

基于GC-MS技术分析4个主产地沉香燃香烟气成分差异

杨柳青¹, 李辉^{1*}, 任刚²

(1. 复旦大学生命科学学院现代人类学教育部重点实验室, 上海 200433; 2. 中国香道协会, 北京 100710)

摘要: **目的** 分析不同产地沉香燃香的烟气成分。**方法** 采用GC-MS技术结合多元统计分析对中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南产沉香燃香烟气成分进行分析, 并通过主成分分析、正交偏最小二乘判别分析进行化学模式识别。**结果** 共鉴定得到158种成分, 以醚类、萜类、醛类为主。在不同产地沉香燃香的75种差异性烟气成分中, 萜类和烃类居多, 中国海南产沉香以1-乙酰氧基-2-丁酮、1-(2-甲基苯基)乙醇等为主要成分, 东马来西亚产沉香以萜品油烯、羟基缬草酸等为主要成分, 印尼伊里安产沉香以乙酰丁香酮、茴香基丙酮等为主要成分, 越南产沉香以 β -甲基苯乙烯、4-丙烯基丁香醇等为主要成分。**结论** 不同产地沉香燃香的烟气成分种类及含量存在差异, 可为其产地溯源和烟气成分研究提供参考。

关键词: 沉香; 产地; 烟气成分; GC-MS; 主成分分析 (PCA); 正交偏最小二乘判别分析 (OPLS-DA)

中图分类号: R284.1

文献标志码: A

文章编号: 1001-1528(2026)05-1555-08

doi: 10.3969/j.issn.1001-1528.2026.05.019

Analysis of differences in smoke constituents of *Aquilariae Lignum Resinatum* incense from four main origins by GC-MS

YANG Liu-qing¹, LI Hui^{1*}, REN Gang²

(1. Ministry of Education Key Laboratory for Contemporary Anthropology, School of Life Sciences, Fudan University, Shanghai 200433, China; 2. The Incense Association of China, Beijing 100710, China)

ABSTRACT: **AIM** To analysis the smoke constituents of incense from different origins of *Aquilariae Lignum Resinatum*. **METHODS** The incense of *Aquilariae Lignum Resinatum* from Hainan (China), East Malaysia, Irian Jaya (Indonesia) and Vietnam was analyzed by gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) coupled with multivariate statistical analysis. Chemical pattern recognition was performed using principal component analysis (PCA) and orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA). **RESULTS** A total of 158 compounds were identified, mainly ethers, terpenoids and aldehydes. Among the 75 differential constituents identified, terpenoids and hydrocarbons were in the majority. In the samples from Hainan (China), the prominent constituents included 1-acetoxy-2-butanone and 1-(2-methylphenyl) ethanol. In the samples from East Malaysia, the prominent constituents included terpinolene and hydroxyvaleric acid. Acetosyringone and *p*-methoxybenzylacetone were the prominent constituents of samples from Irian Jaya (Indonesia). Benzene, 1-propenyl, 4-propenyl syringol, and valencene are the prominent constituents of samples from Vietnam. **CONCLUSION** There are significant differences in the types and contents of smoke constituents present in incense from various sources of *Aquilariae Lignum Resinatum*, which can provide reference for the origin traceability of *Aquilariae Lignum Resinatum* and smoke composition research.

KEY WORDS: *Aquilariae Lignum Resinatum*; origins; smoke constituents; GC-MS; principal component analysis (PCA); orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA)

收稿日期: 2025-03-11

作者简介: 杨柳青 (2001—), 女, 硕士生, 从事芳香疗法药理作用研究。Tel: 18270699130, E-mail: 22210700066@m.fudan.edu.cn

*通信作者: 李辉 (1978—), 男, 博士, 教授, 从事分子人类学、生理人类学研究。Tel: (021) 31246787, E-mail: LHCA@fudan.edu.cn

网络出版日期: 2025-05-13

网络出版地址: <http://kns.cnki.net/kcms/detail/31.1368.R.20250513.0941.002.html>

沉香是由瑞香科沉香属植物形成的树脂木材混合物^[1], 包括中国海南、广东、广西等地的白木香树, 印尼、马来西亚的鹰木, 越南、高棉等地的蜜香树等, 含有木香、清香、花果香等丰富的香气^[2], 药用价值很高, 具有镇静安神、抗菌抗炎等作用^[3], 常用于治疗胸腹胀闷疼痛、胃寒呕吐呃逆、肾虚气逆喘急^[4], 临床上已有应用其熏香治疗失眠、抑郁症等疾病的报道^[5-6]。

然而, 当前市场上沉香质量良莠不齐^[7], 邱聪花等^[8-9]通过建立指纹图谱来对沉香进行质量评价。不同产地沉香的品质和成分均存在差异, 张林祥等^[10]发现, 沉香中无机元素与产地存在相关性; 吴秀君等^[11]认为, 不同等级天然沉香香气差异主要受倍半萜、芳香族类化合物的影响。目前, 对沉香化学成分的研究集中于挥发油, 而对传统燃香方式产生的烟气成分涉及较少。气相色谱-质谱联用(GC-MS)法能对物质进行高效分离并定性定量^[12], 适用于烟气成分的检测。因此, 本研究采用GC-MS法结合多元统计分析, 对来自中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南4个产地沉香的燃香烟气成分进行分析, 以期为该药材进一步开发利用提供理论基础。

1 材料

1.1 仪器 玻璃燃烧室(上海亚克力化工有限公司); 8890-5977C单四极杆气质联用仪、HP-5MS弹性石英色谱柱(美国Agilent公司); FA224微量电子分析天平(上海力辰邦西仪器科技有限公司); GM-15S无油隔膜真空泵(上海析牛莱伯仪器有限公司)。

1.2 试剂与药材 13批沉香按产地分为中国海南3批[瑞香科沉香属白木香 *Aquilaria sinensis* (Lour.) Gilg, 北纬18°~20°, 东经108°~111°, 编号H1~H3]、东马来西亚3批(瑞香科沉香属马来沉香 *A. malaccensis* Lam., 北纬3°~5°, 东经110°~119°, 编号M1~M3)、印尼伊里安4批(瑞香科沉香属贝卡里沉香 *A. beccariana* Tiegh., 0°~南纬10°, 东经130°~141°, 编号I1~I4)、越南3批(瑞香科沉香属厚叶沉香 *A. crassna* Pierre ex Lecomte, 北纬8°~23°, 东经102°~109°, 编号V1~V3), 性状见图1, 均经复旦大学生命科学学院李辉教授鉴定为正品, 保存于复旦大学生命科学学院现代人类学教育部重点实验室。乙醇(分析纯, 批号P2963075, 纯度≥99.7%, 上海泰坦科技股份有限公司)。

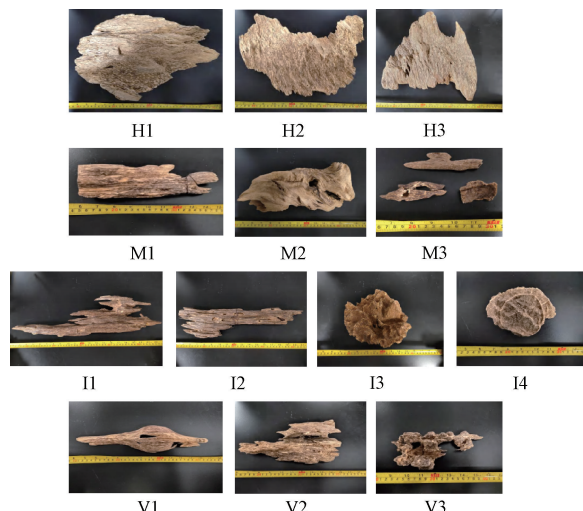
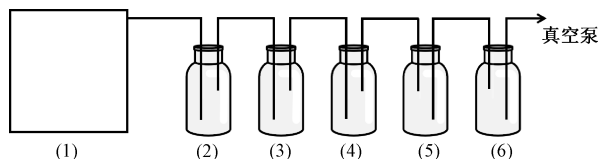


图1 沉香性状

Fig. 1 Characteristics of *Aquilariae Lignum Resinatum*

2 方法

2.1 烟气成分收集 取3个洁净干燥的玻璃瓶, 各加入15 mL乙醇, 另取2个玻璃瓶, 装置见图2。将药材研磨成粉末后过80目筛, 称取2.5 g至玻璃燃烧室中点燃, 调节无油隔膜真空泵直至吸收瓶内有稳定气泡冒出, 缓冲瓶内不出现白烟为止, 燃烧结束20 min后关闭真空泵, 合并吸收瓶中的溶液, 0.22 μm微孔滤膜过滤, 保存于样品瓶中。



注: (1) 为玻璃燃烧室, (2)~(4) 为吸收瓶, (5) 为空白瓶, (6) 为缓冲瓶。

图2 燃香成分收集装置

Fig. 2 Device for collecting incense constituents

2.2 GC-MS分析条件

2.2.1 色谱 HP-5MS色谱柱(30 m×250 μm, 0.25 μm); 程序升温(50 °C, 1 min; 50~80 °C, 2 °C/min; 80~130 °C, 6 °C/min; 130 °C, 1 min; 130~250 °C, 10 °C/min; 250~280 °C, 5 °C/min; 280 °C, 3 min); 进样口温度280 °C; 载气高纯氮气, 体积流量1 mL/min; 不分流进样, 进样量1 μL。

2.2.2 质谱 电子轰击离子源(EI), 温度230 °C, 电离能量70 eV; 四极杆温度150 °C; 传输线温度280 °C; 全扫描模式, 质量扫描范围 m/z 50~650; 溶剂延迟3 min。

2.3 数据处理 采用Agilent Masshunter Qualitative

Analysis 10.0 软件及 NIST20 数据库进行成分鉴定及归一化分析, Origin 2021 软件绘制柱状堆积图, SIMCA 14.1 软件进行主成分分析 (PCA)、正交偏最小二乘判别分析 (OPLS-DA), 以 $VIP \geq 1$ 、 $P < 0.05$ 为条件筛选差异成分, 微生信网站绘制热图^[13]。

3 结果

3.1 烟气成分 共鉴定出 158 种, 共有成分 28 种, 具体见表 1。由此可知, 苯甲醛、糠醛、4-苯基-2-丁酮、沉香螺醇、愈创木酚是含量较高的共

有成分, 属于沉香燃香后产生的常见烟气成分; 不同药材烟气成分种类和相对含量存在差异, 如甲基丁香酚、丁香三环烷二醇、茴香醛、姜酮等仅在中国海南产者中检出, 萜品油烯、喇叭烯、马兜铃烯等仅在东马来西亚产者中检出, α -甲基苯乙烯、异长叶醇、茴香基丙酮等仅在印尼伊里安产者中检出, 6, 7-二甲氧基-2-(苯基乙基) 色酮、木香烯内酯等仅在越南产者中检出。

表 1 不同产地沉香燃香烟气成分

Tab. 1 Smoke constituents of incense from different origins of *Aquilariae Lignum Resinatum*

分类	编号	名称	CAS 编号	产地
萜类	CF79639	柠檬烯	138-86-3	越南
	CF153105	桉油烯醇	6750-60-3	东马来西亚
	CF21016	萜品油烯	586-62-9	东马来西亚
	CF191006	丁香三环烷二醇	2649-64-1	中国海南
	CF291359	β -杜松烯	523-47-7	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安
	CF9226	愈创木烯	88-84-6	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安
	CF107004	γ -桉叶醇	1209-71-8	中国海南
	CF107021	α -桉叶醇	473-16-5	印尼伊里安
	CF384111	异朱栾倍半萜	22387-74-2	中国海南、东马来西亚、越南
	CF152888	喇叭烯	21747-46-6	东马来西亚
	CF427495	α -香附酮	473-08-5	东马来西亚
	CF413534	去氢蜂斗菜酮	19598-45-9	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF109295	巴伦西亚橘烯	4630-07-3	越南
	CF414294	α -檀香醇	115-71-9	越南
	CF152248	α -雪松烯	3853-83-6	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安
	CF333039	异长叶醇	1139-17-9	印尼伊里安
	CF22531	广藿香烯	1405-16-9	中国海南
	CF69822	4,6(Z),8(Z)-巨豆三烯	71186-25-9	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安
	CF159387	β -新丁香三环烯	56684-96-9	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安
	CF185098	愈创醇	489-86-1	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安
	CF100967	沉香螺醇	1460-73-7	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF502354	6-(2-羟基丙-2-基)-4, 8a-二甲基-2,3,4,6,7,8-六氢-1H-萘-1-醇,1-乙酸酯	—	中国海南
	CF413356	2-[(2R,4aR,8aR)-4a,8-二甲基-1,2,3,4,4a,5,6,8a-八氢-2-萘基]丙烯醛	4586-01-0	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安
	CF413194	佛木酮	562-23-2	中国海南、东马来西亚、越南
	CF488658	[(1S,4aS,8aR)-2,5,5,8a-4 甲基-4-氧代-1,4,4a,5,6,7,8,8a-八氢萘-1-基]乙酸甲酯	110547-82-5	中国海南、东马来西亚、越南
	CF478665	香柏酮	4674-50-4	中国海南、东马来西亚、越南
	CF156151	γ -古朱烯环氧化物-(2)	184705-51-9	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF478230	小白菊内酯	20554-84-1	中国海南
	CF413199	(4aR,5S)-1-羟基-4a,5-二甲基-3-(丙-2-亚基)-4,4a,5,6-4 氢萘-2(3H)-酮	669064-29-3	中国海南、东马来西亚、越南
	CF412969	假虎刺酮	473-10-9	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安
	CF513105	苍术内酯 III 乙酸酯	—	中国海南
	CF408881	(5R,10R)-10-甲基-6-亚甲基-2-异亚丙基螺[4.5]癸-7-烯	28908-27-2	中国海南
	CF190535	3,7,11-三甲基十二烷-2,4,6,10-4 烯醛	13832-89-8	中国海南
	CF412954	γ -雪松烯	53111-25-4	印尼伊里安
	CF150149	马兜铃烯	6831-16-9	东马来西亚
	CF413197	A-沉香呔喃	5956-12-7	印尼伊里安
	CF341751	(1R, 4aS, 8aR)-rel-1,2,4a,5,8,8a-六氢-4,7-二甲基-1-(1-甲基乙基)-萘	5951-61-1	印尼伊里安
	CF151492	八氢-1,1,4,4-甲基-2,3b-甲醇-3bH-环戊并[1,3]环丙并[1,2]苯-7-醇	74842-43-6	印尼伊里安
	CF140331	1,3a-ethano-3aH-indene-4-methanol, octahydro-2,2,4,7a-tetramethyl-, [1R-(1 α , 3 α , 4 α , 7a β)](9CI)	137235-47-3	印尼伊里安
	CF111118	木香烯内酯	553-21-9	越南

续表1

分类	编号	名称	CAS 编号	产地	
烃类	CF441629	苯乙烯	100-42-5	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南	
	CF228741	丁基苯	104-51-8	中国海南、印尼伊里安、越南	
	CF413767	戊基苯	538-68-1	越南	
	CF229236	1-甲基萘	767-59-9	中国海南、东马来西亚、越南	
	CF379701	萘	91-20-3	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南	
	CF413793	4-甲氧基苯乙烯	637-69-4	中国海南、印尼伊里安、越南	
	CF429476	1-甲基萘	90-12-0	中国海南	
	CF379975	2-甲基萘	91-57-6	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南	
	CF156694	1,8-二甲基4 喹	25419-33-4	中国海南	
	CF229757	1,2-二氢萘	447-53-0	越南	
	CF20403	β -甲基苯乙烯	637-50-3	中国海南、印尼伊里安、越南	
	CF424032	α -甲基苯乙烯	98-83-9	印尼伊里安	
	CF4003	1,2-二氢-3-甲基萘	2717-44-4	中国海南、东马来西亚、越南	
	CF200980	1,2,3,5,8,8a-六氢-7-甲基-萘	107914-88-5	中国海南、东马来西亚、越南	
	CF383918	(4a <i>S</i> ,8 <i>R</i>)-4,4a,5,6,7,8-六氢-4a,8-二甲基-2(3 <i>H</i>)-萘	69460-62-4	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安	
	CF153401	八甲基<4>轴烯	88919-66-8	中国海南	
	CF186387	3-甲基-2-丁烯基苯	4489-84-3	中国海南、东马来西亚、越南	
	CF5654	1-丙-2-基-4-丙-1-烯-2-基苯	2388-14-9	中国海南	
	CF373941	(1 <i>R</i> ,3 <i>aS</i> ,5 <i>aS</i> ,8 <i>aR</i>)-1,3a,4,5a-4 甲基-1,2,3,3a,5a,6,7,8-八氢环戊二醇并[<i>c</i>]戊烯	65372-78-3	中国海南	
	CF189110	[4 <i>aR</i> -(4 <i>ax</i> ,6 <i>ax</i> ,8 <i>a</i> β)]-4a,5,6,7,8,8a-六氢-6-[1-(羟甲基)乙基]-4,8a-二甲基-2(1 <i>H</i>)-萘	109897-57-6	中国海南	
	CF27684	对异丁基甲苯	5161-04-6	越南	
	CF228432	苯乙炔	536-74-3	越南	
	CF62280	2,3,4,5-4 甲基三环[3.2.1.0 ^{2,7}]-3-辛烯	62338-44-7	印尼伊里安	
	CF239581	1,2,3,4,5-五甲基环戊二烯	4045-44-7	印尼伊里安	
	CF113286	1,2-二苯乙烷	103-29-7	越南	
	酚类	CF291437	愈创木酚	90-05-1	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
		CF185118	紫罗醇	128-37-0	中国海南、东马来西亚、越南
		CF233068	2,2-亚甲基双-(4-甲基-6-叔丁基苯酚)	119-47-1	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
		CF431439	2-甲氧基-4-乙基苯酚	7786-61-0	中国海南、印尼伊里安、越南
		CF425203	3-羟基-4-甲氧基甲苯	1195-09-1	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
		CF249695	4-乙基愈创木酚	2785-89-9	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
		CF231854	紫丁香醇	91-10-1	越南
CF107171		甲基丁香酚	93-15-2	中国海南	
CF514669		4-乙基丁香醇	14059-92-8	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南	
CF465440		莱籽多酚	28343-22-8	越南	
CF249727		4-烯丙基-2,6-二甲氧基苯酚	6627-88-9	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南	
CF164791		对甲酚	106-44-5	中国海南	
CF413361		4-甲基丁香醇	6638-05-7	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南	
CF413251		4-丙烯基丁香醇	20675-95-0	越南	
CF430925		2-甲氧基-4-甲基苯酚	93-51-6	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南	
CF291615		乙酰丁香酮	2478-38-8	中国海南、印尼伊里安、越南	
CF34984		2-乙基-5-甲基苯酚	1687-61-2	中国海南、东马来西亚、越南	
CF412733		1,1,2,3,4a,4,5,6-八氢-7a,4-二甲基-5-(3-甲基乙基)-1-萘酚	61847-19-6	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安	
CF132370		去甲绵马酚	437-72-9	中国海南	
CF246141		姜酮	122-48-5	中国海南	
CF108237		2-甲基-2-环戊烯-1-酮	1120-73-6	东马来西亚、印尼伊里安、越南	
CF423467		2,3-二甲基-2-环戊烯酮	1121-05-7	印尼伊里安	
CF223435		苯乙酮	98-86-2	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南	
CF228430		4-苯基-2-丁酮	2550-26-7	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南	
CF1673		甲基环戊烯醇酮	80-71-7	中国海南	
CF112926		2-羟基-2-环戊烯-1-酮	10493-98-8	中国海南、印尼伊里安、越南	
CF156501		1-乙酰氧基-2-丁酮	1575-57-1	中国海南	
CF408888		(<i>E</i>)-2-[(8 <i>R</i> ,8 <i>aS</i>)-8,8a-二甲基-3,4,6,7,8,8a-六氢萘-2(1 <i>H</i>)-亚基]丙醛	137695-18-2	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安	

续表1

分类	编号	名称	CAS 编号	产地
	CF189422	1,3,1b,2,3,3-六氢-1,2-二甲基环戊并[3,6]环丙并[7,8]环庚烯-6(6aH)-酮	91531-58-7	中国海南
	CF131868	4-叔丁基苯丙酮	81561-77-5	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安
	CF384106	α -香根酮	15764-04-2	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安
	CF319336	6-甲氧基-9-甲基三环[7.2.1.0(3,8)]十二烷-3(8),4,6-三烯-2,12-二酮	—	中国海南
	CF412642	6-甲氧基-2-(2-苯乙基)色酮	84294-89-3	越南
	CF231569	茴香基丙酮	104-20-1	印尼伊里安
	CF413470	(3aR)-3 α ,4,4 α ,5,6,7,9,9a β -八氢-5 α ,8-二甲基-3-亚甲基氮杂烯并[6,5-b]呋喃-2(3H)-酮	66873-37-8	东马来西亚
	CF190514	6-[1-(羟甲基)乙基]-4,8a-二甲基-3,5,6,7,8,8a-六氢-1H-萘-2-酮	—	越南
	CF413468	(3R,3aR,4aS,5R,9aS)-3,5,8-三甲基-3a,4,4a,5,6,7,9,9a-八氢氮杂[6,5-b]呋喃-2(3H)-酮	66873-38-9	越南
	CF383989	2-(2-苯乙基)色酮	61828-53-3	越南
	CF383988	6,7-二甲氧基-2-(苯乙基)色酮	84294-87-1	越南
醚类	CF228304	糠醛	98-01-1	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF149344	糠醇	98-00-0	中国海南
	CF233644	2-乙酰基呋喃	1192-62-7	中国海南
	CF413208	5-甲基-2-糠醛	620-02-0	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF434143	苯并呋喃	271-89-6	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF233333	2-甲基苯并呋喃	4265-25-2	越南
	CF118098	3-糠醛	498-60-2	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF414732	5-甲基呋喃-2-(5H)-酮	591-11-7	印尼伊里安
	CF423992	4-甲基苯甲醚	104-93-8	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF424168	苯甲醚	100-66-3	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF61972	4-乙基苯甲醚	1515-95-3	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF159391	环氧柏木烷	29597-36-2	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安
	CF188659	2,4,5a,5,6a,6b-六氢-6,4,4b-三甲基-6-(2-甲基乙基)-1H-环丙并[g]苯并呋喃	102681-49-2	印尼伊里安
	CF383993	(3R)-2,2,5a β ,9 β -4-甲基-3 β ,9a β -甲氧乙二氢-1-苯并氧杂卓	5956-09-2	东马来西亚
	CF440297	榄香素	487-11-6	中国海南
	CF233474	丙醛缩二甲醇	4744-10-9	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF373377	苯甲醛二乙缩醛	774-48-1	印尼伊里安
	CF342858	乙氧基乙醛二乙基缩醛	4819-77-6	印尼伊里安
醇类	CF190305	(8R,8aS)-rel-6,7,8,8a-4-氢-2,3,5,5,8a-五甲基-5H-1-苯并吡喃-8-醇	97306-66-6	中国海南
	CF164366	(1aR,4S,7R,7aS,7bR)-1,1,4,7-4-甲基-1a,2,3,4,6,7,7a,7b-八氢-1H-环丙[e]萹-4-醇	63181-42-0	越南
	CF495721	4-羟基-6-[2-(2-甲基-1,2,4a,5,6,7,8,8a-八氢萘-1-基)乙基]氧杂环庚-2-酮	1212134-02-5	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安
	CF114762	1-(2-甲基苯基)乙醇	7287-82-3	中国海南
	CF100968	茅苍术醇	23811-08-7	中国海南
	CF466216	牛蒡醇	36061-11-7	中国海南
	CF194076	2,3,4,4a,5,6,7,8-八氢-1,4a-二甲基-7-(1-甲基乙基)-2,3-萘二醇	1005284-62-7	东马来西亚
	CF488936	naphth[1,2-b]oxirene-2,6-diol,1a,2,4,5,6,7,7a,7b-octahydro-7,7a-dimethyl-1a-(1-methylethenyl)-,(1aS,2R,6R,7R,7aR,7bR)-	1665293-89-9	东马来西亚
	CF288735	2-乙基己醇	104-76-7	东马来西亚
	CF383991	表桉叶油醇	117066-77-0	东马来西亚
	CF192977	2-甲基-4-[2',6',6'-三甲基-1'-环己烯-1'-基]-3-丁烯-1-醇	62924-17-8	印尼伊里安
	CF413998	莪术醇	19431-84-6	印尼伊里安
酯类	CF291363	苯甲酸甲酯	93-58-3	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安
	CF379580	邻苯二甲酸二乙酯	84-66-2	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安
	CF193486	丙二酸二乙酯	105-53-3	中国海南
	CF385729	2-(1,1-二甲基乙基)-4-甲氧基-1-乙酸苯酚	91401-26-2	中国海南
	CF107279	丙酸正丙酯	106-36-5	中国海南
	CF193212	5,5-二甲基-8-亚甲基-9-氧代-2,3-十二烯酸甲酯	68799-74-6	印尼伊里安
	CF259740	(1,2,3,4,5,6,7,8-八氢-3,8,8-三甲基萘-2-基)乙酸甲酯	314773-27-8	印尼伊里安
	CF35988	2,5-十八碳二炔酸甲酯	57156-91-9	越南
含氮类	CF227742	吡啶	110-86-1	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF791	2-甲基吡啶	109-06-8	越南

续表1

分类	编号	名称	CAS 编号	产地
	CF227843	苯甲腈	100-47-0	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF386057	油酸酰胺	301-02-0	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF151204	3-甲基吡啶	108-99-6	中国海南
	CF238561	2-氧-1-环己烷丙腈	4594-78-9	越南
醛类	CF227846	苯甲醛	100-52-7	中国海南、东马来西亚、印尼伊里安、越南
	CF236472	桂皮醛	14371-10-9	越南
	CF466017	4-羟基-3,5-二甲氧基苯乙醛	87345-52-6	越南
	CF250264	3,5-二甲氧基-4-羟基肉桂醛	87345-53-7	越南
	CF118660	茴香醛	123-11-5	中国海南
	CF62257	长叶炔醛	19890-84-7	中国海南、东马来西亚、越南
羧酸类	CF8511	阿魏酸	1135-24-6	越南
	CF414239	羟基缙草酸	101628-22-2	东马来西亚
	CF453143	1-羟基缙草烯酸	1619-16-5	越南
	CF496089	2-[(3S,3aR,5R,7aS)-3a-乙酰基-3-羟基-7a-甲基-八氢-茛-5-基]-丙烯酸	117869-89-3	越南

燃烟成分可分为10类,包括萜类40种、烃类25种、酚类20种、酮类19种、醚类18种、醇类12种、酯类8种、含氮类6种、醛类6种、羧酸类4种。在4个产地药材中醚类含量占比均最高,为总量的28.65%~33.31%,萜类(4.79%~20.40%)、醛类(9.54%~16.34%)次之,见图3。各产地根据经度由西到东排列,依次为越南、中国海南、东马来西亚、印尼伊里安,越南产沉香中萜类含量较低,酮类含量较高;随着产地经度向东增加,萜类含量逐渐升高,酮类、烃类、含氮化合物含量逐渐降低。综上所述,不同产地药材燃香后烟气成分的种类及相对含量存在一定差异,以醚类、萜类、醛类为主。

3.2 化学模式识别

3.2.1 PCA 得到3个主成分,累积方差解释率 $R^2X=0.62$,表示模型可以接受,见图4A。主成分1、2方差解释率分别为0.27、0.24,得分图见图4B,可知中国海南产药材主要分布在第一象限,东马来西亚产者主要分布在第一、四象限,印尼

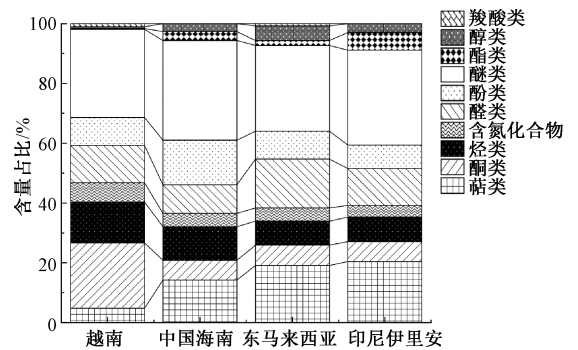


图3 不同产地沉香燃烟气成分种类百分比柱状堆积图
Fig. 3 Percentage column stacking chart of smoke constituents of incense from different origins of *Aquilariae Lignum Resinatum*

伊里安产者主要分布在第四象限,越南产者主要分布在第二、三象限,说明其燃香后产生的烟气成分存在一定地域特征。在第一主成分上,越南产药材离其他3个产地的较远,说明该国与其他产地产者差异较大;在第二主成分上,东马来西亚、印尼伊里安产药材更接近,说明两者差异较小。

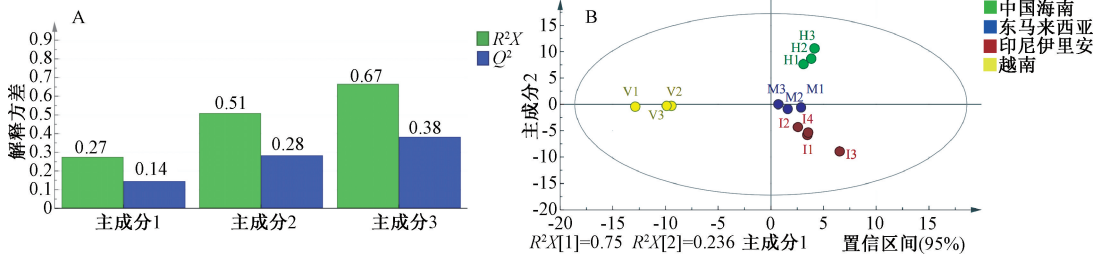


图4 不同产地沉香燃烟气成分PCA图

Fig. 4 PCA plots for smoke constituents of incense from different origins of *Aquilariae Lignum Resinatum*

3.2.2 OPLS-DA 由图5A可知,4个产地药材区分效果较好,解释能力参数 R^2Y 、 Q^2 分别为0.973、0.911,表明模型稳定性和预测能力较好。再对该

模型进行200次迭代置换检验,结果见图5B,可知 R^2 、 Q^2 回归线斜率为正数, Q^2 截距为-0.665,表明模型无过度拟合,4个产地药材存在差异。

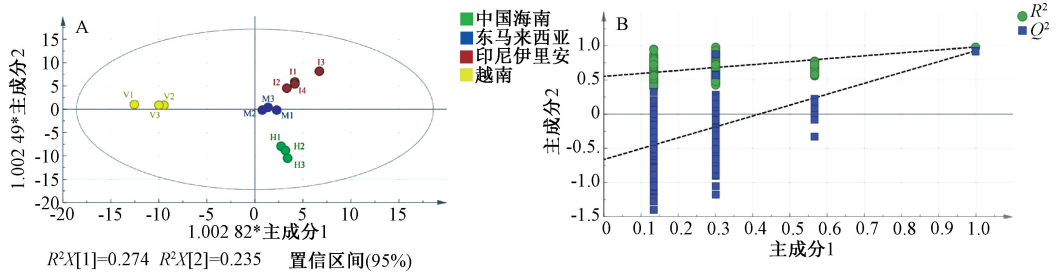


图5 不同产地沉香燃香烟气成分的 OPLS-DA 图

Fig. 5 OPLS-DA plots for smoke constituents of incense from different origins of *Aquilariae Lignum Resinatum*

以 $VIP \geq 1$ 、 $P < 0.05$ 为筛选标准^[14]，共得到 75 种差异成分，其中萜类最多，有 19 种；其次是烃类，有 16 种，对其相对含量进行标准化处理后绘制热图，结果见图 6。由此可知，区域 A 为中国海南产药材中含量较高的燃香烟气成分，其中萜类最多，为 6 种，VIP 值排名前 3 位的为 γ -桉叶醇、3, 7, 11-三甲基十二烷-2, 4, 6, 10-四烯醛、茅苍术醇；区域 B 为东马来西亚产药材中含量较高的燃香烟气成分，其中萜类最多，为 9 种，VIP 值排名前 3 位的为 2-乙基己醇、桉油烯醇、2, 3, 4, 4a, 5, 6, 7, 8-八氢-1, 4a-二甲基-7-(1-甲基乙炔基)-2, 3-萘二醇；区域 C 为印尼伊里安产药材中含量较高的燃香烟气成分，其中烃类、醚类化合物最多，均为 3 种，VIP 值排名前 3 位的为 1, 2, 3, 4, 5-五甲基环戊二烯、5-甲基咪喃-2-(5H)-酮、茴香基丙酮；区域 D 为越南产药材中含量较高的燃香烟气成分，其中烃类最多，为 7 种，VIP 值排名前 3 位的为 2-氧-1-环己烷丙腈、3, 5-二甲氧基-4-羟基肉桂醛、1, 2-二苯乙烷。

4 讨论与结论

苯甲醛、糠醛、沉香螺醇和愈创木酚是沉香烟气中含量较高的共有成分，其中苯甲醛和糠醛在沉香加热后才会出现^[15-16]，表明其燃香时通过裂解等方式来生成其他物质；沉香螺醇是沉香中的特征性倍半萜类成分，而愈创木酚是沉香中的代表性熏烤香成分，均属于药材中常见的香气物质，与 Pripdeevech 等^[17]研究一致。不同产地沉香烟气成分的种类和相对含量存在差异，表明它们受产地影响较大。中国海南产沉香气味清甜，马来西亚、印尼产者气味厚重^[18]，而越南产者气味丰富，有木香、药香、蜜香和清凉气息^[2]。萜类物质大多具有花香和清凉味^[19]，是沉香清新气味的主要来源。越南产沉香中酮类、醛类含量较高，推测是其气味丰富的原因。醚类、萜类和醛类是沉香燃香后的主要烟气成分，而以往研究认为以倍半萜类、色酮

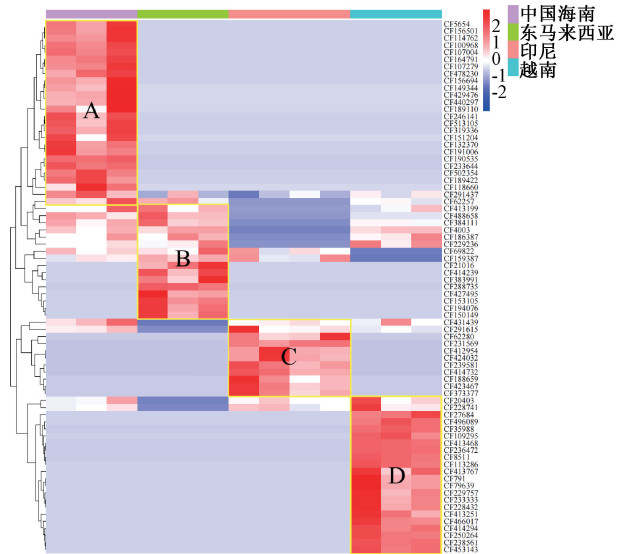


图6 不同产地沉香燃香差异烟气成分热图

Fig. 6 Heatmap for differential smoke constituents of incense from different origins of *Aquilariae Lignum Resinatum*

类、芳香族类化合物为主^[18]。萜类物质是沉香香气的主要来源，具有挥发性，故在沉香挥发时、燃烧后的含量都较高；色酮类物质不易挥发，燃烧时易裂解，故在上述 2 种状态下的含量存在差异。

气候、温度、土壤等因素会影响植物挥发性成分的积累^[20]。中国海南以热带季风气候为主，马来西亚和印尼以热带雨林气候为主，而越南南部以热带季风气候为主，北部以温带季风气候为主。海南省年平均气温为 24~26 °C^[21]，马来西亚为 26~28 °C^[22]，印尼为 27~30 °C，而越南南部为 27~28 °C，北部为 22~24 °C。海南的土壤包括红壤、黄壤、沙质土壤等^[23]，马来西亚以红壤、黄壤和泥炭土为主^[24]，印尼以红壤、火山土、泥炭土为主^[25]，而越南以红壤、黄壤、冲积土和为主，其中红壤酸性较强，黄壤肥沃，泥炭土和火山土富含有机质和矿物质。因此，上述因素差异会影响沉香的生长和香气物质的积累，是造成不同产地药材

燃烟成分差异的原因。中国海南、东马来西亚产沉香燃烟中萜类数量最多，印尼产者烃类、醚类数量最多，而越南产者烃类数量最多。因此，产地差异对沉香燃烟成分中萜类、烃类等物质的影响最大。

综上所述，不同产地沉香燃烟成分种类和含量呈现地域特征，产地差异对萜类、烃类等物质的影响最大。但燃烟收集装置无法充分吸收所有成分，故后续需改进，如更换吸收溶液或采用气体进样口进样。同时，目前对沉香燃烟中同分异构体的鉴定存在一定困难，相关技术有待加强；沉香产地较多，但本研究所用药材产地数量有限，一些主产区的没有纳入，故今后将扩大样本，以期更全面准确地分析不同产地药材燃香的烟气成分。

参考文献：

[1] Li W, Chen H Q, Wang H, et al. Natural products in agarwood and *Aquilaria* plants: chemistry, biological activities and biosynthesis[J]. *Nat Prod Rep*, 2021, 38(3): 528-565.

[2] 董文化, 王 昊, 李 薇, 等. 沉香历代香谱考证和香气成分研究进展[J]. *香料香精化妆品*, 2024, 22(3): 1-16.

[3] 朱慧娜, 苏志诚, 林达淮, 等. 沉香药理作用概述及研究进展[J]. *基层中医药*, 2024, 3(8): 70-79.

[4] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典: 2020年版一部[S]. 北京: 中国医药科技出版社, 2020: 192-193.

[5] 雷 莉, 张 婷, 高 东, 等. 沉香熏香疗法对失眠障碍患者的临床疗效研究[J]. *中风与神经疾病杂志*, 2019, 36(7): 609-612.

[6] 张光彩, 潘佳慧, 张海英, 等. 海南沉香灸治疗轻度抑郁性失眠患者的疗效观察[J]. *世界中西医结合杂志*, 2024, 19(1): 150-155.

[7] Peng D Q, Wang C H, Liu Y Y, et al. Research progress on the chemical constituents of *Aquilariae Lignum Resinatum* and their pharmacological activities[J]. *Chin J Mod Appl Pharm*, 2021, 38(3): 358-365.

[8] 邱聪花. 沉香 HPLC 指纹图谱研究[J]. *中成药*, 2023, 45(6): 2049-2053.

[9] 许凌雯, 杨思惠, 陈晓颖, 等. 天然沉香和人工沉香的 HPLC 指纹图谱分析及比较[J]. *中国药学杂志*, 2019, 54(23): 1980-1987.

[10] 张林祥, 郝培君, 刘富强, 等. ICP-MS 法结合化学计量学的沉香产地分析及健康风险评估[J]. *中药材*, 2023, 46(4): 919-924.

[11] 吴秀君, 梁丽华, 罗成桦, 等. 基于 PY-GC-MS 分析不同等级天然沉香的香气差异[J]. *广东化工*, 2023, 50(8): 191-194; 197.

[12] Fiehn O. Metabolomics by gas chromatography-mass spectrometry: combined targeted and untargeted profiling[J]. *Curr Protoc Mol Biol*, 2016, 114: 1-32.

[13] Tang D D, Chen M J, Huang X H, et al. SRplot: A free online platform for data visualization and graphing[J]. *PLoS One*, 2023, 18(11): e0294236.

[14] Mahieu B, Qannari E M, Jaillais B. Extension and significance testing of variable importance in projection (VIP) indices in partial least squares regression and principal components analysis[J]. *Chemometr Intell Lab Syst*, 2023, 242(15): 104986.

[15] Hashimoto K, Nakahara S, Inoue T, et al. A new chromone from agarwood and pyrolysis products of chromone derivatives[J]. *Chem Pharm Bull*, 1985, 33(11): 5088-5091.

[16] 王 茜. 不同产区沉香的化学成分特征及其可识别性研究[D]. 北京: 中国林业科学研究院, 2020.

[17] Pripdeevech P, Khummueng W, Park S K. Identification of odor-active components of agarwood essential oils from Thailand by solid phase microextraction-GC/MS and GC-O[J]. *J Essent Oil Res*, 2011, 23(4): 46-53.

[18] 尚丽丽, 陈 媛, 晏婷婷, 等. 沉香的化学成分和品质评价研究进展[J]. *木材工业*, 2018, 32(3): 29-33.

[19] 麦雅彦, 杨锡洪, 连 鑫, 等. SDE/GC-MS 测定南美白对虾的挥发性香气成分[J]. *现代食品科技*, 2014, 30(1): 206-210.

[20] 李 聪, 黄诗雨, 陈丽华, 等. 药材部位、产地及采收期对中药挥发油成分的差异性分析[J]. *中草药*, 2020, 51(20): 5395-5404.

[21] 孙 瑞, 吴志祥, 陈帮乾, 等. 近 55 年海南岛气候要素时空分布与变化趋势[J]. *气象研究与应用*, 2016, 37(2): 1-7; 122.

[22] Tang K H D. Climate change in Malaysia: Trends, contributors, impacts, mitigation and adaptations[J]. *Sci Total Environ*, 2019, 650(Pt2): 1858-1871.

[23] 徐卫清, 杨 春, 张冬明, 等. 海南岛主要土壤类型全硒含量的分布特征[J]. *贵州农业科学*, 2018, 46(10): 67-71.

[24] Shamshuddin J, Mokhtar S, Mohd A M F. Landscape, geology and soils of the Malay Peninsula[J]. *Malay J Soil Sci*, 2023, 27: 8-28.

[25] Anda M, Ritung S, Suryani E, et al. Revisiting tropical peatlands in Indonesia: Semi-detailed mapping, extent and depth distribution assessment[J]. *Geoderma*, 2021, 402: 115235.