

GC-MS 法鉴定茺蔚子挥发油的化学成分

康琛, 张强, 仝会娟, 李曼玲*

(中国中医科学院中药研究所, 北京 100700)

[摘要] 目的: 研究茺蔚子中挥发油的化学成分。方法: 采用气相色谱-质谱联用仪(GC-MS)对茺蔚子挥发油的化学成分进行了分离和鉴定。结果: 确定了 20 种化学成分并得到相对含量。结论: 茺蔚子挥发油中主要含有环己酮、柏木脑等成分。

[关键词] 茺蔚子; 挥发油; 环己酮; 气-质联用仪

[中图分类号] R284.1 [文献标识码] B [文章编号] 1005-9903(2010)03-0036-03

Identification Chemical Constituents of Volatile oil in *Leonurus japonicus* Houtt by GC-MS

KANG Chen, ZHANG Qiang, TONG Hui-Juan, LI Man-ling*

(Institute of Chinese Materia Medica, China Academy of Chinese Medical Sciences, Beijing 100700, China)

[Abstract] **Objective:** To study volatile oil in *Leonurus japonicus* Houtt by GC-MS. **Methods:** The constituents of volatile oil in *Leonurus japonicus* Houtt were identified by GC-MS. **Results:** 20 compounds and their relative contents were identified. **Conclusion:** The major constituents were Cyclohexanone and Cedrol.

[Key words] *leonurus japonicus* houtt; volatile; cyclohexanone; GC-MS

中药茺蔚子系唇形科植物益母草(*Leonurus japonicus* Houtt)的干燥成熟果实,载于《神农本草经》列为上品。现代临床常用于妇产科血瘀诸症、跌打损伤、水肿、疮疡肿毒、肝热引起的头痛、目赤肿痛等的治疗。其化学成分主要为生物碱类、黄酮类、挥发油及脂肪油脂类。

1 方法

1.1 仪器、试剂 TRACE GC-MS 菲尼根气质联用仪(美国);挥发油提取器;电热套(天津泰斯特科技有限公司);茺蔚子药材购自陕西西安市药材市场,经生药室何希荣主管药师鉴定为唇形科植物益母草 *Leonurus japonicus* Houtt 的干燥成熟果实。

1.2 挥发油的制备^[1~2] 称取茺蔚子药材 20 g,捣碎,加水 300 mL 置于挥发油提取器上,提取 8 h,得到茺蔚子挥发油乙酸乙酯溶液,取上层油层用铺有无水硫酸钠的滤纸滤过,即得。

1.3 色谱条件 色谱柱: HP-5 (30 m × 0.25 mm, 0.25 μm) 弹性石英毛细管柱;载气为氮气;载气流量 1 mL · min⁻¹;进样口温度 220 °C;程序升温 60 °C (6 min) 100 °C (6 min) 200 °C (5 min) 质谱条件: EI 离子源。

2 结果

取挥发油加适量的乙酸乙酯溶解,吸取 1 μL 注入气质联用色谱仪中,得到茺蔚子挥发油的总离子流图,如图 1~3 所示。49 min 内共分离出 20 多个峰,就相对含量较高的峰进行分析鉴定,通过 G1701BA 化学工作站检索 NIST98 谱图库,确认 3 个产地茺蔚子挥发油的 20 个化学成分,见表 1。我们对陕西西安、江西、甘肃 3 个不同产地的茺蔚子中环己酮含量进行了测定,结果为陕西西安含 11.11%;江西 16.91%;甘肃 7.82%。

表 1 茺蔚子挥发油的化学成分

产地	序号	化合物名称	英文名	分子式	分子量	相对含量 %
陕西西安	1	正己醛	Hexanal	C ₆ H ₁₂ O	100	0.65
	2	乙酸正丁酯	n-Butylacetate	C ₆ H ₁₂ O ₂	116	2.06
	3	环己酮	Cyclohexanone	C ₆ H ₁₀ O	98	11.11
	4	-蒎烯	Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-trimethyl-	C ₆ H ₁₆	136	1.34
	5	樟脑萜	Camphene	C ₁₀ H ₁₆	136	0.44
	6	乙酸异龙脑酯	Bicyclo[2.1.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-exo-	C ₁₀ H ₁₈ O	154	0.62
	7	薄荷脑	Borneol	C ₁₀ H ₁₈ O	154	1.04
	8	左旋乙酸龙脑酯	Borneol, acetate(1S,2R,4S)-(-)-Caryophyllene	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	196	2.39
	9	丁香烯	Caryophyllene	C ₁₅ H ₂₄	204	1.38
	10	2-羟基-4-甲氧基苯乙酮	Acetophenone, 2'-hydroxy-4'-methoxy-	C ₉ H ₁₀ O ₃	166	0.52
	11	香叶基丙酮	trans-Geranylacetone	C ₁₃ H ₂₂ O	194	0.56
	12	柏木脑	Cedrol	C ₁₅ H ₂₆ O	222	5.8
	13	六氢合金欢丙酮	Hexahydrofarnesyl acetone	C ₁₈ H ₃₆ O	268	1.93
	14	法尼基丙酮	Farnesyl acetone	C ₁₈ H ₃₀ O	262	0.41
	15	棕榈酸甲酯	Palmitic acid, methylester	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	270	0.31
	16	正二十三烷	n-Tricosane	C ₂₃ H ₄₈	324	0.58
江西	1	环己酮	Cyclohexanone	C ₆ H ₁₀ O	98	16.91
	2	-松油醇	Terpineol	C ₁₀ H ₁₈ O	154	1.02
甘肃	1	环己酮	Cyclohexanone	C ₆ H ₁₀ O	98	7.82
	2	2-正戊基呋	2-n-Pentylfuran	C ₉ H ₁₄ O	138	1.64
	3	辛醛	n-Caprylaldehyde	C ₈ H ₁₆ O	128	0.81
	4	(E, E)-2,4-癸二烯醛	(E, E)-2,4-Decadienal	C ₁₀ H ₁₆ O	152	1.1

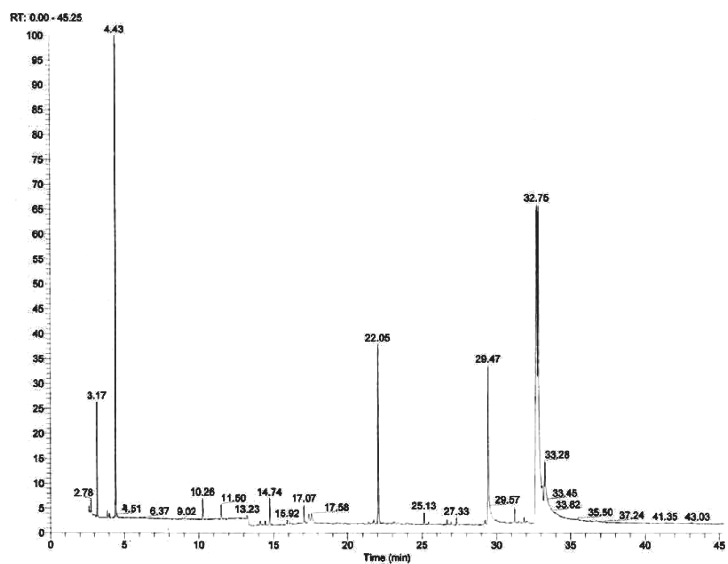


图 1 西安茺蔚子挥发油总离子流图

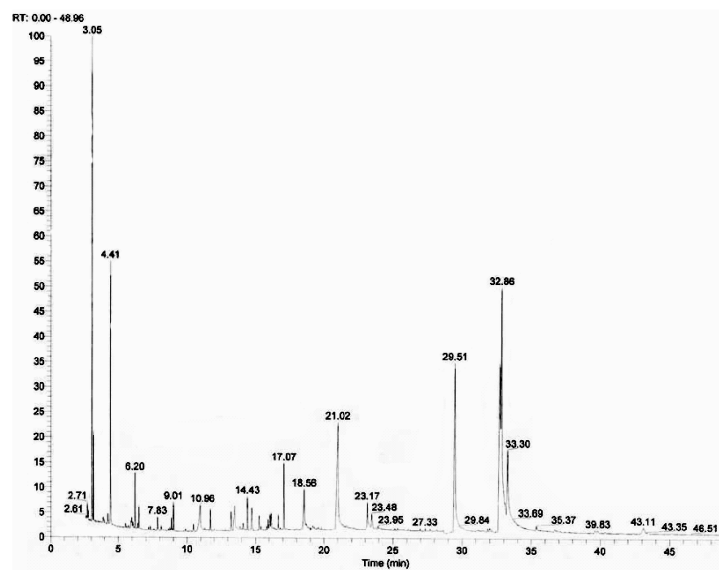


图 2 甘肃茺蔚子挥发油总离子流图

3 讨论

3.1 在西安产茺蔚子挥发油中鉴定出 16 种化合物, 占挥发油的 31.14%, 其中环己酮占 11.11%、柏木脑占 5.8%, 乙酸正丁酯, 左旋乙酸龙脑酯, 六氢合金欢丙酮等在 2% 左右。江西产茺蔚子挥发油中鉴定出 2 种化合物, 环己酮占 16.91%、-松油醇占

1.02%。甘肃产茺蔚子挥发油中鉴定出 4 种化合物, 环己酮占 7.82%、2-正戊基呋 1.64%、辛醛 0.81%、(E, E)-2,4-癸二烯醛 1.1%。

3.2 经文献报道环己酮是一种无色透明低挥发性液体^[3], 为低毒类有机溶剂, 常作为溶剂、纺织品去污剂和干洗剂, 也可用作涂料、油墨的清洗剂和塑料