

SCIEX高分辨质谱联合MExplorer Ultimate赋能中药现代化研究应用案例

Application Cases of SCIEX High-Resolution Mass Spectrometry and MExplorer Ultimate in Empowering Modernization Research of Traditional Chinese Medicine

满卓¹, 司丹丹¹, 陈爱明², 傅川碧²

Zhuo Man¹, Dandan Si¹, Aiming Chen², Chuanbi Fu²

¹ SCIEX应用支持中心, 中国; ² 大连达硕

Key words: MExplorer Ultimate; Metabolomics; ZenoTOF

背景

本应用案例聚焦中药现代化核心研究方向：中药复方治疗自身免疫性疾病、中药干预代谢性肾病，针对行业关键技术痛点提供解决方案：中药复方成分复杂，活性物质定性模糊且作用靶点不明确，制约中药作用机制解析；代谢性疾病相关肾损伤缺乏精准代谢标志物，中药调节代谢紊乱与肠道菌群的协同机制尚未阐明；影响中药在代谢性疾病领域的精准应用。这些难题直接关乎中药产业规范化发展与临床诊疗水平提升，亟须先进的代谢组学分析技术与工具提供支撑。

高分辨代谢组学凭借全面捕获代谢物动态变化、精准鉴定低丰度成分的技术优势，成为破解中药作用机制与代谢性疾病研究瓶颈的核心手段。通过与高分辨质谱技术结合，可实现从复杂中药样本与生物样本中快速筛选差异成分、锁定核心标志物与调控通路，突破传统分析方法覆盖度低、定性不准、效率低下的局限，为中药现代化研发与临床代谢性疾病干预提供深度数据支撑。

SCIEX旗下ZenoTOF 7600、ZenoTOF 7600+、ZenoTOF 8600等高分辨质谱仪器，以高灵敏度、高分辨率、高稳定性的性能优势，为中药成分解析与生物样本高精度检测提供高质量原始数据。MExplorer Ultimate（ME软件网址：www.chemdatasolution.com；邮箱：contact@chemdatasolution.com）作为大连达硕与SCIEX联



合研发的一站式代谢组学数据分析平台，核心亮点突出：一站式全流程分析覆盖从数据导入到报告生成完整环节；实时数据质控保障数据可靠性；超大规模定性依托100万+二级质谱库实现中药成分与生物代谢物的精准广泛鉴定；智能化差异分析一键完成筛选与解析；兼容SCIEX全系列质谱并支持多工具对接，大幅降低分析门槛，高效解决中药研究中的核心痛点。

案例一：基于代谢组学解析金匱肾气丸靶向PAD4抑制NETosis改善银屑病的作用机制

1. 研究背景

银屑病作为复杂的炎症性免疫性皮肤病，以角质形成细胞异常



增殖和鳞屑性红斑为特征，中医认为其发病与肾气不足、瘀血阻滞密切相关。金匱肾气丸（JKSQD）源自《金匱要略》，由熟地黄、附子、山药等八味中药组成，具有温补肾阳、活血化痰的经典功效，但

其治疗银屑病的具体作用机制尚未明确。NETosis（中性粒细胞胞外诱捕网形成）是银屑病发病的关键环节，PAD4（肽酰精氨酸脱亚胺酶为NETosis核心调控因子，亟须通过代谢组学技术揭示这一经典中药复方的分子作用机制。

2. 仪器与实验样本信息

仪器：SCIEX ZenTOF 7600+质谱仪

样本：8周龄C57BL/6小鼠三十五只（分为假手术组、IMQ诱导银屑病模型组、JKSQD低剂量组、JKSQD高剂量组、地塞米松阳性对照组）；健康供者外周血分离的中性粒细胞；小鼠皮肤组织及血浆样本；JKSQD水提物样本。

3. 实验方法

采用IMQ诱导构建小鼠银屑病模型，给予JKSQD干预5天后采集皮肤组织与血浆样本；通过UPLC-Q-TOF-MS/MS技术鉴定JKSQD中的活性成分；结合蛋白质组学、代谢组学分析筛选差异蛋白与代谢物；通过免疫荧光、Western blot、ELISA等实验验证PAD4/NETs相关指标；

利用ME软件完成质谱数据的峰提取、定性定量、差异筛选与通路分析，全流程覆盖从中药成分解析到生物机制验证的核心环节。

4. 研究结果

(1) 成分鉴定：鉴定出JKSQD中73种活性成分，涵盖三羧酸循环代谢物及黄酮类化合物等，为其抗炎作用提供物质基础。

(2) 疗效验证：JKSQD显著改善银屑病小鼠皮肤病变，降低表皮厚度与IL-17a、IL-23、TNF- α 等炎症因子表达，有效恢复皮肤稳态。

(3) 靶点筛选：蛋白质组学筛选出PAD4等NETs相关差异蛋白，JKSQD通过显著下调PAD4表达抑制NETs形成，高剂量组效果更优。

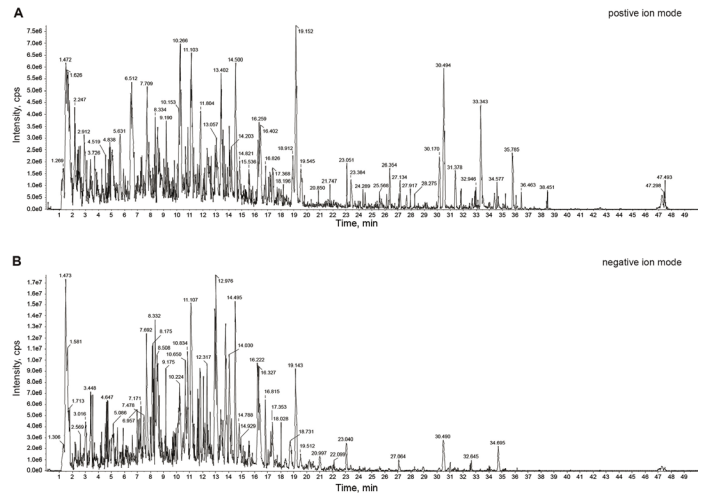


图1. JKSQD水提物正负离子模式总离子流图

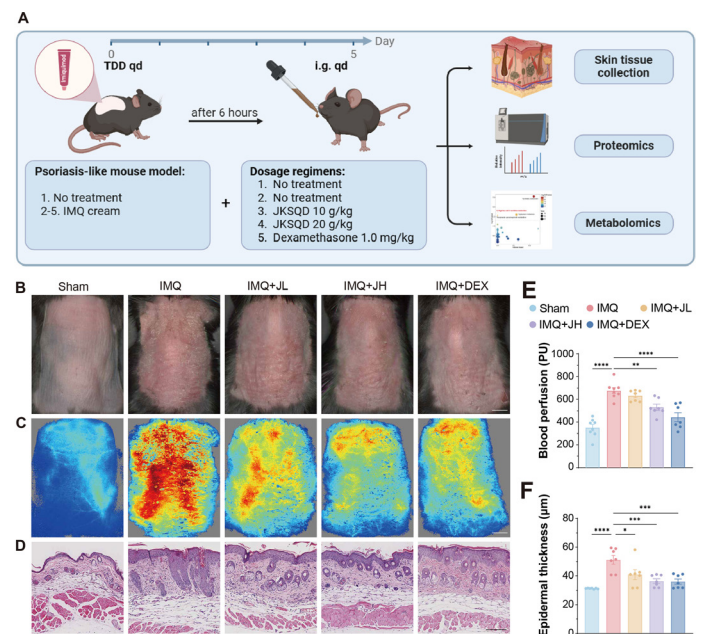


图2. 小鼠皮肤外观、血流灌注及表皮厚度分析图

(4) 机制揭示：代谢组学分析表明JKSQD特异性调控D-精氨酸和D-鸟氨酸代谢通路，通过降低精氨酸酶活性、下调Arg1 mRNA表达恢复代谢稳态。

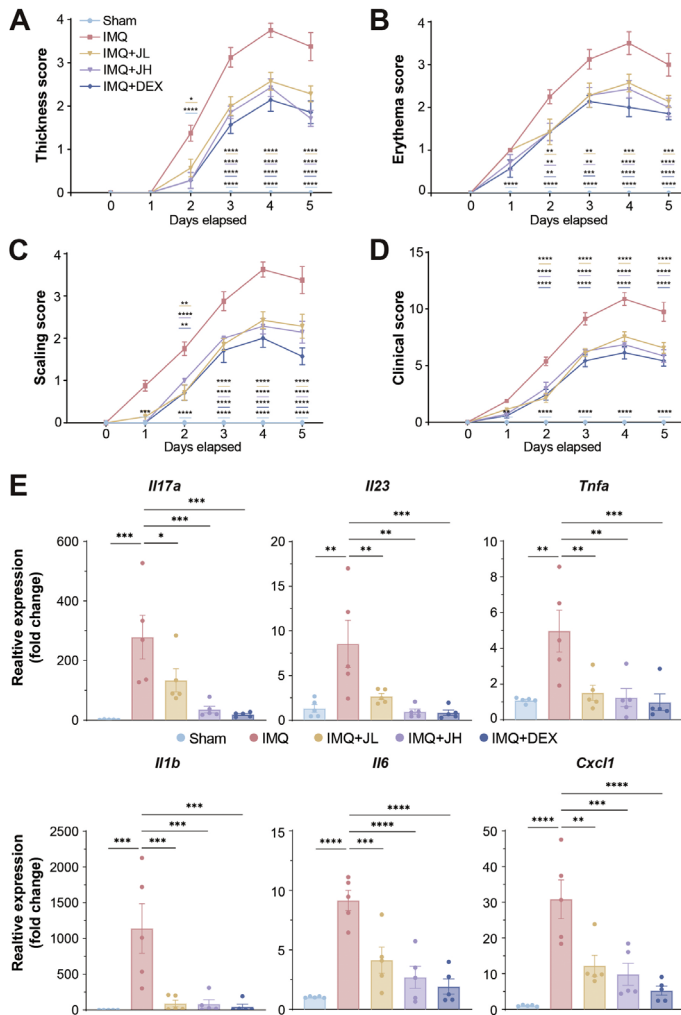


图3. 炎症因子mRNA表达柱状图

5. 结论与展望

本研究明确金匱腎氣丸通过靶向PAD4抑制NETosis，调控D-精氨酸和D-鸟氨酸代谢通路，显著改善银屑病炎症进展，为中药治疗自身免疫性疾病提供了明确的分子机制与实验依据。未来可基

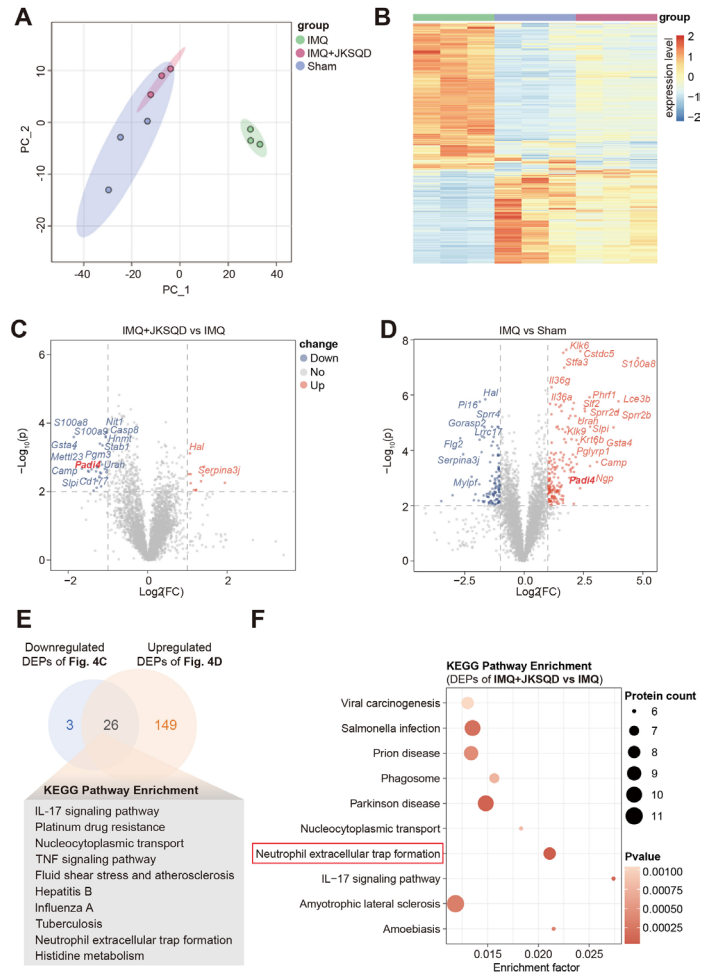


图4. 蛋白质组学PCA得分图与火山图

于ME的拟靶向分析功能，进一步追踪复方中单体成分与核心靶点的动态关联，深入阐明中药复方“多成分-多靶点”的协同作用机制，为中药复方的精准开发与二次创新提供技术支撑。

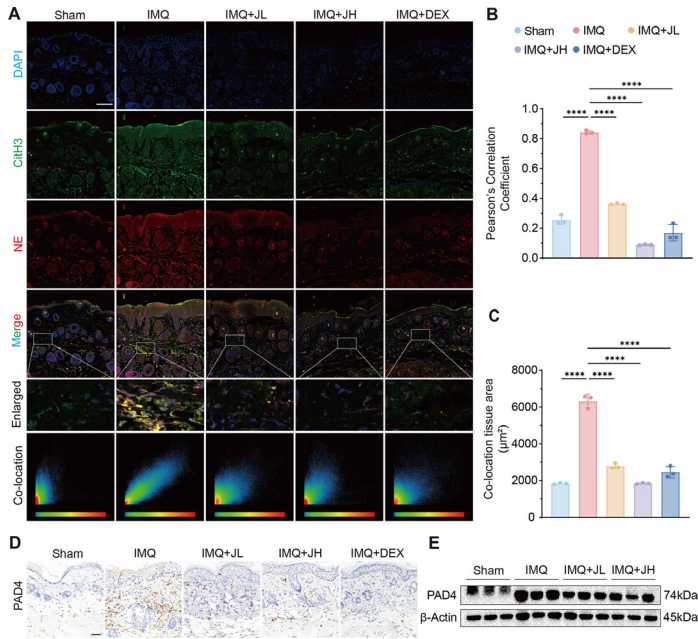


图5. 皮肤组织PAD4免疫组化与Western blot 结果

案例二：基于靶向代谢组学解析虎杖纠正氨基酸代谢紊乱改善高尿酸血症肾损伤的作用机制

1. 研究背景

高尿酸血症 (HUA) 是代谢性肾病的重要诱因, 其引发的氨基酸代谢紊乱与肠道菌群失调会进一步加剧肾损伤。虎杖作为传统中药, 其主要活性成分包括白藜芦醇、大黄素、虎杖苷等, 具有降尿酸、护肾、抗炎的药理作用, 但该中药通过调节氨基酸代谢与肠道菌群改善肾损伤的具体机制尚未明确。临床缺乏精准代谢标志物用于HUA肾损伤的早期诊断, 亟须通过靶向代谢组学技术揭示虎杖的核心调控路径。



2. 仪器与实验样本信息

仪器: SCIEX TripleQuad 6500+、ZenoTOF 7600系统

样本: 91例高尿酸血症患者与99例健康对照者血清样本; 6周

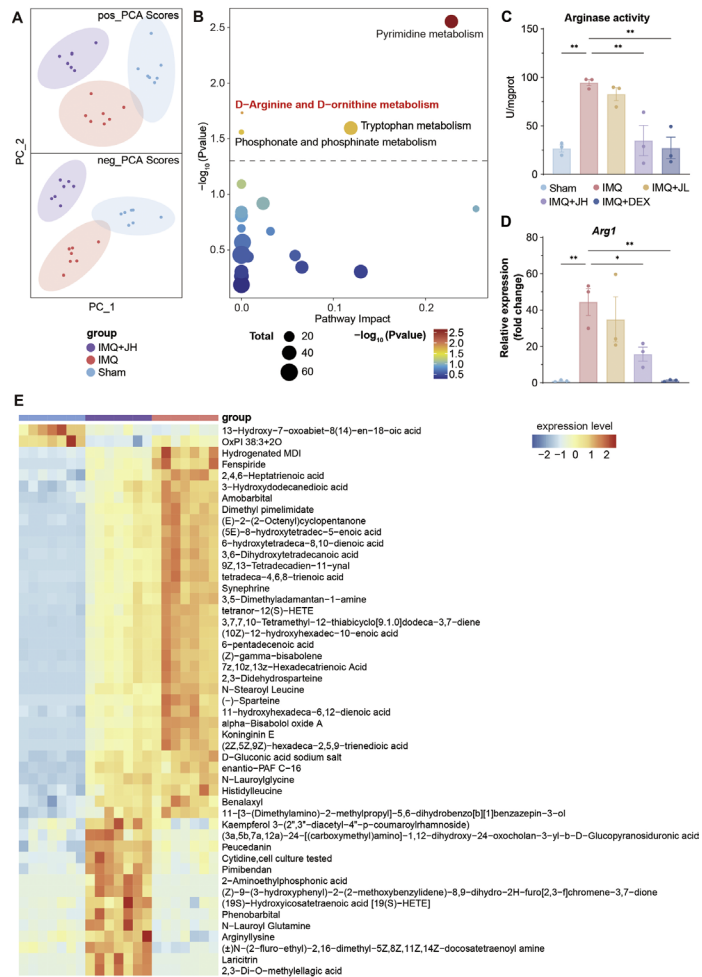


图6. 代谢组学PCA得分图与通路富集图

龄SD大鼠四十八只 (分为正常对照组、HUA模型组、别嘌醇阳性对照组、虎杖低/中/高剂量组); 大鼠肾组织、血清及盲肠内容物样本; 虎杖乙醇提取物样本。

3. 实验方法

采用氧嗪酸钾+腺嘌呤诱导构建大鼠HUA模型, 给予虎杖提取物干预2周后采集相关样本; 通过UPLC-TQ-MS定量分析虎杖中白藜芦醇、大黄素等6种主要活性成分; 结合非靶向与靶向氨基酸代谢组学、转录组学、16SrRNA测序, 系统分析人体与大鼠血清及肾组织中的氨基酸代谢变化、肠道菌群组成及肾组织基因表达差异; 利用ME软件完成肾组织非靶向代谢组学数据的处理与差异分析, 明确核心代谢标志物与调控通路。

4. 研究结果

(1) 临床标志物筛选: 临床样本分析发现, 高尿酸血症患者血清亮氨酸、苯丙氨酸、酪氨酸水平显著升高, 且与尿酸、肌酐水平呈正相关, 可作为HUA肾损伤的潜在代谢标志物。

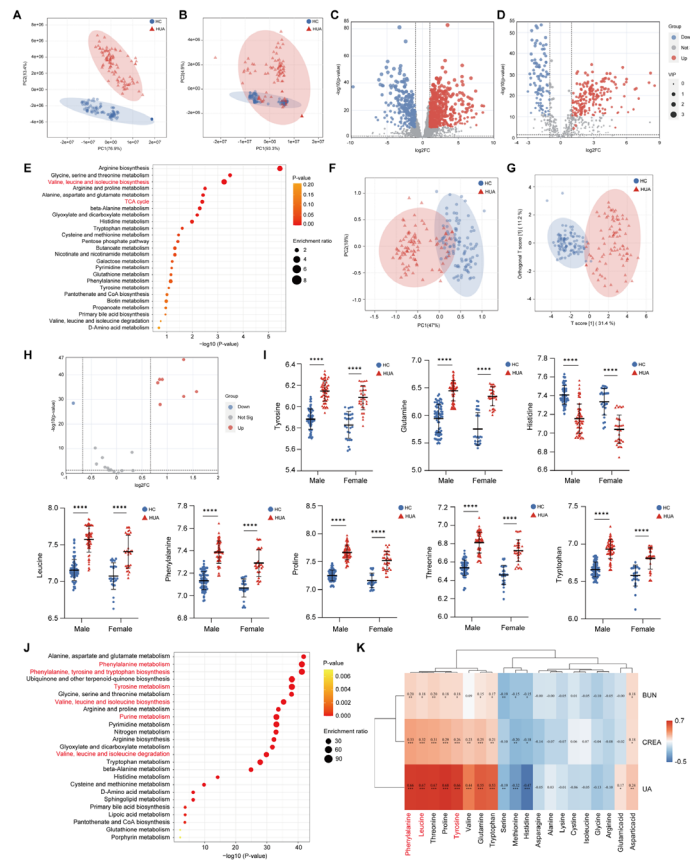


图7. 患者血清差异氨基酸火山图与相关性图

(2) 药效与代谢纠正: 虎杖干预显著降低HUA大鼠血清尿酸、尿素氮、肌酐水平, 改善肾脏组织病理损伤, 且能剂量依赖性逆转亮氨酸、苯丙氨酸、酪氨酸的异常升高, 纠正氨基酸代谢紊乱。

(3) 肠-肾轴调控: 虎杖调节HUA大鼠肠道菌群结构, 提高Bacteroides、Bifidobacterium等有益菌丰度, 降低Neisseria、Streptococcus等有害菌比例, 减少马尿酸、吡咯硫酸盐等肠道来源尿毒症毒素生成, 修复“肠-肾轴”平衡。

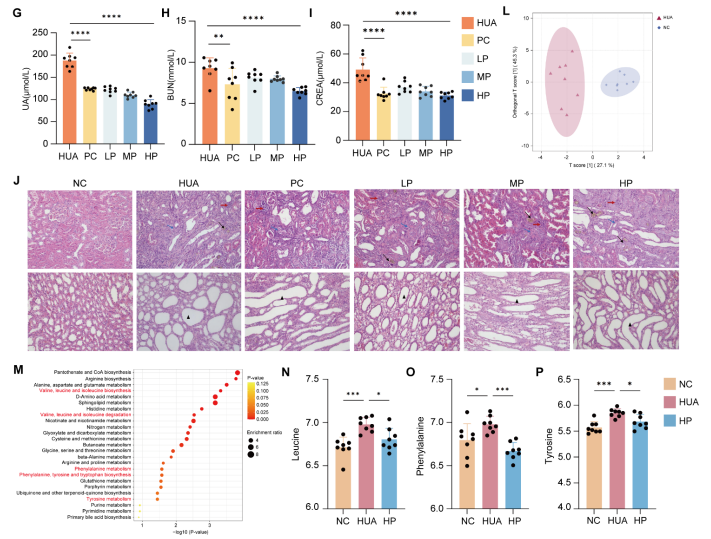


图8. 大鼠血清生化指标与肾脏组织病理切片图

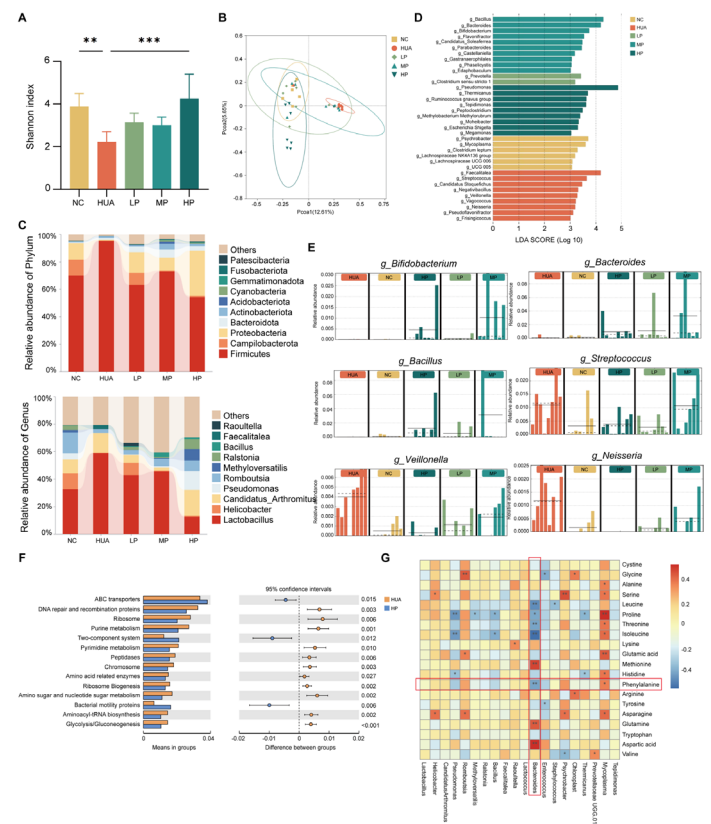


图9. 肠道菌群 Alpha 多样性与 PCoA 分析图

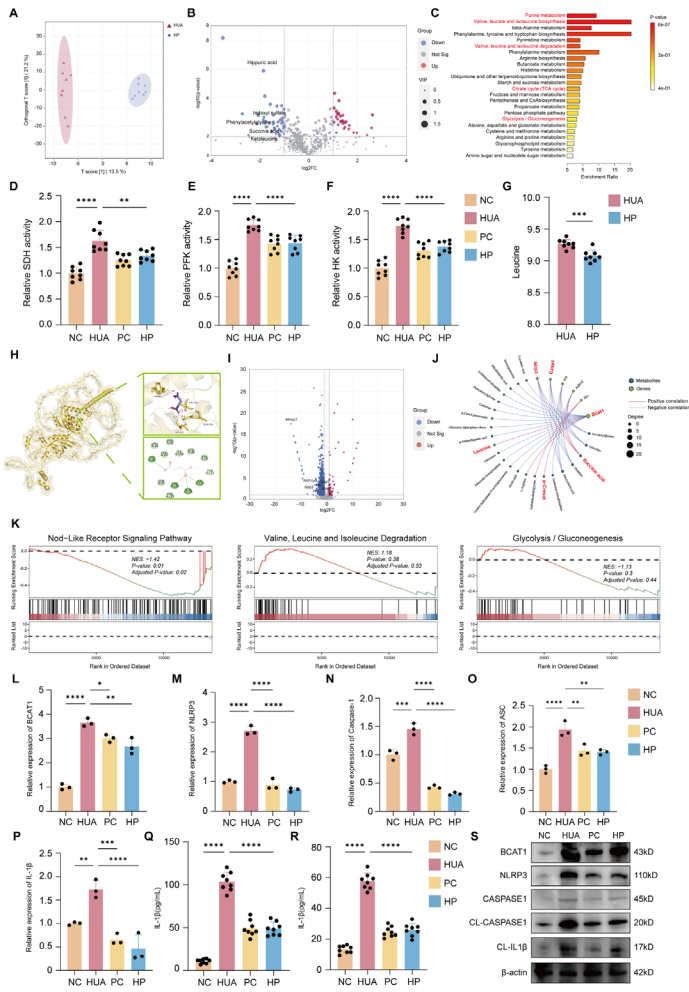


图10. 肾组织差异代谢物火山图与通路富集图

(4) 分子机制验证: 代谢组学与转录组学联合分析表明, 虎杖通过抑制BCAT1表达, 调控亮氨酸代谢与糖酵解通路, 抑制NLRP3炎症小体激活, 减轻肾组织炎症损伤验证中药调控机制。

5. 结论与展望

本研究证实虎杖通过纠正亮氨酸、苯丙氨酸等氨基酸代谢紊乱, 调节肠道菌群平衡, 抑制BCAT1-NLRP3通路激活, 从而改善高尿酸血症诱导的肾损伤, 明确了该中药“调节代谢-重塑菌群-抑制炎症”的协同作用机制。未来可借助ME的多组学数据整合功能, 进一步构建“中药成分-肠道菌群-代谢物-基因”的关联网络, 明确虎杖中白藜芦醇、大黄素等单体成分的特异性作用靶点, 为中药的精准应用与功能食品开发提供科学依据。

ME Explorer Ultimate赋能: 中药现代化研究的核心解决方案

ME深度贴合中药复方解析、中药单体机制研究的核心需求, 以“精准、高效、智能”的核心能力破解中药研究痛点:

一站式全流程分析: 覆盖数据导入、实时质控、峰表提取、定性定量、差异筛选、通路解析至报告生成完整链路。在金匱肾气丸活性成分鉴定、虎杖代谢调控分析中, 实现中药样本与生物样本数据的高效整合与深度解析, 避免多工具切换导致的数据损耗;

超大规模定性: 依托100万+二级质谱库与多级定性体系, 快速完成中药复方中73种活性成分、HUA相关20余种氨基酸的精准鉴定, 解决中药复杂成分与生物代谢物定性覆盖度低、准确性不足的核心难题;

智能化差异分析: 支持正负离子整合分析与PCA、火山图等统计工具, 快速锁定PAD4、BCAT1等中药作用靶点, 筛选氨基酸代谢、D-精氨酸代谢等核心调控通路, 同时支持代谢组学与蛋白质组学、肠道菌群数据的联合关联, 构建中药“多成分-多靶点-多通路”的完整研究链条;

多维度数据整合: 搭配严格实时数据质控与人性化兼容设计, 保障中药复杂基质与生物样本的数据可靠性, 无缝对接SCIEX全系列质谱仪器, 降低分析门槛, 助力科研人员高效产出高质量中药研究成果。

总结

本应用案例集聚焦经典中药复方治疗自身免疫性疾病、传统中药干预代谢性肾病两大核心研究方向, 通过SCIEX高分辨质谱与ME软件的深度协同, 成功破解了中药作用机制不明确、中药成分定性难、临床代谢标志物缺乏等行业关键技术痛点。SCIEX ZenoTOF 7600+、6500+等仪器凭借卓越性能提供高质量原始数据, ME则以一站式全流程分析、超大规模定性、智能化差异筛选等核心功能, 实现从中药成分鉴定到生物机制验证的高效转化, 大幅提升了中药研究的效率与解析准确性。

二者的联合应用, 不仅为金匱肾气丸、虎杖等中药的现代化研发提供了科学可靠的技术方案, 更彰显了其在中药成分解析、作用机制研究、临床关联分析中的广泛适用性与核心竞争力。未来, 随着技术持续迭代, SCIEX高分辨质谱与ME将进一步拓展应用场景, 为中药复方二次开发、中药单体精准靶向研究、中药临床疗效评价等领域的创新发展提供更强大的技术支撑, 助力中药现代化与国际化进程。

参考文献

1. Zhao W, Liu X, Tang J, et al. Jinkui Shenqi decoction targets PAD4 to restrain NETosis and ameliorates psoriasis progression[J]. Phytomedicine, 2025, 139:156543.
2. Ma Y, Peng L, Song H, et al. Polygonum cuspidatum alleviates hyperuricemia-induced renal injury via rectifying amino acid metabolism disorders[J]. Phytomedicine, 2026, 150: 157653.

SCIEX临床诊断产品线仅用于体外诊断。仅凭处方销售。这些产品并非在所有国家地区都提供销售。获取有关具体可用信息，请联系当地销售代表或查阅<https://sciex.com.cn/diagnostics>。所有其他产品仅用于研究。不用于临床诊断。本文提及的商标和/或注册商标，也包括相关的标识、标志的所有权，归属于AB Sciex Pte. Ltd. 或在美国和/或某些其他国家地区的各权利所有人。

© 2026 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. RUO-MKT-02-37862-ZH-A



SCIEX中国

北京分公司
北京市昌平区生命科学园科学园路
18号院A座一层
电话：010-5808-1388
传真：010-5808-1390

全国咨询电话：800-820-3488, 400-821-3897

上海公司及中国区应用支持中心

上海市长宁区福泉北路518号
1座502室
电话：021-2419-7201
传真：021-2419-7333

官网：sciex.com.cn

广州办公室

广州国际生物岛星岛环北路1号
B2栋501、502单元
电话：020-8842-4017

官方微信：[SCIEX-China](#)