

# 橡胶草化学成分鉴定及质谱裂解规律研究

曾钰龙<sup>1,2,3</sup>, 董益阳<sup>1,3</sup>, 马强<sup>2</sup>

(1. 北京化工大学生命科学与技术学院, 北京 100029; 2. 中国质量检验检测科学研究院, 北京 100123;

3. 北京化工大学橡胶植物研究中心, 北京 100029)

**摘要:** 本研究采用超高效液相色谱-四极杆/静电场轨道阱高分辨质谱(UHPLC-Q/Orbitrap HRMS)法鉴定蒲公英属中草药橡胶草的化学成分。采用超声/微波辅助萃取技术提取橡胶草样品成分, 通过 ACQUITY UHPLC BEH C18 色谱柱(150 mm×2.1 mm, 1.7 μm)进行液相色谱分离。采用电喷雾电离源正、负离子模式电离, 四极杆/静电场轨道阱高分辨质谱仪检测数据, 基于全扫描-数据依赖型二级质谱扫描(Full MS/dd-MS<sup>2</sup>)模式采集样品数据。原始数据采用 Xcalibur 4.1 软件进行色谱峰对齐和提取, 将获得的前体离子和碎片离子的精确质量数信息与赛默飞中药成分高分辨质谱数据库(OTCML)、自建数据库和 GNPS(Global Natural Products Social Molecular Networking)在线网站的数据库信息进行匹配, 共鉴定出黄酮类、生物碱类、萜类、酚类、氨基酸类、苯丙素类、有机酸类、核苷酸类及其他类共 94 种化合物, 并对部分典型化合物的质谱裂解规律进行解析, 为阐明橡胶草非橡胶化学成分的药理作用提供科学依据。

**关键词:** 蒲公英橡胶草; 超声/微波辅助萃取(UMAE); 超高效液相色谱-四极杆/静电场轨道阱高分辨质谱(UHPLC-Q/Orbitrap HRMS); 裂解规律

中图分类号: O657.63

文献标志码: A

文章编号: 1004-2997(2026)01-0067-13

DOI: 10.7538/zpxb.2025.0032

CSTR: 32365.14.zpxb.2025.0032

## Identification of Chemical Components in *Taraxacum kok-saghyz* Rodin and Investigation of Mass Spectrometric Fragmentation Pathways

ZENG Yu-long<sup>1,2,3</sup>, DONG Yi-yang<sup>1,3</sup>, MA Qiang<sup>2</sup>

(1. College of Life Science and Technology, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China;

2. Chinese Academy of Quality and Inspection & Testing, Beijing 100123, China;

3. Rubber Plant Research Center, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

**Abstract:** *Taraxacum kok-saghyz* Rodin, a perennial herbaceous plant of the genus *Taraxacum* (Asteraceae), has widely distributed in Europe, the Americas, and northwestern and northeastern China. However, the specific bioactive compounds responsible for its pharmacological effects remain uncharacterized, necessitating experimental validation to establish a theoretical foundation. This study systematically characterized the chemical constituents of *Taraxacum kok-saghyz* Rodin, a medicinal plant of the dandelion genus, using ultra-high-performance liquid chromatography coupled with quadrupole/Orbitrap high-resolution mass spectrometry (UHPLC-Q/Orbitrap HRMS). The sample pretreatment process involved optimizing solvent selection. One gram of dried rubber dandelion root or leaf powder was mixed with methanol and subjected to ultrasonic/microwave-assisted extraction

(microwave power of 450 W, ultrasonic power of 550 W, temperature of 50 °C, and extraction time of 30 min), followed by chromatographic separation on an ACQUITY UHPLC BEH C18 column (150 mm×2.1 mm, 1.7 μm) at 40 °C, with an injection volume of 3 μL per run. The mobile phase consisted of water containing 0.1% formic acid and 2.5 mmol/L ammonium formate (A) and acetonitrile (B) at a flow rate of 0.3 mL/min. Electrospray ionization (ESI) was employed for ionization. Full scan/data-dependent tandem mass spectrometry (MS/MS) scan (Full MS/dd-MS<sup>2</sup>) acquisition mode ensured comprehensive coverage of precursor and fragment ions, with a scan range of  $m/z$  80-1 200. Full scan resolution was set at 60 000, while dd-MS<sup>2</sup> scan resolution reached 15 000. The raw data were processed using Xcalibur 4.1 software for chromatographic peak alignment and extraction. Accurate mass information for precursor and fragment ions was meticulously compared with three databases of the Orbitrap Traditional Chinese Medicine Library (OTCML), a self-curated database, and the Global Natural Products Social Molecular Networking online platform. A total of 94 compounds were identified, encompassing 4 flavonoids, 5 alkaloids, 11 terpenoids, 8 phenolics, 6 amino acids, 13 phenylpropanoids, 10 organic acids, 4 nucleotides, and 33 other types of compounds. To ensure the accuracy of compound identification, reference standards (chlorogenic acid, caffeic acid, *p*-coumaric acid, 7-hydroxycoumarin, and ferulic acid) were subjected to mass spectrometric characterization, effectively eliminating false-positive interferences. This study revealed that amino acids and phenylpropanoids exhibit higher mass spectrometric responses, whereas alkaloids show weaker responses. By analyzing the fragmentation pathways of representative compounds, the structural characteristics were elucidated, providing a scientific basis for deciphering the pharmacodynamic material foundation of non-latex components in *Taraxacum kok-saghyz* Rodin. This study also offers data support for exploring the high-value utilization of non-rubber components in *Taraxacum kok-saghyz* Rodin. *Taraxacum kok-saghyz* Rodin exhibits a complex matrix composition and a diverse array of natural constituents. Future research prospects should integrate nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy with artificial intelligence (AI)-driven pattern recognition methodologies to enhance data accuracy and improve the comprehensiveness of phytochemical characterization.

**Key words:** *Taraxacum kok-saghyz* Rodin; ultrasonic/microwave-assisted extraction (UMAE); ultra-high-performance liquid chromatography-quadrupole/Orbitrap high-resolution mass spectrometry (UHPLC-Q/Orbitrap HRMS); fragmentation pathways

橡胶草 (*Taraxacum kok-saghyz* Rodin) 系菊科蒲公英属多年生草本植物, 广泛分布于欧洲、美洲及中国西北和东北等地<sup>[1]</sup>。作为新型产胶植物, 其形态特征与普通蒲公英近似, 根部橡胶含量可达干重的 20%, 具备工业化开发潜力。针对橡胶草天然橡胶提取后剩余生物质的资源化利用问题, 近年来围绕脱胶后橡胶草在生物能源开发及医药领域创新应用的相关研究逐渐兴起。蒲公英属植物的根、茎、叶富含菊糖<sup>[2]</sup>、菊苣酸和咖啡酸等物质, 其中菊糖可作为发酵底物用于生物能源生产, 咖啡酸等化合物则具有抗氧化、抗炎等药理活性, 彰显出巨大的经济价值<sup>[3]</sup>。然

而, 橡胶草发挥药理作用的物质基础尚不明确, 系统分析其活性成分, 对于推动橡胶草的高值化综合利用具有重要的科学意义与应用价值。

传统的中草药化学成分提取技术(如热浸提法、索氏提取法)普遍存在提取效率低、易导致热敏性成分降解等问题。超声波可加速样品中物质的释放、扩散与溶解, 显著提升萃取效率<sup>[4]</sup>; 微波能改变植物细胞渗透性, 促进目标成分溶出, 并可通过条件优化避免局部温度过高造成成分损失<sup>[5]</sup>。超声/微波辅助萃取法整合了超声波的空化碰撞作用与微波的高效穿透作用, 将振动能与微波能同步作用于样品, 以提高提取效率、

缩短提取时间<sup>[6]</sup>。

中草药化学成分具有组成复杂、活性物质含量低等特点,传统分析方法难以实现高效分离与精准鉴定。液相色谱-质谱(LC-MS)技术集分离、检测于一体,是中草药化学分析与定量的重要手段<sup>[7]</sup>。近年来发展的超高效液相色谱-四极杆/静电场轨道阱高分辨质谱(UHPLC-Q/Orbitrap MS)技术兼具超高效液相色谱的高通量分离能力与高分辨质谱的精准鉴定能力,已成为中药复杂成分分析的关键工具<sup>[8-9]</sup>。

全球天然产物社会分子网络(GNPS)平台整合了 NIST、Wiley 等标准谱库以及各大仪器公司(如赛默飞、安捷伦和沃特世)的专属数据库;涵盖药物成分、挥发油等特定类别谱图库,同时关联 PubChem、ChemSpider 等公共化学数据库和自动质谱图卷积系统(AMDIS)。该平台支持用户检索动态更新的分子网络数据库,或上传自建鉴定数据供其他用户使用。由此建立的分子网络可快速鉴定待测样品的化合物组成,通过结构类似物预测实现新物质的靶向发现,显著降低工作量<sup>[10]</sup>。

本研究采用超声/微波辅助萃取法对橡胶草的活性成分进行高效提取,继而使用 UHPLC-Q/Orbitrap HRMS 技术完成其化学成分分析。通过整合保留时间、特征碎片离子、质荷比等色谱和质谱关键数据,与自建中药成分数据库、OTCML 标准化合物数据库和 GNPS 在线平台进行多维度匹配分析,系统鉴定橡胶草的化学成分。基于所得碎片离子信息,阐明不同种类成分的裂解规律,旨在为橡胶草化学成分的深入研究提供理论支撑。

## 1 实验部分

### 1.1 仪器与装置

UltiMate 3000 超高效液相色谱仪、Q Exactive 四极杆/静电场轨道阱高分辨质谱仪:美国 Thermo Fisher Scientific 公司产品,配有 TraceFinder4.1、Xcalibur4.1 数据处理软件;UWave-2000 多功能超声/微波合成萃取仪:上海新仪微波化学科技有限公司产品;SHZ-D 循环水式多用真空泵:河南省予华仪器有限公司产品;DLSB-5/20C 低温冷却液循环泵:郑州长城科工贸有限公司产品;KQ-500B 超声波清洗机:昆山舒美超声仪器有限

公司产品;AB204-S 分析天平(感量 0.001 g):瑞士 Mettler Toledo 公司产品;0.22  $\mu\text{m}$  有机相尼龙针式滤器:上海安谱实验科技股份有限公司产品;Milli-Q IQ 7005 超纯水净化系统:美国 Merck Millipore 公司产品。

### 1.2 样品与试剂

橡胶草:选自东北辽源橡胶草种植基地,均为同一批种植的新鲜整株橡胶草;甲醇、乙腈(色谱纯):上海安谱实验科技股份有限公司产品;甲酸(质谱纯):美国 Thermo Fisher Scientific 公司产品;甲酸铵(纯度 $\geq 98.0\%$ ):国药集团化学试剂有限公司产品;绿原酸(批号 A22GB158496):上海源叶生物科技有限公司产品;对香豆酸(批号 20050603)、咖啡酸(批号 20032003)、阿魏酸(批号 200720)、7-羟基香豆素(批号 20061504):北京中科质检生物有限公司产品,所有对照品纯度均大于 98%;超纯水:由 Milli-Q IQ 7005 超纯水净化系统制备。

### 1.3 实验条件

**1.3.1 色谱条件** ACQUITY UHPLC BEH C18 色谱柱(150 mm $\times$ 2.1 mm, 1.7  $\mu\text{m}$ );流动相:A相为 0.1%甲酸-2.5 mmol/L 甲酸铵水溶液,B相为乙腈;流速 0.3 mL/min;进样量 3  $\mu\text{L}$ ;柱温 40  $^{\circ}\text{C}$ ;梯度洗脱程序:0~5 min(5%B),5~10 min(5%~50%B),10~18 min(50%B),18~22 min(50%~100%B),22~27 min(100%B),27~27.1 min(100%~5%B),27.1~30 min(5%B)。

**1.3.2 质谱条件** 电喷雾离子源正、负离子模式扫描,喷雾电压分别为 3 500、-2 500 V,鞘气压强 20.70 kPa,辅助气压强 5.17 kPa,吹扫气压强 0.52 kPa,辅助气温度 350  $^{\circ}\text{C}$ ,毛细管温度 325  $^{\circ}\text{C}$ ,透镜电压 70 V;数据采集模式为 Full MS/dd-MS<sup>2</sup>,全扫描质量范围  $m/z$  80~1 200,全扫描模式分辨率 60 000;二级扫描分辨率 15 000;使用高能碰撞诱导解离(HCD),碰撞能量为 20、40、60 eV。

### 1.4 样品预处理方法

将新鲜橡胶草植株的根部与叶片分开储存,于 70  $^{\circ}\text{C}$  烘干 24 h,粉碎后过 40 目筛网。精确称量 1 g 橡胶草根或叶片粉末,置于三口烧瓶中,加入 40 mL 甲醇,混合均匀后放入超声/微波合成萃取仪,组装仪器,设置超声功率 550 W,微波功率 450 W,在 50  $^{\circ}\text{C}$  下萃取 30 min。收集萃取液,过 0.22  $\mu\text{m}$  有机滤膜,于 1  $^{\circ}\text{C}$  冰箱保存。

## 1.5 数据处理

1)首先采用 Xcalibur 4.1 软件对采集的数据进行处理,提取化合物的色谱参数及一、二级质谱信息。2)采用 TraceFinder4.1 软件分析数据,结合自建数据库和 OTCML 中药成分高分辨质谱数据库,对色谱数据,一、二级质谱数据进行匹配分析。3)利用 ProteoWizard 软件中的 MSConvert 工具,将 UHPLC-Q/Orbitrap HRMS 系统获得的橡胶草根及叶片原始数据转换为 mzXML 格式;在 GNPS 平台建立分析方法;设置前体离子和碎片离子的质量误差限为 0.02 u,采

用余弦相似度(cosine score)计算相似度,余弦分数阈值设定为 0.6,节点筛选的最小匹配碎片离子数为 6,峰强度过滤(topK)设置为 10,其余参数采用默认设置<sup>[11]</sup>;通过平台内多个在线数据库对色谱峰及一、二级质谱碎片数据进行比对,完成化学成分鉴定,具体流程示于图 1。4)结合 3 次平行实验结果,经数据库比对初步筛选橡胶草中的活性成分,并通过 PubChem、Web of Science 及 PubMed 等数据库检索化学式,化合物名称,类别,质荷比及一、二级质谱碎片信息,最终整理汇总形成表格。



图 1 质谱数据分析流程图

Fig. 1 Flow chart of mass spectrometric data analysis

## 2 结果与讨论

### 2.1 萃取技术优化

将橡胶草的根和叶干燥粉碎后,采用超声/微波辅助萃取技术进行成分提取。精确称取 1 g 样品与 40 mL 溶剂于三口烧瓶中,设置超声功率 550 W,微波功率 450 W,控制萃取温度 50℃ 以避免热敏性成分分解。分别选用甲醇、乙腈、二氯甲烷作为萃取溶剂,考察不同溶剂的萃取效果。结果表明,以甲醇作为萃取溶剂时,色谱峰响应更强、检出的活性成分种类更多,因此选择甲醇作为萃取溶剂。

### 2.2 橡胶草化学成分鉴定

本研究通过多种数据库联合分析,在橡胶草中共鉴定出 94 种化合物,包括 4 种黄酮类、5 种生物碱类、11 种萜类、8 种酚类、6 种氨基酸类、10 种有机酸类、13 种苯丙素类、4 种核苷酸类及 33 种其他类别化合物。其中,通过自建数据

库和 OTCML 中药成分高分辨质谱数据库比对,鉴定出 54 种化合物,部分代表性化合物列于表 1;通过 GNPS 平台数据库额外鉴定出 40 种化合物,代表性化合物列于附表 1(请登录《质谱学报》网站 <https://zpxb.xml-journal.net/> 下载)。

此外,依据《中国药典》对蒲公英属植物的药用评价标准,重点关注苯丙素类成分咖啡酸及菊苣酸。为确保鉴定结果的准确性,采用对照品验证法对绿原酸、咖啡酸、对香豆酸、7-羟基香豆素及阿魏酸进行质谱特征比对验证,有效排除假阳性干扰。

**2.2.1 黄酮类化合物** 黄酮类化合物具有抗炎、抗菌、抗肿瘤、自由基清除及免疫调节等多种生理与药理活性,其质谱裂解特征主要表现为脱去环上取代基(羟基和甲氧基)、发生逆狄尔斯-阿德尔反应(retro Diels-Alder reaction, RDA)裂解,以及丢失甲基、水分子、二氧化碳和糖基等碎片

表1 基于自建库及 OTCML 中药数据库鉴定出的橡胶草化学成分  
 Table 1 Chemical components of *Taraxacum kok-saghyz* Rodin identified from self-curated database and OTCML traditional Chinese medicine databases

序号 No.	保留时间 $t_R$ /min	归属 Identity	分子式 Formula	前体离子 Precursor ion		质量精度 Mass accuracy/ $\times 10^{-6}$	碎片离子 Fragment ion ( $m/z$ )	化合物 Compound	类别 Category	部位 Part
				理论值 Theoretical mass ( $m/z$ )	实测值 Experimental mass ( $m/z$ )					
1	1.02	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub>	341.10893	341.10849	-1.29	179.05611, 89.02442	蔗糖	多糖类	根、叶
2	1.12	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>	191.05611	191.05608	-0.16	127.04007, 155.03498	奎尼酸	有机酸类	根、叶
3	1.16	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	116.07061	116.07051	-0.86	70.06513, 88.07569	L-脯氨酸	氨基酸类	叶
4	1.21	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	127.03897	127.03899	0.16	81.03350, 109.02840	5-羟甲基糠醛	有机酸类	根
5	1.26	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O <sub>7</sub>	191.01973	191.01971	-0.10	111.00877, 87.00877	柠檬酸	有机酸类	根、叶
6	1.33	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	115.00368	115.00363	-0.43	71.01385, 87.00877	富马酸	有机酸类	根、叶
7	1.37	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	112.05054	112.05054	0.04	95.02399, 69.04474	胞嘧啶	核苷酸类	叶
8	1.42	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> O <sub>9</sub>	311.04086	311.04092	0.21	149.00916, 179.03498	反式咖啡酸	苯丙素类	叶
9	1.48	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	243.06226	243.06236	0.41	152.03532, 200.06226	尿苷	核苷酸类	根、叶
10	1.56	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	152.05669	152.05672	0.20	110.03489, 135.03014	鸟嘌呤	核苷酸类	根、叶
11	1.59	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>	144.10191	144.10193	0.14	102.05496, 84.08078	水苏碱	生物碱类	根
12	1.73	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>	132.10191	132.10194	0.23	69.06988, 86.09643	L-亮氨酸	氨基酸类	根、叶
13	1.78	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	123.05529	123.05539	0.81	96.04439, 80.04948	烟酰胺	生物碱类	根、叶
14	1.81	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	268.10403	268.10394	-0.34	136.06177, 85.00841	腺苷	核苷酸类	根、叶
15	1.87	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	166.08626	166.08621	-0.30	120.08078, 149.05971	L-苯丙氨酸	氨基酸类	根、叶
16	3.02	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	205.09715	205.09708	-0.34	118.06513, 146.06004	L-色氨酸	氨基酸类	根
17	3.26	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	118.08626	118.08627	0.08	102.05496, 72.08078	L-缬氨酸	氨基酸类	根、叶
18	3.93	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	137.02442	137.02448	0.44	93.03459, 65.03967	水杨酸	酚类	根、叶
19	4.12	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	137.02442	137.02446	0.29	93.03459, 65.03967	对羟基苯甲酸	酚类	叶
20	4.63	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	137.02442	137.02446	0.29	81.03459, 109.02950	原儿茶醛	酚类	叶
21	7.62	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	179.03498	179.03496	-0.11	107.05024, 135.04515	咖啡酸	苯丙素类	根、叶
22	8.43	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>16</sub> H <sub>18</sub> O <sub>9</sub>	353.08781	353.08765	-0.45	179.03498, 191.05610	1-咖啡酰奎宁酸	酚类	根、叶
23	8.43	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>16</sub> H <sub>18</sub> O <sub>9</sub>	353.08781	353.08765	-0.45	161.02442, 191.05611	绿原酸	苯丙素类	根、叶

续表

序号 No.	保留时间 $t_R$ /min	前体离子Precursor ion				质量精度 Mass accuracy/ $\times 10^{-6}$	碎片离子 Fragment ion ( $m/z$ )	化合物 Compound	类别 Category	部位 Part
		归属 Identity	分子式 Formula	理论值 Theoretical mass ( $m/z$ )	实测值 Experimental mass ( $m/z$ )					
24	9.07	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	163.03897	163.03899	0.01	119.04914, 107.04914	7-羟基香豆素	香豆素类	叶
25	9.08	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>22</sub> H <sub>18</sub> O <sub>12</sub>	473.07255	473.07285	0.63	179.03498, 219.02990	菊苣酸	苯丙素类	根、叶
26	9.23	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	163.04007	163.04018	0.65	93.03459, 119.05024	对香豆酸	苯丙素类	叶
27	9.52	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	193.04954	193.04958	0.21	137.05971, 103.05423	5,7-二羟基-4-甲基香豆素	香豆素类	叶
28	9.52	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	193.04954	193.04958	0.19	178.02606, 133.02841	萹苈亭	香豆素类	叶
29	9.75	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>21</sub> H <sub>20</sub> O <sub>11</sub>	447.09328	447.09366	0.85	284.03264, 227.03498	紫云英苷	黄酮类	叶
30	9.75	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>21</sub> H <sub>20</sub> O <sub>11</sub>	447.09328	447.09366	0.85	151.00368, 285.04034	木犀草苷	黄酮类	叶
31	9.85	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>25</sub> H <sub>24</sub> O <sub>12</sub>	515.11950	515.11975	0.96	191.05611, 353.08781	异绿原酸	酚类	叶
32	9.85	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>25</sub> H <sub>24</sub> O <sub>12</sub>	515.11950	515.11975	0.49	173.04555, 135.04515	异绿原酸B	有机酸类	根、叶
33	9.85	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>25</sub> H <sub>24</sub> O <sub>12</sub>	515.11950	515.11975	0.49	353.08781, 135.04515	异绿原酸C	有机酸类	根、叶
34	9.85	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>25</sub> H <sub>24</sub> O <sub>12</sub>	515.11950	515.11975	0.49	191.05611, 353.08781	1,3-二咖啡酰奎宁酸	苯丙素类	根
35	10.19	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> O <sub>4</sub>	187.09758	187.09770	0.65	125.09719, 97.06589	杜鹃花酸	有机酸类	叶
36	10.20	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> O <sub>4</sub>	187.09758	187.09764	0.32	125.09719, 97.06589	壬二酸	有机酸类	根
37	10.35	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	193.05063	193.05067	0.21	134.03733, 137.02442	异阿魏酸	苯丙素类	根、叶
38	10.41	[M+COOH] <sup>-</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	193.05063	193.05067	0.21	106.04241, 134.03733	肉桂酸	有机酸类	根、叶
39	10.41	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	193.05063	193.05067	0.21	134.03733, 178.02716	阿魏酸	苯丙素类	根、叶
40	10.58	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> O <sub>4</sub>	263.12888	263.12881	-0.27	163.07645, 219.13905	脱落酸	萜类	根
41	10.66	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	231.13796	231.13792	-0.17	185.13248, 157.10118	白木内酯I	萜类	根
42	10.66	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	231.13796	231.13792	-0.17	185.13248, 143.08553	去氢木香烯内酯	萜类	根
43	10.91	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> O <sub>6</sub>	285.04046	285.04053	0.24	151.00368, 229.05063	山奈酚	黄酮类	叶
44	10.91	[M-H] <sup>-</sup>	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> O <sub>6</sub>	285.04046	285.04053	0.24	151.00368, 133.02950	木犀草素	黄酮类	叶
45	11.36	[M] <sup>+</sup>	C <sub>20</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>4</sub>	336.12303	336.12311	0.24	320.09170, 292.09680	表小檗碱	生物碱类	根、叶
46	11.36	[M] <sup>+</sup>	C <sub>20</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>4</sub>	336.12303	336.12311	0.24	278.08120, 292.09680	黄连素	生物碱类	根、叶
47	11.90	[M+H] <sup>+</sup>	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> O	133.06479	133.06485	0.45	95.04914, 105.06988	桂皮醛	苯丙素类	叶

离子<sup>[12]</sup>。以木犀草素为例,在负离子模式下,其准分子离子 $[M-H]^-$ 为  $m/z$  285.040 46, 色谱保留时间为 10.91 min, 推测其分子式为  $C_{15}H_{10}O_6$ 。二级碎片离子为 $[M-H-CO]^-$ ( $m/z$  257.051 85)、 $[M-H-$

$C_3O_2]^-$ ( $m/z$  217.063 01), 以及 RDA 裂解产生的 $[M-H-C_8H_6O_2]^-$ ( $m/z$  151.003 68)和 $[M-H-C_7H_4O_4]^-$ ( $m/z$  133.029 50), 符合黄酮类物质的碎裂规律<sup>[13]</sup>, 其质谱裂解规律示于图 2。

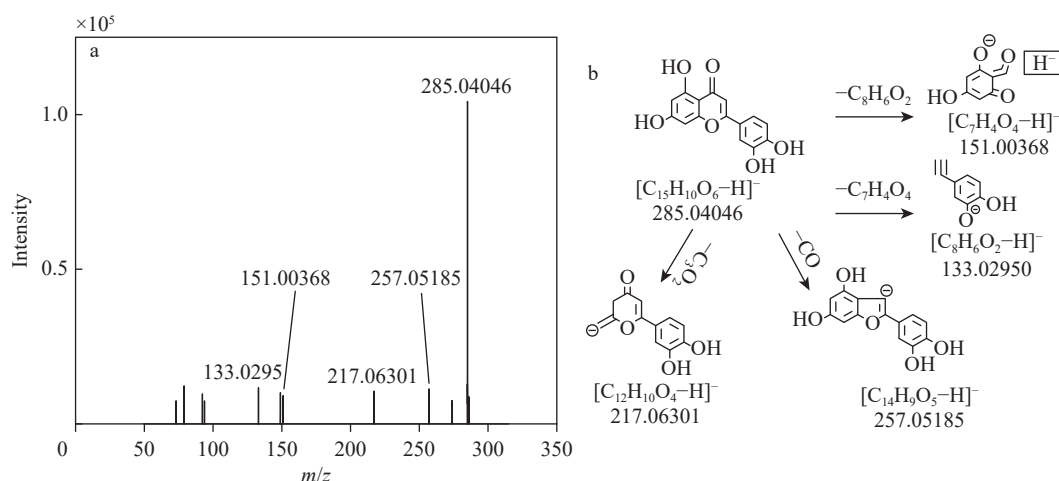


图 2 负离子模式下,木犀草素的二级质谱图(a)及裂解途径(b)

Fig. 2 MS/MS spectrum (a) and proposed fragmentation pathways (b) of luteolin under negative ion mode

**2.2.2 生物碱类化合物** 生物碱是中药材的重要有效成分,属于一类含碱性官能团的有机分子,具有复杂的氮杂环结构。根据化学结构的不同,可分为异喹啉类、喹啉类、哌啶类、吡咯类和其他类。本研究在橡胶草中共鉴定出 5 种生物碱类化合物。该类化合物中含孤对电子的氮原子易加合  $H^+$  形成正离子,因此通常在正离子模式下进行检测<sup>[14]</sup>。其质谱裂解规律较复杂,有机胺类化合物的主要裂解方式为  $\beta$ -裂解,酰胺类化合物的主要裂解方式为麦氏重排,其他氮杂环类化合物则主要以  $H_2O$ 、 $CH_3OH$ 、 $CH_2O$ 、 $CO$ 、 $CHNH_2$ 、 $NO$  和  $NH_3$  等中性分子丢失为主<sup>[15]</sup>。以黄连素为例,正离子模式下,其准分子离子 $[M+H]^+$ 为  $m/z$  336.123 03, 色谱保留时间为 11.36 min, 推测其分子式为  $C_{20}H_{18}NO_4$ 。二级碎片离子为 $[M+H-CH_3-CO]^+$ ( $m/z$  292.096 82)、 $[M+H-C_2H_6-CO]^+$ ( $m/z$  278.081 17)、 $[M+H-CH_3]^+$ ( $m/z$  321.099 61)和 $[M+H-C_2H_6]^+$ ( $m/z$  306.076 10), 符合生物碱类物质的碎裂规律<sup>[16]</sup>, 其质谱裂解规律示于图 3。

**2.2.3 萜类化合物** 萜类化合物的碳骨架由多个异戊二烯单元聚合衍生而成,结构种类繁多,具有广谱抗菌、抗炎和抗肿瘤等生物活性。依据碳骨架的环化模式、侧链位点及取代基类型,

该类化合物可分为单萜、倍半萜、二萜和三萜等不同类型<sup>[17]</sup>。本研究在橡胶草中共鉴定出 11 种萜类化合物。其中,环烯醚萜类化合物的典型结构是环戊并吡喃,在质谱分析过程中易发生化学键断裂,丢失  $CH_3OH$ 、 $H_2O$ 、 $CO_2$ 、 $CO$  和糖分子等中性分子。若碳环含有双键,则易发生 RDA 裂解,失去角甲基。以圆柚酮为例,正离子模式下其准分子离子 $[M+H]^+$ 为  $m/z$  219.174 34, 色谱保留时间为 26.43 min, 推测其分子式为  $C_{15}H_{22}O$ 。二级碎片离子为 $[M+H-C_4H_8]^+$ ( $m/z$  163.111 74)、 $[M+H-H_2O-C_9H_{12}]^+$ ( $m/z$  81.069 88)、 $[M+H-C_5H_{10}]^+$ ( $m/z$  149.096 01)和 $[M+H-H_2O]^+$ ( $m/z$  201.164 67), 其质谱裂解规律示于图 4。

**2.2.4 酚类化合物** 本研究在橡胶草中共检测出 8 种酚类物质。以 6-姜烯酚为例,正离子模式下其准分子离子峰为 $[M+H]^+$ ( $m/z$  277.179 82), 色谱保留时间为 15.01 min, 推测其分子式为  $C_{17}H_{24}O_3$ 。二级碎片离子为 $[M+H-C_9H_{16}O]^+$ ( $m/z$  137.059 71)和 $[M+H-C_9H_{16}O-CH_3]^+$ ( $m/z$  122.036 23), 其质谱裂解规律示于图 5。

**2.2.5 氨基酸类化合物** 氨基酸常以准分子离子脱去  $NH_3$  或  $COOH$  的方式发生裂解。本研究在橡胶草中共检测出 6 种氨基酸类物质。以

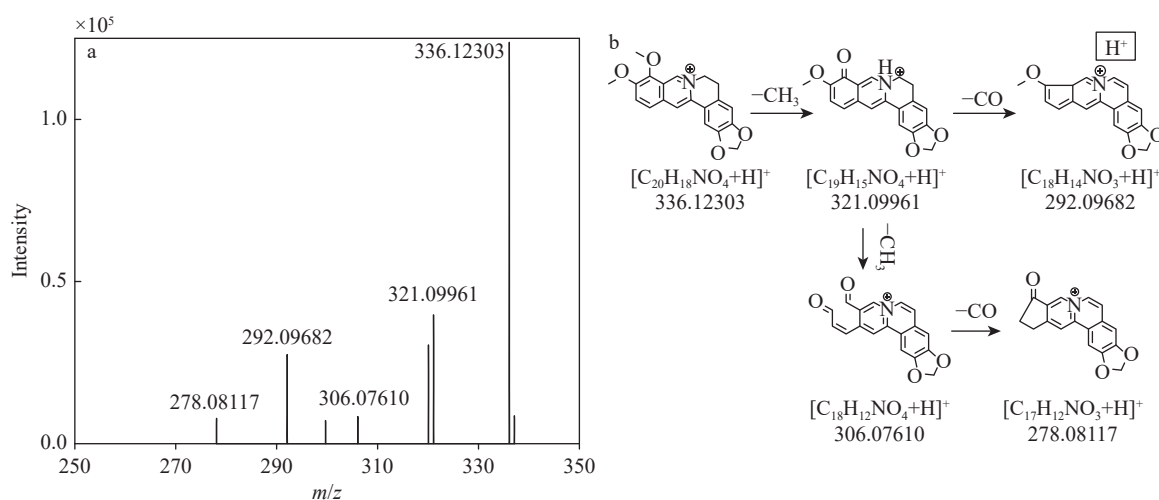


图3 正离子模式下,黄连素的二级质谱图(a)及裂解途径(b)

Fig. 3 MS/MS spectrum (a) and proposed fragmentation pathways (b) of berberine under positive ion mode

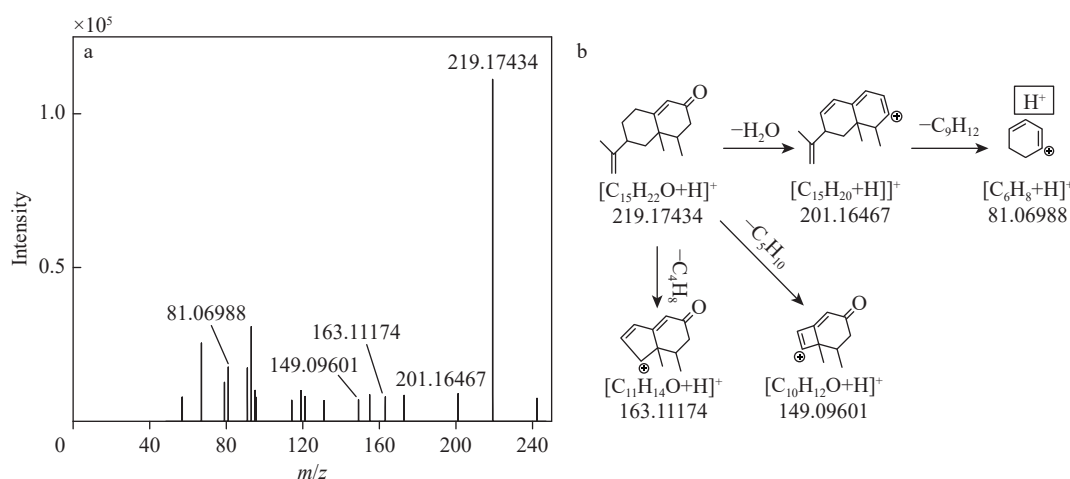


图4 正离子模式下,圆柚酮的二级质谱图(a)及裂解途径(b)

Fig. 4 MS/MS spectrum (a) and proposed fragmentation pathways (b) of nootkatone under positive ion mode

*L*-脯氨酸和 *L*-苯丙氨酸为例,正离子模式下, *L*-脯氨酸的准分子离子峰为  $[M+H]^+$  ( $m/z$  116.070 61), 色谱保留时间为 1.04 min, 推测其分子式为  $C_5H_9NO_2$ , 二级碎片离子为  $[M+H-COOH]^+$  ( $m/z$  70.065 13)。 *L*-苯丙氨酸的准分子离子峰为  $[M+H]^+$  ( $m/z$  166.086 26), 色谱保留时间为 1.77 min, 推测其分子式为  $C_9H_{11}NO_2$ , 二级碎片离子为  $[M+H-NH_3]^+$  ( $m/z$  149.059 71) 和  $[M+H-HCOOH]^+$  ( $m/z$  120.080 78)。二者的二级质谱图与质谱裂解规律示于图 6。

**2.2.6 苯丙素类及香豆素类化合物** 苯丙素类化合物是一类含苯丙烯基结构单元(及其衍生物)的天然有机化合物。根据结构特征和氧化程

度的不同,主要分为简单苯丙素、香豆素和木脂素<sup>[18]</sup>。本研究在橡胶草中共检测出 13 种苯丙素类物质,其中包含 3 种香豆素类物质。以绿原酸为例,负离子模式下其准分子离子峰为  $[M-H]^-$  ( $m/z$  353.087 81), 色谱保留时间为 8.43 min, 推测其分子式为  $C_{16}H_{18}O_9$ 。二级碎片离子为  $[M-H-C_9H_6O_3]^-$  ( $m/z$  191.056 11)、 $[M-H-C_7H_{10}O_5]^-$  ( $m/z$  179.034 98) 和  $[M-H-C_7H_{10}O_5-H_2O]^-$  ( $m/z$  161.024 42), 其质谱裂解途径示于图 7。结合上述裂解规律及对照品质谱数据,鉴定该物质为绿原酸。

咖啡酸的准分子离子峰为  $[M-H]^-$  ( $m/z$  179.034 98), 色谱保留时间为 7.62 min, 推测其分子式为  $C_9H_8O_4$ , 二级碎片离子为  $[M-H-$

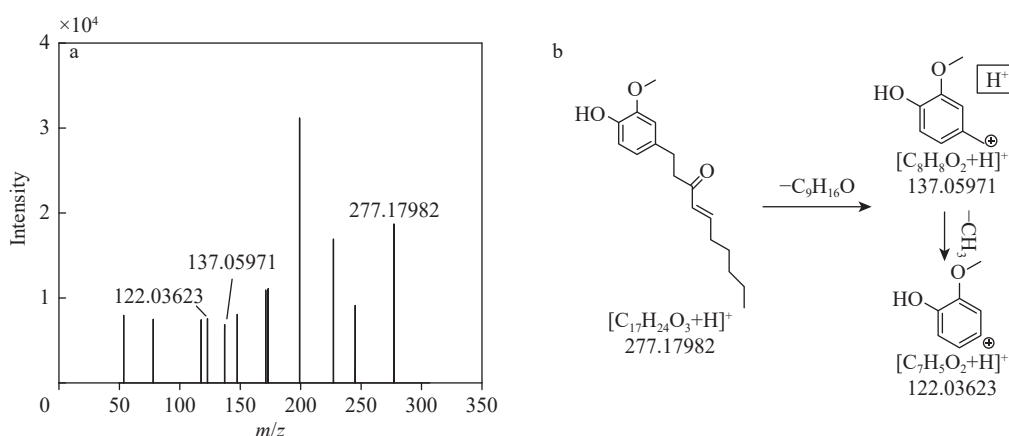


图5 正离子模式下,6-姜烯酚的二级质谱图(a)及裂解途径(b)

Fig. 5 MS/MS spectrum (a) and proposed fragmentation pathways (b) of 6-shogaol under positive ion mode

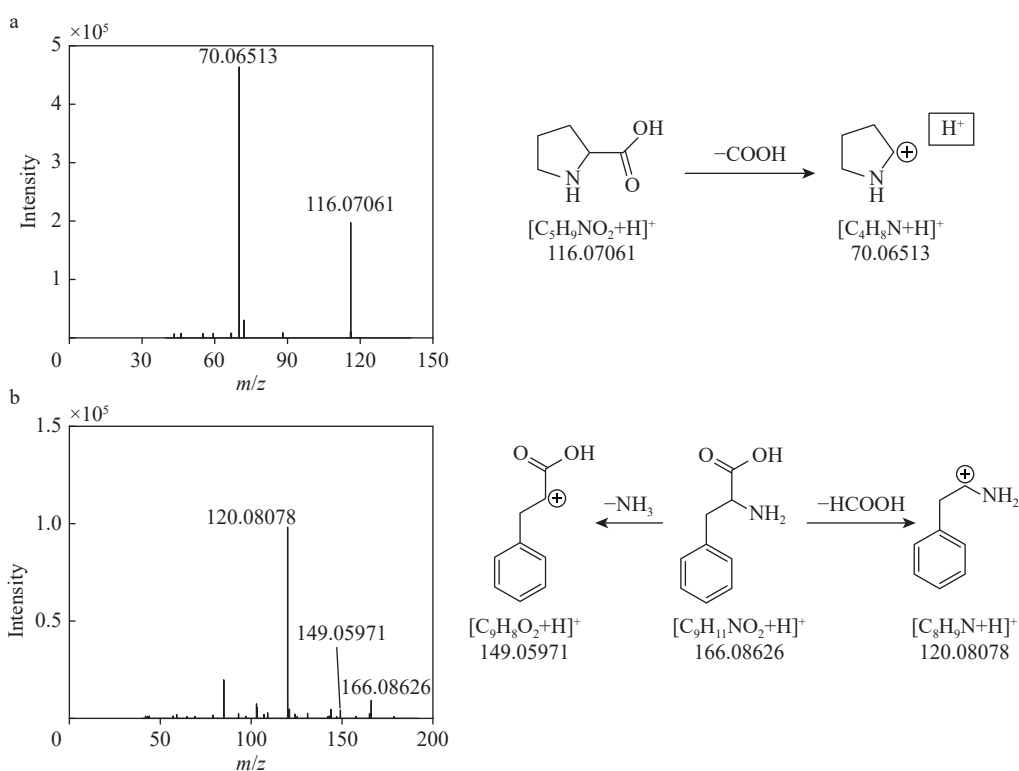


图6 正离子模式下, L-脯氨酸(a)和 L-苯丙氨酸(b)的二级质谱图及裂解途径

Fig. 6 MS/MS spectra and proposed fragmentation pathways of *L*-proline (a) and *L*-phenylalanine (b) under positive ion mode

$\text{COO}]^- (m/z 135.045 15)$  和  $[\text{M}-\text{H}-\text{COO}-\text{C}_2\text{H}_4]^- (m/z 107.050 24)$ , 其质谱裂解规律示于图8。结合上述裂解规律及对照品质谱数据, 鉴定该物质为咖啡酸。

香豆素类物质的离子易发生中性丢失  $\text{CO}$ 、 $\text{H}_2\text{O}$  或  $\text{CO}_2$  等分子, 形成特征碎片离子。以 7-羟基香豆素为例, 正离子模式下其准分子离子峰为

$[\text{M}+\text{H}]^+ (m/z 163.038 97)$ , 色谱保留时间为 9.07 min, 推测其分子式为  $\text{C}_9\text{H}_6\text{O}_3$ 。二级碎片离子为  $[\text{M}+\text{H}-\text{COO}]^+ (m/z 119.049 14)$  和  $[\text{M}+\text{H}-2\text{CO}]^+ (m/z 107.049 14)$ , 其质谱裂解规律示于图9。结合上述裂解规律及对照品质谱数据, 鉴定该物质为 7-羟基香豆素。

负离子模式下, 对香豆酸标准品的准分子离

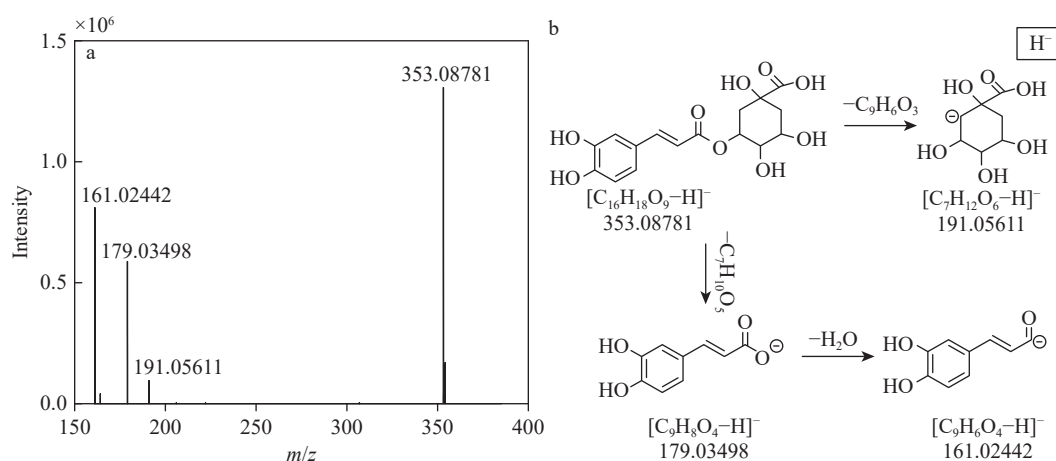


图7 负离子模式下,绿原酸的二级质谱图(a)及裂解途径(b)

Fig. 7 MS/MS spectrum (a) and proposed fragmentation pathways (b) of chlorogenic acid under negative ion mode

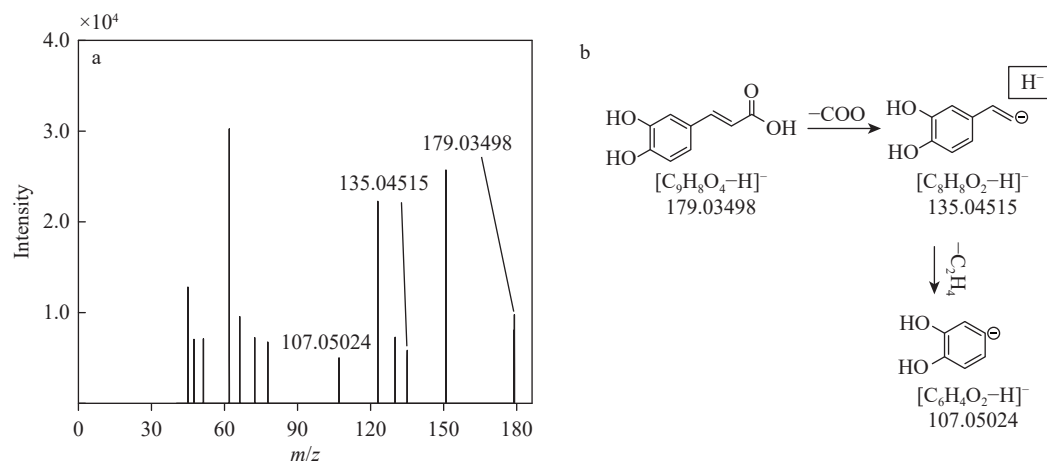


图8 负离子模式下,咖啡酸的二级质谱图(a)及裂解途径(b)

Fig. 8 MS/MS spectrum (a) and proposed fragmentation pathways (b) of caffeic acid under negative ion mode

子峰为 $[M-H]^-$  ( $m/z$  163.040 12), 二级碎片离子为  $m/z$  119.050 41、93.034 13, 与橡胶草样品检测所得  $m/z$  163.040 18、119.050 24 和 93.034 59 吻合。将样品离子信息与 OTCML 数据库进行比对, 鉴定该物质为对香豆酸。

**2.2.7 有机酸类化合物** 有机酸多为碳环芳香族酚酸类化合物, 其在植物中广泛存在, 具有抗菌、抗炎和抗氧化等生物活性。负离子模式下, 有机酸的信号响应较好, 准分子离子峰在碎裂过程中易发生苯环取代基丢失、脱羧、脱水和碳链碎裂等反应<sup>[19]</sup>。本研究在橡胶草中共鉴定出 10 种有机酸。以阿魏酸为例, 负离子模式下其准分子离子峰为 $[M-H]^-$  ( $m/z$  193.050 63), 色谱保留时间为 10.34 min, 推测其分子式为  $C_{10}H_{10}O_4$ 。

二级质谱碎片离子为 $[M-H-CH_3]^-$  ( $m/z$  178.027 16) 和 $[M-H-2CO]^-$  ( $m/z$  134.037 33), 与文献<sup>[20]</sup>报道一致, 其质谱裂解规律示于图 10。结合质谱裂解规律及对对照品质谱数据比对结果, 鉴定该物质为阿魏酸。

**2.2.8 核苷酸类化合物** 本研究在橡胶草中共检测出 4 种核苷酸类物质。以腺苷为例, 正离子模式下其准分子离子峰为 $[M+H]^+$  ( $m/z$  268.104 03), 色谱保留时间为 1.41 min, 推测其分子式为  $C_{10}H_{13}N_5O_4$ 。二级碎片离子为 $[M+H-C_5H_{10}O_4]^+$  ( $m/z$  136.061 77) 和 $[M+H-C_5H_{10}O_4-NH_3]^+$  ( $m/z$  119.025 04), 与文献<sup>[21]</sup>报道一致, 其质谱裂解规律示于图 11。

**2.2.9 其他类化合物** 本研究在橡胶草中还检测出糖类(如蔗糖)、酰胺类(如十六酰胺乙醇)、

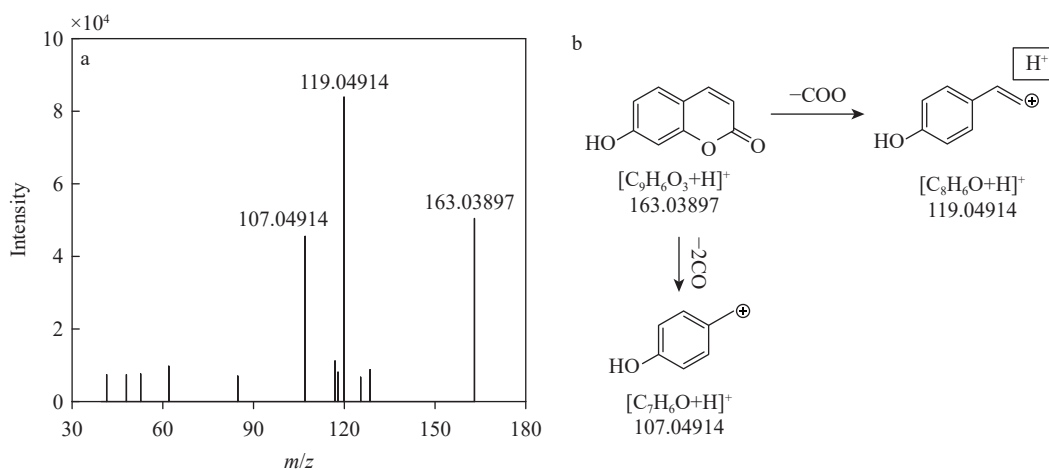


图9 正离子模式下,7-羟基香豆素的二级质谱图(a)及裂解途径(b)

Fig. 9 MS/MS spectrum (a) and proposed fragmentation pathways (b) of 7-hydroxycoumarin under positive ion mode

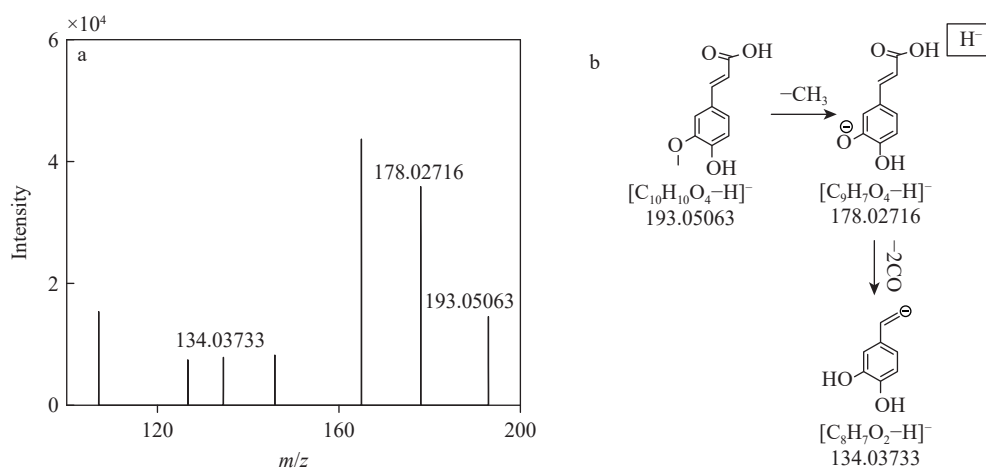


图10 负离子模式下,阿魏酸的二级质谱图(a)及裂解途径(b)

Fig. 10 MS/MS spectrum (a) and proposed fragmentation pathways (b) of ferulic acid under negative ion mode

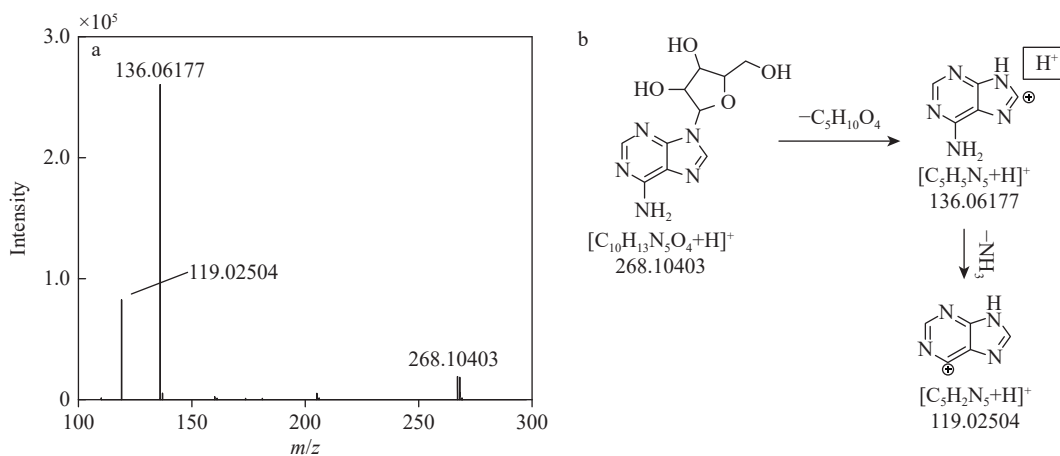


图11 正离子模式下,腺苷的二级质谱图(a)及裂解途径(b)

Fig. 11 MS/MS spectrum (a) and proposed fragmentation pathways (b) of adenosine under positive ion mode

脂类(如乙酰柠檬酸三丁酯)、氨基醇类(如 *N*-十二烷基乙醇胺)、吡啶类(如脱镁叶绿酸盐 A)和醚类(如四聚乙二醇单月桂醚)等物质。

### 3 结论

本研究采用 UHPLC-Q/Orbitrap HRMS 技术对橡胶草中的化学成分进行检测分析。在电喷雾离子源正、负离子模式下,对橡胶草根部及叶片中的未知成分进行定性分析,共鉴定出 94 种化合物。将获得的色谱信息,一、二级质谱数据与自建数据库及 OTCML 中药成分数据库进行比对,并结合在线数据库检索及相关文献报道,共鉴定出 54 种化合物,涵盖黄酮类、生物碱类、萜类、苯丙素类、有机酸类、氨基酸类、核苷酸类及酚类等。进一步通过 GNPS 在线平台进行数据比对,额外鉴定出 40 种其他类化合物。本研究还分析了部分重要化合物的质谱裂解规律,为橡胶草活性成分的深入研究及其高值化利用提供了理论基础。然而,由于橡胶草中天然成分种类繁多、基质复杂,基于单一质谱数据难以实现各类型同分异构体的有效鉴别。同时,现有质谱数据库的覆盖范围也限制了新型化合物的识别能力。后续研究将结合核磁共振等技术及人工智能辅助鉴定方法,以提高鉴定的准确性和全面性。

### 参考文献:

- [1] 卓杨鹏, 廖双泉, 廖小雪, 张晨, 符波, 赵艳芳, 李万珍, 成泽南. 蒲公英橡胶草橡胶的提取及其性能研究进展[J]. 橡胶工业, 2021, 68(2): 154-159.  
ZHUO Yangpeng, LIAO Shuangquan, LIAO Xiaoxue, ZHANG Chen, FU Bo, ZHAO Yanfang, LI Wanzhen, CHENG Ze'nan. Research progress on extraction and properties of rubber from dandelion *Taraxacum kok-saghyz*[J]. China Rubber Industry, 2021, 68(2): 154-159 (in Chinese).
- [2] 崔树阳, 张继川, 张立群, 马勇, 聂秋海, 王锋, 董益阳. 蒲公英橡胶产业的研究现状与未来展望[J]. 中国农学通报, 2020, 36(10): 33-38.  
CUI Shuyang, ZHANG Jichuan, ZHANG Liqun, MA Yong, NIE Qiuhai, WANG Feng, DONG Yiyang. Research status and future prospect of *Taraxacum kok-saghyz* (TKS) rubber industry[J]. Chinese Agricultural
- [3] 郭莹莹. 我区橡胶草研究取得突破性进展[N]. 新疆科技报(汉), 2024-01-19(002).
- [4] 苏学军, 朱旭, 孙有美, 陈馨雨. 表面活性剂辅助超声提取无花果叶总黄酮的工艺优化[J]. 化学工程师, 2025, 39(1): 84-87, 52.  
SU Xuejun, ZHU Xu, SUN Youmei, CHEN Xinyu. Optimization of surfactant assisted ultrasonic extraction of total flavonoids from fig leaves[J]. Chemical Engineer, 2025, 39(1): 84-87, 52(in Chinese).
- [5] 薛宏坤, 谭佳琪, 蔡旭, 刘成海, 唐劲天, 李倩. 微波功率对蔓越莓花色苷萃取过程的影响机理[J]. 食品科学, 2022, 43(1): 92-101.  
XUE Hongkun, TAN Jiaqi, CAI Xu, LIU Chenghai, TANG Jintian, LI Qian. Effect of microwave power on the extraction process of anthocyanins from cranberry[J]. Food Science, 2022, 43(1): 92-101(in Chinese).
- [6] 王佳颖, 王佰灵, 罗婷, 刘雨蒙, 戈振凯. 娑罗子中七叶皂苷 A 的超声-微波协同提取工艺优化[J]. 湖北医药学院学报, 2024, 43(6): 596-601, 606.  
WANG Jiaying, WANG Bailing, LUO Ting, LIU Yumeng, GE Zhenkai. Optimization of ultrasound-microwave synergistic extraction of aescin A from *Aesculi semen*[J]. Journal of Hubei University of Medicine, 2024, 43(6): 596-601, 606(in Chinese).
- [7] 孔佳琦, 孟宪双, 尚宇瀚, 董益阳, 马强. 青胶蒲公英化学成分鉴定及质谱裂解规律研究[J]. 质谱学报, 2022, 43(3): 278-286.  
KONG Jiaqi, MENG Xianshuang, SHANG Yuhan, DONG Yiyang, MA Qiang. Identification of chemical components in *Taraxacum kok-saghyz* Rodin and investigation of mass spectrometric fragmentation pathways[J]. Journal of Chinese Mass Spectrometry Society, 2022, 43(3): 278-286(in Chinese).
- [8] 李荣胜, 李师仰, 刘伟, 戚胜兰, 彭纓. 基于 UHPLC-Q-Exactive Orbitrap HRMS 技术的仙鹤草化学成分分析[J]. 沈阳药科大学学报, 2025, 42(4): 342-357.  
LI Rongsheng, LI Shiyang, LIU Wei, QI Shenglan, PENG Ying. Chemical composition analysis of Xian-hecao based on UHPLC-Q-Exactive Orbitrap HRMS technology[J]. Journal of Shenyang Pharmaceutical University, 2025, 42(4): 342-357(in Chinese).
- [9] 赵佳宇, 吕悦广, 辛通, 郭倩倩, 张文赢, 李金鸿, 薛宏宇, 马强. 中药复方九味汤化学成分鉴定及质谱裂解规律研究[J]. 质谱学报, 2025, 46(1): 11-25.  
ZHAO Jiayu, LYU Yueguang, XIN Tong, GUO Qianqian, ZHANG Wenying, LI Jinhong, XUE Hongyu, MA

- Qiang. Identification and mass spectrometric fragmentation pathways of chemical components in the traditional Chinese medicine formula of Jiwei decoction[J]. Journal of Chinese Mass Spectrometry Society, 2025, 46(1): 11-25(in Chinese).
- [10] 陈敏, 缪莉, 张立奎. 采用 GNPS-分子网络技术快速发掘天然除草剂 aspterric acid 类似物[J]. 实验技术与管理, 2025, 42(3): 80-87.
- CHEN Min, MIU Li, ZHANG Likui. Rapid discovery of natural herbicide aspterric acid analogues using GNPS molecular network technology[J]. Experimental Technology and Management, 2025, 42(3): 80-87(in Chinese).
- [11] OLIVIER B, MEHDI A B, PIERRE C, VÉDASTEK, ALAIN N, CARLA H, GIORGI J, ALLISON L, ALEMBERT T T, LUC A, MICHEL F. Exploration by molecular networking of strychnos alkaloids reveals the unexpected occurrence of strychnine in seven strychnos species[J]. *Toxicon: Official Journal of the International Society on Toxinology*, 2022, 215: 57-68.
- [12] 麦提敏, 麦提萨伍尔, 李彤, 倪雅迪, 袁天杰, 王岱杰, 段金彪, 肖平. 罗汉参黄酮抗氧化物质基础及作用机制探讨[J]. 食品工业科技, 2025, 46(13): 359-370.
- MAITISAWUER M, LI Tong, NI Yadi, YUAN Tianjie, WANG Daijie, DUAN Jin'ao, XIAO Ping. Study on the antioxidant substance basis and mechanism of flavonoids from arhat ginseng[J]. Science and Technology of Food Industry, 2025, 46(13): 359-370(in Chinese).
- [13] ŚLIWKA-KASZYŃSKA M, ANUSIEWICZ I, SKURSKI P. The mechanism of a retro-Diels-alder fragmentation of luteolin: theoretical studies supported by electrospray ionization tandem mass spectrometry results[J]. *Molecules*, 2022, 27(3): 1 032.
- [14] 程贺立. 液相色谱-串联质谱法测定生物碱及其代谢产物[D]. 杭州: 浙江大学, 2018.
- [15] 杨鹏, 卿志星, 左姿, 余坤, 曾建国. HPLC-Q-TOF/MS 鉴定白屈菜中异喹啉类生物碱[J]. 中国现代中药, 2017, 19(2): 174-182.
- YANG Peng, QING Zhixing, ZUO Zi, YU Kun, ZENG Jianguo. Identification of isoquinoline alkaloids in *Chelidonium majus* by HPLC-Q-TOF/MS[J]. *Modern Chinese Medicine*, 2017, 19(2): 174-182(in Chinese).
- [16] 来灿林, 侯梦妮, 楼明波, 孔琼荣, 陈悦, 朱坤丹, 谢升谷, 何厚洪. HPLC-Q-TOF-MS/MS 分析盐酸小檗碱的杂质谱[J]. 中国现代应用药理学, 2022, 39(4): 512-523.
- LAI Canlin, HOU Mengni, LOU Mingbo, KONG Qiongrong, CHEN Yue, ZHU Kundan, XIE Shenggu, HE Houhong. Analysis of impurity spectra of berberine hydrochloride by HPLC-Q-TOF-MS/MS[J]. *Chinese Journal of Modern Applied Pharmacy*, 2022, 39(4): 512-523(in Chinese).
- [17] 田静, 金哲敏, 戚晶泽. 菊花萜类挥发性物质研究进展[J]. 现代农业科技, 2024(24): 137-143, 147.
- TIAN Jing, JIN Zhemin, QI Jingze. Research progress on terpenoids volatile organic compounds in *chrysanthemum*[J]. *Modern Agricultural Science and Technology*, 2024(24): 137-143, 147(in Chinese).
- [18] 陈少影, 李晶晶, 刘琨, 兰卫. 基于 UPLC-QE-Orbitrap-MS 技术的欧芹子的成分分析[J]. 中国医院药学杂志, 2025, 45(4): 410-417.
- CHEN Shaotong, LI Jingjing, LIU Kun, LAN Wei. Component analysis of *Eucommia ulmoides* based on UPLC-QE Orbitrap MS technology[J]. *Chinese Journal of Hospital Pharmacy*, 2025, 45(4): 410-417(in Chinese).
- [19] 张清清, 冯媛, 李春花, 李国川, 刘兴超, 李颖玥, 王红芳, 周莉, 张一听. 基于 UPLC-Q-TOF/MS 技术快速鉴定当归中苯酞类和有机酸类成分[J]. 中国药房, 2022, 33(5): 579-585, 591.
- ZHANG Qingqing, FENG Yuan, LI Chunhua, LI Guochuan, LIU Xingchao, LI Haoyue, WANG Hongfang, ZHOU Li, ZHANG Yixin. Rapid identification of phthalides and organic acids in *Angelica sinensis* based on UPLC-Q-TOF/MS[J]. *China Pharmacy*, 2022, 33(5): 579-585, 591(in Chinese).
- [20] 吴健, 关永霞, 范建伟, 张贵民. 基于超高效液相色谱串联四极杆静电场轨道阱质谱法的天麻眩晕宁颗粒化学成分鉴定及归属[J]. 中国现代中药, 2025, 27(4): 647-660.
- WU Jian, GUAN Yongxia, FAN Jianwei, ZHANG Guiming. Chemical composition identification and attribution of Tianma Dijining granules based on ultra-high performance liquid chromatography tandem quadrupole electrostatic field orbital trap mass spectrometry[J]. *Modern Chinese Medicine*, 2025, 27(4): 647-660(in Chinese).
- [21] 张凌云, 刘匡一. UPLC-QTOF/MS 法鉴定蕨麻中化学成分[J]. 现代药物与临床, 2024, 39(8): 1 995-2 000.
- ZHANG Lingyun, LIU Kuangyi. Identification on chemical constituents in *Potentillae radix* by UPLC-QTOF/MS[J]. *Drugs & Clinic*, 2024, 39(8): 1 995-2 000(in Chinese).

(收稿日期: 2025-03-13; 修回日期: 2025-04-28)