

[成分分析]

基于GC-IMS技术分析黄芪米炒前后挥发性成分的差异

杨请请¹, 姚妙诗¹, 刘晨曦¹, 李明露¹, 吴翻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 研究黄芪米炒前后挥发性成分的差异。方法 利用气相色谱-离子迁移谱 (GC-IMS) 技术检测生黄芪和米炒黄芪的挥发性成分, 获取指纹图谱, 并结合主成分分析 (PCA) 和正交偏最小二乘判别分析 (OPLS-DA) 筛选差异成分。结果 从样品中共检出 117 种挥发性成分, 鉴定出 100 种。以差异倍数 (FC) >1.5 或 <0.67、变量重要性投影 (VIP) >1 及 $P < 0.05$ 为标准, 筛选出 59 种差异性成分 (32 种上调, 27 种下调)。PCA 与 OPLS-DA 模型均显示生品与炮制品可被显著分离。差异成分分析表明, 米炒后气味变化主要源于醇类、醛类成分含量的减少, 以及吡嗪类、呋喃类、酮类成分含量的增加。结论 GC-IMS 技术能有效表征黄芪米炒前后挥发性成分的差异, 为阐明其炮制机理提供了实验依据。

关键词: 黄芪; 米炒; 气相色谱-离子迁移谱 (GC-IMS); 挥发性成分; 主成分分析 (PCA); 正交偏最小二乘判别分析 (OPLS-DA); 气味

中图分类号: R284.1 文献标志码: A 文章编号: 1001-1528(2026)06-1892-08

doi: 10.3969/j.issn.1001-1528.2026.06.016

Analysis of volatile components in *Astragali Radix* before and after rice stir-frying by GC-IMS

YANG Qing-qing¹, YAO Miao-shi¹, LIU Chen-xi¹, LI Ming-lu¹, WU Fan¹, SHU Ya-chun^{1,2*}

(1. Affiliated Hospital of Nanjing University of Chinese Medicine/Jiangsu Province Hospital of Chinese Medicine, Nanjing 210029, China; 2. Jiangsu Haibin Rehabilitation Hospital, Lianyungang 222042, China)

ABSTRACT: **AIM** To study the differences in volatile components of *Astragali Radix* before and after stir-frying with rice. **METHODS** The volatile components of raw *Astragali Radix* and rice-fried *Astragali Radix* were detected using gas chromatography-ion mobility spectrometry (GC-IMS) to obtain fingerprint spectra. Principal component analysis (PCA) and orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA) were employed to screen for differential components. **RESULTS** A total of 117 volatile components were detected in the samples, with 100 being qualitatively identified. By setting the criteria of fold change (FC) >1.5 or <0.67, variable importance in projection (VIP) >1 and $P < 0.05$, 59 differential components (32 up-regulated and 27 down-regulated) were screened. Both PCA and OPLS-DA models showed significant separation between the raw and processed groups. Analysis of the differential components indicated that the odor changes after rice-frying primarily resulted from the decrease in alcohols and aldehydes, as well as the increase in pyrazines, furans and ketones. **CONCLUSION** GC-IMS technology can effectively characterize the differences in volatile components of *Astragali Radix* before and after rice-frying processing, providing experimental evidence for elucidating its processing mechanism.

收稿日期: 2026-03-03

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); 江苏省药学会-奥赛康医院药学科研基金项目 (A202203)

作者简介: 杨请请 (2001—), 女, 硕士在读, 从事中药炮制研究。E-mail: 2177840283@qq.com

* 通信作者: 束雅春 (1976—), 女, 博士, 主任中药师, 硕士生导师, 从事中药炮制及中药健康产品研究。E-mail: guzheng0512@163.com

KEY WORDS: *Astragali Radix*; stir-frying with rice; gas chromatography-ion mobility spectrometry (GC-IMS); volatile components; principal component analysis (PCA); orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA); odor

黄芪是豆科植物蒙古黄芪 *Astragalus membranaceus* (Fisch.) Bge. var. *mongholicus* (Bge.) Hsiao 或膜荚黄芪 *A. membranaceus* (Fisch.) Bge. 的干燥根,味甘,性微温,归肺、脾经,具有补气升阳、固表止汗等功效^[1]。黄芪药用历史悠久,炮制方法多样,除临床常用的生黄芪和炙黄芪外,尚有盐制、酒制、麸制、米制等。米炒黄芪作为现代临床方特色炮制品种之一,目前部分地区仍在使用,与米共炒可增强黄芪健脾止泻的功效^[2]。明代王肯堂的《证治准绳·幼科》^[3]及清代典籍《得配本草》《时病论》^[4]中也有相关记载,如《时病论》记载黄芪米炒后可以增强其补中益气功效,用于治疗泻痢日久、气虚脱肛等病症。现代药理研究表明,米炒黄芪可以改善脾虚小鼠的胃肠功能障碍^[5],具体表现为提高胃排空率与小肠推进率,与米炒增强黄芪“健脾和胃”功效的传统认知相符。

气味是鉴别中药饮片的标准之一,黄芪用药更以“豆腥味浓者为佳”,该气味源于饮片中多不饱和脂肪酸通过酶促反应生成的小分子醇、酮、醛等挥发性物质^[6]。黄芪经不同方法炮制后,其化学成分种类和含量发生变化,进而影响其药理作用^[7]。目前,黄芪的化学成分研究多集中于糖类和黄酮类,其次为氨基酸类和微量元素类^[8],而炮制对黄芪的气味及挥发性成分的影响尚待系统研究。

气相色谱-离子迁移谱(GC-IMS)在食品^[9-11]、中药^[12-13]和空气污染物^[14]检测方面应用广泛。本研究通过GC-IMS技术对黄芪和米炒黄芪中挥发性有机物进行定性分析和差异性识别,明确米炒对黄芪挥发性成分及气味的影响,以期为米炒黄芪的工艺研究与临床应用提供依据。

1 材料

1.1 仪器 FlavourSpec[®] 气相色谱-离子迁移谱(德国 G. A. S. Gesellschaft für analytische Sensorysysteme mbH 公司); BCE224-1CCN 型电子分析天平[万分之一,赛多利斯科学仪器(北京)有限公司]; 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); CY30 型电磁炒药机(北京霍氏机械制造有限公司)。

1.2 试剂与药物 黄芪(批号 210506,产地甘肃,马鞍山井泉中药饮片有限公司)经南京中医

药大学附属医院朱育凤主任中药师鉴定为豆科植物蒙古黄芪 *Astragalus membranaceus* (Fisch.) Bge. var. *mongholicus* (Bge.) Hsiao 的干燥根。大米(凤阳县板桥一星农业发展有限公司)。

米炒黄芪饮片炮制工艺来自课题组前期研究^[15]。米炒黄芪(MH): 240 °C 条件下炒米 7 min,再投入黄芪(H)饮片,投料比 1:4,炒制 10 min,即得。

2 方法

2.1 分析条件 顶空进样:分别称取 0.5 g 黄芪和米炒黄芪(过四号筛)样品,置于 20 mL 顶空瓶中,80 °C、500 r/min 孵育 15 min 后进样 200 μL,进样针温度 85 °C,每个样品平行测定 3 次。GC: MXT-WAX 色谱柱(15 m × 0.53 mm, 1.0 μm);柱温 60 °C;载气体积流量 0~2 min, 2.0 mL/min, 2~8 min, 10.0 mL/min, 10~20 min, 100.0 mL/min, 20~40 min, 100.0 mL/min。IMS:载气/漂移气 N₂;迁移管温度 45 °C;漂移气体积流量 75.0 mL/min。

2.2 数据处理 采用 GC-IMS 技术,利用系列正构酮标准品构建保留指数校准曲线,据此计算样品中挥发性组分的保留指数。结合 NIST 及 IMS 数据库进行比对,实现对黄芪与米炒黄芪挥发性成分的精准定性与非靶向定量。在此基础上,借助 VOCal 软件的 Reporter、Gallery Plot 及 Dynamic PCA 插件,生成包含三维、二维、差异及指纹图谱在内的多维数据集,从而系统性地解析样品间挥发性成分的组成差异。利用 SIMCA 14.0 软件进行主成分分析(PCA)、正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA),以筛选与炮制工艺相关的关键气味差异成分。同时,利用 Origin Pro 2025 软件对差异挥发性成分进行聚类热图分析,从而直观呈现其分布模式与样品间关系。

3 结果

3.1 黄芪及米炒黄芪 GC-IMS 谱图分析 采用 VOCal 软件的 Reporter 插件直接对比样品之间的谱图差异。为了便于观察,采取俯视图(图 1)进行对比,可知黄芪不同炮制品中挥发性成分略有不同,峰强度相似。

GC-IMS 图谱以蓝色为背景,RIP 峰位于横坐

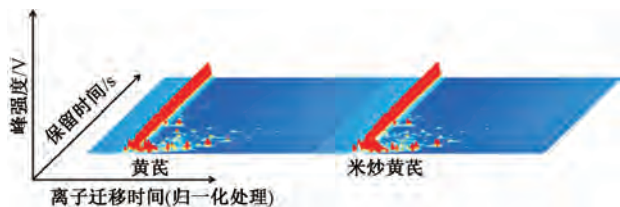


图1 黄芪及米炒黄芪中挥发性物质的气相离子迁移谱 (GC-IMS) 三维谱图

Fig. 1 Three-dimensional GC-IMS spectrum of volatile compounds in *Astragali Radix* and rice-fried *Astragali Radix*

标 1.0 处 (红色竖线), 其余各点代表不同挥发性物质, 其浓度通过颜色梯度表示: 白色为低浓度, 红色为高浓度, 颜色深度与物质含量呈正相关。由图 2 可知, 挥发性成分主要集中于保留时间 200~1 250 s、迁移时间 1.0~2.0 ms 的区间。

以生品黄芪为参照, 将米炒黄芪的谱图进行扣减处理, 得到差异对比图 (图 3)。白色区域表示在米炒黄芪中成分含量无变化, 红色表示该成分含量升高, 蓝色表示含量降低。差异图更直观地揭示了炮制过程使得部分挥发性成分含量发生显著变化, 米炒黄芪中部分物质含量升高, 另有部分物质含量降低, 反映出炮制工艺对黄芪挥发性成分组成的调节作用。

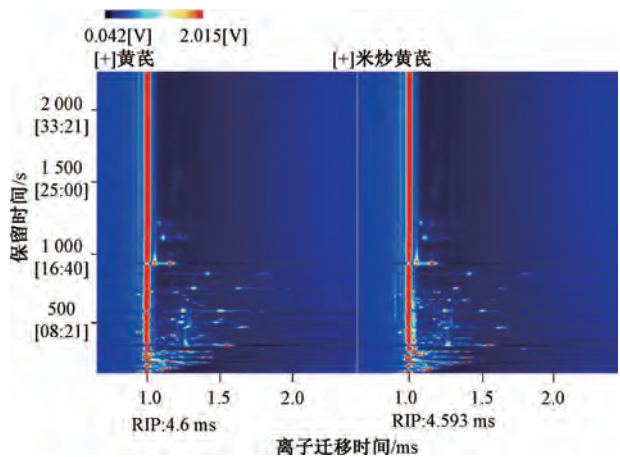


图2 黄芪及米炒黄芪 GC-IMS 图谱

Fig. 2 GC-IMS chromatograms of *Astragali Radix* and rice-fried *Astragali Radix*

3.2 黄芪及米炒黄芪挥发性成分指纹图谱 为了明确黄芪及米炒黄芪中具有差异性的挥发性成分, 对 GC-IMS 二维图谱中所有的待分析峰生成指纹图谱, 见图 4。图中每 1 行代表 1 个样品中挥发性成分的全部信号峰, 图中每 1 列代表同一挥发性物质在不同黄芪样品中的信号峰。红色框中展示的是黄

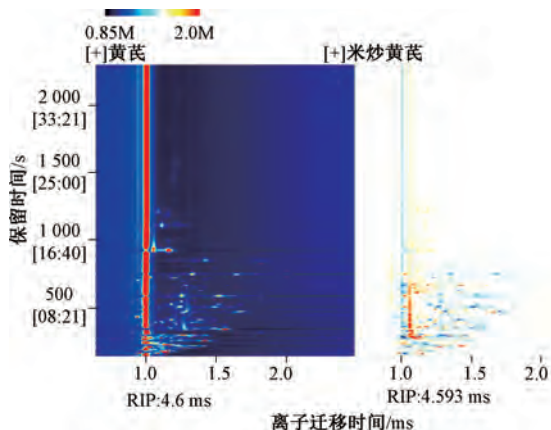


图3 米炒黄芪挥发性成分 GC-IMS 图谱 (以黄芪为参照)
Fig. 3 GC-IMS chromatogram of volatile components in rice-fried *Astragali Radix* (with *Astragali Radix* as reference)

芪中含量较高的挥发性成分, 绿色框中展示的是米炒黄芪中挥发性成分含量较高的部分。由此可知, 黄芪米炒后中挥发性成分含量发生明显变化。

3.3 黄芪及米炒黄芪中挥发性成分定性分析 从 GC-IMS 图谱中共分析得到 117 种挥发性成分, 但受限于 NIST 和 IMS 数据库, 仅鉴定出 100 种成分, 包括酯类、醇类、酮类、醛类、萜类等 12 类化合物, 部分化合物同时具有单体 (M)、二聚体 (D) 及三聚体 (T), 见表 1。在鉴定出的挥发性有机物中, 醇类占比 25%, 醛类 23%, 酮类 15%, 酯类 12%, 萜类 6%, 有机酸类 6%, 硫化物 5%, 腈类 2%, 呋喃类 2%, 吡嗪类 2%, 苯类 1%, 噻唑类 1%, 表明醇类、醛类、酮类和酯类是黄芪中主要的挥发性成分。

3.4 主成分分析 (PCA) 由图 5 可知, PC1 和 PC2 贡献率分别为 92.7%、3.9%, 累计贡献率为 96.6%, 说明二者能较好反映黄芪及米炒黄芪的中体化合物信息, 具有较高的可靠性。样本间聚集度较高, 黄芪及米炒黄芪分别聚为一类, 说明黄芪米炒前后化学成分差异较大, 二者能够被有效区分。

3.5 正交偏最小二乘判别分析 (OPLS-DA) 以筛选出的化合物为因变量、不同炮制品为自变量, 建立 OPLS-DA 模型, 模型拟合与预测能力良好 ($R^2X = 0.963$, $R^2Y = 1$, $Q^2 = 0.998$), 见图 6A。由此可知, 黄芪与米炒黄芪各自聚集, 表明米炒可引起挥发性组分的显著变化。如图 6B 所示, 经过 200 次置换检验, $Q^2 = -0.662$, 说明模型不存在过拟合。以差异倍数 (FC) > 1.5 或 < 0.67 、VIP > 1 及 $P < 0.05$ 为指标, 筛选黄芪及米炒黄芪的差异成

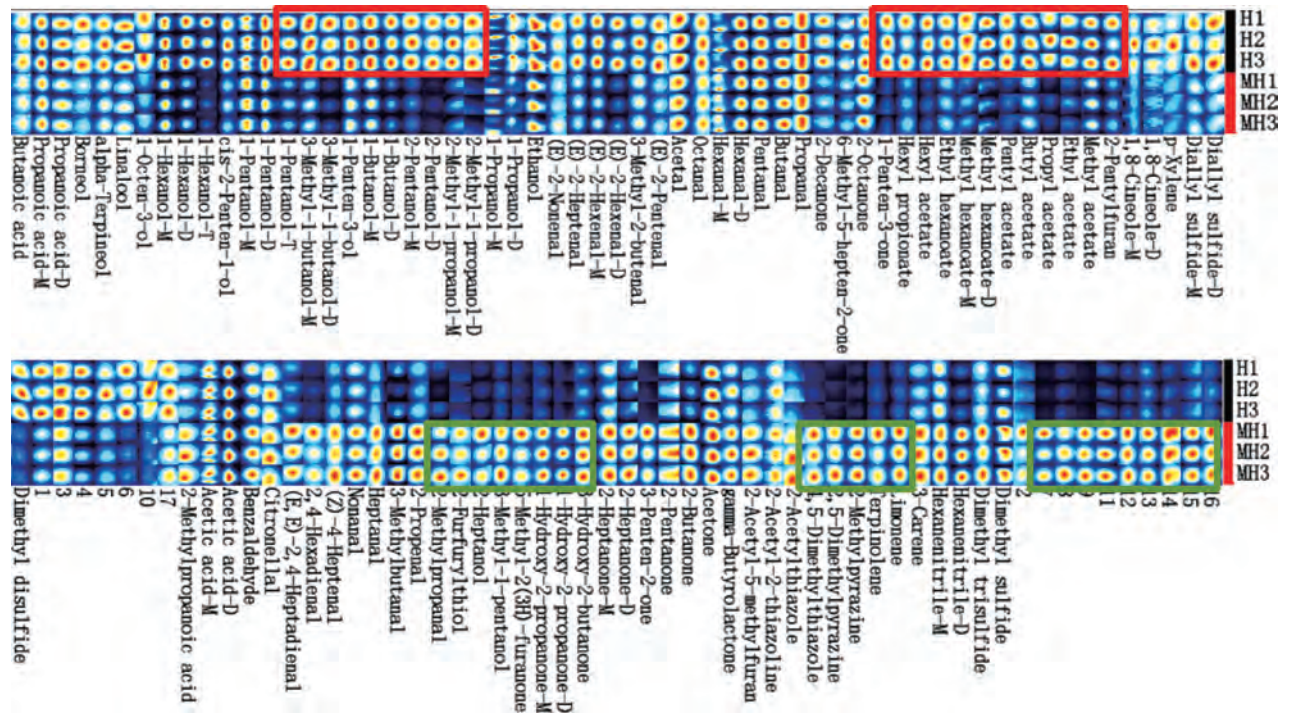


图4 黄芪及米炒黄芪中挥发性成分指纹图谱比较

Fig. 4 Comparison of fingerprint chromatograms of volatile components in *Astragali Radix* and rice-fried *Astragali Radix*

表1 黄芪及米炒黄芪中挥发性成分鉴定结果

Tab. 1 Identification results of volatile components of *Astragali Radix* and rice-fried *Astragali Radix*

序号	分类	名称	CAS号	分子式	分子量/Da	保留指数	保留时间/s	迁移时间/ms
1	酯类	γ-巴豆酰内酯	C96480	C ₄ H ₆ O ₂	86.1	1 611.6	1 197.86	1.09
2		当归内酯	C591128	C ₅ H ₆ O ₂	98.1	1 411.6	798.18	1.13
3		丙酸己酯	C2445763	C ₉ H ₁₈ O ₂	158.2	1 349.3	706.37	1.42
4		乙酸正己酯	C142927	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.2	1 288.2	621.26	1.39
5		己酸乙酯	C123660	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.2	1 247.4	545.87	1.34
6		己酸甲酯 M	C106707	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.2	1 200.1	469.88	1.29
7		己酸甲酯 D	C106707	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.2	1 199.7	469.27	1.69
8		戊酸叶醇酯	C628637	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.2	1 184.7	446.77	1.31
9		乙酸正丁酯	C123864	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.2	1 086.9	322.97	1.24
10		乙酸丙酯	C109604	C ₅ H ₁₀ O ₂	102.1	994.4	247.23	1.48
11		乙酸乙酯	C141786	C ₄ H ₈ O ₂	88.1	890.4	199.35	1.34
12		乙酸甲酯	C79209	C ₃ H ₆ O ₂	74.1	841.6	180.20	1.20
13	有机酸类	丁酸	C107926	C ₄ H ₈ O ₂	88.1	1 673.4	1 365.01	1.18
14		丙酸 M	C79094	C ₃ H ₆ O ₂	74.1	1 570.4	1 098.03	1.12
15		丙酸 D	C79094	C ₃ H ₆ O ₂	74.1	1 570.9	1 099.17	1.27
16		2-甲基丙酸	C79312	C ₄ H ₈ O ₂	88.1	1 566.0	1 087.82	1.15
17		乙酸 M	C64197	C ₂ H ₄ O ₂	60.1	1 485.6	921.05	1.05
18		乙酸 D	C64197	C ₂ H ₄ O ₂	60.1	1 484.8	919.72	1.16
19	酮类	2-癸酮	C693549	C ₁₀ H ₂₀ O	156.3	1 507.8	961.89	1.45
20		6-甲基-5-庚烯-2-酮	C110930	C ₈ H ₁₄ O	126.2	1 354.5	713.67	1.18
21		3-羟基-2-丙酮-M	C116096	C ₃ H ₆ O ₂	74.1	1 320.0	666.86	1.06
22		3-羟基-2-丙酮-D	C116096	C ₃ H ₆ O ₂	74.1	1 319.6	666.25	1.23
23		3-羟基-2-丁酮	C513860	C ₄ H ₈ O ₂	88.1	1 301.2	642.54	1.07
24		2-辛酮	C111137	C ₈ H ₁₆ O	128.2	1 298.3	638.89	1.34
25		2-庚酮 M	C110430	C ₇ H ₁₄ O	114.2	1 193.9	460.76	1.26
26		2-庚酮 D	C110430	C ₇ H ₁₄ O	114.2	1 194.3	461.36	1.63
27		3-戊烯-2-酮	C625332	C ₅ H ₈ O	84.1	1 115.8	354.31	1.35
28		1-戊烯-3-酮	C1629589	C ₅ H ₈ O	84.1	1 042.4	283.80	1.31

续表 1

序号	分类	名称	CAS号	分子式	分子量/Da	保留指数	保留时间/s	迁移时间/ms
29		2-戊酮	C107879	C ₅ H ₁₀ O	86.1	1 002.0	252.46	1.36
30		2-丁酮	C78933	C ₄ H ₈ O	72.1	913.1	208.93	1.25
31		丙酮	C67641	C ₃ H ₆ O	58.1	831.0	176.28	1.12
32		2-乙酰基-2-噻唑啉	C29926418	C ₅ H ₇ NOS	129.2	1 793.2	1 758.55	1.17
33		2-乙酰基噻唑	C24295032	C ₅ H ₅ NOS	127.2	1 624.0	1 229.63	1.13
34	萜类	冰片	C507700	C ₁₀ H ₁₈ O	154.3	1 736.6	1 560.26	1.22
35		萜品油烯	C586629	C ₁₀ H ₁₆	136.2	1 302.1	643.75	1.22
36		1,8-桉叶素 M	C470826	C ₁₀ H ₁₈ O	154.3	1 213.3	489.94	1.30
37		1,8-桉叶素 D	C470826	C ₁₀ H ₁₈ O	154.3	1 214.1	491.15	1.72
38		柠檬烯	C138863	C ₁₀ H ₁₆	136.2	1 210.5	485.68	1.21
39		3-薜烯	C13466789	C ₁₀ H ₁₆	136.2	1 144.3	390.01	1.21
40	噻唑类	4,5-二甲基噻唑	C3581917	C ₅ H ₇ NS	113.2	1 387.6	761.70	1.10
41	醛类	(E)-2-壬烯醛	C18829566	C ₉ H ₁₆ O	140.2	1 534.9	1 018.62	1.41
42		香茅醛	C106230	C ₁₀ H ₁₈ O	154.3	1 529.1	1 006.14	1.23
43		苯甲醛	C100527	C ₇ H ₆ O	106.1	1 518.8	984.58	1.16
44		(E,E)-2,4-庚二烯醛	C4313035	C ₇ H ₁₀ O	110.2	1 514.5	975.51	1.19
45		壬醛	C124196	C ₉ H ₁₈ O	142.2	1 404.5	787.23	1.48
46		(E,E)-2,4-己二烯醛	C142836	C ₆ H ₈ O	96.1	1 402.5	784.19	1.09
47		(E)-2-庚烯醛	C18829555	C ₇ H ₁₂ O	112.2	1 338.2	691.18	1.26
48		(E)-2-己烯醛 M	C6728263	C ₆ H ₁₀ O	98.1	1 233.4	522.16	1.18
49		(E)-2-己烯醛 D	C6728263	C ₆ H ₁₀ O	98.1	1 234.1	523.38	1.52
50		3-甲基-2-丁烯醛	C107868	C ₅ H ₈ O	84.1	1 215.3	492.98	1.09
51		庚醛	C111717	C ₇ H ₁₄ O	114.2	1 199.7	469.27	1.34
52		(E)-戊-2-烯醛	C1576870	C ₅ H ₈ O	84.1	1 148.3	395.23	1.11
53		正己醛 M	C66251	C ₆ H ₁₂ O	100.2	1 100.5	336.47	1.27
54		正己醛 D	C66251	C ₆ H ₁₂ O	100.2	1 100.9	336.90	1.56
55		正戊醛	C110623	C ₅ H ₁₀ O	86.1	1 002.6	252.89	1.42
56		异戊醛	C590863	C ₅ H ₁₀ O	86.1	926.0	214.59	1.41
57		乙缩醛	C105577	C ₆ H ₁₄ O ₂	118.2	901.8	204.14	1.03
58		正丁醛	C123728	C ₄ H ₈ O	72.1	885.1	197.17	1.28
59		2-丙烯醛	C107028	C ₃ H ₄ O	56.1	861.0	187.60	1.06
60		2-甲基丙醛	C78842	C ₄ H ₈ O	72.1	821.3	172.80	1.28
61		丙醛	C123386	C ₃ H ₆ O	58.1	809.0	168.45	1.15
62		辛醛	C124130	C ₈ H ₁₆ O	128.2	1 305.9	648.56	1.41
63		(Z)-4-庚烯醛	C6728310	C ₇ H ₁₂ O	112.2	1 258.5	565.42	1.15
64	硫化物	二甲基三硫醚	C3658808	C ₂ H ₆ S ₃	126.3	1 347.6	703.94	1.29
65		二烯丙基硫醚 M	C592881	C ₆ H ₁₀ S	114.2	1 142.0	386.96	1.12
66		二烯丙基硫醚 D	C592881	C ₆ H ₁₀ S	114.2	1 143.0	388.26	1.33
67		二甲基二硫醚	C624920	C ₂ H ₆ S ₂	94.2	1 087.4	323.41	1.14
68		二甲基硫醚	C75183	C ₂ H ₆ S	62.1	779.4	158.43	0.96
69	腈类	己腈 M	C628739	C ₆ H ₁₁ N	97.2	1 314.4	659.56	1.28
70		己腈 D	C628739	C ₆ H ₁₁ N	97.2	1 314.4	659.56	1.58
71	呋喃类	5-甲基-2-乙酰基呋	C1193799	C ₇ H ₈ O ₂	124.1	1 608.5	1 189.92	1.16
72		2-正戊基呋喃	C3777693	C ₉ H ₁₄ O	138.2	1 245.3	542.22	1.25
73	醇类	α-松油醇	C98555	C ₁₀ H ₁₈ O	154.3	1 697.6	1 436.70	1.20
74		芳樟醇	C78706	C ₁₀ H ₁₈ O	154.3	1 574.3	1 107.11	1.22
75		1-辛烯-3-醇	C3391864	C ₈ H ₁₆ O	128.2	1 470.1	893.90	1.16
76		糠(基)硫醇	C98022	C ₅ H ₆ OS	114.2	1 419.3	810.18	1.10
77		正己醇 M	C111273	C ₆ H ₁₄ O	102.2	1 373.7	741.03	1.33
78		正己醇 D	C111273	C ₆ H ₁₄ O	102.2	1 373.7	741.03	1.64
79		正己醇 T	C111273	C ₆ H ₁₄ O	102.2	1 373.7	741.03	1.99
80		顺-2-戊烯-1-醇	C1576950	C ₅ H ₁₀ O	86.1	1 343.6	698.47	0.94
81		2-庚醇	C543497	C ₇ H ₁₆ O	116.2	1 314.0	658.95	1.39
82		3-甲基-戊醇	C589355	C ₆ H ₁₄ O	102.2	1 356.7	716.71	1.33
83		正戊醇 M	C71410	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1 267.1	581.13	1.25

续表 1

序号	分类	名称	CAS 号	分子式	分子量/Da	保留指数	保留时间/s	迁移时间/ms
84		正戊醇 D	C71410	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1 266.8	580.53	1.51
85		正戊醇 T	C71410	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1 267.5	581.74	1.81
86		异戊醇 M	C123513	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1 221.0	502.10	1.24
87		异戊醇 D	C123513	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1 221.0	502.10	1.49
88		3-戊烯-1-醇	C616251	C ₅ H ₁₀ O	86.1	1 172.7	429.14	0.94
89		正丁醇 M	C71363	C ₄ H ₁₀ O	74.1	1 157.2	407.25	1.18
90		正丁醇 D	C71363	C ₄ H ₁₀ O	74.1	1 157.3	407.42	1.38
91		仲戊醇 M	C6032297	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1 132.5	374.77	1.22
92		仲戊醇 D	C6032297	C ₅ H ₁₂ O	88.1	1 133.2	375.64	1.44
93		异丁醇 M	C78831	C ₄ H ₁₀ O	74.1	1 108.4	345.61	1.17
94		异丁醇 D	C78831	C ₄ H ₁₀ O	74.1	1 108.1	345.17	1.37
95		正丙醇 M	C71238	C ₃ H ₈ O	60.1	1 052.8	292.50	1.11
96		正丙醇 D	C71238	C ₃ H ₈ O	60.1	1 052.8	292.50	1.25
97		乙醇	C64175	C ₂ H ₆ O	46.1	947.0	224.16	1.13
98	吡嗪类	2,5-二甲基吡嗪	C123320	C ₆ H ₈ N ₂	108.1	1 335.1	686.92	1.12
99		2-甲基吡嗪	C109080	C ₅ H ₆ N ₂	94.1	1 281.0	607.28	1.09
100	苯类	对二甲苯	C106423	C ₈ H ₁₀	106.2	1 140.0	384.35	1.07

注：M 为单体，D 为二聚，T 为三聚体。

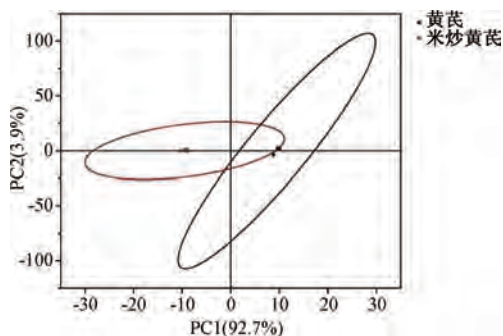


图 5 黄芪及米炒黄芪 PCA 得分图

Fig. 5 PCA score plot of principal component analysis of *Astragali Radix* and rice-fried *Astragali Radix*

分，共得到 59 种。其中，47 种已知成分分别为 (E)-2-庚烯醛、(E)-2-己烯醛 D、(E)-2-己烯

醛 M、(E)-戊-2-烯醛、(E, E)-2, 4-庚二烯醛、(Z)-4-庚烯醛、1, 8-桉叶素 D、正丁醇 D、正丁醇 M、正己醇 D、正己醇 T、3-羟基-2-丙酮 D、3-羟基-2-丙酮 M、1-辛烯-3-醇、正戊醇 D、正戊醇 T、1-戊烯-3-酮、正丙醇 D、(E, E)-2, 4-己二烯醛、2, 5-二甲基吡嗪、5-甲基-2-乙酰基呋喃、2-乙酰基噻唑、2-丁酮、糠(基)硫醇、2-庚醇、2-庚酮 D、异丁醇 D、异丁醇 M、2-甲基丙醛、2-甲基丙酸、2-甲基吡嗪、仲戊醇 D、仲戊醇 M、2-正戊基呋喃、2-丙烯醛、3-萜烯、3-羟基-2-丁酮、异戊醇 D、异戊醇 M、3-甲基-戊醇、异戊醛、3-戊烯-2-酮、4, 5-二甲基噻唑、当归内酯、乙酸正丁酯、顺-2-戊烯-1-醇、二烯丙基硫醚 M。

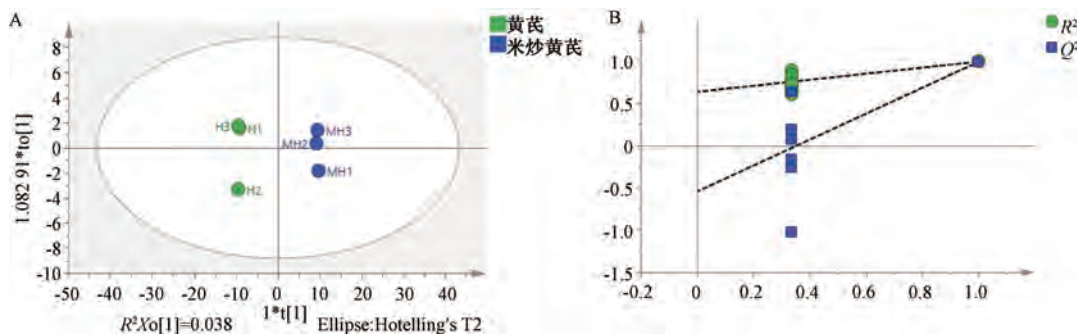


图 6 黄芪及米炒黄芪的 OPLS-DA (A) 及模型交叉验证结果 (B)

Fig. 6 OPLS-DA (A) and model cross-validation results (B) of *Astragali Radix* and rice-fried *Astragali Radix*

3.6 黄芪及米炒黄芪的聚类热图分析 如图 7 所示，从环内到环外分别代表黄芪和米炒黄芪样品，每个样品重复 3 次。扇形部分每一列代表一种挥发性风味成分，红色表示化合物含量较高，蓝色表示

含量较低。由此可知，黄芪和米炒黄芪中差异性挥发性成分的含量变化分为明显的 2 类。黄芪经过米炒后，3-羟基-2-丙酮 M、5-甲基-2-乙酰基呋喃、2-丁酮、2-庚醇、2-庚酮 D、2-甲基丙酸、2-甲基吡

- 部[S]. 北京: 中国医药科技出版社, 2025.
- [2] 李 璇, 刘晨曦, 李明露, 等. 加辅料炒法历史沿革及现代研究进展[J]. 中药材, 2025, 48(3): 788-794.
- [3] 王肯堂. 证治准绳·幼科[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1959.
- [4] 雷 丰. 时病论[M]. 北京: 中国中医药出版社, 2011.
- [5] 赵 薇, 冼小敏. 黄芪不同炮制品对脾虚小鼠胃功能的影响与多糖含量的相关性分析[J]. 中国当代医药, 2017, 24(20): 145-147.
- [6] 谢道生. 黄芪药材豆腥味与品质关联性研究[D]. 太原: 山西大学, 2010.
- [7] 吴红伟, 李东辉, 杨新荣, 等. 黄芪不同炮制方法前后化学成分变化研究新进展[J]. 时珍国医国药, 2021, 32(10): 2488-2490.
- [8] 姚妙诗, 赵毅萌, 王泽琨, 等. UPLC-Q-TOF-MS/MS 结合化学计量学探究黄芪米炒前后的成分差异[J]. 中国实验方剂学杂志, 2025, 31(4): 189-197.
- [9] 赵玉欣, 韩丽娟, 葛世鹏, 等. 基于 GC-IMS 分析不同提取方法对藏羊油风味的影响[J]. 中国油脂, 2025, 50(4): 125-132.
- [10] 田 芸, 孙海燕, 朱 旋, 等. 基于气相离子迁移色谱分析不同贮藏时期蓝莓的挥发性化合物变化[J]. 食品研究与开发, 2024, 45(24): 168-175.
- [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] 陈宏降, 陆耕宇, 王珊珊, 等. 基于 HS-GC-IMS 结合多元统计分析的毛慈菇及其伪品山兰、筒瓣兰的比较研究[J]. 中国药理学杂志, 2025, 60(11): 1135-1143.
- [13] 宋艺君, 郭 涛, 高阳丽, 等. GC-IMS 法比较黄精不同炮制品特征气味物质差异[J]. 中国药理学杂志, 2022, 57(16): 1329-1336.
- [14] 武 旭, 钟 恋, 王 晶, 等. 基于气相色谱-离子迁移色谱法结合分光测色仪技术分析不同胆汁及其所制胆南星的差异性[J]. 中华中医药杂志, 2023, 38(12): 5700-5708.
- [15] 姚妙诗, 谢怡君, 李明露, 等. AHP-CRITIC 综合加权联用 BBD-RSM 优化米炒黄芪炮制工艺[J/OL]. 中药材, 2025 (10): 2468-2473 (2025-10-28) [2026-03-26]. <https://doi.org/10.13863/j.issn1001-4454>. 2025. 10. 011.
- [16] 高 帆, 景 琪, 马倩倩, 等. 米炒炮制对黄芪化学成分及其豆腥味的影 响[J]. 时珍国医国药, 2025, 36(18): 3478-3483.
- [17] 邓梓萌, 刘思迪, 赵 婧, 等. 大豆蛋白植物肉豆腥味的形成与去除研究进展[J]. 食品工业科技, 2025, 46(24): 1-10.
- [18] 冯大炎, 周运友. Maillard 反应与 Strecker 降解及其对食品风味与食品营养的影响[J]. 安徽师大学报(自然科学版), 1993, 16(2): 79-84.
- [19] 唐立伟, 田红玉, 孙宝国, 等. 亮氨酸与还原糖组成的 Maillard 模型体系形成异戊醛[J]. 食品科学, 2009, 30(17): 145-148.
- [20] 徐 瑶. “焦三仙”炒焦增强消食导滞的“焦香气味”物质及其协同增效作用机理研究[D]. 成都: 西南交通大学, 2018.
- [21] 杨彬彬, 崔 宁, 王世军. 基于 Wnt/ β -catenin 信号通路探讨黄芪多糖对脾虚湿困大鼠小肠黏膜损伤修复作用机制[J]. 南京中医药大学学报, 2022, 38(1): 77-82.
- [22] 高传强, 谈甜甜, 信亚伟. 芝麻香型白酒提取物及 4 种特征成分的抗氧化活性[J]. 酿酒科技, 2015(3): 58-60.
- [23] 崔 宁. 基于全基因表达谱的黄芪及其拆分组分健脾祛湿机制研究[D]. 济南: 山东中医药大学, 2015.