

基于含量测定、化学计量学和熵权 TOPSIS 法评价孔雀草质量

程 静¹, 陈俭勤¹, 胡海琦¹, 李志国²

[1. 浙江大学医学院附属金华医院 (金华市中心医院) 药学部, 浙江 金华 321000; 2. 浙江中医药大学药学院, 浙江 杭州 311402]

摘要: **目的** 评价孔雀草质量。**方法** HPLC 法测定山柰酚-3-*O*- β -*D*-葡萄糖苷、万寿菊苷、槲皮万寿菊素、槲皮素-7-*O*- α -*L*-鼠李糖苷、山柰酚-7-*O*- α -*L*-鼠李糖苷、万寿菊素、山柰酚、 α -三联噻吩、胡萝卜苷、 β -谷甾醇含量, 灰分测定法测定总灰分、酸不溶性灰分含量, 进行主成分分析、正交偏最小二乘判别分析, 构建熵权 TOPSIS 法模型并进行排序。**结果** 18 批药材中 10 种成分平均含量分别为 0.894、1.790、1.193、0.169、0.520、0.661、0.223、1.157、0.096、0.707 mg/g, 总灰分、酸不溶性灰分平均含量分别为 6.1%、2.0%。各批药材聚为 3 类, 2 个主成分累积方差贡献率为 88.920%, α -三联噻吩、万寿菊苷、 β -谷甾醇、万寿菊素、山柰酚和槲皮万寿菊素为质量差异成分。四川、贵州产药材排序较高。**结论** 含量测定、化学计量学结合熵权 TOPSIS 法简便准确, 可为孔雀草质量控制及相关标准制定提供科学依据。

关键词: 孔雀草; 质量评价; 含量测定; 主成分分析; 正交偏最小二乘判别分析; 熵权 TOPSIS 法

中图分类号: R282 **文献标志码:** A **文章编号:** 1001-1528(2026)08-2520-07

doi: 10.3969/j.issn.1001-1528.2026.08.004

Quality evaluation of *Tagetes patula* based on content determination, chemometrics and entropy weight TOPSIS method

CHENG Jing¹, CHEN Jian-qin¹, HU Hai-qi¹, LI Zhi-guo²

[1. Department of Pharmacy, Jinhua Hospital Affiliated to Zhejiang University School of Medicine (Jinhua Central Hospital), Jinhua 321000, China; 2. School of Pharmacy, Zhejiang Chinese Medical University, Hangzhou 311402, China]

KEY WORDS: *Tagetes patula* L.; quality evaluation; content determination; principal component analysis; orthogonal partial least squares discriminant analysis; entropy weight TOPSIS method

孔雀草为菊科万寿菊属植物孔雀草 *Tagetes patula* L. 的全草^[1], 在我国广泛种植^[2-3], 主要含黄酮、噻吩、甾醇、生物碱等成分^[4-5], 该药材抗炎活性物质为挥发油与总黄酮^[6], 其中后者代表成分有山柰酚-3-*O*- β -*D*-葡萄糖苷、万寿菊苷、槲皮万寿菊素、槲皮素-7-*O*- α -*L*-鼠李糖苷、山柰酚-7-*O*- α -*L*-鼠李糖苷、万寿菊素、山柰酚等^[7-9]。前期报道, α -三联噻吩可抑制舞毒蛾幼虫生长发育^[10]; 甾醇类化合物胡萝卜苷具有良好的抗肿瘤、抗氧化、神经保护等药理作用^[11], 而 β -谷甾醇具有广泛的生理活性^[12]。同时, 孔雀草具有清热利湿、止咳、止痛功效, 内服可治疗上呼吸道感染、痢疾、咳嗽、百日咳、牙痛、风火眼痛, 而外用能

治疗腮腺炎、乳腺炎, 还具有抗抑郁、抗菌、抗炎、降血压、治疗心血管疾病等作用^[6,13]。目前, 2025 年版《中国药典》和地方标准均未收录孔雀草, 文献 [14] 仅对万寿菊素进行含量测定, 故需对该药材质量进行全面控制与评价。

化学计量学^[15-16]通过统计学方法来对中药复杂化学数据进行特征提取和处理以达到降维目的, 其优势为利用多变量数值分析对同类或异类药材进行分组, 常用方法为聚类分析、主成分分析、判别分析等, 并且常将多个方法结合应用, 从而解决其质量控制与评价的部分难题。熵权逼近理想解排序 (TOPSIS) 法^[17-18]以建立的最理想/不理想的方案为参照系, 计算各参评方案与参照系的距离, 根据

与最理想方案距离越近，参评方案越优的原则进行排序，从而实现其质量评价。因此，熵权 TOPSIS 法的多目标决策与中药多指标的综合质量评价相吻合，相关应用越来越广。

本实验采用 HPLC 法对孔雀草中山柰酚-3-*O*-β-*D*-葡萄糖苷、万寿菊苷、槲皮万寿菊素、槲皮素-7-*O*-α-*L*-鼠李糖苷、山柰酚-7-*O*-α-*L*-鼠李糖苷、万寿菊素、山柰酚、α-三联噻吩、胡萝卜苷、β-谷甾醇进行含量测定，检测总灰分、酸不溶性灰分含量，构建熵权 TOPSIS 法模型，并对不同产地药材质量进行排序，旨在为其道地性开发和内在质量控制提供科学依据。

1 材料

1.1 试剂与药材 山柰酚（批号 110861-202214，纯度 97.4%）、β-谷甾醇（批号 110851-201909，纯度 92.7%）对照品均购于中国食品药品检定研

究院；山柰酚-3-*O*-β-*D*-葡萄糖苷（批号 T6S1101-240944，纯度 99.9%）、万寿菊苷（批号 T8294-227992，纯度 99.8%）、槲皮万寿菊素（批号 T8114-227600，纯度 99.8%）、槲皮素-7-*O*-α-*L*-鼠李糖苷（批号 TN1113-232216，纯度 98.6%）、α-三联噻吩（批号 T5650-140334，纯度 99.2%）、万寿菊素（批号 TCS1856-117948，纯度 99.9%）、胡萝卜苷（批号 T3871-D33422，纯度 99.7%）对照品均购于上海陶术生物科技有限公司；山柰酚-7-*O*-α-*L*-鼠李糖苷对照品（批号 CFS202201，纯度 98.0%）购于武汉天植生物技术有限公司。孔雀草共 18 批，经浙江中医药大学药学院李志国副教授鉴定为正品，采集后晒干，保存于浙江中医药大学中药标本室，具体见表 1。乙腈、磷酸均为色谱纯（国药集团化学试剂有限公司）；其余试剂均为分析纯。

表 1 孔雀草信息
Tab. 1 Information of *T. patula*

编号	采集地	采集时间	编号	采集地	采集时间
S1	云南宜良县	2024 年 8 月	S10	河南罗山县	2024 年 8 月
S2	云南永德县	2024 年 8 月	S11	湖北英山县	2024 年 9 月
S3	云南德钦县	2024 年 8 月	S12	湖北谷城县	2024 年 9 月
S4	云南双柏县	2024 年 8 月	S13	四川金川县	2024 年 8 月
S5	广西金秀县	2024 年 9 月	S14	四川雷波县	2024 年 8 月
S6	广西田阳县	2024 年 9 月	S15	四川会东县	2024 年 8 月
S7	广西资源县	2024 年 9 月	S16	四川都江堰市	2024 年 8 月
S8	河南淅川县	2024 年 8 月	S17	贵州麻江县	2024 年 9 月
S9	河南鄢陵县	2024 年 8 月	S18	贵州安龙县	2024 年 9 月

1.2 仪器 电子分析天平 [型号 MS105DU，梅特勒-托利多仪器（上海）有限公司]；高效液相色谱仪（型号 LC-20A，日本岛津公司）；超声波清洗器（型号 KQ3200，昆山市超声仪器有限公司）。

2 方法与结果

2.1 溶液制备

2.1.1 对照品溶液 精密称取各对照品适量，60% 甲醇制成质量浓度分别为 0.418、0.690、0.572、0.094、0.252、0.310、0.118、0.476、0.042、0.370 mg/mL 储备液，精密吸取适量，60% 甲醇稀释成分别含 α-三联噻吩 20.90 μg/mL、万寿菊苷 34.50 μg/mL、β-谷甾醇 28.60 μg/mL、万寿菊素 4.70 μg/mL、山柰酚 12.60 μg/mL、槲皮万寿菊素 15.50 μg/mL、山柰酚-3-*O*-β-*D*-葡萄糖苷 5.90 μg/mL、山柰酚-7-*O*-α-*L*-鼠李糖苷 23.80 μg/mL、槲皮素-7-*O*-α-*L*-鼠李糖苷 2.10 μg/mL、胡萝卜苷 18.50 μg/mL 的溶液，即得。

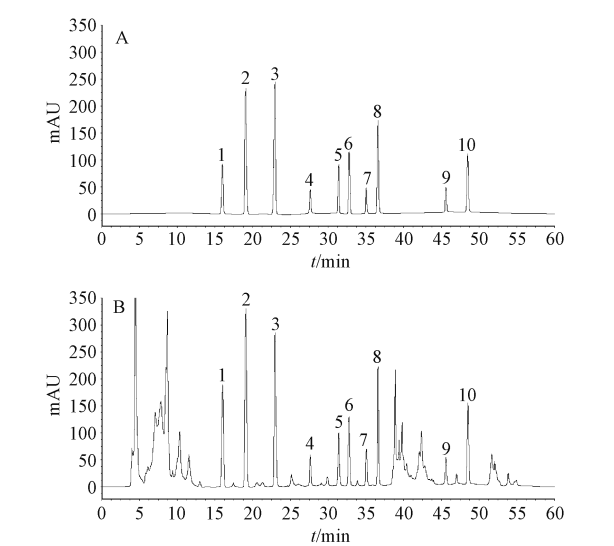
2.1.2 供试品溶液 将药材粉碎，精密称取 0.5 g，

加入约 20 mL 60% 甲醇，超声提取 40 min，过滤，60% 甲醇稀释至 25 mL，摇匀，过滤，取续滤液，即得。

2.2 各成分含量测定 采用 HPLC 法。

2.2.1 色谱条件 Discovery C₁₈ 色谱柱（250 mm×4.6 mm，5 μm）；流动相乙腈（A）-0.3% 磷酸（B），梯度洗脱（0~13 min，16.0% A；13~39 min，16.0%~68.0% A；39~51 min，68.0%~82.0% A；51~60 min，82.0%~16.0% A）；体积流量 1.0 mL/min；柱温 30 ℃；0~39 min 在 254 nm 波长处检测山柰酚-3-*O*-β-*D*-葡萄糖苷、万寿菊苷、槲皮万寿菊素、槲皮素-7-*O*-α-*L*-鼠李糖苷、山柰酚-7-*O*-α-*L*-鼠李糖苷、万寿菊素、山柰酚和 α-三联噻吩，39~60 min 在 210 nm 波长处检测胡萝卜苷和 β-谷甾醇；进样量 10 μL。色谱图见图 1。

2.2.2 线性关系考察 精密吸取“2.1.1”项下储备液适量，60% 甲醇依次稀释 4、10、20、40、100、200 倍，在“2.2.1”项色谱条件下进样测



注：A 为对照品，B 为供试品。

1. 山柰酚-3-O-β-D-葡萄糖苷 2. 万寿菊苷 3. 槲皮万寿菊素
4. 槲皮素-7-O-α-L-鼠李糖苷 5. 山柰酚-7-O-α-L-鼠李糖苷 6. 万寿菊素 7. 山柰酚 8. α-三联噻吩 9. 胡萝卜苷 10. β-谷甾醇

1. kaempferol-3-O-β-D-glucoside 2. quercetagetin-7-O-glucoside
3. quercetagetin 4. quercetin 7-O-α-L-rhamnoside 5. kaempferol-7-O-α-L-rhamnoside 6. tagetesin 7. kaempferol 8. α-trithiophene
9. carotenoside 10. β-sitosterol

图 1 各成分 HPLC 色谱图

Fig. 1 HPLC chromatograms of various constituents

表 2 各成分线性关系			
Tab. 2 Linear relationships of various constituents			
成分	回归方程	r	线性范围/(μg·mL ⁻¹)
山柰酚-3-O-β-D-葡萄糖苷	Y=2.725 3×10 ⁶ X+919.2	0.999 5	2.09~104.50
万寿菊苷	Y=3.488 9×10 ⁶ X-843.5	0.999 9	3.45~172.50
槲皮万寿菊素	Y=3.623 6×10 ⁶ X+628.4	0.999 3	2.86~143.00
槲皮素-7-O-α-L-鼠李糖苷	Y=8.658 1×10 ⁵ X+1 037.1	0.999 4	0.47~23.50
山柰酚-7-O-α-L-鼠李糖苷	Y=1.645 2×10 ⁶ X+645.6	0.999 1	1.26~63.00
万寿菊素	Y=2.088 1×10 ⁶ X-539.8	0.999 8	1.55~77.50
山柰酚	Y=1.232 7×10 ⁶ X-1 137.2	0.999 2	0.59~29.50
α-三联噻吩	Y=3.109 6×10 ⁶ X+1 671.5	0.999 7	2.38~119.00
胡萝卜苷	Y=5.617 9×10 ⁵ X+960.7	0.999 6	0.21~10.50
β-谷甾醇	Y=2.365 2×10 ⁶ X+2 174.3	0.999 3	1.85~92.50

素-7-O-α-L-鼠李糖苷、山柰酚-7-O-α-L-鼠李糖苷、万寿菊素、山柰酚、α-三联噻吩、胡萝卜苷、β-谷甾醇含量 RSD 分别为 1.26%、1.08%、1.10%、1.83%、1.61%、1.56%、1.74%、1.21%、1.88%、1.48%，表明该方法重复性良好。

2.2.4 加样回收率试验 取各成分含量已知的药材（S1）9 份，每份约 0.25 g，精密称定，分别按 1：0.8、1：1、1：1.2 比例加入对照品溶液（每 1 mL 分别含山柰酚-3-O-β-D-葡萄糖苷、万寿菊苷、槲皮万寿菊素、槲皮素-7-O-α-L-鼠李糖苷、山柰酚-7-O-α-L-鼠李糖苷、万寿菊素、山柰酚、α-三联

2522

定。以对照品质量浓度为横坐标（X），峰面积为纵坐标（Y）进行回归，结果见表 2，可知各成分在各自范围内线性关系良好。

2.2.3 精密度、稳定性、重复性试验 取供试品溶液（S1）适量，在“2.2.1”项色谱条件下进样测定 6 次，测得山柰酚-3-O-β-D-葡萄糖苷、万寿菊苷、槲皮万寿菊素、槲皮素-7-O-α-L-鼠李糖苷、山柰酚-7-O-α-L-鼠李糖苷、万寿菊素、山柰酚、α-三联噻吩、胡萝卜苷、β-谷甾醇峰面积 RSD 分别为 1.16%、0.85%、0.92%、1.52%、1.26%、1.29%、1.49%、1.03%、1.74%、1.11%，表明仪器精密度良好。取供试品溶液（S1）适量，于 0、2、4、8、12、16、24 h 在“2.2.1”项色谱条件下进样测定，测得山柰酚-3-O-β-D-葡萄糖苷、万寿菊苷、槲皮万寿菊素、槲皮素-7-O-α-L-鼠李糖苷、山柰酚-7-O-α-L-鼠李糖苷、万寿菊素、山柰酚、α-三联噻吩、胡萝卜苷、β-谷甾醇峰面积 RSD 分别为 1.19%、1.05%、1.03%、1.74%、1.57%、1.32%、1.62%、1.14%、1.83%、1.28%。取 6 份药材（S1），按“2.1.2”项下方法制备供试品溶液，在“2.2.1”项色谱条件下进样测定，测得山柰酚-3-O-β-D-葡萄糖苷、万寿菊苷、槲皮万寿菊素、槲皮

噻吩、胡萝卜苷、β-谷甾醇 0.211、0.359、0.284、0.048、0.127、0.162、0.059、0.237、0.021、0.184 mg），按“2.1.2”项下方法制备供试品溶液，在“2.2.1”项色谱条件下进样测定，计算回收率。结果，山柰酚-3-O-β-D-葡萄糖苷、万寿菊苷、槲皮万寿菊素、槲皮素-7-O-α-L-鼠李糖苷、山柰酚-7-O-α-L-鼠李糖苷、万寿菊素、山柰酚、α-三联噻吩、胡萝卜苷、β-谷甾醇平均加样回收率分别为 98.98%、100.05%、98.74%、97.31%、96.80%、99.03%、97.32%、99.40%、97.60%、99.77%，RSD 分别为 1.07%、0.82%、1.51%、0.87%、1.03%、

1. 34%、1. 56%、1. 21%、1. 42%、1. 18%。项下方法平行制备 3 份供试品溶液，在“2. 2. 1”

2. 2. 5 样品含量测定 取 18 批药材，按“2. 1. 2”项色谱条件下进样测定，计算含量，结果见表 3。

表 3 各成分含量测定结果 (mg/g, n=3)

成分	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15	S16	S17	S18
山奈酚-3- <i>O</i> - β - <i>D</i> -葡萄糖苷	0.852	0.943	0.894	0.825	0.871	0.800	0.744	0.715	0.725	0.744	0.676	0.703	1.092	1.158	1.044	1.135	1.110	1.067
万寿菊苷	1.426	1.605	2.180	1.923	1.821	2.012	2.090	2.177	2.313	1.971	2.358	2.067	1.395	1.193	1.721	1.293	1.162	1.514
槲皮万寿菊素	1.159	1.067	1.205	1.184	1.144	1.267	1.178	0.941	0.952	0.996	0.923	0.904	1.395	1.457	1.486	1.515	1.426	1.268
槲皮素-7- <i>O</i> - α - <i>L</i> -鼠李糖苷	0.191	0.180	0.123	0.149	0.170	0.144	0.132	0.115	0.109	0.125	0.100	0.114	0.215	0.226	0.236	0.268	0.247	0.204
山奈酚-7- <i>O</i> - α - <i>L</i> -鼠李糖苷	0.503	0.457	0.516	0.480	0.492	0.516	0.454	0.418	0.427	0.437	0.413	0.396	0.635	0.664	0.623	0.681	0.650	0.606
万寿菊素	0.647	0.753	0.487	0.613	0.717	0.578	0.524	0.341	0.350	0.374	0.337	0.300	0.990	0.964	0.920	1.043	1.078	0.881
山奈酚	0.232	0.297	0.324	0.267	0.286	0.278	0.242	0.159	0.189	0.205	0.145	0.133	0.214	0.259	0.181	0.224	0.174	0.197
α -三联噻吩	0.946	1.006	1.044	1.253	1.123	1.193	1.289	0.687	0.733	0.762	0.602	0.665	1.634	1.695	1.574	1.762	1.513	1.352
胡萝卜苷	0.081	0.094	0.104	0.090	0.097	0.101	0.083	0.069	0.070	0.072	0.067	0.070	0.129	0.119	0.124	0.133	0.114	0.110
β -谷甾醇	0.724	0.912	0.783	0.827	0.851	0.768	0.726	0.689	0.760	0.702	0.661	0.635	0.601	0.568	0.534	0.493	0.731	0.754

2. 3 总灰分、酸不溶性灰分含量测定 取 18 批 则 2302 灰分测定法^[19]进行检测，平行 3 次，结果
药材，粉碎，参照 2025 年版《中国药典》四部通 见表 4。

表 4 总灰分、酸不溶性灰分含量测定结果 (% , n=3)

指标	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15	S16	S17	S18
总灰分	6.7	5.9	5.6	6.2	6.1	5.4	5.8	8.1	8.9	7.3	7.6	7.2	4.3	4.9	5.3	4.7	5.4	5.2
酸不溶性灰分	1.9	2.3	1.7	1.6	2.1	1.8	1.4	3.3	2.9	3.2	3.5	2.4	1.1	1.3	1.6	1.2	1.8	1.5

2. 4 化学计量学

2. 4. 1 主成分分析(PCA) 将表 3~4 数据导入 SPSS 26. 0 软件进行分析，提取特征值大于 1 的 2 个主成分，特征值和方差贡献率见表 5，主成分矩阵见表 6，可知山奈酚-3-*O*- β -*D*-葡萄糖苷、万寿菊苷、槲皮万寿菊素、槲皮素-7-*O*- α -*L*-鼠李糖苷、山奈酚-7-*O*- α -*L*-鼠李糖苷、万寿菊素、 α -三联噻吩、胡萝卜苷、总灰分和酸不溶性灰分对主成分 1 贡献率较高，而主成分 2 综合了山奈酚、 β -谷甾醇信息。再以各成分、总灰分、酸不溶性灰分含量为变量，采用 SIMCA 14. 1 软件建立模型，见图 2，可

表 5 主成分特征值和方差贡献率

Tab. 5 Eigenvalues and variance contribution rates of principal components

主成分	初始特征值		
	特征值	方差贡献率/%	累积方差贡献率/%
1	9. 041	75. 342	75. 342
2	1. 629	13. 578	88. 920
3	0. 633	5. 277	94. 197
4	0. 226	1. 885	96. 082
5	0. 181	1. 512	97. 594
6	0. 122	1. 014	98. 609
7	0. 070	0. 585	99. 194
8	0. 045	0. 376	99. 569
9	0. 033	0. 279	99. 848
10	0. 009	0. 079	99. 927
11	0. 005	0. 045	99. 972
12	0. 003	0. 028	100. 000

表 6 主成分矩阵

Tab. 6 Matrices for principal components

指标	因子载荷	
	主成分 1	主成分 2
山奈酚-3- <i>O</i> - β - <i>D</i> -葡萄糖苷含量	0.961	-0.043
万寿菊苷含量	-0.868	0.080
槲皮万寿菊素含量	0.970	-0.013
槲皮素-7- <i>O</i> - α - <i>L</i> -鼠李糖苷含量	0.942	-0.156
山奈酚-7- <i>O</i> - α - <i>L</i> -鼠李糖苷含量	0.971	-0.140
万寿菊素含量	0.967	-0.013
山奈酚含量	0.257	0.911
α -三联噻吩含量	0.969	0.028
胡萝卜苷含量	0.967	0.039
β -谷甾醇含量	-0.408	0.786
总灰分含量	-0.908	-0.229
酸不溶性灰分含量	-0.854	-0.273

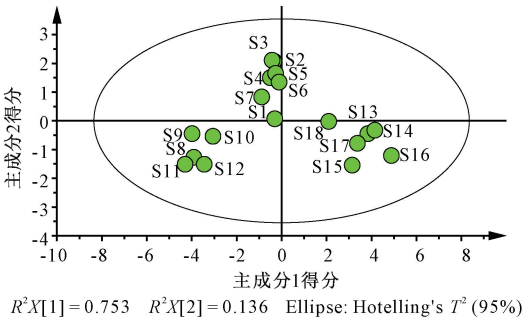


图 2 18 批孔雀草 PCA 得分图

Fig. 2 PCA scores plot for 18 batches of *T. patula*

知采集于云南和广西的 S1~S7 聚为一类，采集于河南和湖北的 S8~S12 聚为一类，采集于贵州和四川的 S13~S18 聚为一类，但组内各散点不够集中，其原因可能是产地相近的药材质量存在一定差异，但不明显。

2.4.2 正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA) 采用 SIMCA 14.1 软件对表 3~4 数据进行分析，发现累积解释能力参数 R^2X 为 0.979， R^2Y 为 0.918，预测能力参数 Q^2 为 0.852，均大于 0.5，表明模型稳定^[20]。图 3 显示，采集于云南和广西的 S1~S7 聚为一类，采集于河南和湖北的 S8~S12 聚为一类，采集于贵州和四川的 S13~S18 聚为一类，与 PCA 一致，并且组内各散点更为集中，推测产地气候、环境可能是影响药材质量的主要原因。再以变量重要性投影值(VIP 值) >1 为标准，筛选出 6 个质量差异标志物，即 α -三联噻吩、万寿菊苷、 β -谷甾醇、万寿菊素、山柰酚和槲皮万寿菊素，VIP 值分别为 1.472 9、1.400 4、1.331 3、1.218 6、1.212 4 和 1.059 8，见图 4。

2.5 熵权 TOPSIS 法

2.5.1 归一化 选择山柰酚-3-*O*- β -*D*-葡萄糖苷、万寿菊苷、槲皮万寿菊素、槲皮素-7-*O*- α -*L*-鼠李糖苷、山柰酚-7-*O*- α -*L*-鼠李糖苷、万寿菊素、山柰酚、 α -三联噻吩、胡萝卜苷、 β -谷甾醇含量作为正向指标，总灰分、酸不溶性灰分含量作为负向指

标，分别采用公式 $Y_{ij} = \frac{X_{ij} - \min(x)}{\max(x_j) - \min(x_j)}$ 和

表 7 各指标归一化结果

Tab. 7 Results for normalization of various indices												
编号	山柰酚-3- <i>O</i> - β - <i>D</i> -葡萄糖苷含量	万寿菊苷含量	槲皮万寿菊素含量	槲皮素-7- <i>O</i> - α - <i>L</i> -鼠李糖苷含量	山柰酚-7- <i>O</i> - α - <i>L</i> -鼠李糖苷含量	万寿菊素含量	山柰酚含量	α -三联噻吩含量	胡萝卜苷含量	β -谷甾醇含量	总灰分含量	酸不溶性灰分含量
S1	0.365 1	0.220 7	0.417 3	0.541 7	0.375 4	0.446 0	0.518 3	0.296 6	0.212 1	0.551 3	0.478 3	0.666 7
S2	0.553 9	0.370 4	0.266 8	0.476 2	0.214 0	0.582 3	0.858 6	0.348 3	0.409 1	1.000 0	0.652 2	0.500 0
S3	0.452 3	0.851 2	0.492 6	0.136 9	0.421 1	0.240 4	1.000 0	0.381 0	0.560 6	0.692 1	0.717 4	0.750 0
S4	0.309 1	0.636 3	0.458 3	0.291 7	0.294 7	0.402 3	0.701 6	0.561 2	0.348 5	0.797 1	0.587 0	0.791 7
S5	0.404 6	0.551 0	0.392 8	0.416 7	0.336 8	0.536 0	0.801 0	0.449 1	0.454 5	0.854 4	0.608 7	0.583 3
S6	0.257 3	0.710 7	0.594 1	0.261 9	0.421 1	0.357 3	0.759 2	0.509 5	0.515 2	0.656 3	0.760 9	0.708 3
S7	0.141 1	0.775 9	0.448 4	0.190 5	0.203 5	0.287 9	0.570 7	0.592 2	0.242 4	0.556 1	0.673 9	0.875 0
S8	0.080 9	0.848 7	0.060 6	0.089 3	0.077 2	0.052 7	0.136 1	0.073 3	0.030 3	0.467 8	0.173 9	0.083 3
S9	0.101 7	0.962 4	0.078 6	0.053 6	0.108 8	0.064 3	0.293 2	0.112 9	0.045 5	0.637 2	0.000 0	0.250 0
S10	0.141 1	0.676 4	0.150 6	0.148 8	0.143 9	0.095 1	0.377 0	0.137 9	0.075 8	0.498 8	0.347 8	0.125 0
S11	0.000 0	1.000 0	0.031 1	0.000 0	0.059 6	0.047 6	0.062 8	0.000 0	0.000 0	0.401 0	0.282 6	0.000 0
S12	0.056 0	0.756 7	0.000 0	0.083 3	0.000 0	0.000 0	0.000 0	0.054 3	0.045 5	0.338 9	0.369 6	0.458 3
S13	0.863 1	0.194 8	0.803 6	0.684 5	0.838 6	0.886 9	0.424 1	0.889 7	0.939 4	0.257 8	1.000 0	1.000 0
S14	1.000 0	0.025 9	0.905 1	0.750 0	0.940 4	0.853 5	0.659 7	0.942 2	0.787 9	0.179 0	0.869 6	0.916 7
S15	0.763 5	0.467 4	0.952 5	0.809 5	0.796 5	0.796 9	0.251 3	0.837 9	0.863 6	0.097 9	0.782 6	0.791 7
S16	0.952 3	0.109 5	1.000 0	1.000 0	1.000 0	0.955 0	0.476 4	1.000 0	1.000 0	0.000 0	0.913 0	0.958 3
S17	0.900 4	0.000 0	0.854 3	0.875 0	0.891 2	1.000 0	0.214 7	0.785 3	0.712 1	0.568 0	0.760 9	0.708 3
S18	0.811 2	0.294 3	0.595 7	0.619 0	0.736 8	0.746 8	0.335 1	0.646 6	0.651 5	0.622 9	0.804 3	0.833 3

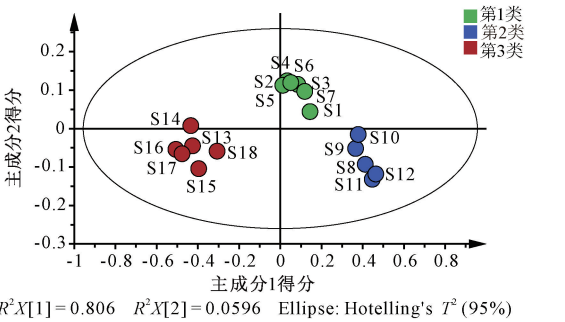
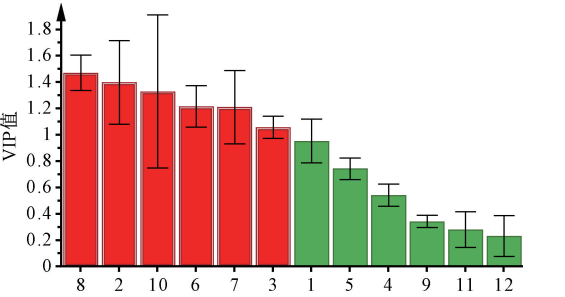


图 3 18 批孔雀草 OPLS-DA 得分图
Fig. 3 OPLS-DA score plot for 18 batches of *T. patula*



注：1~12 分别为山柰酚-3-*O*- β -*D*-葡萄糖苷、万寿菊苷、槲皮万寿菊素、槲皮素-7-*O*- α -*L*-鼠李糖苷、山柰酚-7-*O*- α -*L*-鼠李糖苷、万寿菊素、山柰酚、 α -三联噻吩、胡萝卜苷、 β -谷甾醇、总灰分、酸不溶性灰分。

图 4 各成分 VIP 值
Fig. 4 VIP values of various constituents

$Y_{ij} = \frac{\max(x_j) - X_{ij}}{\max(x_j) - \min(x_j)}$ 进行处理^[21]，结果见表 7。

2.5.2 综合评价 山柰酚-3-*O*- β -*D*-葡萄糖苷、万寿菊苷、槲皮万寿菊素、槲皮素-7-*O*- α -*L*-鼠李糖苷、山柰酚-7-*O*- α -*L*-鼠李糖苷、万寿菊素、山柰酚、 α -三联噻吩、胡萝卜苷、 β -谷甾醇、总灰分、酸不溶性灰分含量的权重系数分别为 0.103 1、0.076 5、0.093 8、0.103 3、0.103 1、0.102 8、0.069 3、0.087 5、0.109 4、0.052 6、0.042 7、0.055 9，将其与归一化后的数据相乘，得到熵权矩阵，见表 8，以各指标最大值为最优方案 Z^+ ，最

小值为最劣方案 Z^- ，分别按照公式 $D_i^+ = \sqrt{\sum_{j=1}^n (Z_{ij} - Z_j^+)^2}$ 、 $D_i^- = \sqrt{\sum_{j=1}^n (Z_{ij} - Z_j^-)^2}$ 计算各指标与最优、最劣方案的距离 D_i^+ 、 D_i^- ，再按照公式 $C_i = \frac{D_i^-}{D_i^+ + D_i^-}$ 计算其最优解的欧氏贴近度 C_i ， C_i 越大，质量越好，结果见表 9。由此可知，排名前 6 位的药材产自四川和贵州，平均 C_i 为 0.701 7，表明两地药材整体质量较好。

表 8 各指标熵权矩阵

Tab. 8 Entropy weight matrices for various indices

编号	山柰酚-3- <i>O</i> - β - <i>D</i> -葡萄糖苷含量	万寿菊苷含量	槲皮万寿菊素含量	槲皮素-7- <i>O</i> - α - <i>L</i> -鼠李糖苷含量	山柰酚-7- <i>O</i> - α - <i>L</i> -鼠李糖苷含量	万寿菊素含量	山柰酚含量	α -三联噻吩含量	胡萝卜苷含量	β -谷甾醇含量	总灰分含量	酸不溶性灰分含量
S1	0.037 6	0.016 9	0.039 1	0.056 0	0.038 7	0.045 8	0.035 9	0.026 0	0.023 2	0.029 0	0.020 4	0.037 3
S2	0.057 1	0.028 3	0.025 0	0.049 2	0.022 1	0.059 9	0.059 5	0.030 5	0.044 8	0.052 6	0.027 8	0.028 0
S3	0.046 6	0.065 1	0.046 2	0.014 1	0.043 4	0.024 7	0.069 3	0.033 3	0.061 3	0.036 4	0.030 6	0.041 9
S4	0.031 9	0.048 7	0.043 0	0.030 1	0.030 4	0.041 4	0.048 6	0.049 1	0.038 1	0.041 9	0.025 1	0.044 3
S5	0.041 7	0.042 2	0.036 8	0.043 0	0.034 7	0.055 1	0.055 5	0.039 3	0.049 7	0.044 9	0.026 0	0.032 6
S6	0.026 5	0.054 4	0.055 7	0.027 1	0.043 4	0.036 7	0.052 6	0.044 6	0.056 4	0.034 5	0.032 5	0.039 6
S7	0.014 5	0.059 4	0.042 1	0.019 7	0.021 0	0.029 6	0.039 5	0.051 8	0.026 5	0.029 3	0.028 8	0.048 9
S8	0.008 3	0.064 9	0.005 7	0.009 2	0.008 0	0.005 4	0.009 4	0.006 4	0.003 3	0.024 6	0.007 4	0.004 7
S9	0.010 5	0.073 6	0.007 4	0.005 5	0.011 2	0.006 6	0.020 3	0.009 9	0.005 0	0.033 5	0.000 0	0.014 0
S10	0.014 5	0.051 7	0.014 1	0.015 4	0.014 8	0.009 8	0.026 1	0.012 1	0.008 3	0.026 2	0.014 9	0.007 0
S11	0.000 0	0.076 5	0.002 9	0.000 0	0.006 1	0.004 9	0.004 4	0.000 0	0.000 0	0.021 1	0.012 1	0.000 0
S12	0.005 8	0.057 9	0.000 0	0.008 6	0.000 0	0.000 0	0.000 0	0.004 8	0.005 0	0.017 8	0.015 8	0.025 6
S13	0.089 0	0.014 9	0.075 4	0.070 7	0.086 5	0.091 2	0.029 4	0.077 8	0.102 8	0.013 6	0.042 7	0.055 9
S14	0.103 1	0.002 0	0.084 9	0.077 5	0.097 0	0.087 7	0.045 7	0.082 4	0.086 2	0.009 4	0.037 1	0.051 2
S15	0.078 7	0.035 8	0.089 3	0.083 6	0.082 1	0.081 9	0.017 4	0.073 3	0.094 5	0.005 1	0.033 4	0.044 3
S16	0.098 2	0.008 4	0.093 8	0.103 3	0.103 1	0.098 2	0.033 0	0.087 5	0.109 4	0.000 0	0.039 0	0.053 6
S17	0.092 8	0.000 0	0.080 1	0.090 4	0.091 9	0.102 8	0.014 9	0.068 7	0.077 9	0.029 9	0.032 5	0.039 6
S18	0.083 6	0.022 5	0.055 9	0.063 9	0.076 0	0.076 8	0.023 2	0.056 6	0.071 3	0.032 8	0.034 3	0.046 6

表 9 18 批孔雀草排序结果

Tab. 9 Results for ranking of 18 batches of *T. patula*

编号	D_i^+	D_i^-	C_i	排序
S1	0.184 9	0.122 9	0.399 3	12
S2	0.170 4	0.148 3	0.465 3	10
S3	0.170 5	0.157 9	0.480 8	7
S4	0.174 3	0.139 1	0.443 8	11
S5	0.160 5	0.147 7	0.479 2	8
S6	0.164 8	0.149 9	0.476 3	9
S7	0.199 3	0.127 4	0.390 0	13
S8	0.265 2	0.072 9	0.215 6	17
S9	0.258 0	0.087 4	0.253 0	14
S10	0.246 2	0.074 1	0.231 3	15
S11	0.278 3	0.080 8	0.225 0	16
S12	0.272 3	0.068 8	0.201 7	18
S13	0.095 2	0.239 3	0.715 4	3
S14	0.098 0	0.247 7	0.716 5	2
S15	0.095 6	0.231 5	0.707 7	4
S16	0.093 7	0.273 1	0.744 5	1
S17	0.107 8	0.238 2	0.688 4	5
S18	0.113 0	0.199 1	0.637 9	6

3 讨论

3.1 供试品溶液制备方法优化 前期预实验分别考察了不同提取溶剂（50%、60%、70%、100% 甲醇）、超声时间（30、40、60 min），从色谱信息全面性、色谱峰丰度、杂质干扰程度等方面考虑，最终确定为 60% 甲醇超声提取 40 min。

3.2 色谱条件优化 前期预实验分别考察了不同体积分数（0.1%、0.2%、0.3%）磷酸、乙腈对供试品溶液色谱图的影响，发现以乙腈-0.3% 磷酸洗脱时色谱峰基线平稳，丰度较高。另外，本实验采用波长切换法，即在 254 nm 处检测山柰酚-3-*O*- β -*D*-葡萄糖苷、万寿菊苷、槲皮万寿菊素、槲皮素-7-*O*- α -*L*-鼠李糖苷、山柰酚-7-*O*- α -*L*-鼠李糖苷、万寿菊素、山柰酚和 α -三联噻吩，210 nm 处检测胡萝卜苷和 β -谷甾醇。

3.3 综合评价 化学计量学显示，18 批孔雀草分类明显，其中采自云南和广西的 7 批、河南和湖北

的 5 批、贵州和四川的 6 批各聚为一类，质量差异标志物为 α -三联噻吩、万寿菊苷、 β -谷甾醇、万寿菊素、山柰酚和槲皮万寿菊素。熵权 TOPSIS 法显示，四川、贵州产孔雀草的整体质量较好，故后期将在这 2 个产区采集更多药材进行方法学考证。同时，由于孔雀草为全草入药，故今后将对该药材叶、茎、花、根作进一步考察，并且对不同采收期者也进行比较，以期为其道地产地研究提供数据支撑。

4 结 论

本实验将含量测定、化学计量学和熵权 TOPSIS 法相结合，其科学客观，操作简便，易于推广，可用于孔雀草质量控制，为该药材综合评价提供了参考。

参考文献：

[1] 陈颜旭, 郭同军, 古再丽努尔·艾麦提, 等. 万寿菊粕饲料资源开发利用进展[J]. 中国饲料, 2023(3): 137-142.

[2] 郭雁君, 吉前华, 郭丽英, 等. 万寿菊主要功能成分提取工艺及开发利用研究进展[J]. 现代农业科技, 2021(14): 220-223; 233.

[3] 霍雅楠, 王 文, 祁 智, 等. 孔雀草的研究进展[J]. 北方农业学报, 2017, 45(4): 123-126.

[4] 于 森, 冉小库, 窦德强, 等. 孔雀草茎、叶化学成分的分 离鉴定[J]. 中国实验方剂学杂志, 2018, 24(7): 64-68.

[5] 王云龙, 苏丽梅, 郭荣灿, 等. 孔雀草精油成分及其抑菌 效果研究[J]. 化工设计通讯, 2019, 45(7): 167-169.

[6] 陈文哲, 刘雪莹, 郭胜男, 等. 孔雀草抗急性炎症活性成 分研究[J]. 山西中医学院学报, 2019, 20(3): 172-176.

[7] Yasukawa K, Kasahara Y. Effects of flavonoids from French marigold (florets of *Tagetes patula* L.) on acute inflammation model[J]. *Int J Inflam*, 2013, 2013: 309493.

[8] Riaz M, Ahmad R, Rahman N U, *et al.* Traditional uses, phytochemistry and pharmacological activities of *Tagetes Patula*

L. [J]. *J Ethnopharmacol*, 2020, 255: 112718.

[9] Sukhikh S, Ivanova S, Babich O, *et al.* Study of biological activity of aqueous extracts of *Tagetes Patula* L. flowers[J]. *Fitoterapia*, 2025, 185: 106712.

[10] 李奇萌, 陈运泽, 赵国成, 等. α -三联噻吩对舞毒蛾幼虫 的杀虫活性和生理生化影响[J]. 中国森林病虫, 2023, 42(6): 1-7.

[11] 王翔鹏, 武璐璐, 李丽丽, 等. 胡萝卜苷药理作用研究现 状[J]. 中国临床药理学杂志, 2019, 35(7): 722-724.

[12] 陈元堃, 曾 奥, 罗振辉, 等. β -谷甾醇药理作用研究进 展[J]. 广东药科大学学报, 2021, 37(1): 148-153.

[13] 刘琳琳, 王宇萌, 张 旭, 等. 孔雀草水煎液对小鼠抗抑郁 作用及机制研究[J]. 辽宁中医药大学学报, 2019, 21(5): 26-29.

[14] 刘剑寒, 茅加伟, 康靖杰, 等. HPLC 法测定孔雀草中万 寿菊素含量[J]. 广州化工, 2025, 53(6): 102-105.

[15] 久 欣, 张慧文, 刘 宏, 等. 化学计量学方法在中药质量 标志物中的应用[J]. 中成药, 2021, 43(12): 3416-3421.

[16] 许有诚, 赵 庄, 卢日刚, 等. 主成分分析在中药质量分 析及质量评价中的应用进展[J]. 大众科技, 2021, 23(8): 37-41.

[17] 李雨昕, 邢 娜, 白浩东, 等. 基于熵权法的灰色关联法- TOPSIS 法对不同产地三七及其炮制品质量的评价研究[J]. 中草药, 2023, 54(4): 1252-1259.

[18] 冯 冲, 陈玉娥, 刘尉棋, 等. 基于熵权 TOPSIS 法分析 不同产地北细辛药材质量[J]. 特种经济动植物, 2022, 25(11): 13-16.

[19] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典: 2025 年版四部[S]. 北京: 中国医药科技出版社, 2025: 309.

[20] 唐 瑞, 杜伟锋, 孙贝贝, 等. 基于多指标成分含量结合 化学计量学评价不同产地浙贝母质量[J]. 中成药, 2023, 45(7): 2317-2322.

[21] 张立群, 马诗瑜, 冯 恺, 等. HPLC 多指标成分定量结 合化学计量学, 加权 TOPSIS 模型评价不同产地肺形草质 量[J]. 现代药物与临床, 2024, 39(5): 1176-1183.