

HS-SPME-GC-MS 联用技术分析不同产地艾叶挥发性成分

刘梦菲, 江汉美*, 肖宇硕, 孟佳敏

(湖北中医药大学, 湖北省药用植物研发中心, 武汉 430065)

[摘要] **目的:**采用顶空固相微萃取-气相色谱-质谱(HS-SPME-GC-MS)联用技术分析湖北蕲春、江苏南通、浙江台州、云南楚雄和新疆乌鲁木齐 5 个不同产地的 13 批艾叶中挥发性成分的含量及分布特征,为蕲艾的道地性的研究提供科学依据,并为艾叶资源的合理利用提供科学参考。**方法:**采用顶空固相微萃取技术,结合气相色谱-质谱法(GC-MS)对不同产地的 13 批艾叶中挥发性成分进行分析鉴定,利用峰面积归一化法测定各成分的相对百分含量,并用化学计量法主成分分析和聚类分析对艾叶中的挥发性成分进行分析。**结果:**初步鉴定出了 187 种化合物,主要为烯类、醇类和酮类化合物,不同产地及不同品种艾叶中的挥发性成分具有一定差异,其中湖北蕲春所产的五尖艾品质最好。**结论:**顶空固相微萃取法操作简便、萃取速度快、使用成本低,采用顶空固相微萃取与气相色谱-质谱联用的方法稳定可靠,适用于艾叶中挥发性成分的快速分析,为艾叶的内在质量评价提供一定的科学依据,并为艾叶资源的合理利用提供科学参考。

[关键词] 艾叶; 不同产地; 挥发性成分; 顶空固相微萃取-气相色谱-质谱; 主成分分析; 聚类分析

[中图分类号] R284.1; R22; R2-03; R243 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1005-9903(2018)10-0079-011

[doi] 10.13422/j.cnki.syfjx.20180917

[网络出版地址] <http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.3495.R.20180213.1010.001.html>

[网络出版时间] 2018-02-13 20:02

Comparative Analysis of Volatile Components of Artemisiae Argyi Folium from Different Origins Using HS-SPME-GC-MS

LIU Meng-fei, JIANG Han-mei*, XIAO Yu-shuo, MENG Jia-min

(Research and Development Center of Medicinal Plant in Hubei Province, Hubei University of Chinese Medicine, Wuhan 430065, China)

[Abstract] **Objective:** To analyze the content and distribution characteristics of volatile components in Artemisiae Argyi Folium of different regions by HS-SPME-GC-MS, in order to provide the scientific basis for the study of the geographical origin and the scientific reference for the rational utilization of Artemisiae Argyi Folium. **Method:** The volatile components were investigated by HS-SPME-GC-MS based on the agilent productivity Chem Station and quantified roughly by peak area normalization method. The data were analyzed by principal component analysis (PCA) and cluster analysis (CA). **Result:** One hundred and eighty-seven components were preliminarily identified as mainly ketones, alkenes, aldehydes and alcohols. There were significant differences in essential components of Artemisiae Argyi Folium from different origins. Artemisiae Argyi Folium from Qichun in Hubei province had the best quality. **Conclusion:** The method of headspace solid phase microextraction is simple and convenient, with a fast extraction speed and low use cost. The method of headspace solid phase microextraction and gas chromatography-mass spectrometry is stable and reliable, and suitable for the rapid analysis of volatile components in leaves, and provide a scientific basis for the rational use of the resources.

[Key words] Artemisiae Argyi Folium; different origins; volatile component; HS-SPME-GC-MS;

[收稿日期] 20170807(022)

[第一作者] 刘梦菲, 硕士, 从事中药及其天然药物活性成分研究, E-mail: 359545809@qq.com

[通信作者] * 江汉美, 教授, 硕士生导师, 从事中药及其天然药物活性成分研究, E-mail: 13807186811@sohu.com

principal component analysis; cluster analysis

艾叶为菊科植物艾 *Artemisia argyi* 的干燥叶^[1], 以湖北蕲春产者质量最佳, 谓为“蕲艾”, 蕲艾堪称艾中珍品, 被誉为道地药材^[2]。蕲艾具有浓郁的香气, 其挥发油含量丰富, 成分复杂, 是医疗行业、香料工业、食品工业及化学工业的重要原料^[3], 其挥发性成分是蕲艾主要药效成分。顶空固相微萃取法 (HS-SPME) 无需溶剂, 集取样、萃取、浓缩、进样于一体, 具有操作简便、萃取速度快、使用成本低、富集效率高等特点, 与 GC-MS 联用作为分析艾叶挥发性成分的首选方法。目前已有一些分析艾叶中挥发性成分的研究^[4-11], 本实验在前期研究的基础上, 采用顶空固相微萃取技术, 结合气相色谱-质谱法 (GC-MS) 对湖北蕲春、江苏南通、浙江台州、云南楚雄和新疆乌鲁木齐 5 个不同产地的 13 批艾叶中挥发性成分进行分析鉴定, 利用峰面积归一化法测定各成分相对百分含量, 并用化学计量法主成分分析和聚类分析对艾叶中挥发性成分进行分析, 为蕲艾道地性的考究提供科学依据, 并为艾叶的内在质量评价提供一定的科学参考。

1 材料

Agilent 6890/5973 型气相-质谱-计算机联用仪 (美国安捷伦公司), NIST 系列标准谱库; 手动固相微萃取 (SPME) 进样装置 (德国 IKA 公司), 65 μm 聚二甲基硅氧烷-二乙烯基苯 (PDMS/DVB) 萃取纤维头 (美国 Supelco 公司), 顶空瓶 (15 mL), ALC-210. 2 型电子天平 (北京赛多利斯天平有限公司)。

不同产地艾叶来源见表 1, 经湖北中医药大学生药教研室张秀桥教授鉴定为菊科植物艾 *Artemisia argyi* 的干燥叶。

2 方法

2.1 顶空固相微萃取条件 取艾叶 0.3 g, 研碎, 置于配有聚四氟乙烯胶垫的 15 mL 顶空瓶中, 用带有 65 μm PDMS-DVB 萃取纤维头的手动进样器插入瓶内, 120 °C 平衡 10 min, 推出萃取头顶空萃取 10 min, 取出, 立即插入色谱仪进样口 (温度 250 °C), 解吸 3 min。

2.2 GC-MS 分析条件 色谱条件: HP-5MS 石英毛细管柱 (0.25 mm × 30 m, 0.25 μm), 程序升温 (初始温度 50 °C, 以 2 °C · min⁻¹ 升温至 80 °C, 再以 8 °C · min⁻¹ 升温至 180 °C, 保留 3 min), 进样口温度 230 °C, 载气高纯氦气 (99.999%), 载气流速 1.0 mL · min⁻¹, 不分流进样。

表 1 不同产地艾叶样品来源信息

Table 1 Information of *Artemisiae Argyi* Folium from different origins

采收地	编号	具体信息	采收时间
江苏南通	S1	七尖艾引种南通种植	2016-06-02
	S2	五尖艾引种南通种植	2016-06-02
湖北蕲春	S3	香艾	2016-06-04
	S4	五尖艾	2016-06-04
	S5	七尖艾	2016-06-04
	S6	九尖艾	2016-06-04
	S7	九尖艾	2016-06-04
浙江台州	S8	香艾	2016-06-14
	S9	海艾	2016-06-14
云南楚雄	S10	青山引种云南种植 (有籽小叶艾)	2016-06-24
	S11	蕲艾引种云南种植 (大叶艾)	2016-06-24
新疆乌鲁木齐	Xj3	湖北蕲春五尖艾移栽乌市 (端午艾)	2016-06-15
	Xj15	阜康 222 团小区种植	2016-06-23

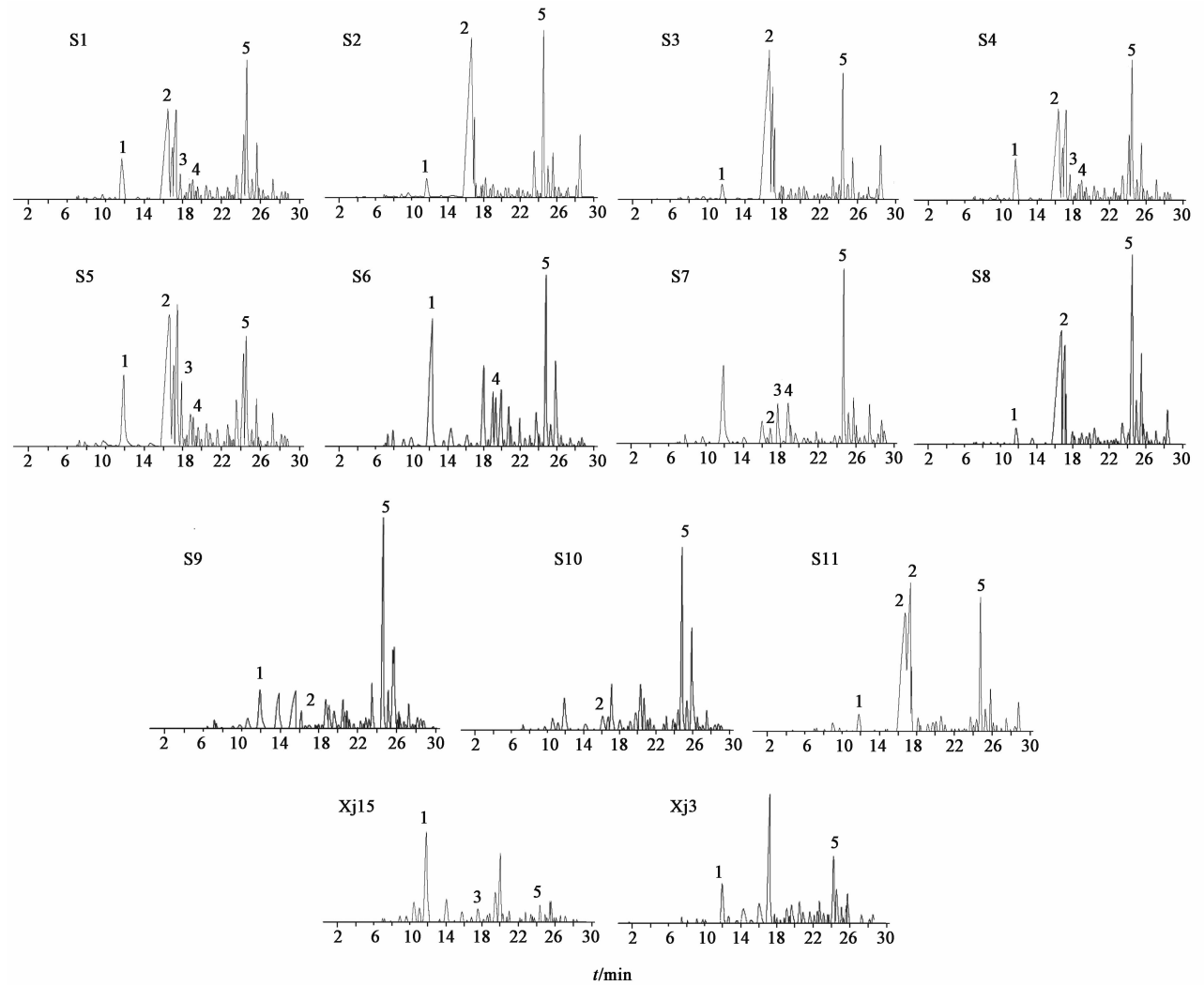
注: 所有样品均为栽培品。

质谱条件: 离子源 EI, 离子源温度 230 °C, 四级杆温度 150 °C, 接口温度 280 °C, 电子能量 70 eV, 倍增管电压 1.2 kV, 质量范围 *m/z* 35 ~ 550。

3 结果与分析

按照上述顶空固相微萃取条件和气相色谱-质谱条件, 分析不同产地艾叶样品中挥发性成分, 经安捷伦化学工作站数据处理并用峰面积归一化法从总离子流图中计算各组分相对质量分数, 按各峰的质谱图经 NIST 08 质谱数据库检索, 并结合相关文献, 初步鉴定出了 187 种化合物, 分析结果见图 1, 表 2。

3.1 不同产地艾叶总挥发性成分分析 本实验应用顶空固相微萃取技术对不同产地的 13 批艾叶进行 GC-MS 分析, 从 S1 号中共分离出 43 个峰, 并确定了其中 42 个组分, 占总挥发性成分的 99.95%; 从 S2 号中共分离出 47 个峰, 并确定了其中 44 个组分, 占总挥发性成分的 99.27%; 从 S3 号中共分离出 43 个峰, 并确定了其中 41 个组分, 占总挥发性成分的 99.38%; 从 S4 号中共分离出 49 个峰, 并确定了



1. 桉油精; 2. 侧柏酮; 3. 樟脑; 4. 冰片; 5. 1-石竹烯

图 1 不同产地艾叶挥发性成分总离子流

Fig. 1 Total ionic flow diagram of volatile components in *Artemisiae Argyi Folium* from different habitat

表 2 不同产地艾叶样品中挥发性成分

Table 2 Volatile components of *Artemisiae Argyi Folium* from different origins

峰号	化合物		分子式	相对质量分数/%													
	中文名称	英文名称		S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	Xj3	Xj15	
1	三甲胺	trimethylamine	C ₃ H ₉ N	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.02
2	1, 1-二甲基-2-(2-甲基-2-丙烯基)-环丙烷	1,1-dimethyl-2-(2-methyl-2-propenyl)-cyclopropane	C ₉ H ₁₆	0.03	0.03	0.03	-	-	-	-	0.04	-	-	-	-	-	-
3	螺[2.5]辛烷	spiro[2.5]octane	C ₈ H ₁₄	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.06	-	-
4	5-(1,1-二甲基乙基)-1,3-环戊二烯	5-(1,1-dimethylethyl)-1,3-cyclopentadiene	C ₉ H ₁₄	-	-	-	-	0.02	-	2.71	-	-	-	-	-	-	-
5	1-(3-亚甲基环戊基)-乙酮	1-(3-methylene-cyclopentyl)-etha	C ₈ H ₁₂ O	-	-	-	-	0.02	-	-	-	-	-	-	-	-	-
6	1, 7, 7-三甲基-三环[2.2.1.0(2,6)]庚烷	1, 7, 7-trimethyl-tricyclo[2.2.1.0(2,6)]heptane	C ₁₀ H ₁₆	-	-	-	-	-	0.04	-	-	-	-	-	-	-	-

续表 2

峰号	化合物		分子式	相对质量分数/%													
	中文名称	英文名称		S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	Xj3	Xj15	
7	2-甲基-5-(1-甲基乙基)-二环[3.1.0]己-2-烯	2-methyl-5-(1-methylethyl)-bicyclo[3.1.0]hex-2-ene	C ₁₀ H ₁₆	-	-	-	-	-	0.21	-	-	-	-	-	-	-	
8	α-蒎烯	α-pinene	C ₁₀ H ₁₆	-	-	0.15	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
9	二环[3.1.0]己-3-烯-2-醇	bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-ol	C ₆ H ₈ O	-	0.13	0.32	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
10	黏蒿三烯	artemisia triene	C ₁₀ H ₁₆	-	-	-	-	-	-	-	-	0.6	-	-	-	-	
11	3-蒎烯	3-carene	C ₁₀ H ₁₆	-	-	-	-	-	0.04	-	0.51	-	-	-	-	-	
12	4-蒎烯	4-carene	C ₁₀ H ₁₆	-	-	-	-	-	-	-	0.11	-	-	-	-	-	
13	蒎烯	pinene	C ₁₀ H ₁₆	0.20	-	-	0.60	0.40	0.99	0.24	0.51	-	0.58	0.32	0.61	0.67	
14	环戊烯酮	cyclofenchone	C ₁₀ H ₁₆	-	0.15	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
15	茨烯	camphene	C ₁₀ H ₁₆	-	0.06	-	0.21	0.41	1.52	1.18	-	0.05	-	0.95	-	0.10	
16	(1S)-2,2,2-三甲基-3-亚甲基二环[2.2.1]庚烷	(1S)-2,2-dimethyl-3-methylene-bicyclo[2.2.1]heptane	C ₁₀ H ₁₆	0.07	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
17	2,4(10)-紫杉二烯	2,4(10)-thujadiene	C ₁₀ H ₁₄	0.09	-	-	-	-	-	-	-	-	0.16	0.21	-	-	
18	皮蝇磷	b-terpinen	C ₁₀ H ₁₆	0.73	-	-	-	0.33	0.84	0.39	-	-	-	-	-	-	
19	庚-3-烯-2-醇	thuj-3-en-2-ol	C ₈ H ₁₆ O	-	-	-	-	-	-	-	0.23	-	-	-	-	-	
20	β-水芹烯	β-phellandrene	C ₁₀ H ₁₆	-	0.36	0.19	0.31	-	-	-	0.25	-	6.88	1.00	1.40	0.69	
21	β-蒎烯	β-pinene	C ₁₀ H ₁₆	-	-	-	-	-	-	-	-	0.29	-	-	-	-	
22	蘑菇醇	1-octen-3-ol	C ₈ H ₁₆ O	0.86	0.83	0.58	1.18	0.96	1.48	1.56	0.47	0.67	0.78	0.62	1.76	0.60	
23	α-水芹烯	α-phellandrene	C ₁₀ H ₁₆	0.16	0.37	0.28	0.26	0.32	0.27	0.51	0.15	-	2.35	0.18	5.97	0.26	
24	2-藜芦烯(7CI,8CI)	2-carene(7CI,8CI)	C ₁₀ H ₁₆	-	-	0.44	0.18	-	2.32	-	-	-	-	-	3.88	-	
25	3,3,6-三甲基-1,4-庚二烯-6-醇	3,3,6-trimethyl-1,4-heptadien-6-ol	C ₁₀ H ₁₈ O	-	-	-	-	-	-	-	-	1.91	-	-	-	-	
26	3-辛醇	3-octanol	C ₈ H ₁₈ O	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.21	-	-	
27	松油烯	terpilene	C ₁₀ H ₁₆	0.14	-	0.1	-	0.11	0.17	-	0.08	-	-	0.08	-	-	
28	桉油精	eucalyptol	C ₁₀ H ₁₈ O	3.88	3.1	2.48	7.79	7.97	21.24	19.32	2.7	7.14	0.30	2.83	26.39	9.13	
29	薄荷烯	menthomenthene	C ₁₀ H ₁₈	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.33	
30	萜品烯	g-terpinene	C ₁₀ H ₁₆	0.32	0.30	0.21	0.30	0.19	0.70	0.31	-	-	0.22	0.23	0.71	0.35	
31	顺式-β-萜品醇	cis-β-terpineol	C ₁₀ H ₁₈ O	1.07	0.62	-	0.72	1.18	2.96	1.58	-	-	1.47	0.87	9.85	4.34	
32	异松油烯	terpinolene	C ₁₀ H ₁₆	-	0.13	-	-	-	0.32	-	-	0.13	1.28	-	0.35	-	
33	顺-对-甲基-2-烯-1-醇	cis-p-menth-2-en-1-ol	C ₁₀ H ₁₈ O	-	-	-	-	-	2.60	-	-	0.46	-	-	1.05	-	
34	二氢异羟脯氨酸醇	dihydroneoisocarveol	C ₁₀ H ₁₈ O	-	-	-	0.22	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
35	1-咪唑-1-基-3-甲基丁-2-烯-1-酮	1-imidazol-1-yl-3-methylbut-2-en-1-one	C ₈ H ₁₀ N ₂ O	-	-	-	-	-	-	-	-	-	7.34	-	-	-	
36	3,3,6-三甲基-1,5-庚二烯-4-醇	3,3,6-trimethyl-1,5-heptadien-4-ol	C ₁₀ H ₁₈ O	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8.39	-	-	-	
37	艾蒿酮	artemisia ketone	C ₁₀ H ₁₆ O	-	-	-	-	-	-	-	1.02	-	-	-	-	-	
38	2,7-二甲基-2,6-辛二烯-4-醇	2,7-dimethyl-2,6-octadien-4-ol	C ₁₀ H ₁₈ O	-	-	-	-	-	-	-	0.51	-	-	-	-	-	
39	崖柏酮	chrysanthone	C ₁₀ H ₁₆ O	4.24	4.43	-	-	-	-	4.84	10.15	-	-	-	0.23	-	

续表2

峰号	化合物		分子式	相对质量分数/%													
	中文名称	英文名称		S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	Xj3	Xj15	
40	侧柏酮	thujone	C ₁₀ H ₁₆ O	45.78	42.61	51.25	28.12	23.54	-	0.87	30.65	2.20	4.89	54.20	-	-	
41	1,6-二甲基庚-1,3,5-三烯	1, 6-dimethylhepta-1, 3, 5-triene	C ₉ H ₁₄	-	-	4.08	10.26	7.02	-	-	2.39	-	-	2.54	-	1.67	
42	2,6,6-三甲基-2,4-环庚二烯-1-酮	2, 6, 6-trimethyl-2, 4-cycloheptadien-1-one	C ₁₀ H ₁₄ O	-	-	-	-	11.76	-	-	-	-	-	-	-	-	
43	樟脑	camphor	C ₁₀ H ₁₆ O	1.97	0.46	-	2.31	3.75	-	6.12	-	0.30	-	-	3.57	-	
44	马鞭烯醇	verbenol	C ₁₀ H ₁₆ O	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2.46	-	-	-	
45	6,6-二甲基-2-亚甲基-双环[2.2.1]庚-3-酮	6, 6-dimethyl-2-methylene-bicyclo[2.2.1]heptan-3-one	C ₁₀ H ₁₄ O	-	-	-	0.65	-	-	-	-	-	0.29	-	0.34	-	
46	左旋樟脑	<i>l</i> -camphor	C ₁₀ H ₁₆ O	-	-	-	-	-	8.75	-	-	-	-	-	-	-	
47	3,3-二甲基-6-亚甲基环己烯	3,3-dimethyl-6-methylenecyclohexene	C ₉ H ₁₄	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	5.45	
48	5,5-二甲基-2-乙基-1,3-环戊二烯	5,5-dimethyl-2-ethyl-1,3-cyclopentadiene	C ₉ H ₁₄	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	23.50	
49	(+)-香茅醛	(+)-citronellal	C ₁₀ H ₁₈ O	-	-	-	-	-	-	-	-	0.15	-	-	-	-	
50	香茅醇	citronellol	C ₁₀ H ₂₀ O	-	-	-	-	-	-	-	-	0.34	-	-	-	-	
51	松香	pinocarpone	C ₁₀ H ₁₄ O	-	-	-	-	0.74	0.53	0.38	-	0.32	-	-	-	0.39	
52	水芹醛	phellandral	C ₁₀ H ₁₆ O	-	-	0.68	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
53	1-(1-丁炔基)环戊醇	1-(1-butynyl)cyclopentanol	C ₉ H ₁₄ O	-	-	1.12	-	-	-	-	-	-	-	1.88	-	-	
54	5-异丙烯基-2-甲基环戊-1-烯甲醛	5-isopropenyl-2-methylcyclopent-1-enecarboxaldehyde	C ₁₀ H ₁₄ O	-	-	1.43	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
55	6-异亚丙基-1-甲基-双环[3.1.0]己烷	6-isopropylidene-1-methylbicyclo[3.1.0]hexane	C ₁₀ H ₁₆	-	-	1.66	-	-	-	-	-	-	0.18	-	-	-	
56	(7-十二炔氧基)四氢-2H-吡喃	7-dodecy-1-yl-2-tetrahydropyranylolether	C ₁₇ H ₃₀ O ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	3.68	-	-	-	-	
57	冰片	borneol	C ₁₀ H ₁₈ O	-	-	-	1.78	2.55	-	9.85	-	-	-	-	-	-	
58	乙炔环己醇	1-ethynyl-cyclohexanol	C ₈ H ₁₂ O	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.73	
59	丙酸异龙脑酯	isobornyl propionate	C ₁₃ H ₂₂ O ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.55	-	-	-	
60	4-亚甲基-1-(1-甲基乙基)-二环[3.1.0]己-3-醇乙酸酯	4-methylene-1-(1-methylethyl)-bicyclo[3.1.0]hexan-3-ol, acetate	C ₁₂ H ₁₈ O ₂	-	1.45	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
61	1-壬烯-4-炔	1-nonen-4-yne	C ₉ H ₁₄	-	1.91	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
62	异龙脑	isoborneol	C ₁₀ H ₁₈ O	-	0.90	-	0.95	-	-	-	0.21	-	0.32	-	-	-	
63	左旋乙酸冰片酯	<i>L</i> -borneol acetate	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.33	-	
64	乙酸异龙脑酯	isobornyl acetate	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	1.11	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
65	4-萜烯醇	terpinen-4-ol	C ₁₀ H ₁₈ O	1.14	1.5	1.17	2.05	2.03	-	-	-	2.75	1.29	-	2.15	2.15	
66	2,5-二甲基-3-亚甲基-1,5-己二烯	2, 5-dimethyl-3-methylene-1,5-hexadiene	C ₉ H ₁₄	-	-	-	0.49	-	-	-	-	-	-	-	-	2.08	
67	松油醇	(-)-alpha-terpineol	C ₁₀ H ₁₈ O	-	-	-	1.48	1.58	-	-	-	2.47	-	1.25	7.07	3.14	
68	(R)-1-亚甲基-3-(1-甲基乙基)-环己烷	(R)-1-methylene-3-(1-methylethenyl)-cyclohexane	C ₁₀ H ₁₆	-	-	0.92	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
69	(1S)-(-)-戊-2-烯-4-酮	(1S)-(-)-pin-2-en-4-one	C ₁₀ H ₁₄ O	0.54	-	1.24	0.50	1.00	-	-	1.17	-	-	1.31	-	-	

续表2

峰号	化合物		分子式	相对质量分数/%													
	中文名称	英文名称		S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	Xj3	Xj15	
70	1-(1-丁炔基)环戊醇	1-(1-butynyl)cyclopentanol	C ₉ H ₁₄ O	-	-	-	-	-	-	-	1.62	-	-	-	-		
71	伞形酮	umbellulone	C ₁₀ H ₁₄ O	1.67	-	-	-	-	-	-	0.94	-	-	-	-		
72	7-(1-甲基亚乙基)-双环[4.1.0]庚烷	7-(1-methylethylidene)-bicyclo[4.1.0]heptane	C ₁₀ H ₁₆	-	-	-	-	-	-	-	0.66	-	-	-	-		
73	2,4-辛二烯	2,4-octadiene	C ₈ H ₁₄	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.95	-		
74	(-)-4-萜品醇	(-)-4-terpineol	C ₁₀ H ₁₈ O	-	-	-	-	-	3.29	-	1.20	-	-	0.80	-		
75	α-松油醇	α-terpineol	C ₁₀ H ₁₈ O	1.16	-	-	-	-	6.47	1.82	1.00	-	2.73	-	-		
76	反式-对-薄荷-2-烯-1-醇	trans-p-menth-2-en-1-ol	C ₁₀ H ₁₈ O	-	-	-	-	-	-	-	-	0.33	-	-	-		
77	顺式胡椒碱	cis-piperito	C ₁₀ H ₁₈ O	-	-	-	-	-	-	-	-	-	7.75	-	14.01		
78	4-亚甲基八氢-1H-茛	4-methyleneoctahydro-1H-indene	C ₁₀ H ₁₆	-	0.87	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
79	2,5-二甲基-3-亚甲基-1,5-己二烯	2,5-dimethyl-3-methylene-1,5-hexadiene	C ₉ H ₁₄	-	0.42	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
80	顺式-卡波醇	cis-carveol	C ₁₀ H ₁₆ O	0.97	0.91	1.38	1.48	1.69	3.15	0.90	2.05	2.99	4.04	2.07	-	3.23	
81	乙基四甲基环戊二烯	ethyltetramethylcyclopentadiene	C ₁₁ H ₁₈	-	-	-	1.00	-	-	-	-	-	-	-	-		
82	(E)-(3,3-二甲基亚环己基)-乙醛	(E)-(3,3-dimethylcyclohexylidene)-acetaldehyde	C ₁₀ H ₁₆ O	-	-	-	0.19	-	0.40	-	-	-	-	-	-	0.74	
83	右旋香芹酮	D(+)-carvone	C ₁₀ H ₁₄ O	-	-	-	-	1.08	-	0.95	-	-	1.52	0.81	1.05	-	
84	(-)-异长叶醇	(-)-isolongifolol	C ₁₅ H ₂₆ O	-	-	-	-	0.21	-	-	-	-	-	-	-	-	
85	6-亚甲基-螺[4.5]癸烷	6-methylene-spiro[4.5]decane	C ₁₁ H ₁₈	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2.04	
86	2-异丙基-5-甲基-3-环己烯-1-酮	2-isopropyl-5-methyl-3-cyclohexen-1-one	C ₁₀ H ₁₆ O	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.28	-	1.52	-	
87	左旋香芹酮	l(-)-carvone	C ₁₀ H ₁₄ O	-	-	-	-	-	-	-	0.59	-	-	-	-	-	
88	2-甲基-5-(1-甲基乙基)环己酮	2-methyl-5-(1-methylethenyl)-cyclohexanone	C ₁₀ H ₁₆ O	-	-	-	-	-	-	-	0.19	-	-	-	-	-	
89	(4S)-1,8-对-戊二烯-3-酮	(4S)-1,8-p-menthadiene-3-one	C ₁₀ H ₁₄ O	-	-	0.55	1.53	0.79	-	-	0.43	-	0.66	-	-	1.36	
90	2,6-二甲基-6-硝基-2-庚烯-4-酮	2,6-dimethyl-6-nitro-2-hepten-4-one	C ₉ H ₁₅ NO ₃	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.40	-	-	-	
91	三异丁基铝	triisobutylaluminum	C ₁₂ H ₂₇ Al	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.30	-	-	-	
92	2,6,6-三甲基-双环[3.1.1]庚-2-烯-4-醇乙酸酯	2,6,6-trimethyl-bicyclo[3.1.1]hept-2-en-4-ol,acetate	C ₁₂ H ₁₈ O ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	0.76	-	-	-	-	
93	2,6-二甲基-5-庚烯-1-醇	2,6-dimethyl-5-hepten-1-ol	C ₉ H ₁₈ O	-	-	-	-	-	-	-	-	0.12	-	-	-	-	
94	7-甲基-5-辛烯-4-酮	7-methyl-5-octen-4-one	C ₉ H ₁₆ O	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.87	-	-	-	
95	4,5-二乙基辛烷	4,5-diethyloctane	C ₁₂ H ₂₆	-	-	-	-	-	-	-	-	0.23	-	-	-	-	
96	6-甲基-3-(1-甲基乙基)-2-环己烯-1-酮	6-methyl-3-(1-methylethyl)-2-cyclohexen-1-one	C ₁₀ H ₁₆ O	-	-	-	-	-	-	0.31	-	-	-	-	-	-	
97	乙酸冰片酯	bornyl acetate	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	-	-	-	-	0.74	1.82	1.33	-	-	-	-	-	-	
98	2-甲基-3-苯基-丙醛	2-methyl-3-phenyl-propanal	C ₁₀ H ₁₂ O	-	1.07	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
99	紫苏醛	perillaldehyde	C ₁₀ H ₁₄ O	-	0.30	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
100	2,4-二甲基苯乙醇	2,4-dimethylphenethyl alcohol	C ₁₀ H ₁₄ O	-	0.47	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	

续表 2

峰号	化合物		分子式	相对质量分数/%													
	中文名称	英文名称		S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	Xj3	Xj15	
101	乙酸乙烯酯	myrtenyl acetate	C ₁₂ H ₁₈ O ₂	-	0.77	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
102	对异丙基苯甲醇	<i>p</i> -isopropylbenzyl alcoho	C ₁₀ H ₁₄ O	-	0.81	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
103	1,2,3,4,4a,5,6,7-八氢-4a-甲基萘	1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 7-octahydro-4a-methyl-naphthalene	C ₁₁ H ₁₈	-	0.15	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
104	2-甲基-3-苯基-丙醛	2-methyl-3-phenyl-propanal	C ₁₀ H ₁₂ O	1.05	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
105	富马酸,丁基丁烯酯	fumaric acid, butyl myrtenyl ester	C ₁₈ H ₂₆ O ₄	1.51	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
106	3,6,6-三甲基-8-氧杂双环[5.1.0]辛-2-烯-4-酮	3,6,6-trimethyl-8-oxabicyclo[5.1.0]oct-2-en-4-one	C ₁₀ H ₁₄ O ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.35	-	-	
107	1,3,8-对-青霉烯	1,3,8- <i>p</i> -menthatriene	C ₁₀ H ₁₄	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.27	-	-	
108	六氢-1-氧杂-环丙烷并[d]茛-2-酮	hexahydro-1-oxa-cyclopropa[<i>d</i>]inden-2-one	C ₉ H ₁₂ O ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.33	-	-	
109	1,2,5,5-四甲基-1,3-环戊二烯	1, 2, 5, 5-tetramethyl-1,3-cyclopentadiene	C ₉ H ₁₄	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.14	-	-	
110	顺-2-甲基-5-(1-甲基乙炔基)-2-环己烯-1-醇乙酸酯	<i>cis</i> -2-methyl-5-(1-methylethenyl)-2-cyclohexen-1-ol, acetate	C ₁₂ H ₁₈ O ₂	0.59	0.39	0.39	-	-	0.63	-	0.38	0.96	-	0.23	-	-	
111	2-甲基-2-冰片烯	2-methyl-2-bornene	C ₁₁ H ₁₈	-	-	0.27	0.27	0.35	-	-	-	-	-	-	-	-	
112	2-乙基-5-丙基苯酚	2-ethyl-5-propylphenol	C ₁₁ H ₁₆ O	-	-	-	1.19	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
113	1,4,6-三氮杂茛	1,4,6-triazaindene	C ₆ H ₅ N ₃	-	-	0.46	-	-	-	-	0.35	-	-	-	-	-	
114	亚硫酸,环己基甲基十七烷基酯	sulfurous acid, cyclohexylmethyl hepta-decyl ester	C ₂₄ H ₄₈ O ₃ S	-	-	0.42	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
115	5,5-二甲基-1-乙基-1,3-环戊二烯	5, 5-dimethyl-1-ethyl-1,3-cyclopentadiene	C ₉ H ₁₄	-	-	0.32	-	1.53	-	0.32	-	-	-	-	-	-	
116	2,6,6-三甲基-2,4-环庚二烯-1-酮	2, 6, 6-trimethyl-2, 4-cycloheptadien-1-one	C ₁₀ H ₁₄ O	-	-	-	0.46	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
117	环戊烯酮	cyclofenchone	C ₁₀ H ₁₆	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.73	
118	苯乙烯二醇	styrene glycol	C ₈ H ₁₀ O ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3.30	
119	6-异亚丙基-1-甲基-双环[3.1.0]己烷	6-isopropylidene-1-methyl-bicyclo[3.1.0]hexane	C ₁₀ H ₁₆	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.26	
120	2-亚甲基冰片烷	2-methylenebornane	C ₁₁ H ₁₈	-	-	-	0.48	0.25	-	-	-	-	-	-	-	0.35	
121	2-甲基金刚烷	2-methyladamantane	C ₁₁ H ₁₈	0.94	-	-	0.64	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
122	长叶烯	longifolen	C ₁₅ H ₂₄	-	-	-	-	-	0.29	-	-	-	-	-	-	-	
123	4,4-二甲基-十一烷	4,4-dimethyl-undecane	C ₁₃ H ₂₈	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.64	-	
124	乙酸异薄荷酯	isopulegyl acetate	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.18	-	
125	阿洛烯	2-alloocimene	C ₁₀ H ₁₆	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.26	-	
126	5-烯丙基愈创醇	5-allylguaiacol	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	4.33	-	2.41	2.90	-	3.17	-	3.01	-	-	-	0.87	-	
127	2,3,6-三甲基-苯甲醚	2,3,6-trimethyl-anisole	C ₁₀ H ₁₄ O	-	-	-	6.57	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
128	2,4,5,6,7,7a-六氢-4,4,7a-三甲基-1H-茛-1-酮	2,4,5,6,7,7a-hexahydro-4,4,7a-trimethyl-1H-inden-1-one	C ₁₂ H ₁₈ O	-	0.25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	

续表 2

峰号	化合物		分子式	相对质量分数/%													
	中文名称	英文名称		S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	Xj3	Xj15	
129	丁香酚	eugenol	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	-	5.20	-	-	3.58	-	-	-	-	-	1.66	0.70	-	
130	3-烯丙基愈创木酚	3-allylguaiacol	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	0.52	-	0.59	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.82	
131	壬酸乙酯	ethyl nonylate	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	-	-	-	-	-	-	0.37	-	-	-	-	-	-	
132	8-(1-甲基亚乙基)-双环[5.1.0]辛烷	8-(1-methylethylidene)-bicyclo[5.1.0]octane	C ₁₁ H ₁₈	-	-	-	-	-	-	0.47	0.39	0.69	-	-	-	-	
133	2,7,7-三甲基-双环[3.1.1]庚-2-烯-6-酮	2,7,7-trimethyl-bicyclo[3.1.1]hept-2-en-6-one	C ₁₀ H ₁₄ O	-	-	-	-	-	-	0.25	-	-	-	-	-	-	
134	三环[4.4.1.0(1,6)]十一烷	tricyclo[4.4.1.0(1,6)]undecane	C ₁₁ H ₁₈	-	-	-	-	-	-	0.29	-	-	-	-	-	-	
135	2-溴乙酸苄酯	benzyl 2-bromoacetate	C ₉ H ₉ BrO ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.70	-	-	-	
136	2-甲基双环[4.3.0]壬-1(6)-烯	2-methylbicyclo[4.3.0]non-1(6)-ene	C ₁₀ H ₁₆	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.68	-	-	-	
137	α-蒎烯	copaene	C ₁₅ H ₂₄	-	-	-	-	-	-	1.16	0.32	-	1.70	-	-	0.81	
138	2-亚乙基-6-甲基-3,5-庚二烯醛	2-ethylidene-6-methyl-3,5-heptadienal	C ₁₀ H ₁₄ O	-	-	1.38	-	6.71	-	-	-	-	-	-	-	10.68	
139	1-丁基吡咯	1-butylpyrrole	C ₈ H ₁₃ N	-	-	-	-	-	1.07	-	-	-	0.92	0.51	0.58	-	
140	3,5-二甲苯乙酸	3,5-xylaceticacid	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	-	-	-	-	-	0.36	-	-	-	-	-	-	-	
141	2,3-二氢-2,2,6-三甲基苯甲醛	2,3-dihydro-2,2,6-trimethylbenzaldehyde	C ₁₀ H ₁₄ O	-	-	-	-	-	-	0.99	1.00	-	2.46	1.25	-	-	
142	均四甲苯	durene	C ₁₀ H ₁₄	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.92	-	-	-	
143	戊酸,十三烷-2-炔基酯	valeric acid, tridec-2-ynyl ester	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3.92	-	-	-	
144	7-甲氧基甲基-2,7-二甲基环庚-1,3,5-三烯	7-methoxymethyl-2,7-dimethylcyclohepta-1,3,5-triene	C ₁₁ H ₁₆ O	-	0.25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
145	石竹烯	caryophyllene	C ₁₅ H ₂₄	10.83	12.23	9.45	11.83	6.73	12.02	18.15	16.52	19.95	19.52	10.09	2.57	5.33	
146	α-石竹烯	α-caryophyllene	C ₁₅ H ₂₄	1.84	-	1.48	1.65	0.95	1.89	-	-	2.95	3.81	-	-	-	
147	金合欢烯	b-farnesene	C ₁₅ H ₂₄	-	2.43	-	-	-	-	3.60	3.65	-	-	-	-	-	
148	顺式-b法呢烯	cis-b-farnesene	C ₁₅ H ₂₄	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2.00	0.86	-	
149	[S-(R*,S*)]-3-(1,5-二甲基-4-己烯基)-6-亚甲基-环己烯	[S-(R*,S*)]-3-(1,5-dimethyl-4-hexenyl)-6-methylene-cyclohexene	C ₁₅ H ₂₄	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.41	-	
150	大根香叶烯	(-)-germaacene	C ₁₅ H ₂₄	3.53	3.65	3.69	3.99	2.44	8.00	4.43	6.26	6.89	13.37	3.15	2.29	1.50	
151	(+)-α-榄香烯	(+)-α-elemene	C ₁₅ H ₂₄	-	-	-	-	0.39	-	-	-	-	-	-	-	-	
152	反式-橙花叔醇	nerolidol	C ₁₅ H ₂₆ O	-	-	-	-	-	-	1.41	-	-	-	-	-	-	
153	丝氨酸-3,11-二烯	selina-3,11-diene	C ₁₅ H ₂₄	-	-	-	-	-	-	-	-	5.66	-	-	-	-	
154	异戊酸龙脑酯	borneyl isovalerate	C ₁₅ H ₂₆ O ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	0.54	-	-	-	-	
155	(+)-1(10)-亚科内酯	(+)-1(10)-aristolene	C ₁₅ H ₂₄	-	0.73	-	-	-	-	-	-	1.5	-	-	-	-	
156	(+)-b-茜烯	(+)-b-selinene	C ₁₅ H ₂₄	-	-	-	-	-	-	2.25	-	-	-	-	3.04	-	
157	雪松烯	cedrene	C ₁₅ H ₂₄	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.47	-	
158	d-杜松烯	d-cadinene	C ₁₅ H ₂₄	0.54	1.03	0.63	1.02	0.3	1.04	0.78	1.1	0.87	1.51	0.61	0.40	-	
159	顺式-b法呢烯	cis-b-farnesene	C ₁₅ H ₂₄	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.40	
160	顺式-橙花叔醇	cis-nerolidol	C ₁₅ H ₂₆ O	-	-	-	-	-	0.17	-	-	-	-	-	-	0.28	

续表 2

峰号	化合物		分子式	相对质量分数/%													
	中文名称	英文名称		S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	Xj3	Xj15	
161	(+)-香橙烯	(+)-aromadendrene	C ₁₅ H ₂₄	0.79	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3.09	
162	β-佛尔酮	β-phorone	C ₉ H ₁₄ O	-	-	0.34	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
163	1,6-二溴己烷	1,6-dibromo-hexane	C ₆ H ₁₂ Br ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	0.15	-	-	-	-	
164	1-b-双子叶烯	1-b-bisabolene	C ₁₅ H ₂₄	0.19	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
165	氧化石竹烯	caryophyllene oxide	C ₁₅ H ₂₄ O	1.18	0.97	1.28	2.08	2.33	0.72	5.03	1.68	2.34	2.41	1.66	0.83	0.96	
166	螺[4.4]壬烷-2-酮	spiro[4.4]nonan-2-one	C ₉ H ₁₄ O	-	-	-	-	-	-	0.49	-	-	-	-	-	-	
167	八氢-4a(2H)-萘甲醇	octahydro-4a(2H)-naphthalenemethanol	C ₁₁ H ₂₀ O	-	-	-	-	-	-	-	-	0.14	-	-	-	-	
168	金刚烷	adamantane	C ₁₀ H ₁₆	-	-	-	-	-	-	1.24	-	1.17	-	-	-	-	
169	(-)-蓝桉醇	(-)-globulol	C ₁₅ H ₂₆ O	-	-	-	-	-	-	2.8	-	-	-	-	-	-	
170	3-甲基-2-丁烯酸, 2,7-二甲基辛-7-烯-5-炔-4-基酯	3-methyl-2-butenic acid, 2,7-dimethyloct-7-en-5-yn-4-yleste	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	0.66	-	-	-	-	
171	顺式-Z-双油烯环氧化物	cis-Z-α-bisabolene epoxide	C ₁₅ H ₂₄ O	-	-	-	0.25	0.25	-	-	-	0.88	-	-	-	-	
172	顺式-十氢-1-萘酚	cis-decahydro-1-naphthol	C ₁₀ H ₁₈ O	-	-	-	0.90	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
173	(1-甲基乙炔基)-环辛烯	3-(1-methylethenyl)-cyclooctene	C ₁₁ H ₁₈	-	-	-	-	-	0.18	-	-	-	-	-	-	-	
174	桉油烯醇	(-)-spathulenol	C ₁₅ H ₂₄ O	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.91	-	
175	2,6-二乙吡啶	2,6-diethylpyridine	C ₉ H ₁₃ N	-	0.27	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
176	2,4-二甲基苯甲醇	2,4-dimethylbenzyl alcohol	C ₉ H ₁₂ O	-	0.47	-	-	1.04	0.5	-	-	-	0.71	-	0.19	-	
177	β-律草烯	β-humulene	C ₁₅ H ₂₄	-	-	-	0.68	1.75	-	-	-	-	-	-	-	-	
178	1,4-二甲基-8-异亚丙基三环[5.3.0.0(4,10)]癸烷	1,4-dimethyl-8-isopropylidene-tricyclo[5.3.0.0(4,10)]decane	C ₁₅ H ₂₄	-	-	-	-	-	0.7	-	-	-	-	-	-	-	
179	(E,E)-10-(1-甲基乙炔基)-3,7-环癸二烯-1-酮	(E,E)-10-(1-methylethenyl)-3,7-cyclodecadien-1-one	C ₁₃ H ₁₈ O	-	-	-	-	-	-	-	-	0.90	-	-	-	-	
180	异戊二烯环氧化物	isoaromadendrene epoxide	C ₁₅ H ₂₄ O	-	-	-	0.85	-	0.49	-	-	1.10	0.89	-	-	-	
181	乙酸异薄荷荷酯	p-menth-8-en-3-ol, acetate (8Cl)	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.29	
182	10,10-二甲基-2,6-二亚甲基双环[7.2.0]十一烷-5b-醇	10,10-dimethyl-2,6-dimethylenebicyclo[7.2.0]undecan-5b-ol	C ₁₅ H ₂₄ O	-	-	1.06	-	-	-	-	0.75	-	-	0.50	-	-	
183	三环[4.4.0.0(2,8)]癸烷	tricyclo[4.4.0.0(2,8)]decane	C ₁₀ H ₁₆	0.97	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
184	(+)-g-赤藓酮	(+)-g-gurjunene	C ₁₅ H ₂₄	4.77	-	5.57	-	-	-	-	-	-	0.70	-	-	0.79	
185	3-苯基-1-戊烯	3-phenyl-1-pentene	C ₁₁ H ₁₄	-	-	-	-	-	-	-	-	0.06	-	-	-	-	
186	(+)-α-长叶蒎烯	(+)-α-longipinene	C ₁₅ H ₂₄	0.09	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
187	(+)-杀螨醇	(+)-viridiflorol	C ₁₅ H ₂₆ O	-	6.33	-	-	-	-	-	-	3.61	-	-	3.35	-	

其中 46 个组分, 占总挥发性成分的 99.86%; 从 S5 号中共分离出 47 个峰, 确定了其中 45 个组分, 占总挥发性成分的 99.45%; 从 S6 号中共分离出 41 个

峰, 并确定了其中 40 个组分, 占总挥发性成分的 98.97%; 从 S7 号中共分离出 41 个峰, 并确定了其中 40 个组分, 占总挥发性成分的 98.92%; 从 S8 号

中共分离出 43 个峰,并确定了其中 42 个组分,占总挥发性成分的 99.43%;从 S9 号中共分离出 53 个峰,并确定了其中 48 个组分,占总挥发性成分的 98.45%;从 S10 号中共分离出 43 个峰,并确定了其中 41 个组分,占总挥发性成分的 99.05%;从 S11 号中共分离出 42 个峰,并确定了其中 41 个组分,占总挥发性成分的 99.47%;从 Xj3 号艾中共分离出 41 个峰,并确定了其中 40 个组分,占总挥发性成分的 99.54%;从 Xj15 号中共分离出 42 个峰,并确定了其中 39 个组分,占总挥发性成分的 95.56%。

3.2 不同产地艾叶挥发性成分的比较分析 经 HS-SPME-GC-MS 技术分析不同产地艾叶挥发性成分总离子流图、化学成分种类,对不同产地艾叶挥发性成分进行比较分析后发现,不同产地艾叶样品中挥发性成分种类和相对含量有一定的差异。通过总结发现,蕲艾中含有在其他产地艾叶中未能检测到的成分,如具有镇静、止泻、祛痰、抗感染等作用的乙酸冰片酯,具有抗菌、抗炎、镇痛等作用的冰片,具有神经保护作用的左旋樟脑等。桉油精、蘑菇醇、大根香叶烯、石竹烯及其氧化物在 13 个样品中均能被检出。不同产地的 13 批艾叶中含量较高的主要有酮类、烯类、醇类,此外,部分批次的艾叶还有少量的醛类、酯类、烷烃等。具体的信息见图 2。

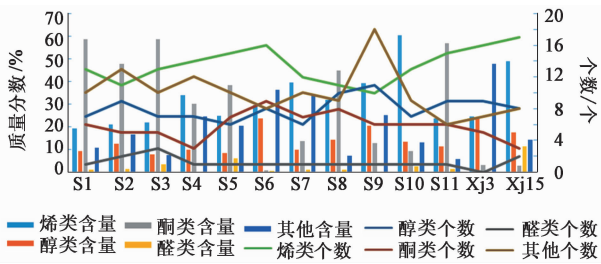


图 2 不同产地艾叶中各挥发性成分种类及其相对质量分数
Fig.2 Volatile components and relative content of Artemisiae Argyi Folium from different areas

3.3 PCA 分析 将 13 个批次艾叶的共有峰信息导入 SPSS 19.0 软件中,以共有峰的相对百分含量为特征值,在进行 PCA 分析前,需要把数据标准化处理。主成分的特征值及方差贡献率这两个指标是选择主成分的依据,具体的指标信息见表 3。在特征值这个指标上,前 3 个主成分都 >1,在方差贡献率这个指标上,前 3 个主成分的累积贡献率达 98.843%,基于上述两个指标的综合考虑,选取前 3 个主成分进行 PCA 分析是合理的。

表 3 不同产地艾叶共有峰主成分特征值及贡献率
Table 3 Principal component's characteristic value and contribution rate of f Artemisiae Argyi Folium from different areas

成分	特征值	方差贡献/%	累积方差贡献/%
1	7.004	53.876	53.876
2	4.320	33.233	87.109
3	1.525	11.734	98.843

计算不同批次艾叶样品的总因子得分 F,见表 4。不同批次艾叶样品的 F 值,是依据各主要因子的权重系数累加得到的(权重系数 = 各主成分的贡献率/3 个主成分的总贡献率,按照这个方法可以得到 3 个主成分的权重系数)。F 可用来评价药材的质量,F 越高,表明质量越好。通过这个方法来评价各个批次的艾叶药材,S4 样品蕲春五尖艾 F 最高,即品质最好,蕲春所产的其他艾叶 F 值均较高,质量较佳。

表 4 不同产地艾叶挥发性成分主成分因子得分
Table 4 Principal component score of volatile components in Artemisiae Argyi Folium from different habitats

No.	F1	F2	F3	F
S1	-0.17	-0.28	0.02	-0.44
S2	-0.32	-0.17	0.04	-0.45
S3	0.23	0.89	0.02	1.13
S4	-0.28	0.84	2.15	2.71
S5	-0.07	0.81	-0.08	0.66
S6	0.65	0.60	0.78	2.04
S7	0.03	-0.95	2.02	1.09
S8	-1.30	0.32	0.78	-0.21
S9	0.05	0.20	0.11	0.36
S10	-0.33	1.03	0.02	0.73
S11	0.54	-0.63	-0.15	-0.24
Xj3	-1.63	-0.44	0.13	-1.94
Xj15	-0.02	0.10	0.03	-0.09

经 PCA 分析后,得到了主成分的 PC1,PC2 得分图 3。可以看出,不同产地艾叶处于相对独立的空间,基本得到了有效的区分,表明不同产地艾叶的挥发性成分有差别。

3.4 聚类分析 利用 SPSS 19.0 软件中的聚类分析程序,以共有峰的相对百分含量数据为变量,对 5 个产地 13 批艾叶样本进行聚类分组,聚类方法为组间联接方法,度量标准区间选择平方 Euclidean 距离,聚类分析将艾叶分为四大类,不同产地的艾叶基

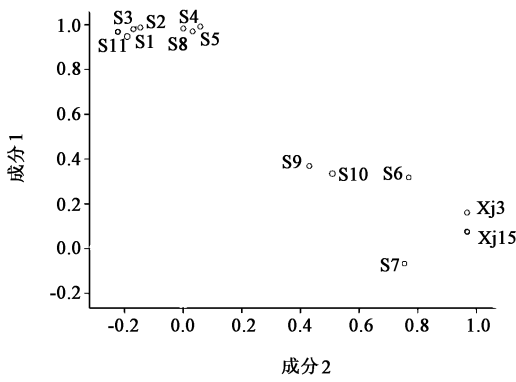


图 3 不同产地艾叶主成分得分
Fig. 3 PCA analysis of Artemisiae Argyi Folium from different habitats

本归为一类,其聚类分析结果见图 4。

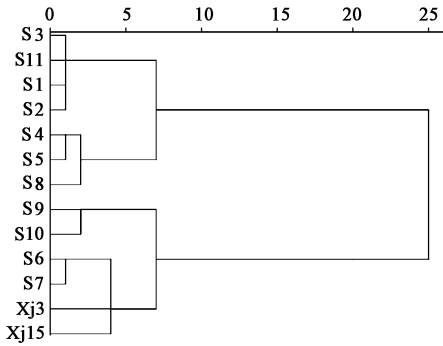


图 4 不同产地艾叶聚类分析
Fig. 4 Cluster analysis results of Artemisiae Argyi Folium from different habitats

4 讨论

本研究采用 HS-SPME-GC-MS 技术对湖北蕲春、江苏南通、浙江台州、云南楚雄和新疆乌鲁木齐 5 个不同产地的 13 批艾叶进行分析,结果显示不同产地艾叶样品中挥发性成分种类和相对含量有一定的差异。其中湖北蕲春所产的艾叶中含有多种在其他产地艾叶中未检出的药效成分,如冰片、乙酸冰片酯、左旋樟脑等,挥发性成分最多,总的相对含量最高,在一定程度上印证了蕲艾的道地性。

PCA 与 CA 分析结果基本一致,2 种分析方法相互验证,两种方法结合不仅有效区分了不同产地

艾叶,还反映了不同批次间的相似性和差异,使分析结果客观、科学,为艾叶挥发性成分的质量评价提供了依据。

同时,比较湖北蕲春所产的 5 批艾叶,发现桉油精、侧柏酮、樟脑、冰片和异龙脑这 5 种主要有效成分均存在于五尖艾中,且其相对含量均较高,说明五尖艾为蕲艾中的优势品种,在医药、保健品、烟业、食品及化妆品等领域具有较高的开发应用前景。

[参考文献]

[1] 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,2015:89.

[2] 曹利,卢金清,叶欣. HS-SPME-GC-MS 联用分析不同栽培品种与蕲艾不同部位的挥发性成分[J]. 中国实验方剂学杂志,2017,23(2):62-68.

[3] 杨小金. 蕲艾挥发性成分及质量标准研究[D]. 武汉:湖北中医药大学,2014.

[4] 梁欢,卢金清,戴艺,等. HS-SPME-GC-MS 结合化学计量法对不同产地艾叶药材挥发性成分的比较分析[J]. 中国实验方剂学杂志,2014,20(18):85-90.

[5] 郭胜男. 蕲艾挥发性成分的质量评价及其抗氧化活性研究[D]. 武汉:湖北中医药大学,2016.

[6] 戴卫波,李拥军,梅全喜,等. 12 个不同产地艾叶挥发油的 GC-MS 分析[J]. 中药材,2015,38(12):2502-2506.

[7] 文福姬,俞庆善,阚民燮. 艾叶精油化学成分研究[J]. 香料香精化妆品,2007(3):21-23.

[8] 梅全喜,董普仁,王剑,等. 不同产地艾叶中挥发油和微量元素含量的比较[J]. 中国中药杂志,1991,16(12):718.

[9] 张元,康利平,滕中秋,等. 顶空进样 GC-MS 比较蕲春与南阳产艾叶的挥发性成分(英文)[J]. 针灸推拿医学:英文版,2016,14(3):164-169.

[10] 蒋潇,田静. 三个产地艾叶挥发油的化学成分分析[J]. 中国民族民间医药,2015,24(17):19-22.

[11] 赵志鸿,黄勇勇,张小俊,等. 河南驻马店产艾叶挥发油的 GC-MS 分析[J]. 郑州大学学报:理学版,2013,45(2):80-84.

[责任编辑 顾雪竹]