

植物代谢组学在药用植物次生代谢产物中的研究进展

李禾菲

昆明医科大学药学院，云南 昆明

收稿日期：2025年9月21日；录用日期：2025年11月17日；发布日期：2025年11月28日

摘 要

代谢组学是系统生物学的一个分支，是继基因组学、转录组学、蛋白质组学之后发展起来的一门交叉学科，在基因功能鉴定、生物系统研究、中医药领域等方面得到了广泛的应用。以组群指标分析为基础，以高通量检测 and 数据处理为手段，采用质谱联用不同色谱模式以及代谢轮廓分析方法已成为植物代谢组学的主要技术平台，因其具有整体性、动态性和全面性研究特点受到广泛关注。本综述总结了近些年来植物代谢组学在药用植物中不同种次生代谢产物中的研究进展，包括药用植物中的萜烯类、黄酮类和生物碱类，从而揭示植物代谢物动态变化趋势，为药用植物的质量评价提供了重要的参考价值。

关键词

植物代谢组学，药用植物，次生代谢产物

Research Progress of Plant Metabolomics in Secondary Metabolites of Medicinal Plants

Hefei Li

School of Pharmacy, Kunming Medical University, Kunming Yunnan

Received: September 21, 2025; accepted: November 17, 2025; published: November 28, 2025

Abstract

Metabolomics is a branch of systems biology, a cross-disciplinary discipline developed after genomics, transcriptomics, and proteomics, which has been widely used in the field of gene function identification, biological system research, and Chinese medicine. Qualcomm, based on cluster analysis, with high-throughput detection and data processing, Mass spectrometry combining different chromatography

models and metabolic profiling methods has become the main technical platform for plant metabolomics, and has received wide attention because of its holistic, dynamic and comprehensive research characteristics. This review summarizes recent advances in plant metabolomics of different secondary metabolites in medicinal plants. It includes flavonoids, terpenes and alkaloids in medicinal plants, thus revealing the dynamic changes of plant metabolites and providing important reference value for the quality evaluation of medicinal plants.

Keywords

Plant Metabolomics, Medicinal Plants, Secondary Metabolites

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 前言

代谢组学是研究生物体内代谢物在不同生理状态下的变化及其与生物学过程之间关系的学科, 20 世纪 90 年代末, 代谢组学的概念就已经在微生物领域出现[1], 随后 Trethewey 提出了代谢组学在植物领域的重要性[2]。代谢组学特指对存在于组织、细胞或生物体中维持其正常生长和功能的大量低分子量(相对分子质量 < 1000)代谢物进行定量和定性分析。代谢组学现在被认为是一个广泛的、敏感的、实用的方法去研究任何有机体的有用的微量成分, 利用高通量技术, 如质谱和核磁共振, 对生物体内代谢产物进行全面、系统的分析。代谢组学可分为不同层次的分析, 包括靶标分析、代谢轮廓分析、代谢指纹分析和代谢组学分析。其目标是揭示代谢通路的调控机制, 发现代谢标志物, 并探索其在健康和疾病中的作用, 为健康管理、疾病诊断和治疗提供科学依据。分析手段包括液相 - 质谱联用(LC-MS)、气相 - 质谱联用(GC-MS)、毛细管电泳 - 质谱联用(CE-MS)、超高效液相色谱 - 质谱联用(UPLC-MS)、四级杆飞行时间质谱(FTICR-MS)、基质辅助激光解吸电离(MALDI)、离子迁移谱(IMS)、核磁共振(NMR)、四级杆飞行时间(Q-TOF)等已成为植物学领域用于分析非生物胁迫响应的有力分析工具[3] [4]、多样性[5]、进化[6]以及生长和发育调控[7]。代谢组学在植物科学研究中发挥了突出的作用, 代谢物谱能够直接反映植物整体的生理生化状态[8], 从研究不同气候胁迫下的胁迫特异性代谢产物, 评估候选代谢基因的功能, 分析植物细胞的生物学机制, 以及解剖响应各种生物和非生物胁迫的基因型 - 表型关系[9]。

植物代谢组学是代谢组学的重要分支, 专注于研究植物体内代谢物在不同生理状态下的变化及其与生物学过程的关系, 植物代谢组学是对植物的某一组织或细胞在一特定生理时期内所有低分子量代谢产物同时进行定性和定量分析。它是以组群指标分析为基础, 以高通量检测和数据处理为手段, 以信息建模与系统整合为目标, 从宏观角度研究生物机体的生化变化, 从而监控或者评价基因功能。许多植物代谢物是中药的活性成分, 其种类和含量随品种、生长环境、采集季节以及炮制方法等因素而变化。因此, 中药的质量问题主要就是植物代谢组的问题。由于环境因素、植物有效部位对中药药效(或价值)有一定影响, 而代谢组学法可以有效检测这些因素, 植物代谢组学为深入研究开发中药资源创造了新的研究平台。植物代谢组学应用的高灵敏度、高通量检测技术, 可同时对大量代谢物进行定性定量分析, 较为全面地研究植物不同时期或者不同部位代谢物种类与含量变化, 并进一步通过这些变化来推测相应的代谢途径和代谢网络; 也可用来研究不同生长环境对植物代谢的影响, 从而对植物进行分类, 推测亲缘关系。由于植物利用复杂的机制来维持体内主要代谢物水平的相对稳定, 因此对植物代谢组的分析力求可检测样

品中每种代谢物,这是进行功能基因组研究和植物质量控制的基础。

到目前为止,很多研究已经进行了植物代谢组分析[10]。GC-MS一般适用于分析植物生长发育过程中生存和繁殖所必需的初级代谢物,如碳水化合物、蛋白质、脂质、核酸等,而LC-MS则更适合评估一大批植物次级代谢物,包括生物碱、类黄酮、酚类化合物等[11]。大多数研究使用GC-MS或LC-MS技术根据物质的特性来确定代谢物[12]。Fiehn [13]对笋瓜 *Cucurbita maxima* 的叶柄脉管和叶片抽提物进行GC-MS分析,得到了四百多个峰,通过与质谱数据库比对,初步鉴定出90个化合物,并比较了叶柄与叶片之间在糖、氨基酸等代谢物组分方面的差别;Davuluri [14]应用代谢组学方法研究了基因改造西红柿中与人体健康相关的成分类胡萝卜素和解毒的黄酮类成分与野生株的差别;Hirai [15]应用HPLC2FTMS技术研究发现硫磺和氮对拟南芥中芥子苷的代谢途径具有重要影响,并显示出相当大的相关性;Aharoni等[16]研究了番茄成熟过程中茄红素等一系列代谢产物的动态变化过程,从而对番茄的成熟机制有了进一步的了解,为加快番茄成熟速度打下了基础;Lemo [17]利用GC-MS测定了迷迭香(*Rosmarinus officinalis*)的精油成分,并利用LC-MS对其提取物成分进行了评价,发现夏季采集的精油和提取物中樟脑和鼠尾草酸含量较高,具有较高的抗氧化和抗菌活性,这一结果为全面了解植物代谢物提供了可能;Zhang [18]采用气相色谱-质谱联用技术分析柳针叶的非靶向代谢组,探讨了不同季节的代谢差异;Takada [19]用超临界水处理日本杉木,进行凝胶渗透色谱(GPC)和GC-MS分析,检测到31种单体化合物和22种二聚化产物;Xie [20]利用GC-MS对不同产地的柳杉针叶精油样品进行了分析,鉴定出87种化合物,揭示了柳杉针叶精油样品中化学成分的差异是遗传和环境共同作用的结果,为选择柳杉针叶和含有重要化合物的精油提供了参考。Qian [21]利用UHPLC-QTOFMS对山茱萸进行多变量数据统计分析,鉴别出了山茱萸原料和加工产品之间的17种不同的化合物,揭示了山茱萸关键化合物与颜色的关系;Falco Beer [22]采用GC×GC-MS、LC-QToF-MS两种互补的代谢组学平台,研究了兰花不同组织部位的代谢组学,所表征的代谢物包括大量的糖类、氨基酸、脂肪酸和胺,兰花特有的次级代谢物如黄酮类、萜类化合物,揭示了兰花不同组织部位特有次级代谢物的差异。这些都能够充分地说明植物代谢组学在不同种植物次级代谢产物中得到了广泛地应用。

2. 代谢组学的研究技术与研究内容

代谢组学的研究技术发展迅速

代谢组学是研究生物体内代谢物在不同生理状态下的变化及其与生物学过程之间关系的学科,代谢组学特指对存在于组织、细胞或生物体中维持其正常生长和功能的大量低分子量(相对分子质量 < 1000)代谢物进行定量和定性分析。代谢组学现在被认为是一个广泛的、敏感的、实用的方法去研究任何有机体的有用的微量成分,利用高通量技术,如质谱和核磁共振,对生物体内代谢产物进行全面、系统的分析。

根据研究目的及用途的不同,代谢组学可分为不同层次的分析,包括靶标分析、代谢轮廓分析、代谢指纹分析和代谢组学分析。其目标是揭示代谢通路的调控机制,发现代谢标志物,并探索其在健康和疾病中的作用,为健康管理、疾病诊断和治疗提供科学依据。分析手段包括液相-质谱联用(LC-MS)、气相-质谱联用(GC-MS)、毛细管电泳-质谱联用(CE-MS)、超高效液相色谱-质谱联用(UPLC-MS)、四极杆飞行时间质谱(FTICR-MS)、基质辅助激光解吸电离(MALDI)、离子迁移谱(IMS)、核磁共振(NMR)、四级杆飞行时间(Q-TOF)等已成为植物学领域用于分析非生物胁迫响应的有力分析工具、多样性、进化以及生长和发育调控。

3. 药用植物次级代谢产物概述

1、药用植物次级代谢产物的分类

植物代谢物包括丰富多彩的初级代谢物和次级代谢物。初级代谢物是必需的代谢产物，被植物细胞消耗如葡萄糖、氨基酸、核苷酸等，与基本的生存和生长过程密切相关。植物次级代谢物是植物在长期进化过程中与环境相互作用的结果，由初级代谢物派生。而次级代谢物在植物的不同部位或原位或非原位进行多种活动，次级代谢物的合成受其位置的限制，因为每个器官对次生代谢物的需求不同。根据次级代谢物生物合成途径和化学结构，次级代谢物大致可分为三大类：(i) 萜类化合物(萜烯类、植物挥发物、甾醇、类胡萝卜素、皂苷和糖类)；(ii) 酚类化合物(黄酮类、酚酸、木质素、木脂素、香豆素、二苯乙烯和丹宁)；(iii) 含氮化合物(生物碱、硫代葡萄糖苷和氰苷)[23][24]。本篇综述主要针对植物代谢组学在三大类化合物中的代表性化合物萜烯类、黄酮类、生物碱类化合物中的应用进行展开论述。

大多数化合物和化合物类别在不同植物类群中广泛表达。例如，萜烯(异戊二烯)是最多样化的化合物类别之一，作为主要的植物化合物类别和植物挥发性主要成分，具有多种生态功能[25]。其中一些化合物，如 β -石竹烯、柠檬烯和芳樟醇，以及苯丙素类苯甲醛和水杨酸，在所有被研究的植物中存在 50%~70% [26]。

2、药用植物次级代谢产物的药理作用

植物次级代谢产物作为药理作用跨越了几千年，然而，对植物次级代谢产物进行特定功能注释的分析仅在两百年前才开始引起人们的注意，其中最早研究的是罂粟中的吗啡[27]。植物次级代谢物在植物抵御真菌、病毒、细菌和喂养食草动物方面发挥着多种作用[28]。一些植物次级代谢产物具有化感活性作用，而另一些则作为与共生昆虫(如传粉媒介和种子传播者)进行化学交流的信号转导器[29]。最近对几种植物次级代谢产物的杀虫剂和除草活性进行了调查。大约 40% 的商业药物是使用植物次级代谢产物作为有效成分合成的[30]。例如，抗癌药物紫杉醇(Taxol)和抗疟疾药物青蒿素(Artemisinin)就是由萜烯合成的[31]。酚类化合物可以阻止帕迪蚜(*Rhopalosiphum padi*)和细粒细粒蚜(*Galerucella lineola*)取食小麦植株，还可以延缓棉蚜(*Aphis gossypii*)在棉花植株上的成熟和降低繁殖力[32]。200 年来的现代化学和生物学已经描述了初级代谢物在细胞分裂和生长、呼吸、储存和繁殖等基本生命功能中的作用。

3、植物次级代谢物对环境因子的响应

药用植物是不同植物化学化合物的来源，在其生长发育过程中受到各种环境胁迫。温度、二氧化碳、光照、臭氧、土壤水分、土壤盐分和土壤肥力等不同的生态限制因子对药用植物的生理生化反应和次生代谢过程有显著影响。环境因素是药用植物生长和存在的主要限制因素，研究发现同种植物在应对不同的环境会产生特定的次级代谢物，那是因为植物能够产生特定的定性和定量的化合物去应对环境压力[33]。温度是主要的气候变化能够显著地影响在环境急剧改变时，造成植物进行光合作用时次级代谢物的分布，例如：当温度升高至物种最适水平时，植物的生长(节和叶出现率)增加，而低温则限制了植物的生长、叶片发育和光合作用。此外，可以推测这些随季节和平均温度的次级代谢物的变化可能会在未来改变某些物种的培育与种植面积。例如：Yuan 观察铁皮石斛(*Kimura & Migo*)在野生、仿生和温室三种不同栽培模式下的反应，结果表明：野生环境中多糖、总生物碱和总黄酮含量较高，其次是仿生环境和温室环境，研究发现代谢物含量随着温度的升高而下降，这表明铁皮石斛是喜好阴避环境，过高的温度对它的生长有害，这表明温度对植物生长和次级代谢物合成的影响不是单一的，表明物种具有特异性[34]；二氧化碳被认为是阻碍药用植物生理过程的主要温室气体。植物适应环境的改变是代谢过程的变化，而代谢的变化影响了植物的次级代谢产物，而植物的次级代谢产物是药用植物活性的基础[35]。例如：在对玫瑰茄的典型研究中，UKMR-2 的 CO_2 的浓度从 $400 \mu\text{mol mol}^{-1}$ 升高到 $800 \mu\text{mol mol}^{-1}$ 时，花萼产量和总酚浓度均有所增加[36]。此外，华重楼(*Paris polyphylla* var. *yunnanensis*)，一个传统的中国药用植物，在 CO_2 浓度升高的条件下，云南西部地区的生物活性和生物活性物质含量均高于云南中部地区。表明：云

南西部的华重楼品种对 CO₂ 的敏感性高于云南中部品种, 云南西部的华重楼品种是高 CO₂ 环境下的潜在候选者[37]; 紫外线是一个重要的环境影响因素, 黄酮类在紫外线保护中的作用也在 Bieza 和 Lois 的研究中得到了支持, 他们从中分离出了一个耐受高水平 UV-B 辐射的拟南芥突变体[38]。此外, Nascimento 发现落地生根叶子中的酚类和黄酮类含量随着紫外线(UV)辐射的增强, 含量逐渐增加[39]; 干旱也是一个重要的环境因素影响植物的次级代谢物含量的变化。例如: 黄芩, 一个传统的中草药植物, 黄芩苷的含量在轻度胁迫下升高, 在重度胁迫下降低, 结果证明: 适当的干旱条件可能通过刺激黄芩苷生物合成关键酶的表达和活性来促进黄芩苷的积累。此外, 光照、土壤盐度、土壤肥力等环境因素的改变都会影响植物次级代谢物的生成[40]。

4. 植物代谢组学在次生代谢产物中的应用实例

1、在药用植物萜烯中的应用

萜烯是自然界中最大和最多样化的植物次级代谢产物[41], 是植物用于拮抗和互惠相互作用的信息和防御载体。“萜烯”一词由杜马于 1866 年提出, 源于拉丁语“松节油”(Balsamum terebinthinae), 一种从松树中提取的液体。萜烯是最大的天然产物, 具有显著的结构变化, 包括线性碳氢化合物或碳环骨架。大约有 55,000 个已知成员[42]。萜烯经过氧化、氢化或脱氢形成萜类化合物。萜烯的分类基于 Wallach 于 1887 年提出的异戊二烯单元(C₅H₈), 这是一种形成萜烯骨架的 5 碳化合物[19]。二磷酸异戊烯基(IPP)单元及其异构体二磷酸二甲基烯基(DMAPP)是萜烯的生物合成前体。萜烯在高等植物、柑橘类、针叶树和桉树中含量丰富, 广泛分布于这些植物的叶、花、茎和根中。在抵御生物和非生物胁迫方面发挥着重要作用, 研究表明, 植物激素脱落酸(ABA)触发防御机制, 如通过调节膜特性促进对于干旱和水分胁迫的反应[43]。此外, 萜烯化合物具有抗真菌、抗菌、抗病毒和抗寄生虫作用, 它们阻止食草动物进食, 并被用作杀虫剂来储存农产品[44]。由 *Teucrium marum* (猫百里香或猫香)产生的甲基环戊类单萜是一种对蚂蚁和蟑螂的驱避剂。

萜烯类含量受季节变化影响[45]。Zhang [46]利用 LC-MS/MS 靶向分析测量了 6 个不同发育阶段的山核桃中的萜类化合物, 随着发育时期的增加, 萜烯类化合物逐渐减少, 揭示了山核桃种子发育过程中萜烯类代谢物含量、相关代谢和重要调控途径的差异; Tang [47]整合代谢组学和转录组学分析揭示了大麻同源四倍体及其二倍体后代细胞中苯丙素和萜烯类物质积累的差异, 结果显示, 在大麻四倍体和二倍体中, 大麻二酚和四氢大麻二酚的含量没有明显的差异, 在多倍体发生后, 一些转录因子作为调节因子影响代谢生物合成, 此外, 一些关键的催化基因, 与苯丙素代谢途径相关, 被鉴定为多倍体调节, 这项研究提高了对大麻自多倍体效应的全面认识, 并为多倍体育种在提高工业大麻重要次生代谢产物提供了新的见解[48]; Zhang 整合转录组学和代谢组学揭示了不同季节柳杉针叶中萜烯类和黄酮类生物合成的差异, 在夏天, 柳杉针叶中的 2-甲基季戊四醇 4-磷酸(MEP)通路中的 DXS、DXR、ispH 和 GGPS 高表达, 促进了萜类物质尤其是二萜类物质的积累。在冬天, 柳杉针叶中, HCT、CHS、CHI、F3H、F3'H、F3'5'H、FLS、DFR 和 LAR 9 个参与类黄酮生物合成的基因高表达, 促进了类黄酮的积累。本研究拓宽了柳杉针叶因季节变化引起的代谢和转录组学变化的认识, 为柳杉针叶的适应机制及其代谢物的提取提供了参考; Liang [49]利用非靶向代谢组学分析三叶橙(*Poncirus trifoliata*)幼苗接种菌根真菌(*Rhizophagus intraradices*)后, 在水分充足和土壤干旱条件下根系代谢物的变化, 研究发现, 土壤干旱条件下, 根菌根真菌的定殖率为 70%, 土壤湿润条件下为 85%, 接种菌根真菌增加了根和茎生物量。另外, AMF 的定殖引发了几乎所有萜烯类化合物的减少, 但是 β -石竹烯在干旱条件下被菌根真菌上调, 这表明挥发性有机化合物可能增加, 从而引发植物的防御反应。

2、植物代谢组学在药用植物黄酮中的应用

黄酮类化合物是一类富含蔬菜、水果、谷物和茶叶的天然多酚类物质。在化学结构上,黄酮类化合物以 3 个环(C6-C3-C6)为基本骨架,根据中心杂环的氧化程度来划分,黄酮类化合物一般分为黄酮醇、黄酮、异黄酮、花青素、黄烷酮、黄烷醇和查尔酮 7 个亚类。黄酮类化合物通常以糖苷的形式积聚在植物细胞的液泡中,在植物中,黄酮类化合物通常存在于花、叶和种子中,有助于植物与固氮细菌和丛枝菌根真菌的相互作用,从而促进植物对养分的吸收,黄酮类化合物被认为编码影响大量生物相互作用结果的化学信息,从而控制营养循环和群落动态等大规模生态过程[50];黄酮类化合物最突出的功能之一是保护植物免受非生物(如干旱、盐、紫外线辐射和热)和生物(如昆虫和病原体的攻击)胁迫[51];最常见的是,研究报道类黄酮在活性氧(ROS)的调节中起作用,并具有紫外线筛选机制[52];黄酮类在人类饮食中很常见,具有抗氧化作用以及其他生物活性(例如,抗菌和抗炎特性),可降低疾病风险。

植物代谢组学在药用植物黄酮中应用广泛, Mucci 等[53]团队研究了柠檬不同部位的代谢谱。Zhang [54]采用高分辨魔角旋转核磁共振(HR-MAS NMR)技术对柠檬果实的黄酮类、反照率、果肉、油腺和种子进行了研究。在反射率中,检测到黄酮类化合物的清晰信号,如橙皮苷和芦花苷,这些信号也被高效液相色谱(HPLC)分析鉴定出来;黄酮类化合物作为茶树的主要次生代谢产物,黄酮类的生物合成随温度和光照的增加而增加;Xin Yin [55]利用 MALDI-MSI 和 LC-MS 技术对野生和栽培大豆进行了代谢组学比较分析,揭示了大豆种子代谢途径固有的复杂性和多样性,其中黄酮类化合物是野生大豆与栽培大豆差异最大的一类化合物,也是所鉴定的差异代谢物中所占比例最高的一类,研究中发现,野生大豆种皮中大多数代谢物类型含量高于培育大豆,培育大豆胚芽中黄酮类含量高于野生大豆,表明野生大豆具有更强的环境适应性和潜在的营养物质;Li 利用 LC-MS 靶向分析揭示了中国四川、新疆、青海不同来源的大麻的化学成分差异,来自新疆和青海的大麻叶积累了较高的黄酮类葡萄糖醛酸苷,高于四川,研究发现大麻叶片中黄酮类化合物的变异具有潜在的化学型标记和地理标志,能够提高大麻叶的实用和经济价值。

3、植物代谢组学在药用植物生物碱中的应用

生物碱是一类由氨基酸衍化而来,含有氮原子结构多样的环状化合物。“生物碱”这个词是由德国化学家卡尔 Carl F. W., Meissner 于 1819 年提出这个词,来源于阿拉伯语名字 al-qali,与最初分离出苏打水的植物密切相关。生物碱是一大类次生代谢物,分离出 12,000 多种物质。种类繁多结构式,来自不同的生物合成途径,呈现非常不同的药理活性是该组的特征。根据生物碱的生物合成前体和杂环系统,生物碱被划分为不同的类别,包括吲哚、莨菪烷、哌啶、嘌呤、咪唑、吡咯里西啶、吡咯烷、喹诺里西啶和异喹啉生物碱。生物碱有多种多样的生物活性,每种生物活性都有特定的作用机制。生物碱具有明显的肌肉松弛活性[56]、抗氧化活性[57]、抗癌活性[58]、抗菌和抗疟疾活性等[59]。

玫瑰花 *Catharanthus roseus* (C. roseus) 和小长春花 *Vinca minor* (V. minor) 中主要含有治疗人类疾病的吲哚生物碱类,使用最广泛的吲哚生物碱类是长春碱,对于脑循环和神经元稳态具有调节作用,并具有抗缺氧和神经保护作用。被用于预防和治疗脑血管功能不全和各种脑部疾病[60];Chen [61]利用广靶 GC-MS 和靶向 LC-MS 区别玫瑰花 *Catharanthus roseus* (C. roseus) 和小长春花 *Vinca minor* (V. minor) 中的表型和代谢物差异,结果显示,小长春花相比于玫瑰花,叶片较小,光合速率较低,有利于抵抗寒冷的环境。另外,小长春花中含有较高的吲哚生物碱中间体马钱子苷、蛇纹石、水昔草碱。这项工作对于两种药用植物之间初级和次级代谢产物做了全面的比较。Tawfeek [62]利用快速、灵敏的改进的 QuEChERS 方法对不同种类的羽扇豆属中的生物碱进行 LC-MS/MS 分析,在 6 分钟的分析窗口内检测和定量了 6 种生物碱,这种简单的分离方法比传统的 GC-MS 更加经济、容易;SYARPIN 利用 LCMS/MS 分析匍茎三叶藤橘根的提取部分中的植物化学成分和抗氧化活性。研究发现,匍茎三叶藤橘根的提取部分主要的化合物为生物碱类、苯丙素类、萜类,生物碱类在所有溶剂提取部分都含量丰富,生物碱随着溶剂极性的增加含量增加。

5. 总结与展望

代谢组学作为解析生物体内代谢物动态变化的核心技术，在植物次级代谢研究领域展现出重要的科学价值与应用潜力，同时也面临着诸多技术瓶颈与研究挑战。从技术优势来看，代谢组学凭借高通量、无偏向性的检测特性，可同时对数千种代谢物进行定性分析与定量分析，为解析植物响应环境胁迫、遗传调控等过程中的代谢变化提供系统性数据支持。其非靶向分析策略不仅能够捕捉已知代谢物的动态变化，更有助于发现新型天然产物，极大拓展了植物代谢研究的边界。特别是在植物次级代谢物合成调控网络解析方面，代谢组学通过全景式呈现代谢物变化，为阐明代谢通路调控机制提供了关键依据。然而，当前代谢组学技术仍存在显著局限性。首先，代谢物鉴定高度依赖现有数据库，对于大量结构新颖的未知代谢物，其准确注释面临巨大困难；其次，低丰度代谢物检测易受基质效应干扰，导致信号强度不足或检测偏差，影响数据准确性；此外，现有技术在代谢物时空动态监测方面存在精度短板，难以满足复杂环境下瞬时代谢调控机制解析的需求。

面向未来，代谢组学技术的创新与突破将主要聚焦于多维技术整合与智能化分析方向。在技术整合层面，通过串联质谱(MS/MS)与核磁共振(NMR)的联用，结合人工智能辅助的结构解析算法，有望显著提升未知代谢物的鉴定效率与准确性；开发高灵敏度的单细胞代谢组学技术，则可实现代谢物时空分布的精准解析。在研究策略层面，构建代谢组学与转录组学、蛋白质组学等多组学联合分析平台，并结合代谢流分析技术，将有助于系统揭示代谢物合成的分子调控网络及其环境应答机制。随着标准化实验流程的建立以及跨物种代谢物数据库的持续完善，代谢组学将在植物次级代谢产物的生物合成途径解析、生态功能挖掘以及作物遗传改良等领域发挥更为重要的作用，为植物资源高效利用与农业可持续发展提供新的技术路径与理论支撑。

参考文献

- [1] Tweeddale, H., Notley-McRobb, L. and Ferenci, T. (1998) Effect of Slow Growth on Metabolism of *Escherichia coli*, as Revealed by Global Metabolite Pool ("Metabolome") Analysis. *Journal of Bacteriology*, **180**, 5109-5116.
- [2] Václavík, T., Lautenbach, S., Kuemmerle, T. and Seppelt, R. (2013) Mapping Global Land System Archetypes. *Global Environmental Change*, **23**, 1637-1647. <https://doi.org/10.1016/j.gloenvcha.2013.09.004>
- [3] Mubeen, S., Hoyt, C.T., Gemünd, A., Hofmann-Apitius, M., Fröhlich, H. and Domingo-Fernández, D. (2019) The Impact of Pathway Database Choice on Statistical Enrichment Analysis and Predictive Modeling. *Frontiers in Genetics*, **10**, Article No. 1203. <https://doi.org/10.3389/fgene.2019.01203>
- [4] Kazmi, Z., Fatima, I., Perveen, S. and Malik, S.S. (2017) Monosodium Glutamate: Review on Clinical Reports. *International Journal of Food Properties*, **20**, 1807-1815. <https://doi.org/10.1080/10942912.2017.1295260>
- [5] Van Dam, N.M. and van der Meijden, E. (2011) A Role for Metabolomics in Plant Ecology. In: *Annual Plant Reviews*, Volume 43, John Wiley & Sons, Ltd., 87-107.
- [6] Nicholson, J.K., Lindon, J.C. and Holmes, E. (1999) "Metabonomics": Understanding the Metabolic Responses of Living Systems to Pathophysiological Stimuli via Multivariate Statistical Analysis of Biological NMR Spectroscopic Data. *Xenobiotica*, **29**, 1181-1189.
- [7] Patel, M., Pandey, S., Kumar, M., Haque, M., Pal, S. and Yadav, N. (2021) Plants Metabolome Study: Emerging Tools and Techniques. *Plants*, **10**, Article No. 2409. <https://doi.org/10.3390/plants10112409>
- [8] Fiehn, O., Kopka, J., Dörmann, P., Altmann, T., Trethewey, R.N. and Willmitzer, L. (2000) Metabolite Profiling for Plant Functional Genomics. *Nature Biotechnology*, **18**, 1157-1161. <https://doi.org/10.1038/81137>
- [9] Giunchetti, R.C., Silveira, P., Resende, L.A., Leite, J.C., Melo-Júnior, O.A.d.O., Rodrigues-Alves, M.L., *et al.* (2019) Canine Visceral Leishmaniasis Biomarkers and Their Employment in Vaccines. *Veterinary Parasitology*, **271**, 87-97. <https://doi.org/10.1016/j.vetpar.2019.05.006>
- [10] Wang, Y., Zhang, S., Li, F., Zhou, Y., Zhang, Y., Wang, Z., *et al.* (2019) Therapeutic Target Database 2020: Enriched Resource for Facilitating Research and Early Development of Targeted Therapeutics. *Nucleic Acids Research*, **48**, D1031-D1041. <https://doi.org/10.1093/nar/gkz981>
- [11] t'Kindt, R., Morreel, K., Deforce, D., Boerjan, W. and Van Bocxlaer, J. (2009) Joint GC-MS and LC-MS Platforms for

- Comprehensive Plant Metabolomics: Repeatability and Sample Pre-Treatment. *Journal of Chromatography B*, **877**, 3572-3580. <https://doi.org/10.1016/j.jchromb.2009.08.041>
- [12] Muráriková, A., Ťažký, A., Neugebauerová, J., Planková, A., Jampílek, J., Mučaji, P., *et al.* (2017) Characterization of Essential Oil Composition in Different Basil Species and Pot Cultures by a GC-MS Method. *Molecules*, **22**, Article No. 1221. <https://doi.org/10.3390/molecules22071221>
- [13] Fiehn, O. (2003) Metabolic Networks of Cucurbita Maxima Phloem. *Phytochemistry*, **62**, 875-886. [https://doi.org/10.1016/s0031-9422\(02\)00715-x](https://doi.org/10.1016/s0031-9422(02)00715-x)
- [14] Hirai, M.Y. and Saito, K. (2004) Post-Genomics Approaches for the Elucidation of Plant Adaptive Mechanisms to Sulphur Deficiency. *Journal of Experimental Botany*, **55**, 1871-1879. <https://doi.org/10.1093/jxb/erh184>
- [15] Aharoni, A., *et al.* (2004) Nontargeted Metabolome Analysis by Use of Fourier Transform Ion Cyclotron Mass Spectrometry. <https://home.liebertpub.com/omi>
- [16] Takada, D., Ehara, K. and Saka, S. (2004) Gas Chromatographic and Mass Spectrometric (GC-MS) Analysis of Lignin-Derived Products from Cryptomeria Japonica Treated in Supercritical Water. *Journal of Wood Science*, **50**, 253-259. <https://doi.org/10.1007/s10086-003-0562-6>
- [17] Xie, Y.J., *et al.* (2012) Chemical Variation in Essential Oil of *Cryptomeria fortunei* from Various Areas of China. *Industrial Crops and Products*, **36**, 308-312. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0926669011004134>
- [18] Qin, Y., Chen, X., Yang, J., Gao, J., Zhang, G., Yan, Y., *et al.* (2024) Integrated Metabolomic and Transcriptomic Analyses Reveal the Regulatory Mechanism Underlying the Accumulation of Anthocyanins in *Cornus officinalis* Pericarp. *Horticulturae*, **10**, Article No. 651. <https://doi.org/10.3390/horticulturae10060651>
- [19] Kumar, S., Shah, S.H., Vimala, Y., Jatav, H.S., Ahmad, P., Chen, Y., *et al.* (2022) Absciscic Acid: Metabolism, Transport, Crosstalk with Other Plant Growth Regulators, and Its Role in Heavy Metal Stress Mitigation. *Frontiers in Plant Science*, **13**, Article 972856. <https://doi.org/10.3389/fpls.2022.972856>
- [20] Raguso, R.A. (2008) Wake up and Smell the Roses: The Ecology and Evolution of Floral Scent. *Annual Review of Ecology, Evolution, and Systematics*, **39**, 549-569. <https://doi.org/10.1146/annurev.ecolsys.38.091206.095601>
- [21] Knudsen, J.T., *et al.* (2006) Diversity and Distribution of Floral Scent. *The Botanical Review*, **72**, Article No. 1. [https://link.springer.com/article/10.1663/0006-8101\(2006\)72\[1:dadofs\]2.0.co;2](https://link.springer.com/article/10.1663/0006-8101(2006)72[1:dadofs]2.0.co;2)
- [22] Hartmann, T. (2007) From Waste Products to Ecochemicals: Fifty Years Research of Plant Secondary Metabolism. *Phytochemistry*, **68**, 2831-2846. <https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2007.09.017>
- [23] Yousaf, H.K., Shan, T., Chen, X., Ma, K., Shi, X., Desneux, N., *et al.* (2018) Impact of the Secondary Plant Metabolite Cucurbitacin B on the Demographical Traits of the Melon Aphid, *Aphis gossypii*. *Scientific Reports*, **8**, Article No. 16473. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-34821-w>
- [24] Isah, T. (2019) Stress and Defense Responses in Plant Secondary Metabolites Production. *Biological Research*, **52**, Article No. 39. <https://doi.org/10.1186/s40659-019-0246-3>
- [25] Kumar, R. and Tewari, A.K. (2018) Isolation of Medicinally Important Constituents from Rare and Exotic Medicinal Plants. In: Tewari, A. and Tiwari, S., Eds., *Synthesis of Medicinal Agents from Plants*, Elsevier, 229-256. <https://doi.org/10.1016/b978-0-08-102071-5.00010-6>
- [26] Gao, F., Zhu, S., Sun, Y., Du, L., Parajulee, M., Kang, L., *et al.* (2008) Interactive Effects of Elevated CO₂ and Cotton Cultivar on Tri-Trophic Interaction of *Gossypium hirsutum*, *Aphis gossypii*, and *Propylaea japonica*. *Environmental Entomology*, **37**, 29-37. <https://doi.org/10.1093/ee/37.1.29>
- [27] Yuan, Y., Tang, X., Jia, Z., Li, C., Ma, J. and Zhang, J. (2020) The Effects of Ecological Factors on the Main Medicinal Components of *Dendrobium Officinale* under Different Cultivation Modes. *Forests*, **11**, Article No. 94. <https://doi.org/10.3390/f11010094>
- [28] Yang, L., Wen, K., Ruan, X., Zhao, Y., Wei, F. and Wang, Q. (2018) Response of Plant Secondary Metabolites to Environmental Factors. *Molecules*, **23**, Article No. 762. <https://doi.org/10.3390/molecules23040762>
- [29] Mohd Ali, S.A., Che Mohd Zain, C.R. and Latip, J. (2019) Influence of Elevated CO₂ on the Growth and Phenolic Constituents Production in *Hibiscus sabdariffa* var. UKMR-2. *Jurnal Teknologi*, **81**, 109-118. <https://doi.org/10.11113/jt.v81.13241>
- [30] Qiang, Q., Gao, Y., Yu, B., Wang, M., Ni, W., Li, S., *et al.* (2020) Elevated CO₂ Enhances Growth and Differentially Affects Saponin Content in *Paris polyphylla* var. *yunnanensis*. *Industrial Crops and Products*, **147**, Article ID: 112124. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2020.112124>
- [31] Ma, C.H., Chu, J.Z., Shi, X.F., Liu, C.Q. and Yao, X.Q. (2016) Effects of Enhanced UV-B Radiation on the Nutritional and Active Ingredient Contents during the Floral Development of Medicinal Chrysanthemum. *Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology*, **158**, 228-234. <https://doi.org/10.1016/j.jphotobiol.2016.02.019>
- [32] Bieza, K. and Lois, R. (2001) An Arabidopsis Mutant Tolerant to Lethal Ultraviolet-B Levels Shows Constitutively

- Elevated Accumulation of Flavonoids and Other Phenolics. *Plant Physiology*, **126**, 1105-1115. <https://doi.org/10.1104/pp.126.3.1105>
- [33] Nascimento, L.B.d.S., Leal-Costa, M.V., Menezes, E.A., Lopes, V.R., Muzitano, M.F., Costa, S.S., *et al.* (2015) Ultraviolet-b Radiation Effects on Phenolic Profile and Flavonoid Content of *Kalanchoe pinnata*. *Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology*, **148**, 73-81. <https://doi.org/10.1016/j.jphotobiol.2015.03.011>
- [34] Kleinwächter, M. and Selmar, D. (2014) New Insights Explain That Drought Stress Enhances the Quality of Spice and Medicinal Plants: Potential Applications. *Agronomy for Sustainable Development*, **35**, 121-131. <https://doi.org/10.1007/s13593-014-0260-3>
- [35] Alhaithloul, H.A., Soliman, M.H., Ameta, K.L., El-Esawi, M.A. and Elkelish, A. (2019) Changes in Ecophysiology, Osmolytes, and Secondary Metabolites of the Medicinal Plants of *Mentha piperita* and *Catharanthus roseus* Subjected to Drought and Heat Stress. *Biomolecules*, **10**, Article No. 43. <https://doi.org/10.3390/biom10010043>
- [36] Pant, P., Pandey, S. and Dall'Acqua, S. (2021) The Influence of Environmental Conditions on Secondary Metabolites in Medicinal Plants: A Literature Review. *Chemistry & Biodiversity*, **18**, e2100345. <https://doi.org/10.1002/cbdv.202100345>
- [37] Jogawat, A., *et al.* (2021) Crosstalk between Phytohormones and Secondary Metabolites in the Drought Stress Tolerance of Crop Plants: A Review. *Physiologia Plantarum*, **172**, 1106-1132.
- [38] Li, Y., Kong, D., Fu, Y., Sussman, M.R. and Wu, H. (2020) The Effect of Developmental and Environmental Factors on Secondary Metabolites in Medicinal Plants. *Plant Physiology and Biochemistry*, **148**, 80-89. <https://doi.org/10.1016/j.plaphy.2020.01.006>
- [39] Cox-Georgian, D., Ramadoss, N., Dona, C. and Basu, C. (2019) Therapeutic and Medicinal Uses of Terpenes. In: Joshee, N., Dhekney, S.A. and Parajuli, P., Eds., *From Farm to Pharmacy*, Springer International Publishing, 333-359. https://doi.org/10.1007/978-3-030-31269-5_15
- [40] Wada, K., Hazawa, M., Takahashi, K., Mori, T., Kawahara, N. and Kashiwakura, I. (2007) Inhibitory Effects of Diterpenoid Alkaloids on the Growth of A172 Human Malignant Cells. *Journal of Natural Products*, **70**, 1854-1858. <https://doi.org/10.1021/np070270w>
- [41] Reynolds, W.F. and Enriquez, R.G. (2016) Chapter 7. Terpenes: Mono-, Sesqui-, and Higher Terpenes. In: Williams, A., *et al.*, Eds., *Modern NMR Approaches to the Structure Elucidation of Natural Products: Data Acquisition and Applications to Compound Classes*, Royal Society of Chemistry, 251-274. <https://doi.org/10.1039/9781849734684-00251>
- [42] Trost, B.M. and Min, C. (2020) Total Synthesis of Terpenes via Palladium-Catalysed Cyclization Strategy. *Nature Chemistry*, **12**, 568-573. <https://doi.org/10.1038/s41557-020-0439-y>
- [43] Chen, M., Du, Y., Zhu, G., Takamatsu, G., Ihara, M., Matsuda, K., *et al.* (2018) Action of Six Pyrethrins Purified from the Botanical Insecticide Pyrethrum on Cockroach Sodium Channels Expressed in *Xenopus* Oocytes. *Pesticide Biochemistry and Physiology*, **151**, 82-89. <https://doi.org/10.1016/j.pestbp.2018.05.002>
- [44] Lybrand, D.B., Xu, H., Last, R.L. and Pichersky, E. (2020) How Plants Synthesize Pyrethrins: Safe and Biodegradable Insecticides. *Trends in Plant Science*, **25**, 1240-1251. <https://doi.org/10.1016/j.tplants.2020.06.012>
- [45] Silva, L.N., Zimmer, K.R., Macedo, A.J. and Trentin, D.S. (2016) Plant Natural Products Targeting Bacterial Virulence Factors. *Chemical Reviews*, **116**, 9162-9236. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.6b00184>
- [46] Merk, L., Kloos, M., Schönewitz, R. and Ziegler, H. (1988) Influence of Various Factors on Quantitative Composition of Leaf Monoterpenes of *Picea abies* (L.) Karst. *Trees*, **2**, 45-51. <https://link.springer.com/article/10.1007/BF00196979>
- [47] Bang, K.W., Lewis, G. and Villas-Boas, S.G. (2020) *Leptospermum scoparium* (Mānuka) and *Cryptomeria japonica* (Sugi) Leaf Essential Oil Seasonal Chemical Variation and Their Effect on Antimicrobial Activity. <https://www.preprints.org/manuscript/202008.0623>
- [48] Hanover, J.W. (1992) Applications of Terpene Analysis in Forest Genetics. *New Forests*, **6**, 159-178. <https://doi.org/10.1007/bf00120643>
- [49] Salam, U., Ullah, S., Tang, Z., Elateeq, A.A., Khan, Y., Khan, J., *et al.* (2023) Plant Metabolomics: An Overview of the Role of Primary and Secondary Metabolites against Different Environmental Stress Factors. *Life*, **13**, Article No. 706. <https://doi.org/10.3390/life13030706>
- [50] Stanivuković, Z., Govedar, Z., Kapovic Solomun, M. and Hrkić Ilić, Z. (2010) Climate Change Impact on Forest Vegetation in the Republic of Srpska.
- [51] Zhang, Y., Elam, E., Ni, Z., Zhang, F., Thakur, K., Wang, S., *et al.* (2022) LC-MS/MS Targeting Analysis of Terpenoid Metabolism in *Carya cathayensis* at Different Developmental Stages. *Food Chemistry*, **366**, Article ID: 130583. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.130583>
- [52] Tang, Q., Xu, Y., Gao, F., Xu, Y., Cheng, C., Deng, C., *et al.* (2023) Transcriptomic and Metabolomic Analyses Reveal

- the Differential Accumulation of Phenylpropanoids and Terpenoids in Hemp Autotetraploid and Its Diploid Progenitor. *BMC Plant Biology*, **23**, Article No. 616. <https://doi.org/10.1186/s12870-023-04630-z>
- [53] Liang, S.-M., Zhang, F., Zou, Y.-N., Kuča, K. and Wu, Q.-S. (2021) Metabolomics Analysis Reveals Drought Responses of Trifoliate Orange by Arbuscular Mycorrhizal Fungi with a Focus on Terpenoid Profile. *Frontiers in Plant Science*, **12**, Article ID: 740524. <https://doi.org/10.3389/fpls.2021.740524>
- [54] Valle, I.D., *et al.* (2020) Soil Organic Matter Attenuates the Efficacy of Flavonoid-Based Plant-Microbe Communication. *Science Advances*, **6**, eaax8254. <https://www.science.org/doi/full/10.1126/sciadv.aax8254>
- [55] Peer, W.A. and Murphy, A.S. (2007) Flavonoids and Auxin Transport: Modulators or Regulators? *Trends in Plant Science*, **12**, 556-563. [https://www.cell.com/ajhg/abstract/S1360-1385\(07\)00276-2](https://www.cell.com/ajhg/abstract/S1360-1385(07)00276-2)
- [56] Gayomba, S.R., Watkins, J.M. and Muday, G.K. (2017) Flavonols Regulate Plant Growth and Development through Regulation of Auxin Transport and Cellular Redox Status. In: *Recent Advances in Polyphenol Research*, John Wiley & Sons, Ltd., 143-170.
- [57] Taylor, L.P. and Grotewold, E. (2005) Flavonoids as Developmental Regulators. *Current Opinion in Plant Biology*, **8**, 317-323. <https://doi.org/10.1016/j.pbi.2005.03.005>
- [58] Sharma, A., Shahzad, B., Rehman, A., Bhardwaj, R., Landi, M. and Zheng, B. (2019) Response of Phenylpropanoid Pathway and the Role of Polyphenols in Plants under Abiotic Stress. *Molecules*, **24**, Article No. 2452. <https://doi.org/10.3390/molecules24132452>
- [59] Agati, G., *et al.* (2012) Flavonoids as Antioxidants in Plants: Location and Functional Significance. *Plant Science*, **196**, 67-76. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0168945212001586>
- [60] Agati, G. and Tattini, M. (2010) Multiple Functional Roles of Flavonoids in Photoprotection. *New Phytologist*, **186**, 786-793. <https://doi.org/10.1111/j.1469-8137.2010.03269.x>
- [61] Shen, N., *et al.* (2022) Plant Flavonoids: Classification, Distribution, Biosynthesis, and Antioxidant Activity. *Food Chemistry*, **383**, Article ID: 132531. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0308814622004939>
- [62] Yin, X., *et al.* (2024) Metabolic Profiling and Spatial Metabolite Distribution in Wild Soybean (*G. soja*) and Cultivated Soybean (*G. max*) Seeds. *Food Chemistry: X*, **23**, Article ID: 101717. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2590157524006059>