

电子自旋共振波谱法检测电子束辐照百蕊草

王海洋¹, 蒲婧哲^{2,3*}, 严露⁴, 方青⁵, 宋梦桃⁵, 何于凤⁵, 张群林^{1*}, 张亚中^{2,3*}

[1. 安徽医科大学药学院, 安徽 合肥 230032; 2. 安徽省食品药品检验研究院, 安徽 合肥 230051; 3. 国家药品监督管理局中药质量研究与评价重点实验室, 安徽 合肥 230051; 4. 安徽中医药大学药学院, 安徽 合肥 230012; 5. 国仪量子技术(合肥)股份有限公司, 安徽 合肥 230088]

摘要: 目的 建立电子自旋共振(ESR)波谱法检测电子束辐照百蕊草。方法 3批药材分别经电子束辐照1、3、6、10、15、20 kGy后,考察ESR波谱特征。探讨ESR信号强度与辐照剂量、贮藏时间的关系。附加计量法(分别附加4、7、10、13、16、20 kGy)估算初始剂量。结果 不同辐照剂量下ESR信号强度与辐照剂量均呈正相关线性关系,并且随着贮藏时间延长而衰减,其中产生诱导信号的高剂量程度较小。初始辐照剂量分别为6、10、15 kGy时,可进行定量。结论 ESR波谱法能较好地鉴别电子束辐照百蕊草,并且可对该药材初始辐照剂量进行精准估算,为其溯源提供了参考。

关键词: 百蕊草; 电子束; 辐照; 电子自旋共振(ESR)波谱法

中图分类号: R284.1

文献标志码: A

文章编号: 1001-1528(2026)05-1720-06

doi: 10.3969/j.issn.1001-1528.2026.05.043

辐照灭菌作为冷灭菌技术,其穿透力强,能耗少,操作简便^[1],辐照的高能射线不仅能直接破坏微生物的DNA,还能间接激发自由基的生成^[2],故近年来已成为中药灭菌主流方式,但很多企业为了达到限度标准会进行超剂量辐照,故亟需建立辐照鉴别、剂量追溯方法。电子自旋共振(ESR)波谱法可检测辐照诱导的自由基和顺磁性物质^[3],其原理为样品经电离辐照后会产生一定数量的稳定自由基,能被ESR波谱仪检测到,其操作简便,灵敏度高,广泛应用于植物^[4-5]、肉类^[6]、医疗器械^[7]检测,并且涉及中药领域,如杜仲^[8]、蛇床子、泽泻^[9]等,适用前景广阔。

百蕊草主要含有黄酮、酚类等成分^[10],课题组前期发现,辐照会降低该药材中5-O-阿魏酰奎宁酸等有效成分的含量^[11],从而影响其品质^[12],故有必要对其进行监管。本实验参考相关标准结合

文献[13-15],建立ESR波谱法检测电子束辐照百蕊草,探索其信号强度的动力学规律,并结合附加计量法进行验证,以期对相关指导原则的建立提供一定参考。

1 材料

1.1 仪器 XP26/ML204 电子天平 [梅特勒-托利多仪器(上海)有限公司]; EPR200M 台式电子顺磁共振谱仪 [国仪量子技术(合肥)股份有限公司]; RADPRO 台式X射线辐照器(德国Radpro公司); DZ-10/20 电子直线加速器(合肥杰能辐照科技有限公司); EPR 石英玻璃样品管(4 mm×250 mm,杭州雷迈科技有限公司); Sterilin™ 50 mm 带盖皮氏皿(美国Thermo Fisher Scientific公司)。

1.2 试剂 4-羟基-2,2,6,6-四甲基哌啶-1-氧自由基(Tempol,批号39006,含量≥99.9%,美国MedChemExpress公司)。

收稿日期: 2024-10-30

基金项目: 安徽省科技重大专项项目(202303a07020005); 安徽省自然科学基金(2408085MH232)

作者简介: 王海洋(1998—),男,硕士生,研究方向为中药、天然药物质量控制。Tel: 18382330690, E-mail: 497049895@qq.com

*共同第一作者: 蒲婧哲(1982—),女,副主任中药师,研究方向为中药质量研究与评价。Tel: 15155938552, E-mail: pujingzhe@163.com

*通信作者: 张群林(1973—),女,博士,教授,研究方向为药物分析新材料和新技术。Tel: 13965424030, E-mail: qlzhang@ahmu.edu.cn

张亚中(1976—),男,博士,主任中药师,研究方向为中药、天然药物质量控制。Tel: 17302862573, E-mail: 282483507@qq.com

网络出版日期: 2025-05-21

网络出版地址: <http://kns.cnki.net/kcms/detail/31.1368.R.20250521.1029.002.html>

1.3 药材 百蕊草共3批(编号BRC-1、BRC-2、BRC-3,产地甘肃省天水市麦积区、陕西省铜川市宜君县、山西省临汾市洪洞县),经安徽省食品药品检验研究院张亚中博士鉴定为檀香科植物百蕊草 *Thesium Chinense* Turcz. 的干燥全草。

2 方法

2.1 药材处理 3批药材粉碎成细粉,过4号筛,每批取10g,置于自封袋中,常温避光保存。

2.2 实际辐照剂量确定 3批药材各平行取7份,其中1份作为阴性样品(0kGy),其余6份送至合肥杰能辐照科技有限公司进行处理,设置初始辐照剂量分别为1、3、6、10、15、20kGy,再采用重铬酸钾剂量计测得实际辐照剂量分别为1.23、3.41、6.85、11.02、15.60、20.74kGy,密封避光保存。

2.3 附加辐照剂量确定 取“2.2”项下初始辐照剂量分别为6、10、15kGy的药材粉末(BRC-3)适量,平行6份,采用电子加速器(额定能量10MeV、功率10kW)进行重复辐照处理,设置辐照剂量分别为4、7、10、13、16、20kGy,再采用重铬酸钾剂量计测得附加辐照剂量分别为3.99、7.53、11.05、12.17、15.78、20.04kGy,密封避光保存。

2.4 Tempol 溶液制备 精密称取Tempol粉末8.7mg,置于50mL量瓶中,纯水溶解并定容至刻度,取0.1mL,置于1mL量瓶中,纯水定容至刻度,即得(浓度为0.1mmol/mL)。

2.5 ESR 检测 称取辐照后药材约50mg,平行3

份,重复2次,装入外径4mm的EPR玻璃管中,压实,封口膜密封,放入波谱仪谐振腔中,设定工作条件为中心磁场(3506±3)Gs;中心频率(9.8318±0.0005)GHz;扫描宽度100Gs;扫描范围3450~3550Gs;增益303Gs;调制振幅3Gs;衰减值21dB;信号接收调制频率100kHz;时间常数0.2s;转换时间100ms;扫描点数1000点;温度室温。以ESR信号强度计算相对自由基浓度,Tempol溶液校正。

2.6 数据分析 分别采用EPR Data Processing、Microsoft Excel 2021、Origin 2018软件进行数据分析和绘图。

3 结果

3.1 ESR 定性检测

3.1.1 辐照剂量与 ESR 信号强度的关系 将“2.2”项下未辐照、辐照样品的检测结果导入EPR Data Processing软件,计算ESR信号强度,并以辐照剂量为横坐标(X),ESR信号强度为纵坐标(Y)进行回归,结果见表1。由此可知,3批药材辐照前后ESR信号强度差异均较大,相同辐照剂量下不同产地药材之间的也存在明显差异;各辐照剂量下BRC-3的ESR信号强度大于BRC-1、BRC-2的,主要是因为它本身具有更多的稳定自由基、糖含量和顺磁性物质,受辐照激发后产生更多的稳定自由基^[16-18];3批药材在1~20kGy范围内线性关系良好,可进行定量分析。

表1 辐照剂量与 ESR 信号强度的关系 ($\bar{x}\pm s, n=3$)

辐照剂量/kGy	BRC-1	BRC-2	BRC-3
0	63.17±2.96	69.57±2.66	187.50±7.37
1	99.51±10.84	156.30±8.13	293.14±33.09
3	163.97±35.13	245.73±6.40	515.51±23.36
6	321.52±12.82	444.86±31.86	838.71±28.07
10	450.88±16.88	604.08±7.91	1208.77±58.36
15	585.17±64.82	790.22±18.36	1568.98±150.74
20	722.59±137.15	994.31±20.49	2022.67±106.43
回归方程	$Y=32.816X+90.798$	$Y=43.788X+137.85$	$Y=89.356X+255.53$
r	0.9848	0.9916	0.9955

3.1.2 ESR 信号特征 取辐照剂量分别为0、1、3、6、10、15、20kGy的药材各3批,进行ESR测试,结果见图1。由此可知,未辐照的阴性样品呈现平滑、峰窄、信号低的单个信号特征峰,为本底信号,其中心磁场的波谱特征参数 g_0 为2.0034±0.0010,磁场宽度约为28Gs;1、3kGy辐照的ESR波谱图中心磁场范围增宽、信号增强、峰面

积增加,根据特征峰磁场宽度和信号强度可与阴性样品区分,但因辐照剂量小、能量低而对药材的影响较小,未产生明显辐照诱导信号;6、10、15、20kGy辐照的ESR波谱图均产生了区别于本底信号的4个特征峰,可能是糖类成分受到足够辐照能量激发产生的自由基信号,四者g因子分别为2.0160±0.0010、2.0088±0.0027、1.9930±

0.002 1、1.991 3±0.000 8，与阴性样品差异显著。综上所述，辐照后波谱信号增强，峰形展宽，峰面积增大，具有辐照依赖性；虽然在较低辐照剂量下3批药材 ESR 检测结果与阴性样品的相似，但为6~20 kGy 时差异明显；4 个特征峰在 3 批药材中

稳定存在，*g* 因子在一定范围内恒定，可标定为共有辐照特征峰。另外，BRC-2、BRC-3 在辐照剂量为 3 kGy 时已有诱导趋势，而为 6 kGy 时诱导特征峰比 BRC-1 的更明显。

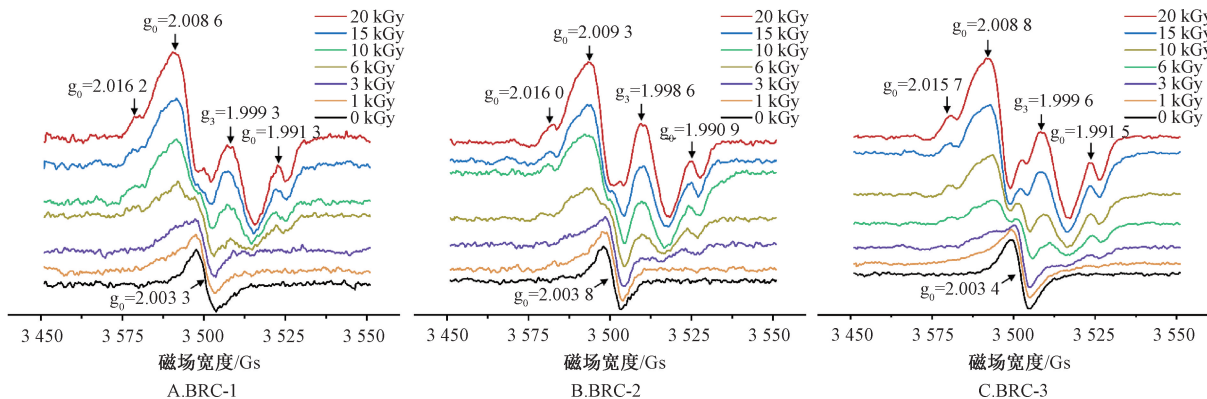


图1 不同辐照剂量下百蕊草 ESR 波谱图

3.2 方法学考察

3.2.1 精密性试验 采用毛细管吸取“2.4”项下 Tempol 溶液 50 μL，封口泥将毛细管两端密封，装至 EPR 样品管中，在“2.5”项工作条件下进样测定 6 次，测得 ESR 信号强度 RSD 为 1.15%，表明仪器精密性良好。

3.2.2 重复性试验 取辐照剂量为 10 kGy 的 3 批药材，按“2.5”项下方法平行装样 6 份，在“2.5”项工作条件下进样测定，测得 ESR 信号强度 RSD 分别为 2.29%、2.23%、2.52%，表明该方法重复性良好。

3.2.3 中间精密性试验 取辐照剂量为 10 kGy 的 3 批药材，按“2.5”项下方法平行装样，于 0、2、4、6、8、10 h 在“2.5”项工作条件下进样测定，测得 ESR 信号强度 RSD 分别为 2.66%、2.40%、2.50%，表明中间精密性良好。

3.3 ESR 衰减动力学研究

取 ESR 样品管中密封避光常温保存的药材，于辐照后第 1、15、30、60、90、120、150 天进行 ESR 测试，以贮藏时间为横坐标 (X)，ESR 信号强度为纵坐标 (Y) 进行回归，结果见图 2、表 2。由图 2 可知，ESR 信号强度随着贮藏时间延长而逐渐衰减，表明辐照诱导的自由基含量衰减或被清除，在 30 d 内程度最大，其中辐照 1 kGy 后衰减约 50%，3~20 kGy 后衰减约 15%~30%，之后逐渐平缓；在 150 d 时，辐照 1 kGy 后 ESR 信号强度与阴性样品的接近，3~20 kGy 后仍高于阴性样品的，表明药材最佳检测时间在 30 d 内，并且辐照剂量超过 1 kGy 时，在贮存 150 d 后仍可采用 ESR 法进行定性鉴别。由表 2 可知，辐照 1~20 kGy 后 ESR 信号强度与贮藏时间不呈线性关系，故不能估算出各剂量每天 ESR 信号衰减值。

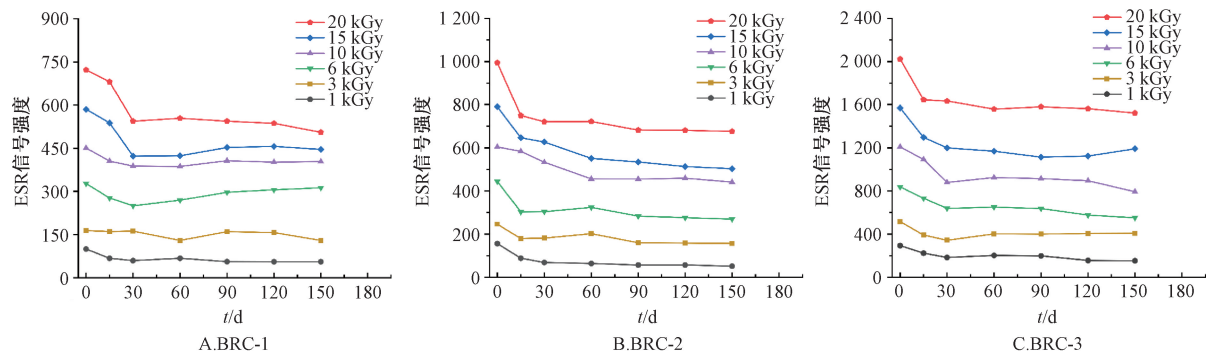


图2 百蕊草 ESR 信号强度衰减曲线

3.4 ESR 定量检测

3.4.1 附加计量法估算初始辐照剂量 取“2.3”

项下 4~20 kGy 附加剂量辐照的药材进行 ESR 检测，结果见图 3，再以辐照剂量为横坐标 (X)，

表2 ESR信号强度与贮藏时间(150 d)的关系

辐照剂量/kGy	BRC-1	BRC-2	BRC-3
1	$Y = -0.18X + 76.32 (r = 0.5412)$	$Y = -0.27X + 87.19 (r = 0.8129)$	$Y = -0.69X + 247.81 (r = 0.6608)$
3	$Y = -0.15X + 161.86 (r = 0.3128)$	$Y = -0.43X + 211.79 (r = 0.5650)$	$Y = -0.24X + 424.38 (r = 0.0657)$
6	$Y = 0.05X + 298.83 (r = 0.0052)$	$Y = -0.76X + 365.23 (r = 0.4969)$	$Y = -1.52X + 762.84 (r = 0.7647)$
10	$Y = -0.63X + 483.28 (r = 0.3148)$	$Y = -1.24X + 603.32 (r = 0.5148)$	$Y = -2.04X + 1095.20 (r = 0.6512)$
15	$Y = -0.53X + 514.09 (r = 0.2383)$	$Y = -1.59X + 700.82 (r = 0.7634)$	$Y = -1.32X + 1359.60 (r = 0.2686)$
20	$Y = -1.14X + 666.39 (r = 0.6273)$	$Y = -1.40X + 839.75 (r = 0.4879)$	$Y = -2.74X + 1788.90 (r = 0.5656)$

ESR信号强度为纵坐标(Y)进行回归,结果见表3~4(当Y为0时,校正曲线与横坐标的交点的绝对值即为估算的初始辐照剂量^[19-20])。由图3可知,附加剂量辐照后ESR波谱在初始辐照剂量的谱图上均保留辐照诱导信号。由表3可知,ESR信

号强度与附加辐照剂量之间的线性关系良好,可用于定量分析。由表4可知,估算剂量与实际吸收剂量的误差在0.61~0.68 kGy之间,而与理论初始剂量的误差在0.02~1.63 kGy之间,表明该方法较准确。

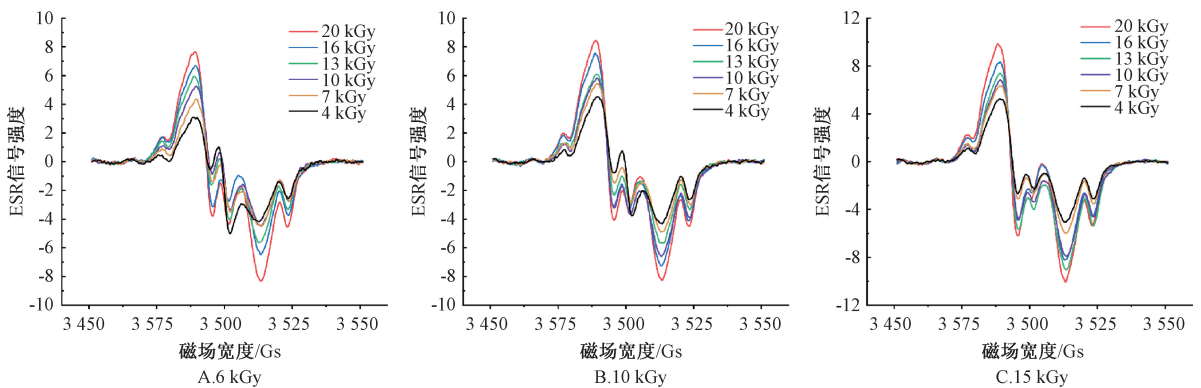


图3 附加辐照剂量下百蕊草ESR波谱图

表3 附加辐照剂量下百蕊草ESR信号强度($\bar{x} \pm s, n=6$)

理论剂量/kGy	实际剂量/kGy	初始6 kGy	初始10 kGy	初始15 kGy
4	3.99	1 452.80±9.44	1 958.71±14.16	2 596.05±54.09
7	7.53	1 863.70±9.52	2 402.89±47.70	3 089.80±26.32
10	11.05	2 295.03±2.57	2 744.98±38.11	3 599.04±23.18
13	12.17	2 656.37±91.24	3 192.67±78.50	3 952.01±9.59
16	15.78	3 063.83±21.05	3 558.05±53.13	4 456.84±23.71
20	20.04	3 499.00±47.04	3 992.02±103.33	4 817.42±30.85
回归方程		$Y = 128.75X + 969.73$	$Y = 127.71X + 1 484.90$	$Y = 140.81X + 2 109.10$
r		0.997 9	0.997 3	0.990 4

表4 初始辐照剂量估算结果

初始剂量/kGy	实际剂量/kGy	估算剂量/kGy	偏差值/%
6	6.85	7.53	9.93
10	11.02	11.63	5.54
15	15.60	14.98	-3.97

3.4.2 附加剂量法适应性 分别于贮藏第20、30、60、90天,取“2.3”项下4、7、10、13、16、

20 kGy附加剂量辐照的药材进行ESR检测,按“3.4.1”项下方法估算并计算偏差,结果见表5。由此可知,90 d内估算剂量(6、10、15 kGy)与实际辐照剂量(6.85、11.02、15.60 kGy)仍接近,表明即使贮藏时间较长,该方法也能对初始辐照剂量进行较精准地估算。

表5 不同贮藏时间下初始剂量估算、偏差计算结果(n=6)

贮藏第10天		贮藏第20天		贮藏第30天		贮藏第60天		贮藏第90天	
估算剂量/kGy	偏差率/%	估算剂量/kGy	偏差率/%	估算剂量/kGy	偏差率/%	估算剂量/kGy	偏差率/%	估算剂量/kGy	偏差率/%
7.53	9.93	6.78	-1.02	7.08	3.36	7.87	14.89	7.58	10.66
11.63	5.54	11.14	1.09	10.89	-1.18	10.61	-3.72	11.70	6.17
14.98	-3.97	14.38	-7.82	16.52	5.90	15.21	-2.50	14.47	-7.24

4 讨论

植物性来源样品的 ESR 检测主要分为“类纤维素” ESR 波谱和“类糖” ESR 波谱,前者主要包括草药和香辛料,大多数草本、木本植物属于此类,后者主要是含糖量较高的干果以及单、双糖含量高的植物样本^[2]。“类糖” ESR 波谱的具有多线态的诱导信号,会根据单、双糖自由基的类型和含量比例呈现复合 ESR 波谱信息,另外糖类自由基会在晶格中固定,难以重组还原因此稳定性极高,衰减缓慢^[21]。本研究中的3批百蕊草在大于3 kGy 辐照时表现出明显的“类糖”信号,其随贮藏时间的衰减动力学研究表明其信号稳定,在150 d内均可采用 ESR 法对百蕊草进行辐照定性检测。

本研究辐照中药的定量方法是基于 ESR 检测原理和辐照电离原理,对样品初始辐照剂量进行估算,从侧面来说是对辐照样品产生的自由基进行相对定量检测。由于高辐照会影响百蕊草的有效成分^[11],因此追溯其初始辐照剂量并加以控制对于百蕊草药材及其制剂的质量保证具有现实价值。国内外辐照剂量的定量研究甚少,有文献报道,拟合了辐照孜然和小茴香等香料的 ESR 信号强度与辐照剂量的指数和3次多项式关系式来估算初始剂量^[22-23]。ESR 信号强度与辐照剂量的数学关系式对估算辐照剂量尤为重要,本研究发现辐照百蕊草的 ESR 信号强度与辐照剂量的正相关线性关系,用以估算初始剂量较可靠。本研究首次采用 ESR 法结合附加计量法对3批辐照百蕊草的初始剂量进行定量,拟合了 ESR 信号强度与辐照剂量之间的线性方程,成功建立了辐照百蕊草的定量数学模型,并且研究的初始剂量(6、10、15 kGy)样品在90 d内的估算值与实际值偏差较小,完成了在较长时间范围内追溯百蕊草的辐照情况,为辐照百蕊草的定性、定量检测方法完善和市场监管提供了参考。

5 结论

本研究首次采用 ESR 波谱法对百蕊草进行定性鉴别,探索了其 ESR 信号强度与贮藏时间的衰减关系,并结合附加计量法对其初始辐照剂量进行估算。从定性表征结果可知,辐照会使百蕊草产生大量自由基,当辐照剂量充足(>3 kGy)时会出现辐照诱导信号,产生“类糖” ESR 波谱,且 ESR 信号强度与辐照剂量呈正相关;90 d 贮藏期内采用附加计量法对初始辐照剂量进行估算仍较为准确,估算剂量与药材实际辐照剂量接近。此外,

如果能探索样品贮藏环境或水分等因素的影响,加以控制自由基的衰减,辐照剂量的估算将更加精准,对辐照中药市场控制和辐照监管体系的建立具有重要意义。

参考文献:

- [1] 严露,蒲婧哲,张亚中. 钴⁶⁰- γ 辐照灭菌对中药安全性和有效性的影响[J]. 世界最新医学信息文摘, 2021, 21(97): 106-109.
- [2] Aleksieva K I, Yordanov N D. Various approaches in EPR identification of gamma-irradiated plant foodstuffs: A review[J]. *Food Res Int*, 2018, 105: 1019-1028.
- [3] 苏吉虎,杜江峰. 电子顺磁共振波谱: 原理和应用[M]. 北京: 科学出版社, 2022.
- [4] Tomaiuolo M, Mangiacotti M, Trotta G, et al. Identification of X-ray irradiated walnuts by ESR spectroscopy[J]. *Radiat Phys Chem*, 2018, 150: 35-39.
- [5] Sezer M Ö, Kaplan N, Sayin U, et al. ESR analysis of natural and gamma irradiated coriander (*Coriandrum sativum* L.) seeds[J]. *Radiat Eff Defect S*, 2017, 172(11): 815-823.
- [6] Escudero R, Valhondo M, Ordoñez J A, et al. Electron spin resonance (ESR) spectroscopy study of dry-cured ham treated with electron-beam[J]. *Food Chem*, 2012, 133(4): 1530-1537.
- [7] Turker N S, Özer A Y, Çolak Ş, et al. ESR investigations of gamma irradiated medical devices[J]. *Appl Radiat Isotopes*, 2017, 130: 121-130.
- [8] 梁倩,李咏富,何扬波,等. 电子自旋共振波谱法检测⁶⁰Co- γ 射线辐照中药材[J]. 中成药, 2022, 44(1): 310-313.
- [9] Baek M, Ameer K, Jo Y, et al. Microbial assessment of medicinal herbs (*Cnidii Rhizoma* and *Alismatis Rhizoma*), effects of electron beam irradiation and detection characteristics[J]. *Food Sci Biotechnol*, 2019, 29(5): 705-715.
- [10] 陈培玉,陈晓清,吴超,等. 百蕊草的开发利用研究进展[J]. 中国野生植物资源, 2020, 39(6): 48-52.
- [11] 王海洋,蒲婧哲,严露,等. 基于UPLC特征图谱和指标成分定量的百蕊草电子束辐照前后品质影响研究[J]. 现代中药研究与实践, 2024, 38(2): 53-59.
- [12] 严露,蒲婧哲,杨勇,等. 基于指纹图谱联合化学计量学评价不同产地百蕊草质量的研究[J]. 药物分析杂志, 2023, 43(1): 141-152.
- [13] 冯敏,李澧,杨萍,等. ESR波谱法对含结晶糖辐照农产品的检测[J]. 安徽农业科学, 2015, 43(20): 281-282.
- [14] 汪昌保,赵永富,哈益明,等. ESR法在五种植物类辐照食品检测中应用[J]. 核农学报, 2013, 27(5): 613-618.
- [15] Ahn J J, Akram K, Jo D, et al. Investigation of different factors affecting the electron spin resonance-based characterization of gamma-irradiated fresh, white, and red ginseng[J]. *J Ginseng Res*, 2012, 36(3): 308-313.
- [16] Rumi Y, Shojiro K, Masatoshi O. Analysis of electron spin resonance spectra of irradiated gingers: Organic radical components derived from carbohydrates[J]. *Radiat Phys Chem*,

- 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@