

## 气相色谱-质谱联用和正交投影法分析当归不同部位挥发油成分\*

裴建云<sup>1</sup>, 贺云彪<sup>2</sup>, 姚惠平<sup>2</sup>, 王玉林<sup>1</sup>, 冯晓亮<sup>1</sup>, 葛承胜<sup>1</sup>, 黄兰芳<sup>1\*\*</sup>

(1. 衢州学院化学与材料工程学院, 衢州 324000; 2. 常德市食品药品检验所, 常德 415000)

**摘要 目的:** 研究当归不同部位挥发油成分, 为中药当归的加工及临床应用提供科学依据。**方法:** 利用水蒸气蒸馏法提取当归根和须挥发油, 用气相色谱-质谱(GC-MS)联用技术检测。先用子窗口因子分析法(SFA法)定性定量分析当归根的挥发油, 然后用正交投影法(OPR法)定性鉴定当归须挥发油。**结果:** 在当归根和须挥发油中分别鉴定出67和65个化学成分, 分别占总含量的89.68%和87.07%。在当归根和须挥发油中有59个共有组分, 主要组分都为藁本内酯、丁烯基酞内酯、2,6,6-三甲基-[3,1,1]庚-2-烯、香芹酚、罗勒烯和2-甲氧基-4-乙烯基苯酚等, 但含量有一定差别。**结论:** 该方法不仅可鉴定的化合物数目增加, 而且提高了定性准确度, 可用于同一中药的不同部位或不同产地的分析和质量控制。

**关键词:** 中药; 当归; 挥发油; 气相色谱-质谱; 水蒸气蒸馏; 子窗口因子分析(SFA); 正交投影(OPR)法

中图分类号: R 917

文献标识码: A

文章编号: 0254-1793(2017)05-0826-06

doi: 10.16155/j.0254-1793.2017.05.12

## Analysis of the volatile constituents in different parts of *Angelica sinensis* by GC-MS and orthogonal projection resolution\*

PEI Jian-yun<sup>1</sup>, HE Yun-biao<sup>2</sup>, YAO Hui-ping<sup>2</sup>, WANG Yu-lin<sup>1</sup>,  
FENG Xiao-liang<sup>1</sup>, GE Cheng-sheng<sup>1</sup>, HUANG Lan-fang<sup>1\*\*</sup>

(1. Department of Chemistry and Material Engineering, Quzhou College, Quzhou 324000, China;

2. Changde Institute for Food and Drug Control, Changde 415000, China)

**Abstract Objective:** To study the volatile constituents in different parts of *Angelica sinensis* for scientific evidence of its processing and clinical application. **Methods:** The volatile constituents in main and fibrous roots of *Angelica sinensis* were extracted by water distillation method and detected by GC-MS. The volatile constituents in main root were identified and determined by sub-window factor analysis (SFA) method. Then the volatile constituents in fibrous root were identified by orthogonal projection resolution (OPR). **Results:** 67 and 65 components were identified in main root and fibrous root, respectively. They accounted for 89.68% and 87.07% of the total essential oil in main root and fibrous root, respectively. 59 common components were identified in both main and fibrous roots including ligustilide, butylidene phthalide, 2,6,6-trimethylbicyclo-[3,1,1]hept-2-ene, carvacrol, allo ocimene and

\* 浙江省自然科学基金资助项目(LY15B050008);衢州市科技计划资助项目(2013Y001)

\*\* 通信作者 Tel:(0570)8015339; E-mail: lf18huang@aliyun.com

第一作者 Tel:(0570)8015339; E-mail: peijianyun@126.com

2-methoxy-4-vinylphenol. But the content of each component in main and fibrous roots varied. **Conclusions:** The proposed method could identify more components with improved accuracy, thus could be applied to analysis and quality control of traditional Chinese medicine from different plant parts or different habitats.

**Keywords:** TCM; *Angelica sinensis*; essential oil; gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS); steam distillation; sub-window factor analysis (SFA); orthogonal projection resolution (OPR)

当归具有活血补血、调经止痛等功效,在中医方剂中应用甚广,另外对心血管和免疫系统也有影响<sup>[1-2]</sup>。挥发油是当归的主要活性成分,对当归挥发油的研究已有一些报道<sup>[2-7]</sup>,然而由于当归化学成分过于复杂,且不同产地或同产地不同部位当归,其化学成分也有一定差别<sup>[5]</sup>,即使最优化色谱分离条件,也不可避免会存在一些重叠峰,因而定性定量鉴定的挥发性化学组分不多,因此如何建立研究不同产地或同产地不同部位当归挥发性成分的方法是必要的,而快速发展的化学计量学分辨方法<sup>[8-15]</sup>,使当归复杂体系的分析成为可能。

本文采用气相色谱-质谱联用法(GC-MS法),并结合正交投影法(OPR法)等化学计量学相关方法,建立了分析当归不同部位挥发性成分的方法,为当归化学指纹图谱和能客观反映当归质量评价体系的建立奠定基础。

### 1 仪器与试剂

GCMS-QP 2010 型气相色谱-质谱联用仪(SHIMADZU公司),DB-5毛细管柱(30 m × 0.25 mm × 0.25 μm;固定相:5%-苯基-甲基聚硅氧烷;安捷伦公司),FR2202CN电子天平(奥豪斯公司),挥发油提取器自制,FZ-102中草药粉碎机(天津天斯特仪器有限公司)。

当归购于浙江衢州老百姓大药房,经湖南中医药研究所朱中绩副研究员鉴定为当归 *Angelica sinensis* (Oliv.) Diels 的根(甘肃岷县,批号 G10)及须(甘肃岷县,批号 G2),无水硫酸钠为分析纯。

### 2 方法

**2.1 挥发油的提取** 样品于 40 °C 干燥 40 min,粉碎过 50 目筛,将经干燥的当归根或须粉末 200 g 和 1 000 mL 的蒸馏水混合后,置于挥发油提取器中。在提取挥发油之前,将混合物室温放置 30 min,根据中国药典<sup>[15]</sup>水蒸气蒸馏提取挥发性成分 5 h,获得的挥发油用无水硫酸钠干燥后得淡黄色油状物。当归根和须挥发油分别为原重的 0.517% 和 0.426%,供

GC-MS 分析用。

**2.2 GC-MS 条件** 采用 DB-5 毛细管柱(30 m × 0.25 mm × 0.25 μm),柱温为程序升温(初始温度 70 °C,保持 1 min 后,以 3.5 °C · min<sup>-1</sup> 升温至 250 °C,保持 10 min),载气为氦气,流速为 0.5 mL · min<sup>-1</sup>,进样量 0.04 μL,分流比 6:1,汽化温度 290 °C;离子源 EI,电子能量 70 eV,离子源温度 200 °C,倍增电压 1.2 kV,加速电压 4 kV,扫描范围 *m/z* 35~450 amu,扫描速度 1 s · dec<sup>-1</sup>,从 GC-MS 的总离子图中选出各成分的质谱图或经化学计量学分辨方法分辨出的组分质谱进行鉴定。

**2.3 数据分析** 数据分析在 Pentium IV (Intel) 计算机上进行,所有程序用 Matlab6.5 编写,所分辨的质谱在 NIST 147 标准谱库中进行检索。

### 3 结果与讨论

**3.1 定性分析** 图 1 为当归根挥发油总离子流图,由图 1 可知,它是一个复杂的分析体系,部分色谱峰达到基线分离,但也有些色谱峰出现重叠现象。如用 NIST 质谱库直接定性则相似程度很低,本文用子窗口因子分析法(SFA法)<sup>[8]</sup>对所有重叠峰进行分辨,定性准确度显著提高。以图 2-A 中保留时间在 14.00~14.60 min 间的峰 C 为例,说明此解析方法的整个过程。

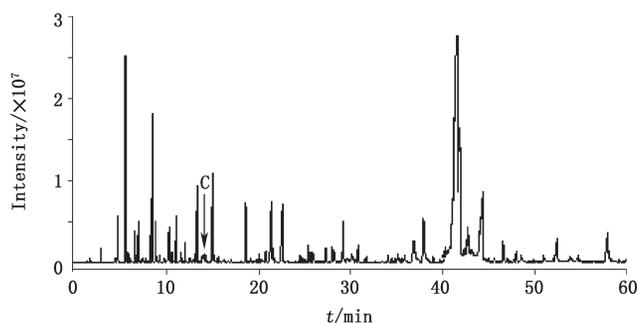
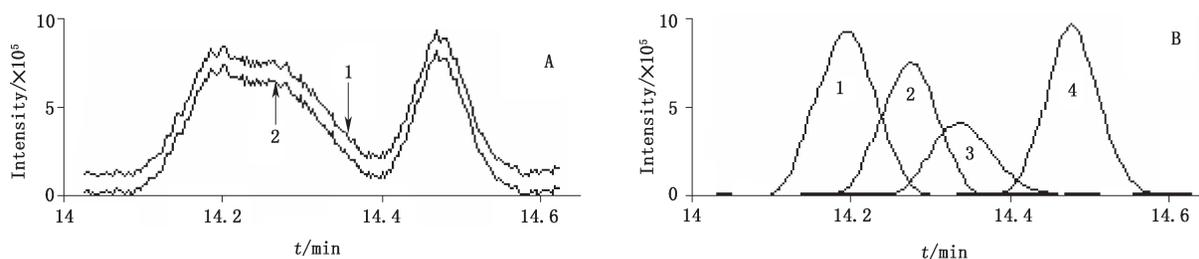


图 1 当归根挥发油的总离子流图

Fig. 1 TIC of the volatile components in main root of *Angelica sinensis*

经 PCA 法扣除背景和基线漂移(见图 2-A)后,用固定尺寸窗口渐进因子分析法(FSMWEFA法)<sup>[9]</sup>



1. 未扣背景 (before background correction) 2. 扣除背景 (after background correction)

A. 分辨前 (the original chromatogram) B. 分辨后 (the resolved chromatogram)

图2 峰C总离子流图

Fig. 2 TIC of the peak C

获得秩图。依秩图可知每一组分的子窗口,用SFA法直接分辨由GC-MS所得的C重叠峰中各组分纯物质谱。得到各组分纯物质谱后,可得其纯色谱图如图2-B。用NIST质谱库定性,组分1、2和4分别为2,4-二甲苯甲醛、3,4-二甲基苯甲醛和[-]-4-松油

醇,相关系数分别为0.987、0.972和0.953,而组分3因相关系数太低而未能定性。

同法可得到其他各组分的定性结果,共分辨出87个色谱峰,其中67个组分的定性结果见表1。

表1 当归根( $X_1$ )和须( $X_2$ )挥发油化学成分

Tab. 1 The volatile constituents in main root ( $X_1$ ) and fibrous root ( $X_2$ ) of *Angelica sinensis*

峰号 (peak No.)	$t_R$ /min		化合物名称 (compound name)	分子式 (formula)	相对含量 (relative content)/%	
	$X_1$	$X_2$			$X_1$	$X_2$
1	1.982	1.974	丁醛 (butanal)	$C_4H_8O$	0.24	0.27
2	3.141	3.128	乙酸 (acetic acid)	$C_2H_4O_2$	0.42	0.36
3	4.639	4.594	正庚烷 (heptane)	$C_7H_{16}$	0.26	0.29
4	4.928	4.876	正壬烷 (nonane)	$C_9H_{20}$	0.27	0.22
5	5.841	5.852	$\alpha$ -蒎烯 ( $\alpha$ -pinene)	$C_{10}H_{16}$	5.78	4.92
6	6.359	6.324	正辛烷 (octane)	$C_8H_{18}$	0.51	0.75
7	6.810	—	2-辛醛 (2-octanal)	$C_{10}H_{16}$	1.69	—
8	7.149	7.154	7-甲基-3-甲基-1,6-辛二烯 (7-methyl-3-methylene-1,6-octadiene)	$C_{10}H_{16}$	1.46	1.72
9	7.183	7.175	辛醛 (octanal)	$C_8H_{16}O$	0.87	0.78
10	8.431	8.386	D-柠檬烯 (D-limonene)	$C_{10}H_{16}$	1.82	1.52
11	8.682	8.674	2,6,6-三甲基-[3,1,1]庚-2-烯 (2,6,6-trimethylbicyclo-[3,1,1]hept-2-ene)	$C_{10}H_{16}$	4.72	5.41
12	9.048	8.964	3,7-二甲基-1,3,7-辛三烯 (3,7-dimethyl-1,3,7-octatriene)	$C_{10}H_{16}$	0.83	0.76
13	9.430	9.387	4-甲基-3-[1-甲基亚乙基]-环己烯 (4-methyl-3-[1-methylethylidene]-cyclohexene)	$C_{10}H_{16}$	0.16	0.28
14	10.605	—	反,反-六-2,4-二己烯醋酸 ( <i>trans,trans</i> -hexa-2,4-dienyl acetate)	$C_8H_{12}O_2$	0.09	—
15	10.668	10.637	罗勒烯 (allo ocimene)	$C_{10}H_{16}$	3.75	3.56
16	10.895	10.846	1-癸烯 (1-decene)	$C_{10}H_{20}$	0.58	0.56
17	11.034	10.963	6,7-二甲基双环[4.2.0]辛烷 (6,7-dimethyl-bicyclo[4.2.0]octane)	$C_{10}H_{18}$	0.24	0.39
18	11.379	11.461	2-甲基壬烷 (2-methylnonane)	$C_{10}H_{22}$	1.43	1.37
19	11.892	11.794	1,5,5-三甲基-6-亚甲基环己烯 (1,5,5-Trimethyl-6-methylene-cyclohexene)	$C_{10}H_{16}$	0.38	0.32
20	12.335	—	5-甲基-3-(1-甲基亚乙基)-1,4-己二烯 (5-methyl-3-(1-methylethylidene)-1,4-hexadiene)	$C_{10}H_{16}$	0.53	—
21	13.509	13.482	戊苯 (pentylbenzene)	$C_{11}H_{16}$	0.26	0.41
22	13.612	13.596	6-丁基-1,4-环庚二烯 (6-butyl-1,4-cycloheptadiene)	$C_{11}H_{18}$	1.83	1.53
23	14.187	14.227	2,4-二甲苯甲醛 (2,4-dimethylbenzaldehyde)	$C_{10}H_8$	0.87	0.72
24	14.285	—	3,4-二甲基苯甲醛 (3,4-dimethylbenzaldehyde)	$C_9H_{10}O$	0.46	—

表 1(续)

峰号 (peak No.)	$t_R$ /min		化合物名称 (compound name)	分子式 (formula)	相对含量 (relative content)/%	
	$X_1$	$X_2$			$X_1$	$X_2$
25	14.476	14.357	[ - ]-4- 松油醇 ([ - ]-4-terpineol)	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	0.91	1.13
26	15.321	15.272	[ - ]- $\alpha$ - 松油醇 ([ - ]- $\alpha$ -terpineol [ <i>p</i> -menth-1-en-8-ol ])	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	1.23	1.05
27	15.468	15.396	<i>n</i> - 癸醛 ( <i>n</i> -decanal)	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O	0.28	0.17
28	15.951	16.042	5- 甲基壬烷 (2-methylnonane)	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	0.34	0.41
29	17.245	17.187	5- 癸烯 -1- 醇 (5-decen-1-ol)	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O	0.25	0.27
30	18.816	18.764	香芹酚 (carvacrol)	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O	3.78	3.92
31	19.352	19.327	1- 甲氧基 -4-[ 1- 丙烯基 ]- 苯 (1-methoxy-4-[ 1-propenyl ]-benzene)	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O	0.07	0.14
32	19.948	19.925	5- 甲基 -2- 癸烯 (5-methyl-2-decene)	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub>	0.24	0.35
33	20.252	20.301	4- 甲基 -5- 癸醇 (4-methyl-5-decanol)	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> O	1.46	1.41
34	20.628	20.586	6- 羟甲基 -2, 3- 二甲基甲酚 ([ 6-hydroxymethyl-2, 3-dimethylphenyl ]methanol)	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	0.06	0.17
35	20.949	20.921	2, 9- 二甲基癸烷 (2, 9-dimethyldecane)	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	1.86	1.56
36	21.614	21.637	2- 甲氧基 -4- 乙烯基苯酚 (2-methoxy-4-vinylphenol)	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	3.79	3.48
37	22.772	22.743	2, 4, 5- 三甲基苯甲醛 (2, 4, 5-trimethylbenzaldehyde)	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O	2.10	1.93
38	24.820	24.801	10- 十一烯醛 (10-undecenal)	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> O	0.23	0.18
39	25.104	—	2, 5- 二甲基 -3- 己醇醋酸 (2, 5-dimethyl-3-hexanol acetate)	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	0.08	—
40	25.709	25.684	十二醛 (dodecanal)	C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> O	1.81	2.16
41	26.028	26.053	2- 甲基十二烷 (2-methyldodecane)	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	1.24	1.47
42	26.270	26.261	[ + ]- $\beta$ - 柏木烯 ([ + ]-beta-cedrene)	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.86	0.78
43	27.427	27.327	5, 9, 9- 三甲基螺 (5, 9, 9-trimethyl-spiro [ 3, 5 ] non-5-en-1-one)	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> O	0.43	0.31
44	28.269	28.302	2- 丁烯基己酯 (2-butenyl hexanoic acid ester)	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	1.61	1.47
45	28.342	28.356	1, 3- 二异丙烯基 -6- 甲基环己烯 (1, 3-diisopropenyl-6-methyl-cyclohexene)	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub>	0.38	0.43
46	29.438	29.416	5, 6- 二氢 -4-[ 2, 3- 二甲基 -2- 丁烯 -4- 基 ]-2 <i>H</i> - 吡喃 (5, 6-dihydro-4-[ 2, 3-dimethyl-2-buten-4-yl ]-2 <i>H</i> -pyran-2-one)	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	1.47	1.25
47	30.310	30.284	喇叭茶烯 ([ + ]-ledene)	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.39	0.47
48	30.429	30.398	$\beta$ - 雪松烯 ( $\beta$ -himachalene)	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.34	0.42
49	30.982	—	7, 11- 二甲基 -3- 甲基 -1, 6, 10- 朵三烯 (7, 11-dimethyl-3-methylene-1, 6, 10-dodecatriene)	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.32	—
50	31.028	31.012	百秋里醇 (pathouli alcohol)	C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O	0.47	0.52
51	31.660	31.647	$\beta$ - 倍半水芹烯 ( $\beta$ -sesquiphellandrene)	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.35	0.31
52	31.901	31.892	[ + ]- $\alpha$ - 长蒴烯 ([ + ]- $\alpha$ -longipinene)	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0.31	0.39
53	34.220	34.184	[ Z ]-2-[ 3- 环丙基 -7-7- 降萜基 ] 醋酸 ([ Z ]-2-[ 3-cyclopropyl-7-norcaranyl ] acetate)	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	0.36	0.47
54	35.262	35.243	苯乙酸 - 反 -2- 己烯酯 ( <i>trans</i> -2-hexen-1-ylester, phenylacetic acid))	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	0.34	0.29
55	35.681	—	十二烷基环氧乙烷 (dodecyl-oxirane)	C <sub>14</sub> H <sub>28</sub> O	0.51	—
56	35.818	35.796	2- 十四醇 (2-tetradecanol)	C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> O	0.25	0.19
57	36.015	36.032	顺 -7- 十烯四 -1- 醇 ( <i>cis</i> -7-tetradecen-1-ol)	C <sub>14</sub> H <sub>28</sub> O	0.42	0.57
58	38.226	38.204	丁烯基酞内酯 (butylidene phthalide)	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	4.78	4.82
59	39.223	39.241	异丁烯基酞内酯 ( <i>iso</i> -butylidene phthalide)	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	1.34	2.23
60	43.194	43.176	藁本内酯 (ligustilide)	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	18.72	17.59
61	44.543	44.526	4- 甲基 -2- 叔辛基酚 (4-methyl-2-tert-octylphenol)	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O	2.97	2.24
62	46.748	46.725	<i>E</i> -7- 十四醇 ( <i>E</i> -7-tetradecen-1-ol)	C <sub>14</sub> H <sub>28</sub> O	0.36	1.05
63	47.162	47.143	1- 十六烷烯 (1-hexadecene)	C <sub>16</sub> H <sub>32</sub>	0.18	0.14
64	48.144	48.127	十四烷酸 (tetradecanoic acid)	C <sub>14</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	0.29	0.28
65	48.663	48.674	10- 五角十四醇 ( <i>E</i> -10-pentadecenol)	C <sub>15</sub> H <sub>30</sub> O	0.27	0.41
66	54.882	—	1- 十三醛 -4- 醇 (1-tridecyn-4-ol)	C <sub>13</sub> H <sub>24</sub> O	0.32	—
67	57.342	57.297	硬脂酸 (stearic acid)	C <sub>18</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>	2.46	2.28

**3.2 定量分析** 在解析出各组分的纯色谱和质谱以后,采用总体积分和归一化法得到各组分的定量结果,定性组分含量占总含量的 89.68%,结果见表 1。

**3.3 相关化合物的鉴定** 图 3 中曲线 1 和曲线 2 分别为当归根 ( $X_1$ ) 和须 ( $X_2$ ) 挥发油的 GC-MS 总离子流图,从图中可见,  $X_2$  中有很多组分与  $X_1$  一致,但其中各组分浓度存在一定差别。实际上,比较当归根和须的挥发性成分时,由  $X_1$  演绎的信息通过 OPR 法<sup>[10]</sup>可达此目的,而不必对每一峰解析。

如“3.1”项定性分析所示,峰 C 存在 4 个组分,每个组分的纯光谱已由 SFA 法获得。因保留时间漂移不严重,故  $X_2$  中峰 C' (13.90~14.70 min) 可定为  $X_1$  中峰 C 相关部分,然后将组分 2 (3,4-二甲基苯甲醛) 和组分 4 ([ - ]-4-松油醇) 的纯光谱  $v_1$  和  $v_4$  正交投影到  $X'$ ,得正交投影图如图 4 所示。从图 4 可以看出,组分 4 有一个残余向量接近于 0 的区域,考虑残余向量非常接近 0,以及噪声和背景等因素,故确定组分 [ - ]-4-松油醇也存在于当归须中;但组分 2 没有残余向量接近于 0 的区域,可以确定 3,4-

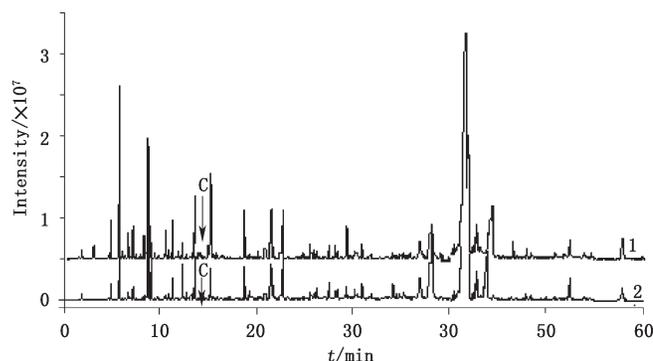


图 3 当归根 ( $X_1$ : 曲线 1) 和须 ( $X_2$ : 曲线 2) 挥发油的总离子流图  
Fig. 3 TIC of the volatile components in main root ( $X_1$ : curve 1) and fibrous root ( $X_2$ : curve 2) of *Angelica sinensis*

二甲基苯甲醛不存在于当归须中。用同样方法,可得  $X_1$  中挥发油组分在  $X_2$  中的相关组分,结果也列于表 1,在当归根和须挥发油中有 59 个共有组分。

当然在  $X_2$  中有些峰未能用 OPR 法定性,对这些峰按“3.1”项方法进行定性分析,从  $X_2$  挥发油中定性鉴定得到 6 个  $X_1$  中不含的组分,其定性定量分析结果见表 2。

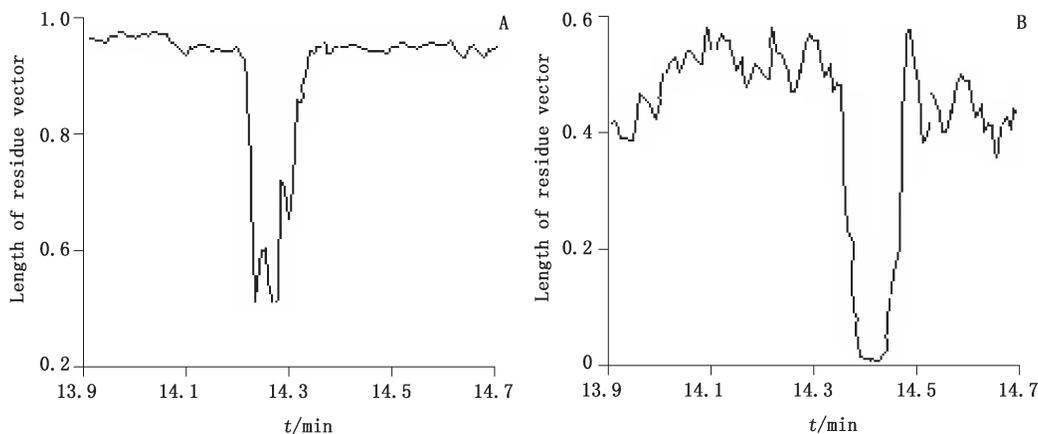


图 4 组分 2 (A) 和组分 4 (B) 正交投影图  
Fig. 4 Spectrum projection graphs of components 2 and 4

表 2 当归须挥发油中其他化学成分分析结果

Tab. 2 Qualitative analysis results of other volatile constituents in fibrous root of *Angelica sinensis*

峰号 (peak No.)	$t_R$ /min	化学名称 (compound name)	分子式 (formula)	相对含量 (relative content) /%
1	6.824	7-甲基-3-亚甲基-1,6-辛二烯 (7-methyl-3-methylene-1,6-octadiene)	$C_{10}H_{16}$	1.27
2	12.328	癸烷 ((decane))	$C_{10}H_{22}$	0.47
3	14.245	Z-beta-松油醇 (terpineol, Z-beta-)	$C_{10}H_{18}O$	0.53
4	19.562	3-癸炔-2-醇 (3-decyn-2-ol)	$C_{10}H_{18}O$	0.21
5	25.150	十五烷 (pentadecane)	$C_{15}H_{32}$	0.04
6	54.310	十五酸 (pentadecanoic acid)	$C_{15}H_{30}O_2$	0.17

## 4 结论

本文以 GC-MS 结合相关化学计量学方法 (SFA 法和 OPR 法), 定性或定量分析了当归 2 个不同部位的挥发油。结果显示在相同提取和测定条件下, 当归不同部位的挥发油中各化学成分及含量存在差异性。当归根和须中挥发油分别鉴定 67 和 65 个组分, 分别占总含量的 89.68% 和 87.07%。在当归根和须挥发油中有 59 个共有组分, 主要组分都为藁本内酯、丁烯基酞内酯、香芹酚和 2-甲氧基-4-乙炔基苯酚等, 但含量有一定差别, 和以前文献结果<sup>[5]</sup>相比, 定性鉴定组分更多, 定量准确度更高。该方法使比较同一中药的不同产地或不同部位的组分、真假判断和质量控制成为可能, 为当归中药化学指纹图谱和能客观反映中药质量评价体系的建立奠定基础, 为中药当归的加工及临床应用提供科学依据。

## 参考文献

- [1] 董晴, 陈明苍. 当归化学成分及药理作用研究进展 [J]. 亚太传统医药, 2016, 12(2): 32  
DONG Q, CHEN MC. Chemical composition and pharmacological research progress of *Angelica* [J]. *Asia Pac Tradit Med*, 2016, 12(2): 32
- [2] 李曦, 张丽宏, 王晓晓, 等. 当归化学成分及药理作用研究进展 [J]. 中药材, 2013, 36(6): 1023  
LI X, ZHANG LH, WANG XX, *et al.* Chemical composition and pharmacological research progress of *Angelica sinensis* [J]. *J Chin Med Mater*, 2013, 36(6): 1023
- [3] 李冬华, 马潇, 宋平顺, 等. 三种方法提取当归挥发性成分的气相色谱-质谱联用分析 [J]. 西部中医药, 2013, 26(8): 15  
LI DH, MA X, SONG PS, *et al.* Analysis of three methods for extracting volatile constituent from Danggui by combination of gas chromatography and mass spectrometry [J]. *West J Tradit Chin Med*, 2013, 26(8): 15
- [4] 唐文文, 李国琴, 晋小军. 不同干燥方法对当归挥发油成分的影响 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2014, 20(3): 9  
TANG WW, LI GQ, JIN XJ. Effects of different drying methods on volatile oil from *Angelicae Sinensis Radix* [J]. *Chin J Exp Tradit Med Form*, 2014, 20(3): 9
- [5] 吴海燕, 华永丽, 郭延生. 甘肃岷县当归不同药用部位挥发油的提取及其成分分析 [J]. 天然产物研究与开发, 2012, 24(9): 1225  
WU HY, HUA YL, GUO YS. Extraction and analysis of volatile oil in different parts of *Radix Angelicae Sinensis* from Min county in Gansu [J]. *Nat Prod Res Dev*, 2012, 24(9): 1225
- [6] 张庆, 茹庆国, 林红梅, 等. 当归挥发油分子蒸馏馏分 GC-MS 分析及抗氧化研究 [J]. 中国中医药信息杂志, 2016, 23(2): 82  
ZHANG Q, RU QG, LIN HM, *et al.* GC-MS analysis and antioxidant activity study of distillates separated from essential oil of *Angelicae Sinensis Radix* by molecular distillation [J]. *Chin J Inf Tradit Chin Med*, 2016, 23(2): 82
- [7] 杨艳, 易进海, 黄志芳, 等. 川芎、当归和藁本中挥发油成分比较研究 [J]. 中药材, 2015, 38(6): 1212  
YANG Y, YI JH, HUANG ZF, *et al.* Comparative study on volatile oil composition of *Chuanxiong Rhizoma*, *Angelicae Sinensis Radix* and *Ligustici Rhizoma Radix* [J]. *J Chin Med Mater*, 2015, 38(6): 1212
- [8] MANNE R, SHEN HL, LIANG YZ. Subwindow factor analysis [J]. *Chemom Intell Lab Syst*, 1999, 45(1): 171
- [9] 梁逸曾. 复杂体系仪器分析-白、灰、黑分析体系及其多变量解析方法 [M]. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1996: 199  
LIANG YZ. *Instrumental Analysis of Complex Systems-White, Gray and Black Analytical Systems and Their Multivariate Methods* [M]. Changsha: Hunan Science and Technology Press, 1996: 199
- [10] SANCHEZ FC, RUTAN SC, GIL GARCIA ND. Resolution of multicomponent overlapped peaks by the orthogonal projection approach, evolving factor analysis and window factor analysis [J]. *Chemom Intell Lab Syst*, 1997, 36(1-2): 153
- [11] LIU HT, ZOU SS, QI YD, *et al.* Quantitative determination of four compounds and fingerprints analysis in the rhizomes of *Drynaria fortunei* (Kunze) J. Sm. [J]. *J Nat Med*, 2012, 66(2): 413
- [12] LU FL, LI DP, FU CM, *et al.* Studies on chemical fingerprints of *Siraitia Grosvenorii* fruits (Luohanguo) by HPLC [J]. *J Nat Med*, 2012, 66(1): 70
- [13] 马诗瑜, 沈岚, 洪燕龙, 等. 化学计量学在中药定量表征中的应用 [J]. 世界科学技术-中医药现代化, 2014, 16(12): 2700  
MA SY, SHEN L, HONG YL, *et al.* Application of chemometrics in quantitative characterization of traditional Chinese medicine [J]. *World Sci Technol Mod Tradit Chin Med Mater Med*, 2014, 16(12): 2700
- [14] 刘斌, 李艳薇, 刘国良, 等. GC-MS 结合化学计量学方法用于肾茶挥发油的定性分析 [J]. 药物分析杂志, 2015, 35(5): 1815  
LIU B, LI YW, LIU GL, *et al.* Qualitative analysis of volatile oil from *Orthosiphon stamineus* by GC-MS and chemometrics [J]. *Chin J Pharm Anal*, 2015, 35(5): 1815
- [15] 中国药典 2010 年版. 一部 [S]. 2010: 附录 63  
ChP 2010. Vol I [S]. 2010: Appendix 63

(本文于 2016 年 5 月 28 日收到)