

- 2010, 79(4): 417-423.
- [17] Rumi Y, Shojiro K, Masatoshi O. Electron spin resonance characterization of radical components in irradiated black pepper skin and core[J]. *Radiat Phys Chem*, 2011, 80(11): 1282-1288.
- [18] Paksu U, Engin B. Electron spin resonance (ESR) spectroscopy study of gamma-irradiated dried white mulberry (*Morus alba* L.) fruits[J]. *Radiat Phys Chem*, 2022, 197: 110216.
- [19] Maria C D, Antonio B. Evaluation of the original dose in irradiated dried fruit by EPR spectroscopy[J]. *Radiat Meas*, 2011, 46(9): 813-815.
- [20] Beshir W. Identification and dose assessment of irradiated cardamom and cloves by EPR spectrometry[J]. *Radiat Phys Chem*, 2014, 96: 190-194.
- [21] Escudero R, Segura J, Velasco R, et al. Electron spin resonance (ESR) spectroscopy study of cheese treated with accelerated electrons[J]. *Food Chem*, 2019, 276: 315-321.
- [22] Yi M H, Wei M L, Feng W. Application of ESR spectroscopy to identify and estimate original dose in irradiated cumin and white pepper[J]. *Eur Food Res Technol*, 2011, 233(4): 625-630.
- [23] 李伟明, 哈益明, 王 锋, 等. 辐照孜然的 ESR 法鉴定及原初吸收剂量的估算[J]. *中国农业科学*, 2011, 44(8): 1688-1693.

基于 GC-IMS 分析荆芥及其炮制品中挥发性成分差异

刘晨曦¹, 赵毅萌¹, 张礼欣¹, 姚妙诗¹, 束雅春^{1,2*}

(1. 南京中医药大学附属医院/江苏省中医院, 江苏 南京 210029; 2. 江苏省海滨康复医院, 江苏 连云港 222042)

摘要: 目的 表征荆芥及其炮制品中挥发性成分, 并分析差异成分。方法 采用气相-离子迁移谱 (GC-IMS) 对荆芥、炒荆芥、荆芥炭中的挥发性成分进行鉴定, 结合化学计量学分析其差异。结果 共鉴定出 170 种挥发性成分, 包括醛类、酮类、醇类等 13 种类型, 并筛选出 27 种差异成分。荆芥单独聚为一类, 炒荆芥和荆芥炭聚为一类, 丙酮、乙酸橙花酯等差异成分可体现三者特征性。结论 本研究筛选出荆芥、炒荆芥、荆芥炭中差异挥发性成分, 可为该药材不同炮制品辨识提供思路。

关键词: 荆芥; 炒荆芥; 荆芥炭; 炮制; 挥发性成分; 气相色谱-离子迁移谱 (GC-IMS); 化学计量学

中图分类号: R284.1

文献标志码: A

文章编号: 1001-1528(2026)05-1725-07

doi: 10.3969/j.issn.1001-1528.2026.05.044

荆芥为唇形科植物荆芥 *Schizonepeta tenuifolia* Briq. 的干燥地上部分^[1], 始载于《神农本草经》, 是我国大宗药材, 历代医家根据不同病症建立其多种炮制方法, 包括净制、焙制、炒制等, 其中炒制品中有炒荆芥和荆芥炭。荆芥常用于祛风解热, 《得配本草》^[2]记载“散风生用”; 炒荆芥辛散作用减弱, 重在祛风理血^[3]; 荆芥炭长于止血^[4], 并且炒荆芥和荆芥炭在多个省份炮制规范中均有收载, 但 2025 年版《中国药典》仅收载荆芥炭, 而炒荆芥大多为临方特色炮制品种。

挥发油是荆芥主要成分, 由多种活性物质组成, 由于炒制温度等因素其种类和含量会发生变化。目前, 关于荆芥挥发性成分的研究主要集中于

生品及不同药用部位, 炒荆芥涉及较少。因此, 本研究采用气相色谱-离子迁移谱 (GC-IMS) 对荆芥、炒荆芥、荆芥炭中挥发性成分进行检测, 结合化学计量学筛选差异成分, 以期揭示炮制对该药材挥发性成分的影响, 为其特异香气物质研究、临床应用提供依据。

1 材料

1.1 试剂与药材 荆芥 (编号 JJ) 购于河北省安国市, 经南京中医药大学附属医院朱育凤主任中药师鉴定为唇形科植物荆芥 *Schizonepeta tenuifolia* Briq. 的干燥地上部分; 炒荆芥、荆芥炭为实验室自制。2-丁酮、2-戊酮、2-己酮、2-庚酮、2-辛酮、2-壬酮 (分析纯, 上海阿拉丁生化科技股份有限

收稿日期: 2025-09-29

基金项目: 国家中医药管理局中药炮制技术传承创新项目 (GZY-KJS-2022-053); 江苏省中医药科技发展计划项目 (ZD202316)

作者简介: 刘晨曦 (2001—), 女, 硕士, 从事中药炮制研究。E-mail: 2897950854@qq.com

* 通信作者: 束雅春 (1976—), 女, 博士, 主任中药师, 硕士生导师, 从事中药炮制及其健康产品开发研究。E-mail: guzheng0512@

公司)。

1.2 仪器 FlavourSpec[®] 气相离子迁移谱(德国 G. A. S. 公司); CTC-PAL 3 静态顶空自动进样装置(瑞士思特斯分析仪器有限公司); 20 mL 顶空瓶(山东海能科学仪器有限公司); BCE224-1CCN 电子天平[赛多利斯科学仪器(北京)有限公司]。

2 方法

2.1 样品制备

2.1.1 荆芥 取“1.1”项下生品,即得。

2.1.2 炒荆芥 参照2020年版《江苏省中药饮片炮制规范》第一册,取生品适量,置于预热的炒锅(100℃)内翻炒至表面呈黄褐色(约12 min),取出,放凉,即得(编号CJJ)。

2.1.3 荆芥炭 参照2025年版《中国药典》,取生品适量,置于预热的炒锅(210℃)内翻炒至表面呈黑褐色(约7 min),取出,放凉,即得(编号JJC)。

2.2 顶空进样条件 称取样品1 g,置于20 mL顶空瓶中孵育20 min后进样测定,平行3次,条件为孵化温度80℃;孵化时间20 min;进样体积500 μL;不分流进样;孵化转速500 r/min;进样针温度85℃。

2.3 GC 条件 MXT-WAX 毛细管柱(30 m×0.53 mm, 1.0 μm),柱温60℃;载气高纯氮气(纯度≥99.999%),程序升压(初始体积流量2.0 mL/min,保持2 min,在8 min内增至10.0 mL/min,在10 min内增至100.0 mL/min,保持40 min);色谱运行时间60 min;进样口温度80℃。

2.4 IMS 条件 电离源氙源(3H);迁移管长度53 mm;电场强度500 V/cm;迁移管温度45℃;漂移气高纯氮气(纯度≥99.999%);体积流量75.0 mL/min;正离子模式。

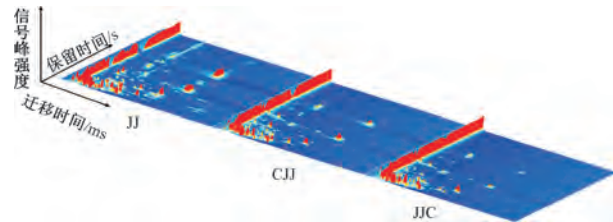
2.5 数据处理 检测6种酮类成分的混标,建立保留时间、保留指数校准曲线,通过目标物保留时间来计算该物质保留指数,在VOCal软件内置的GC保留指数(NIST 2020)数据库和IMS迁移时间数据库中进行检索,对目标物进行定性分析。

采用VOCal软件中的Reporter、Gallery Plot、Nearest Neighbour等插件生成挥发性成分的三维谱图、二维谱图、差异谱图、指纹图谱及最邻近分析图,用于样品间对比。再基于OriginPro 2025、SIMC A14.1软件进行主成分分析(PCA)、正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA),结合变量重要性

投影(VIP)和P值筛选差异成分。采用微生物平台(<http://www.bioinformatics.com.cn/>)进行聚类热图分析。

3 结果

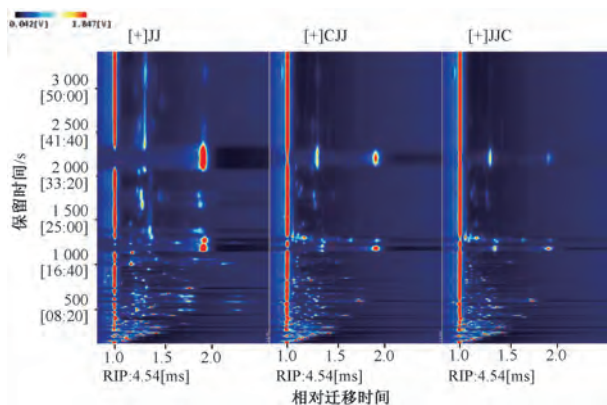
3.1 气相离子迁移谱 GC-IMS 三维图谱见图1,可知各样品挥发性成分相似,但峰强度不同。



注: JJ为荆芥, CJJ为炒荆芥, JJC为荆芥炭。

图1 荆芥及其炮制品中挥发性成分GC-IMS三维图谱

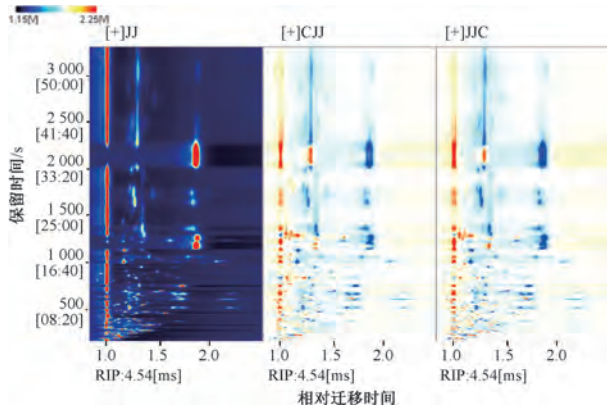
对离子迁移时间、反应离子峰(RIP)位置进行归一化处理获得气相离子迁移图谱,见图2, RIP峰两侧的每一个点代表一种挥发性有机物,颜色越深,峰强度越大。由此可知,大部分信号出现在200~2 000 s的保留时间和1.0~2.0 ms的漂移时间范围内。为了进一步直观对比样品中挥发性成分的差异,选取荆芥图谱作为对照,其他样品图谱相应扣减,得到差异对比图,见图3,若目标样品中挥发性有机物含量和对照中一样,则扣减后的背景为白色,红色代表该物质含量在炒荆芥、荆芥炭中高于荆芥中,蓝色代表该物质含量在炒荆芥、荆芥炭中低于荆芥中。另外,与生品相比,炒荆芥、荆芥炭中挥发性有机物含量均有所升高或降低。



注: JJ为荆芥, CJJ为炒荆芥, JJC为荆芥炭。

图2 荆芥及其炮制品气相离子迁移图谱

3.2 挥发性成分 共发现210种挥发性成分,但受限于NIST、IMS数据库,仅鉴定出170种,包括酯类、醇类、酮类、醛类、不饱和烃类、吡嗪类、呋喃类、苯类及其他类,部分同时存在单体(M)、二聚体(D)及三聚体(T),具体见表1。另外,



注：JJ为荆芥，CJJ为炒荆芥，JJC为荆芥炭。

图3 荆芥及其炮制品气相色谱离子迁移谱差异图谱

不同炮制程度药材中检测到的挥发性有机物包括醛类33个，占19.41%；醇类31个，占18.24%；酮类27个，占15.88%；酯类21个，占12.35%；不饱和烃类18个，占10.59%；吡嗪类12个，占7.06%；苯类7个，占4.12%；呋喃类5个，占2.94%；其他类16个，占9.41%，表明醛类、醇类、酮类化合物是其主要挥发性成分。

3.3 GC-IMS 指纹图谱 为了进一步比较荆芥及其炮制品中挥发性成分的差异，通过指纹图谱来识别特征峰区域，见图4，每列代表同一种挥发性成分在不同样品中的信号峰，不同行表示不同样品，编号表示未知化合物。由此可知，荆芥及其炮制品既

表1 荆芥及其炮制品中挥发性成分鉴定结果

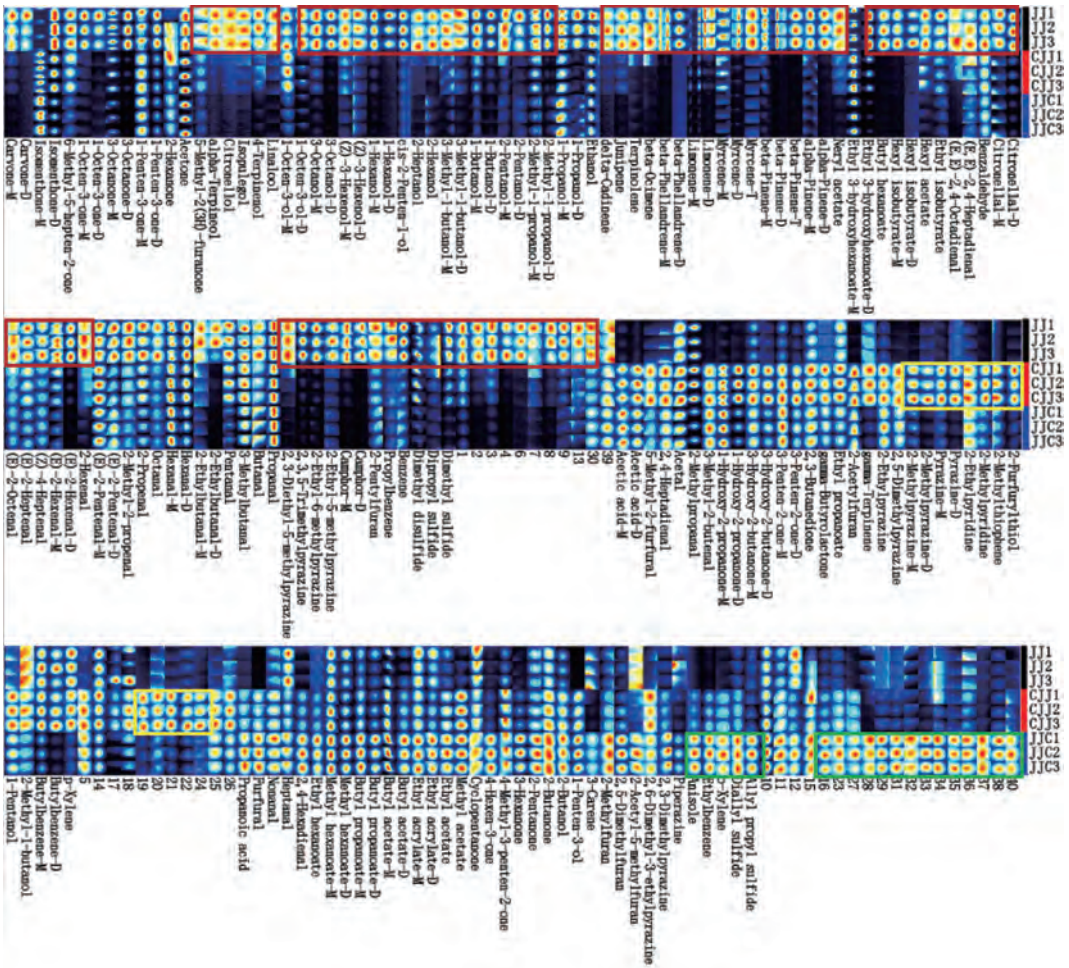
编号	名称	CAS号	化学式	分子量/Da	保留指数	保留时间/s	相对迁移时间
1	香芹酮	C99490	C ₁₀ H ₁₄ O	150.2	1 897.0	2 953.418	1.299 60
2	α-松油醇	C98555	C ₁₀ H ₁₈ O	154.3	1 870.3	2 788.012	1.205 78
3	香茅醇	C106229	C ₁₀ H ₂₀ O	156.3	1 865.8	2 761.032	1.378 83
4	乙酸橙花酯	C141128	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	196.3	1 802.9	2 410.290	1.241 59
5	异胡薄荷醇	C89792	C ₁₀ H ₁₈ O	154.3	1 804.6	2 419.283	1.372 86
6	3-羟基乙酸乙酯	C2305251	C ₈ H ₁₆ O ₃	160.2	1 736.7	2 088.776	1.290 82
7	4-松油醇	C562743	C ₁₀ H ₁₈ O	154.3	1 703.8	1 945.689	1.238 25
8	芳樟醇	C78706	C ₁₀ H ₁₈ O	154.3	1 655.0	1 750.840	1.222 98
9	(E,E)-2,4-辛二烯醛	C30361285	C ₈ H ₁₂ O	124.2	1 589.8	1 520.830	1.254 03
10	苯甲醛	C100527	C ₇ H ₆ O	106.1	1 558.5	1 421.255	1.155 16
11	香茅醛	C106230	C ₁₀ H ₁₈ O	154.3	1 507.1	1 272.009	1.353 72
12	(E,E)-2,4-庚二烯醛	C4313035	C ₇ H ₁₀ O	110.2	1 525.2	1 322.656	1.201 59
13	糠醛	C98011	C ₅ H ₄ O ₂	96.1	1 499.9	1 252.269	1.091 43
14	1-辛烯-3-醇	C3391864	C ₈ H ₁₆ O	128.2	1 490.5	1 227.287	1.162 79
15	异胡薄荷酮	C491076	C ₁₀ H ₁₈ O	154.3	1 470.3	1 174.737	1.337 09
16	2,4-庚二烯醛	C5910850	C ₇ H ₁₀ O	110.2	1 503.0	1 260.884	1.611 57
17	3-辛醇	C589980	C ₈ H ₁₈ O	130.2	1 423.9	1 062.700	1.402 71
18	Z-3-己烯醇	C928961	C ₆ H ₁₂ O	100.2	1 412.4	1 036.654	1.241 84
19	己酸丁酯	C626824	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	172.3	1 403.5	1 016.961	2.046 18
20	正己醇	C111273	C ₆ H ₁₄ O	102.2	1 377.7	961.692	1.332 41
21	6-甲基-5-庚烯-2-酮	C110930	C ₈ H ₁₄ O	126.2	1 355.1	915.953	1.178 30
22	异丁酸己酯	C2349077	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	172.3	1 353.8	913.412	1.483 82
23	Z-2-戊烯-1-醇	C1576950	C ₅ H ₁₀ O	86.1	1 345.4	896.895	0.945 78
24	2-庚醇	C543497	C ₇ H ₁₆ O	116.2	1 342.8	891.813	1.358 10
25	(E)-2-庚烯醛	C18829555	C ₇ H ₁₂ O	112.2	1 339.5	885.460	1.258 06
26	1-辛烯-3-酮	C4312996	C ₈ H ₁₄ O	126.2	1 320.1	849.250	1.281 04
27	1-羟基-2-丙酮	C116096	C ₃ H ₆ O ₂	74.1	1 321.2	851.156	1.068 80
28	3-羟基-2-丁酮	C513860	C ₄ H ₈ O ₂	88.1	1 305.4	822.569	1.072 86
29	辛醛	C124130	C ₈ H ₁₆ O	128.2	1 307.1	825.745	1.412 17
30	乙酸己酯	C142927	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.2	1 283.2	785.210	1.432 02
31	3-辛酮	C106683	C ₈ H ₁₆ O	128.2	1 272.7	768.580	1.307 75
32	(Z)-4-庚烯醛	C6728310	C ₇ H ₁₂ O	112.2	1 263.2	753.959	1.147 83
33	2-己醇	C626937	C ₆ H ₁₄ O	102.2	1 253.7	739.460	1.289 00
34	(E)-2-己烯醛	C6728263	C ₆ H ₁₀ O	98.1	1 239.3	718.093	1.182 77
35	2-己烯醛	C505577	C ₆ H ₁₀ O	98.1	1 232.7	708.555	1.192 55

续表 1

编号	名称	CAS号	化学式	分子量/Da	保留指数	保留时间/s	相对迁移时间
36	异戊醇	C123513	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1 228.8	702.831	1.214 92
37	庚醛	C111717	C ₇ H ₁₄ O	114.2	1 204.7	669.255	1.344 90
38	己酸甲酯	C106707	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.2	1 195.1	656.282	1.263 84
39	正丁醇	C71363	C ₄ H ₁₀ O	74.1	1 167.8	600.194	1.186 96
40	丙酸丁酯	C590012	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.2	1 162.9	590.274	1.287 60
41	(<i>E</i>)-2-戊烯醛	C1576870	C ₅ H ₈ O	84.1	1 157.0	578.446	1.107 30
42	环戊酮	C120923	C ₅ H ₈ O	84.1	1 152.8	570.109	1.334 07
43	4-甲基-3-戊烯-2-酮	C141797	C ₆ H ₁₀ O	98.1	1 134.0	534.509	1.115 46
44	2-戊醇	C6032297	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1 130.1	527.538	1.202 90
45	3-戊烯-2-酮	C625332	C ₅ H ₈ O	84.1	1 122.9	514.593	1.094 97
46	异丁醇	C78831	C ₄ H ₁₀ O	74.1	1 117.0	504.386	1.175 58
47	正己醛	C66251	C ₆ H ₁₂ O	100.2	1 108.9	490.444	1.279 42
48	乙酸丁酯	C123864	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.2	1 097.5	471.773	1.256 19
49	正丙醇	C71238	C ₃ H ₈ O	60.1	1 063.5	427.496	1.110 81
50	1-戊烯-3-酮	C1629589	C ₅ H ₈ O	84.1	1 051.3	412.728	1.081 62
51	丙烯酸乙酯	C140885	C ₅ H ₈ O ₂	100.1	1 032.4	390.822	1.118 60
52	2-乙基丁醛	C97961	C ₆ H ₁₂ O	100.2	1 021.0	378.270	1.217 87
53	戊醛	C110623	C ₅ H ₁₀ O	86.1	1 010.5	366.948	1.426 15
54	2-戊酮	C107879	C ₅ H ₁₀ O	86.1	1 008.4	364.732	1.360 94
55	2,3-丁二酮	C431038	C ₄ H ₆ O ₂	86.1	1 004.4	360.548	1.177 97
56	丙酸乙酯	C105373	C ₅ H ₁₀ O ₂	102.1	979.4	339.381	1.469 95
57	异丁酸乙酯	C97621	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.2	987.3	345.288	1.563 38
58	乙醇	C64175	C ₂ H ₆ O	46.1	957.6	323.628	1.130 28
59	异戊醛	C590863	C ₅ H ₁₀ O	86.1	934.8	307.876	1.398 90
60	2-丁酮	C78933	C ₄ H ₈ O	72.1	924.8	301.230	1.246 10
61	乙缩醛	C105577	C ₆ H ₁₄ O ₂	118.2	915.3	295.077	1.022 25
62	2-甲基-2-丙烯醛	C78853	C ₄ H ₆ O	70.1	906.5	289.416	1.220 79
63	正丁醛	C123728	C ₄ H ₈ O	72.1	899.0	284.739	1.283 08
64	乙酸乙酯	C141786	C ₄ H ₈ O ₂	88.1	907.2	289.908	1.337 59
65	2-丙烯醛	C107028	C ₃ H ₄ O	56.1	875.9	270.709	1.060 20
66	丙酮	C67641	C ₃ H ₆ O	58.1	848.8	255.203	1.114 71
67	乙酸甲酯	C79209	C ₃ H ₆ O ₂	74.1	861.9	262.587	1.199 38
68	2-甲基丙醛	C78842	C ₄ H ₈ O	72.1	837.2	248.804	1.282 11
69	丙醛	C123386	C ₃ H ₆ O	58.1	826.7	243.142	1.144 88
70	仲丁醇	C78922	C ₄ H ₁₀ O	74.1	1 047.1	407.806	1.149 75
71	3-己酮	C589388	C ₆ H ₁₂ O	100.2	1 078.9	446.941	1.470 92
72	2-己酮	C591786	C ₆ H ₁₂ O	100.2	1 106.2	486.076	1.192 57
73	γ-丁内酯	C96480	C ₄ H ₆ O ₂	86.1	1 715.7	1 996.371	1.086 46
74	5-甲基-2-糠醛	C620020	C ₆ H ₆ O ₂	110.1	1 660.6	1 772.415	1.136 99
75	5-甲基-2-(3 <i>H</i>)-呋喃酮	C591128	C ₅ H ₆ O ₂	98.1	1 452.5	1 130.466	1.128 96
76	2,4-己二烯醛	C142836	C ₆ H ₈ O	96.1	1 392.8	993.561	1.100 86
77	壬醛	C124196	C ₉ H ₁₈ O	142.2	1 412.1	1035.918	1.481 91
78	正戊醇	C71410	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1 272.4	768.202	1.255 30
79	2-甲基-1-丁醇	C137326	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1 228.5	702.493	1.246 19
80	3-甲基-2-丁烯醛	C107868	C ₅ H ₈ O	84.1	1 222.1	693.389	1.096 98
81	1-戊烯-3-醇	C616251	C ₅ H ₁₀ O	86.1	1 181.2	628.527	0.942 75
82	4-己烯-3-酮	C2497214	C ₆ H ₁₀ O	98.1	1 206.5	671.664	1.106 00
83	己酸乙酯	C123660	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.2	1 237.2	715.055	1.344 58
84	(<i>E</i>)-2-辛烯醛	C2548870	C ₈ H ₁₄ O	126.2	1 445.7	1 113.873	1.337 19

有各自的特征峰区域，也有相同的区域，红色框中挥发性成分在荆芥中含量较高，并且随着炒制程度加深逐渐降低；黄色框中挥发性成分在炒荆芥中含

量较高；绿色框中挥发性成分在荆芥炭中含量较高。综上所述，炮制方法可影响挥发性成分含量。

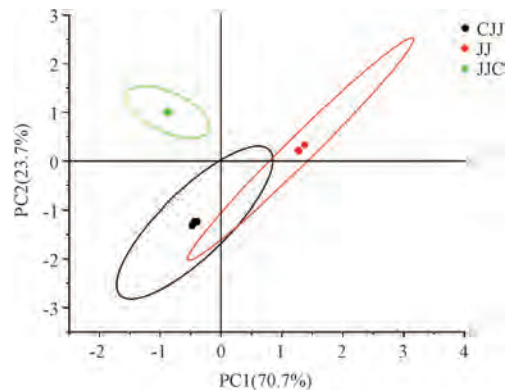


注：JJ1~JJ3为荆芥，CJJ1~CJJ3为炒荆芥，JJC1~JJC3为荆芥炭。

图4 荆芥及其炮制品中挥发性成分GC-IMS指纹图谱

3.4 主成分分析及最邻近分析 由图5~6可知，PC1、PC2贡献率分别为70.7%、23.7%，累积贡献率为94.4%，说明两者能较好地反映整体化学成分信息，具有较高的可靠性；样本聚集度较高，不同炮制方式的分别聚为一类，说明药材炮制前后化学成分差异较大，能被有效区分；炒荆芥和荆芥炭距离较近，说明两者挥发性成分差异较小。

3.5 正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA) 以挥发性成分为因变量，不同炮制品为自变量进行分析，见图7。由此可知，自变量拟合指数 R^2X 为0.988，因变量拟合指数 R^2Y 为1，模型预测指数 Q^2 为0.999，荆芥、炒荆芥、荆芥炭分别聚集在各自区域，并且明显分为3类，说明药材炮制前后挥发性成分发生显著变化。经过200次置换检验后， R^2 截距为0.316， Q^2 截距为-0.698，左侧 R^2 、 Q^2



注：JJ为荆芥，CJJ为炒荆芥，JJC为荆芥炭。

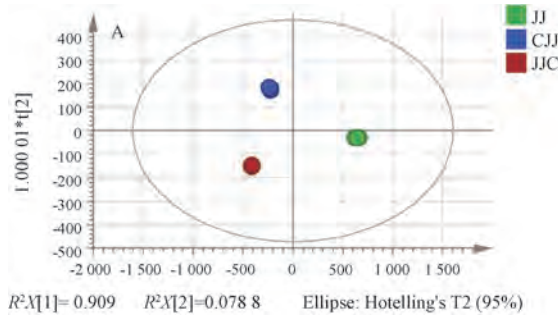
图5 荆芥及其炮制品主成分分析图

均低于右侧的，说明模型不存在过拟合，差异具有统计学意义。再以VIP>1、P<0.05为指标筛选差异成分，共得到27种。



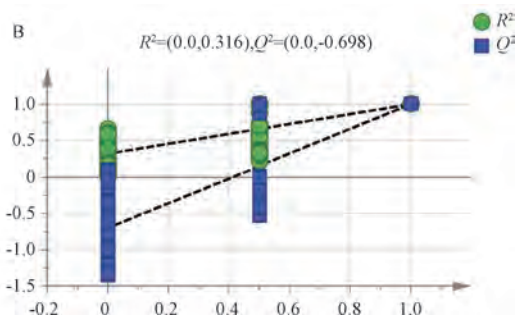
注: JJ1~JJ3 为荆芥, CJJ1~CJJ3 为炒荆芥, JJC1~JJC3 为荆芥炭。

图6 荆芥及其炮制品最邻近分析图

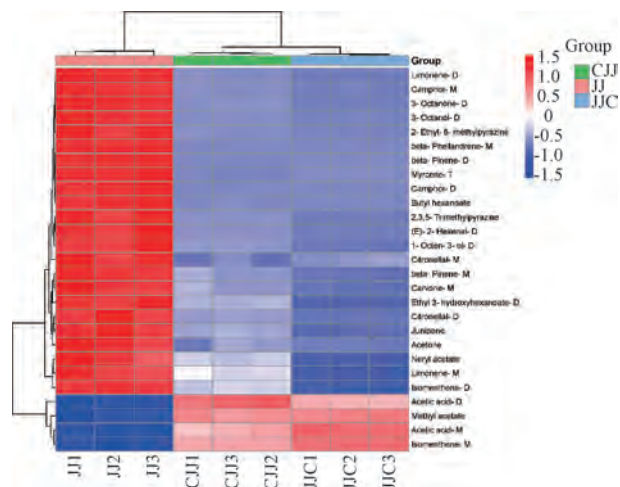


注: JJ 为荆芥, CJJ 为炒荆芥, JJC 为荆芥炭。

图7 荆芥及其炮制品 OPLS-DA 图 (A) 及模型交叉验证图 (B)



2-己烯醛 D、1-辛烯-3-醇 D、2, 3, 5-三甲基吡嗪、2-乙基-6-甲基吡嗪、3-辛醇 D、3-辛酮 D、丙酮、β-水芹烯 M、β-蒎烯 D、β-蒎烯 M、己酸丁酯、樟脑 D、樟脑 M、香芹酮 M、香茅醛 D、香茅醛 M、3-羟基己酸乙酯 D、异胡薄荷酮 D、长叶烯、柠檬烯 D、柠檬烯 M、月桂烯 T、乙酸橙花酯含量显著高于炮制品中, 炒荆芥中乙酸 D 含量明显高于其他样品中, 荆芥炭中乙酸 M、异胡薄荷酮 M、乙酸甲酯含量最高。此外, 炒荆芥和荆芥炭聚类关系更近, 而荆芥单独聚为一类, 进一步说明炒制会影响药材挥发性成分。



注: JJ 为荆芥, CJJ 为炒荆芥, JJC 为荆芥炭。

图8 荆芥及其炮制品挥发性成分聚类热图

4 讨论

炒制温度和炒制时间会对药材饮片颜色及有效成分产生影响, 炒制温度太低, 炒制时间则过长;

3.6 聚类热图 为了更清晰地区分生品及炮制品, 以差异成分为变量, 采用微生信平台 (<http://www.bioinformatics.com.cn/>) 进行聚类热图分析, 结果见图8, 图中横坐标代表不同样品, 纵标代表挥发性成分, 红色表示相对含量显著上调, 蓝色表示相对含量显著下调。由此可知, 生品中 (E) -

炒制温度过高, 炒制程度则不容易控制, 还会破坏并降低有效成分含量^[5-7]。颜色、成分、临床疗效等因素会随着炒制方式改变而变化, 并且颜色、成分通常与药材质量存在密切联系, 不同炒制品临床疗效也会发生改变^[8-10]。荆芥呈淡黄绿色或淡紫红色, 味辛, 临床上主要用于解热镇痛; 炒荆芥呈黄褐色, 辛散作用减弱, 临床上主要用于治疗妇科疾病; 荆芥炭呈黑褐色, 辛散作用同样减弱, 临床上主要用于止血, 本研究发现三者挥发性成分含量发生改变, 不同种类的含量在生品及其炮制品中各有明显优势。结果表明, 荆芥中酮类、醇类化合物含量较高, 醇类具有花果香气^[11], 酮类气味浓烈^[12], 炮制后两者含量下降, 可能是药材味辛的主要物质基础; 1-辛烯-3-醇^[13]、柠檬烯^[14]、月桂烯^[15]具有抗炎、抗菌、抗病毒等药理作用, 樟脑具有抗炎、镇痛作用^[16], 同时水芹烯、蒎烯、月桂烯等具有辛辣味^[17-19], 辛能散, 可能印证了荆芥解热镇痛、祛风解表功效; 乙酸具有酸味, 入肝经, 辛酸合用能疏泄肝气兼补益肝血^[20]。傅青从肝论治月经病时, 不用过于辛燥之品, 而以炒荆芥清宣疏肝, 调达肝气^[21]; 国医大师夏桂成在调理月经周期和治疗多囊卵巢综合征等妇科疾病时均选用炒荆芥^[22-23]。荆芥炭辛散力降低, 味苦而辛, 乙酸味酸, 酸能收涩, 在治疗血分病时可发挥止血功效^[24], 并且乙酸、异胡薄荷酮 M、乙酸甲酯含量显著升高, 推测三者协同发挥止血作用。荆芥炒制后挥发油含量有所降低, 辛散作用减弱, 挥发性成分也发生改变, 可能与临床药效密切相关。

荆芥炮制后,其色泽、气味等外观性状及药性发生改变,并且化学成分是发挥药效的基础,其改变也会影响药材炮制前后临床疗效^[25]。本实验所用的GC-IMS可快速简便地对荆芥及其炮制品挥发性成分进行检测,并利用化学计量学初步确定了差异成分,不仅为该药材气味分析提供了数据,也为其临床应用提供了参考。

利益冲突: 所有作者均声明不存在利益冲突。

参考文献:

[1] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典: 2025年版一部[S]. 北京: 中国医药科技出版社, 2025: 252.

[2] 严西亭, 施澹宁, 洪缉庵. 得配本草[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1958: 65.

[3] 龚敏, 卢金清, 韩怡. HS-SPME-GC-MS分析荆芥及其炮制品的挥发性成分[J]. 中国现代中药, 2019, 21(8): 1041-1044.

[4] 陈晨, 王鹏, 谢欢欢. 中药荆芥的本草考证[J]. 中药材, 2018, 41(3): 745-748.

[5] 徐月, 贾哲, 王云, 等. 基于“表里关联”的炒甘草质量动态变化分析[J]. 中国实验方剂学杂志, 2025, 31(5): 194-202.

[6] 张世豪, 那叶馨, 东娇娇, 等. 牛膝盐炙工艺研究[J]. 中医药信息, 2024, 41(3): 9-17.

[7] 张宏伟, 林秀敏, 王彦志, 等. 不同炮制程度制马钱子毒性成分与色度变化研究[J]. 时珍国医国药, 2024, 35(3): 629-633.

[8] 张陈了一, 李阳阳, 李明星, 等. 党参炮制工艺优化及颜色与其内在关键质量属性相关性研究[J]. 中草药, 2024, 55(23): 8023-8034.

[9] 张媛, 朱月健, 尹磊, 等. 炮制程度对大蓟炭有效成分含量、颜色及止血作用的影响[J]. 中成药, 2024, 46(11): 3754-3758.

[10] 黄莉, 杨磊, 金凯, 等. AHP-CRITIC综合加权联用响应面法的蜜百合炮制工艺优选及颜色相关性分析[J]. 中草药, 2024, 55(18): 6174-6185.

[11] 张厅, 王欣颖, 李黔艳, 等. 基于GC-IMS分析四种刺梨

发酵酒中挥发性成分差异[J]. 中国酿造, 2024, 43(11): 242-248.

[12] 邵淑贤, 徐梦婷, 林燕萍, 等. 基于电子鼻与HS-SPME-GC-MS技术对不同产地黄观音乌龙茶香气差异分析[J]. 食品科学, 2023, 44(4): 232-239.

[13] 苏畅, 赵艳云, 冯媛, 等. 荆芥叶及穗的抗菌效果和成分分析[J]. 中国新药杂志, 2022, 31(11): 1103-1111.

[14] Eddin L B, Jha N K, Meeran M F N. Neuroprotective potential of limonene and limonene containing natural products[J]. *Molecules*, 2021, 26(15): 4535-4560.

[15] Islam A U S, Hellman B, Nyberg F. Myrcene attenuates renal inflammation and oxidative stress in the adrenalectomized rat model[J]. *Molecules*, 2020, 25(19): 4492-4506.

[16] Dos santos E, Leitão M M, Aguero Ito C N, et al. Analgesic and anti-inflammatory articular effects of essential oil and camphor isolated from *Ocimum kilimandscharicum* Gürke leaves[J]. *J Ethnopharmacol*, 2021, 269: 113697.

[17] 杨洪锦, 吴长喜, 田应菊, 等. 新鲜苹果营养成分及风味物质分析[J]. 食品工业科技, 2024, 45(20): 271-278.

[18] 高文涛, 雷文平, 陈利, 等. 不同方式鉴别不同产地白胡椒特征挥发性物质及抗氧化性分析[J]. 食品科学, 2025, 46(8): 235-246.

[19] 谭岸, 陈梓生, 马雨茵, 等. 化橘红精油香气成分分析及品质检测[J]. 现代食品科技, 2024, 40(7): 203-210.

[20] 陈晔欣, 张博, 崔改雯, 等. 基于“定位-定性-定方”的《辅行诀五脏用药法要》五脏补泻方治痛思路探赜[J]. 中华中医药杂志, 2024, 39(7): 3540-3543.

[21] 申萌萌, 刘雁峰, 梁嘉玲, 等. 《傅青主女科》从肝论治月经病[J]. 吉林中医药, 2018, 38(12): 1372-1374; 1379.

[22] 王进进, 谈勇, 花海兵, 等. 国医大师夏桂成调理月经周期从心论治崩漏[J]. 中华中医药杂志, 2021, 36(11): 6465-6467.

[23] 张娅, 胡荣魁. 国医大师夏桂成教授治疗多囊卵巢综合征经验撷萃[J]. 光明中医, 2022, 37(7): 1162-1166.

[24] 王文雅, 张迪, 潘菽弢, 等. 基于血分病探析酸味药效特点[J]. 北京中医药, 2022, 41(8): 883-885.

[25] 雷艳, 李玉卓, 王婉莹, 等. 桃儿七化学成分和药理作用研究进展及质量标志物的预测分析[J]. 世界科学技术-中医药现代化, 2025, 27(6): 1555-1577.