laboratory of Traditional Chinese

Medicine Raw Material Product Research and Development, Bozhou University, Bozhou 236800, China

Abstract Objective: Based on metabolomics methods, this study aims to explore the differential metabolites of different primitive Chinese medicinal herbs (such as Chinese medicinal herb, Chinese medicinal herb, and Chinese medicinal herb) and screen the main metabolites identified by primitive identification. Method: The chemical composition of different types of *Platycodon grandiflorus* was analyzed by ultra – high performance liquid chromatography quadrupole time – of – flight mass spectrometry (UPLC – Q – TOF – MS). Principal component analysis, cluster heatmap, orthogonal partial least squares discriminant analysis, and other methods were used to compare the differences in metabolites among the three types of *Platycodon grandiflorus*. Differential metabolites were identified using a database. Result: A total of 691 compounds were identified in negative ion mode, with lipids, organic acids and their derivatives, and flavonoids being the main metabolites. Differential metabolites were significantly enriched in the flavonoid biosynthesis pathway. There are a total of 11 differential metabolites among the three groups, with flavonoids (3, 27.27%) and lipids (3, 27.27%) accounting for the largest proportion. Combined with the difference factor, rutin, anthocyanin B2, and isorhamnetin – 3 – O – rutinose were identified as the three differential metabolites based on their respective origins. Conclusion: UPLC – Q – TOF – MS metabolomics technology can elucidate the differences in chemical composition of different basal components of *Eucommia ulmoides*, providing new ideas for differential analysis of different basal components of *Eucommia ulmoides*, and also providing references for the quality control, evaluation, and clinical use of medicinal materials of *Eucommia ulmoides*.

Key words Akebia; Multiple botanical origins; Metabolomics; Differential metabolites; Flavonoids