·中药与民族药·

基于聚类分析和主成分分析的壮瑶药三妹木HPLC指纹图谱研究⁴

傅 静*,张 莹,李字辉,王孝勋#(广西中医药大学药学院,南宁 530200)

中图分类号 R284 文献标志码 A 文章编号 1001-0408(2019)17-2355-05

DOI 10.6039/j.issn.1001-0408.2019.17.10

摘 要 目的:建立壮瑶药三妹木的高效液相色谱(HPLC)指纹图谱,为不同产地三妹木的质量评价提供依据。方法:以广西南宁、桂林、梧州等5不同产地的10批三妹木为样品,采用"中药色谱指纹图谱相似度评价系统"(2012 版)软件建立HPLC指纹图谱并进行相似度评价[色谱柱为Inertsil ODS-3,流动相为乙腈-0.2%磷酸溶液(梯度洗脱),流速为0.8 mL/min,检测波长为350 nm,柱温为35%,进样量为10 µL],通过对照品比对对共有峰进行指认。采用IBM SPSS 21.0 软件对其进行聚类分析和主成分分析。结果:建立了HPLC指纹图谱,共确定了12个共有峰,并指认了其中3个共有峰(8、10、11 号共有峰分别为夏佛塔苷、牡荆素和异牡荆素);10 批样品的相似度均大于0.9。经聚类分析发现,10 批药材可聚为二大类;经主成分分析发现,2个主成分因子的累计方差贡献率为86.108%(第一主成分、第二主成分的贡献率分别为66.891%、19.217%)。结论:成功建立了三妹木药材的HPLC指纹图谱,该方法简单、易行,为三妹木的质量控制提供了可靠的评价方法。

关键词 壮瑶药;三妹木;高效液相色谱法;化学计量学;指纹图谱

Study on HPLC Fingerprints of Zhuang and Yao Medicine Lespedeza formosa Based on Cluster Analysis and Principal Component Analysis

FU Jing, ZHANG Ying, LI Yuhui, WANG Xiaoxun (School of Pharmacy, Guangxi University of TCM, Nanning 530200, China)

ABSTRACT OBJECTIVE: To establish HPLC fingerprint of Zhuang and Yao medicine *Lespedeza formosa*, and to provide reference for quality control of *L. formosa* from different producing areas. METHODS: Totally 10 batches of samples were collected from 5 producing areas as Guangxi Nanning, Guilin, Wuzhou and so on. HPLC fingerprints was established and similarity analysis was carried out by using "Similarity evaluation system of TCM chromatographic fingerprint" (2012 edition) software. The determination was performed on Inertsil ODS-3 column with mobile phase consisted of acetonitrile-0.2% phosphoric acid solution (gradient elution) at the flow rate of 0.8 mL/min. The detection wavelength was set at 350 nm, and the column temperature was 35 °C. The sample size was 10 μL. Common peaks were identified by comparing substance control. Cluster analysis and principal component analysis were performed by using IBM SPSS 21.0 statistical software. RESULTS: HPLC fingerprint was established, and 12 common peaks were calibrated. 3 common peaks were identified (common peak 8, 10, 11 were chafotalin, vitexin and isovitexin). The similarity of 10 batches of samples were all higher than 0.9. Through cluster analysis, 10 batches of medicinal materials could be clutered into 2 groups. According to the principal component analysis, the cumulative variance contribution rate of the two principal component factors was 86.108% (contribution rates of first principal components and second principal components were 66.891% and 19.217%). CONCLUSIONS: HPLC fingerprint of *L. formosa* is established successfully. The method is simple and easy to use, provides a reliable evaluation method for quality control of *L. formosa*.

KEYWORDS Zhuang and Yao medicine; Lespedeza formosa; HPLC; Chemometrics; Fingerprint

三妹木来源于豆科植物美丽胡枝子[Lespedeza for-mosa (Vog.) Koehne.]的干燥茎叶,亦称谋见亮、把天门、夜关门,为广西壮族和瑶族地区民间常用中草药^[1-2]。其味苦,性平,具有清热、利尿通淋之功,主治热淋、小便不利^[3]。壮医认为三妹木具有调气道、利水道、清热毒、除

Δ基金项目:国家自然科学基金资助项目(No.81360640);《广西 壮族自治区瑶药材质量标准(第二卷)》质量评价与标准研究项目(No. GXYY2017001);广西壮族自治区重点实验室(No.桂科基字[2014]32 号);广西"2011协同创新中心"(No.桂教科研[2013]20号)

*硕士研究生。研究方向:中药品种、质量及资源开发。E-mail: 1242959923@qq.com

#通信作者:副教授,博士。研究方向:中药品种、质量及资源开发。E-mail:407977122@qq.com

湿毒、消肿痛的功效,主治肺痈、风湿骨痛、跌打损伤^[4]。目前,关于三妹木的研究主要是在总黄酮的含量测定、体细胞染色体核型分析、种子萌发、幼苗生长规律等^[5-8]方面,对其质量评价方面研究甚少。中药指纹图谱数据库的研究和建立是中药质量评价的重要发展趋势之一,已成为中药鉴定的一个重要平台。且中药指纹图谱的构建方法及解析方法多种多样,能全面反映中药的整体化学特征,体现其内在的整体质量,是一种较为合理的中药质量控制模式^[9]。为促进广西本土药材资源的合理开发利用,本研究采用高效液相色谱(HPLC)法结合化学计量学对广西5个不同产地10批三妹木进行指纹图谱研究,旨在为其质量评价提供依据。

1 材料

1.1 仪器

e2695型HPLC仪(包括四元泵洗脱系统、在线真空脱气机、标准自动进样器、智能化柱温箱和光电二极管阵列检测器)购自美国Waters公司;TGL-16B型高速台式离心机(上海安亭科学仪器厂);BP211D型电子分析天平(德国赛多利斯公司);HWS-28型电热恒温水浴锅(上海齐欣科学仪器有限公司);DHG-9240A型电热鼓风干燥箱(上海一恒科学仪器有限公司);As7240BT型超声波清洗器(天津奥特赛恩斯仪器有限公司);DP5系列超纯水仪(法国密里博公司)。

1.2 药品与试剂

共采集三妹木药材10批,经广西中医药大学韦松基教授鉴定均为豆科胡枝子属植物美丽胡枝子 L. formosa (Vog.) Koehne.的茎叶;夏佛塔苷对照品(上海诗丹德标准技术服务有限公司,批号:5861,纯度:99.4%);牡荆素对照品(中国食品药品检定研究院,批号:111687-201704,纯度:94.9%);异牡荆素对照品(云南西力生物技术股份有限公司,批号:BBP00949,纯度:97%);甲醇、乙腈为色谱纯(美国Fisher公司);其他试剂均为分析纯,水为超纯水。三妹木药材基源信息见表1。

表1 三妹木药材基源信息

Tab 1	Material	source information	of L.	formosa
Iabi	Matchiai	source mior mation	UI L.	jointosa

药材批次	采收时间	药材产地	经纬度		
S1	2018-04-10	广西南宁市邕宁区	N22.0° E108.0°		
S2	2018-06-05	广西来宾市金秀县	N23.0° E110.0°		
S3	2018-07-07	广西梧州市藤县	N24.0° E110.6°		
S4	2018-07-08	广西来宾市象州县	N23.6° E110.1°		
S5	2018-07-11	广西桂林市临桂县	N24.0° E110.2°		
S6	2018-09-03	广西柳州市三江县	N25.0° E109.0°		
S7	2018-09-15	广西来宾市金秀县	N23.9° E110.2°		
S8	2018-10-20	广西南宁市邕宁区	N22.0° E108.0°		
S9	2018-11-03	广西柳州市三江县	N25.0° E109.0°		
S10	2018-12-05	广西来宾市金秀县	N24.0° E110.2°		

2 方法与结果

2.1 溶液的制备

2.1.1 混合对照品溶液的制备 分别称取夏佛塔苷对照品 1.82 mg、牡荆素对照品 1.34 mg、异牡荆素对照品 1.54 mg,用 75% 乙醇溶解并定容至同一 10 mL 量瓶中,摇匀,制成含 0.182 mg/mL 夏佛塔苷、0.134 mg/mL 牡荆素和 0.154 mg/mL 异牡荆素的混合对照品溶液,备用。 2.1.2 供试品溶液的制备 称取批次为 S2 的药材粉末 2 g,精密称定,置于 50 mL 量瓶中,加入 75% 乙醇 20 mL,称定质量,超声(功率: 500 W,频率: 35 kHz)提取 30 min,冷却至室温,再次称定质量,然后用 75% 乙醇补足减失的质量,滤过,续滤液以 13 000 r/min 离心 10 min,备用。

2.2 色谱条件

色谱柱:Inertsil ODS-3(250 mm×4.6 mm,5 μ m);检测器:光电二极管阵列检测器;流动相:乙腈(A)-0.2%磷

酸溶液(B),梯度洗脱(0~20 min,10% \rightarrow 17%A;20~30 min,17%A;30~45 min,17% \rightarrow 21%A;45~55 min,21% \rightarrow 23%A;55~70 min,23% \rightarrow 50%A);流速:0.8 mL/min;检测波长:350 nm;柱温:35 °C;进样量:10 μ L。

2.3 方法学考察

2.3.1 精密度试验 称取三妹木药材粉末(批次为S2) 2g,精密称定,按"2.1.2"项下方法制备供试品溶液,按"2.2"项下色谱条件连续进样6次,记录色谱。以夏佛塔 苷峰(8号峰)为参照峰,考察各共有峰的相对保留时间和相对峰面积。结果表明,各共有峰相对保留时间的 RSD在 $0.03\%\sim0.19\%$ 之间(n=6),相对峰面积的 RSD在 $0.03\%\sim0.30\%$ 之间(n=6),表明检测仪器精密度良好。

2.3.2 重复性试验 分别称取同一批三妹木药材粉末 (批次为S2)2 g,精密称定,按"2.1.2"项下方法平行制备 供试品溶液 6份,按"2.2"项下色谱条件进样检测,记录色谱。以夏佛塔苷峰(8号峰)为参照峰,分别考察各共有峰的相对保留时间和相对峰面积。结果表明,各共有峰相对保留时间的RSD在 $0.12\%\sim1.18\%$ 之间(n=6),相对峰面积的RSD在 $0.10\%\sim1.27\%$ 之间(n=6),表明本方法重复性良好。

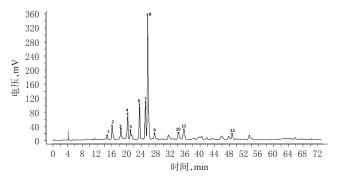
2.3.3 稳定性试验 称取三妹木药材粉末(批号为S2) 2g,精密称定,按"2.1.2"项下方法制备供试品溶液,分别于制备0.4.8.10.12.24h后按"2.2"项下色谱条件进样检测,记录色谱。以夏佛塔苷峰(8号峰)为参照峰,分别考察各共有峰的相对保留时间和相对峰面积。结果表明,各共有峰相对保留时间的RSD在 $0.07\%\sim2.13\%$ 之间(n=6),相对峰面积的RSD在 $0.11\%\sim2.44\%$ 之间(n=6),表明供试品溶液在24h内稳定性良好。

2.4 **HPLC**指纹图谱的生成与相似度评价、共有峰的相关分析

2.4.1 HPLC指纹图谱的生成 称取 10 批三妹木药材粉末,分别按"2.1.2"项下方法制备供试品溶液,以"2.2"项下色谱条件进样检测,记录色谱。将色谱图导入"中药色谱指纹图谱相似度评价系统"(2012版)软件中,以S9号色谱图为参照图谱,将时间窗宽度设为0.2,采用多点校正法进行色谱峰匹配,选择中位数法生成对照图谱R^[10-12]。对照指纹图谱R见图1,10 批药材样品HPLC叠加指纹图谱见图2。

2.4.2 相似度分析 采用"中药色谱指纹图谱相似度评价系统(2012版)"软件,以药材样品 HPLC 对照图谱 R 为参照,进行整体相似度评价。结果显示,10批药材样品相似度在0.901~0.995之间,表明不同批次药材样品间差异较小。相似度评价结果见表2。

2.4.3 共有峰的指认及相关分析 确定共有峰12个,通过与对照品溶液色谱峰比对(取"2.1.1"项下混合对照品溶液按"2.2"项下色谱条件测定,记录色谱图),确认8、10、11号共有峰分别为夏佛塔苷、牡荆素和异牡荆素。

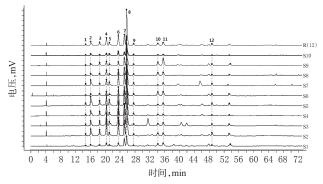


注:1~12为共有峰

Note: 1-12 are common peaks

图1 对照指纹图谱R

Fig 1 Reference fingerprint R



注:1~12为共有峰

Note: 1-12 are common peaks

图2 10批药材样品 HPLC 叠加指纹图谱

Fig 2 HPLC superimposed fingerprint of 10 batches of medicinal samples

表2 10批药材样品相似度评价结果

Tab 2 Similarity evaluation results of 10 batches of sample

编号	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	对照图谱R
S1	1.000	0.905	0.934	0.889	0.885	0.991	0.895	0.970	0.974	0.887	0.933
S2	0.905	1.000	0.986	0.997	0.991	0.931	0.987	0.976	0.872	0.984	0.995
S3	0.934	0.986	1.000	0.986	0.979	0.943	0.980	0.977	0.882	0.970	0.992
S4	0.889	0.997	0.986	1.000	0.996	0.915	0.993	0.967	0.851	0.990	0.994
S5	0.885	0.991	0.979	0.996	1.000	0.911	0.997	0.962	0.851	0.996	0.992
S6	0.991	0.931	0.943	0.915	0.911	1.000	0.917	0.986	0.979	0.916	0.953
s7	0.895	0.987	0.980	0.993	0.997	0.917	1.000	0.964	0.859	0.996	0.992
S8	0.970	0.976	0.977	0.967	0.962	0.986	0.964	1.000	0.949	0.964	0.987
S9	0.974	0.872	0.882	0.851	0.851	0.979	0.859	0.949	1.000	0.861	0.901
S10	0.887	0.984	0.970	0.990	0.996	0.916	0.996	0.964	0.861	1.000	0.989
对照图谱R	0.933	0.995	0.992	0.994	0.992	0.953	0.992	0.987	0.901	0.989	1.000

其中8号峰峰面积较大,分离度及对称因子均符合要求, 且为所有药材样品共有,故设定其为参照峰(S),计算其 他共有峰的相对保留时间和相对峰面积。混合对照品 溶液的色谱图见图3,10批药材样品相对保留时间、相对 峰面积的测定结果分别见表3、表4。

2.5 化学计量学分析

2.5.1 聚类分析 以12个共有峰的峰面积为原始数据,运用IBM SPSS 21.0 软件对10批三妹木药材进行聚类

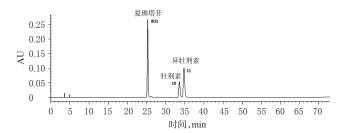


图3 混合对照品色谱图

Fig 3 Chromatogram of mixed control

表3 10 批药材样品 HPLC 图谱共有峰的相对保留时间 Tab 3 Relative retention time of common peaks in HPLC chromatograms of 10 batches of medici-

nal samples

共有峰	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	RSD,%
1	0.573	0.572	0.572	0.571	0.572	0.572	0.572	0.572	0.572	0.571	0.09
2	0.626	0.626	0.625	0.625	0.625	0.625	0.625	0.626	0.625	0.625	0.07
3	0.718	0.718	0.717	0.717	0.718	0.718	0.717	0.718	0.718	0.717	0.06
4	0.790	0.790	0.790	0.789	0.789	0.789	0.789	0.789	0.789	0.789	0.04
5	0.821	0.819	0.819	0.819	0.819	0.820	0.818	0.820	0.820	0.819	0.09
6	0.915	0.915	0.914	0.914	0.914	0.915	0.914	0.914	0.914	0.914	0.03
7	0.976	0.976	0.976	0.976	0.976	0.976	0.976	0.976	0.976	0.976	0.01
8(S)	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.00
9	1.073	1.073	1.072	1.073	1.073	1.073	1.073	1.073	1.073	1.073	0.05
10	1.324	1.326	1.320	1.322	1.327	1.326	1.328	1.326	1.328	1.327	0.19
11	1.382	1.383	1.382	1.382	1.381	1.383	1.381	1.383	1.385	1.381	0.10
12	1.886	1.890	1.889	1.891	1.891	1.891	1.907	1.891	1.891	1.892	0.30

表4 10批药材样品HPLC图谱共有峰的相对峰面积

Tab 4 Relative peak area of common peaks in HPLC chromatograms of 10 batches of medicinal samples

		-									
共有峰	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	RSD,%
1	0.036	0.031	0.030	0.028	0.037	0.038	0.041	0.038	0.023	0.029	17.36
2	0.100	0.130	0.101	0.080	0.118	0.089	0.132	0.086	0.091	0.113	17.71
3	0.079	0.119	0.092	0.097	0.082	0.112	0.054	0.113	0.183	0.044	40.02
4	0.261	0.270	0.247	0.216	0.158	0.239	0.140	0.258	0.273	0.125	25.84
5	0.076	0.045	0.078	0.052	0.079	0.066	0.068	0.060	0.069	0.119	28.26
6	0.249	0.273	0.378	0.275	0.252	0.238	0.252	0.247	0.213	0.232	17.17
7	0.632	0.243	0.410	0.234	0.211	0.470	0.240	0.359	0.452	0.184	42.40
8(S)	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.00
9	0.090	0.045	0.052	0.061	0.050	0.135	0.066	0.095	0.120	0.071	39.27
10	0.337	0.078	0.082	0.048	0.033	0.342	0.025	0.227	0.335	0.062	87.38
11	0.431	0.068	0.094	0.041	0.056	0.366	0.086	0.237	0.654	0.097	97.17
12	0.145	0.073	0.049	0.011	0.049	0.128	0.063	0.065	0.139	0.015	65.68

分析,采用组间平均数联结法,以Euclidean平方距离为度量标准[12-14]。结果显示,10批三妹木药材样品可聚为二大类:批次为S2、S3、S4、S5、S7、S10的聚为一类,批次为S1、S6、S8、S9的聚为另一类。三妹木样品聚类分析树状图见图4。

2.5.2 主成分分析 用IBM SPSS 21.0 软件对 10 批次 广西不同产地三妹木药材的 12个变量(共有峰峰面积) 进行标准化处理,以主成分的方差贡献率及特征值为依据,进行主成分分析,计算相关系数矩阵、主成分特征 值、方差贡献率以及主成分综合得分,对各产地的三妹 木药材进行评价[15]。

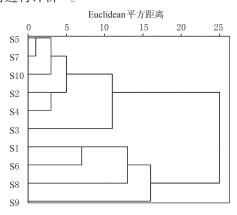


图 4 三妹木样品聚类分析树状图

Fig 4 Dendrogram cluster analysis of L. formosa

根据各因子特征值大于1及因子的方差累计贡献率大于85%的原则作为主成分提取的标准,本研究需提取的主成分主要有2个:第一主成分的特征值为8.198,其贡献率为66.891%;第二主成分的特征值为2.135,其贡献率为19.217%。这2个主成分的累计方差总贡献率为86.108%。以主成分因子为变量绘制公因子碎石图,可以看出特征值较高的2个主成分的斜率更大,说明前2个主成分可以最大程度地反映三妹木药材的品质关系,可见提取前2个主成分进行分析较为适宜。公因子碎石图见图5。

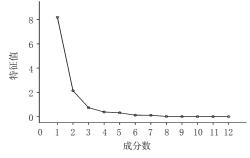


图5 公因子碎石图

Fig 5 Scree plot of common factor

为了使提取的主成分更加全面、清晰地反映原始数据包含的信息,将因子分析得到的成分矩阵进行正交旋转,得到12个指标在2个主成分中的旋转矩阵。结果显示,第一主成分的信息主要来自于色谱峰2、3、4、6、8(夏佛塔苷),此类峰的峰面积较大,表示成分含量较高,对三妹木品质有明显的影响;第二主成分的信息主要来自于色谱峰10(牡荆素)、11(异牡荆素)。初始因子荷载矩阵见表5。

10批次三妹木样品有规律地分布为二大类,即批次为 S2、S3、S4、S5、S7、S10 的聚为一类,批次为 S1、S6、S8、S9 的聚为另一类,该结果与聚类分析结果一致。 主成分得分图见图 6。

2.5.3 基于主成分分析建立广西产三妹木质量评价综合模型 根据表5结果,以*X*₁,X₂代表2个主成分来作为

表5 初始因子荷载矩阵

Tab 5 Initial factor rotation matrix

峰编号	第一主成分	第二主成分
1	0.834	-0.390
2	0.925	-0.280
3	0.917	0.186
4	0.911	0.070
5	0.887	-0.318
6	0.942	-0.222
7	0.888	0.072
8	0.961	-0.270
9	0.881	-0.145
10	-0.018	0.957
11	-0.109	0.868
12	0.795	0.344

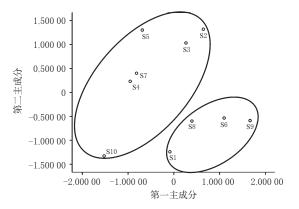


图6 主成分得分图

Fig 6 Scores of principal components

10批三妹木样品成分所表达的信息,以其共有峰峰面积 为变量,建立其品质评价模型。得到第一主成分的线性 关系表达式为: X_1 =0.834 共有峰1+0.925 共有峰2+ 0.917 共有峰 3+0.911 共有峰 4+0.887 共有峰 5+0.942 共 有峰6+0.888 共有峰7+0.961 共有峰8+0.881 共有峰9 -0.018共有峰10-0.109共有峰11+0.795共有峰12;第 二主成分的线性关系表达式为: $X_2 = -0.38$ 共有峰1-0.28 共有峰 2+0.186 共有峰 3+0.07 共有峰 4-0.318 共有 峰5-0.222 共有峰6+0.072 共有峰7-0.27 共有峰8-0.145 共有峰 9+0.957 共有峰 10+0.868 共有峰 11+0.344 共有峰12(注:表达式中各变量非原始峰面积,而是标准 化处理后峰面积)。将上述表达式与所对应的的2个主 成分的方差贡献率作内积后,得到三妹木质量综合评价 函数 X(综合得分) 的表达式为: X(综合得分) = (68.313X₁+19.217X₂)/86.108,综合得分越高表示药材样 品的整体质量越好[16]。结果显示,批次为S2、S3、S4、 S5、S7的样品的综合得分均>0,且以S2样品综合得分 最高。不同产地三妹木药材的主成分得分、综合得分及 排名情况见表6。

3 讨论

在前期研究中,笔者对样品的提取方法(超声、加热回流和冷浸法)、提取溶剂(不同体积分数的甲醇、乙醇和水)等进行了考察,最终采用75%乙醇超声提取作为

表6 不同产地三妹木主成分得分、综合得分及排名

Tab 6 Principal component scores, comprehensive scores and ranking of *L. formosa* from different origins

编号	第一主成分得分	第二主成分得分	综合得分	排名
S1	-1.225	-0.094	-0.97	9
S2	1.260	0.688	1.13	1
S3	0.960	0.342	0.82	3
S4	0.311	-0.906	0.04	5
S5	1.391	-0.707	0.92	2
S6	-0.519	1.130	-0.15	7
S7	0.358	-0.982	0.06	4
S8	-0.645	0.372	-0.42	8
S9	-0.528	1.610	-0.05	6
S10	-1.364	-1.452	-1.38	10

样品前处理方法。另外,笔者还对不同流动相体系(甲醇-水、甲醇-0.2%磷酸、乙腈-水、乙腈-0.2%磷酸)以及不同检验波长(260、300、350、380 nm)等 HPLC 色谱条件进行了优选。最终确定采用 Inertsil ODS-3(250 mm×4.6 mm,5 μm)为色谱柱,以乙腈-0.2%磷酸溶液为流动相进行梯度洗脱,检测波长为350 nm。在该色谱条件下,HPLC特征指纹图谱基线平稳,色谱峰较多且分离度较好。

通过"中药色谱指纹图谱相似度评价系统"(2012版)软件进行相似度分析,发现10批三妹木药材样品相似度均>0.9,表明药材样品质量稳定,差异较小。在12个共有峰中,通过与混合对照品溶液HPLC色谱图比对,指认出了夏佛塔苷、牡荆素和异牡荆素峰。各共有峰相对保留时间的RSD差异较小,但相对峰面积的RSD差异较大,说明不同产地三妹木药材中的成分类型一致,但含量有较大差异。这可能与三妹木药材的生长环境、采收季节等因素有关。

利用化学模式识别法中的聚类分析与主成分分析 相结合,对不同产地的三妹木样品进行聚类鉴别和判别 分析。聚类分析是在"相似度"的基础上对样品进行归 类,反映样品之间的稳定性。主成分分析则是对样品信 息的浓缩,利用方差最大原则,对降维后的多变量重新 组合成几个新的主分量,并尽可能多地保留原始变量的 信息,通过得分图对样品进行分类。在聚类分析中,将 10批三妹木药材样品聚为二大类,其中批次为S2、S3、 S4、S5、S7、S10的聚为一类,编号为S1、S6、S8、S9的聚 为另一类,与主成分得分结果一致。第一主成分的信息 主要来自于色谱峰2、3、4、6、8(夏佛塔苷);第二主成分 的信息主要来自于色谱峰9(牡荆素)、10(异牡荆素)。 综合得分大于0的药材的产地有来宾市金秀瑶族自治 县、梧州市藤县、来宾市象州县和桂林市临桂县,批次为 S2、S4、S7、S10的样品均采自来宾市金秀瑶族自治县, 但批次为S2的样品综合得分最高(得分越高质量越好), 这说明药材质量不仅与产地有关,还受采收时间、温度、

土壤、降雨量及不同植株年份累积的影响。

在本研究中,建立的方法可对三妹木药材进行整体性的评价,可为其质量控制提供一定的理论依据。由于中药材质量受多方面因素的影响,不同产地间的质量存在较大差异,利用主成分分析能筛选出共有的特征成分,并指导发现主要成分,但中药化学成分复杂,其他可作为质量评价的成分还未知,故下一步笔者将通过液质联用等分析技术,确定其他未知共有峰所代表的化合物,对三妹木药材进行进一步研究。

参考文献

- [1] 覃迅云,罗金裕,高志刚.中国瑶药学[M].北京:民族出版 社,2002:918-920.
- [2] 滕红丽,梅之南.中国壮药资源名录[M].北京:中医古籍 出版社,2014:128.
- [3] 国家中医药管理局《中华本草》编委会.中华本草:第四册 [M].上海:上海科技出版社,1999:544-546.
- [4] 朱华,田慧,蔡毅.壮药学[M].南宁:广西科学技术出版 社,2015:102.
- [5] 胡文波,石森林,高敏,等.美丽胡枝子不同部位总黄酮含量测定[J].中国现代应用药学,2008,25(6):542-544.
- [6] 刘庆华,王奎玲,王玮,等.美丽胡枝子核型分析[J].西北植物学报,2009,29(8):1595-1598.
- [7] 胡冬南,徐荣华,李萍球.美丽胡枝子多倍体诱导的初步研究[J].江西农业大学学报,2007,29(1):81-84.
- [8] 田宏,王志勇,张鹤山,等.不同温度下美丽胡枝子种子的 发芽特性[J].种子,2017,36(7):73-75.
- [9] 李强,李超.中药指纹图谱研究综述[J].齐鲁药事,2010,29(3):158-161.
- [10] 周欣,张琳,毛婵,等.基于化学计量学方法结合正交偏最小二乘判别分析的陈皮饮片 HPLC 指纹图谱研究[J].中草药,2019,50(9):2194-2200.
- [11] 靳贝贝,裴香萍,梁惠珍.青皮药材的HPLC指纹图谱建立及聚类分析和主成分分析[J].中国药房,2018,29 (24):3336-3339.
- [12] 冯华,王祥培,王世俊,等.辣椒药材的HPLC指纹图谱建立及聚类分析和主成分分析[J].中国药房,2019,30(8): 1078-1082.
- [13] 刘金亮,李隆云,何光华,等. HPLC指纹图谱结合化学计量学与抗氧化能力评价不同产地槐米的品质[J]. 中草药,2018,49(19):4644-4652.
- [14] 严宝飞,朱邵晴,宿树兰,等.不同产地黄芩茎叶UPLC指纹图谱与化学模式识别研究[J].南京中医药大学学报,2017,33(6):633-638.
- [15] 朱星宇,陈勇强. SPSS 多元统计分析方法及应用[M].北京:清华大学出版社,2005:241-247.
- [16] JAYARAMANN U, GUPTA AK. An efficient minutiae based geometric hashing for fingerprint database[J]. *Neurocomputing*, 2014, 137(5):115–126.

(收稿日期:2019-04-04 修回日期:2019-07-01) (编辑:林 静)