

基于傅里叶变换红外光谱法的红花药材质量分析

李贝贝¹, 王瑾¹, 杨亮¹, 杜为军¹, 艾散江·艾海提^{2*}, 关明^{1*}

(1. 新疆师范大学化学化工学院, 乌鲁木齐 830054; 2. 中国科学院新疆理化技术研究所, 乌鲁木齐 830000)

摘要: **目的** 建立傅里叶变换红外光谱法分析评价红花药材质量的分析方法。**方法** 采用傅里叶变换红外光谱法(Fourier transform infrared spectrometry, FTIR)对采集自新疆不同产地的20批红花药材进行测量, 建立指纹图谱; 运用聚类分析与主成分分析等统计学及化学模式识别技术, 对不同来源的红花药材进行红外光谱数据比较分析。**结果** 筛选出12个波数段, 形成了红花药材FTIR红外光谱指纹图谱共有模式; 精密度、稳定性和重复性实验结果表明, 共有峰波数的相对标准偏差(relative standard deviation, RSD)分别为0.00%~0.1%、0.00%~4.56%、0.32%~7.5%, 符合指纹图谱的要求; 20批样品相似度均大于95%, 大致可以分为3大类, 区域间差异较为明显。**结论** 本研究建立的方法简单、易行、快速, 无污染、样品耗量低, 为不同来源红花药材的鉴定、内在质量评价与质量控制提供了依据、奠定了基础。

关键词: 傅里叶变换红外光谱法; 红花; 聚类分析; 质量分析

Quality analysis of safflower based on Fourier transform infrared spectroscopy

LI Bei-Bei¹, WANG Jin¹, YANG Liang¹, DU Wei-Jun¹,
AISANJIANG Ai-Hai-Ti^{2*}, GUAN Ming^{1*}

(1. College of Chemistry and Chemical Engineering, Xinjiang Normal University, Urumqi 830054, China;
2. Xinjiang Institute of Physical and Chemical Technology, Chinese Academy of Sciences, Urumqi 830000, China)

ABSTRACT: Objective To establish a method for evaluating the quality of safflower by Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR). **Methods** A total of 20 batches of safflower collected from different areas of Xinjiang were measured by FTIR and fingerprint was established. The infrared spectra of safflower from different sources were compared and analyzed by statistics and chemical pattern recognition techniques such as cluster analysis and principal component analysis. **Results** A total of 12 kinds of wave number segments were selected to form a common pattern of FTIR infrared fingerprint of safflower. The experimental results of precision, stability and repeatability showed that the RSDs of common peak wave numbers were 0.00%–0.1%, 0.00%–4.56% and 0.32%–7.5%, respectively, which met the requirements of fingerprint. The similarity of 20 batches samples was over 95%, and they could be roughly divided into 3 kinds of categories, with obvious regional differences. **Conclusion** The established method is simple, feasible, rapid,

基金项目: 新疆维吾尔自治区“天山青年计划”优秀青年科技人才项目(2017Q027)

Fund: Supported by Outstanding Young Science and Technology Talents Project of Tianshan Youth Plan in Xinjiang Uygur Autonomous Region (2017Q027)

*通讯作者: 艾散江·艾海提, 博士, 主要研究方向为天然产物有效成分分离纯化研究。E-mail: aisj916@163.com

关明, 教授, 博士, 主要研究方向为仪器分析新方法的研究。E-mail: 635880760@qq.com

*Corresponding author: AISANJIANG Ai-Hai-Ti, Ph.D, Xinjiang Institute of Physical and Chemical Technology, Chinese Academy of Sciences, Urumqi 830000, China. E-mail: aisj916@163.com

GUAN Ming, Professor, Ph.D, Xinjiang Normal University, Urumqi 830054, China. E-mail: 635880760@qq.com

non-polluting and non-destructive, which provides basis and foundation for the identification, internal quality evaluation and quality control of safflower from different sources.

KEY WORDS: Fourier transform infrared spectroscopy; safflower; cluster analysis; quality analysis

1 引言

红花(*Carthamus tinctorius* L.)属菊科植物^[1], 含有多种有效成分, 是我国传统的中药材, 具有活血通经、止痛化瘀的功效^[2], 被广泛应用于心脑血管疾病和妇科疾病的治疗^[3]。然而, 不同产地、不同来源红花药材的化学成分及其含量呈现多样性, 为了保证用药安全, 建立合理、全面、能够真正反映药材内在质量的评价方法势在必行, 也是红花及其他中药现代化和国际化的关键^[4]。

中药材是靠各组分间的协同作用发挥药效, 单凭对其中一种或几种有效成分的含量进行测定, 以此为依据对中药材质量进行评价并不能全面反映质量的优劣差异。近年来, 建立反映复杂体系中化学成分全貌的指纹图谱已成为中药材质量鉴别的主要模式^[5], 方法主要包括色谱法和光谱法, 其中, 色谱法主要有薄层扫描色谱法(thin layer chromatography, TLC)^[6,7]、高效液相色谱法(high performance liquid chromatography, HPLC)^[8-11]、高效毛细管电泳法(high performance capillary electrophoresis, HPCE)^[12]以及气相色谱法(gas chromatography, GC)^[13-16]等; 光谱法主要有紫外光谱法(ultraviolet spectroscopy, UV)、红外光谱法(infrared spectroscopy, IR)、核磁共振法(nuclear magnetic resonance spectroscopy, NMR)和 X 射线衍射法(X-rays diffraction, XRD)等。目前, 已有的关于红花药材质量分析的相关报道, 不能全面评价其内在质量, 因此, 进一步研究能够反映红花药材内在质量的方法十分必要。

红外光谱能够对药材的全组分进行测定, 反映样品的整体信息, 结果具有完整性、全面性的特点, 除此之外, 红外光谱是一种绿色快速无损的技术^[17-20], 样品预处理简单, 无需消耗试剂, 已广泛用于中药材中有效成分的检测^[21-24]。本研究采用傅立叶变换红外光谱法(Fourier transform infrared spectroscopy, FTIR)对不同来源的 20 批红花药材样品化学成分进行分析, 建立了指纹图谱, 以期对红花药材的鉴定、评价及质量鉴别提供参考。

2 材料与方法

2.1 仪器、材料与试剂

TENSOR27 傅立叶变换近红外光谱仪(德国 Bruker 公司); 769YP-15A 粉末压片机(天津市科器新技术公司); 70-1 远红外干燥箱(上海申光仪器仪表有限公司); 标准检验筛(筛孔 200 目, 孔径 0.074 mm, 浙江上虞市五四纱筛厂)。

红花药材样品, 采自新疆伊犁地区、塔城地区、昌吉回族自治州、喀什地区、和田地区等不同来源的 20 批样品。

溴化钾(KBr)(优级纯, 天津市光复精细化工研究所); 无水乙醇(分析纯, 天津市武清区大良镇工业园)。

2.2 实验方法

2.2.1 样品前处理

将从各地区采集过来的 20 批红花样品放在阴凉通风处, 将其晾干。然后用玛瑙研钵对干燥的样品进行研磨, 进行均一化处理, 得到粉末状红花, 用 200 目筛子过筛, 供红外光谱测定用。将一部分溴化钾放入红外干燥箱, 进行干燥, 供 FTIR 测定用。

2.2.2 样品的制备

取适量干燥的溴化钾粉, 放置玛瑙研钵中, 研磨至很细的粉末, 取少量放入配套压片装置, 用粉末压片机压成约 2 mm 厚度的透明薄片, 进行空白片背景扫描。另取很少量过筛后备用的红花药材粉末, 与一定量的溴化钾研磨均匀, 压片, 进行测定。

2.2.3 数据处理以及分析

通过测定得到不同种植来源的 20 批红花药材样品的红外光谱图, 筛选出不同产地样品共有的 12 个特征峰, 并记录不同波数段的透过率值。以不同产地的红花样品为对象, 不同波数段的透过率做指标, 构建原始数据的矩阵, 列入表 1。利用统计学软件, 进行主成分分析及聚类分析。

2.2.4 方法学考察

(1) 精密度实验

取同一种红花药材样品, 按照 2.2.2 的方法制备压片, 并进行测定, 连续测定 5 次, 得到光谱图之后。计算共有峰的波数的相对标准偏差(relative standard deviation, RSD)。

(2) 稳定性实验

取同一种红花药材样品, 按照 2.2.2 的方法制备压片, 并 0、3、6、12、24 h 进行测定, 得到相应的谱图之后, 计算共有峰的波数的 RSD。

(3) 重复性实验

取同样的样品, 按照 2.2.2 的方法制备 5 份平行样品, 并进行测定, 得到相应的谱图之后, 计算共有峰的波数的 RSD。

3 结果与分析

3.1 方法学考察结果

精密度实验结果可以看出: 共有峰波数的 RSD 为

0.00%~0.1%，符合指纹图谱的要求；稳定性实验的结果表明：共有峰波数的RSD为0.00%~4.56%，说明样品在24 h内稳定，符合指纹图谱要求；重复性实验结果表明：共有峰波数的RSD为0.32%~7.5%，符合指纹图谱的要求。

3.2 红花药材 FTIR 指纹图谱

通过测定不同产地红花药材的红外光谱筛选出12个波数段，形成了红花药材的FTIR红外光谱指纹图谱，建立红花药材红外光谱的共有模式，如图1所示。在3427 cm⁻¹附近有较强且宽的吸收峰，其代表的可能是羟基的伸缩振动。羟基的伸缩振动ν_{O-H}位于3670~3230 cm⁻¹，游离态的羟基在3600 cm附近出现一个尖的谱带，当形成分子内或分子间氢键时，谱峰大幅度向低频移动，同时强度增加，谱带变宽。伯胺的伸缩振动范围也在3500~3200 cm⁻¹，但是其峰形比较尖锐，而红花药材中特征峰峰比较宽，因此，初步确定该峰为羟基峰。2851.6 cm⁻¹处的峰应该是醛基质子的伸缩振动，此外，1738.4 cm⁻¹峰可能是醛的羰基峰。2921 cm⁻¹和2851 cm⁻¹处的2个吸收峰，可能是亚甲基的不对称伸缩振动和对称变形振动。1738.4 cm⁻¹和1244.3 cm⁻¹2个特征峰可能是代表酯类化合物，因为酯类在的吸收首先应1750 cm⁻¹附近羰基ν_{C=O}吸收峰以及1250 cm⁻¹附近ν_{C-O}吸收峰。同时，1244.3 cm⁻¹处出现的峰可能是属于芳香酮类化合物特征峰。1633 cm⁻¹处的峰可能代表的是ν_{C=O}伸缩振动，同时，也有可能是酰胺类化合物中枪机的伸缩振动。1515 cm⁻¹处出现的响应很低的小峰可能是代表仲胺类的1个吸收峰，同时代表带有硝基或者羰基的芳香环类化合物的特征峰。由于取代基为强吸电子取代基，从而强度大大削弱。1448.8 cm⁻¹处出现的峰可能是芳香骨架振动的特征峰。832.7 cm⁻¹处出现的峰可能是对二取代的芳环所产生的特征峰。

1381.4 cm⁻¹处峰可能是代表硝基化合物的特征吸收峰。1052.1 cm⁻¹处峰肯恩恶搞代表的是酸酐类成分，因为酸酐类化合物在1100~1000 cm⁻¹之间会出现一个强大而宽的C-O-C伸缩振动吸收，可以作为酸酐的红外光谱特征。667.4 cm⁻¹处的特征峰可能是，烯烃类化合物的特征峰。

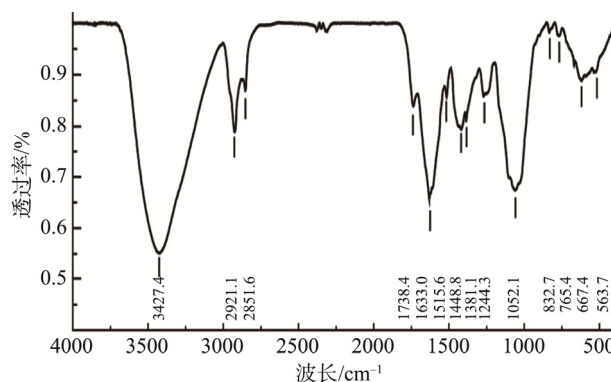


图1 红花药材红外光谱图
Fig.1 FTIR spectrum of Safflower

不同产地红花药材的红外光谱存在一定的差异，主要的表现在于部分特征峰的吸收相对强度有一定的不同，另外指纹区中有些峰存在微小的差异。这可能与不同生长环境条件的差异有关。不同产地的红花样品典型红外谱图叠加效果如图2所示，从图中可以看出不同产地红花的红外光谱吸收峰的峰型和峰位相似，但不同波长下的透过率存在差异，北疆地区的透过率较大，南疆地区的透过率较小，其中，塔城地区的红花样品透过率为最大，其次是伊犁地区和塔城地区的透过率较大，而喀什和和田地区样品的透过率较小。

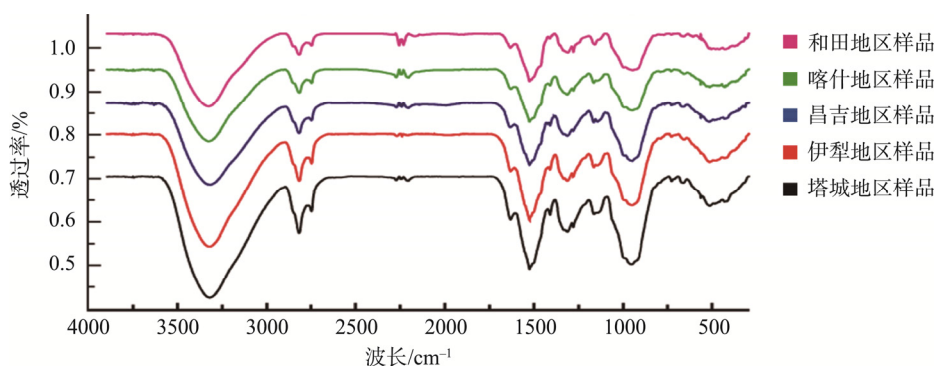


图2 不同产地红花样品典型 FTIR 谱图比较

Fig.2 The comparison for typical FTIR spectra of safflower samples from different places

3.3 样品 FTIR 谱图快速比较

不同波数段的透过率做指标，构建原始数据的矩阵，列入表1。利用红外光谱仪随机软件 OPUS6.0 中的“快速比较(quick comparison)”功能，计算反映红外光谱相似度的相关因子 *r*，对红花各样品的红外光谱图进行相似度比较，

结果列入表2。

从表2可以看出，2、3、4、5、6号样品相似度较高，为98.94%~99.83%，其中，3号和5号样品的相似度高达99.83%；同处塔城地区的8、9、13号样品的相似度为99.30%~99.85%；同处昌吉地区的7、11、14、15号样品的

相似度略差, 为 96.84%~99.80%, 其中, 14、15 号样品的相似度较高, 而 7、11 号样品出现了相似度较低的情况, 为 96.76%和 97.78%, 其原因可能是因为 7 号和 11 号样品所生长的地理环境和气候变化与其他地区有明显的差异所致; 同处和田地区的 1、12 号样品的相似度为 97.63%, 与其他样品比较出现了异常情况, 其原因可能是该地区的红花品种对和田地区气候和地理环境还没有产生良好的适应性。

与和田地区相比, 同处喀什地区的 17、19、20 号样品的相似度较高, 为 98.62%~99.09%。总体而言, 红外光谱的快速比较功能较大程度上反映了地理环境和气候因素对样品化学组分的影响。20 批样品的相似度均大于 95%, 同一地区样品的 FTIR 光谱图的相似度普遍较高, 但是, 南疆地区和北疆地区红外光谱的相似度有一定的差异, 和田地区的样品出现了同一地区样品相似度差异较大的异常情况。

表 1 不同波数下各样品的透过率(%)
Table 1 Transmittance values at the different wave numbers of the sample (%)

样 品	波长/cm ⁻¹											
	3435~3425	2915~2925	2845~2855	1732~1742	1628~1638	1510~1520	1433~1443	1376~1386	1250~1270	1045~1065	825~835	617~627
1	0.731	0.922	0.955	0.947	0.826	0.981	0.940	0.932	0.960	0.866	0.996	0.945
2	0.671	0.877	0.923	0.895	0.765	0.928	0.881	0.889	0.917	0.797	0.989	0.922
3	0.585	0.828	0.893	0.864	0.682	0.870	0.836	0.843	0.879	0.736	0.988	0.883
4	0.565	0.823	0.890	0.842	0.668	0.850	0.785	0.801	0.842	0.681	0.986	0.910
5	0.612	0.842	0.902	0.866	0.701	0.875	0.830	0.852	0.884	0.728	0.986	0.923
6	0.592	0.847	0.910	0.879	0.697	0.853	0.803	0.830	0.882	0.702	0.992	0.934
7	0.707	0.872	0.922	0.897	0.777	0.918	0.887	0.900	0.926	0.809	0.992	0.926
8	0.698	0.878	0.924	0.896	0.771	0.903	0.866	0.881	0.912	0.783	0.990	0.929
9	0.698	0.888	0.934	0.890	0.772	0.916	0.883	0.895	0.930	0.787	0.990	0.956
10	0.695	0.900	0.940	0.911	0.776	0.922	0.876	0.894	0.930	0.796	0.996	0.956
11	0.683	0.897	0.939	0.917	0.785	0.932	0.768	0.906	0.942	0.816	0.992	0.935
12	0.683	0.901	0.940	0.907	0.770	0.919	0.800	0.879	0.913	0.814	0.994	0.925
13	0.480	0.760	0.850	0.826	0.627	0.839	0.794	0.789	0.843	0.628	0.978	0.869
14	0.551	0.789	0.869	0.392	0.656	0.856	0.839	0.811	0.858	0.674	0.982	0.888
15	0.588	0.839	0.905	0.880	0.702	0.891	0.832	0.857	0.903	0.736	0.987	0.910
16	0.596	0.833	0.901	0.874	0.704	0.884	0.832	0.849	0.897	0.738	0.990	0.907
17	0.732	0.914	0.949	0.927	0.803	0.940	0.906	0.920	0.950	0.646	0.992	0.934
18	0.600	0.860	0.917	0.899	0.728	0.900	0.847	0.864	0.904	0.749	0.988	0.915
19	0.731	0.922	0.955	0.947	0.826	0.981	0.940	0.932	0.960	0.866	0.996	0.945
20	0.671	0.877	0.923	0.895	0.765	0.928	0.881	0.889	0.917	0.797	0.989	0.922

表 2 红花样品快速比较的结果
Table 2 Results of quick comparison among safflower samples

样 品	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
1	100	98.21	96.66	97.19	95.81	95.39	96.50	96.05	97.19	97.37	98.69	97.63	96.36	95.54	97.88	96.14	98.85	98.14	99.50	96.72
2	98.21	100	99.58	99.80	99.31	98.94	99.62	99.42	99.59	99.34	98.81	99.83	98.99	99.45	99.65	99.58	99.26	99.55	98.17	99.56
3	96.66	99.58	100	99.81	99.83	99.41	99.90	99.77	99.64	98.84	97.73	99.28	99.52	99.72	99.61	98.45	98.57	99.25	96.77	99.61
4	97.19	99.80	99.81	100	99.69	99.35	99.85	99.78	9.75	99.20	98.12	99.59	99.36	99.58	99.62	98.82	98.90	99.35	97.17	99.81
5	95.81	99.31	99.83	99.69	100	99.78	99.86	9.93	99.62	98.97	97.19	98.87	99.67	99.91	99.35	98.04	97.99	99.09	95.87	99.76

续表 2

样品	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
6	95.39	98.94	99.41	99.35	99.78	100	99.50	99.72	99.36	99.13	96.84	98.60	99.38	99.63	98.96	97.61	97.58	99.87	95.34	99.64
7	96.50	99.62	99.90	99.85	99.86	99.5	100	99.88	99.70	99.10	97.78	99.23	99.51	99.80	99.48	98.51	98.56	99.19	96.62	99.78
8	96.05	99.42	99.77	99.78	99.93	99.72	99.88	100	99.79	99.16	97.61	99.00	99.60	99.85	99.45	98.39	98.28	99.25	98.12	99.84
9	97.19	99.59	99.64	99.75	99.62	99.36	99.70	99.79	100	99.28	98.55	99.30	99.37	99.54	99.78	99.20	98.93	99.67	97.22	99.75
10	97.37	99.34	98.84	99.20	98.97	99.13	99.10	99.16	99.28	100	98.73	99.32	98.15	98.62	98.95	98.82	98.84	99.18	97.43	99.4
11	98.69	98.81	97.73	98.12	97.19	96.84	97.78	97.61	98.55	98.73	100	98.98	96.55	96.84	98.76	99.57	99.48	99.09	99.13	97.93
12	97.63	99.83	99.28	99.59	98.87	98.60	99.23	99.00	99.30	99.32	98.98	100	98.35	98.56	99.44	99.12	99.48	99.35	98.57	99.25
13	96.36	98.99	99.52	99.36	99.67	99.38	99.51	99.60	99.37	98.15	96.55	98.35	100	99.85	99.25	97.67	97.31	98.93	95.51	99.33
14	95.54	99.45	99.72	99.58	99.91	99.63	99.80	99.85	99.54	98.62	96.84	98.56	99.85	100	99.27	97.92	97.70	98.97	95.48	99.65
15	97.88	99.65	99.61	99.62	99.35	98.96	99.48	99.45	99.78	98.95	98.76	99.44	99.25	99.27	100	99.37	99.18	99.86	97.74	99.45
16	96.14	99.58	98.45	98.82	98.04	97.61	98.51	98.39	99.20	98.82	99.57	99.12	97.67	97.92	99.37	100	99.15	98.17	99.82	96.95
17	98.85	99.26	98.57	98.90	97.99	97.58	98.56	98.28	98.93	98.84	99.47	99.48	97.31	97.70	99.18	99.15	100	99.25	99.09	98.62
18	98.14	99.55	99.25	99.35	99.09	99.87	99.19	99.25	99.67	99.18	99.09	99.35	98.93	98.97	99.86	98.17	99.25	100	98.00	99.32
19	99.50	98.17	96.77	97.17	95.87	95.34	96.62	98.12	97.22	97.43	99.13	98.57	95.21	95.48	97.74	99.82	99.09	98.00	100	98.64
20	96.72	99.56	99.61	99.81	99.76	99.64	99.78	99.84	99.75	99.45	97.93	99.25	99.33	99.65	99.46	96.95	98.62	99.32	98.64	100

3.4 数据处理以及统计分析

3.4.1 主成分分析

对表 1 数据进行主成分分析, 结果列入表 3。从表 3 中可以看出, 第一主成分是最主要的成分, 其方差贡献率到达 80.1%, 而前 2 个主成分的累计方差贡献率已到达 88.86%, 这 2 个主成分已可以解释绝大部分的光谱信息, 丢失的信息量仅为 11.14%, 因此, 这 2 个主成分基本可以表征各种红花的相似性关系。

表 3 红花样品主成分分析

Table 3 principal component analysis of safflower sample

主成分数	方差的贡献率/%	累积贡献率/%
1	80.08	80.08
2	8.774	88.85
3	3.022	91.88
4	2.085	93.96
5	1.295	95.26
6	1.504	96.76
7	1.497	98.26
8	1.175	99.43
9	0.383	99.80
10	0.126	99.94
11	0.054	100.0
12	0	100.0

以第一主成分和第二主成分得分值做散点图, 如图 3 所示。从图 3 中可以看出, 1、17 号样品位于右上区域, 距离很近, 形成第 I 类, 主要来自南疆地区; 2、7、8、9、10、11、12 号样品的距离相近, 形成第 II 类, 主要是来自北疆地区昌吉和塔城地区及少部分南疆和田地区的样品; 3、4、5、6、15、16、18 号样品位于左中下部分, 距离很近, 形成第 III 类, 主要来自北疆伊犁和塔城地区; 而喀什地区 19、20 号样品及北疆 13、14 号样品与其他样品距离均较远。主成分分析结果表明, 新疆不同产地红花药材南疆地区与北疆地区样品之间的差异相对明显, 但北疆地区区域内样品之间的差异并不明显。

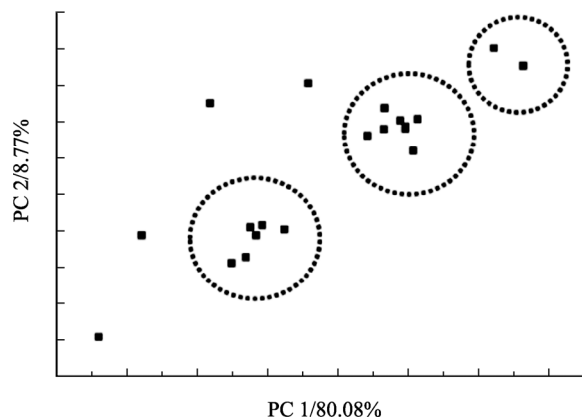


图 3 红花样品第一、二主成分得分值散点图
Fig.3 The plot of PC1×PC2 scores of safflower by PCA analysis

3.4.2 聚类分析

为了进一步明确样品的分类关系, 对光谱图数据进行了聚类分析, 以明确样品之间的分组结构, 表征不同地区红花样品的分化关系, 结果如图 4 所示。结果显示, 20 批红花样品可聚为 3 大类。其中, 主要来自塔城地区和昌吉地区和少部分喀什地区的样品聚为第 I 类; 主要来自伊犁地区的样品聚为第 II 类, 主要来自北疆地区的样品聚为第 III 类。

结合快速比较、主成分分析和聚类分析结果可以看出: 由于天山山脉自然形成的地理位置格局以及南北疆地理环境和气候变化的多样性, 造成新疆地区红花样品存在区域性差异; 以北疆地区的药材样品为例; 因地理环境和气候相似, 伊犁地区、塔城地区、以及昌吉地区部分样品出现相似度高, 聚为一类等情况。总体而言, 聚类分析快速比较及主成分分析的结果基本一致, 进一步说明了地理环境和气候因素对红花药材质量的影响。

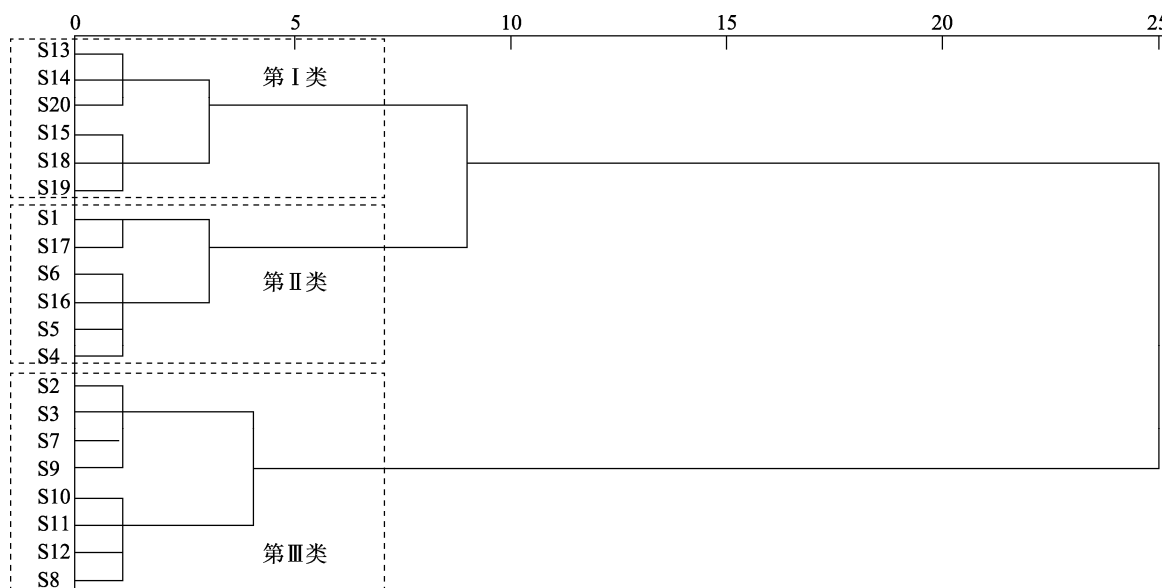


图 4 不同品种红花样品的聚类树状图

Fig.4 Dendrogram of safflower from different places

4 结论与讨论

采用傅里叶变换红外光谱对不同来源的 20 批红花药材样品进行了鉴别以及评价, 建立了红花药材红外光谱指纹图谱的共有模式, 方法学考察结果表明, 建立的方法可靠、稳定、重复性好, 符合指纹图谱的要求。不同来源红花的傅里叶变换红外光谱图反映出不同来源红花化学成分含量或有效成分含量之间差异, 一定程度上也反映出药材产地对药材质量的影响, 为红花药材鉴定、评价及质量鉴别提供了一种快速、简便新型的方法。

参考文献

- [1] Fan LJ, Guo ML. Progress of safflower (*Carthamus tinctorius* L.) regeneration through tissue culture [J]. J Med Coll PLA, 2013, 28(5): 289-301.
- [2] 全国中草药汇编编写组. 全国中草药汇编[M]. 北京: 人民卫生出版社, 1992. National Compilation Group of Chinese Herbal Medicine. National compilation of Chinese herbal medicine [M]. Beijing: People's Health Publishing House, 1992.
- [3] Fan L, Zhao HY, Xu M, *et al.* Qualitative evaluation and quantitative determination of 10 major active components in *Carthamus tinctorius* L. by high-performance liquid chromatography coupled with diode array detector [J]. J Chromatogr A, 2009, 1216: 2063-2070.
- [4] Upadhyay R, Ramalakshmi K, Rao LJM. Microwave-assisted extraction of chlorogenic acids from green coffee beans [J]. Food Chem, 2012, 130(1): 184-188.
- [5] 张鹏, 孙素琴, 周群, 等. 红花注射剂和野菊花注射剂的红外光谱分析 [J]. 光谱学与光谱分析, 2007, 27(8): 1539-1542. Zhang P, Sun SQ, Zhou Q, *et al.* Study on quality control of safflower injection and wild chrysanthemum injection with fourier transform infrared spectroscopy [J]. Spectrosc Spectr Anal, 2007, 27(8): 1539-1542.
- [6] 关明, 王凤琳, 陈坚. 不同地理居群大蒜药材高效薄层色谱指纹图谱研究 [J]. 药物分析杂志, 2011, 31(10): 1924-1929. Guan M, Wang FL, Chen J. Study on high performance thin layer chromatographic fingerprint of garlic from different geographical populations [J]. J Pharm Anal, 2011, 31(10): 1924-1929.
- [7] 苏星, 李相坤, 吴搜, 等. 北沙参药材的薄层色谱指纹图谱研究 [J]. 中药材, 2012, 35(2): 210-213. Su X, Li XK, Wu S, *et al.* Study on TLC fingerprint of *Radix Salviae Miltiorrhizae* [J]. Chin Med Herbs, 2012, 35(2): 210-213.

- [8] 王枚博, 毛秀红, 王柯, 等. 麻仁润肠胶囊特征图谱研究及苦杏仁气相鉴别[J]. 中成药, 2015, 37(6): 1262-1266.
Wang MB, Mao XH, Wang K, *et al.* Specific chromatogram research and GC identification of bitter apricot seed in Maren Runchang Soft Capsules [J]. Chin Tradit Patent Med, 2015, 37(6): 1262-1266.
- [9] 周永妍, 高会芹, 姜国志, 等. 独脚金药材 HPLC-DAD 特征图谱研究[J]. 药物分析杂志, 2016, 37(6): 1225-1230.
Zhou YY, Gao HQ, Jiang GZ, *et al.* Study on the characteristic atlas of radix euphorbiae by high performance liquid chromatography-DAD [J]. J Pharm Anal, 2016, 37(6): 1225-1230.
- [10] 徐硕, 尚明英, 刘广学, 等. 高效液相色谱法测定土茯苓药材中七种活性成分的含量[J]. 中国中药杂志, 2015, 40(3): 469-479.
Xu S, Shang MY, Liu GX, *et al.* Simultaneous determination of seven bioactive constituents in *Smilacis Glabrae Rhizoma* by high-performance liquid chromatography [J]. China J Tradit Chin Med, 2015, 40(3): 469-479.
- [11] 何晶晶, 杜江. 景天三七中槲皮苷、槲皮素及山奈酚含量的高效液相色谱法同时测定[J]. 时珍国医国药, 2016, 27(3): 524-526.
He JJ, Du J. Simultaneous determination of quercetin, quercetin and kaempferol in *Sedum notoginseng* by high performance liquid chromatography [J]. Lishizhen Med Mater Med Res, 2016, 27(3): 524-526.
- [12] 崔英杰, 李玉琴, 于学美, 等. 中药材祁州漏芦几种有效成分的高效毛细管电泳法测定[J]. 时珍国医国药, 2010, 21(9): 2399-2400.
Cui YJ, Li YQ, Yu XM, *et al.* Determination of several active components of *Rhizoma Phellodendri* in Qizhou by high performance capillary [J]. Lishizhen Med Mater Med Res, 2010, 21(9): 2399-2400.
- [13] Yang YH, Kong WJ, Feng HH, *et al.* Quantitative and fingerprinting analysis of *Pogostemon cablin* based on GC-FID combined with chemometrics [J]. J Pharm Biomed Anal, 2016, 121: 84-90.
- [14] Li YQ, Kong DX, Lin XM, *et al.* Quality evaluation for essential oil of *Cinnamomum verum* leaves at different growth stages based on GC-MS, FTIR and microscopy [J]. Food Anal Method, 2016, 9: 202-212.
- [15] 李万娟, 郭艳玲, 商春丽, 等. 北苍术苍术素、苍术酮、 β -桉叶醇测定及特征图谱研究[J]. 中草药, 2016, 47(2): 330-335.
Li WJ, Guo YL, Shang CL, *et al.* Determination of atractylosin, atractylone and beta-eucalyptus alcohol and characteristic atlas [J]. Chin Tradit Herb Drug, 2016, 47(2): 330-335.
- [16] Huang ZP, Huang YL, Xu SQ, *et al.* Discrimination of the traditional Chinese medicine from *Schisandra* fruits by flash evaporation-gas chromatography/mass spectrometry and fingerprint analysis [J]. Chromatographia, 2015, 78: 1083-1093.
- [17] 王宁, 傅春华, 周爱敏, 等. 近红外漫反射光谱法直接测定小儿消食片中总有机酸的含量[J]. 中国中药杂志, 2007, 32(15): 1597.
Wang N, Fu CH, Zhou AM, *et al.* Direct determination of total organic acids in Xiaoyer Xiaoshi tablets by near infrared diffuse reflectance spectrometry [J]. China J Chin Mater Med, 2007, 32(15): 1597.
- [18] 任卫波, 韩建国, 张蕴薇, 等. 近红外光谱分析原理及其在牧草航天育种的应用前景[J]. 光谱学与光谱分析, 2008, 28(2): 303.
Ren WB, Han JG, Zhang WW, *et al.* Principle of near infrared spectroscopy and its application prospect in forage space breeding [J]. Spectrosc Spectr Anal, 2008, 28(2): 303.
- [19] 李彦周, 闵顺耕, 刘霞. 近红外光谱技术在中草药分析中的应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2008, 28(7): 1549-1553.
Li YZ, Min SG, Liu X. Application of near infrared spectroscopy in the analysis of Chinese herbal medicine [J]. Spectrosc Spectr Anal, 2008, 28(7): 1549-1553.
- [20] 陈雪英, 陈勇, 王龙虎, 等. 红花醇沉液浓缩除醇过程中多元质控指标的近红外快速检测[J]. 药物分析杂志, 2010, 30(11): 2086-2087.
Chen XY, Chen Y, Wang LH, *et al.* Near infrared rapid detection of multivariate quality control indicators in the process of concentrating and removing alcohol from safflower alcohol sediment [J]. J Pharm Anal, 2010, 30(11): 2086-2087.
- [21] 雷敬卫, 刘建营, 白雁, 等. 近红外光谱法快速测定山楂药材中球松素含量[J]. 中国现代应用药学, 2011, 28(11): 1000-1003.
Lei JW, Liu JY, Bai Y, *et al.* Rapid determination of conidin in sandalwood by near infrared spectroscopy [J]. Chin J Mod Appl Pharm, 2011, 28(11): 1000-1003.
- [22] 白雁, 李珊, 王星, 等. 近红外光谱法快速测定金银花中绿原酸的含量[J]. 中国实验方剂学杂志, 2011, 17(5): 66-69.
Bai Y, Li S, Wang X, *et al.* Rapid determination of chlorogenic acid in Honeysuckle by near infrared spectroscopy [J]. Chin J Exp Tradit Med Form, 2011, 17(5): 66-69.
- [23] 张聪, 胡馨, 张英华, 等. 近红外光谱法测定西红花中西红花苷 I 含量的研究[J]. 中成药, 2010, 32(9): 1559-1561.
Zhang C, Hu X, Zhang YH, *et al.* Determination of safflower I in *Crocus sativus* by near infrared spectroscopy [J]. Chin Patent Med, 2010, 32(9): 1559-1561.
- [24] 王小梅, 焦龙, 刘小丽, 等. 近红外漫反射光谱法定量分析川芎中的阿魏酸含量[J]. 药物分析杂志, 2011, 31(6): 1016-1019.
Wang XM, Jiao L, Liu XL, *et al.* Quantitative analysis of ferulic acid in *Ligusticum Chuanxiong* by near infrared diffuse reflectance spectroscopy [J]. J Pharm Anal, 2011, 31(6): 1016-1019.

(责任编辑: 武英华)

作者简介



李贝贝, 硕士, 主要研究方向为仪器分析新方法的研究。
E-mail: 578183145@qq.com

艾散江·艾海提, 博士, 主要研究方向为天然产物有效成分分离纯化研究。
E-mail: aisj916@163.com

关明, 教授, 博士, 主要研究方向为仪器分析新方法的研究。
E-mail: 635880760@qq.com