参芪调肾方的化学成分分析Δ

尹丹丹[1,2*]，杨勤军[3,4]，李泽庚[3,4#]（1.安徽医科大学第一附属医院药剂科，合肥 230022；2.国家中医药管理局中药化学三级实验室，合肥 230022；3.安徽中医药大学第一附属医院呼吸科，合肥 230031；4.安徽省中医药科学院中医呼吸病防治研究所，合肥 230031）

中图分类号 R917 **文献标志码** A **文章编号** 1001-0408（2023）06-0666-05
DOI 10.6039/j.issn.1001-0408.2023.06.05

摘 要 目的 分析参芪调肾方（SQTS）的化学成分。**方法** 基于超高效液相色谱-四极杆/静电场轨道阱高分辨质谱技术，以ACQUITY UPLC BEH C_{18}为色谱柱，0.1%甲酸溶液-0.1%甲酸乙腈溶液为流动相（梯度洗脱），流速为0.4 mL/min，柱温为40 ℃，进样量为5 μL；采用电喷雾电离源进行正、负离子扫描，扫描范围为*m/z* 100～1 500。结合TCMSP、PubChem等数据库，建立SQTS活性成分数据库并结合相关文献进行成分鉴定。**结果与结论** 从SQTS中共鉴定出131个化学成分，涉及萜类23个、黄酮类22个、苯丙素类21个、生物碱类12个、酚类11个、氨基酸衍生物9个、脂肪酰类4个、有机酸3个等，包括芦丁、川陈皮素、辛弗林、肉桂酸、人参皂苷Rg_1等成分；主要成分的裂解过程涉及糖苷键断裂、脱水等。

关键词 参芪调肾方；化学成分；超高效液相色谱-四极杆/静电场轨道阱高分辨质谱；结构鉴定

Analysis of chemical components of Shenqi tiaoshen formula

YIN Dandan[1,2], YANG Qinjun[3,4], LI Zegeng[3,4] (1. Dept. of Pharmacy, the First Affiliated Hospital of Anhui Medical University, Hefei 230022, China; 2. Grade 3 Pharmaceutical Chemistry Laboratory, State Administration of Traditional Chinese Medicine, Hefei 230022, China; 3. Dept. of Respiratory, the First Affiliated Hospital of Anhui University of Chinese Medicine, Hefei 230031, China; 4. Institute of Traditional Chinese Medicine Respiratory Disease Prevention and Control, Anhui Academy of Traditional Chinese Medicine, Hefei 230031, China)

ABSTRACT OBJECTIVE To analyze chemical components of Shenqi tiaoshen formula (SQTS). **METHODS** UPLC-QE-MS method was adopted. The determination was performed on ACQUITY UPLC BEH C_{18} column with mobile phase consisted of 0.1% formic acid solution-0.1% formic acid acetonitrile solution (gradient elution) at the flow rate of 0.4 mL/min. The column temperature was set at 40 ℃, and the sample size was 5 μL. The electrospray ionization source was used to scan positive and negative ions, and the scanning range was *m/z* 100-1 500. Combined with TCMSP, PubChem and other databases, SQTS active component database was established and the components were identified in combination with relevant literature. **RESULTS & CONCLUSIONS** Totally 131 chemical components were identified from SQTS, including 23 terpenoids, 22 flavonoids, 21 phenylpropanoids, 12 alkaloids, 11 phenols, 9 amino acid derivatives, 4 fatty acyls, 3 organic acids and others, such as rutin, citrinin, synephrine, cinnamic acid and ginsenoside Rg_1, etc. The cracking process of the main components involved the breaking of glycosidic bonds, dehydration, etc.

KEYWORDS Shenqi tiaoshen formula; chemical components; UPLC-QE-MS; structure identification

慢性阻塞性肺疾病（chronic obstructive pulmonary disease，COPD）属中医“肺胀”“哮喘综合征”范畴。“气虚”状态贯穿COPD的发病过程，而肺肾气虚是COPD稳定期最常见的中医辨证[1]。参芪调肾方（Shenqi tiaoshen formula，SQTS）是由国医大师韩明向教授根据新安医学“固本培元”理论，在安徽中医药大学第一附属医院院内制剂六味补气胶囊（人参、炙黄芪、益智仁、玉竹、陈皮、肉桂）的基础上添加山茱萸、桃仁、白芥子演化而来。方中，人参和炙黄芪为君药，可滋补肺、脾、肾之气；山茱萸、益智仁、肉桂为臣药，可温肺肾以平喘；白芥子可温肺化痰、益气通络，陈皮可调气健脾，桃仁可活血化瘀、止咳平喘，玉竹质润可防诸药温燥太过，四药共为佐使；全方共奏补肺益肾、益气活血化瘀之效。临床实践证实，SQTS治疗肺肾气虚型COPD的效果显著[2]，目前已准备开发为新药。然而，SQTS发挥药效的物质基础仍

Δ **基金项目** 国家自然科学基金资助项目（No.U20A20398）；安徽医科大学药学创新基金科研项目（No.YXCX202105）

＊ **第一作者** 中药师，硕士。研究方向：中药复方活性成分及药理作用。E-mail：2822133973@qq.com

\# **通信作者** 主任医师，教授，硕士。研究方向：中医药防治呼吸系统疾病。E-mail：li6609@126.com

不明确，故本研究拟采用超高效液相色谱-四极杆/静电场轨道阱高分辨质谱技术分别在正、负离子模式下对SQTS进行系统分析，同时比对相关文献及自建数据库，初步鉴定SQTS的化学成分，为进一步揭示该方药效物质基础提供科学依据。

1 材料

1.1 主要仪器

本研究所用主要仪器包括Vanquish型超高液相色谱仪、Orbitrap Exploris 120型高分辨质谱仪、Heraeus Fresco17型离心机（美国Thermo Fisher Scientific公司），明澈D24 UV型纯水仪（美国Merck Millipore公司），YM-080S型超声仪（深圳市方奥微电子有限公司）等。

1.2 主要药品与试剂

人参饮片（批号2012310122）购自亳州市沪谯药业有限公司；肉桂（批号2201131）、益智仁（批号2201112）、炙黄芪[豆科植物蒙古黄芪*Astragalus membranaceus*（Fisch.）Bge. var. mongholicus（Bge.）Hsiao干燥根的加工炮制品，批号2204172]、陈皮（批号2112223）、山茱萸（批号2109073）、白芥子（十字花科植物白芥*Sinapis alba* L.的干燥成熟种子，批号2201193）、玉竹（批号2112272）、桃仁[蔷薇科植物桃*Prunus persica*（L.）Batsch的干燥成熟种子，批号2202251]饮片均购自安徽普仁中药饮片有限公司；上述饮片经安徽中医药大学第一附属医院药剂科主任中药师韩燕全鉴定，均为真品。甲醇、乙腈（液质联用级）均购自德国CNW Technologies公司；甲酸（液质联用级）购自美国Sigma公司；水为超纯水。

2 方法与结果

2.1 检测条件

2.1.1 色谱条件 以ACQUITY UPLC BEH C_{18}（2.1 mm×100 mm，1.7 μm）为色谱柱，0.1%甲酸溶液（A）-0.1%甲酸乙腈溶液（B）为流动相进行梯度洗脱（0～3.5 min，5%B→15%B；3.5～6 min，15%B→30%B；6～6.5 min，30%B；6.5～12.5 min，30%B→70%B；12.5～18 min，70%B→100%B；18～25 min，100%B；25～30 min，100%B→5%B）；流速为0.4 mL/min；柱温为40 ℃；进样量为5 μL。

2.1.2 质谱条件 采用电喷雾电离源，在正、负离子模式下进行检测。雾化气压力为55 psi；辅助气压力为55 psi；气帘气压力为35 psi；离子传输管温度为350 ℃；气化器温度为350 ℃；喷雾电压为5.5 kV（正离子模式）或－4 kV（负离子模式）；轰击能量为40 eV；碰撞能量为20 eV；扫描模式为全扫描，扫描范围为*m/z* 100～1 500。

2.2 SQTS化学成分数据库的建立

利用TCMSP、PubChem、SciFinder、ChemicalBook、中国知网和BioTree中药数据库等检索SQTS各单味药材的化学成分信息，整理各成分的化学文摘社（Chemical Abstracts Service，CAS）号、简化分子线性输入系统（simplified molecular input line entry system，SMILES）号、国际化合物标识（international chemical identifier key，InChIKey）号、分子式、相对分子量、名称、分子结构式（mol格式）等，建立SQTS化学成分数据库。

2.3 供试品溶液的制备

称取人参10 g、炙黄芪20 g、益智仁10 g、玉竹6 g、陈皮6 g、肉桂3 g、山茱萸12 g、桃仁10 g、白芥子6 g，混合，加10倍量水，回流提取2 h后滤过；药渣加8倍量水，回流提取1 h后滤过；合并两次滤液，于60 ℃下减压浓缩至每1 mL含生药1.494 g。取上述浓缩液，真空冷冻干燥36 h，得蓬松干燥物。取该干燥物，研磨成细粉，精密称取1.0 g，置具塞锥形瓶中，精密加入50%甲醇25 mL，密塞，称定质量，超声（功率240 W，频率45 kHz）处理15 min，冷却至室温后，用50%甲醇补足减失的质量，摇匀滤过后，取续滤液过0.22 μm微孔滤膜即得。

2.4 成分归属与鉴定分析

取“2.3”项下供试品溶液适量，按“2.1”项下检测条件进样测定，得SQTS的总离子流图（图1）。将正、负离子模式下检测到的质谱信息导入Xcalibur软件进行数据处理，收集各色谱峰的相对分子量、碎片离子信息、保留时间等，通过比对参考文献[3－12]和“2.2”项下自建数据库，以实际测定的相对分子量与理论值之间的偏差小于10 ppm为标准，对各色谱峰对应成分进行指认。结果显示，共鉴定出131个成分，包括23个萜类成分、22个黄酮类成分、21个苯丙素类成分、12个生物碱类成分、11个酚类成分、9个氨基酸衍生物、4个脂肪酰类成分、3个有机酸类成分、2个脂肪酸类成分、2个羧酸及其衍生物、1个糖类及其衍生物、1个酯类成分和20个其他成分，具体见表1。

2.4.1 黄酮类成分 黄酮类化合物是一类含有2-苯基色原酮结构的化合物，具有止咳、祛痰、平喘及抗菌的活性[13－14]。本研究从SQTS供试品溶液中共鉴定出黄酮类成分22个，包括芦丁、川陈皮素、山柰酚、刺芒柄花素、金丝桃苷等。以化合物11为例，其在正离子模式下的准分子离子为*m/z* 611.161 4[M+H]$^+$，推断其分子式为$C_{27}H_{30}O_{16}$；该准分子离子分别脱去1分子葡萄糖和1分子鼠李糖后产生碎片离子*m/z* 465.098 2、301.047 4。结合相关文献[3]，确定该化合物为芦丁，其可能的质谱裂解过程见图2。

多甲氧基黄酮类成分的母核上通常连有多个甲氧基或羟基，因此在正离子模式下其特征碎片离子峰显示为[M+H－$(CH_3)_n$]$^+$和[M+H－$(CH_3)_n$－H_2O]$^+$[4]。以化合物33为例，其在正离子模式下的准分子离子为*m/z* 403.137 6[M+H]$^+$，推测其分子式为$C_{21}H_{22}O_8$；该准分子离子脱去若干分子OCH_3、1分子CH_3和1分子H_2O后得到碎片离子*m/z* 388.114 3、372.095 2、354.784 4、341.107 4。结合相关文献[5]，确定该化合物为川陈皮素，其可能的质谱裂解过程见图3。

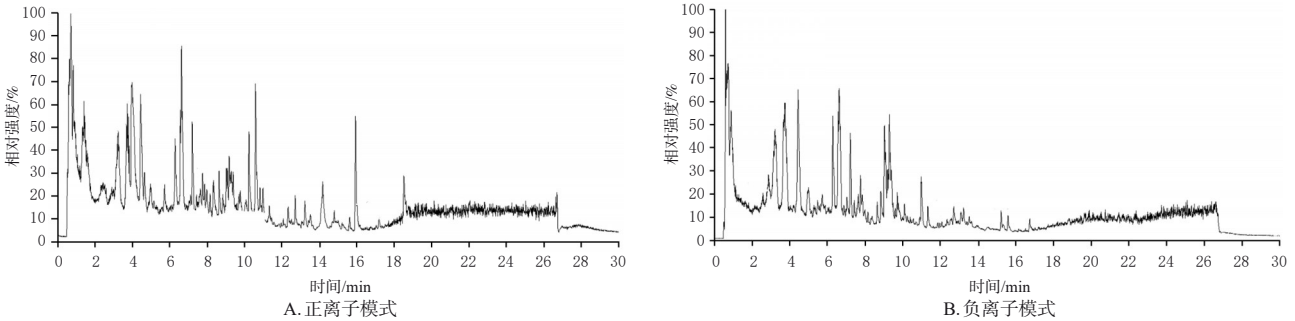


图1　SQTS的总离子流图

表1　SQTS主要活性成分的鉴定结果

序号	化合物	分子式	相对分子量(*m/z*)	保留时间/min	偏差/ppm	离子模式	二级碎片离子(*m/z*)
1	精氨酸	$C_6H_{14}N_4O_2$	175.118 6	0.55	2.303 2	$[M+H]^+$	130.098 4,116.071 2,70.065 4,60.055 2
2	辛弗林	$C_9H_{13}NO_2$	168.101 8	0.71	1.383 6	$[M+H]^+$	150.091 2,135.068 4,119.049 3,91.054 6
3	脱水莫诺苷元	$C_{11}H_{14}O_5$	227.090 8	1.78	0.641 6	$[M+H]^+$	195.066 4,167.071 1,141.056 2,139.042 3
4	原儿茶酸	$C_7H_6O_4$	153.019 3	1.78	2.323 2	$[M-H]^-$	110.033 8,109.035 6,108.022 1,81.035 4
5	没食子酸	$C_7H_6O_5$	169.028 4	2.41	2.822 6	$[M-H]^-$	125.034 7,107.643 2
6	咖啡酸	$C_9H_8O_4$	179.035 3	3.52	1.679 1	$[M-H]^-$	135.045 5,89.025 3,71.015 1,59.014 2
7	马钱苷	$C_{17}H_{26}O_{10}$	435.151 7	4.41	1.570 6	$[M+HCOO]^-$	227.091 2,228.097 8,127.046 7,101.024 2
8	芥子基己糖苷	$C_{17}H_{22}O_{10}$	387.201 3	4.49	0.802 0	$[M+H]^+$	207.136 2,189.127 4,149.096 1,123.082 3,95.085 4
9	苦杏仁苷	$C_{20}H_{27}NO_{11}$	502.152 8	4.81	2.523 9	$[M+HCOO]^-$	323.038 2,263.057 4,221.066 2,179.013 1,161.046 2,119.024 2
10	芥子碱	$C_{16}H_{24}NO_5$	310.164 4	4.85	1.249 4	$[M]$	252.096 0,251.092 4,207.065 7,175.042 1
11	芦丁	$C_{27}H_{30}O_{16}$	611.161 4	5.65	3.904 2	$[M+H]^+$	465.098 2,301.047 4,164.069 1,85.028 4,71.052 1
12	金丝桃苷	$C_{21}H_{20}O_{12}$	465.103 1	5.73	0.192 1	$[M+H]^+$	303.047 5,229.659 2,97.028 1,85.028 4,69.033 2
13	芥子酸	$C_{11}H_{12}O_5$	223.061 5	5.74	2.181 5	$[M-H]^-$	208.038 3,193.015 3,164.049 5,149.025 5
14	山柰酚	$C_{15}H_{10}O_6$	287.054 8	6.21	0.775 2	$[M+H]^+$	165.519 2,153.019 3,109.029 4
15	异鼠李素	$C_{16}H_{12}O_7$	317.065 4	6.23	1.221 8	$[M+H]^+$	302.043 1,285.041 5,318.073 1,274.045 4
16	柚皮苷	$C_{27}H_{32}O_{14}$	581.562 3	6.28	0.392 3	$[M+H]^+$	461.524 5,405.738 1,273.078 7,71.052 1,85.028 1,153.019 3,129.055 2
17	水杨酸	$C_7H_6O_3$	137.025 8	6.47	1.926 7	$[M-H]^-$	93.034 7,123.042 4,94.038 2,138.029 4,41.999 1
18	香豆素	$C_9H_6O_2$	147.043 8	6.65	1.428 2	$[M+H]^+$	103.054 2,148.048 5,104.058 4,91.054 6
19	新橙皮苷	$C_{28}H_{34}O_{15}$	609.183 8	7.09	1.267 7	$[M-H]^-$	325.071 8,301.072 3,286.051 2,164.012 4
20	人参皂苷Rg_1	$C_{42}H_{72}O_{14}$	845.489 3	7.21	0.792 3	$[M+HCOO]^-$	799.504 7,799.477 4,637.441 2,475.372 7
21	肉桂酸	$C_9H_8O_2$	149.059 5	7.94	3.401 1	$[M+H]^+$	150.092 8,132.053 7,131.049 2,103.054 1
22	人参皂苷F_3	$C_{41}H_{70}O_{13}$	815.480 9	8.02	1.071 0	$[M+HCOO]^-$	815.480 9,769.484 7,769.512 3,637.446 5
23	肉桂醛	C_9H_8O	133.065 6	8.32	4.067 2	$[M+H]^+$	133.065 6,115.054 2,105.069 1,55.018 3
24	柚皮素	$C_{15}H_{12}O_5$	273.077 1	8.35	0.177 2	$[M+H]^+$	153.018 3,147.043 2,123.044 2,119.049 4
25	人参皂苷Rf	$C_{42}H_{72}O_{14}$	799.480 9	8.83	1.376 3	$[M-H]^-$	799.480 9,475.375 3,113.025 7,101.024 5
26	人参皂苷Rb_1	$C_{54}H_{92}O_{23}$	1 109.606 5	9.01	3.199 0	$[M+H]^+$	407.364 5,325.111 2,163.064 5,145.049 4,127.039 2
27	人参皂苷Rg_6	$C_{42}H_{70}O_{12}$	767.490 8	9.20	2.816 1	$[M+H]^+$	395.112 6,85.028 5,81.069 7
28	人参皂苷Rc	$C_{53}H_{90}O_{22}$	1 077.578 3	9.25	1.609 8	$[M-H]^-$	1 077.578 3,1 077.484 7,191.057 4,131.035 3
29	人参皂苷Rb_3	$C_{53}H_{90}O_{22}$	1 123.587 6	9.25	2.178 5	$[M+HCOO]^-$	1 077.587 6,191.057 5,131.035 4
30	人参皂苷Ro	$C_{48}H_{76}O_{19}$	955.487 8	9.28	1.278 4	$[M-H]^-$	793.431 5,438.654 2
31	刺芒柄花素	$C_{16}H_{12}O_4$	267.066 3	9.38	2.237 4	$[M-H]^-$	267.066 3,251.044 6,223.042 5,132.046 2
32	人参皂苷F_1	$C_{36}H_{62}O_9$	683.436 6	9.45	0.562 0	$[M+HCOO]^-$	683.436 6,637.439 4,475.385 3,101.024 4
33	川陈皮素	$C_{21}H_{22}O_8$	403.137 6	9.51	1.103 5	$[M+H]^+$	388.114 3,372.095 2,354.784 4,341.107 4,327.085 4
34	橘皮素	$C_{20}H_{20}O_7$	395.109 8	9.67	0.523 0	$[M+Na]^+$	395.109 8,380.089 2,365.061 2,81.069 5
35	人参皂苷Rg_3	$C_{42}H_{72}O_{13}$	784.482 6	10.48	6.888 3	$[M]$	622.068 4,460.086 2
36	人参皂苷Rg_2	$C_{42}H_{72}O_{13}$	829.495 0	10.88	1.154 1	$[M+HCOO]^-$	829.472 5,783.486 2,783.513 3,621.430 8
37	人参环氧炔醇	$C_{17}H_{24}O_2$	261.184 6	11.18	1.483 9	$[M+H]^+$	105.033 4,81.060 9,71.086 2,77.042 5
38	人参皂苷Rg_5	$C_{42}H_{70}O_{12}$	767.491 1	11.38	2.418 4	$[M+H]^+$	605.582 5,443.373 2
39	人参皂苷Rh_2	$C_{36}H_{62}O_8$	667.444 2	13.03	1.742 2	$[M+HCOO]^-$	445.488 7,311.117 1,204.092 3,78.955 8
40	齐墩果酸	$C_{30}H_{48}O_3$	455.354 2	15.31	2.666 9	$[M-H]^-$	411.534 6,101.934 6,50.596 2

2.4.2　酚类成分　酚类化合物的结构特点为芳环上直接连接了羟基，故该类化合物通常具有抗氧化的潜力[6]。本研究从SQTS供试品溶液中共鉴定出11个酚类化合物，包括辛弗林、没食子酸、水杨酸、苦杏仁苷等。

以化合物2为例，其在正离子模式下的准分子离子为*m/z* 168.101 8$[M+H]^+$，推测分子式为$C_9H_{13}NO_2$；该准分子离子丢失1分子H_2O后产生碎片离子*m/z* 150.091 2。结合相关文献[7]，确定该化合物为辛弗林，其可能的质谱裂解过程见图4。

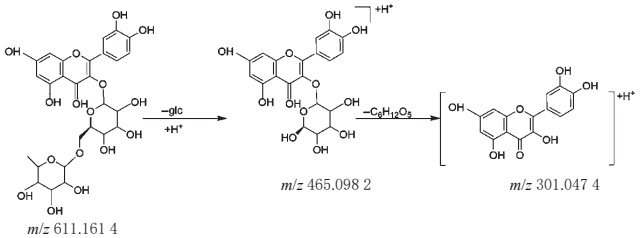


图2　芦丁的质谱裂解过程

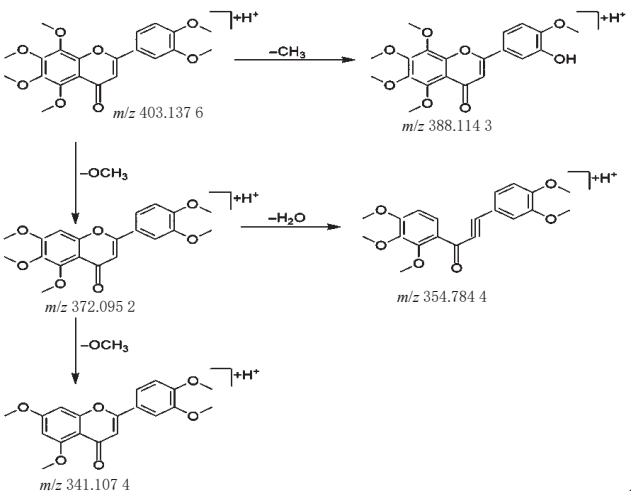


图3　川陈皮素的质谱裂解过程

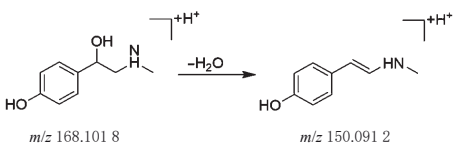


图4　辛弗林的质谱裂解过程

2.4.3　苯丙素类成分　本研究从SQTS供试品溶液中共鉴定出21个苯丙素类成分，以苯丙酸类和香豆素类结构为主，包括咖啡酸乙酯、芥子基己糖苷、芥子酸、肉桂酸、香豆素等。苯丙素类化合物多与糖或多元醇结合以苷或酯的形式存在于植物中，其母核常含有1个或数个C6-C3单元，其生物合成前提的关键物质是对羟基桂皮酸。

以化合物21为例，其在正离子模式下的准分子离子为*m/z* 149.059 5[M+H]$^+$，推测分子式为$C_9H_8O_2$；该准分子离子脱去1分子H_2O后产生碎片离子*m/z* 131.049 2，继续脱去1分子CO后产生碎片离子*m/z* 103.054 1。结合相关文献[8]，确定该化合物为肉桂酸，其可能的质谱裂解过程见图5。

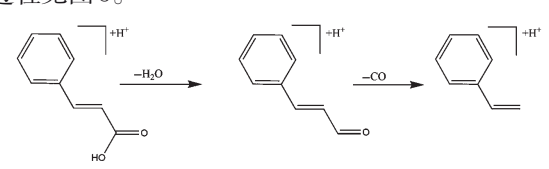


图5　肉桂酸的质谱裂解过程

2.4.4　萜类成分　本研究从SQTS供试品溶液中鉴定出23个萜类成分，其中人参皂苷13个。人参所含的人参皂苷大部分为原人参三醇型和原人参二醇型，含少量的齐墩果酸型，通常在负离子模式下有较强的响应，可形成[M－H]$^-$或[M+HCOO]$^-$的准分子离子；同时，母离子糖苷键断裂可产生一系列脱糖碎片和苷元离子[9]。

以化合物20为例，其在负离子模式下的准分子离子为*m/z* 845.489 3[M+HCOO]$^-$，推测分子式为$C_{42}H_{72}O_{14}$；该准分子离子碎裂产生碎片离子*m/z* 799.477 4，随后相继丢失六碳糖产生碎片离子*m/z* 637.441 2、475.372 7。结合相关文献[10]，确定该化合物为人参皂苷Rg_1。

以化合物40为例，其在负离子模式下的准分子离子为*m/z* 455.354 2[M－H]$^-$，推测分子式为$C_{30}H_{48}O_3$；该准分子离子发生裂解而丢失1分子COOH，生成碎片离子*m/z* 411.534 6。结合相关文献[11]，确定该化合物为齐墩果酸。

2.4.5　氨基酸衍生物　氨基酸是含氨基和羧基官能团的化合物，易发生α-裂解掉落氨基或羧基基团，在正离子模式下的准分子离子峰[M+H]$^+$的相对丰度较低。本研究从SQTS供试品溶液中共鉴定出9个氨基酸衍生物。

以化合物1为例，其在正离子模式下的准分子离子为*m/z* 175.118 6[M+H]$^+$，推测分子式为$C_6H_{14}N_4O_2$；该准分子离子失去CH_5N_3生成碎片离子*m/z* 116.071 2。结合相关文献[12]，确定该化合物为精氨酸。

3　讨论

基于新安医学的“固本培元”理论，SQTS组方严谨、临床效果显著。临床疗效的正常发挥与中药复方所含的化学成分息息相关。为此，本研究对SQTS的化学成分进行了定性检测，旨在为揭示SQTS治疗稳定型COPD的药理作用及药效物质基础提供依据。

人参的主要有效成分为皂苷和多糖类成分，其中人参皂苷具有改善心功能、抑制心肌细胞凋亡、改善心肌缺血、保护血管内皮细胞等药理作用，在抗肿瘤、促进骨生成、延缓衰老等方面具有积极作用[15]。炙黄芪中的黄芪多糖能调节固有免疫系统和特异性免疫系统，可减轻COPD模型大鼠的炎症反应并使其平均血小板体积升高，对血压、血液黏稠度等具有调节作用[16]。山茱萸活性成分马钱苷可使核因子κB失活，从而减轻神经炎症反应[17]。益智仁中的圆柚酮、7-表-香科酮等倍半萜类成分是其特征性成分，对排尿功能均有调节作用[18]。研究表明，肉桂水提物能明显延长实验动物的致喘潜伏期，改善肺组织病理改变，减少炎症因子产生，缓解支气管平滑肌痉挛，具有一定的平喘作用[19]。玉竹多糖是玉竹的主要活性兼药效成分之一，具有降血糖、免疫调节、抗肿瘤、抗氧化、抗疲劳、延缓皮肤衰老等药理作用[20]。桃仁中的苦杏仁苷具有抗炎、抗肿瘤活性，可通过激活胞外调节蛋白激酶1/2通路而发挥神经保护作用[21]。陈皮挥发油具有祛痰平喘和扩张支气管、扩张血管的作用，并能通过增加冠脉流量而使血压降低[22]。炒白芥子醇

提取物具有镇咳作用，白芥子水提取物则具有祛痰作用[23]。可见，SQTS所含化学成分众多，可通过多成分、多靶点、多途径来改善COPD稳定期患者气虚、血瘀、痰结的症状。

本研究建立了一种快速鉴定SQTS化学成分的方法，并从该方中初步鉴定出131个化合物，包括23个萜类成分、22个黄酮类成分、21个苯丙素类成分、12个生物碱类成分、11个酚类成分、9个氨基酸衍生物、4个脂肪酰类成分、3个有机酸类成分、2个脂肪酸类成分、2个羧酸及其衍生物、1个糖类及其衍生物、1个酯类成分等，并对其中40个活性成分的裂解途径（本文只分析了主要活性成分的典型裂解途径，其他裂解途径略）进行了分析，裂解过程涉及糖苷键断裂、脱水等。然而，本研究仍存在如下不足之处：对肉桂、白芥子、陈皮的挥发油类成分检出较少，这可能与本研究供试品溶液采用回流提取法、造成挥发油损失有关；由于多糖的分子量较大等原因，对玉竹中的多糖类成分检出有限。对此本课题组后期拟改进提取方式、采用不同的检测方法对SQTS的化学成分进一步表征，以期为该方的临床应用提供物质研究基础。

参考文献

[1] 赵正阳，王至婉. 肺气虚为慢性阻塞性肺疾病稳定期病机根本及其与肺功能之间的关系[J]. 中华中医药学刊，2022，40(11)：161-164.

[2] 童佳兵，王心恒，杨程，等. 基于新安医学固本补气法综合干预COPD稳定期肺肾气虚证的临床观察研究[J]. 时珍国医国药，2018，29(6)：1372-1374.

[3] 黄华靖，江洁怡，肖观林，等. UPLC-Q-TOF-MS法分析猫爪草化学成分[J]. 中成药，2022，44(7)：2405-2409.

[4] 刘梦诗，杨得坡，杨婉玲，等. 基于UHPLC-Q-Exactive Orbitrap-MS技术分析四花青皮的成分[J]. 中国医院药学杂志，2021，41(23)：2395-2400，2427.

[5] 李荣荣，赵迪，李蒙蒙，等. 基于UHPLC-Q Exactive-Orbitrap高分辨质谱研究浙贝母和陈皮主要成分在大鼠体内的代谢物[J]. 药物分析杂志，2020，40(8)：1413-1424.

[6] 裴河欢，张美凤，覃洋琛，等. 多酚类化合物药理作用研究进展[J]. 中国药业，2022，31(23)：124-127.

[7] 王慧，黄友荪，梁燕青，等. 基于UPLC-Q-TOF-MS代谢组学技术的枳壳适宜采收期研究[J]. 中国中药杂志，2022，47(12)：3175-3184.

[8] 程贤，毕良武，曾维星，等. 基于UHPLC-QTOF MS的肉桂枝叶蒸油剩余物化学成分研究[J]. 林产化学与工业，2020，40(6)：50-60.

[9] ZUO T，ZHANG C，LI W，et al. Offline two-dimensional liquid chromatography coupled with ion mobility-quadrupole time-of-flight mass spectrometry enabling four-dimensional separation and characterization of the multicomponents from white ginseng and red ginseng[J]. J Pharm Anal，2020，10(6)：597-609.

[10] 王静，姚长良，张建青，等. 基于UPLC-Q-TOF-MS的人参配方颗粒化学成分及指纹图谱研究[J]. 中草药，2022，53(11)：3286-3294.

[11] 支雅婧，甄亚钦，郗仲玟，等. 基于UPLC-ESI-Q-TOF-MS/MS技术快速鉴定彝族药双参的化学成分[J]. 中国药学杂志，2022，57(19)：1611-1620.

[12] 史月姣，王瑛，朱惠照，等. LC-MS快速分析紫苏水煎液中的主要化学成分[J]. 药物分析杂志，2015，35(8)：1417-1423.

[13] 邬勋平，陶禹至，刘琳，等. 槲皮素基于EGFR信号通路减轻大鼠气道黏液高分泌[J]. 中国免疫学杂志，2022，38(8)：940-945.

[14] 刘彩虹，杨红辉，卢俊娟. 山柰酚减轻慢性阻塞性肺疾病模型小鼠的炎症反应[J]. 中国病理生理杂志，2021，37(9)：1655-1661.

[15] 高健，吕邵娃. 人参化学成分及药理作用研究进展[J]. 中医药导报，2021，27(1)：127-130，137.

[16] 张淑娟，张育贵，牛江涛，等. 黄芪的研究进展及其质量标志物预测分析[J]. 中华中医药学刊，2022，40(2)：151-155.

[17] KIM H，YOUN K，AHN M R，et al. Neuroprotective effect of loganin against $A\beta_{25-35}$-induced injury via the NF-κB-dependent signaling pathway in PC12 cells[J]. Food Funct，2015，6(4)：1108-1116.

[18] 龚晓猛，李梦琪，吴珊珊，等. 盐炙益智仁石油醚部位缩尿成分分离与药效学分析[J]. 中国实验方剂学杂志，2017，23(6)：13-18.

[19] 侯仙明，徐树楠，杨洪霞，等. 肉桂对豚鼠哮喘模型血清中ET、NO和IL-5含量的影响[J]. 四川中医，2009，27(8)：22-24.

[20] 孟庆龙，崔文玉，刘雅婧，等. 玉竹的化学成分及药理作用研究进展[J]. 上海中医药杂志，2020，54(9)：93-98.

[21] 张妍妍，韦建华，卢澄生，等. 桃仁化学成分、药理作用及质量标志物的预测分析[J]. 中华中医药学刊，2022，40(1)：234-241.

[22] 王春燕. 浅谈陈皮的药理作用及临床应用[J]. 中国中医药现代远程教育，2013，11(3)：120，131.

[23] 张学梅，刘凡亮，梁文波，等. 白芥子提取物的镇咳、祛痰及平喘作用研究[J]. 中草药，2003(7)：62-64.

（收稿日期：2022-11-14　修回日期：2023-02-19）

（编辑：邹丽娟）