

# 基于 PLSR 分析当归挥发油分子蒸馏馏分中化学成分与抗炎作用的相关性

张庆 茹庆国 林红梅 刘艳 康倩 李辉 吴清

**【摘要】 目的** 研究当归挥发油分子蒸馏馏分的化学成分与其抗炎作用的相关性。**方法** 用分子蒸馏设备对当归挥发油进行分馏,气质联用色谱(gas chromatography-mass spectroscopy,GC-MS)表征所得馏分的化学组成;用脂多糖(lipopolysaccharide,LPS)诱导 RAW264.7 细胞作为炎症模型,评价各馏分的细胞毒作用和抗炎作用;用偏最小二乘法回归分析(partial least squares regression,PLSR)分析馏分中化学成分与抗炎作用的相关性。**结果** 当归挥发油经分子蒸馏后得到 6 个馏分,且各馏分均能抑制 LPS 诱导的 RAW264.7 细胞产生一氧化氮,表现出抗炎作用;PLSR 结果显示建立的回归模型合理,馏分中的十九烷、2,2-二甲基-1-苯基-1-丙醇、Z-葑本内酯、E-葑本内酯、十六烷、阿魏酸、十三酸、亚油酸、油酸、5,8,11-十七碳三炔酸甲酯与抗炎作用呈正相关。**结论** 本研究为当归及其他中药挥发油的进一步开发利用及中药挥发油的质量控制提供了实验数据。

**【关键词】** 当归挥发油; 分子蒸馏; 气质联用色谱; 抗炎; 偏最小二乘法  
**【中图分类号】** R285.5 **【文献标识码】** A doi:10.3969/j.issn.1674-1749.2015.10.001

**Correlation between chemical constituents and anti-inflammatory activity of distillates separated from essential oil of Angelica Sinensis Radix by molecular distillation based on PLSR** ZHANG Qing, RU Qing-guo, LIN Hong-mei, et al. School of Chinese Materia Medica, Beijing University of Chinese Medicine, Beijing 100102, China

Corresponding author: WU Qing, E-mail: qwu@vip.sina.com

**【Abstract】 Objective** To investigate the correlation between the chemical constituents and anti-inflammatory effect of distillates separated from the essential oil of Angelica Sinensis Radix by molecular distillation. **Methods** The distillates were separated from the essential oil of Angelica Sinensis Radix by molecular distillation, and the chemical constituents of distillates were analyzed by GC-MS; lipopolysaccharide (LPS) - induced RAW264.7 cells as a model of inflammation to evaluate the cell toxicity and anti-inflammatory effects of distillates; partial least squares regression (PLSR) was evaluated to analysis the correlation between chemical constituents and anti-inflammatory effect. **Results** 6 fractions obtained from Angelica Sinensis Radix by molecular distillation, and all distillates showed anti-inflammatory effects by inhibiting the production of NO by LPS activated RAW264.7 cells; PLSR results showed that the regression model was reasonable, and Nonadecane, Benzenemethanol, a-(1,1-dimethylethyl)-, Z-ligustilide, E-ligustilide, Hexadecane, ferulaic acid, tridecanoic acid, linoleic acid, oleic acid, 5, 8, 11-Heptadecatriynoic acid, methyl ester were positively related to anti-inflammatory effects. **Conclusion** This study provided the experimental data for the further development of the essential oil of Angelica Sinensis Radix and other Chinese herbs and the quality control of essential oil of Chinese medicine.

**【Key words】** Essential oil of angelica sinensis radix; Molecular distillation; Gas chromatography-mass spectroscopy; Anti-inflammation; Partial least squares regression analysis

基金项目: 国家自然科学基金(81073059);北京中医药大学创新团队发展计划(2011-CXTD-13)  
作者单位: 100102 北京中医药大学中药学院[张庆(硕士研究生)、茹庆国(硕士研究生)、林红梅(博士研究生)、刘艳(硕士研究生)、康倩(硕士研究生)、李辉(硕士研究生)、吴清]  
作者简介: 张庆(1990-),2013 级在读硕士研究生。研究方向: 中药新剂型与新技术。E-mail: zzzhangqing01@126.com  
通讯作者: 吴清(1965-),女,博士,教授。研究方向: 中药新剂型与新技术。E-mail: qwu@vip.sina.com

中药当归为伞形科植物当归 *Angelica sinensis* (Oliv.) Diels. 的干燥根,有补血活血、调经止痛、润肠通便的功效<sup>[1]</sup>,广泛应用于中医临床,素有“十方九归”之称。当归挥发油是当归的主要有效成分之一,现代药理研究证明其有提高免疫力、消炎镇痛和抗血小板聚集等作用<sup>[2-3]</sup>。

在本研究中,用分子蒸馏对超临界流体萃取制备的当归挥发油进行进一步分馏,应用气质联用色谱(gas chromatography-mass spectroscopy, GC-MS)分析所得馏分的化学组成,用 LPS 诱导的 RAW264.7 细胞模型评价各馏分的抗炎作用,用 PLSR 分析各馏分中的化学成分与抗炎药效的相关性。本研究为当归及其他中药挥发油的进一步开发利用及中药挥发油质量控制提供了有价值的资料。

## 1 材料

### 1.1 材料与试剂

当归饮片购自北京本草方源药业有限公司,经北京中医药大学中药学院中药鉴定系刘春生教授鉴定为伞形科植物当归的干燥根。提取前将当归饮片粉碎成粗粉。

脂多糖,二甲亚砜(dimethyl sulfoxide, DMSO) 购自 Sigma-Aldrich 公司;磷酸盐缓冲液(PBS)、青霉素—链霉素溶液、MTT 试剂购自北京索来宝公司; NO 试剂盒购自江苏碧云天生物科技研究所;DMEM 培养基、色谱级乙酸乙酯购自 Fisher 公司。

### 1.2 仪器与设备

HA220-50-01 超临界流体萃取仪(江苏南通华安超临界萃取有限公司),BSA224S 分析天平(赛多利斯科学仪器有限公司),VLK-70 分子蒸馏设备(德国瑞达有限公司),Thermo Finnigan 2000 Trace DSQ 气相色谱-质谱仪器(美国 Thermo 公司),Multiskan GO 多功能酶标仪(美国 Thermo 公司)。

## 2 实验方法

### 2.1 超临界流体萃取及分子蒸馏

根据实验室前期已确定的最佳提取工艺对当归进行超临界流体萃取,以 CO<sub>2</sub> 为萃取溶剂。提取的工作条件如下:工作压力:30 MPa,工作温度:50℃,提取时间:2 小时,CO<sub>2</sub> 的流量:25 L/h;分离器 I 的工作压力:8 MPa,温度:50℃;分离器 II 的压力为提取系统尾部的压力,工作温度:35℃。

用分子蒸馏设备对所得挥发油进行分馏,工作

条件如下:刮刀的转速:300 rpm/min,分子蒸馏过程真空度:0.35 mbar,滴速:每秒 1~2 滴。本研究中,通过改变温度来获得不同的馏分。将所得到的馏分保存在-20℃冰箱中用于进一步的研究。

### 2.2 总提取物与各馏分的 GC-MS 分析

将各馏分适当稀释后,用无水硫酸钠脱水,然后用 GC-MS 进行分析,GC-MS 条件:柱子型号:安捷伦 DB-5 MS(0.25 mm×30 m,0.25 μm),进样口温度:230℃,升温程序:80℃以 3℃/min 升温至 167℃,保持 2.5 min;以 2℃/min 升至 202℃,以 4℃/min 升至 280℃,保持 15 分钟,载气为高纯氦气,流速:1 mL/min,进样量:1 μL,溶剂延迟:4 分钟。离子源温度:230℃,电离源:EI,电子能量:70 eV;传输线温度:250℃;四级杆温度:150℃,扫描质量范围:35~550 amu。

### 2.3 抗炎能力的测定—馏分对 LPS 诱导的 RAW264.7 释放 NO 的抑制作用

2.3.1 RAW264.7 细胞培养及传代 小鼠单核巨噬细胞系细胞 RAW264.7 细胞购自国家实验细胞资源共享平台。细胞用含有 10% 胎牛血清,1% 青霉素—链霉素溶液的 DMEM 培养基,培养环境为 37℃、5% CO<sub>2</sub>,当细胞生长密度达到 70%~80% 的时候进行传代,1~2 天换液 1 次,2~3 隔天传代。

2.3.2 MTT 测定各馏分对 RAW264.7 生长的影响 将处于对数生长期的 RAW264.7 细胞,按  $1 \times 10^4$ /孔的密度接种于 96 孔板中,置于 37℃、5% CO<sub>2</sub> 的环境中培养 24 小时,然后分别加入不同浓度的含药培养基,使药物的最终浓度分别为 100 μg/mL、50 μg/mL、25 μg/mL、12.5 μg/mL、6.25 μg/mL、3.13 μg/mL、1.56 μg/mL,同时设置空白对照组与调零孔。继续培养 24 小时后,加入 5 mg/mL 的 MTT 20 μL,置于细胞培养箱中孵育 4 小时,吸出上清液后,每孔加入 150 μL DMSO,放置于摇床上摇 10 分钟,用酶标仪测定其在 450 nm 处的吸光度。

$$\text{细胞生存率} = \frac{1 - (\text{OD}_{\text{对照组}} - \text{OD}_{\text{实验组}})}{(\text{对照组} - \text{OD}_{\text{调零}})} \times 100\%$$

2.3.3 馏分对 NO 释放的影响 将处于对数生长期的 RAW264.7 细胞,按照  $1 \times 10^4$ /孔的密度接种于 96 孔板中,于 37℃、5% CO<sub>2</sub> 环境中培养 24 小时,然后分别加入含药培养基,使其最终浓度为 12.5 μg/mL,继续培养 1 小时后,加入 LPS 进行诱导,LPS 的终浓度是 10 μg/mL,对照组加入等量的 PBS,继续培养 24 小时后,吸取细胞上清液进行离

心,用 Griss 试剂法测定每组细胞的上清液中的 NO,按照试剂盒上的操作步骤进行测定,通过计算 NO 抑制率评价馏分的抗炎作用。

$$\text{NO 抑制率} = \frac{(\text{OD 实验组} - \text{OD 对照组})}{\text{OD 实验组}} \times 100\%。$$

## 2.4 统计学处理

采用 SPSS 20.0 进行统计分析,结果以均数 $\pm$ 标准差( $\bar{x} \pm s$ )表示,经检验数据符合正态分布,方差齐,采用单因素方差分析,多组间两两比较采用 LSD 检验,检验水平  $\alpha=0.05$ ,双侧检验, $P<0.05$  时有显著性差异。用 SIMCA-P 11.5 偏最小二乘法回归(partial least squares regression,PLSR)分析馏分中化学成分与抗炎作用的相关性。

## 3 结果

### 3.1 超临界流体萃取及分子蒸馏

本研究用超临界流体萃取法制得了棕色澄明的当归挥发油,得率为 1.4%,其中当归挥发油中主要有效成分藁本内酯的相对含量为 65.98%。

当归挥发油进行分子蒸馏后得到 6 个不同的馏分,在 100℃ 下分离得到了馏分 1,然后将残渣进一步分离,在 110℃ 时,得到馏分 2,并将所得的残渣按照上述方法进一步分离,在 120℃、130℃、140℃、150℃ 下分别获得了馏分 3、馏分 4、馏分 5、馏分 6。馏分 1 到馏分 6 从浅黄色变化到橙黄色,颜色逐渐加深,黏度增大。

### 3.2 当归挥发油分子蒸馏后所得馏分的 GC-MS 分析

通过与 NIST 2.0 质谱图库提供的标准图谱进行比较,并查阅参考文献,确定各馏分中的化学成分。

采用面积归一化法确定馏分中各化学成分的相对含量。本研究为研究各馏分中化学成分与其抗炎作用的相关性,为简化分析只对各馏分中相对含量大于 1% 的化学成分进行分析。GC-MS 分析结果如表 1 所示。

GC-MS 的结果显示,藁本内酯是各馏分中相对含量最高的成分,各馏分中藁本内酯从低到高依次为:馏分 6(32.77%)<馏分 5(48.63%)<馏分 1(62.46%)<馏分 2(72.27%)<馏分 4(75.28%)<馏分 3(79.97%)。

### 3.3 抗炎作用

3.3.1 各馏分对 RAW264.7 细胞生长的影响  
如表 2 所示,MTT 结果显示各馏分的药物浓度在 12.5  $\mu\text{g/mL}$ 、6.25  $\mu\text{g/mL}$ 、3.13  $\mu\text{g/mL}$ 、1.56  $\mu\text{g/mL}$

时对细胞的正常生长无影响,细胞生存率与空白对照组相比,无显著性差异, $P>0.05$ 。

3.3.2 各馏分的抗炎作用 本研究考察了各馏分药物浓度在 12.5  $\mu\text{g/mL}$ 、6.25  $\mu\text{g/mL}$ 、3.13  $\mu\text{g/mL}$ 、1.56  $\mu\text{g/mL}$  时对 LPS 诱导的 RAW264.7 细胞 NO 释放的影响,结果显示当药物浓度分别为 6.25  $\mu\text{g/mL}$ 、3.13  $\mu\text{g/mL}$ 、1.56  $\mu\text{g/mL}$  能够抑制 LPS 诱导的 RAW264.7 细胞 NO 的释放,但无统计学差异( $P>0.05$ )。因此本研究选用各馏分浓度为 12.5  $\mu\text{g/mL}$  ( $P<0.05$ ) 时对 LPS 诱导的 RAW264.7 细胞释放 NO 的影响作为抗炎作用评价指标。结果如表 3 所示。

抗炎结果显示在所得的 6 个馏分中馏分 4 的抗炎能力最强,而馏分 1 和馏分 5 的能力相对较弱。如表 2 所示,各馏分的抗炎能力与馏分中藁本内酯的含量不成剂量依赖,馏分中其他成分对馏分抗炎作用的贡献是值得关注的。

### 3.4 偏最小二乘法回归分析

为了研究馏分中化学成分(相对含量>1%)与其抗炎作用的相关性,本研究采用 SIMCA-P 11.5 偏最小二乘法回归分析,分析馏分中化学成分与抗炎作用的相关性。将各馏分中含量>1%的化学成分的相对含量作为自变量,其抑制 NO 释放的百分比作为因变量进行回归分析。

PLSR 分析结果显示馏分中的化学成分十九烷:2,2-二甲基-1-苯基-1-丙醇、Z-藁本内酯、E-藁本内酯、十六烷、阿魏酸、十三酸、亚油酸、油酸、5,8,11-十七碳三炔酸甲酯与馏分抗炎作用呈正相关;(-)-柠檬烯、6-丁基-1,4-环庚二烯、 $\beta$ -柏木烯、顺-11,14,17-二十碳三烯酸甲酯、1-石竹烯、红没药醇、桉油烯醇、1-(2,4-二甲基苯基)-1-丙酮、丁烯基苯酚、十五烷、2,6,10,14-四甲基十五烷、2,6,11-三甲基十二烷、十八烷、邻苯二甲酸二异丁酯、邻苯二甲酸二丁酯、棕榈酸、3-羟基甲基烯-2-樟脑、(Z)-氧代环十七碳-8-烯-2-酮、Ethyl 9,9-diformylnona-2,4,6,8-tetraenoate、己二酸-1-(2-乙基己基)酯与馏分的抗炎药效呈负相关,结果如表 4 所示。

在偏最小二乘法中,自变量在解释因变量重要程度的大小时可以用投影变量重要性指标值来评价,其值越大说明自变量对因变量解释的重要程度越大。

馏分中,各化学成分的变量重要性值如表 5 所示,当变量重要性值大于 1 时说明自变量能对因变量做一个更好的解释,各化学成分中变量重要性值

表 1 各馏分 GC-MS 的分析结果(只显示相对含量大于 1% 的化学成分)

序号	保留 时间(min)	化学成分	相对含量(%)					
			馏分 1	馏分 2	馏分 3	馏分 4	馏分 5	馏分 6
1	4.91	(-)-柠檬烯	-	1.07	-	-	-	-
2	8.19	6-丁基-1,4-环庚二烯	0.52	1.2	-	-	-	-
3	17.51	β-柏木烯	1.42	0.21	0.23	-	-	-
4	18.73	顺-11,14,17-二十碳三烯酸甲酯	2.33	0.33	0.14	-	-	-
5	19.06	1-石竹烯	1.18	0.13	-	-	-	-
6	21.06	红没药醇	2.88	0.43	0.08	-	-	-
7	23.62	桉油烯醇	2.31	1.36	-	-	-	-
8	26.3	1-(2,4-二甲基苯基)-1-丙酮	1.6	1.83	1.62	0.91	-	-
9	27.06	丁烯基苯酚	3.77	4.25	3.37	1.78	0.75	0.22
10	28.24	十五烷	-	-	-	-	2.62	-
11	28.29	2,6,10,14-四甲基十五烷	-	-	-	-	2.99	-
12	28.38	2,6,11-三甲基十二烷	2.17	-	-	-	-	-
13	28.42	十九烷	-	1.72	0.28	0.4	-	0.61
14	28.61	2,2-二甲基-1-苯基-1-丙醇	3.09	4.76	6.26	6.18	3.21	0.88
15	29.21	Z-藁本内酯	61.74	71.23	77.95	72.41	44.85	24.62
16	31.6	E-藁本内酯	0.72	1.04	2.02	2.87	3.78	8.15
17	32.36	十八烷	-	-	-	-	1.89	-
18	32.42	十六烷	1.06	1.41	1.01	1.06	-	0.31
19	34.84	邻苯二甲酸二异丁酯	0.84	0.67	0.44	0.67	2.73	0.27
20	35.4	阿魏酸	-	-	-	-	-	1.31
21	39.13	邻苯二甲酸二丁酯	1.11	0.8	0.64	-	3.7	0.41
22	39.78	十三酸	-	-	-	1.56	-	-
23	40.04	棕榈酸	-	-	0.14	-	5.91	8.84
24	41.2	3-羟基甲基烯-2-樟脑	-	0.22	2.78	0.18	-	-
25	47.37	(Z)-氧代环十七碳-8-烯-2-酮	-	-	-	-	10.83	1.34
26	47.63	亚油酸	-	-	-	1.32	1.05	7.7
27	47.76	油酸	-	-	-	-	-	22.89
28	50.24	5,8,11-十七碳三炔酸甲酯	-	-	-	0.27	1.23	8.15
29	52.7	Ethyl 9,9-diformylnona-2,4,6,8-tetraenoate	-	-	-	-	0.59	1.23
30	56.17	己二酸-1-(2-乙基己基)酯	0.57	-	0.37	0.61	1.7	0.35

注：“-”表示在该馏分中未检出。

表 2 不同浓度的各馏分对细胞生存率的影响( $\bar{x}\pm s$ )

馏分	不同浓度给药后的细胞生存率(%)						
	1.56(μg/mL)	3.13(μg/mL)	6.25(μg/mL)	12.5(μg/mL)	25(μg/mL)	50(μg/mL)	100(μg/mL)
馏分 1	101.03±2.38	103.00±3.96	107.16±3.90	105.33±5.35	103.68±5.04	81.99±9.97 <sup>a</sup>	32.09±3.75 <sup>b</sup>
馏分 2	102.85±2.32	107.25±5.46	107.18±4.91	107.48±3.48	105.76±6.27	82.82±6.44 <sup>a</sup>	31.53±4.35 <sup>b</sup>
馏分 3	101.57±3.29	105.99±2.00	107.01±4.73	111.23±3.80	104.60±2.18	79.60±7.93 <sup>a</sup>	29.20±5.90 <sup>b</sup>
馏分 4	105.07±3.19	106.49±4.14	105.73±4.34	106.52±8.69	103.24±4.98	72.47±6.49 <sup>a</sup>	19.10±1.99 <sup>b</sup>
馏分 5	100.82±4.21	100.73±3.43	103.96±5.30	101.45±2.10	85.48±6.61	60.84±3.94 <sup>a</sup>	13.83±1.11 <sup>b</sup>
馏分 6	100.62±3.05	102.80±2.25	103.25±3.17	105.18±5.31	70.47±4.29 <sup>a</sup>	57.43±6.43 <sup>a</sup>	17.17±1.52 <sup>b</sup>

注：与空白对照组(99.99±4.21)比较,<sup>a</sup>*P*<0.05、<sup>b</sup>*P*<0.01。



表 3 各馏分中藁本内酯的相对含量及其抑制 LPS 诱导的 RAW264.7 细胞释放 NO 的抑制率( $\bar{x}\pm s$ )

馏分	藁本内酯相对含量(%)	NO 抑制率(%)
馏分 1	62.46	11.89±2.43
馏分 2	72.27	27.58±9.25
馏分 3	79.97	32.25±4.76
馏分 4	75.28	50.27±3.42
馏分 5	48.63	13.91±6.75
馏分 6	32.77	44.76±13.46

表 4 各馏分化学成分与抗炎作用的 PLSR 的回归系数

序号	化学成分	回归系数
1	(-)-柠檬烯	-0.05
2	6-丁基-1,4-环庚二烯	-0.08
3	$\beta$ -柏木烯	-0.09
4	顺-11,14,17-二十碳三烯酸甲酯	-0.08
5	1-石竹烯	-0.07
6	红没药醇	-0.08
7	桉油烯醇	-0.09
8	1-(2,4-二甲基苯基)-1-丙酮	-0.05
9	丁烯基苯酞	-0.09
10	十五烷	-0.09
11	2,6,10,14-四甲基十五烷	-0.09
12	2,6,11-三甲基十二烷	-0.07
13	十九烷	0.01
14	2,2-二甲基-1-苯基-1-丙醇	0.07
15	Z-藁本内酯	0.02
16	E-藁本内酯	0.06
17	十八烷	-0.09
18	十六烷	0.04
19	邻苯二甲酸二异丁酯	-0.09
20	阿魏酸	0.04
21	邻苯二甲酸二丁酯	-0.15
22	十三酸	0.25
23	棕榈酸	-0.02
24	3-羟基甲基烯-2-樟脑	-0.07
25	(Z)-氧代环十七碳-8-烯-2-酮	-0.09
26	亚油酸	0.07
27	油酸	0.04
28	5,8,11-十七碳三烯酸甲酯	0.03
29	Ethyl 9,9-diformylnona-2,4,6,8-tetraenoate	-0.01
30	己二酸-1-(2-乙基己基)酯	-0.04

大于 1 的化学成分有十三酸、邻苯二甲酸二丁酯、邻苯二甲酸二异丁酯、 $\beta$ -柏木烯、顺-11,14,17-二十碳三烯酸甲酯、红没药醇、桉油烯醇、1-石竹烯、十九烷、亚油酸、十五烷、2,6,11-三甲基十二烷、十八烷、E-藁本内酯、阿魏酸、油酸。结果如表 5 所示。

表 5 各馏分化学成分影响抗炎作用的变量重要性值(>1)

化学成分	变量重要性指标
十三酸	1.55
邻苯二甲酸二丁酯	1.53
邻苯二甲酸二异丁酯	1.29
$\beta$ -柏木烯	1.25
顺-11,14,17-二十碳三烯酸甲酯	1.25
红没药醇	1.25
桉油烯醇	1.24
1-石竹烯	1.24
十九烷	1.20
亚油酸	1.12
十五烷	1.09
2,6,11-三甲基十二烷	1.09
十八烷	1.09
E-藁本内酯	1.06
阿魏酸	1.02
油酸	1.02

偏最小二乘法的一个重要用途是用于预测建模,以各样本点在 Y 的原始数据为观测值,以回归方程的拟合值  $y'$  为预测值,绘制观测值和预测值的散点图,如下图所示,所有的样本点均排列在途中对角线附近,有关化学成分与药效之间的预测模型的拟合结果: $y=1 * x+2.935e-0.07$ ,  $R^2=0.997$ ,其预测结果是令人满意的,结果如图 1 所示。

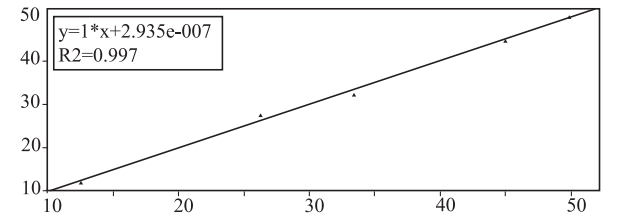


图 1 各馏分化学成分影响抗炎作用 PLSR 回归模型

4 讨论

超临界流体萃取法是一种快速、清洁的提取技术,是中药挥发油常用的提取手段之一。分子蒸馏,也称为短程蒸馏,是一种快速、高效、无污染的分离和浓缩技术,是分离和纯化的天然产物的常用的方法,特别适用于高沸点、高黏度且热敏性物质分离,被广泛地用于中草药挥发油和其它精油的分离<sup>[4-6]</sup>。

偏最小二乘法是结合了主成分提取和相关性分析的综合建模方法,被称为第二代回归技术,通过成分提取,以主成分分析过程通过协方差矩阵筛选出变异信息贡献程度最大的综合性成分,再通过

这些选出来的综合成分建立回归模型<sup>[7]</sup>。

本研究用分子蒸馏的方法对当归挥发油蒸馏后得到了 6 个馏分,GC-MS 分析结果显示藁本内酯仍是各馏分的主要成分但有较大差异,抗炎实验结果表明不同馏分的抗炎作用不同( $P<0.05$ ),且与馏分中藁本内酯的含量没有依赖性,PLSR 结果抗炎药效与化学成分存在较好的线性,说明模型建立是合理的,PLSR 结果显示除藁本内酯外,当归超临界提取物中与藁本内酯的共存成分对其抗炎活性也起到了重要的作用。本实验为当归及其他中草药挥发油的进一步研究开发和利用提供了有价值的资料。

中药化学成分复杂,通过多途径多靶点发挥药效,若仅通过某一成分或某几个成分对其进行质量控制不能代表中药的整体性,通过建立药效与化学成分的相关模型进行质量控制是必要的。中药挥发油的药理作用广泛,有抗炎、抗氧化、抗病毒、抗肿瘤等药理作用。而中药挥发油成分复杂,中药挥发油的药效物质基础广泛<sup>[8]</sup>,因此有目的的针对挥发油中的多种药效成分进行质量控制是保证中药挥发油质量和药效稳定的一个有效手段,本研究为

当归及其他中药挥发油的进一步开发利用和质量控制进行了有益的探索并为其提供了数据支持。

## 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,2010:124-125.
- [2] 刘医辉,杨世英,马伟林,等. 当归药理作用的研究进展[J]. 中国当代医药,2014,21(22):192-193,196.
- [3] 尹辉. 当归化学成分及药理活性研究进展[J]. 重庆科技学院学报(自然科学版),2015,17(1):100-101,112.
- [4] 李燕,刘军海. 分子蒸馏技术在天然产物分离纯化中应用进展[J]. 粮食与油脂,2011,(3):7-11.
- [5] 于兆海,李万忠. 中药挥发油的提取、分离与制剂研究概述[J]. 环球中医药,2009,3:232-234.
- [6] 徐浩锋,杨华俊,俞岚. 中药有效成分现代提取技术研究进展[J]. 海峡药学,2012,24(1):13-18.
- [7] WOLD S, SJÖSTRÖM M, ERIKSSON L. PLS-regression; a basic tool of chemometrics [J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2001, 58(2):109-130.
- [8] 黄罗生,顾燕飞,李红. 中药挥发油及芳香性药物的研究进展[J]. 中国中药杂志,2009,34(12):1605-1611.

(收稿日期:2015-06-02)

(本文编辑:董历华)