

基于傅里叶变换红外光谱及化学计量学方法的不同产地锁阳药材分类鉴别

顾志荣¹, 马天翔², 孙岚萍², 马转霞², 许爱霞¹, 孙宇靖³, 祁梅¹, 葛斌^{1*}

(1. 甘肃省人民医院, 兰州 730000; 2. 甘肃中医药大学药学院, 兰州 730000;

3. 甘肃省中药质量与标准研究重点实验室, 兰州 730000)

[摘要] **目的:**基于傅里叶变换红外光谱(FTIR)及化学计量学方法实现不同产地锁阳药材的分类鉴别。**方法:**采集 5 个省(区)12 个市(区/州/旗)的 106 批锁阳药材,以透射方式采集样品的 FTIR 光谱数据并进行光谱预处理,建立锁阳 FTIR 指纹图谱并进行光谱解析,以相关系数法计算不同产地锁阳的 FTIR 相似度,求取不同产地锁阳 FTIR 平均光谱的一阶导数(1D)光谱,以预处理后的 1D 光谱数据建立基于主成分分析(PCA)的软独立建模分类(SIMCA)鉴别模型,以前 6 个主成分建立正交偏最小二乘法(OPLS)鉴别模型。**结果:**不同产地锁阳 FTIR 指纹图谱的走势及主要吸收峰位基本一致,共指认出了 16 个共有特征吸收峰;不同产地锁阳 FTIR 指纹图谱的相似度及 1D 光谱均有显著、唯一的特征;所建 SIMCA 模型可实现不同省级产区锁阳的分类鉴别,所建 OPLS 模型可实现不同市级产区锁阳的精确分类鉴别,12 个产地锁阳的分类鉴别体现了明显的地域聚集性特点。**结论:**基于 FTIR 及化学计量学方法能够实现不同产地锁阳药材的分类鉴别。

[关键词] 锁阳; 傅里叶变换红外光谱; 一阶导数光谱; 软独立建模分类法; 正交偏最小二乘法; 产地鉴别

[中图分类号] R282.2; Q946; R289; R22 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1005-9903(2019)22-0159-07

[doi] 10.13422/j.cnki.syfjx.20191114

[网络出版地址] <http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.3495.r.20190219.1312.009.html>

[网络出版时间] 2019-02-20 9:54

Classification and Identification of Cynomorii Herba from Different Producing Areas Based on Fourier Transform Infrared Spectroscopy and Chemometrics

GU Zhi-rong¹, MA Tian-xiang², SUN Lan-ping², MA Zhuan-xia²,

XU Ai-xia¹, SUN Yu-jing³, QI Mei¹, GE Bin^{1*}

(1. Gansu Provincial Hospital, Lanzhou 730000, China;

2. College of Pharmacy, Gansu University of Chinese Medicine, Lanzhou 730000, China;

3. Key Laboratory of Chinese Medicine Quality and Standard in Gansu Province, Lanzhou 730000, China)

[Abstract] **Objective:** To realize the classification and identification of Cynomorii Herba from different producing areas based on fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) and chemometrics. **Method:** FTIR spectrum data of 106 batches of Cynomorii Herba from 12 cities in 5 provinces were collected by transmission method and preprocessed. The FTIR fingerprints of Cynomorii Herba were established, and spectrum analysis was performed. The FTIR similarities of Cynomorii Herba from different producing areas were calculated by correlation coefficient method. The first derivative (1D) spectrum of average FTIR of Cynomorii Herba from different producing areas were obtained. The soft independent modeling of class analog (SIMCA) model based on principal

[收稿日期] 20181211(018)

[基金项目] 甘肃省中药药理与毒理学重点实验室基金项目(ZDSYS-KJ-2018-010);甘肃省中药质量与标准研究重点实验室基金项目(ZYZL18-004)

[第一作者] 顾志荣, 硕士, 主管中药师, 从事中药分析与质量控制研究, E-mail: guzr8817@126.com

[通信作者] *葛斌, 主任药师, 从事中药分析与质量控制研究, Tel: 0931-8281754, E-mail: gjy0630@163.com

component analysis (PCA) was established by the preprocessed 1D spectrum data. The orthogonal partial least squares (OPLS) model was established by top 6 principal components. **Result:** The FTIR fingerprint trend and main absorption peaks of *Cynomorii Herba* from different producing areas were basically the same, and 16 common characteristic absorption peaks were recognized. Similarity and 1D spectrum of FTIR fingerprint of *Cynomorii Herba* from different producing areas showed significant and unique characteristics. The established SIMCA model can realize the classification and identification of *Cynomorii Herba* from different provinces, while OPLS model can realize accurate classification and identification of *Cynomorii Herba* in different cities. The classification and identification of *Cynomorii Herba* from 12 city producing areas showed obvious geographical clustering characteristics. **Conclusion:** The established method based on FTIR and chemometrics can realize the classification and identification of *Cynomorii Herba* from 12 cities.

[**Key words**] *Cynomorii Herba*; fourier transform infrared spectroscopy; first derivative spectrum; soft independent modeling of class analog; orthogonal partial least squares; origin identification

锁阳为锁阳科锁阳属多年生肉质寄生草本植物锁阳的干燥肉质茎^[1],多寄生于蒺藜科白刺属植物根部,具有补肾助阳、益精养血、润肠通便之功效,是中医、藏、蒙古族医的常用药^[2]。锁阳在改善性机能和肾功能、抗衰老、抗疲劳、益智、提高免疫、抗应激、抗血小板聚集、抗癌等方面效果明确、应用广泛^[3-6]。

锁阳资源主要分布在甘肃、内蒙古、新疆、青海等地区的沙漠和半沙漠地带,这些地区海拔高、日照时数长、降雨量少、蒸发量大、平均气温低、无霜期短^[7],独特的生长环境造就了其“不老药”“沙漠人参”等美誉。《神农本草经》云:“药有……采治(造)时月;生熟,土地所出”;“药王”孙思邈在《备急千金要方》中亦云:“古之医者……用药必依土地,所以治十得九”^[8],说明产地因素影响药材品质的道地性理论古已有之。现代道地性理论认为,不同产地的气候条件及水土异质,会通过影响药用植物的物候规律、生长发育、能量代谢、物质合成及气体交换等生理作用,继而影响其有效物质(次生代谢产物)的变化,从而导致药材质量及临床疗效产生差异^[9]。因此,不同产地中药质量评价及中药质量形成与环境因子的相关性研究,一直是中药资源学、中药资源生态学、中药资源化学等新兴学科的核心内容,而锁阳的红外光谱及其产地鉴别研究未见报道。本实验基于傅里叶变换红外光谱(FTIR)与化学计量学技术,首次实现不同产地锁阳药材的分类鉴别,为突出锁阳道地产区的比较优势,打造地域性锁阳品牌提供技术参考。

1 材料

Spectrum 110 型 FTIR 仪(Perkin-Elmer 公司,配有中红外 DTGS 检测器);OMNIC 8.2 光谱处理软

件,FTIR TQ Analyst 光谱分析软件(美国 Thermo Nicolet 公司);AL204 型 1/1 万电子天平(瑞士 Mettler-Toledo 公司)。

106 批锁阳药材,采集于甘肃、内蒙古、新疆、青海、宁夏 5 个省(区),包括武威、酒泉、敦煌、张掖、阿拉善右旗、阿拉善左旗、喀什、和田、阿勒泰、海西、海南、石嘴山 12 个市(区/州/旗)。所有样品均经甘肃省人民医院药剂科郑修丽副主任中药师鉴定为锁阳科锁阳 *Cynomorium songaricum* 的干燥肉质茎。将样品自然阴干,粉碎后过 200 目筛,冷藏备用。样品信息见表 1。光谱纯 KBr 碎晶(天津市大茂化学试剂厂,批号 20170710)。

2 方法与结果

2.1 光谱采集 将锁阳粉末于(65 ± 5) °C 干燥至恒重,精确称定 10 mg 与 KBr 碎晶 100 mg 一起加入玛瑙研钵中,以等量递增法研磨混匀后,以压片机压成薄片。以透射方式采集样品的 FTIR 原始光谱数据,扫描参数:扫描范围 4 000 ~ 400 cm⁻¹,光谱分辨率 4 cm⁻¹,扫描次数 16;扫描时扣除 H₂O 和 CO₂ 干扰;控温范围 50 ~ 120 °C,每 10 °C 扫描 1 次,升温速率 2 °C · min⁻¹。平行测量 3 次,取平均光谱^[10]。

2.2 光谱预处理 采用 OMNIC 8.2 光谱处理软件对原始 FTIR 光谱数据进行预处理。经筛选,最终确定采用 15 点平滑滤波,基线校正,Noise 去噪及多元散射校正(MSC)结合作为预处理方法。

2.3 数据分析与模型建立 采用 OMNIC 8.2 光谱处理软件绘制 FTIR 指纹图谱、求取平均光谱及一阶导数(1D)光谱。采用 IBM SPSS 21.0 统计软件以“相关系数法”计算光谱相似度。采用 SIMCA-P 13.0 统计软件,以预处理后的 1D 光谱数据建立基于主成分分析(PCA)的软独立建模分类法(soft independent

表 1 锁阳样品信息

Table 1 Sample information of Cynomorii Herba

产地	批次	编号	海拔/m	经度	纬度	气候类型	年平均 无霜期/d	年降雨量 /mm	全年日照 时数/h	年平均 气温/℃	年平均 蒸发量/mm
甘肃省酒泉市金塔县	7	1~7	1 233~1 421	E98°35'17.77"~ E99°5'28.28"	N39°0'38.29"~ N40°15'58.67"	温带大陆性荒漠气候	133~186	47~160	3 193.2	8~10	2 567~2 620
甘肃省酒泉市瓜州县	21	8~28	1 063~1 590	E95°40'59.69"~ E96°52'47.17"	N40°26'0.41"~ N40°33'44.69"	温带大陆性气候	145~247	45.7~75.3	3 230~3 360	8~9.7	1 988.9~3 140.6
甘肃省酒泉市敦煌市	9	29~37	958~1 815	E93°59'33.00"~ E94°27'48.74"	N40°6'56.97"~ N41°4'1.81"	暖温带干旱性气候	142~190	39.9	3 246.7~3 300	9.3~9.9	2 149~2 486
甘肃省武威市民勤县	10	38~47	1 293~1 545	E102°31'43.96"~ E103°22'43.16"	N38°5'51.28"~ N38°42'1.16"	温带大陆性干旱气候	163~190	156	2 400~3 073.5	9~9.5	1 749.4~2 623
甘肃省张掖市肃南县	11	48~58	1 475~3 154	E99°23'28.81"~ E99°55'25.11"	N38°57'54.58"~ N39°31'21.97"	温带大陆性气候	80~96	87~300	2 683~3 085	2~3.6	2 800
内蒙古阿拉善右旗阿拉腾	12	59~70	1 299~1 503	E104°5'15.32"~ E104°9'1.35"	N40°09'8.28"~ N40°19'48.92"	温带大陆性气候	150	75	2 880	8.4	3 100
内蒙古阿拉善盟阿拉善左旗苏红图	7	71~77	789~1 541	E104°12'27.79"~ E104°13'9.20"	N41°11'29.01"~ N41°13'9.20"	中温带大陆性气候	150	90	3 100	7.2	3 050
宁夏省石嘴山市平罗县	5	78~82	1 103~1 247	E106°41'19.17"~ E106°41'35.66"	N38°48'40.92"~ N38°49'34.62"	温带大陆性气候	159	173.2	3 008.6	8.8	1 756.4
新疆和田地区和田县	5	83~87	2 875~3 436	E79°56'45.78"~ E79°59'20.59"	N36°34'8.44"~ N36°40'22.67"	温带极端干旱荒漠气候	220	50	2 735	8	2 480
新疆喀什地区喀什市疏附县	5	88~92	1 229~1 312	E75°51'25.45"~ E75°52'9.33"	N39°29'9.94"~ N39°29'50.95"	暖温带大陆性干旱气候	212	72.2	2 923.7	12	2 537.8
新疆阿勒泰地区阿勒泰市	5	93~97	813~1 003	E88°8'59.94"~ E88°12'7.80"	N47°50'39.46"~ N48°0'46.42"	温带大陆性气候	151	199	2 881	4.5	1 769
青海省海西蒙古族藏族自治州格尔木戈壁滩	3	98~100	2 815~2 833	E97°8'22.37"~ E97°8'34.19"	N37°20'29.57"~ N37°20'59.36"	荒漠、半荒漠大陆性气候	无绝对 无霜期	41.5	3 358	4	3 000
青海省海南藏族自治州同德县	6	101~106	2 926~3 266	E100°34'9.70"~ E100°34'19.67"	N35°15'17.43"~ N36°17'13.21"	高原大陆性气候	无绝对 无霜期	440	2 655	0.5	1 452

modeling of class analog, SIMCA) 鉴别模型^[11-12], 以 PCA 的前 6 个主成分(包含总体变量 94.58% 的信息量)建立正交偏最小二乘法(OPLS)鉴别模型^[13]。

2.4 锁阳的 FTIR 指纹图谱及光谱解析 106 批锁阳 FTIR 图谱见图 1。整体可见,不同产地锁阳 FTIR 图谱的走势及主要吸收峰位基本一致,说明不同产地锁阳的质量总体稳定、均一。从图 2 平均光谱(共有模式)中共指认出了 16 个锁阳的特征吸收峰,其中 3 261 cm⁻¹处的宽峰为羟基 O-H 伸缩振动

吸收峰;2 928 cm⁻¹处为大量亚甲基 C-H 键的伸缩振动,属于锁阳中三萜类物质的伸缩振动;1 616 cm⁻¹处为锁阳中酯类 C=C 的伸缩振动吸收峰,1 530,1 444 cm⁻¹处强吸收峰为苯环的骨架伸缩振动吸收峰,体现了锁阳中含有丰富的鞣质;1 349 cm⁻¹处为烷烃 C-H 弯曲振动吸收峰;1 289 cm⁻¹处为苯环 C-H 面内弯曲振动吸收峰,结合 1 530 cm⁻¹和 1 444 cm⁻¹等处吸收峰,说明锁阳中含有丰富的黄酮类物质;1 247 cm⁻¹处为羟基 O-

H 弯曲振动吸收峰;1 108,1 058,578,529 cm^{-1} 等处均属锁阳中糖及糖苷类物质 C-O 伸缩振动吸收峰,864,828,766 cm^{-1} 处均属碳水化合物糖环 C-O 伸缩振动吸收峰或环上直立或平伏 C-H 弯曲振动吸收峰;614 cm^{-1} 处为 O-H 面外弯曲振动吸收峰^[14-15]。

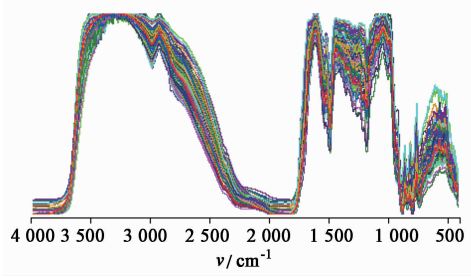


图 1 锁阳 FTIR 光谱

Fig. 1 FTIR fingerprints of Cynomorii Herba

2.5 不同产地锁阳的 FTIR 指纹图谱相似度分析
为评价不同产地锁阳的质量均一性,揭示不同产地锁阳 FTIR 光谱与地理位置的关系,本研究对不同产地锁阳 FTIR 平均光谱进行相似度分析,见表 2。可以看出,甘肃武威、酒泉、敦煌、张掖 4 个产地的

表 2 12 个产区锁阳 FTIR 平均光谱的相似度分析

Table 2 Similarity analysis of average FTIR of Cynomorii Herba from 12 producing areas

产地	武威	酒泉	敦煌	张掖	阿拉善右旗	阿拉善左旗	喀什	和田	阿勒泰	石嘴山	海西	海南
武威	1.000											
酒泉	0.991	1.000										
敦煌	0.988	0.991	1.000									
张掖	0.990	0.989	0.987	1.000								
阿拉善右旗	0.967	0.967	0.971	0.978	1.000							
阿拉善左旗	0.965	0.960	0.965	0.974	0.995	1.000						
喀什	0.948	0.961	0.966	0.970	0.982	0.983	1.000					
和田	0.949	0.968	0.967	0.976	0.983	0.988	0.798	1.000				
阿勒泰	0.955	0.982	0.953	0.956	0.980	0.976	0.857	0.864	1.000			
石嘴山	0.954	0.945	0.955	0.954	0.993	0.995	0.963	0.973	0.968	1.000		
海西	0.965	0.960	0.956	0.912	0.901	0.907	0.892	0.863	0.906	0.910	1.000	
海南	0.969	0.971	0.957	0.906	0.909	0.914	0.889	0.859	0.913	0.908	0.987	1.000

2.6 不同产地锁阳 FTIR 平均光谱及 1D 光谱的对比分析
依据 FTIR 平均光谱难以发现不同产地锁阳的特有吸收峰,因此求取平均光谱的 1D 光谱对差异进行放大,见图 3~5。由 1D 光谱可知,吸收峰 a, b, c, d, e, f 以及 A 区域(3 525 ~ 3 071 cm^{-1}) 是 12 个产地锁阳 FTIR 的差异所在。其中,喀什所产锁

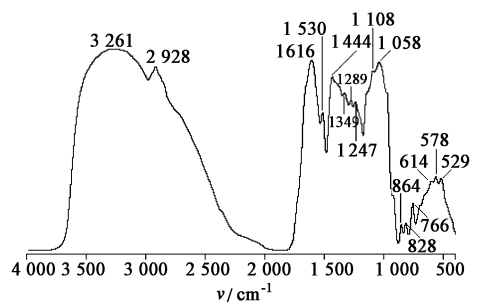


图 2 锁阳 FTIR 平均光谱及吸收峰

Fig. 2 Average spectrum and absorption peaks of FTIR of Cynomorii Herba

锁阳相似度较大(0.987 ~ 0.991),说明甘肃产锁阳质量稳定,均一性好;内蒙古阿拉善右旗、阿拉善左旗及宁夏石嘴山产锁阳相似度较大(0.993 ~ 0.995);新疆的 3 个产地喀什、和田及阿勒泰产锁阳的相似度较小(0.798 ~ 0.864),说明新疆 3 个产地所产锁阳的质量差异较大;青海的海西、海南 2 个产地与除喀什、和田外的其他 8 个产地锁产锁阳的相似度均 > 0.9,其中尤以与甘肃武威、酒泉、敦煌等 3 个产地的锁阳相似度较大(均 > 0.95)。

阳未发现吸收峰 a;武威、酒泉、阿拉善右旗、阿拉善左旗、阿勒泰所产锁阳未发现吸收峰 b;吸收峰 c 只存在于喀什、和田、阿勒泰所产锁阳中;武威、海西、海南所产锁阳无明显吸收峰 d,而其他产地锁阳吸收峰 d 均表现为尖峰;和田所产锁阳未发现明显吸收峰 e, f, 而表现为宽峰 g。将图 4 中 A 区域光谱放

大可知,12 个产地锁阳的 1D 光谱在 A 区域无一相同、各有特征,据此可实现 12 个产地锁阳的分类鉴别。喀什、和田、海西、海南所产锁阳在 A 区域的红外吸收最为丰富,尤其在 $3\ 320 \sim 3\ 071\ \text{cm}^{-1}$ 存在特有吸收(吸收峰 11~20)。新疆喀什、和田、阿勒泰所产锁阳在 A 区域具有更为丰富的红外吸收,吸收峰 16,17 是这 3 个产地所产锁阳的特有吸收峰。海西、海南所产锁阳在 A 区域的红外吸收最为丰富,且吸收特征较相似;吸收峰 11,14,18 是海西、海南所产锁阳的特有吸收峰,吸收峰 19,20 是海南所产锁阳的特有吸收峰。武威、酒泉、敦煌、张掖、阿拉善右旗、阿拉善左旗、石嘴山在 A 区域的吸收均在 $3\ 525 \sim 3\ 320\ \text{cm}^{-1}$,而在 $3\ 320 \sim 3\ 071\ \text{cm}^{-1}$ 无吸收,且石嘴山在 A 区域表现出最少的吸收峰;吸收峰 4,8 是武威所产锁阳的特有吸收峰。内蒙古阿拉善右旗、阿拉善左旗及宁夏石嘴山所产锁阳在 A 区域的红外吸收最少,表明其物质成分没有其他产地的丰富。

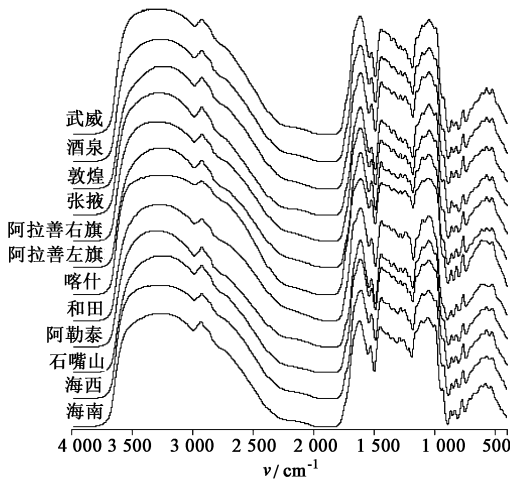


图 3 12 个产地锁阳 FTIR 平均光谱对比
Fig. 3 Comparison of average FTIR of Cynomorii Herba from 12 producing areas

2.7 不同产地锁阳 FTIR 指纹图谱的 SIMCA 鉴别模型 见图 6。12 个产地锁阳的分类鉴别体现了明显的地域聚集性特点。其中,武威、酒泉、敦煌、张掖 4 地所产锁阳在投影空间中互相靠近,且基本可分类鉴别,但酒泉、敦煌所产锁阳互有交叉;阿拉善右旗、阿拉善左旗、石嘴山 3 地所产锁阳在投影空间中互相靠近,且基本可分类鉴别,但阿拉善左旗与阿拉善右旗、石嘴山所产锁阳均互有交叉;新疆喀什、和田、阿勒泰 3 地所产锁阳的产地鉴别规律不明显,但在更大的范围内亦互相靠近,与其他产地明显分开;青海的海西、海南 2 地所产锁阳在投影空间互相靠

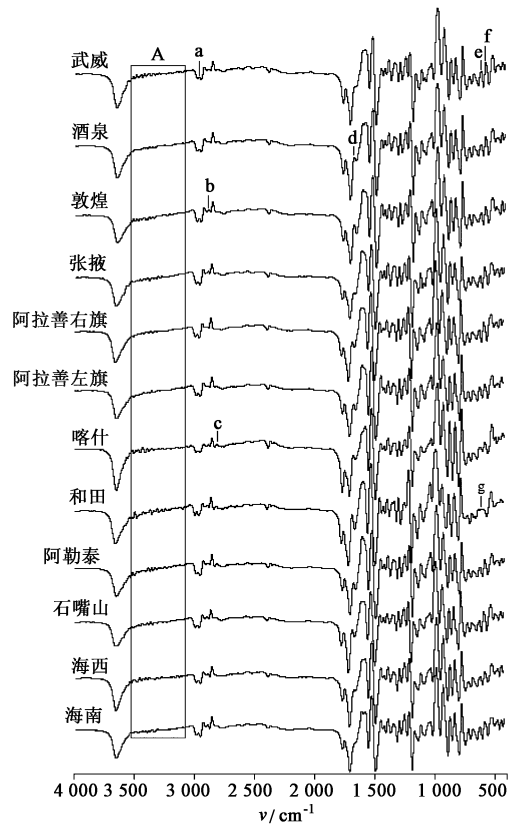


图 4 12 个产地锁阳 FTIR 平均光谱的 1D 光谱
Fig. 4 1D spectrum of average FTIR of Cynomorii Herba from 12 producing areas

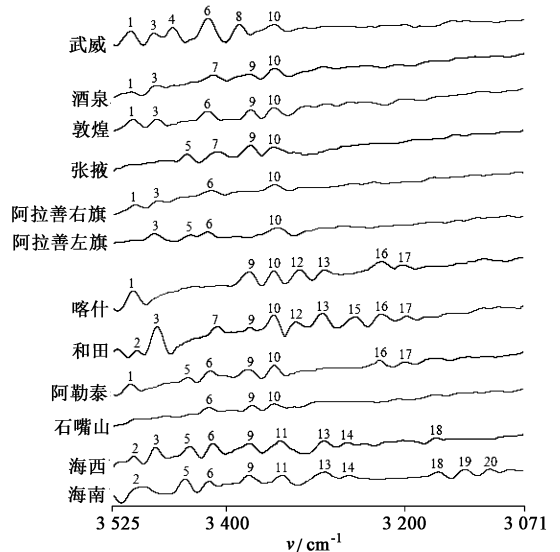


图 5 A 区域 ($3\ 525 \sim 3\ 071\ \text{cm}^{-1}$) 的 1D 光谱
Fig. 5 1D spectrum of average FTIR in wave number range of $3\ 525 \sim 3\ 071\ \text{cm}^{-1}$

近,且分类鉴别较为明确。从离散样本来看,酒泉所产锁阳有 3 批样本离散,张掖有 2 批离散,阿拉善右旗、阿拉善左旗各有 1 批离散,喀什、和田各有 1 批

离散,阿勒泰全部离散而无聚类规律;只有武威、海西所产锁阳可以实现完全鉴别。总结可知,所建 SIMCA 鉴别模型基本可实现不同省级产区锁阳的鉴别,但在市级产区则离散、交叉样本较多,鉴别的精确性不足。

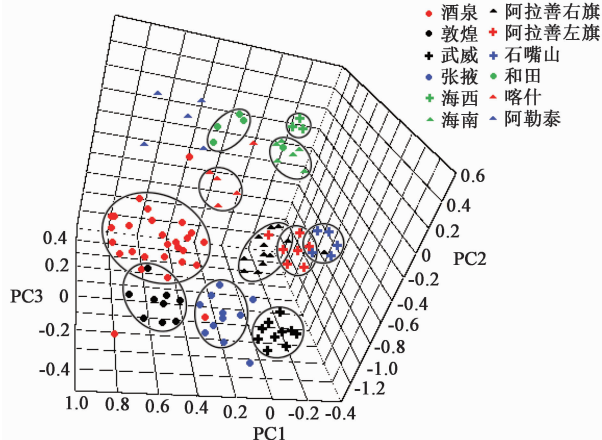


图 6 基于 1D 光谱数据的 SIMCA 三维得分
Fig. 6 3D plot of SIMCA model based on 1D spectrum data

2.8 不同产地锁阳 FTIR 指纹图谱的 OPLS 鉴别模型 1D 光谱 SIMCA 表明,前 6 个主成分包含了总体变量 94.58% 的信息量,因此以 1D 光谱的前 6 个主成分建立 OPLS 鉴别模型^[16]。结果表明,所建 OPLS 模型的主成分回归系数 $Q^2 Y = 0.6753 > 0.5$,表明不同产地锁阳样本具有明确的分离趋势,即模型的预测能力较强; $R^2 Y = 0.8379$,即前 6 个主成分对因变量变异贡献的百分比为 83.79%,表明模型的拟合度较好。见图 7。由 OPLS 三维得分图可知,除酒泉有 1 个样本被归为敦煌,张掖、阿勒泰各有 1 个样本离散,其余产地锁阳样本均可实现精确的产地分类鉴别;12 个产地锁阳的分类鉴别亦体现了明显的地域聚集性特点。因此,采用 1D 光谱前 6 个主成分所建的 OPLS 鉴别模型,能够实现不同产地锁阳的精确分类鉴别。

3 讨论

据报道,锁阳含有黄酮类、多糖、三萜类、鞣质、有机酸等广泛的化学成分^[17-18],本研究 FTIR 光谱解析结果得到了相似的结果。1 616 cm^{-1} 处较高吸收峰及 1 530, 1 444 cm^{-1} 处强吸收峰表明锁阳含有较多的鞣质;1 289, 1 530, 1 444 cm^{-1} 等吸收表明锁阳含有丰富的黄酮类物质;1 200 ~ 700 cm^{-1} 吸收表明锁阳含有丰富的多糖类成分;2 928 cm^{-1} 处大量亚甲基伸缩振动表明锁阳中三萜类物质含量较高^[19-20]。

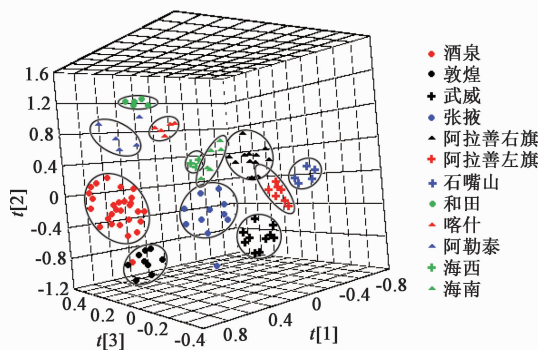


图 7 基于 1D 光谱数据前 6 个主成分的 OPLS 三维得分
Fig. 7 3D plot of OPLS model based on top 6 principal components of 1D spectrum data

对比 SIMCA 及 OPLS 模型对锁阳的产地鉴别结果可知,OPLS 模型的鉴别效能及准确度明显高于 SIMCA。这是因为 SIMCA 模型基于 FTIR 的 1D 全光谱数据,这其中包含了许多对产地鉴别并无贡献的变量,而基于前 6 个主成分的 OPLS 模型则剔除了对鉴别结果影响不大的“脏数据”,使鉴别的效能大大增加,能够更为精确地实现 12 个产地锁阳药材的准确鉴别,说明对 1D 全光谱数据进行有效降维是保证 OPLS 模型鉴别能力的关键。

研究发现,新疆喀什、和田及阿勒泰产锁阳的相似度较小,说明这 3 个产地所产锁阳的质量差异较大。1D 光谱分析进一步表明,这 3 个产地锁阳的红外吸收更为丰富及复杂,可能与其地域跨度大、分布面积广泛有关。武威、酒泉、敦煌、张掖 4 地,阿拉善右旗、阿拉善左旗、石嘴山 3 地,喀什、和田、阿勒泰 3 地,以及海西、海南 2 地所产锁阳在投影空间中互相靠近,说明地理位置上互相靠近的产地所产锁阳的 FTIR 更趋于相似,这也与相似度分析的结果相一致。对比分析表 1 中不同产地的环境因子可知,地理位置互相靠近的产地往往具有更为相近的环境因子,如阿拉善右旗、阿拉善左旗与石嘴山的海拔、气候类型、年平均无霜期、全年日照时数等均较为接近,海西、海南 2 地均无绝对无霜期等,这也印证了产地环境因子是锁阳药材品质及道地性形成的主导因素。

锁阳资源主要分布在甘肃、内蒙古、新疆、青海等地区的沙漠和半沙漠地带,地域辽阔、环境因子变化较大。本研究样品在每个产地的采样点相对较为集中,多数产区的环境因子较为均衡,不能完全代表相应地区的锁阳整体分布情况。因此,虽然所建模型的产地鉴别效果较好,但对于来源更为广泛、环境

因素更为复杂多变的锁阳样本,其鉴别效果尚未可知,需要在后续研究中扩大样本量及样本来源作进一步验证。

[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: 346.

[2] 任梦云, 杨光, 杜乐山, 等. 药用植物锁阳的研究进展[J]. 生物学杂志, 2018, 35(5): 95-98.

[3] CHEN J, Wong H S, Leung H Y, et al. An ursolic acid-enriched extract of *Cynomorium songaricum*, protects against carbon tetrachloride hepatotoxicity and gentamicin nephrotoxicity in rats possibly through a mitochondrial pathway: a comparison with ursolic acid[J]. J Funct Foods, 2014, 7(1): 330-341.

[4] XIE Y, LI X, XU J, et al. Two phenolic antioxidants in Suoyang enhance viability of OH-damaged mesenchymal stem cells: comparison and mechanistic chemistry[J]. Chem Centr J, 2017, 11(1): 84.

[5] Tuvaanjav S, HAN S, Komata M, et al. Isolation and antiviral activity of water-soluble *Cynomorium songaricum* Rupr. polysaccharides[J]. J Asian Nat Prod Res, 2016, 18(2): 159-171.

[6] 杨帆, 赵鹏伟, 孙鹏, 等. 锁阳多糖对肺癌细胞端粒的影响[J]. 中国中药杂志, 2016, 41(5): 917-921.

[7] LIU G D, CHEN G L, LI W, et al. Genetic and phytochemical diversities of *Cynomorium songaricum* Rupr. in Northwest China indicated by ISSR markers and HPLC-fingerprinting[J]. Biochem Syst Ecol, 2013, 48(48): 34-41.

[8] 唐仕欢, 杨洪军, 黄璐琦. 论自然环境因子变化对中药药性形成的影响[J]. 中国中药杂志, 2010, 35(1): 126-128.

[9] Kim E J, Kwon J, Park S H, et al. Metabolite profiling of *Angelica gigas* from different geographical origins using ¹H NMR and UPLC-MS analyses[J]. J Agric Food

Chem, 2011, 59(16): 8806-8815.

[10] 顾志荣, 许爱霞, 祁梅, 等. 基于傅里叶变换红外光谱指纹特征的甘肃8个主产区红芪药材鉴别研究[J]. 中国中医药信息杂志, 2018, 25(11): 62-67.

[11] 吕慧茹, 刘刚, 时有明, 等. 傅里叶变换红外光谱结合SIMCA对宣威火腿鉴别研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2018, 38(S1): 79-80.

[12] 郭昊, 杜伟锋, 蔡宝昌, 等. 温郁金和桂郁金红外光谱的SIMCA聚类鉴别方法研究[J]. 中药新药与临床药理, 2013, 24(3): 300-303.

[13] 薛淑娟, 陈随清. 基于代谢组学分析不同蒸制次数熟地黄中糖类成分的变化规律[J]. 中国实验方剂学杂志, 2018, 24(22): 1-5.

[14] 孙素琴, 周群, 陈建波. 中药红外光谱分析与鉴定[M]. 北京: 化学工业出版社, 2010.

[15] 赵明明, 范久余, 古锐, 等. 基于近红外光谱技术评价不同等级渣驯的质量[J]. 中国实验方剂学杂志, 2018, 24(17): 93-98.

[16] 黄小方, 欧阳辉, 李军茂, 等. UPLC-Q-TOF-MS/MS分析不同产地白术的差异性化学成分[J]. 中国实验方剂学杂志, 2017, 23(23): 27-33.

[17] MENG H C, WANG S, LI Y, et al. Chemical constituents and pharmacologic actions of *Cynomorium* plants[J]. Chin J Nat Med, 2013, 11(4): 321-329.

[18] WANG F X, WANG W, HUANG Y L, et al. Characterization of a novel polysaccharide purified from a herb of *Cynomorium songaricum* Rupr. [J]. Food Hydro, 2015, 47: 79-86.

[19] 樊海燕, 刘江英, 陈贵林. 红外光谱结合有效成分分析在锁阳多糖提取分离中的应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2018, 38(S1): 75-76.

[20] 樊海燕, 那布其, 陈贵林. 不同方法提取的锁阳多糖光谱分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36(S1): 89-90.

[责任编辑 顾雪竹]