

DOI: 10.15906/j.cnki.cn11-2975/s.2024120041-04

# GC-MS结合模式识别分析 独一味不同部位挥发性成分

周小丽<sup>1</sup>, 唐丽杰<sup>1,2</sup>, 方李珂<sup>1</sup>, 桑海贸<sup>3</sup>, 钱慧琴<sup>1\*</sup>

(1.豫北医学院, 河南新乡 453003;

2.河南医药大学, 河南新乡 453000;

3.黄河科技学院, 河南郑州450063)

**[摘要]** 为揭示独一味(根、叶和花)中挥发性成分的差异,采用水蒸气蒸馏法提取独一味不同部位中的挥发性成分,使用气相色谱法-质谱联用分析其组成成分,采用主成分分析和聚类分析进行模式识别。结果表明:从独一味根、叶和花中分别鉴定出 106、57、73 种挥发性成分,占各总组分的 96.90%、98.66% 和 88.56%。共有成分有 11 种,分别为沉香醇、橙花叔醇、十五烷酸和 9-甲基十九烷等。由主成分分析和聚类分析可知,独一味叶和花中挥发性成分的种类有很大的相似性,但与根之间差别很大。本实验可为综合利用独一味药用植物资源提供科学依据。

**[关键词]** 独一味; 挥发性成分; 气相色谱-质谱; 模式识别

**[中图分类号]** S816.17

**[文献标识码]** A

**[文章编号]** 1004-3314(2026)09-0137-09

独一味 (*Lamiophlomis rotata*, LR) 为唇形科独一味属草本植物,主要生长于青海、西藏、四川、甘肃等高海拔地区。独一味在藏族作为民间草药使用已有一千多年历史,独一味始载于藏医经典著作《月王药诊》(成书于八世纪中叶),书中在骨伤治疗一章中记载独一味为“引导黄水之药”(葛珈铭, 2023)。目前,独一味被收录于《中华人民共和国药典》(2025 版一部),地上部位入药,具有活血止血、祛风止痛之效,用于治疗跌打损伤、外伤出血、风湿痹痛、黄水病等疾病(国家药典委员会, 2025)。现代研究表明,独一味主要含有环烯醚萜、黄酮、苯丙素、挥发油、香豆素、多糖和有机酸等成分,具有止痛、止血、抗炎、抗肿瘤、免疫调节、抗氧化和心脏保护活性等广泛的药理活性

(Cui 等, 2020; La 等, 2015; 袁涛等, 2014; 曾阳等, 2001)。此外,以独一味为原料制备成单方制剂独一味胶囊和独一味片在临床上广泛应用,主要用于痛经、流产后阴道出血、荨麻疹、骨囊肿、风湿性关节炎、胃癌等疾病(张燕飞等, 2021; 娄国菁和黄燕, 2004)。由此可见,独一味在医疗保健应用方面具有巨大的潜力。

目前,对独一味研究主要是针对非挥发性成分及其药理活性,而关于挥发性成分的研究尚有所欠缺。刘海峰等(2006)采用 GC-MS 分析独一味地上部分和地下部分的挥发油成分差异,但是关于独一味不同部位的挥发性成分是否存在差异仍有疑问。因此,本实验采用 GC-MS 分析方法对独一味根、叶和花中挥发性成分进行分析,采用聚类分析(cluster analysis, CA)和主成分分析(principle component analysis, PCA)对独一味不同部位进行模式识别,以分析独一味不同部位中挥发性成分的差异性,为独一味根茎、叶和花的合理开发利用提供科学支撑。

基金项目:河南省高等学校重点科研项目(23B360007);  
河南省科技攻关项目(262102310511)

作者简介:周小丽(1983—),女,硕士,副教授,主要从事天然活性成分研究, E-mail:22436502@qq.com

\* 通信作者:钱慧琴(1988—),硕士,副教授,主要从事天然药物活性成分研究, E-mail: qianhuiqina@163.com

## 1 材料与方法

1.1 材料与仪器 独一味于 2020 年 11 月采集于青海省西宁市湟中县。无水硫酸钠(分析纯)、正己烷(色谱纯),上海国药集团化学试剂有限公司。

安捷伦 GC7890A-MS5975C 气相色谱-质谱联用仪; VF-5MS 气相色谱柱 (30 m × 0.25 mm × 0.25 μm); FA2004 电子天平,上海良平仪器仪表有限公司。

### 1.2 实验方法

1.2.1 挥发油的提取 将独一味全草按照根、叶、花进行分类,洗净,于 60 °C 干燥,然后依次粉碎,过筛(60 目),得独一味根、叶和花粗粉。称取独一味根、叶和花粗粉各 40 g,分别置于 500 mL 圆底烧瓶中,加入 7 倍量蒸馏水,蒸馏提取 8 h,提取的挥发油用适量正己烷溶解,使用无水硫酸钠干燥,用 0.22 μm 微孔滤膜过滤,滤液进行 GC-MS 分析。

1.2.2 仪器工作条件 参照刘海峰等(2006)色谱和质谱条件并略做修改。色谱条件: VF-5MS 气相色谱柱 (30 m × 0.25 mm × 0.25 μm); 载气为氦气,流量 1.0 mL/min; 进样口温度 300 °C,进样量为 1 μL,分流进样,分流比 5:1; 柱温 60 °C (保持 2 min), 300 °C (保持 8 min), 以 10 °C/min 的速率进行程序升温。质谱条件: EI 离子源; 电离能量 70 eV; 离子源温度 200 °C, 接样口温度 300 °C, 采用 SCAN 扫描方式, 扫描范围质荷比 (m/z) 29~400; 溶剂延迟时间 0 min。

1.3 独一味不同部位挥发性成分分析 采用 NIST17 标准质谱图库和文献资料对独一味根、叶和花的挥发油的总离子流图进行分析,采用峰面积归一法计算独一味中不同挥发性成分的相对含量。

1.4 独一味不同部位挥发性成分化学模式识别分析 以挥发性成分的相对含量为响应值,使用 Origin 2019b 和 SIMCA 14.1 对独一味根、叶和花中挥发性成分进行 CA 和 PCA 分析。

## 2 结果与分析

2.1 独一味不同部位中挥发性成分分析 独一味根、叶和花中挥发性成分的总离子流图如图 1

所示。经过 GC-MS 检测,独一味根、叶和花各共鉴定出 106、57 和 73 种挥发性成分,相对含量分别占总组分的 96.90%、98.66% 和 88.56% (表 1)。

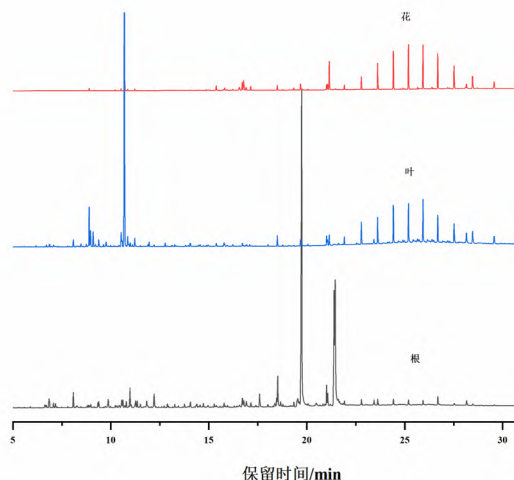


图 1 独一味根、叶和花中挥发性成分的总离子流图

2.2 挥发性成分类别 从独一味不同部位中鉴定出的挥发性成分按照化合物的官能团分为 10 类,包括醇类、醛类、酯类、酮类、羧酸类、醚类、酚类、烷烃类、烯烃类和其他。独一味不同部位挥发性成分种类和含量见表 2。从相对含量上看,独一味根中挥发性成分中羧酸类成分相对含量较高,占总组分的 50.49%,主要羧酸类物质为十五烷酸(34.77%)和亚麻酸(10.98%)。独一味叶和花中挥发性成分中烷烃类相对含量较高,分别占总组分的 61.54% 和 27.11%,其中叶和花中主要的烷烃类物质为二十四烷(11.01% 和 5.49%)和 9-甲基十九烷(10.68% 和 4.80%)。由此可见,独一味根与叶和花中挥发性成分的组成种类有很大不同,而叶和花组成种类有一定的相似性,但在挥发性组成成分的相对含量上存在较大差异。

2.3 共有成分和特有成分 对独一味根、叶和花中挥发性成分进行并集分析显示(图 2),独一味不同部位中共有挥发性成分有 11 种,包括沉香醇(5)、橙花叔醇(36)、十五烷酸(118)和 9-甲基十九烷(143)等。由图 3 可知,独一味不同部位中共有成分的相对含量存在较大差异,其中,

表 1 独一味根、叶和花中挥发性成分的具体信息

| 分类 | 序号 | 化合物名称                                                  | 分子式                                            | 相对百分含量/% |      |      | 分类 | 序号 | 化合物名称                       | 分子式                                             | 相对百分含量/% |      |      |
|----|----|--------------------------------------------------------|------------------------------------------------|----------|------|------|----|----|-----------------------------|-------------------------------------------------|----------|------|------|
|    |    |                                                        |                                                | 根        | 叶    | 花    |    |    |                             |                                                 | 根        | 叶    | 花    |
| 醇类 | 1  | 1-辛烯-3-醇                                               | C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O               | —        | —    | 0.36 | 醇类 | 34 | 异瑟模环烯醇                      | C <sub>20</sub> H <sub>34</sub> O               | 0.19     | —    | —    |
|    | 2  | 2,6-二甲基-5-庚烯-2-醇                                       | C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O               | 0.39     | —    | —    |    | 35 | 植物醇                         | C <sub>20</sub> H <sub>40</sub> O               | —        | 7.17 | 1.13 |
|    | 3  | 反式氧化芳樟醇                                                | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub> | 0.13     | —    | 0.36 |    | 36 | 橙花叔醇                        | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O               | 0.15     | 1.24 | 0.30 |
|    | 4  | 顺式氧化芳樟醇                                                | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub> | —        | —    | 0.30 | 醛类 | 37 | 己醛                          | C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O                | 0.55     | —    | 0.41 |
|    | 5  | 沉香醇                                                    | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | 0.16     | 0.50 | 0.30 |    | 38 | 2-己烯醛                       | C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O                | —        | —    | 0.41 |
|    | 6  | 脱氢芳樟醇                                                  | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O              | —        | —    | 0.30 |    | 39 | 3-甲基己醛                      | C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O                | 0.05     | —    | 0.08 |
|    | 7  | 2,6,6-三甲基双环[3.1.1]庚烷-3-醇                               | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | 0.07     | —    | —    |    | 40 | 5-甲基糠醛                      | C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>    | 0.36     | —    | —    |
|    | 8  | 环己基乙醇                                                  | C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O               | 0.09     | 0.08 | —    |    | 41 | 苯甲醛                         | C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O                 | 0.23     | —    | 0.23 |
|    | 9  | 2-苯乙醇                                                  | C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O               | —        | —    | 0.35 |    | 42 | (2E,4E)-2,4-壬二烯醛            | C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> O                | —        | —    | 0.25 |
|    | 10 | 左旋龙脑                                                   | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | 0.19     | 0.22 | —    |    | 43 | 辛醛                          | C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O                | 0.04     | —    | 0.09 |
|    | 11 | 异胡薄荷醇                                                  | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | 0.21     | —    | —    |    | 44 | 2,4-庚二烯醛                    | C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> O                | 0.06     | —    | —    |
|    | 12 | α-松油醇                                                  | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | —        | 0.47 | —    |    | 45 | 苯乙醛                         | C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O                 | 1.18     | —    | 0.9  |
|    | 13 | (-)-α-蒎品醇                                              | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | —        | —    | 1.72 |    | 46 | 2-辛烯醛                       | C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O                | 0.14     | —    | —    |
|    | 14 | 2-甲基-1-苯基-3-(对甲苯基)-1,3-丙二醇                             | C <sub>17</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub> | 0.20     | —    | —    |    | 47 | 壬醛                          | C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O                | 0.28     | —    | —    |
|    | 15 | D-香茅醇                                                  | C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O              | —        | 0.41 | 1.55 |    | 48 | α-环柠檬醛                      | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O               | 0.36     | —    | —    |
|    | 16 | 香叶醇                                                    | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | —        | 0.38 | 0.93 |    | 49 | 丁香醛B                        | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>  | —        | —    | 0.25 |
|    | 17 | 2,6,6-三甲基-1-环己烯-1-乙醇                                   | C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> O              | 0.08     | —    | —    |    | 50 | 丁香醛C                        | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>  | —        | —    | 0.70 |
|    | 18 | 2,3-脱氢-4-氧-β-紫罗兰醇                                      | C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub> | 0.22     | —    | —    |    | 51 | 丁香醛D                        | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>  | —        | —    | 0.15 |
|    | 19 | 芍药醇                                                    | C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>  | 0.43     | 0.10 | —    |    | 52 | 2-(3,3-二甲基环己基亚甲基)-(2E)-乙醛   | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O               | 0.71     | —    | —    |
|    | 20 | 大匙叶桉油烯醇                                                | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O              | —        | 0.59 | 0.21 |    | 53 | 癸醛                          | C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O               | —        | —    | 0.67 |
|    | 21 | (1S,3aS,4S,5S,7aR,8R)-5-异丙基-1,7a-二甲基辛氢-1H-1,4-甲基茛萜-8-醇 | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O              | —        | 0.26 | —    |    | 54 | 2,6,6-三甲基-1,3-环己二烯-1-甲醛     | C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O               | 0.57     | —    | —    |
|    | 22 | (1S,3aS,4S,5S,7aR,8R)-5-异丙基-1,7a-二甲基八氢-1H-1,4-亚甲基-8-醇  | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O              | —        | —    | 0.21 |    | 55 | 4-苄氧基-3-甲氧基-2-硝基苯甲醛         | C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>5</sub> | —        | 0.12 | —    |
|    | 23 | 柏木醇                                                    | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O              | 0.10     | —    | —    |    | 56 | 9-十八烯醛                      | C <sub>18</sub> H <sub>34</sub> O               | 0.06     | —    | —    |
|    | 24 | α-杜松醇                                                  | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O              | 0.31     | 1.38 | —    |    | 57 | 9,12,15-十八碳三烯醛              | C <sub>18</sub> H <sub>30</sub> O               | —        | 0.08 | —    |
|    | 25 | Spirojatamol                                           | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O              | —        | 2.31 | —    |    | 58 | (7Z,10Z,13Z)-7,10,13-十六碳三烯醛 | C <sub>16</sub> H <sub>26</sub> O               | 14.34    | —    | —    |
|    | 26 | T-依兰醇                                                  | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O              | 0.96     | —    | —    |    | 59 | 十三烷二醛                       | C <sub>13</sub> H <sub>24</sub> O <sub>2</sub>  | 0.86     | —    | —    |
|    | 27 | 愈创木醇                                                   | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O              | —        | —    | 0.31 |    | 60 | 糠醛                          | C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>    | 0.50     | —    | 0.50 |
|    | 28 | β-红没药醇                                                 | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O              | 0.67     | 3.26 | —    | 酮类 | 61 | 4-甲基-4-庚烯-3-酮               | C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O                | 0.05     | —    | —    |
|    | 29 | trans-p-Menthan-7-ol                                   | C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O              | —        | 1.00 | —    |    | 62 | 1-辛烯-3-酮                    | C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O                | 0.97     | —    | —    |
|    | 30 | 广藿香醇                                                   | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O              | —        | —    | 0.18 |    | 63 | 1-乙酰基-1-环己烯                 | C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> O                | 0.14     | —    | —    |
|    | 31 | α-檀香醇                                                  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O              | 0.36     | 1.00 | —    |    | 64 | 异佛尔酮                        | C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> O                | 0.44     | —    | —    |
|    | 32 | 3,5,11,15-四甲基-1-十六烷基-3-醇                               | C <sub>20</sub> H <sub>40</sub> O              | —        | 0.11 | —    |    | 65 | 4-氧代异佛尔酮                    | C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>   | 0.18     | —    | —    |
|    | 33 | 法尼醇                                                    | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O              | 0.10     | —    | —    |    | 66 | 1-(1,2,3-三甲基-2-环戊烯基)-乙酮     | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O               | 0.11     | —    | —    |
|    |    |                                                        |                                                |          |      |      |    | 67 | 3-异丙烯-5-甲基-4-己烯-2-酮         | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O               | 0.07     | —    | —    |
|    |    |                                                        |                                                |          |      |      |    | 68 | 4-甲基-烯酮                     | C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O               | 1.40     | —    | —    |

续表 1

| 分类 | 序号  | 化合物名称                                        | 分子式                                                           | 相对百分含量/% |      |      | 分类  | 序号  | 化合物名称                          | 分子式                                              | 相对百分含量/% |      |      |
|----|-----|----------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|----------|------|------|-----|-----|--------------------------------|--------------------------------------------------|----------|------|------|
|    |     |                                              |                                                               | 根        | 叶    | 花    |     |     |                                |                                                  | 根        | 叶    | 花    |
| 酮类 | 69  | 顺式-罗勒烯酮                                      | C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O                             | —        | —    | 0.45 | 酯类  | 102 | 次亚麻酸甲酯                         | C <sub>19</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>   | 0.96     | —    | —    |
|    | 70  | 2,4-二甲基-8-氧杂双环[3.2.1]辛-6-烯-3-酮               | C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>                 | 0.21     | —    | —    |     | 103 | 亚硫酸己基十五烷基酯                     | C <sub>21</sub> H <sub>44</sub> O <sub>3</sub> S | 0.12     | —    | —    |
|    | 71  | 反式-罗勒烯酮                                      | C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O                             | —        | —    | 0.23 |     | 104 | 11,14,17-二十碳三烯酸酯               | C <sub>21</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub>   | 0.38     | —    | —    |
|    | 72  | 甲基紫罗兰酮                                       | C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> O                             | 0.06     | —    | —    |     | 105 | 碳酸二十烷基丙-1-烯-2-酯                | C <sub>24</sub> H <sub>46</sub> O <sub>3</sub>   | 0.67     | —    | —    |
|    | 73  | 7-甲基-4,4a,5,6-四氢-2(3H)-萘酮                    | C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> O                             | 0.10     | —    | —    |     | 106 | 2'-羟基-4'-甲氧基苯乙酮2-甲基丙酸酯         | C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> O <sub>4</sub>   | —        | —    | 0.48 |
|    | 74  | β-大马酮                                        | C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> O                             | 0.05     | —    | —    | 羧酸类 | 107 | 2-壬烯酸                          | C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>    | 0.80     | —    | —    |
|    | 75  | 7-甲基六环戊烷[C]吡喃-1(3H)-酮                        | C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>                 | —        | —    | 0.18 |     | 108 | 壬酸                             | C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>    | 0.55     | —    | —    |
|    | 76  | 2-叔丁基-5-(2-甲基丙-2-烯-1-基)环己基-2,5-二烯-1,4-二酮     | C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>                | 0.17     | —    | —    |     | 109 | 癸酸                             | C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>   | 0.12     | —    | —    |
|    | 77  | β-紫罗兰酮                                       | C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> O                             | —        | 0.11 | 0.12 |     | 110 | 8-甲基壬酸                         | C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>   | 0.04     | —    | —    |
|    | 78  | 3,5,6,7,8,8a-六氢-4,8a-二甲基-6-(1-甲基乙烯基)-2(1H)萘酮 | C <sub>15</sub> H <sub>22</sub> O                             | 0.25     | —    | —    |     | 111 | 十二烷酸                           | C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> O <sub>2</sub>   | 0.23     | —    | —    |
|    | 79  | 2-羟基环十五烷酮                                    | C <sub>15</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>                | 2.53     | —    | —    |     | 112 | 正十四烷酸                          | C <sub>14</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>   | 1.05     | —    | —    |
|    | 80  | 3,3,6-三甲基庚-1,5-二烯-4-酮                        | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O                             | 0.09     | —    | —    |     | 113 | 十八烷酸                           | C <sub>18</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub>   | 0.42     | —    | —    |
|    | 81  | 2-戊基-2-环戊烯-1-酮                               | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O                             | —        | 0.24 | —    |     | 114 | 9-十六烯酸                         | C <sub>16</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>   | 1.33     | —    | —    |
|    | 82  | 6,10,14-三甲基-2-十五烷酮                           | C <sub>18</sub> H <sub>36</sub> O                             | —        | 1.15 | 1.13 |     | 115 | 棕榈酸                            | C <sub>16</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>   | 0.20     | —    | —    |
|    | 83  | 呋喃-3-羧酸酯                                     | C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>                  | 0.09     | —    | —    |     | 116 | Roughanic acid                 | C <sub>16</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>   | —        | 1.41 | —    |
| 酯类 | 84  | 4-甲基苯甲酸甲酯                                    | C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>                 | 0.46     | —    | —    |     | 117 | 亚麻酸 w                          | C <sub>18</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>   | 10.98    | —    | —    |
|    | 85  | 醋酸冰片酯                                        | C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>                | 0.53     | —    | —    |     | 118 | 十五烷酸                           | C <sub>17</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>   | 34.77    | 1.67 | 0.81 |
|    | 86  | 2-甲氧基-4-乙烯基苯基乙酸酯                             | C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>                | —        | 0.04 | —    | 烯烃类 | 119 | 檀烯                             | C <sub>9</sub> H <sub>14</sub>                   | 0.05     | —    | —    |
|    | 87  | 2,4-二羟基-6-甲基苯甲酸甲酯                            | C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>                 | 0.22     | —    | —    |     | 120 | β-侧柏烯                          | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                  | —        | —    | 0.12 |
|    | 88  | 草酸环己基癸酸酯                                     | C <sub>18</sub> H <sub>32</sub> O <sub>4</sub>                | —        | 0.21 | 0.10 |     | 121 | 4,4,6,6-四甲基双环[3.1.0]己-2-烯      | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                  | 0.07     | —    | —    |
|    | 89  | 3-辛烯酸壬酯                                      | C <sub>17</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>                | —        | 0.23 | 0.26 |     | 122 | 右旋柠檬烯                          | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                  | 0.09     | —    | —    |
|    | 90  | 2-苯基丁酸2-癸基酯                                  | C <sub>20</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>                | 0.09     | —    | —    |     | 123 | (R)-1-甲基-5-(丙基)环己烯             | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                  | —        | —    | 0.09 |
|    | 91  | 7-甲基环戊烷[C]吡喃-4-羧酸甲酯                          | C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>                | 0.10     | —    | —    |     | 124 | 3-甲基-反式-3a,4,7,7a-四氢茛烷         | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                  | 0.14     | —    | —    |
|    | 92  | 反式-2-十二碳烯-1-醇三氟乙酸酯                           | C <sub>14</sub> H <sub>23</sub> F <sub>3</sub> O <sub>2</sub> | 0.73     | —    | —    |     | 125 | 8-甲基-1-十一碳烯                    | C <sub>12</sub> H <sub>24</sub>                  | 0.07     | —    | —    |
|    | 93  | 邻苯二甲酸异丁酯                                     | C <sub>22</sub> H <sub>34</sub> O <sub>4</sub>                | —        | 0.14 | 0.13 |     | 126 | (-)-异苜蓿烯                       | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                  | —        | —    | 0.18 |
|    | 94  | 邻苯二甲酸二异丁酯                                    | C <sub>16</sub> H <sub>22</sub> O <sub>4</sub>                | 0.14     | —    | —    |     | 127 | α-姜黄烯                          | C <sub>15</sub> H <sub>22</sub>                  | 0.10     | —    | —    |
|    | 95  | 14-甲基-十五烷酸甲酯                                 | C <sub>17</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>                | 0.33     | 0.49 | —    |     | 128 | 顺式-α-甜没药烯                      | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                  | 0.07     | —    | —    |
|    | 96  | 邻苯二甲酸6-乙基-3-辛基丁酯                             | C <sub>22</sub> H <sub>34</sub> O <sub>4</sub>                | —        | 0.36 | 0.27 |     | 129 | 月桂烯                            | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                  | —        | 0.06 | —    |
|    | 97  | 亚硫酸2-乙基己基酯                                   | C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> O <sub>3</sub> S              | —        | 0.16 | —    |     | 130 | 1,3-二异丙烯基-6-甲基-环己烯             | C <sub>13</sub> H <sub>20</sub>                  | 0.08     | —    | —    |
|    | 98  | 亚硫酸2-乙基己基异己基酯                                | C <sub>22</sub> H <sub>34</sub> O <sub>4</sub>                | —        | —    | 0.18 |     | 131 | 3,3,5-三甲基-1,4-己二烯              | C <sub>9</sub> H <sub>16</sub>                   | —        | 0.08 | —    |
|    | 99  | 十一碳-10-炔酸十一烷基酯                               | C <sub>22</sub> H <sub>40</sub> O <sub>2</sub>                | 0.46     | —    | —    |     | 132 | 5-(2,2-二甲基环丙基)-2-甲基-4-亚甲基-1-戊烯 | C <sub>12</sub> H <sub>20</sub>                  | —        | 0.13 | —    |
|    | 100 | 十一碳-10-炔酸十二烷基酯                               | C <sub>23</sub> H <sub>42</sub> O <sub>2</sub>                | 0.17     | —    | —    |     | 133 | 5,5-二甲基-1-乙炔基双环[2.1.1]己烷       | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                  | —        | 0.13 | —    |
|    | 101 | 11,14-二十碳二烯酸甲酯                               | C <sub>21</sub> H <sub>38</sub> O <sub>2</sub>                | 1.51     | —    | 1.13 |     | 134 | β-香柑油烯                         | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                  | —        | 0.08 | —    |
|    |     |                                              |                                                               |          |      |      |     | 135 | 西柏烯                            | C <sub>20</sub> H <sub>32</sub>                  | —        | —    | 0.66 |
|    |     |                                              |                                                               |          |      |      |     | 136 | 2,6,10-三甲基十一烷-1,3-二烯           | C <sub>14</sub> H <sub>26</sub>                  | —        | 0.09 | —    |

续表 1

| 分类  | 序号  | 化合物名称            | 分子式                             | 相对百分含量/% |       |      | 分类 | 序号  | 化合物名称          | 分子式                                            | 相对百分含量/% |      |       |
|-----|-----|------------------|---------------------------------|----------|-------|------|----|-----|----------------|------------------------------------------------|----------|------|-------|
|     |     |                  |                                 | 根        | 叶     | 花    |    |     |                |                                                | 根        | 叶    | 花     |
| 烷烃类 | 137 | 十六烷              | C <sub>16</sub> H <sub>34</sub> | —        | 0.26  | 0.46 |    | 160 | 2-戊基呋喃         | C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> O               | 0.40     | —    | —     |
|     | 138 | 2,7,10-三甲基十二烷    | C <sub>16</sub> H <sub>34</sub> | —        | —     | 0.22 |    | 161 | 1-碘-2-甲基壬烷     | C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> I              | 0.19     | —    | —     |
|     | 139 | 十五烷              | C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> | —        | 0.10  | 0.18 |    | 162 | 丁酸酐            | C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>  | —        | 0.06 | —     |
|     | 140 | 7-甲基十五烷          | C <sub>16</sub> H <sub>34</sub> | —        | 1.11  | 0.83 |    | 163 | 肉豆蔻酸酐          | C <sub>28</sub> H <sub>54</sub> O <sub>3</sub> | 0.61     | —    | —     |
|     | 141 | 2-甲基二十四烷         | C <sub>25</sub> H <sub>52</sub> | 0.28     | —     | —    |    | 164 | 2-十二碳烯-1-基丁二酸酐 | C <sub>16</sub> H <sub>26</sub> O <sub>3</sub> | —        | —    | 0.15  |
|     | 142 | 2-甲基二十烷          | C <sub>21</sub> H <sub>44</sub> | —        | 9.25  | —    | 其他 | 165 | 9-二十炔          | C <sub>20</sub> H <sub>38</sub>                | —        | —    | 0.18  |
|     | 143 | 9-甲基十九烷          | C <sub>20</sub> H <sub>42</sub> | 0.31     | 10.68 | 4.80 |    | 166 | 棕榈酰胺           | C <sub>16</sub> H <sub>31</sub> NO             | 0.33     | —    | —     |
|     | 144 | 二十四烷             | C <sub>24</sub> H <sub>50</sub> | 0.31     | 11.01 | 5.49 |    | 167 | 2-甲基吡啶         | C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> N               | —        | 4.81 | 35.51 |
|     | 145 | 8-己基-十五烷         | C <sub>21</sub> H <sub>44</sub> | —        | 9.20  | 3.91 |    | 168 | 油酸酰胺           | C <sub>18</sub> H <sub>35</sub> NO             | 0.31     | —    | 0.47  |
|     | 146 | 2,6,10,15-四甲基十七烷 | C <sub>21</sub> H <sub>44</sub> | —        | 1.22  | 0.84 |    | 169 | 1-碘代-二十烷       | C <sub>20</sub> H <sub>41</sub> I              | 0.12     | 4.25 | 1.67  |
|     | 147 | 十三烷              | C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> | 0.31     | 0.10  | 0.18 | 醚类 | 170 | 顺式玫瑰氧化物        | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | —        | —    | 1.74  |
|     | 148 | 二十烷              | C <sub>20</sub> H <sub>42</sub> | 0.34     | 3.06  | 2.43 |    | 170 | 反式玫瑰氧化物        | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | —        | —    | 0.74  |
|     | 149 | 十九烷              | C <sub>19</sub> H <sub>40</sub> | 0.44     | 6.23  | 2.84 |    | 172 | 顺式(-)-氧化柠檬烯    | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O              | —        | —    | 0.22  |
|     | 150 | 廿一烷              | C <sub>21</sub> H <sub>44</sub> | 0.18     | 6.76  | 2.77 |    | 173 | 黄樟素            | C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub> | —        | —    | 0.53  |
|     | 151 | 三十四烷             | C <sub>34</sub> H <sub>70</sub> | 0.07     | 2.45  | 1.23 |    | 174 | 3,4-二甲氧基苯乙烯    | C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub> | 0.29     | —    | —     |
|     | 152 | 6-乙基-2-甲基辛烷      | C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> | 0.05     | —     | —    |    | 175 | 氧化石竹烯          | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O              | —        | 0.32 | —     |
|     | 153 | 4,7-二甲基十一烷       | C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> | —        | —     | 0.30 |    | 176 | 1-(乙氧基)-十二烷    | C <sub>14</sub> H <sub>28</sub> O              | 0.15     | 0.16 | —     |
|     | 154 | 3,7-二甲基壬烷        | C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> | —        | —     | 0.12 | 酚类 | 177 | 2-甲氧基-4-乙烯基苯酚  | C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>  | 1.20     | —    | 0.14  |
|     | 155 | 5-丁基壬烷           | C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> | 0.40     | —     | —    |    | 178 | 丁子香酚           | C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub> | —        | 0.06 | 0.43  |
|     | 156 | 2,3,5,8-四甲基癸烷    | C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> | —        | —     | 0.12 |    | 179 | 2,4-二叔丁基苯酚     | C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O              | 0.37     | —    | —     |
|     | 157 | 3,6-二甲基癸烷        | C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> | —        | —     | 0.15 |    |     |                |                                                |          |      |       |
|     | 158 | 3,7-二甲基壬烷        | C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> | —        | 0.11  | —    |    |     |                |                                                |          |      |       |
|     | 159 | 2-甲基-5-丙基壬烷      | C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> | —        | —     | 0.24 |    |     |                |                                                |          |      |       |

注：“—”表示未检出该成分。

表 2 独一味不同部位挥发性成分种类及其含量

| 化合物类别 | 根  |       | 叶  |       | 花  |       |
|-------|----|-------|----|-------|----|-------|
|       | 种类 | 含量/%  | 种类 | 含量/%  | 种类 | 含量/%  |
| 醇类    | 19 | 5.01  | 17 | 20.48 | 15 | 8.51  |
| 醛类    | 16 | 20.29 | 2  | 0.20  | 12 | 4.64  |
| 酮类    | 16 | 6.82  | 3  | 1.50  | 5  | 2.11  |
| 酯类    | 16 | 6.96  | 7  | 1.63  | 7  | 2.55  |
| 羧酸类   | 11 | 50.49 | 2  | 3.08  | 1  | 0.81  |
| 醚类    | 2  | 0.44  | 2  | 0.48  | 4  | 3.23  |
| 酚类    | 2  | 1.57  | 1  | 0.06  | 2  | 0.57  |
| 烷烃类   | 10 | 2.69  | 14 | 61.54 | 18 | 27.11 |
| 烯烃类   | 8  | 0.67  | 6  | 0.57  | 4  | 1.05  |
| 其他    | 6  | 1.96  | 3  | 9.12  | 5  | 37.98 |

根中十五烷酸(118)的含量(34.77%)远高于其叶(1.67%)和花(0.81%)。十五烷酸是一种脂肪酸,可支持人体长期代谢,并有助于心脏健康。体外试验表明,十五烷酸具有抗炎、抗菌、抗增殖和抗抑郁等活性 (Venn-watson 和 Butterworth, 2022; Galdiero 等, 2021)。值得注意的是十五烷酸可

通过调控 AMPK 通路促进胰岛素诱导葡萄糖摄取,并能显著促进胰岛素刺激的 C2C12 肌管中葡萄糖摄取 (Fu 等, 2021)。此外,十五烷酸通过激活凋亡信号通路参与骨骼肌减少症的发病 (Chen 等, 2020)。综上可知,减少含十五烷酸的食物或者药物的摄入会改善糖尿病和肌少症的症状。沉香醇可减轻氧化应激损伤,降低线粒体 ROS 与钙超载,维持线粒体膜电位稳态,显著改善线粒体功能障碍,发挥潜在神经保护作用。基于以上药理活性,沉香醇可作为治疗神经退行性脑疾病的潜在药物 (Sabogal-guáqueta 等, 2019)。此外,沉香醇还具有抗癌、抗菌、抗焦虑、抗抑郁、抗应激、保肝、保肾、保肺活性,还可作为抗癌药物或抗生素的佐剂 (An 等, 2021)。橙花叔醇具有抗胆碱酯、抗氧化、抗接种、抗炎和抗焦虑等活性 (De Carvalho 等, 2018)。综上可知,沉香醇和橙花叔醇是一种具

有开发治疗药物潜力的植物化学物质。

从独一味不同部位中挥发性成分的组成差异分析,独一味花中特有成分有 35 种,占其挥发性成分的 13.44%,包括醇类 8 种(3.73%),醛类 6 种(2.43%),酮类 3 种(0.86%),酯类 2 种(0.66%),醚类 4 种(3.23%),烷烃类 6 种(1.15%),烯烃类 4 种(1.05%),其他 2 种(0.33%),主要特有成分有(-)- $\alpha$ -萜品醇(1.72%)、顺式玫瑰氧化物(1.74%)等。 $\alpha$ -萜烯醇是一种单萜醇,可通过抑制 NF- $\kappa$ B 表达起到抗肺癌、乳腺癌、白血病和结直肠癌的作用(Negreiros 等, 2021)。

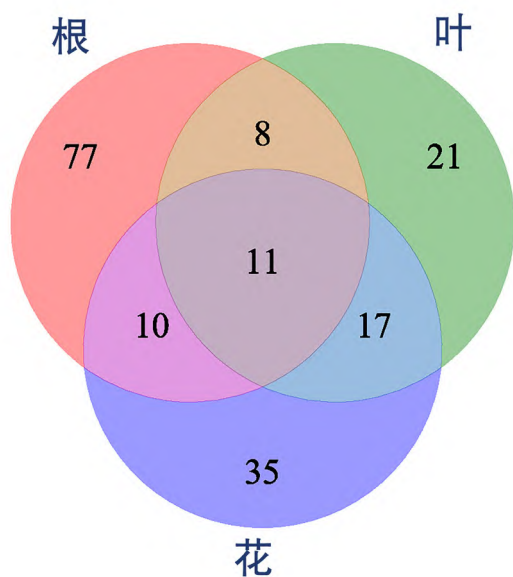


图 2 独一味不同部位挥发性成分数量的韦恩图

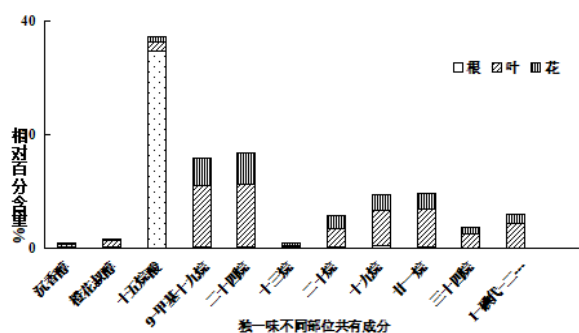


图 3 独一味不同部位共有成分的堆积图

独一味叶中特有成分 21 种,占其挥发性成分的 16.51%,包括醇类 5 种(4.15%),醛类 2 种(0.20%),酮类 1 种(0.24%),酯类 2 种(0.20%),

羧酸类 1 种(1.41%),醚类 1 种(0.32%),烷烃类 2 种(9.36%),烯烃类 6 种(0.57%),其他 1 种(0.06%),主要特有成分有 2-甲基二十烷(9.25%)、Spirojatamol(2.31%)、Roughanic acid(1.41%)等。

独一味根中特有挥发性成分 77 种,占其挥发性成分的 51.51%,包括酮类 16 种(6.87%),酯类 14 种(5.12%),醛类、羧酸类和醇类各 10 种(17.74%、15.72%和 2.52%),烷烃类 8 种(0.67%),烷烃类 3 种(0.73%),酚类和醚类各 1 种(0.37%和 0.29%),其他 4 种(1.53%),主要特有成分有(7Z,10Z,13Z)-7,10,13-十六碳三烯醛(14.34%)、亚麻酸(10.98%)、2-羟基环十五烷酮(2.53%)、4-甲基-烯酮(1.40%)。亚麻酸具有抗癌、抗肥胖和抗动脉粥样硬化活性,可用于治疗癌症、肥胖和动脉粥样硬化(Den Hartigh, 2019; Wang 等, 2016)。亚麻酸还能有效逆转棕榈酸诱导的小胶质细胞炎症反应(Tu 等, 2019)。

## 2.4 化学模式识别

2.4.1 聚类分析 采用 Origin 2019b 软件中 Ward 聚类分析法,以欧式距离(Euclidean distance)为测度,对独一味根、叶和花中挥发性成分进行聚类分析,结果见图 4。当欧式距离为 35 时,独一味不同部位聚为 2 类,第一类是叶和花聚为一类,第二类为根。说明独一味叶和花中挥发性成分种类相似,但二者与根之间的差别较大,这与主成分分析的结果保持一致。

2.4.2 主成分分析 为直观判断独一味不同部位之间挥发性成分是否存在差异,采用 Smica-P 软件对独一味根、叶和花中挥发性成分进行主成分分析,具体结果见得分图 5 和载荷图 6。由图 5 可知,独一味不同部位中挥发性成分在第 1 主成分方差贡献率为 65.4%,第 2 主成分的方差贡献率为 34.6%,总贡献率达到 100%,说明两个主成分能全面反映样品的整体信息。得分图中,独一味根位于第 1 象限,花位于第 2 象限,而叶位于第 4 象限,独一味不同部位处于相对独立的空间,说明独一味不同部位挥发性成分有显著差别。此外,

在得分图中可以看出,独一味花和叶的距离较近,而与根距离较远,这说明花和叶中挥发油的组成和含量有一定的相似性,而与根有较大差异。

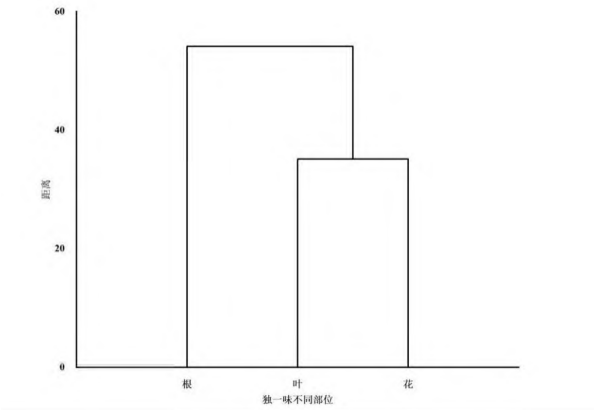


图 4 独一味不同部位挥发性成分聚类分析图

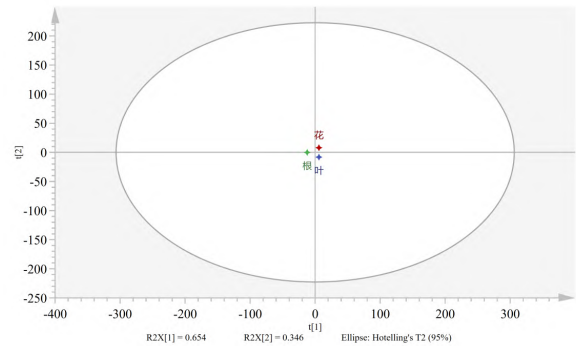


图 5 独一味根、叶和花中挥发性成分 PCA 得分图

由表 2 中独一味不同部位挥发性成分与图 6 各挥发性成分载荷图进行相关性分析可知,独一味不同部位中各个挥发性成分在载荷图中各象限的分布较为分散,说明独一味不同部位挥发性成分存在明显差异。结合表 1 实验数据和图 5 得分图可知,(7Z,10Z,13Z)-7,10,13-十六碳三烯醛(58)、亚麻酸(117)、2-羟基环十五烷酮(79)、4-甲基-烯酮(68)、9-十六烯酸(114)等挥发性成分分布于第 1 象限内,与 PC1 呈负相关,而与 PC2 呈正相关,是独一味根茎中挥发油的主要差异成分。顺式玫瑰氧化物(119)、(-)- $\alpha$ -萜品醇(13)、反式玫瑰氧化物(120)等挥发性成分位于第 2 象

限,与 PC1 和 PC2 均呈正相关,是独一味花中挥发油中的主要差异性成分。2-甲基二十烷(142)、Spirojatamol(25)、Roughanic acid(116)、trans-p-Menthan-7-ol(29)等位于第 4 象限,与 PC1 呈正相关,而与 PC2 呈负相关,是独一味叶中挥发性成分的主要差异性成分。综上,以上差异性成分可作为区分独一味不同部位的化学标志物。

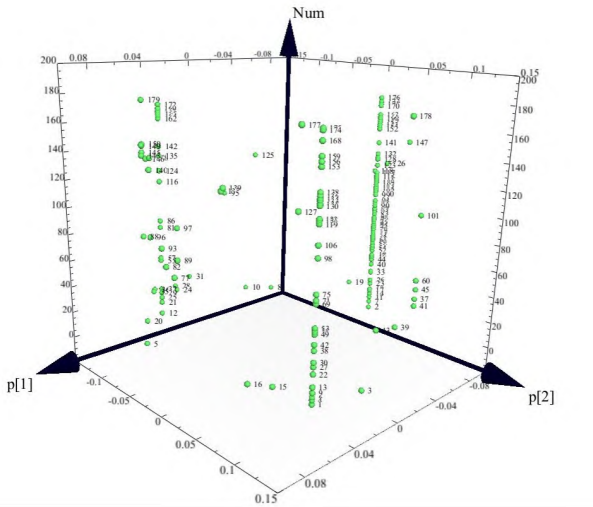


图 6 独一味根、叶和花中挥发性成分的 PCA 载荷图

### 3 结论与讨论

本实验采用 GC-MS 技术分析独一味根、叶和花中挥发性成分,结果发现,独一味叶和花的挥发性组成成分有很大的相似性,而与根的挥发性成分的组成有较大差异。独一味根中羧酸类相对含量较高,主要为十五烷酸和亚麻酸,而叶和花中挥发性成分中烷烃类相对含量较高,主要为二十四烷和 9-甲基十九烷。刘海峰等(2006)发现,独一味地上(叶和花)和地下部分(根和根茎)挥发油成分有很大的相似性,主要含有脂肪酸及其衍生物,其中棕榈酸和油酸含量较高,这与实验研究结果有很大的不同。由于已有文献没有明确指出独一味的产区和采收日期,但有研究报道不同的生长环境,对独一味的株高、根粗、花序量等均有影响,海拔越高,植株越高,根越粗及花序量越多(谢田朋等,2021)。此外,不同产地的

独一味中毛蕊花糖苷和连翘酯苷的含量存在较大差异,四川理塘产含量最低,甘肃玛曲产含量最高(张凤等,2008)。此外,不同的生长日期对独一味中质量标准物山梔苷甲酯和 8-O-乙酰山梔苷甲酯的含量亦有影响(郭敏等,2011)。纪兰菊等(2007)发现,独一味的叶、花、全草中均含有木犀草素,而根中未检出木犀草素。因此,造成与现有文献报道不一致的可能原因是独一味挥发性成分与产区、采收日期和药用部位有很大的相关性。本研究明确了独一味根、叶和花中挥发性组成成分的差异,这为独一味不同药用部位的开发提供了科学依据。独一味不同部位的挥发性成分的抗氧化、抗炎和抗肿瘤等生物活性尚有待研究,后期可通过体内和体外试验揭示独一味不同部位挥发性成分的药理活性。

### 参考文献

- [1] 葛珈铭, 索南昂旦, 康生福, 等. 藏族药独一味本草考证 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2023, 29(14):164~172.
- [2] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典: 一部 [M]. 北京: 中国医药科技出版社, 2025.
- [3] 郭敏, 汪付田, 王晓琳, 等. 不同生长期独一味中山梔苷甲酯和 8-O-乙酰山梔苷甲酯的含量研究 [J]. 药物分析杂志, 2011, 31(1):124~126.
- [4] 纪兰菊, 冯丽娟, 李生萍, 等. 藏药独一味药材中不同部位木犀草素和总黄酮含量的分析 [J]. 分析实验室, 2007, S1:101~103.
- [5] 刘海峰, 李翔, 邓赞, 等. 藏药独一味地上和地下部分挥发油成分的 GC-MS 分析 [J]. 药物分析杂志, 2006, 26(12):1794~1796.
- [6] 姜国菁, 黄燕. 藏药独一味(片、胶囊)的临床应用 [J]. 中成药, 2004, 10:76~79.
- [7] 谢田朋, 崔治家, 张建旭, 等. 高寒草地类型和海拔对濒危藏药独一味生长繁殖特征的影响 [J]. 广西植物, 2021, 41(8):1346~1353.
- [8] 袁涛, 王森, 顿珠, 等. 藏药独一味的研究进展 [J]. 中成药, 2014, 36(9):1958~1961.
- [9] 曾阳, 陈学军, 陈振宁. 藏药独一味的研究进展 [J]. 中草药, 2001, 12:88~90.
- [10] 张凤, 孙连娜, 陈万生. 不同产地独一味中苯乙醇苷类的含量测定与品质评价 [J]. 中国中药杂志, 2008, 11:1346~1347.
- [11] 张燕飞, 陈瑞鑫, 袁茂华, 等. 藏药独一味抗类风湿关节炎的作用及其药效物质基础研究 [J]. 中国药房, 2021, 32(5):578~583.
- [12] An Q, Ren JN, Li X, *et al.* Recent updates on bioactive properties of linalool[J]. Food & Function, 2021, 12(21):10370~10389.
- [13] Chen Fx, Du N, Hu J, *et al.* Intramuscular accumulation of pentadecanoic acid activates AKT1 to phosphorylate NCOR1 and triggers FOXM1-mediated apoptosis in the pathogenesis of sarcopenia[J]. American Journal of Translational Research, 2020, 12(9):5064~5079.
- [14] Cui ZH, Qin SS, Zang EH, *et al.* Traditional uses, phytochemistry, pharmacology and toxicology of *Lamiophlomis rotata* (Benth.) Kudo: a review [J]. RSC Advances, 2020, 10(19):11463~11474.
- [15] De Carvalho RBF, De Almeida AAC, Campelo NB, *et al.* Nerolidol and its Pharmacological Application in Treating Neurodegenerative Diseases: A Review[J]. Recent Patents on Biotechnology, 2018, 12(3):158~168.
- [16] Den Hartigh LJ. Conjugated Linoleic Acid Effects on Cancer, Obesity, and Atherosclerosis: A Review of Pre-Clinical and Human Trials with Current Perspectives[J]. Nutrients, 2019, 11(2):370~398.
- [17] Fu WC, Li HY, Li TT, *et al.* Pentadecanoic acid promotes basal and insulin-stimulated glucose uptake in C2C12 myotubes [J]. Food & Nutrition Research, 2021, 65:1~9.
- [18] Galdiero E, Ricciardelli A, D'angelo C, *et al.* Pentadecanoic acid against *Candida albicans*-*Klebsiella pneumoniae* biofilm: towards the development of an anti-biofilm coating to prevent polymicrobial infections[J]. Research in Microbiology, 2021, 72(7~8):103880.
- [19] La M, Zhang F, Gao S, *et al.* Constituent analysis and quality control of *Lamiophlomis rotata* by LC-TOF/MS and HPLC-UV [J]. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 2015, 102:366~376.
- [20] Negreiros HA, De Moura KG, Barreto Do Nascimento MLL, *et al.* Alpha-Terpineol as Antitumor Candidate in Pre-Clinical Studies[J]. Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry, 2021, 21(15):2023~2031.
- [21] Sabogal-guáqueta AM, Hobbie F, Keerthi A, *et al.* Linalool attenuates oxidative stress and mitochondrial dysfunction mediated by glutamate and NMDA toxicity[J]. Biomedicine & Pharmacotherapy, 2019, 118:1~12.
- [22] Tu TH, Klim H, Yang S, *et al.* Linoleic acid rescues microglia inflammation triggered by saturated fatty acid[J]. Biochemical and Biophysical Research Communications, 2019, 513(1):201~206.
- [23] Venn-watson SK, Butterworth CN. Broader and safer clinically-relevant activities of pentadecanoic acid compared to omega-3: Evaluation of an emerging essential fatty acid across twelve primary human cell-based disease systems[J]. PLoS One, 2022, 17(5):1~17.
- [24] Wang J, Liang Y, Jian L, *et al.* Linoelaidic acid enhances adipogenic differentiation in adipose tissue-derived stromal cells through suppression of Wnt/ $\beta$ -catenin signaling pathway in vitro[J]. Prostaglandins Leukot Essent Fatty Acids, 2016, 110:1~7.

## Analysis of volatile components in different parts of *Lamiophlomis rotata* using GC-MS combined with pattern recognition

ZHOU Xiaoli<sup>1</sup>, TANG Lijie<sup>1,2</sup>, FANG Like<sup>1</sup>, SANG Haimao<sup>3</sup>, QIAN Huiqin<sup>1\*</sup>

(1.North Henan Medical University, Xinxiang, Henan Province,453003, China;

2.Henan Medical University, Xinxiang ,Henan Province, 453000, Province ,China;

3. Huanghe University of Science and Technology, Zhengzhou, Henan Province,450063, China)

**[Abstract]** In order to reveal the differences of the volatile components in the different parts (roots, leaves and flowers) of *Lamiophlomis rotata* (LR), the volatile components in different parts of LR were extracted by steam distillation, then analyzed and identified by gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS). The obtained data were then analyzed via pattern recognition using cluster analysis (CA) and principle component analysis (PCA). The results showed that 106, 57 and 73 volatile components were identified from the roots, leaves and flowers of LR, which accounted for 96.90%, 98.66% and 88.56% of the total fractions, respectively. There were 11 common volatile components in the three parts, including linalool, nerolidol, pentadecanoic acid, 9-methylnonadecane, etc. According to the principal component analysis and cluster analysis, the types of volatile components in leaves and flowers showed great similarity but differed greatly from the roots. The experiment could offer the scientific basis for the comprehensive utilization of the medicinal plant resources of LR.

**[Key words]** *Lamiophlomis rotata*; volatile components; gas chromatography-mass spectrometry; pattern recognition

(上接第 136 页)

## Determination of azithromycin illegal addition in mixed feed additives by UPLC-MS/MS

WANG Yingying<sup>1</sup>, YANG Zhiguo<sup>1</sup>, ZHU Na<sup>2</sup>, ZHAO Xuefeng<sup>1</sup>, ZHANG Wei<sup>1</sup>, SUN Kai<sup>2</sup>,

BU Yanlin<sup>1</sup>, LI Qing<sup>1</sup>, LI Junling<sup>1\*</sup>

1.Shandong Livestock Product Quality and Safty Center,Jinan,Shandong Province 250100,China;

2.Centre Testing International(Qingdao)Co.,Ltd,Qingdao,Shandong Province 266100,China

**[Abstract]** The experiment aimed to establish an analytical method for the determination of azithromycin illegal addition in mixed feed additives by ultra performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry (UPLC-MS/MS). The samples were uniformly dispersed by water, extracted by acetonitrile, and NaCl was used as salting-out agent. Extraction liquid was purified by solid-phase extraction column, and finally detected by UPLC-MS/MS, matrix standard curve quantification. The results showed that the azithromycin detected by this method had a good linear relationship between 0.5~20 µg/L. The limit of quantity of the method was 10 µg/kg. The blank samples were spiked at three levels (10, 20 µg/kg and 100 µg/kg), and the average recoveries were 81.0%~101.8% ( $n=6$ ), and the relative standard deviations were no more than 8.6%. This method was simple, rapid and accurate. It was suitable for the determination of azithromycin in mixed feed additives.

**[Key words]** azithromycin; mixed feed additives; UPLC-MS/MS; determination