

中药皂苷类成分的谱效关系研究进展

郭笑园, 吕邵娃*

黑龙江中医药大学药学院 教育部北药基础与应用研究重点实验室, 哈尔滨 150040

摘要:皂苷是中药中一类重要的活性成分,具有广泛的药理作用,其复杂体系的药效物质基础解析一直是研究的难点,而谱效关系研究为这一难题提供了有效策略。尽管已有不少单味中药及复方中药皂苷的谱效关系研究,但仍缺少对其进行系统性的梳理和整合。因此,本研究总结了近十年来皂苷类成分的谱效关系案例,重点对单味药及其复方中的皂苷成分进行谱效关联分析,并将现代色谱-质谱联用技术与多变量统计学分析相结合,阐明皂苷类成分与药理作用之间的相关性,揭示其药效物质基础。本研究为揭示皂苷类成分的作用机制、中药质量控制标准提供理论依据。

关键词:皂苷;谱效关系;指纹图谱;药效物质基础

中图分类号:R285

文献标志码:A

文章编号:1001-6880(2026)8-1827-08

DOI:10.16333/j.1001-6880.2026.8.020

CSTR:32307.14.1001-6880.2026.8.020

Research progress on spectrum-effect relationship of saponins from traditional Chinese medicine

GUO Xiao-yuan, LYU Shao-wa*

Key Laboratory of Northern Medicine Basic and Applied Research,

Ministry of Education School of Pharmacy, Heilongjiang University of Chinese Medicine, Harbin 150040, China

Abstract: Saponins are a pivotal class of bioactive compounds in traditional Chinese medicine (TCM), widely recognized for their diverse pharmacological activities. However, elucidating the pharmacodynamic material basis underlying their therapeutic efficacy within the complex matrix of TCM remains a significant scientific challenge. Spectrum-effect relationship research has emerged as a powerful strategy to address this challenge. Although a substantial body of research has explored the spectrum-effect relationships of saponins in both single herbs and compound formulas, a systematic review and integration of these findings are still lacking. Accordingly, this study synthesizes key findings from spectrum-effect relationship studies on saponins over the past decade, with a specific focus on these spectrum-effect correlations in single herbs and TCM compound formulas. By combining modern chromatography-mass spectrometry techniques with multivariate statistical analyses, we elucidate these quantitative correlations and thus identify the key saponin constituents responsible for the observed effects, thereby defining their pharmacodynamic material basis. This synthesis not only consolidates our understanding of saponin bioactivity but also provides a critical theoretical framework for future mechanistic investigations and the advancement of evidence-based, saponin-focused quality control protocols in TCM.

Key words: saponins; spectrum-effect relationship; fingerprint; pharmacodynamic material basis

中药疗效的发挥往往依赖于多种成分的协同作用。皂苷类成分凭借其独特的结构和多样的生物活性成为当前中医药研究的热点。其化学结构主要由亲脂性皂苷元(非糖组分)与亲水性的糖链经糖苷键共价连接^[1],广泛存在于人参、三七、柴胡等常用

中药^[2-4]。多数皂苷具有油水两亲性和促渗透特性,药理作用广泛,涵盖保肝、抗肿瘤、活血、免疫调节、抗炎、抗氧化及神经保护等多个方面,是中药发挥疗效的重要物质基础^[5]。然而皂苷结构复杂且中药多成分协同的特点,传统的研究方法难以全面、精确地揭示皂苷类成分在中药整体疗效中的具体贡献。

中药化学成分与其药效间相互作用机理尚未完全阐明,一直是该领域的研究难点。由于单一成分

收稿日期:2025-10-10

接受日期:2026-03-10

基金项目:国家自然科学基金面上项目(82474098)

*通信作者 Tel:86-015245081418; E-mail:lsww599@hotmail.com

的药理作用具有局限性,需要从整体考虑中药多成分的协同药效关系。在此背景下,谱效关系研究应时而生。谱效关系是通过关联中药化学指纹图谱与整体药理效应,为辨识复杂体系中的关键药效物质提供方法学支持。其研究框架主要包括高分辨化学信息的获取与化学计量学的关联分析。在化学信息获取方面,高效液相色谱(HPLC)与超高效液相色谱(UPLC)以高分离能力和方法重现性,常用于构建皂苷类成分指纹图谱;超高效液相色谱-四极杆-飞行时间质谱(UPLC-Q-TOF-MS)等色谱-质谱联用技术,可实现皂苷成分的高通量鉴定,显著提升化学信息深度^[6]。在数据关联分析中,多变量统计方法用于量化成分与药效关系:如偏最小二乘回归(partial least squares regression, PLSR)能够有效处理变量多重共线性,建立可靠的药效预测模型;灰色关联分析(grey relational analysis, GRA)适用于小样本,

评估成分贡献次序;主成分分析(principal component analysis, PCA)与层次聚类分析(hierarchical cluster analysis, HCA)常用于样本分类与差异性成分筛选。综合运用上述策略,可从海量数据中识别与特定药效相关的活性成分群^[7,8]。该方法不仅为中药质量控制和药效物质基础研究提供了新途径,其应用也已拓展至多种成分研究。例如,该方法曾用于揭示福白菊中关键抗氧化的黄酮类成分^[9],以及枸杞多糖中抗疲劳与免疫调节活性的糖类成分群^[10];在复方研究中,还成功解析银翘散抗流感病毒的物质组合^[11],以及芍药甘草汤中抗癫痫脑保护成分^[12]。本研究总体技术路线如图1所示,下文将依此框架对皂苷的谱效关系进行系统阐述,以明确其药效物质基础研究的现状与规律,为皂苷类中药的深入研究提供参考。

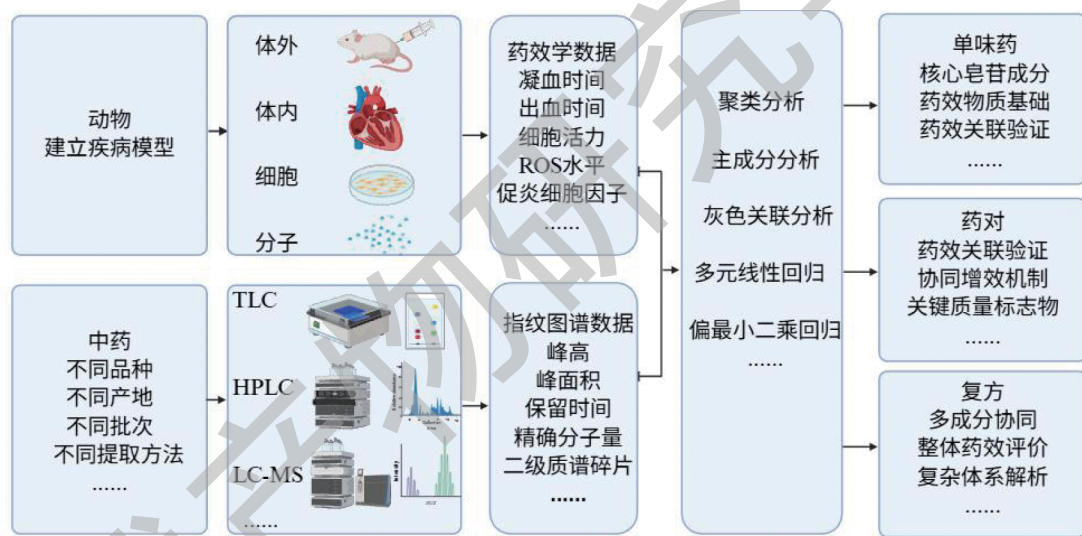


图1 中药皂苷类成分谱效关系研究框架

Fig. 1 Research framework for studying the spectrum-effect relationship of saponin components in traditional Chinese medicine

1 单味中药中皂苷类化合物的谱效关系

1.1 活血作用

血瘀是由于血液黏度升高、血小板黏附与聚集功能增强及微循环改变,导致血管内皮损伤的一种病理状态^[13]。研究表明,皂苷类成分可通过调节纤溶系统功能、抑制由二磷酸腺苷诱导的血小板聚集过程发挥活血作用^[14]。Ding等^[15]采用乙醇回流提取法提取三七的活性成分,通过提取物对大鼠毛细血管凝血和脑缺血再灌注损伤的影响,表明三七具有活血功效。利用HPLC法对三七建立指纹图谱,指认了12个共有峰均为皂苷类成分。结合PLSR,结

果显示人参皂苷Rb₂、Rc、Re等9个皂苷类化合物均具有活血作用。Li等^[16]采用UPLC法对12批滇重楼建立指纹图谱,鉴定出7个皂苷类成分。通过抗血小板聚集实验,确定滇重楼具有显著的抑制效果。结合HCA与典型相关分析(canonical correlation analysis, CCA)发现,重楼皂苷VII、D、H等5个皂苷成分与抗血小板聚集作用相关联。综上,皂苷是三七和重楼发挥活血功效的重要物质基础,为进一步研究其活血作用机理提供依据。

1.2 止血作用

皂苷类化合物在止血领域具有重要作用。皂苷

可通过缩短血浆再钙化时间、体外凝血时间及血浆凝血酶时间,促进纤维蛋白原向纤维蛋白转化,加速血凝块的生成,实现其止血功效^[17]。Liu 等^[18]利用大孔树脂柱色谱法和乙醇梯度洗脱法获取三七不同组分,采用超高效液相色谱-质谱(UPLC-MS)联用技术构建指纹图谱,识别共有峰多为皂苷成分。通过大鼠胃出血实验,验证三七止血功效。结合双变量相关分析和 PLSR,确定了人参皂苷 R_g 、 R_d 、 R_h 等皂苷成分与止血功效相关联。Li 等^[19]对三七药材进行乙醇提取,经 HPLC 法指认出 11 个皂苷类成分,通过大鼠实验证实其止血功效。采用 PLSR 进行谱效分析,发现三七皂苷 R_1 、 R_g 、 R_e 等与止血作用呈正相关。上述研究表明,该皂苷类成分是三七止血的关键物质。关键皂苷以达玛烷型为母核,不同皂苷因其特异结构而通过不同途径止血,例如:三七皂苷 R_1 凭借 C-6 位特征双糖链结构可协同多个环节发挥止血相关活性^[20]。三七止血源于多种皂苷结构协同,这为创新药物设计提供了新思路:在保留达玛烷型母核的基础上,对其关键糖基进行定向修饰,以开发靶向性更强的新型止血药,推动中药现代化。

1.3 免疫调节作用

目前,针对免疫失调的干预手段有限,皂苷类化合物作为一类具有复杂化学结构的天然产物,在免疫调节领域发挥着重要的作用。皂苷能够作用于巨噬细胞、T 细胞等免疫细胞,通过调节细胞因子的表达与分泌,增强或抑制免疫应答,在免疫调节过程中发挥关键作用。同时,皂苷还可干预免疫细胞的增殖、分化和凋亡过程,平衡机体的免疫功能,在自身免疫性疾病、感染性疾病的防治方面,起着关键作用^[21]。Lyu 等^[22]利用 70% 乙醇水提取西洋参药材中的有效化学成分,以斑马鱼模型进行药效学实验,确定西洋参具有增强免疫的作用。采用液相色谱-四极杆-飞行时间串联质谱(LC-Q-TOF-MS/MS)联用技术,以西洋参皂苷类成分为研究对象,构建指纹图谱分析方法,确定了 18 个皂苷类成分。结合 GRA 和 PLSR 进行分析,发现人参皂苷 F_1 、 R_d 等皂苷类成分对增强免疫力作用贡献最为明显。Chen 等^[23]以 UV-1700 法检测到黄芪含大量皂苷,利用 UPLC-Q-TOF-MS 联用技术建立指纹图谱,通过免疫调节活性实验测定细胞活力、细胞因子等指标,确定黄芪具有免疫调节作用。采用正交偏最小二乘法分析显示,黄芪甲苷 IV、II、I 等 6 个皂苷与免疫调节活

性有高度相关性。谱效关系研究表明,皂苷的免疫调节活性与其结构特征密切相关。黄芪甲苷 I、II、IV 均具有环阿尔廷型三萜母核,黄芪甲苷 I 的简单糖基构成活性基础;黄芪甲苷 II 通过增加糖基数目增强免疫相互作用^[24];黄芪甲苷 IV 则凭其结构特性,实现免疫调控,参与调节细胞因子网络^[25,26]。这一构效关系揭示,皂苷具有免疫活性既源于母核结构,更由糖基化程度与连接模式精确决定,为阐明黄芪免疫调节作用的药效物质基础提供了关键依据。

1.4 抗炎作用

皂苷类成分可通过阻断核因子- κ B(nuclear factor- κ B, NF- κ B)核转位,抑制肿瘤坏死因子- α (tumor necrosis factor- α , TNF- α)、白细胞介素-17(interleukin-17, IL-17)等促炎细胞因子的释放;此外,部分皂苷还能直接抑制环氧合酶-2(cyclooxygenase-2, COX-2)活性,减少前列腺素 E_2 (prostaglandin E_2 , PGE₂)等炎症介质的生成^[27]。Lyu 等^[28]利用 HPLC 法对类叶牡丹建立指纹图谱,通过高效液相色谱-质谱(HPLC-MS)联用技术鉴定其主要成分为皂苷与生物碱。以胶原诱导性关节炎小鼠为模型进行药效学实验,以 TNF- α 、IL-17 和 IL-6 等促炎细胞因子为检测指标,明确类叶牡丹的抗炎作用。采用多元线性回归和 GRA 显示,类叶牡丹皂苷 C、D、G 等皂苷类成分与抗炎作用具有显著的相关性。Sun 等^[29]对 13 批地榆药材进行提取,经 HPLC 建立指纹图谱指认出鞣花酸以及多种皂苷类成分等。以 COX-2 抑制率为指标,确定地榆具有抑制作用。结合 GRA、皮尔逊相关性分析及实验验证,确定地榆皂苷 I 是发挥对 COX-2 抑制作用及抗炎功效的主要活性成分。上述研究虽针对不同药材,但均通过谱效分析方法证明了皂苷类成分为抗炎作用的活性物质。

1.5 抗氧化作用

皂苷类化合物可通过清除自由基,或降低细胞内氧化应激相关物质水平发挥抗氧化的活性^[30]。Xu 等^[31]采用 HPLC 法对白头翁建立指纹图谱,结合 UPLC-Q-TOF-MS 指认了共有峰主要为皂苷类成分。通过 DPPH 自由基清除实验,并以脂多糖诱导 RAW 264.7 细胞氧化应激模型验证,发现白头翁皂苷 B₄ 和 D 可显著降低一氧化氮(nitric oxide, NO)与活性氧(reactive oxygen species, ROS)水平,在抗氧化作用中贡献度较高。经 GRA、PLSR 及 PCA 确认二者具有显著抗氧化活性。可见白头翁皂苷 B₄、

D 是白头翁抗氧化的物质基础。Qi 等^[32]利用 HPLC 建立了不同产地积雪草的指纹图谱,并从共有峰中鉴定出 7 个成分,采用体外抗氧化活性评价及 GRA、PLSR 分析,经分子对接验证,明确了积雪草苷 B、羟基积雪草苷和山柰酚是积雪草发挥抗氧化功效的主要有效成分群。因此,皂苷类成分是白头翁与积雪草抗氧化作用的关键活性成分。

1.6 抗肿瘤作用

皂苷类成分可通过阻滞肿瘤细胞周期、诱导其凋亡以抑制肿瘤增殖,同时干扰肿瘤细胞代谢,从而阻断肿瘤进展^[33]。Zhou 等^[34]通过 UPLC 法建立 18 批人参指纹图谱并筛选出 6 个皂苷类成分,经 CCK-8 法检测,人参对 Lewis 肺癌小鼠肿瘤细胞(Lewis lung cancer cell, LLC)增殖具有抑制作用。采用 HCA 和 CCA 表明,人参皂苷 Rg₁、Re、Ro 等与抗肺癌作用呈正相关,其中人参皂苷 Ro 是抑制 LLC 细胞增殖的主要成分。Li 等^[35]采用 MTT 法测定长柱重楼、滇重楼、南重楼对肝癌 HepG2 细胞增殖的抑制活性,发现三者均有显著抗癌功效且长柱重楼效果最佳;结合 HPLC 指纹图谱及 HCA、GRA 分析,发现重楼皂苷 VI 与抗肝癌活性关联度均 >0.9,表明皂苷成分是重楼药材发挥抗癌功效的重要物质基础。类似地,Zou 等^[36]采用 HPLC 技术分离辽东槲木叶中的皂苷组分,结合 MTT 比色法活性检测发现,辽东槲木叶中极性较小的皂苷组分具有最强的抗肿瘤作用。上述研究共同证实了皂苷类成分是多种中药发挥抗癌作用的关键物质基础。

1.7 对肝脏的保护作用

皂苷能够通过激活抗氧化酶系统、清除自由基、抑制脂质过氧化反应,同时阻断 NF- κ B 等炎症相关信号通路,减轻氧化应激与炎症反应,发挥保肝作用^[37,38]。Zhang 等^[39]对北柴胡正丁醇萃取部位进行指纹图谱分析,筛选出 12 个特征峰均为皂苷类成分。通过 CCl₄ 诱导的小鼠肝损伤模型实验,检测小鼠血清中丙氨酸转氨酶(alanine aminotransferase, ALT)、天冬氨酸转氨酶(aspartate transaminase, AST)水平,评估北柴胡的保肝功效。采用 HCA 与 CCA,发现北柴胡中的柴胡皂苷 A、D 与保肝作用具有显著关联性。Zhang 等^[40]提取玉叶金花药材的总皂苷,通过小鼠急性肝损伤实验,证实其具有保肝作用。采用 HPLC 法建立指纹图谱,并指出 5 个共有峰。经 GRA,发现玉叶金花苷 O、G、C 等 3 个皂苷成分与保肝作用的关联最显著。由此可见,皂苷

是北柴胡和玉叶金花发挥保肝功效的关键活性成分。

1.8 对神经的保护作用

皂苷对神经系统的保护作用已获现代研究证实。Yang 等^[41]采用乙醇提取黑西洋参的有效成分,利用 UPLC 法对其建立指纹图谱,从中确定 8 个成分为皂苷类化合物。通过斑马鱼神经元损伤模型实验,测定斑马鱼神经元荧光面积和荧光强度,证明黑西洋参对斑马鱼神经元具有保护作用。结合 PCA 与正交偏最小二乘法判别分析,发现皂苷与黑西洋参的神经元保护作用呈正相关,经活性验证实验,证实人参皂苷 20(S)-Rg₃、20(R)-Rg₃ 及人参皂苷 Rk₁ 被确认为发挥该作用的关键活性成分。人参皂苷能直接促进细胞存活、神经突起生长及轴突与突触活动以再生神经网络,同时调节神经递质、其受体及第二信使水平防止神经元功能失调^[42]。除人参皂苷外,其他皂苷类成分如柴胡皂苷也在多种神经系统病理过程中展现出保护效应:柴胡皂苷 A 可激活 10-11 易位甲基胞嘧啶双加氧酶 1(ten-eleven translocation methylcytosine dioxygenase 1, TET1)/Delta 样配体 3(delta-like ligand 3, DLL3)/神经源性基因座 Notch 同源蛋白 1(neurogenic locus notch homolog protein 1, NOTCH1)通路,促进海马神经发生与突触可塑性改善抑郁^[43];通过调控环磷酸鸟苷(cyclic guanosine monophosphate, cGMP)/蛋白激酶 G(protein kinase G, PKG)信号通路,抑制 B 淋巴细胞瘤-2(B-cell lymphoma-2, BCL-2)/BCL-2 相关 X 蛋白(BCL-2-associated X protein, BAX)比值,拮抗癫痫样放电及神经元凋亡^[44];并通过抑制 NF- κ B 信号通路缓解脊髓损伤后的炎症与水肿^[45]。其同系物柴胡皂苷 D 则通过阻断 Toll 样受体 4(Toll-like receptor 4, TLR4)/NF- κ B 通路,抑制小胶质细胞 M1 极化及炎性因子释放,减轻脑出血后神经损伤^[46]。从药物开发的角度来看,此类皂苷成分源于天然产物,具备良好的生物相容性与潜在安全性,其多靶点作用机制为阿尔茨海默病、帕金森病等复杂神经退行性疾病的防治提供了新的策略。

1.9 其他作用

含皂苷类化合物的单味中药,还具有健脾益气、镇咳祛痰及抗疲劳等功效(见表 1)。

2 中药复方中皂苷类化合物的谱效关系

2.1 药对

中药复方疗效源于多组分协同作用,药对作为

表 1 单味中药中皂苷类化合物谱效关系研究概况

Table 1 Research profile on spectrum-effect relationships of saponins from single Chinese herbs

药材 Herb	分析方法 Analytical method	药理作用 Pharmacological action	数据处理方法 Data processing method	药理活性成分 Pharmacologically active constituent	文献 Ref.
红参 Ginseng Radix et Rhizoma Rubra	HPLC-Q-TOF-MS/MS	治疗心肌梗伤	GRA、PLSR	人参皂苷 R _{g1} 、R _{g2} 等	47
甘草 Glycyrrhizae Radix et Rhizoma	HPLC-Q-TOF-MS	健脾益气	GRA、PLSR	甘草酸、18 α -甘草酸	48
人参 Ginseng Radix et Rhizoma	HPLC	治疗糖尿病视网膜病变	PLSR	人参皂苷 Re、Rh ₁ 、Rd	49
西洋参 Panacis Quinquefolii Radix	UPLC-Q-TOF-MS	抗疲劳	PLSR	人参皂苷 Re、Rb ₁ 、Rb ₂	50
三七 Notoginseng Radix et Rhizoma	HPLC	改善失眠	GRA、PLSR	人参皂苷 Rb ₃	51
桔梗 Platycodonis Radix	UPLC-LTQ-Orbitrap-MS ^a	镇咳祛痰	PLSR	桔梗皂苷 D ₂ 、D 等	52
柴胡 Bupleuri Radix	HPLC	治疗阴虚	GRA、PLSR	柴胡皂苷 B ₁ 、B ₂ 等	53
续断 Dipsaci Radix	HPLC	促进细胞增殖分化	GRA	川续断皂苷 VI、X 等	54
大叶冬青 Folium Ilicis Latifoliae	HPLC	抑制黄嘌呤氧化酶	PCA	大叶冬青皂苷 C、D	55

结构精简的核心功能单元,以药简力宏的特性,助力解析皂苷类成分的谱效关系。其化学成分明确,可降低全方研究复杂度,承载相须相使等配伍规律,为皂苷定性定量分析及复方药效物质基础研究提供支撑。Yu 等^[56]基于超高效液相色谱-四极杆-静电场轨道阱高分辨质谱(UPLC-Q-Exactive Orbitrap-MS)联用技术构建柴胡-黄芩药对指纹图谱,结合脂多糖致热家兔模型,经 GRA,发现柴胡皂苷 A 与柴胡皂苷 C(关联度>0.865)与解热药效密切相关,故将其确立为关键质量标志物,明确了其核心谱效关系。Liu 等^[57]采用 UPLC 法为红参-制何首乌药对建立指纹图谱,确定 13 个有效成分,经细胞模型实验表明其具有显著的细胞保护效应,GRA 与 PLSR 分析发现人参皂苷 Ro 等皂苷类成分及蒽醌类化合物与该效应相关,且证实其作用源于多成分的协同作用。上述研究证实,药对研究的核心在于通过谱效关系精准明确复方中关键皂苷的药效,为君臣佐使理论提供了直接的实证支撑。在此基础上,通过比对药对与全方的化学指纹差异,更能进一步解析皂苷与多糖、生物碱等组分的协同或拮抗机制。该策略不仅是解析复方复杂性的有效方法,更是阐释皂苷配伍规律与协同机制的关键所在。

2.2 复方

从结构精简的药对研究拓展至成分复杂的复方时,多组分协同作用的解析变得更具挑战,却也更能反映中药配伍的整体特性。现代研究通过整合多种技术手段,正逐步揭示皂苷类成分与其他化学组分的协同机制。Wang 等^[58]采用超临界 CO₂ 流体萃取和 75% 乙醇水回流萃取法提取理冲生髓饮有效成分,经体外肿瘤抑制实验和荷瘤裸鼠生存延长实验,证实其抗卵巢癌活性。利用高效液相色谱-二极管阵列检测器-蒸发光散射检测器(HPLC-PDA-ELSD)联用技术建立指纹图谱,结合 HPLC-MS 鉴定相关峰结构,再通过回归分析和 HCA 发现,人参皂苷 Rc、黄芪甲苷等皂苷类成分、倍半萜及其他成分协同发挥抗卵巢癌功效,其中皂苷类成分是该复方重要的药效物质基础。Zheng 等^[59]提取复方逍遥散有效成分,通过小鼠悬尾实验和强迫游泳实验,表明其具有显著的抗抑郁作用。利用¹H NMR 法分析乙酸乙酯萃取物指纹图谱,指认出 14 个化学成分。借助 GRA、HCA 和强迫引入回归分析发现,有效成分含柴胡皂苷 A 等皂苷和白术内酯 I 等成分,其中柴胡皂苷类成分在抗抑郁中占主导,是逍遥散抗抑郁主要活性成分,也证实了柴胡作为君药的物质基础。

综上所述,在复方层面,皂苷类成分往往在药效发挥中居于核心地位。系统性地明确皂苷与其他成分间的协同机制,已成为阐释复方药效物质基础及验证君臣佐使配伍理论科学内涵的关键方法。

3 结论与展望

皂苷类化合物的谱效关系借助 HPLC、UPLC 等技术建立中药的指纹图谱,运用 GRA、PLSR 等回归分析,确定发挥药效的物质基础,为完善中药的质量控制提供了科学依据。从目前来看,皂苷类化合物的谱效关系研究仍然存在几个问题。一是指纹图谱的全面性和相关药效难以兼顾,单一的仪器技术难以检测到结构多样的微量皂苷成分,且共有峰往往选择高峰成分,容易忽略含量极少的关键活性成分,导致关联偏差;二是数据分析方法具有局限性,仅靠一种统计分析方法,很难精确地反映出皂苷类成分之间的相互作用、拮抗等非线性关系,而且一些研究忽略药物浓度与效应的动态关联,可能判断药效贡献不准确;三是皂苷在中药复方中的配伍规律研究不足。目前,针对中药复方中皂苷与其他组分(如黄酮、多糖、生物碱等)的协同比例及相互转化机制的研究尚不充分,难以充分阐释复方整体疗效的物质基础。

今后的研究还需要在三个方面深入探索:一是建立多元指纹图谱与多效价关联体系。利用 HPLC-MS、UPLC-Q-TOF-MS 等现代分析手段,提高复杂体系中药物组分的分离效率,并通过药物活性分离富集微量成分,避免丰度偏见;二是联用多种数据分析方法^[60]。将线性方法和非线性模型结合,构建皂苷-靶点-通路网络,解析多成分协同机制;三是完善复方中皂苷的配伍规律研究。通过成分增删等方法系统干预复方组成,可结合谱效关系与一测多评的研究策略,明确皂苷与其他组分间的相互作用及其与整体药效的关联,利用一测多评技术实现多组分协同比例的精准定量与质量控制,从而深入阐明复方的整体疗效物质基础及配伍规律。虽然现代检测手段不断发展,但对微量的活性皂苷进行高敏度检测、结构-活性-谱效协同机制等问题的深入探索仍任重道远。

参考文献

- 1 Timilsena YP, et al. Perspectives on saponins: food functionality and applications[J]. Int J Mol Sci, 2023, 24: 13538.
- 2 Wu FJ, et al. Investigation of adsorption and desorption prop-

erties of total ginsenosides on anion-exchange resins and its LC-MS analysis[J]. Chin J Exp Tradit Med Form(中国实验方剂学杂志), 2021, 27: 127-136.

- 3 Gao YZ, et al. Effect of different steaming processes on variation of active ingredients in *Notoginseng Radix et Rhizoma* [J]. Chin J Exp Tradit Med Form(中国实验方剂学杂志), 2022, 28: 147-154.
- 4 Ren L, et al. Study on target identification and effect of saponin A on depressive disorder[J]. Nat Prod Res Dev(天然产物研究与开发), 2024, 36: 44-51.
- 5 Dong J, et al. Saponins regulate intestinal inflammation in colon cancer and IBD[J]. Pharmacol Res, 2019, 144: 66-72.
- 6 Zhang JF, et al. Research progress of traditional Chinese medicine quality control based on spectrum-effect correlation technology[J]. Chin Arch Tradit Chin Med(中华中医药学刊), 2025, 43: 205-209.
- 7 Noviana E, et al. Advances in fingerprint analysis for standardization and quality control of herbal medicines[J]. Front Pharmacol, 2022, 13: 853023.
- 8 Hao PS, et al. Application progress of data analysis techniques in the research of antioxidant spectrum-effect relationship for traditional Chinese medicine[J]. Chin J Mod Appl Pharm(中国现代应用药学), 2019, 36: 877-884.
- 9 Ran PL, et al. Analysis of total flavonoid antioxidant activity and spectrum-effect relationships in *Fubaiju* [J]. Mod Food Sci Technol(现代食品科技), 2025, 41: 112-121.
- 10 Zhao TT, et al. Establishment of fingerprints and spectrum-effect relationship of anti-fatigue and immunoregulatory activity of *Lycium barbarum* L polysaccharide [J]. Chin J Hosp Pharm(中国医院药学杂志), 2024, 44: 2829-2838.
- 11 Wang SC, et al. Establishment of HPLC fingerprint of *Yinqiao Powder* and relationship between spectrum and effect of its activity against influenza virus[J]. Pharmacol Clin Chin Mater Med(中药药理与临床), 2025, 41: 20-27.
- 12 Wang Y, et al. Investigation of spectrum-effect relationship of brain protection of *Shaoyao Gancaotang* on epileptic mice based on grey correlation analysis [J]. Chin J Exp Tradit Med Form(中国实验方剂学杂志), 2020, 26: 56-62.
- 13 Chen R, et al. Bioinformatics analysis of microRNAs related to blood stasis syndrome in diabetes mellitus patients [J]. Biosci, 2018, 38: BSR20171208.
- 14 Wu GH, et al. Mechanism of promoting blood circulation and hemostasis in *Panax notoginseng* (Burk) F. H. Chen and its application in improving blood stasis syndrome of kidney disease[J]. China J Tradit Chin Med Pharm(中华中医药杂志), 2019, 34: 3140-3142.
- 15 Ding YS, et al. Spectrum-effect relationship of the blood-acti-

- vating efficacy of *Notoginseng Radix et Rhizoma* [J]. *China J Chin Mater Med* (中国中药杂志), 2021, 46:4736-4743.
- 16 Li Y, et al. Multimodal integrated strategy for the discovery and identification of antiplatelet aggregation Q-markers in *Paris polyphylla* var. *yunnanensis* [J]. *Biomed Chromatogr*, 2024, 38:e5824.
- 17 Wu Q, et al. Study on traditional effect of *Panax notoginseng* based on network pharmacology [J]. *Chin Tradit Herb Drugs* (中草药), 2020, 51:3717-3727.
- 18 Liu J, et al. Screening and verification of hemostatic effective components group of *Panax notoginseng* based on spectrum-effect relationships [J]. *J Ethnopharmacol*, 2024, 321:117539.
- 19 Li QY, et al. Spectrum-effect relationship of hemostatic effects of *Notoginseng Radix et Rhizoma* with different commodity specifications [J]. *China J Chin Mater Med* (中国中药杂志), 2021, 46:4157-4166.
- 20 Liu H, et al. Focus on Notoginsenoside R₁ in metabolism and prevention against human diseases [J]. *Drug Des Devel Ther*, 2020, 14:551-565.
- 21 Zhang Y, et al. Regulatory effect and mechanism of ginsenosides on immune function [J]. *J Jiangsu Univ Med* (江苏大学学报:医学版), 2023, 33:455-460.
- 22 Lyu J, et al. Analysis for American ginseng saponins by LC-QTOF-MS/MS and study on the spectrum-efficacy relationship of its enhancement of immunity [J]. *China J Tradit Chin Med Pharm* (中华中医药杂志), 2020, 35:2298-2304.
- 23 Chen Q, et al. Screening immunomodulatory Q-markers in *Astragali Radix* based on UHPLC-QTOF-MS analysis and spectrum-effect relationship [J]. *Biomed Chromatogr*, 2024, 38:e6015.
- 24 Wang M, et al. Anti-tumor immunological mechanism of astragaloside II through activating CD45 PTPase [J]. *J Yunnan Univ Tradit Chin Med* (云南中医学院学报), 2021, 44:1-6.
- 25 Huang SW, et al. Effects of astragaloside IV on low-glucose mediated tumor immunosuppression microenvironment and its mechanism [J]. *Chin J Clin Pharmacol Ther* (中国临床药理学与治疗学), 2024, 29:1201-1211.
- 26 Jiang H, et al. Research progress on biosynthesis, *in vivo* and *in vitro* transformation, pharmacological effects, and quality control of astragalus saponins components [J]. *Shanghai J Tradit Chin Med* (上海中医药杂志), 2025, 59:80-93.
- 27 Lai M, et al. Research progress on anti-inflammatory action mechanism of dioscin [J]. *China Med Herald* (中国医药导报), 2025, 22:46-50.
- 28 Lyu SW, et al. Spectrum-effect relationships between fingerprints of *Caulophyllum robustum* Maxim and inhabited pro-inflammation cytokine effects [J]. *Molecules*, 2017, 22:1826.
- 29 Sun JT, et al. Establishment of HPLC fingerprints and the spectrum-effect relationship of *Sanguisorbae Radix* on inhibiting COX-2 [J]. *Chin J Hosp Pharm* (中国医院药学杂志), 2025, 45:2057-2063.
- 30 Liang Y, et al. Pharmacological effects of astragaloside IV: a review [J]. *Molecules*, 2023, 28:6118.
- 31 Xu BL, et al. Study on potential antioxidant quality markers of *Pulsatilla Radix* based on fingerprints and spectrum-effect correlation [J]. *Chin Tradit Herb Drugs* (中草药), 2025, 56:4427-4435.
- 32 Qi YT, et al. Antioxidant quality marker of *Centellae Herba* based on spectral-activity correlation analysis and bioinformatics [J]. *Chin Pharm J* (中国药理学杂志), 2025, 60:727-738.
- 33 Li JW, et al. Research progress on anti-tumor mechanisms of ginsenoside and their metabolites [J]. *Chin Arch Tradit Chin Med* (中华中医药学刊), 2021, 39:121-124.
- 34 Zhou X, et al. Spectrum-effect relationship between UPLC fingerprints and anti-lung cancer effect of *Panax ginseng* [J]. *Phytochem Anal*, 2021, 32:339-346.
- 35 Li RS, et al. Spectrum-effect relationship of anti-hepatoma activity from 3 kinds of genus *Paris* based on cluster analysis and grey relational analysis [J]. *Chin J Exp Tradit Med Form* (中国实验方剂学杂志), 2020, 26:192-198.
- 36 Zou SJ, et al. HPLC of total saponins in *Aralia elata* leaves and spectral efficiency analysis of its antitumor effect [J]. *Chin J Exp Tradit Med Form* (中国实验方剂学杂志), 2017, 23:13-17.
- 37 Geng J, et al. Ginsenoside-Rg₁ from *Panax notoginseng* prevents hepatic fibrosis induced by thioacetamide in rats [J]. *Eur J Pharmacol*, 2010, 634:162-169.
- 38 Gao Y, et al. Anti-inflammatory function of ginsenoside Rg₁ on alcoholic hepatitis through glucocorticoid receptor related nuclear factor-kappa B pathway [J]. *J Ethnopharmacol*, 2015, 173:231-240.
- 39 Zhang HF, et al. Spectrum-effect relationship of *Bupleurum chinense* for hepatoprotective effect based on cluster analysis and typical correlation analysis [J]. *Chin Tradit Herb Drugs* (中草药), 2013, 44:2696-2702.
- 40 Zhang Y, et al. Study on the fingerprint of total saponins from *Mussaenda pubescens* and the spectrum-effect relationship of its hepatoprotective activity [J]. *China Pharm* (中国药房), 2023, 34:2715-2720.
- 41 Yang YT, et al. Quality evaluation of black *Panacis Quinque-*

- folii Radix based on neuroprotective spectrum-effect relationship[J]. Chin J Exp Tradit Med Form(中国实验方剂学杂志), 2025, 31: 149-156.
- 42 Sun A, et al. Neuroprotection by saponins[J]. Phytother Res, 2015, 29: 187-200.
- 43 Tong Y, et al. Saikosaponin a acativates tet1/dll3/notch1 signalling and promotes hippocampal neurogenesis to improve depression-like behavior in mice [J]. J Ethnopharmacol, 2024, 319: 117289.
- 44 Hao Y, et al. Effect of saikosaponin a on neuroprotection and neuronal excitability of epilepsy[J]. Northwest Pharm J(西北药学杂志), 2023, 38: 37-42.
- 45 Zhu SL, et al. Neuroprotective effects and mechanism of saikosaponin A on acute spinal cord injury in rats[J]. Repar Reconstr Surg(中国修复重建外科杂志), 2017, 31: 825-829.
- 46 Wang XM, et al. Study on the neuroprotective mechanism of saikosaponin D on rats with cerebral hemorrhage[J]. J Clin Neurol(临床神经病学杂志), 2023, 36: 208-215.
- 47 Li J, et al. Target cell extraction and spectrum-effect relationship coupled with BP neural network classification for screening potential bioactive components in ginseng extract with a protective effect against myocardial damage[J]. Molecules, 2024, 29: 2028.
- 48 Xia W, et al. Study on the spectrum-effect relationship of the traditional effect of saponins in *Glycyrrhiza uralensis* Fisch [J]. Int J Anal Chem, 2021, 2021: 1-9.
- 49 Wang ZY, et al. Study on the spectrum-effect relationship of ginsenoside regulating expression of HIF-1 α under AGEs based on retinal Müller cells[J]. Pharmacol Clin Chin Mater Med(中药药理与临床), 2017, 33: 91-95.
- 50 Lin M, et al. Screening anti-fatigue components of American ginseng saponin by analyzing spectrum-effect relationship coupled with UPLC-Q-TOF-MS [J]. Asian Biomedicine, 2023, 17: 163-172.
- 51 Zhang QQ, et al. Pharmacodynamic components of Qiye Shen'an Tablets based upon spectrum-effect relationship[J]. Chin J Hosp Pharm(中国医院药学杂志), 2024, 44: 2799-2805.
- 52 Zhang C, et al. Components study on antitussive effect and holistic mechanism of Platycodonis Radix based on spectrum-effect relationship and metabonomics analysis[J]. J Chromatogr B, 2021, 1173: 122680.
- 53 Hou MY, et al. Spectrum-effect relationship of Bupleuri Radix processed with *Trionyx sinensis* blood for Yin deficiency based on saponins[J]. Chin J Exp Tradit Med Form(中国实验方剂学杂志), 2025, 31: 147-155.
- 54 Yang Y, et al. Spectral-effect relationship between HPLC fingerprint and cell proliferation and differentiation of crude and sweated Dipsaci Radix [J]. Chin Tradit Herb Drugs(中草药), 2019, 50: 3909-3916.
- 55 Yao L, et al. Spectrum-activity relationship of extract from *Ilex latifolia* on inhibition of xanthine oxidase[J]. Chin Tradit Herb Drugs(中草药), 2018, 49: 4838-4843.
- 56 Yu BB, et al. Quality markers screening of drug pair decoction of Bupleuri Radix and Scutellariae Radix by UPLC-Q-Exactive Orbitrap-MS spectrum-effect correlation technology and establishment of content determination method[J]. Chin Tradit Herb Drugs(中草药), 2022, 53: 1983-1992.
- 57 Liu JJ, et al. Spectrum-fect relationship of Ginseng Radix et Rhizoma Rubra and Polygonum Multiflorum Radix Preparata medicinal pair in protection of nerve cells[J]. Chin J Pharmacovigil(中国药物警戒), 2023, 20: 623-628.
- 58 Wang Y, et al. Multi-dimensional spectrum-effect relationship of the impact of Chinese herbal formula Lichong Shengsui Yin on ovarian cancer[J]. Molecules, 2017, 22: 979.
- 59 Zheng XF, et al. Spectrum-effect relationship of ethyl acetate fraction in ethanol extract from Xiaoyaosan (XYE-E) for antidepressant effect based on ^1H NMR[J]. Mod Tradit Chin Med Mater Med World Sci Technol(世界科学技术-中医药现代化), 2015, 17: 563-568.
- 60 Lyu SW, et al. Advance in application of data analysis technique in spectrum-effect relationship of traditional Chinese medicines[J]. Chin J Exp Tradit Med Form(中国实验方剂学杂志), 2015, 21: 226-230.