

# 半边苏挥发油化学成分的气相色谱-质谱分析

刘 刚\*, 王 辉, 周本宏, 宋金春  
(武汉大学人民医院药学部, 湖北 武汉 430060)

[摘要] 目的: 分析半边苏挥发油的化学成分。方法: 采用水蒸气蒸馏法提取半边苏挥发油, 用气相色谱(GC)毛细管柱进行分析, 归一化法测定其相对含量, 并用气相色谱-质谱(GC-MS)法鉴定化学成分。结果: 检出 79 个色谱峰, 鉴定出 54 个化合物, 占挥发油总量的 71.56%。结论: 半边苏挥发油中, 香荆芥酚、百里香酚、对-聚伞花素、邻-聚伞花素、百里香酚甲醚是其主要成分, 其中香荆芥酚占总挥发油量的 23.80%。

[关键词] 半边苏; 挥发油; 气相色谱-质谱

[中图分类号] R284.2 [文献标识码] B [文章编号] 1005-9903(2006)11-0018-04

## GC-MS Analysis of Essential Oils from *Elsholtzia ciliata*

LIU Gang\*, WANG Hui, ZHOU Ben-hong, SONG Jin-chun  
(Department of Pharmacy, Renmin Hospital of Wuhan University, Wuhan 430060, China)

[Abstract] **Objective:** To analyze the essential oil constituents extracted from the herb of *Elsholtzia ciliata*. **Method:** The essential oils were extracted by water-steam distillation and separated by capillary column gas chromatography. The components were determined with area normalization method, and were identified by GC-MS. **Result:** 79 Peaks were separated and 54 compounds have been identified, which were 71.56% in the total peak areas of total essential oil. **Conclusion:** In the total essential oils of *Elsholtzia ciliata* carvacrol, thymol, *p*-cymene, *o*-cymene and methyl thymylether are main components. Among them, carvacrol is the highest(23.80%) in the total essential oils.

[Key words] *Elsholtzia ciliata* Hyland; essential oil; GC-MS

半边苏为唇形科植物香薷 *Elsholtzia ciliata* (Thunb) Hyland 的全草, 在某些地区作香薷药用。半边苏生于山野草坡, 我国大部分地区都有分布, 具有驱风发汗, 清热解表的功效<sup>[1]</sup>。对香薷几种来源植物挥发油成分的研究已有报道<sup>[2-5]</sup>, 但作为香薷来源之一的半边苏挥发性成分的研究尚未见报道。本文首次对产自湖北地区半边苏的挥发油进行了研究, 鉴定了 54 个化合物。

### 1 仪器与实验材料

英国 Pye-204 气相色谱仪, VGMM-7070H 质谱仪; 半边苏于 2004 年 5 月采自湖北省京山县, 经武

汉大学药学院张洪教授鉴定为唇形科植物 *Elsholtzia ciliata* Hyland。无水硫酸钠、乙醚均为分析纯。

### 2 实验方法

**2.1 挥发油的提取** 按 2005 年版《中国药典》一部附录方法蒸馏提取<sup>[6]</sup>, 加 10 倍量水, 提取 2h, 蒸馏液用乙醚萃取, 30℃减压回收乙醚, 无水硫酸钠干燥, 得淡黄色油液, 收率约 0.12%, 储存于-20℃冰箱, 备用。

**2.2 挥发油的 GC-MS 分析** SE-54 石英毛细管色谱柱(30m×0.32mm), 柱温 35℃~220℃, (5℃/min), 进样温度 230℃, 载气为氮气, 进样量 0.2μL, 分流比 25:1。VGMM-7070H 质谱仪, 分辨率 600, EI 电离源, 70eV, 离子源温度 200℃, 扫描质量范围 30~450amu。结果见图 1。

按照上述实验条件进样, 得到半边苏挥发油总

[收稿日期] 2006-03-22

[通讯作者] \* 刘刚, Tel: (027) 62036675; E-mail: liugang-wh@

126.com

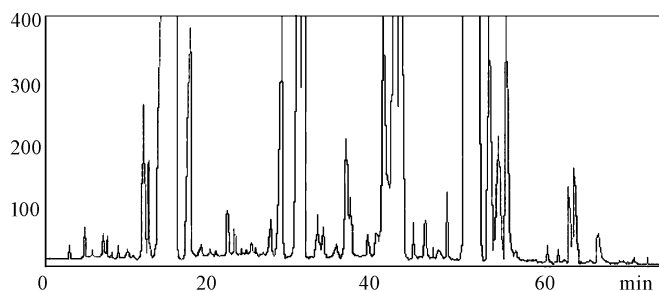


图 1 半边苏挥发油气相色谱图

离子流图。对总离子流图中各峰经质谱扫描后得到质谱图,通过 Xcalibur 工作站 NIST 标准质谱图库进行检索,与文献<sup>[7-9]</sup>的质谱数据对照,确认各化合物,按峰面积归一化法计算各化合物在挥发油中的相对含量,结果见表 1。

### 3 结果与讨论

通过气相色谱法共分离出 79 个峰,质谱法鉴定出 54 个化合物,所含成分的含量为峰面积归一化的

表 1 半边苏挥发油成分组成

No.	保留时间 /min	相似度	化合物名称	分子质量	分子式	含量 /%
1	5.22	90	$\alpha$ -蒎烯 $\alpha$ -pinene	136	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	0.21
2	8.48	83	莰烯 camphene	136	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	0.07
3	8.96	49	1-辛烯-3-醇 1-octene-3-ol	128	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O	0.06
4	10.03	91	3-辛醇 3-octanol	130	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O	0.03
5	13.23	96	$\beta$ -蒎烯 $\beta$ -pinene	136	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	0.94
6	13.96	98	$\beta$ -水芹烯 $\beta$ -phellandrene	136	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	0.67
7	18.52	94	$\beta$ -月桂烯 $\beta$ -myrcene	136	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1.16
8	23.86	94	柠檬烯 limonene	136	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	0.27
9	24.34	92	$\alpha$ -水芹烯 $\alpha$ -phellandrene	136	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	0.25
10	26.15	80	己酸 hexanoic acid	116	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	0.17
11	26.52	90	苯甲醛 benzaldehyde	106	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O	0.01
12	28.28	86	3-萜烯 3-carene	136	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	0.07
13	28.36	91	4-萜烯 4-carene	136	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	0.29
14	29.46	96	$\alpha$ -松油烯 $\alpha$ -terpinene	136	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1.12
15	31.32	98	对-聚伞花素 p-cymene	134	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	6.48
16	31.96	97	邻-聚伞花素 o-cymene	134	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	6.02
17	32.56	96	$\gamma$ -松油烯 $\gamma$ -terpinene	136	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	0.09
18	32.88	95	桉油素 eucalyptol	154	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	0.08
19	33.06	91	芳樟醇 linalool	154	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	0.07
20	34.78	96	4-甲基-1-丙基-3-环己烯-1-醇 4-methyl-1-isopropyl-3-cyclohexene-1-ol	154	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	0.08
21	35.23	94	樟脑 camphor	152	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O	0.02
22	36.42	96	牻牛儿醇 geraniol	154	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	0.58
23	36.74	90	$\alpha, \alpha, 4$ -三甲基苯甲醇 $\alpha, \alpha, 4$ -trimethylbenzenemethanol	150	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O	0.15
24	38.98	98	松油烯-4-醇 terpine-4-ol	154	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	0.05
25	40.01	94	$\alpha$ -松油醇 $\alpha$ -terpineol	154	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	0.02
26	40.95	64	2,3,3-三甲基-1,4-戊二烯 2,3,3-trimethyl-1,4-pentadiene	110	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	0.91
27	42.30	98	百里香酚甲醚 methyl thymylether	164	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> O	3.73

续表 1

No.	保留时间 /min	相似度	化合物名称	分子质量	分子式	含量 /%
28	42.86	98	香荆芥酚甲醚 methyl carvacryliether	164	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> O	2.76
29	44.52	95	4-苯基-2-丁酮 4-phenyl-2-butanone	148	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O	0.11
30	45.91	58	丁香香酚 eugenol	164	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	0.15
31	48.48	72	5-异丙基-6-甲基-3,5-庚二烯-2-醇 5-isopropyl-6-methyl-hept-3,5-dien-2-ol	168	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> O	0.19
32	50.52	98	香荆芥酚 carvacrol	150	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O	23.80
33	51.69	98	百里香酚 thymol	150	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O	18.29
34	52.05	68	乙酸辛烯酯 octenyl acetate	170	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	0.01
35	52.36	90	2-甲氧基-5-(1-丙烯基)-苯酚 2-methoxy-5-(1-propenyl)-phenol	164	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	0.02
36	52.67	80	肉豆蔻醚 myristicine	192	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	0.01
37	53.10	91	乙酸香荆芥酚 carvasyl acetate	192	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	0.57
38	54.32	91	乙酸百里香酚 thymol acetate	192	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	0.30
39	55.03	90	长叶蒎烯 longipinene	204	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.03
40	55.36	98	β-石竹烯 β-caryophyllene	204	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.68
41	56.28	90	香木对烯 aromadendranes	204	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.05
42	58.66	91	蛇麻烯 humulene	204	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.02
43	60.31	94	α-石竹烯 α-caryophyllene	204	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.10
44	61.74	95	β-芹子烯 β-selinene	204	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.08
45	62.11	72	葑烯 cadinen	204	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.06
46	62.46	78	β-库毕烯 β-cubebene	204	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.01
47	62.77	94	α-依兰油烯 α-muurolene	204	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.02
48	63.06	91	δ-杜松油烯 δ-cadinene	204	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.20
49	63.58	98	乙酸牻牛儿酸 geranyl acetate	196	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	0.26
50	65.13	64	斯巴醇 spathulenol	220	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O	0.02
51	65.96	91	对薄荷烯 1-limonene	136	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	0.05
52	66.02	89	3-亚乙基环 3-ethylidene cycloheptene	122	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub>	0.01
53	66.54	90	茉莉花酯 methyl jasmonate	224	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> O <sub>3</sub>	0.01
54	66.95	92	邻苯二甲酸二丁酯 o-butyl phthalate	278	C <sub>16</sub> H <sub>22</sub> O <sub>4</sub>	0.15

面积百分比, 如表 1 所示。其中, 含量在 3% 以上的化合物有香荆芥酚(23.80%)、百里香酚(18.29%)、对-聚伞花素(6.48%)、邻-聚伞花素(6.02%)、百里香酚甲醚(3.73%), 合计占总挥发油量的 58.32%。

在半边苏挥发油中, 已鉴定出的 54 种化合物占挥发油总量的 71.56%, 主要为萜类化合物、脂肪族化合物和芳香族化合物等。萜类化合物是存在于植物界的一大类化合物, 其生物活性是多方面的, 并且是某些中药的有效成分。如萜类化合物水芹烯、桉

油素、芳樟醇、萜品醇、石竹烯、月桂烯、蒎烯、依兰油烯等活性有效成分, 具有镇咳、祛痰、抗菌、抗炎、抗病毒及镇痛等作用; 某些芳香族化合物如聚伞花素、苯甲醛, 具有抗菌、止咳、消毒、杀虫等作用<sup>[6,10]</sup>。

半边苏挥发油中所含成分与其他来源香薷(土香薷、石香薷、木香薷) 不尽相同<sup>[2,3]</sup>, 但主要都含有香荆芥酚、百里香酚、对-聚伞花素、百里香酚甲醚、香荆芥酚甲醚等。这些成分也是香薷抗菌、抗病毒的主要有效成分<sup>[10]</sup>。

## [参考文献]

- [ 1 ] 江苏新医学院. 中药大词典[M]. 上册, 上海: 上海科学技术出版社, 1997. 779-780.
- [ 2 ] 郑尚珍, 杨彩霞, 高黎明, 等. 石香薷挥发油成分的研究[J]. 西北师范大学学报(自然科学版), 1998, 34(3): 31-33.
- [ 3 ] 郑尚珍, 康淑荷, 高黎明, 等. 木香薷挥发油主要化学成分的研究[J]. 西北师范大学学报(自然科学版), 1999, 35(3): 36-38.
- [ 4 ] Mockute D, Bernotiene G, Judzentiene A. The essential oil of *Origanum vulgare* L. ssp. *vulgare* growing wild in Vilnius district[J]. *Phytochemistry*, 2001, 57(1): 65-69.
- [ 5 ] Garcia M A, Sanz J, Analysis of *Origanum vulgare* volatiles by direct thermal desorption coupled to gas chromatography-mass spectrometry[J]. *Journal of Chromatography A*, 2001, 918(1): 189-194.
- [ 6 ] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典[S]. 一部, 北京: 化学工业出版社, 2005. 336.
- [ 7 ] Adams R P, Identification of essential oil components by gas chromatography-mass spectroscopy [ J ]. Illinois: Allured Publishing Corporation, 2001. 1001.
- [ 8 ] Davies N W, Gas chromatographic retention indices of monoterpenes and sesquiterpenes on methyl silicone and carbowax 20M phases[ J ]. *J Chromatogr*, 1990, 503: 1.
- [ 9 ] Adams R P, Weyerstah P, Cis- and trans-sabinene hydrate: comparisons of quadrupole and ion trap mass spectra[ J ]. *J Essent Oil Res*, 1992, 4(2): 1971.
- [ 10 ] Sahin F, Gulluce M, Daferera D, et al. Biological activities of the essential oils and methanol extract of *Origanum vulgare* ssp. *vulgare* in the Eastern Anatolia region of Turkey[ J ]. *Food Control*, 2004, 15(7): 549-557.