

doi: 10.12452/j.fxcxb.26041603

便携式质谱仪的研制及其在中药材分析中的应用

易依依¹, 朱腾高¹, 余欣慧², 洪杰^{2*}, 陈焕文^{1*}

(1. 江西中医药大学 恶性肿瘤中医药诊疗与康复江西省重点实验室, 江西 南昌 330004; 2. 昆山聂尔精密仪器有限公司, 江苏 苏州 215316)

摘要: 传统质谱仪因体积大、功耗高、需高真空环境及复杂样品前处理, 难以直接应用于野外或现场分析。该文研制了一款质量轻、低功耗、易携带的质谱仪, 具备现场快速检测能力。该仪器采用小型连续大气压接口与复合离子漏斗结构, 显著提升了离子传输效率与分析稳定性。结合正弦波频率扫描与四极增强偶极共振激发技术, 在保持单位质量分辨率($\text{FWHM} < 1 \text{ Da}$)的同时, 实现了高质量范围内的灵敏检测。仪器整体质量约22 kg, 尺寸为44 cm×30 cm×40 cm, 功耗低于330 W。在中药材分析中, 该便携式质谱仪结合内部萃取电喷雾电离(iEESI)技术展现出良好的应用潜力, 可实现芳香类药材挥发性等成分的原位检测与指纹图谱构建, 为中药质量现场监控与溯源提供了可靠技术支撑。未来, 通过拓展离子源类型与整合数据库系统, 便携式质谱仪有望在中药现代化进程中发挥更广泛的作用。

关键词: 便携式质谱仪; 中药材; 快速检测; 质量控制; 现场分析

中图分类号: O657.63; R284 **文献标识码:** A **文章编号:** 1004-4957(2026)08-1653-09

Development of a Portable Mass Spectrometer and Its Application in the Analysis of Traditional Chinese Medicine

YI Yi-yi¹, ZHU Teng-gao¹, YU Xin-hui², HONG Jie^{2*}, CHEN Huan-wen^{1*}

(1. The Key Laboratory for Diagnosis, Treatment, and Rehabilitation of Cancer using Chinese Medicine, Jiangxi University of Chinese Medicine, Nanchang 330004, China; 2. Kunshan Nier Precision Instrumentation Inc., Suzhou 215316, China)

Abstract: Traditional mass spectrometers are difficult to be applied directly to field or on-site analysis due to their large size, high power consumption, the need for a high vacuum environment and complex sample pretreatment. Herein, a lightweight, low-power, portable mass spectrometer has been developed, featuring the ability for on-site rapid detection. A small-sized continuous atmospheric pressure interface and a composite ion funnel structure were employed in this mass spectrometer, significantly enhancing the ion transmission efficiency and analytical stability. In terms of the mass-analysis, the sine-wave frequency scanning and quadrupole-enhanced dipole resonance excitation were combined, and a high-sensitivity detection within a wide range of quality has been achieved, while maintaining the resolution of unit mass ($\text{FWHM} < 1 \text{ Da}$). In normal operation, the weight of the instrument is about 22 kg, with a volume of 44 cm×30 cm×40 cm, and it runs at under 330 W. In the analysis of Chinese medicine, the portable mass spectrometer has shown good application potential, combined with internal extraction electrospray ionization (iEESI) technology. It can realize the in-situ detection and fingerprint construction of volatile components of aromatic Chinese medicine, providing reliable technical support for on-site monitoring and traceability of the quality of traditional Chinese medicine. In summary, by expanding the types of ion sources and integrating the database system, portable mass spectrometers have great potential in the modernization research of traditional Chinese medicine.

Key words: portable mass spectrometer; traditional Chinese medicine; rapid detection; quality control; on-site analysis

收稿日期: 2026-04-16; **修回日期:** 2026-06-27

基金项目: 江西中医药大学校级科技创新团队发展项目(CXTD22005); 中央本级重大增减支项目“名贵中药资源可持续利用能力建设”项目(2060302)

* **通讯作者:** 洪杰, 博士, 高级实验师, 研究方向: 质谱应用分析、快检质谱仪研发, E-mail: 19820823hj@163.com
陈焕文, 博士, 教授, 研究方向: 质谱分析、质谱制备、仪器研制, E-mail: chw8868@gmail.com

网络首发日期: 2026-06-30

传统质谱分析涵盖样本获取、前处理、质量检测及数据分析等多个步骤。尽管质谱仪对分子的质量检测可在毫秒级内完成,但样品采集与前处理往往耗时较长,这极大地延长了整体分析周期,限制了样品分析效率。目前的常规实验室质谱仪体积大、功耗高、操作复杂、维护成本高^[1],极大地约束了质谱分析的应用场景,使其只能在实验室中进行,无法满足现场实时、在线、快速检测分析的需求。因此,体积小、功耗低、操作简易且成本较低的便携式质谱仪是现场快速分析的重要工具,在中药材的品质快速鉴定、质量评价及野外现场分析等方面具有广泛用途。

质谱系统尺寸与功耗在很大程度上由真空系统决定。真空系统与大气压接口的设计是质谱仪小型化的核心瓶颈,既要借助小型真空泵实现高真空状态,又要高效导入样品离子。传统接口技术受限于真空容量,难以兼顾灵敏度、速度和通用性。小型质谱仪的大气压接口(API)一般可分为3种类型,包括膜进样接口(MI)、非连续大气压接口(DAPI)和连续大气压接口(CAPI)。早期针对挥发性有机化合物(VOCs)的分析多采用MI^[2],其通过半透膜选择性富集VOCs,同时排除大部分空气成分,为不破坏真空环境的选择性采样提供了简便方法。但MI仅对VOCs具有良好透过性,适用化合物范围有限,且聚二甲基硅氧烷(PDMS)等膜材料易吸附或溶解有机物,清洗耗时较长,连续检测不同样品时易产生交叉污染。同时,离子源与膜的真空侧通常置于质量分析器的同一腔室中,电离区域的工作压力因此受到限制,这可能会降低电离效率^[3]。为实现更广泛的样品类型分析,特别是与大气压电离源的耦合,DAPI与CAPI相继被研制出来。DAPI采用脉冲式进样方式^[4],在维持系统真空度与实现高效离子传输之间取得较好平衡,显著降低真空泵功率需求,是实现质谱仪小型化的关键创新之一。而CAPI则通过采用细长毛细管和分级抽真空设计,提供更为稳定的进样条件,但通常需更高功率的真空泵维持真空度。

为适应现场检测的迫切需求,质谱仪的小型化已成为当前质谱技术发展的重要方向之一^[5]。例如,北京理工大学的徐伟等^[6]于2015年研制了第一台CAPI接口的微型质谱仪,该仪器的总尺寸约为30 cm×30 cm×18 cm,系统重量约为6 kg。采用两级真空系统和带双曲面电极的线性离子阱(LIT),摒弃了DAPI的机械开关来控制真空和离子引入,通过施加电压来精确控制离子的持续引入时间,提高了仪器的鲁棒性和稳定性。配备CAPI的微型质谱仪具有环境适应性强、性能稳定、重复性高、质谱分析速度快的特点,能够在常温环境下与各种原位电离技术耦合,同时具备可接受的质谱分辨率和灵敏度。这些特点使微型质谱仪在不同的原位化学分析领域中得到广泛应用。

在中药材分析中,样品普遍存在基质干扰强、化学成分复杂、含量差异跨度大等特点,传统分析方法往往面临前处理流程繁琐、耗时长、样品耗量大、分析通量低的限制^[7-8]。微型质谱仪结合原位电离质谱技术,如内部萃取电喷雾电离质谱(iEESI-MS)、中性解吸电喷雾萃取电离质谱(ND-EESI-MS),可实现无需样本前处理的灵敏、快速检测,有望为中药质量控制、药效物质基础研究及相关代谢动力学分析提供强有力的技术支撑。因此,发展兼具便携性与高性能的微型质谱技术,并拓展其在中医药等复杂体系中的应用,具有重要的科学研究价值与实际应用前景。

本研究研制了一台与iEESI技术联用的便携式离子阱质谱系统,旨在解决传统质谱仪体积大、功耗高、操作复杂、依赖实验室环境而难以满足现场快速检测需求的问题。该系统在CAPI中集成了微型离子漏斗,有效突破了离子传输效率和真空度的瓶颈,提升了仪器的便携化与现场适应能力。本文介绍了该系统的关键部件、整机设计及性能指标,并对八角茴香、陈皮等代表性芳香中药材进行了实际检测,实现了其主要化学成分的快速质谱表征。此外,针对实际应用中可能遇到的高含水量、高油脂及高胶质等复杂中药基质,进一步探讨了该方法的适用性,以评估该技术在不同类型中药材分析中的潜力与局限。

1 便携式质谱仪的研制

便携式质谱仪的整机设计以实现轻量化、低功耗和现场快速检测为核心目标^[9-10]。整机系统采用紧凑型模块化架构,将离子源、真空系统、离子漏斗与离子传输透镜、质量分析器以及检测器等高度集成于具备电磁屏蔽功能的轻质外壳内;外壳设计充分考虑散热与人机工程学,以适应野外、车载等移动应用场景的震动与温湿度变化。整机工作流程始于样品引入与离子化,经由大气压接口将离子传输

至真空区,通过离子导向组件聚焦后进入质量分析器进行质量分离,最终由检测器捕获离子信号并转换输出质谱图。

1.1 离子源

1984年,Fenn等^[11]首次报道了电喷雾电离(ESI),在高电压和雾化作用下将溶液分散成带电液滴,经溶剂蒸发和库仑裂变产生气相离子,实现了生物大分子的电离,成为广泛应用的电离技术。2006年,Chen等^[12]提出了电喷雾萃取电离(EESI),该技术采用双喷雾器设计,通过液-液萃取与电荷转移实现离子化,可直接分析液体、气溶胶及固体表面样品^[13]。Zhang等^[14]针对大体积块状样品内部成分分析进一步发展了iEESI技术。该电离技术将带电溶剂直接注入样品内部,形成稳定电喷雾羽流实现离子化,可在无需样品预处理的情况下对中药材、食品、动植物组织等复杂样品进行分析。

本研究构建了一个iEESI电离源(图1),用金属电极前端轻微刮取中药材样本进行采样,将其放入含萃取剂的毛细管中,并在金属电极末端施加高压,从而在毛细管出口产生电喷雾电离。该电离源是一种无泵装置,利用毛细管力实现液体的自吸取样。其结构非常简单,具备一次性使用特性,解决了残留污染的问题。此外,通过灵活选择萃取溶剂的极性和组成,可以实现对不同极性分析物的选择性萃取,从而提高检测灵敏度和选择性,同时节省了溶剂用量(单次溶剂用量仅20 μL),更贴近绿色分析化学的理念。整个操作过程简单、快速,无需样品前处理,具有样本量小和可提供快速的现场结果的优点,真正满足了便携式质谱仪对现场快速、深度分析的需求^[15]。

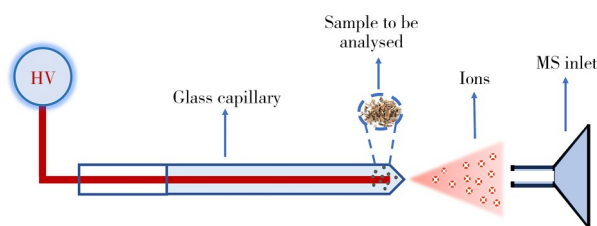


图1 内部萃取电喷雾电离源示意图

Fig. 1 Schematic of the internal extraction electrospray ionization source

1.2 真空系统

真空系统是质谱仪实现灵敏、准确检测的关键组成部分,具有维持离子化、离子传输、质量分析和离子检测等过程气压环境的重要作用,然而,真空系统也是质谱仪小型化的主要障碍。该系统主要由真空腔体、机械泵和涡轮分子泵组成。真空腔体为真空环境的形成提供必要的密闭空间,机械泵用于建立初级真空并作为涡轮分子泵的前级泵,涡轮分子泵则提供系统所需的高真空条件,确保质量分析器与检测器的正常工作^[16]。

便携式质谱仪的核心进样与质量分析区在真空构架下的关键技术组件如图2所示。该系统采用微型差动真空设计^[7],通过两级分区的方式,其功能相当于传统系统的缩小模拟,能够高效地实现从大气压环境到分析所需高真空环境的过渡。一级真空区是系统的初级降压区域,其核心是连续大气压接口。该接口通常为根不锈钢毛细管(长10 cm,内径0.3 mm),作为大气压环境下产生的离子进入真空系统的主要通道,能够在维持较高气体流量的情况下,实现离子的高效导引^[17-18],内部装有微型离子漏斗,用于捕获离子并将其转移到二级真空区。二级真空区属于核心分析区域,在极低压力下,离子被进一步操控与分析。同时,通过对一级真空系统的压力以及传输透镜电压进行优化,能使离子的传输效率更高。该真空区包含1个LIT($x_0=y_0=4\text{ mm}$, $z_0=40\text{ mm}$)和1个离子检测器。真空由1台抽速为100 L/min的涡轮机械泵和1台抽速为80 L/s的涡轮分子泵共同维持差分抽气,使两腔室压力分别保持在666.61 Pa和0.33 Pa^[19]。该区域融合了多项关键技术与组件:直流透镜置于前端,借由静态电场作用,对经一级减压后的离子束实施聚焦与导向操作,其传输效率得以优化;正弦波频率扫描作为质量分析的基本驱动方式,射频场频率呈线性变化而非幅度调整,离子由此发生共振激发并被选择性弹出,此方法具有扫描速度快、控制精度高的优点^[20];四极辅助离子激发技术引入高阶场分量后,离子弹射过程中峰形与分辨率获得有效改善;宽时频域离子选择功能则使仪器具备在复杂基质中执行高质量选择性及MS/MS分析的能力。通过采用多级真空室逐渐降低从离子源到分析器区域的压力,这种方法创造了稳定的气流和压力条件,可以提高仪器检测的稳定性和鲁棒性。

缝,用于将待测离子径向弹射至检测器。在仪器工作过程中, y 方向电极上施加随时间扫描的射频高压,实现对离子的捕获与质量选择; z 方向端盖电极上施加直流电压,用于轴向离子约束与冷却; x 方向电极则施加一对频率相同、相位相反的交流信号,以激发离子并实现共振弹射。LIT的应用大大提高了仪器性能。它可以储存更多的离子,有效地扩大了仪器的动态范围。

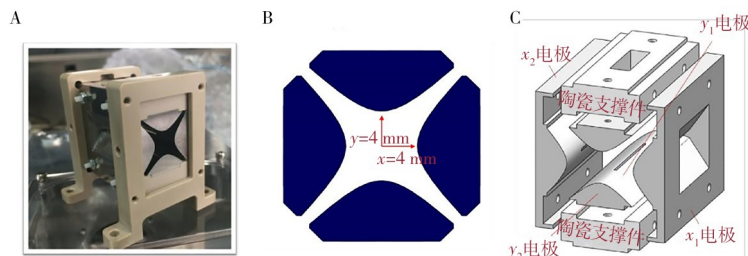


图4 LIT实物图(A)、截面示意图(B)与装配结构图(C)^[16]

Fig. 4 Product image(A), cross-sectional diagram(B), assembly structure diagram(C) of LIT^[16]

1.5 离子检测器

经过质量分析器分离的离子流信号非常微弱,电子倍增器利用二次电子发射效应进行信号放大。当离子以一定能量撞击到探测器入口的打拿极时,会激发出多个二次电子。这些电子在高压电场作用下被加速,撞击到后续的打拿极上,激发出更多的电子,如此级联倍增,最终形成一个可测量的电流脉冲^[27]。便携式质谱仪内部结构如图5所示,电子倍增器作为终端离子检测的核心部件,其功能在于实现高通量的离子信号转换与放大。该器件通过在打拿极施加-4 200 V的高负电压,并在电子倍增器极上施加-1 000 V的偏压,使其在正离子检测模式下工作。当经由线性离子阱分离后的正离子轰击打拿极表面时,引发二次电子发射,所产生的电子在电场作用下沿倍增器内部级联倍增,最终将微弱的离子流放大为可测量的电信号。此设计显著提升了系统的检测灵敏度,确保了低丰度成分信号的高效捕获与准确量化,保障整机分析性能。

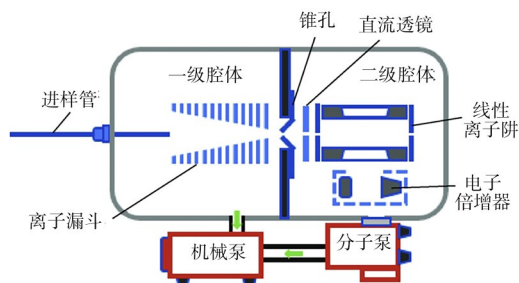


图5 便携式质谱仪内部结构^[26]

Fig. 5 Internal structure of a portable mass spectrometer^[26]

1.6 整机系统集成

便携式质谱仪的工作原理与大型质谱仪一致,即样品分子在离子源中被电离成带电离子,离子在真空环境下被电场加速和聚焦,由质量分析器根据 m/z 进行分离,最终被检测器检测并转换为电信号,经处理后形成质谱图。质谱仪便携化设计的核心挑战在于在有限的体积与功耗条件下,实现分析过程的高效与稳定运行。便携式质谱仪的整体性能依赖于各功能模块的系统集成与协同工作。系统原理结构如图6A所示,该系统采用模块化设计,将真空系统、电源模块、电路控制及信号采集等核心组件高度集成。其中,真空系统通过机械泵与涡轮分子泵建立差动抽气真空梯度^[28],为离子传输与质量分析提供稳定环境;电源模块为各组件提供多路精准电压;电路模块集成射频发生器与时序控制器,驱动质量分析器并协调系统同步;信号采集模块则通过前置放大器与模数转换器处理离子信号,输出质谱数据。整机在44 cm×30 cm×40 cm的紧凑尺寸下实现了22 kg重量与低于330 W的功耗(图6B),质量分析范围为100~2 000 Da,仪器的灵敏度(1 $\mu\text{g/L}$,三唑磷)示于图6C,分辨率(FWHM 0.8 Da,四丁基溴化铵 m/z 242.3)示于图6D,达到同类型仪器的灵敏度和分辨率水平^[26]。由于便携式质谱的小型化、轻量化和低功耗设计,开机后能在15 min内达到所需真空度,结合iEESI无需样品前处理离子化技术,可实现中药材的现场快速分析。该便携式质谱系统支持碰撞诱导解离(CID)串联质谱功能,可兼容纳升电喷雾电离(Nano-ESI)、iEESI、大气压化学电离(APCI)、纸喷雾(PS)等多种电离源,满足从环境监测到生物分析的现场检测需求。

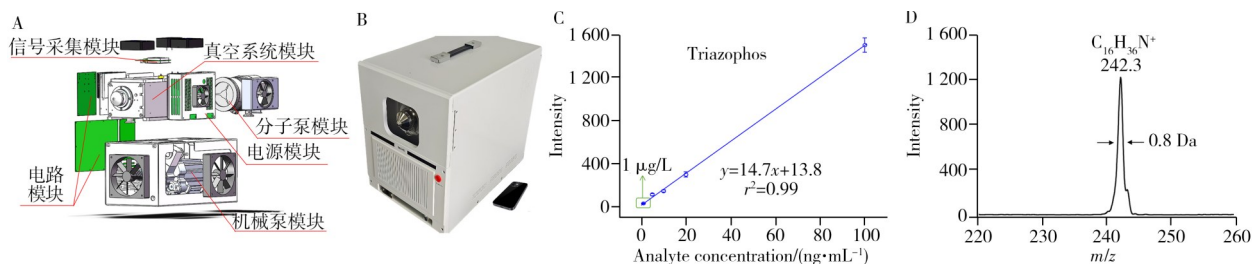


图6 便携式质谱仪的构造图(A)、质谱仪实物照片(B)、三唑磷定量曲线(C)、四丁基溴化铵分辨率(D)

Fig. 6 Schematic diagram(A) and photograph(B) of the portable mass spectrometer, calibration curve for quantitation of triazophos(C), resolution of tetrabutylammonium bromide(D)

1.7 控制与软件系统

控制与软件系统主界面示于图7。通过软件系统可以设置和修改仪器工作的条件参数,包括一级腔体中的电源开关、加热丝温度、锥孔及漏斗电压等和二级腔体中的进样时间、射频电压等。通过与电路系统进行实时通信,对仪器进行控制,在控制界面下发送配置参数并接收返回数据,同时能够完成数据处理、结果显示与结果数据生成,以及数据的存储与读取。软件系统的功能特点体现在高度集成与自动化,将仪器控制、数据采集与动态监控融为一体,显著降低了操作难度并确保了分析结果的重现性,其稳定性与易操作性是便携式质谱仪实现现场、快速、精准分析的重要保障。

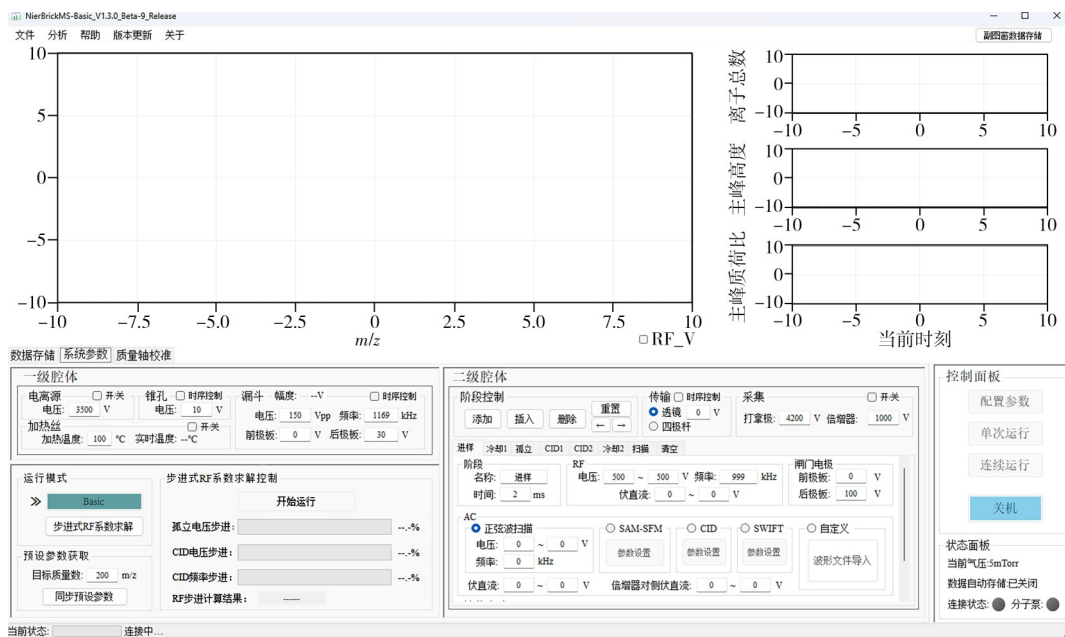


图7 控制软件界面

Fig. 7 Control software interface

2 结果与讨论

2.1 芳香中药材快速检测

采用自主研发的便携式质谱仪,在正离子模式下对9种不同药用部位的芳香中药材——根类(黄芪)、根茎类(白术)、成熟果实(八角茴香)、果皮(陈皮)、干燥花蕾或带初开的花(金银花)、块根(麦冬)、块茎(天麻)、根和根茎(细辛)、树皮(肉桂)进行直接质谱分析。获得一级质谱图和MS/MS质谱图(图8),通过CID鉴定八角茴香中茴香脑(m/z 149)、陈皮中川陈皮素(m/z 403)和橘皮素(m/z 373)、白术中白术内酯 I (m/z 231)和白术内酯 II (m/z 233)等特征成分。本方法无需任何前处理,单样品分析时间小于1 min。

在正离子模式下,八角茴香样品中检测到母离子 m/z 149 ($C_{10}H_{12}O$)失去质量数28 (C_2H_4)的碎片,产生 m/z 121 碎片离子(图9A),经过与标准数据库和文献对比,确定该物质为茴香脑^[29];白术中分别检测到母离子 m/z 231 ($C_{15}H_{18}O_2$)失去质量数46 ($CO+H_2O$)的中性碎片,产生 m/z 185 碎片离子(图9B);母

离子 m/z 233 ($C_{15}H_{20}O_2$) 失去质量数 46 ($CO+H_2O$)、74 ($C_3H_6O_2$)、88 ($C_4H_8O_2$) 的碎片, 产生 m/z 187、 m/z 159 和 m/z 145 碎片离子(图 9C), 经过与标准数据库和文献对比, 确定这两个化合物分别为白术内酯 I 和白术内酯 II^[30]; 陈皮中检测到母离子 m/z 403 ($C_{21}H_{22}O_8$) 在质谱高能碰撞下接连失去质量数 15 (CH_3) 的碎片, 产生 m/z 388、373 碎片离子(图 9D), 经过与标准数据库和文献对比, 确定该物质为川陈皮素; 同样, 母离子 m/z 373 ($C_{20}H_{20}O_7$) 接连失去质量数 15 (CH_3) 的碎片, 产生 m/z 358 和 m/z 343 碎片离子(图 9E), 经过与标准数据库和文献对比, 确定该化合物为橘皮素^[31]。

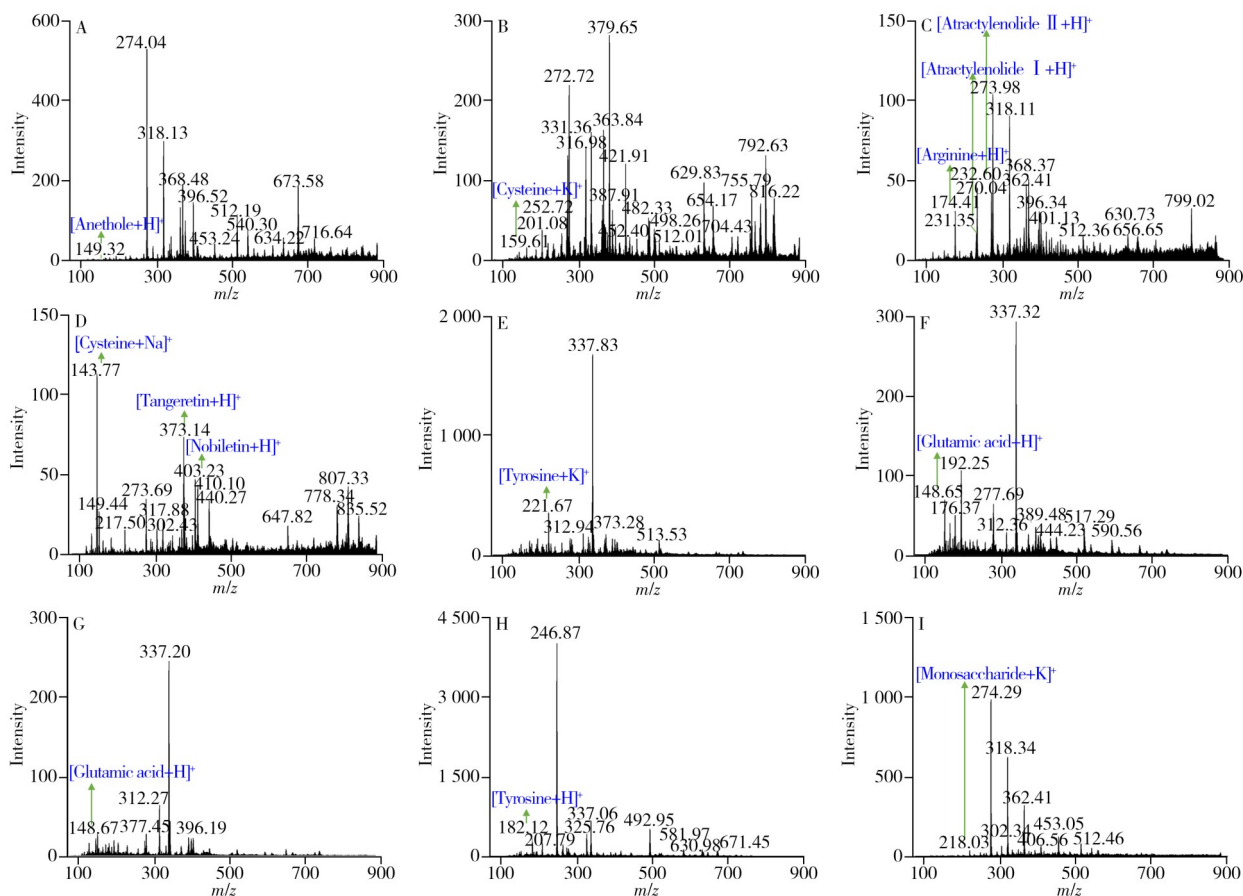


图 8 iEESI 分析不同类型芳香中药材的一级指纹图谱: 八角茴香(A)、天麻(B)、白术(C)、陈皮(D)、黄芪(E)、金银花(F)、麦冬(G)、细辛(H)、肉桂(I)

Fig. 8 Primary fingerprint profiles for different types of aromatic Chinese medicine analyzed by iEESI: *Anisi Stellati Fructus* (A), *Gastrodiae Rhizoma* (B), *Atractylodis Macrocephalae Rhizoma* (C), *Citri Reticulatae Pericarpium* (D), *Astragali Radix* (E), *Lonicerae Japonicae Flos* (F), *Ophiopogonis Radix* (G), *Asari Radix et Rhizoma* (H), *Cinnamomi Cortex* (I)

2.2 复杂中药基质的适用性

中药材基质复杂多样, 包含众多高含水量(如鲜药材)、高油脂(如种子类、乳香、没药)或高胶质(如黄精、玉竹、白及)的样品。本研究分析的肉桂即为富含挥发油类成分的典型代表, 其挥发油含量可达 1.2% 以上(《中国药典》标准), 主要成分为肉桂醛、肉桂酸等脂溶性化合物。采用本方法能在无样品前处理的情况下对肉桂进行快速分析, 获得丰富稳定的质谱指纹图谱, 验证了 iEESI-MS 对高油脂样品的分析能力。iEESI 技术通过带电萃取溶剂在样品内部进行选择性萃取, 在高压电场下, 含待测物的微小带电液滴在样品尖端形成电喷雾, 经去溶剂化产生气相离子进入质谱分析^[32]。该方法样本耗量少, 不依赖样品表面性质, 使得 iEESI 在分析内部成分分布不均匀或质地紧密的药材时可能更具代表性。Zhang 等^[33]利用 iEESI-MS 分析了高含水量水果(如草莓)的组织, 无需样品前处理即可获得丰富的样品信息, 表明该技术能够适用于高水分基质样品的分析; Wang 等^[34]采用 iEESI-MS 对富含油脂的柏子仁进行了直接定量分析, 成功测定了亚油酸、亚麻酸等多种脂肪酸, 线性范围宽、检出限低、重复性良好, 并通过主成分分析区分了不同产地样品, 充分证实了 iEESI-MS 在高油脂基质中的适用性。Xu 等^[35]采用 iEESI-MS 直接分析了富含多糖和具黏性的地黄样品, 无需前处理即可获取丰富的质谱信

息, 并成功区分不同产地及炮制品, 充分证实了 iEESI-MS 在高胶质中药基质中的适用性。针对实际检测中可能遇到的高含水量、高油脂或高胶质样品, 可通过优化萃取溶剂类型和比例, 以提高分析方法的选择性和灵敏度。对于高含水量样品, 可适当提高萃取溶剂中有机相比比例(如甲醇含量)并提升离子传输管温度, 以增强去溶剂化效果; 对于高油脂样品, 可在萃取溶剂中添加适量挥发性酸(如 0.1% 甲酸)以改善电离效率, 并控制取样量避免油脂沉积; 对于高胶质样品, 则应降低样品用量、选择极性较强的萃取溶剂(如含水甲醇)以减少黏附和堵塞。总体而言, 本方法对含水量高、高油脂或高胶质的中药样品同样具有良好的适用性。此外, 该方法取样量低于 2 mg, 对各类贵重药材尤为适用, 所用玻璃毛细管为一次性耗材, 避免了交叉污染和残留, 确保了数据的可靠性与标准化操作。综上, iEESI-MS 技术凭借原位萃取与电离的独特机制, 无需复杂前处理, 可为高含水、高油脂及高胶质等挑战性中药样本提供快速、原位分析的技术策略。

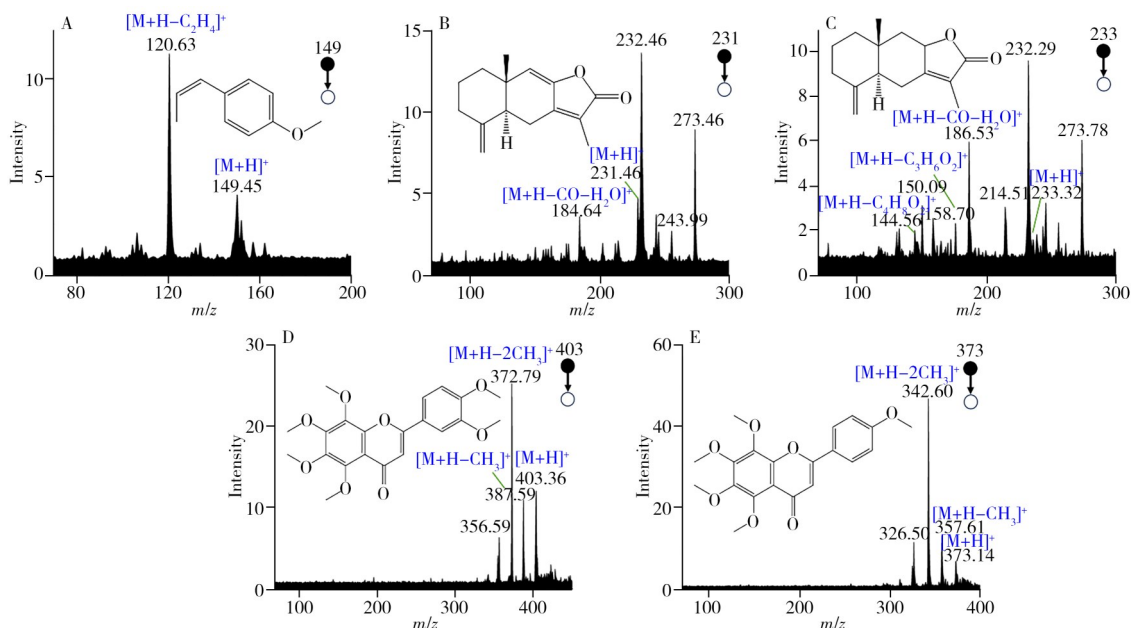


图9 iEESI分析不同类型芳香中药材代谢物的二级指纹图谱: 茴香脑(A)、白术内酯 I (B)、白术内酯 II (C)、川陈皮素(D)、橘皮素(E)

Fig. 9 Secondary fingerprint profiles of metabolites in different types of aromatic Chinese medicine identified by iEESI-MS: anethole(A), atractylenolide I(B), atractylenolide II (C), nobiletin(D), tangeretin(E)

3 结 论

本文研制了一款集小型连续大气压接口、微型离子漏斗结构以及正弦波频率扫描等关键部件和技术的体积小、质量轻、功耗低、操作简便的便携式质谱仪。整机重 22 kg, 尺寸为 44 cm×30 cm×40 cm, 功耗小于 330 W, 能够满足现场快速检测需求。在应用方面, 便携式质谱仪结合 iEESI 技术, 建立了一种无需样品前处理的中药材快速检测方法, 对不同部位(根、茎、果实、花)及不同品种(如肉桂、黄芪、金银花等)芳香中药材进行分析, 单个样品检测时间小于 1 min, 样品耗量少于 2 mg。基于特征离子峰及其相对丰度的差异, 结合文献、自建数据库和人工智能判别算法软件, 该方法可为药材品种来源与药用部位的区分提供新的技术思路, 并应用于中药材真伪鉴别、产地溯源及质量稳定性的现场快速评价。未来, 基于性能优化、专用数据库构建及与智能化技术深度融合, 便携式质谱将在中医药等健康关键领域发挥不可或缺的作用。

参考文献:

- [1] Wang J, Pursell M E, Devor A, Awoyemi O, Valentine S J, Li P. *Proteomics*, **2022**, 22(23/24): e2200112.
- [2] Shi W Y, Huo X M, Tian Y, Lu X Q, Yang L L, Zhou Q, Wang X H, Yu Q. *Talanta*, **2021**, 230: 122352.
- [3] Cao J H, Jiang T, Xu W. *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, **2025**, 39(18): e10088.
- [4] Huo X M, Zhu X Y, Tang F, Zhang J, Zhang X H, Yu Q, Wang X H. *Anal. Chem.*, **2020**, 92(5): 3707-3715.
- [5] Zhang Z Y, Li B Q, Zhang L, Li C P. *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, **2025**, 39(22): e10123.

- [6] Zhai Y B, Feng Y, Wei Y Z, Wang Y Z, Xu W. *Analyst*, **2015**, 140(10): 3406–3414.
- [7] He X R, Li C G, Zhu X S, Li Y Q, Jarouche M, Bensoussan A, Li P P. *J. Sep. Sci.*, **2017**, 40(1): 81–92.
- [8] Pang B Y, Zhu Y, Lu L Q, Gu F B, Chen H L. *Evid. Based Complement Altern. Med.*, **2016**, 2016: 3837270.
- [9] Ouyang Z, Cooks R G. *Annu. Rev. Anal. Chem.*, **2009**, 2: 187–214.
- [10] Snyder D T, Pulliam C J, Ouyang Z, Cooks R G. *Anal. Chem.*, **2016**, 88(1): 2–29.
- [11] Fenn J B, Mann M, Meng C K, Wong S F, Whitehouse C M. *Science*, **1989**, 246(4926): 64–71.
- [12] Chen H W, Venter A, Cooks R G. *Chem. Commun.*, **2006**, (19): 2042–2044.
- [13] Bianchi F, Riboni N, Termopoli V, Mendez L, Medina I, Ilag L, Cappiello A, Careri M. *J. Anal. Methods Chem.*, **2018**, 2018: 1308167.
- [14] Zhang H, Gu H W, Yan F Y, Wang N N, Wei Y P, Xu J J, Chen H W. *Sci. Rep.*, **2013**, 3(1): 2495.
- [15] Pu F, Chiang S, Zhang W, Ouyang Z. *Analyst*, **2019**, 144(4): 1034–1051.
- [16] Zhai Y B. *Instrumental Development and Key Techniques of Miniature Ion Trap Mass Spectrometer with Continuous Atmospheric Pressure Interface*. Beijing: Beijing Institute of Technology (翟雁冰. 连续大气压接口微型离子阱质谱仪及其关键技术的研发. 北京: 北京理工大学), **2017**.
- [17] Page J S, Kelly R T, Tang K, Smith R D. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, **2007**, 18(9): 1582–1590.
- [18] Krutchinsky A N, Padovan J C, Cohen H, Chait B T. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, **2015**, 26(4): 649–658.
- [19] Mohammed A F A, Li B Q, Hong J, Xu W, Zhai Y B. *Talanta*, **2026**, 297: 128707.
- [20] Jiang T, Zhang H J, Tang Y, Zhai Y B, Xu W, Xu H L, Zhao X Y, Li D Y, Xu W. *Anal. Chem.*, **2017**, 89(10): 5578–5584.
- [21] Kelly R T, Tolmachev A V, Page J S, Tang K, Smith R D. *Mass Spectrom. Rev.*, **2010**, 29(2): 294–312.
- [22] Chen Y, Leach F E, Kaiser N K, Dang X, Ibrahim Y M, Norheim R V, Anderson G A, Smith R D, Marshall A G. *J. Mass Spectrom.*, **2015**, 50(1): 280–284.
- [23] Snyder D T, Panczyk E M, Somogyi A, Kaplan D A, Wysocki V. *Anal. Chem.*, **2020**, 92(16): 11195–11203.
- [24] Zhai Y B, Zhang X H, Xu H L, Zheng Y C, Yuan T, Xu W. *Anal. Chem.*, **2017**, 89(7): 4177–4183.
- [25] Li C, Chu S Y, Tan S Y, Yin X C, Jiang Y, Dai X H, Gong X F, Fang X, Tian D. *Front. Chem.*, **2021**, 9: 813359.
- [26] Li Y L, Jia H Y, Jiang Y Z, Huang D, Li X S, Xu W. *J. Chin. Mass Spectrom. Soc.* (李宜凌, 贾贺园, 姜延祚, 黄迪, 李小松, 徐伟. 质谱学报), **2023**, 44(3): 341–347.
- [27] Li N, Liu L, Li J, Yun X T, Liu H L, Liu B Y, Wu S L, Hu W B. *Chin. J. Vac. Sci. Technol.* (李娜, 刘利, 李洁, 负新团, 刘虎林, 刘碧野, 吴胜利, 胡文波. 真空科学与技术学报), **2024**, 44(12): 1033–1039.
- [28] Chen C H, Chen T C, Zhou X Y, Kline-Schoder R, Sorensen P, Cooks R G, Ouyang Z. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, **2014**, 26(2): 240–247.
- [29] Zhou X, Liu C, Wang L P, Liu Q B, Xie M T, Huang F, Wu H Q, Luo H T. *J. Chin. Mass Spectrom. Soc.* (周熙, 刘畅, 王李平, 刘倩宝, 谢梦婷, 黄芳, 吴惠勤, 罗辉泰. 质谱学报), **2025**, 46(5): 1–11.
- [30] Li Y F, Tang L L, Tang R, Zhao M F, Fang K E, Zhang H R, Li C Y, Ge W H, Du W F, Zhang Y F. *Chin. Tradit. Pat. Med.* (李亚飞, 汤璐璐, 唐瑞, 赵明方, 方可儿, 张海瑞, 李昌煜, 葛卫红, 杜伟锋, 张叶峰. 中成药), **2023**, 45(8): 2774–2781.
- [31] Xiao J C, Yan B B, Wan X F, Zou L Q, Wu T X, Liu S, Kang C Z, Lü C G, Wang S, Zhang Y, Yang J. *Chin. Tradit. Pat. Med.* (肖建才, 闫滨滨, 万修福, 邹隆琼, 吴统选, 刘爽, 康传志, 吕朝耕, 王升, 张燕, 杨健. 中成药), **2023**, 54(10): 3302–3311.
- [32] Lu H Y, Zhang H, Xiao Y P, Li Y, Gu H W, Chen H W. *J. Instrum. Anal.* (卢海艳, 张华, 肖义坡, 李毅, 顾海巍, 陈焕文. 分析测试学报), **2017**, 36(2): 152–160.
- [33] Zhang H, Zhu L, Luo L P, Wang N N, Chingin K, Guo X L, Chen H W. *J. Agric. Food Chem.*, **2013**, 61(45): 10691–10698.
- [34] Wang N, Xie S Y, Liu P, Wang L T, Zhong C, Yu J, Qin M M, Chen H W. *Anal. Methods*, **2025**, 17(10): 2254–2262.
- [35] Xu J Q, Yu Z D, Li T, Song L L, Qiu Z D, Huang L Q, Chen H W, Li H. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, **2023**, 34(7): 1342–1348.

(责任编辑: 丁 岩)