

基于指纹图谱、化学模式识别及网络药理学的艾纳香质量标志物预测分析

张正伟, 程 彬, 郭长茂, 姚 诗, 穆开朗, 沙 珊, 庞玉新*

贵州中医药大学, 贵州贵阳 550025

摘 要: 为了明确艾纳香药材与艾粉的成分特征, 筛选抗炎活性成分, 并确定质量标志物, 为艾纳香质量控制提供科学依据, 本研究以贵州贞丰、册亨等地的 15 批艾纳香药材及 14 批艾粉为材料, 使用 GC-MS 建立指纹图谱, 运用聚类分析 (HCA)、主成分分析 (PCA) 和正交偏最小二乘法-判别分析 (OPLS-DA) 法分析数据, 通过网络药理学, 构建“成分-靶点-通路”网络预测核心抗炎成分, 辅以分子对接验证。结果表明: 共鉴定出 31 种化合物, 艾纳香药材与艾粉分别标定了共有峰 22、16 个, 样本相似度分别介于 0.971~0.997、0.991~0.999 之间, 成分轮廓一致性良好, 整体质量稳定; HCA 将艾纳香药材聚为 3 类、艾粉聚为 4 类, PCA 各提取得到 4 个主成分, 累计贡献率分别达 87.137%和 88.495%, 可有效表征样品质量; OPLS-DA 从艾纳香药材中筛选出左旋龙脑、樟脑等 5 个差异标志物, 从艾粉中筛选出 β -石竹烯、花椒油素等 6 个差异标志物。网络药理学表明, 棕榈酸、3-辛醇、 α -桉叶醇、 γ -桉叶醇、紫苏醛可能为艾纳香核心抗炎活性成分, 可作用于 EGFR、PTGS2、ESR1、JAK2、PPARG 等核心靶点, 调控花生四烯酸代谢、Th17 细胞分化、过氧化物酶体增殖物激活受体信号通路和 JAK-STAT 信号通路等炎症相关通路; 分子对接结果显示, 5 个抗炎成分与靶点蛋白对接情况良好, 结合能均小于 0 kcal/mol。本研究确定左旋龙脑、樟脑、 γ -桉叶醇为艾纳香质量标志物, 本研究结果可为艾纳香药材质量评价、抗炎机制研究及资源高效利用提供支撑。

关键词: 艾纳香; 指纹图谱; 化学识别模式; 网络药理学; 质量标志物

中图分类号: S567.2

文献标志码: A

Quality Markers Prediction of *Blumea balsamifera* Based on Fingerprint, Chemical Pattern Recognition and Network Pharmacology

ZHANG Zhengwei, CHENG Bin, GUO Changmao, YAO Shi, MU Kailang, SHA Shan, PANG Yuxin*

Guizhou University of Traditional Chinese Medicine, Guiyang, Guizhou 550025, China

Abstract: In order to clarify the chemical composition characteristics of *Blumea balsamifera*, screen anti-inflammatory active components, and identify quality markers (Q-markers), and to provide a scientific basis for the quality control of *B. balsamifera*, a total of 15 *B. balsamifera* raw herb and 14 powder herb from Zhenfeng, Ceheng and other regions in Guizhou province were utilized for the research. Gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) was employed to establish fingerprint profiles. Hierarchical cluster analysis (HCA), principal component analysis (PCA), and orthogonal partial least squares-discriminant analysis (OPLS-DA) were applied for data processing. To predict the core anti-inflammatory components, a “component-target-pathway” network was constructed using network pharmacology. This prediction was further supplemented by molecular docking verification. A total of 31 compounds were identified. In the GC-MS analysis, 22 and 16 common peaks were calibrated for the *B. balsamifera* raw herb and powder herb, with sample similarities ranging from 0.971 to 0.997 and 0.991 to 0.999, respectively. The consistency in chemical profiles

收稿日期 2025-10-30; 接受日期 2025-12-08

基金项目 国家中医药管理局高水平中医药重点学科建设项目 (No. zyyzdxk-2023186); 贵州中医药大学喀斯特药用资源保护与创新利用科技创新人才团队项目 (贵中医 TD 合字[2022]001 号)。

作者简介 张正伟 (1998—), 男, 硕士研究生, 研究方向: 中药及民族药资源分类鉴定与质量控制。*通信作者 (Corresponding author): 庞玉新 (PANG Yuxin), E-mail: pyxmarx@163.com。

indicates that the overall quality of the materials is stable. HCA classified *B. balsamifera* raw herb into 3 clusters and powder herb into 4 clusters. PCA extracted 4 principal components for each sample type, with cumulative contribution rates of 87.137% and 88.495%, respectively, which could effectively characterize sample quality. OPLS-DA identified 5 differential markers (including L-borneol and camphor) from *B. balsamifera* raw herb and 6 differential markers (including β -caryophyllene and xanthoxylol) from powder herb. Network pharmacology analysis suggested that palmitic acid, 3-octanol, α -eudesmol, γ -eudesmol and perillaldehyde might be the core anti-inflammatory components of *B. balsamifera*. The components could act on key targets such as EGFR, PTGS2, ESR1, JAK2 and PPARG, and regulate inflammation-related pathways including arachidonic acid metabolism, Th17 cell differentiation, PPAR signaling pathway and JAK-STAT signaling pathway. Molecular docking results showed that the 5 anti-inflammatory components had good binding affinity with target proteins, with binding energies < 0 kcal/mol. L-borneol, camphor and γ -eudesmol were identified as the Q-markers of *B. balsamifera*. The results would provide support for the quality evaluation, anti-inflammatory mechanism research, and efficient resource utilization of *B. balsamifera*.

Keywords: *Blumea balsamifera* (L.) DC.; fingerprinting; chemical pattern recognition; network pharmacology; quality markers

DOI: 10.3969/j.issn.1000-2561.2026.03.020

艾纳香 [*Blumea balsamifera* (L.) DC.] 为多年生菊科草本或亚灌木植物, 又名大风艾、牛耳艾^[1], 广泛分布于我国贵州、云南、广西、广东、福建和台湾等地^[2]。其中, 贵州的主产区位于册亨、望谟和罗甸等南部边沿的低热河谷区域^[3]。艾纳香中含有挥发油、黄酮类、甾体类、萜类、苯丙素类等成分^[4], 是药物艾片的唯一生产原料^[5]。现代药理研究发现, 艾纳香具有抗炎^[6]、抗氧化^[7-8]、抗菌^[9]、抗病毒^[10]及抗衰老^[11]等药理活性, 可用于治感冒、风湿性关节炎、产后风痛、跌打损伤、湿疹及皮炎^[12]。艾粉是艾纳香茎叶经水蒸气蒸馏提取所得的产物, 通常在种植基地完成加工提取^[13], 经进一步分离后, 得到艾片与艾纳香油, 提取后的剩余物料多废弃^[14]。市场上艾纳香多以艾粉的形式流通, 其组分已开发出如咽立爽滴丸、金喉健喷雾等药物^[4, 15], 疗效良好。

当前, 艾纳香的质量控制研究仍无法满足产业发展对原料质量“稳定、可控”的核心需求。现有研究通过指纹图谱技术与聚类分析方法, 初步探索了不同来源艾纳香及其提取物中成分的种类与含量相似性^[13, 16], 但仍停留在成分对比阶段, 缺乏对导致艾纳香质量差异的标志性成分的深入挖掘与验证。基于此, 本研究使用化学识别模式分析, 结合网络药理学, 围绕艾纳香药材与艾粉间成分的溯源分析, 多角度探讨艾纳香的质量标志物, 阐明其抗炎的物质基础, 进一步拓展艾纳香药材质量控制研究, 为艾纳香的质量综合评价与控制提供理论依据。

1 材料与方法

1.1 材料

1.1.1 仪器 GCMS-QP2020NX 气相色谱质谱联用仪 (日本岛津公司); SH-I-5Si1 MS 色谱柱 (30 m×0.25 mm×0.25 μ m) (日本岛津公司); KQ-400DE 型超声波清洗仪 (昆山市超声仪器有限公司); XS205 型电子分析天平 (瑞士梅特勒-托利多)。
1.1.2 试剂与药材 乙酸乙酯 (色谱级, 批号: I4210542) 购自上海阿拉丁生化科技股份有限公司; 15 批艾纳香药材及 14 批艾粉分别采自贵州省贞丰、册亨、罗甸、望谟、安龙等县, 经贵州中医药大学庞玉新鉴定为艾纳香药材及艾粉。艾纳香药材及艾粉来源见表 1。

1.2 方法

1.2.1 供试品溶液的制备 称取艾纳香药材粉末 0.5 g (过 2 号筛), 置于具塞锥形瓶中, 加入 10 mL 乙酸乙酯溶液, 超声提取 (功率为 400 W, 频率为 40 kHz) 40 min, 用 0.45 μ m 微孔滤膜过滤, 取滤液。称取艾粉 10 mg, 置于 10 mL 容量瓶中, 以乙酸乙酯溶液溶解定容, 用 0.45 μ m 微孔滤膜过滤, 取滤液。

1.2.2 色谱条件 SH-I-5Si1 MS 色谱柱 (30 m×0.25 mm×0.25 μ m) 升温程序为: 初始温度 50 $^{\circ}$ C, 保持 2 min, 以 4 $^{\circ}$ C/min 升温至 140 $^{\circ}$ C, 保持 6 min, 以 5 $^{\circ}$ C/min 升温至 190 $^{\circ}$ C, 保持 6 min, 再以 4 $^{\circ}$ C/min 升温至 210 $^{\circ}$ C, 保持 10 min; 进样口温度为 250 $^{\circ}$ C; 载气为高纯氦气; 流速为 1 mL/min; 分流比为 10 : 1; 进样量为 1 μ L。电子轰击 (EI) 离子源; 离子源温

表 1 艾纳香药材及艾粉来源
Tab. 1 Sources of *B. balsamifer* raw herb and powder herbs

药材 Raw herb		药粉 Powder herb	
编号 No.	产地 Origin	编号 No.	产地 Origin
S1	罗甸县红水河镇云里村	A1	罗甸县红水河镇云里村
S2	罗甸县红水河镇把等	A2	罗甸县红水河镇云里村
S3	册亨县岩架镇花冗村	A3	册亨县双江镇八望村
S4	册亨县双江镇八望村	A4	册亨县双江镇坝麦村
S5	册亨县双江镇坝麦村	A5	望谟县王母街道
S6	望谟县王母街道	A6	望谟县昂武镇红湖村
S7	望谟县昂武镇红湖村	A7	望谟县昂武镇红湖村
S8	望谟县昂武镇红湖村	A8	望谟县昂武镇红湖村
S9	望谟县昂武镇昂武村	A9	望谟县昂武镇昂武村
S10	望谟县昂武镇昂武村	A10	望谟县昂武镇昂武村
S11	望谟县昂武镇和亭村	A11	望谟县昂武镇昂武村
S12	望谟县昂武镇上亭村	A12	望谟县昂武镇昂武村
S13	贞丰县白层镇坡烂村	A13	望谟县昂武镇和亭村
S14	安龙县德卧镇停西村	A14	望谟县昂武镇上亭村
S15	安龙县万峰湖镇坝盘村		

度为 200 ℃;接口温度为 250 ℃;溶剂延迟 4 min;扫描方式为全扫描,质荷比(m/z)范围为 50~550。

1.2.3 成分鉴定与指纹图谱的建立 通过对照品比对和 NITS11 质谱数据库检索鉴定化合物,用“中药色谱指纹图谱相似度评价系统(2012.1 版本)”生成指纹图谱,计算相似度。

1.2.4 化学模式识别分析 以艾纳香药材和艾粉指纹图谱的 22 个和 16 个共有峰的峰面积为原始数据,采用 OriginPro 2024 软件进行聚类分析,采用 SPSS 26 软件进行 PCA 分析,采用 SIMCA 14.1 软件进行对正交偏最小二乘-判别(OPLS-DA)分析。

1.2.5 网络药理学分析 采用 PubChem 数据库与 SwissADME 数据库查找并筛选潜在活性化合物,采用 SwissTargetPrediction 数据库预测化合物靶点,采用 GeenCards 和 OMIM 数据库,以“anti-inflammatory”为关键词查找疾病靶点。采用 STRING 数据库分析交集靶基因获取关键靶蛋白,采用 Cytoscape 3.9.1 进行可视化,采用 Metoscape 数据库对交集靶点进行 GO 和 KEGG 富集分析,采用微生信进行可视化,整合数据,构建“成分-靶点-通路”网络,预测质量标志物。从 TCMSP 数据库下载质量标志物的 3D 结构文件,从 Uniprot

数据库与 PDB 数据库查找并下载关键靶蛋白的 3D 结构文件,用 AutoDock Tools 软件进行分子对接获取结合能,用 Discovery studio 软件进行可视化。

1.3 数据处理

使用 WPS Office Excel 软件整理试验数据,使用 Adobe Illustrator 2022 软件整理图片。

2 结果与分析

2.1 指纹图谱建立与成分鉴定

2.1.1 指纹图谱建立 取艾纳香药材(S1)及艾粉(A1)制备供试品溶液各 1 份,分别连续进样 6 次,以 6 号峰(左旋龙脑)为参照峰(S),计算各共有峰的相对峰面积与相对保留时间($n=6$)。艾纳香药材各共有峰的相对峰面积的相对标准偏差(RSD)在 0.79%~2.64%之间,各共有峰的相对保留时间 RSD 在 0.02%~0.33%之间,艾粉各共有峰的相对峰面积的 RSD 在 0.54%~2.36%之间,各共有峰的相对保留时间 RSD 在 0.03%~0.11%之间,均小于 3.00%,表明仪器精密度良好。

取艾纳香药材(S1)及艾粉(A1)制备供试品溶液各 1 份,分别于 0、2、4、8、12、24 h 进样,以 6 号峰(左旋龙脑)为参照峰(S),计算各共有峰的相对保留时间与相对峰面积($n=6$)。艾纳香药材各共有峰的相对峰面积的 RSD 在 0.36%~2.66%之间,各共有峰的相对保留时间 RSD 在 0.02%~0.16%之间,艾粉各共有峰的相对峰面积的 RSD 在 0.99%~2.77%之间,各共有峰的相对保留时间 RSD 在 0.03%~0.15%之间,均小于 3.00%,表明供试品溶液的稳定性良好。

制备艾纳香供试品(S1)及艾粉(A1)制备供试品溶液各 6 份,按色谱条件分别进样,以 6 号峰(左旋龙脑)为参照峰(S),计算各共有峰的相对保留时间与相对峰面积($n=6$)。艾纳香药材各共有峰的相对峰面积的 RSD 在 1.27%~2.72%之间,各共有峰的相对保留时间 RSD 在 0.01%~0.11%之间,艾粉各共有峰的相对峰面积的 RSD 在 1.22%~2.68%之间,各共有峰的相对保留时间 RSD 在 0.06%~0.50%之间,均小于 3.00%,表明方法的重复性良好。

分别取 15 批艾纳香药材与 14 批艾粉制备供试品溶液,按色谱条件进样并记录色谱数据,将所得色谱图导入“中药色谱指纹图谱相似度评价系统(2012.1 版本)”,设 S1、A1 为参照峰,选

择中位数法生成对照图谱,以 0.1 为时间窗宽度,经多点校正、峰匹配得到艾纳香药材与艾粉的指纹图谱,指纹图谱见图 1。

2.1.2 成分鉴定与特征峰指认 对供试品溶液进

行 GC-MS 分析,用樟脑、左旋龙脑、 β -石竹烯标准品进行比对,并与 NITS11 质谱数据库进行检索匹配,分析鉴定结果见表 2。15 批艾纳香药材、14 批艾粉分别有 22 个和 16 个共有峰(图 2)。

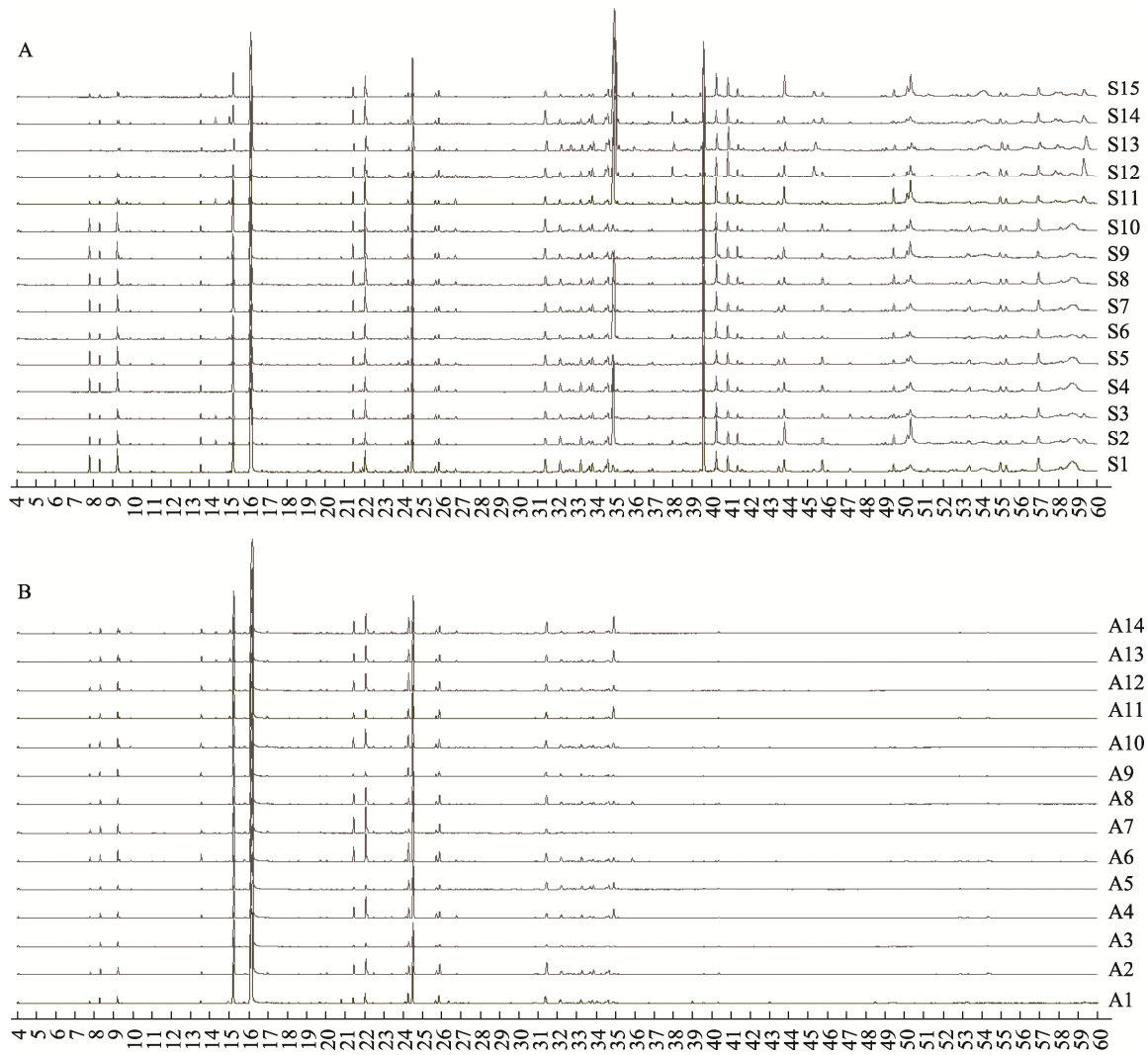


图 1 15 批艾纳香药材 (A) 及 14 批药粉 (B) 的 GC-MS 指纹图谱
Fig. 1 GC-MS fingerprints of 15 *B. balsamifera* raw herb (A) and 14 powdered herb (B)

表 2 GC-MS 成分鉴定
Tab. 2 GC-MS component identification

序号 No.	化合物 Compound	化学式 Molecular formula	保留时间 Retention time/min	
			药材 Raw herb	药粉 Powder herb
1	α -蒎烯* α -pinene	C ₁₀ H ₁₆	7.757	7.771
2	莰烯*camphene	C ₁₀ H ₁₆	8.280	8.296
3	β -蒎烯* β -pinene	C ₁₀ H ₁₆	9.202	9.214
4	3-辛醇 3-octanol	C ₈ H ₁₈ O	9.866	—
5	D-柠檬烯 D-limonene	C ₁₀ H ₁₆	10.985	—
6	芳樟醇*linolool	C ₁₀ H ₁₈ O	13.518	13.535
7	樟脑*camphor	C ₁₀ H ₁₆ O	15.223	15.233
8	左旋龙脑*L-borneol	C ₁₀ H ₁₈ O	16.192	16.221

续表 2 GC-MS 成分鉴定
Tab. 2 GC-MS component identification (continued)

序号 No.	化合物 Compound	化学式 Molecular formula	保留时间 Retention time/min	
			药材 Raw herb	药粉 Powder herb
9	紫苏醛 L-perillaldehyde	C ₁₀ H ₁₄ O	19.688	19.709
10	乙酸异龙脑酯 isobornyl acetate	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	20.031	20.052
11	silphiperfol-5-ene*	C ₁₅ H ₂₄	21.416	21.436
12	α -愈创木烯* α -guaiene	C ₁₅ H ₂₄	22.039	22.059
13	(+)- γ -古芸烯(+)- γ -gurjunene	C ₁₅ H ₂₄	24.112	24.130
14	百里氢醌二甲醚* 1,4-dimethoxy-2-methyl-5-propan-2-ylbenzen	C ₁₂ H ₁₈ O ₂	24.260	24.277
15	β -石竹烯* β -caryophyllene	C ₁₅ H ₂₄	24.522	24.533
16	α -石竹烯* α -caryophyllene	C ₁₅ H ₂₄	25.610	25.712
17	香树烯*alloaromadendrene	C ₁₅ H ₂₄	25.857	25.881
18	香橙烯 aromadendrene	C ₁₅ H ₂₄	26.728	—
19	石竹烯氧化物*caryophyllene oxide	C ₁₅ H ₂₄ O	31.382	31.417
20	愈创醇*guaiol	C ₁₅ H ₂₆ O	32.144	32.175
21	喇叭茶醇 ledol	C ₁₅ H ₂₆ O	32.457	32.49
22	β -桉叶醇 β -eudesmol	C ₁₅ H ₂₈ O	32.819	32.664
23	γ -桉叶醇* γ -eudesmol	C ₁₅ H ₂₈ O	33.220	33.243
24	杜松脑 juniper camphor	C ₁₅ H ₂₆ O	33.652	33.678
25	α -古芸烯*(-)- α -gurjunene	C ₁₅ H ₂₄	33.819	33.847
26	α -桉叶醇 α -eudesmol)	C ₁₅ H ₂₈ O	34.497	34.515
27	绿花白千层醇(+)-viridiflorol	C ₁₅ H ₂₆ O	34.624	34.65
28	花椒毒素*xanthoxylin	C ₁₁ H ₁₄ O ₄	34.889	34.915
29	十五醛 pentadecanal	C ₁₅ H ₃₀ O	36.739	—
30	新植二烯*neophytadiene	C ₂₀ H ₃₈	40.230	—
31	棕榈酸*palmitic acid	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	43.750	—

注：*表示为标定的共有成分；—表示该化合物未检出。
Note: * indicates a calibrated common component; — indicates that the compound was not detected.

2.1.3 相似度评价 相似度评价结果见表 3。各批艾纳香药材与艾粉的相似度分别在 0.971~0.997 和 0.991~0.999 之间，表明相似度较高。

2.2 化学模式识别分析

2.2.1 聚类分析（HCA） 以平方欧氏距离作为药材间的距离公式进行聚类分析，聚类结果显示艾纳香药材聚为 3 类，S12、S13、S14 聚为一类，S3、S6、S7、S8、S9、S11、S15 聚为一类，其余产地聚为一类；艾粉聚为 4 类，A3、A9、A5 聚为一类，A6、A10、A12 聚为一类，A14、A13、A11 聚为一类，A1、A2、A4、A7 以及 A8 为一类（图 3）。

2.2.2 主成分分析（PCA） 设置特征值大于 1，各分别提取得到 4 个主成分，累计贡献率分别达到 87.137%和 88.495%（表 4）。以主成分因子绘

制公因子碎石图，显示艾纳香药材和艾粉特征值较高的前 4 个主成分因子的斜率更大（图 4）。结果表明，所提取的主成分可最大程度地代表艾纳香药材和艾粉的整体质量特征，能基本反映药材共有峰的信息，具有评价艾纳香药材和艾粉质量的可行性。

2.2.3 正交偏最小二乘法-判别分析（OPLS-DA） 艾纳香药材的自变量拟合指数（ R^2_X ）为 0.792，因变量拟合指数（ R^2_Y ）为 0.842，模型预测指数（ Q^2 ）为 0.645；艾粉的自变量拟合指数（ R^2_X ）为 0.785，因变量拟合指数（ R^2_Y ）为 0.788，模型预测指数（ Q^2 ）为 0.613，两模型 R^2 和 Q^2 均大于 0.500，表明该模型良好预测能力较高（图 5）。在 OPLS-DA 基础上再进行置换检测，次数设为 200 次，结果显示 Q^2 与纵轴的相交点均为负值，说明

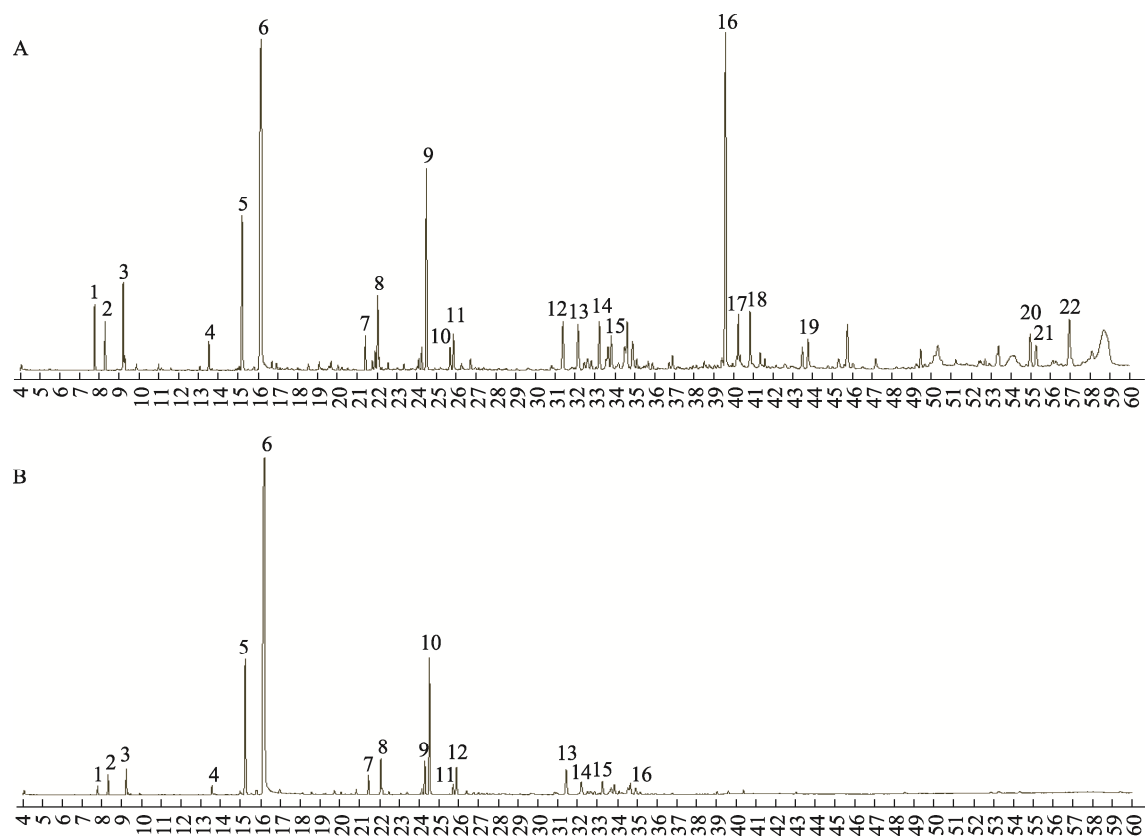


图 2 艾纳香药材 (A) 及艾粉 (B) 的 GC-MS 色谱图
Fig. 2 GC-MS chromatograms of *B. balsamifera* raw herb (A) and powder herb (B)

表 3 15 批艾纳香药材及 14 批艾粉指纹图谱相似度评价
Tab. 3 Similarity evaluation of GC-MS fingerprints of 15 *B. balsamifera* raw herb and 14 powder herb

药材 Raw herb				药粉 Powder herb			
编号 No.	相似性 Similarity	编号 No.	相似性 Similarity	编号 No.	相似性 Similarity	编号 No.	相似性 Similarity
S1	0.996	S9	0.993	A1	0.999	A9	0.998
S2	0.991	S10	0.995	A2	0.998	A10	0.999
S3	0.997	S11	0.994	A3	0.992	A11	0.998
S4	0.995	S12	0.980	A4	0.996	A12	0.998
S5	0.995	S13	0.986	A5	0.996	A13	0.999
S6	0.997	S14	0.991	A6	0.991	A14	0.997
S7	0.997	S15	0.971	A7	0.997		
S8	0.997			A8	0.999		

模型不存在过拟合。进一步分析得到 VIP, 以 VIP>1, 从艾纳香药材中筛选出峰 6 (左旋龙脑)、峰 16、峰 18、峰 5 (樟脑)、峰 3 (β -蒎烯) 5 个成分, 从艾粉中筛选出峰 6 (左旋龙脑)、峰 10 (β -石竹烯)、峰 16 (花椒油素)、峰 5 (樟脑)、峰 8 (α -愈创木烯)、峰 9 (百里烯二甲醚) 6 个成分 (图 6)。

2.3 艾纳香网络药理学研究

2.3.1 艾纳香质量标志物候选成分选择 GC-MS

分析得到的 31 个候选化合物中同时满足肠胃吸收 (GI absorption) “High”、类药 (drug likeness) 五原则 ≥ 3 个 Yes 的化合物共有 18 个。以 probability ≥ 0 为筛选条件预测靶点, 结果合并去除重复值共得到 245 个靶点。通过 GeenCards 和 OMIM 数据库, 以 anti-inflammatory 为关键词分别对其所收纳的疾病靶点进行查找, 合并检索结果并去除重复值, 疾病靶点在去除重复值后得到 1827 个抗炎相关靶点。化合物潜在靶点与抗炎相关靶点取

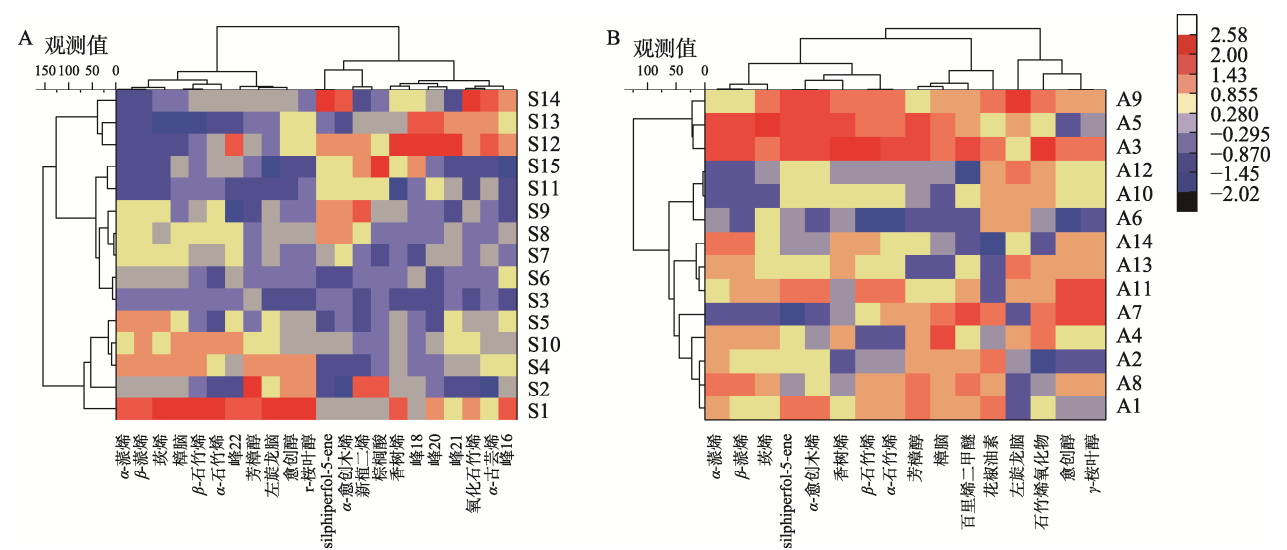


图 3 15 批艾纳香药材 (A) 和 14 批艾粉 (B) 的聚类分析
Fig. 3 Clustering analysis of 15 *B. balsamifera* raw herb (A) and 14 powder herb (B)

表 4 主成分特征值及贡献率
Tab. 4 Principal component eigenvalues and contribution rate

主成分 Principal component	艾纳香药材 Raw herb			主成分 Principal component	艾粉 Powder herb		
	特征值 Eigen-value	方差贡献 Percentage of variance/%	累积方差贡献率 Cumulative variance contribution rate/%		特征值 Eigen-value	方差贡献 Percentage of variance/%	累积方差贡献率 Cumulative variance contribution rate/%
1	8.602	39.101	39.101	1	6.929	43.305	43.305
2	5.533	25.149	64.250	2	3.040	19.000	62.304
3	2.905	13.204	77.454	3	2.487	15.546	77.851
4	2.130	9.684	87.137	4	1.703	10.644	88.495

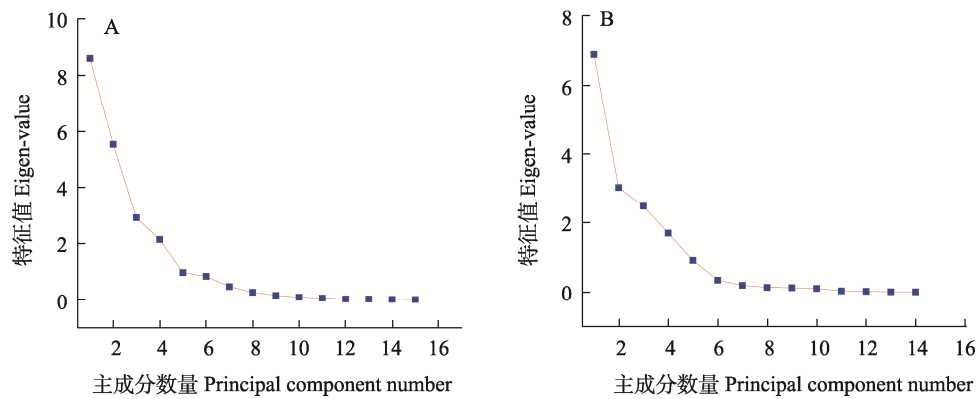


图 4 艾纳香药材 (A) 和艾粉 (B) 的 PCA 分析碎石图
Fig. 4 PCA scree plot of *B. balsamifera* raw herb (A) and powder herb (B)

交集，得到 135 个交集靶点（图 7）。
2.3.2 蛋白-蛋白相互作用（protein-protein interaction, PPI）网络构建 将交集靶基因输入到 STRING 数据库中，物种设置为“Homo sapiens”，置信度 ≥ 0.7 ，共获得 103 个节点和 275 条边，可视化结果按度值（degree）进行排序，度值越大，

节点颜色越深，说明该基因参与的生物功能越多（图 8）。基于 $\text{degree} \geq 30$ 筛选核心靶点，可见 EGFR、PTGS2、ESR1、JAK2 以及 PPARG 5 个核心靶点在 PPI 网络中发挥了关键作用。
2.3.3 GO 富集分析和 KEGG 通路分析 GO 富集分析结果以 $P < 0.01$ 作为标准筛选条件并进行

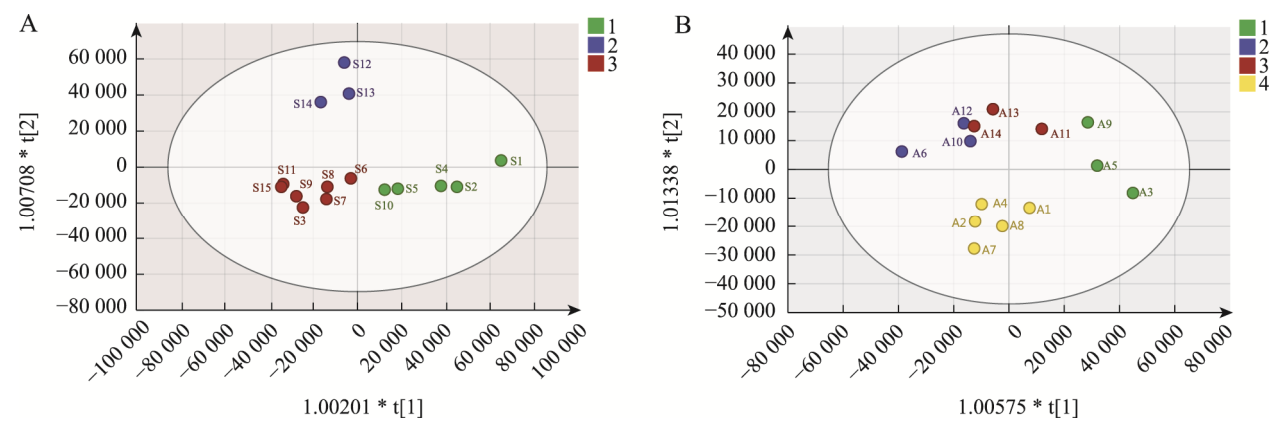


图 5 艾纳香药材 (A) 与艾粉 (B) 的 OPLS-DA 得分图
Fig. 5 OPLS-DA score plot of *B. balsamifera* raw herb (A) and powder herb (B)

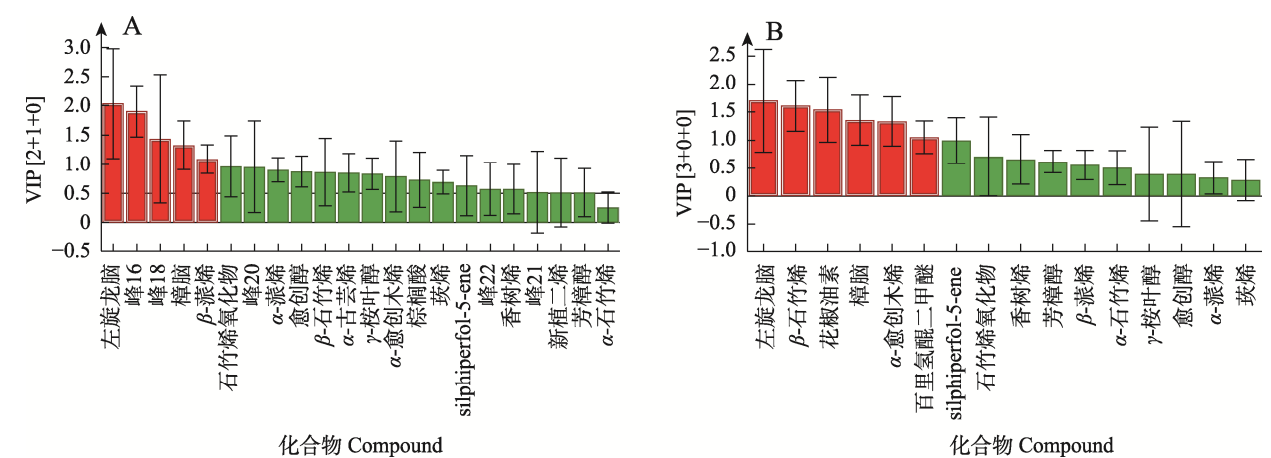


图 6 艾纳香药材 (A) 与艾粉 (B) 的 OPLS-DA VIP 图
Fig. 6 OPLS-DA VIP plot of *B. balsamifera* raw herb (A) and powdered herb (B)

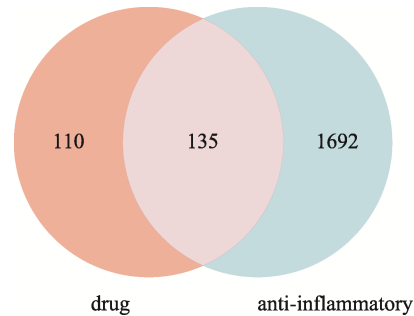


图 7 抗炎潜在靶点韦恩图
Fig. 7 Anti-inflammatory potential targets Venn diagram

排列, 筛选得到生物过程条目 998 条, 主要参与细胞对激素刺激的反应 (cellular response to hormone stimulus)、细胞对含氮化合物的反应 (cellular response to nitrogen compound)、炎症反应的调节 (regulation of inflammatory response) 等, 细胞组分条目 70 条包括膜筏 (membrane raft)、受体复合物 (receptor complex)、小窝 (caveola) 等, 分子功能条目 153 条涉及核受体活性 (nuclear receptor

activity)、配体调控的转录因子活性 (ligand-modulated transcription factor activity) 以及氧化还原酶活性 (oxidoreductase activity) 等。KEGG 通路分析 ($P<0.01$) 共鉴定出 146 条显著通路, 选取排名前 20 的条目绘制气泡图, 气泡大小代表通路富集基因的个数, 颜色差异则代表富集程度, 结果显示, 主要涉及花生四烯酸代谢 (arachidonic acid metabolism)、Th17 细胞分化 (Th17 cell differentiation)、过氧化物酶体增殖物激活受体信号通路 (PPAR signaling pathway) 以及 JAK-STAT 信号通路 (JAK-STAT signaling pathway) 等炎症通路(图 9)。

2.3.4 “成分-靶点-通路”网络构建 使用成分显著富集的 KEGG 通路及各信号通路中的相关靶点构建艾纳香抗炎的“成分-靶点-通路”网络(图 10), 并使用 Cytoscape 3.9.1 软件的 CytoNCA 插件计算算度中心性 (DC)、介数中心性 (BC)、紧密中心性 (CC), 数据分别归一化处理, 以 $DC+BC+CC$ 值的大小进行排序筛选前 5 的成分为核心

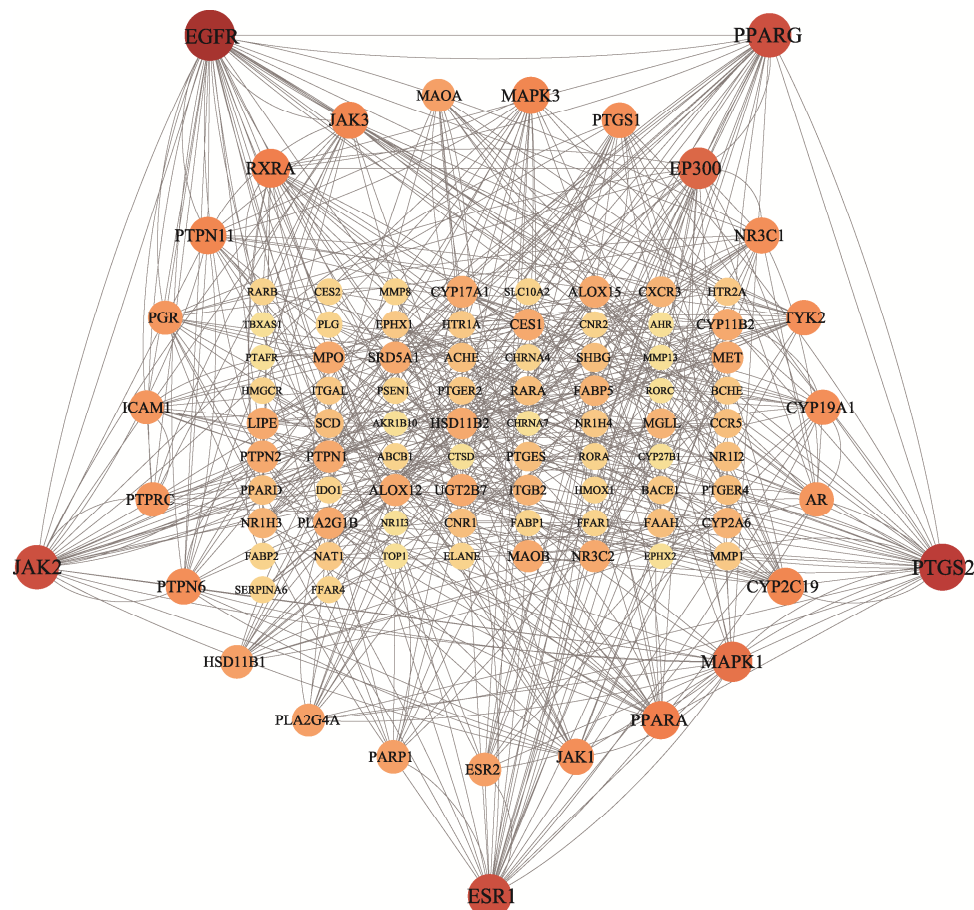


图 8 靶点基因 PPI 网络
Fig. 8 Target gene PPI network

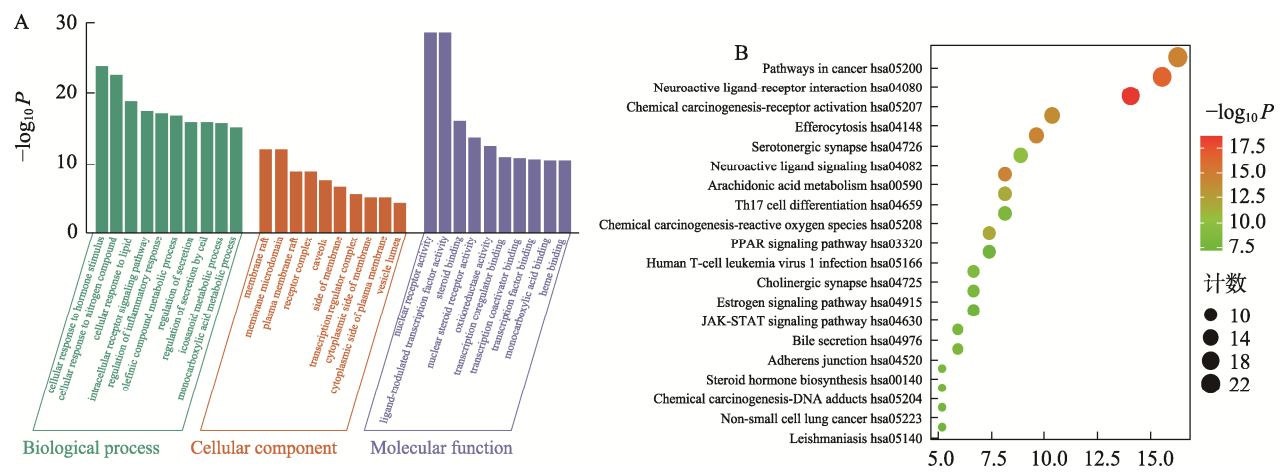


图 9 GO 富集分析 (A) 和 KEGG 通路分析 (B)
Fig. 9 GO enrichment analysis (A) and KEGG pathway analysis (B)

化合物。结果显示，棕榈酸、3-辛醇、 α -桉叶醇、 γ -桉叶醇以及紫苏醛等可能是艾纳香发挥抗炎化作用的关键活性成分。

2.3.5 分子对接结果 对筛选出的艾纳香质量标志物（棕榈酸、3-辛醇、 α -桉叶醇、 γ -桉叶醇、紫

苏醛）及抗炎关键靶蛋白（EGFR、PTGS2、ESR1、JAK2、PPARG）进行分子对接模拟验证（表 5）。结合能越小，表明化合物与蛋白的亲合力越强，结合能小于-5 kcal/mol，二者具有较强结合活性，其中以 γ -桉叶醇效果最好（图 11）。

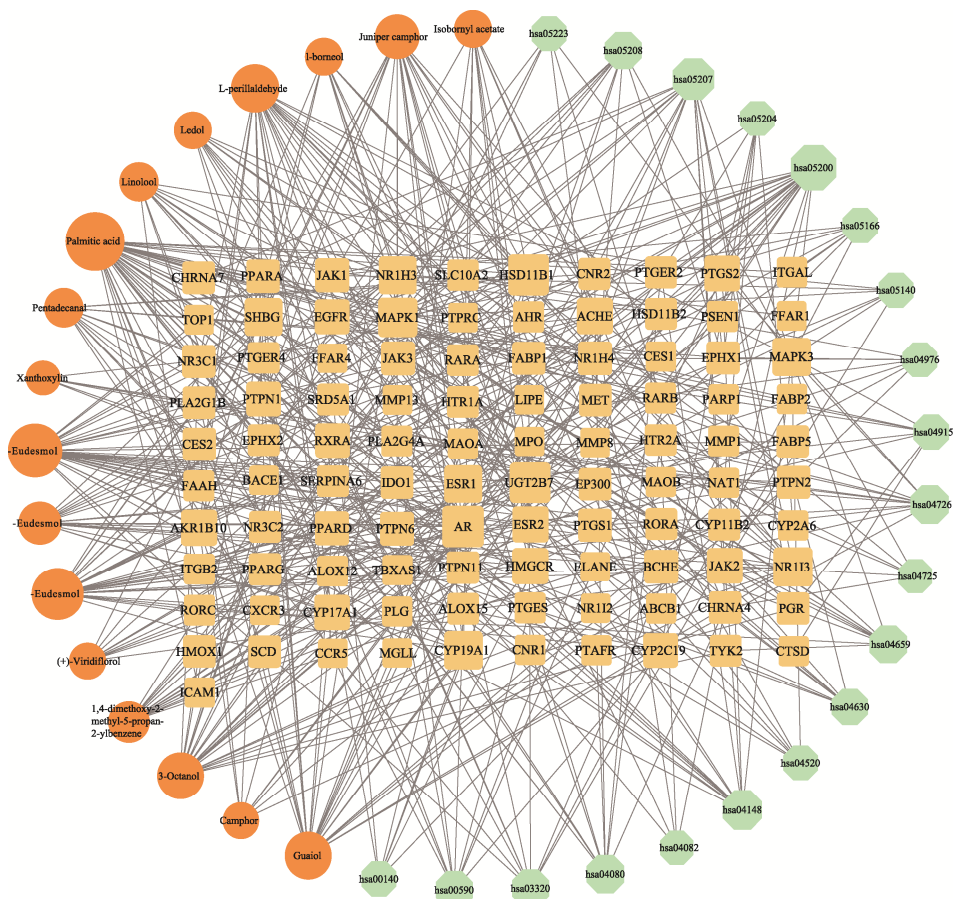
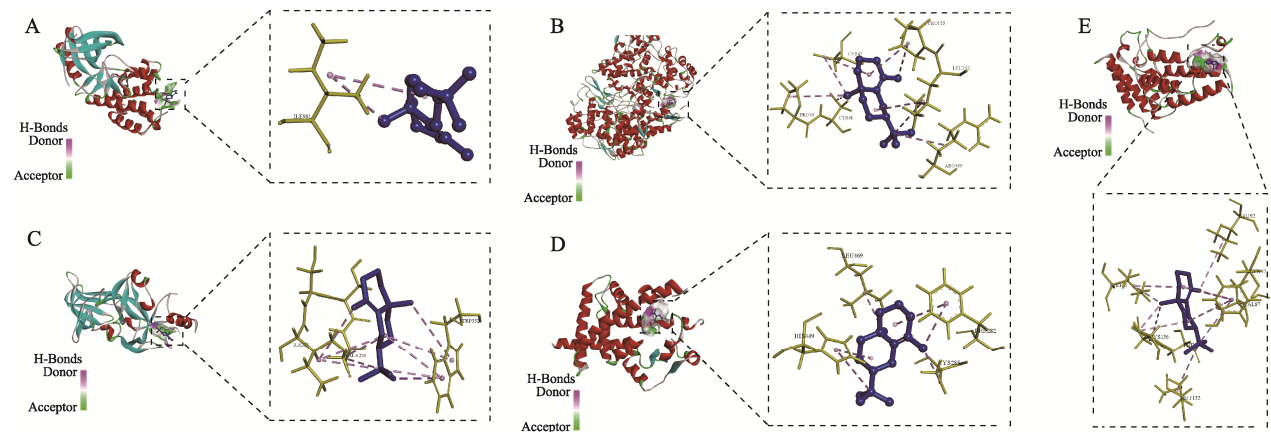


图 10 “成分-靶点 (基因)-通路”网络图
Fig. 10 “Component-Target (gene)-Pathway” network diagram

表 5 分子对接结合能
Tab. 5 Molecular docking binding energy

质量标志物 Q-marker	EGFR	PTGS2	ESR1	JAK2	PPARG
棕榈酸	-2.61	-5.26	-3.41	-2.72	-3.35
3-辛醇	-2.13	-3.63	-3.27	-3.60	-2.78
α -桉叶醇	-4.45	-7.72	-4.80	-5.56	-5.87
γ -桉叶醇	-5.55	-7.67	-6.11	-6.86	-6.69
紫苏醛	-4.05	-6.08	-5.46	-6.00	-4.59



A: EGFR- γ -eudesmol; B: PTGS2- γ -eudesmol; C: ESR1- γ -eudesmol; D: JAK2- γ -eudesmol; E: PPARG- γ -eudesmol.

图 11 分子对接结果示意图
Fig. 11 Schematic diagram of molecular docking results

3 讨论

3.1 提取条件考察

参考相关文献^[16-18]，针对艾纳香提取方法，本研究选择以乙酸乙酯为提取溶剂，以超声提取为提取方式，检测不同提取时间（20、30、40、50 min）和不同料液比（1:10、1:20、1:30、1:40）对艾纳香药材指纹图谱和峰面积测定的影响。结果表明，当提取时间达到40 min时，延长提取时间后峰面积未明显增加；当料液比超过1:20时，色谱峰数量较多、分离度良好。结果发现，以料液比1:20、超声提取40 min可获得最佳提取效果。

3.2 GC-MS 成分分析

收集艾纳香有效成分相关内容^[13, 17, 19-20]，结合标准品比对与 NIST11 质谱数据库检索结果，从艾纳香及艾粉中各鉴定出31、25个化合物，共有峰中左旋龙脑、樟脑及 β -石竹烯由标准品比对鉴定，其余化合物相似度均大于80%，化合物主要涉及萜类、醇类、醛类、酯类、苯丙素类及脂肪酸类等类型。进一步建立艾纳香的GC-MS指纹图谱，本研究的精密度、稳定性和重复性均符合要求。

3.3 化学模式识别分析

15批药材与14批艾粉相似度均在0.971~0.999之间，各个产地的艾纳香药材、艾粉相似度均较高，说明整体成分轮廓相似，特征成分相同。艾纳香药材HCA和OPLS-DA结果一致，药材被分为3类，可能是由栽培管理、种质及生长周期等因素造成的差异。艾粉样本的HCA和OPLS-DA结果基本一致，经提取后得到的艾粉质量差异小，这与孙绪等^[13]的结论相符合。PCA结果表明，所提取的主成分可最大程度地代表艾纳香药材和艾粉的整体质量特征，能基本反映药材共有峰的信息，可用于评价艾纳香药材和艾粉质量。以VIP>1分别从艾纳香药材中筛选出左旋龙脑、峰16、峰18、樟脑、 β -蒎烯5个成分，从艾粉中筛选出左旋龙脑、 β -石竹烯、花椒油素、樟脑、 α -愈创木烯、百里烯二甲醚6个成分，判断这些成分可能是影响艾纳香药材及艾粉质量的关键差异标志物。

3.4 艾纳香抗炎活性的系统评价

本研究经筛选获得EGFR、PTGS2、ESR1、JAK2以及PPARG共5个核心基因。相关研究表

明，这些基因均能参与炎症调控。其中，EGFR可通过磷酸化和影响炎症因子生成从而减轻炎症，降低组织损伤^[21-22]；降低PTGS2的表达可抑制软骨细胞的炎症^[23]；抑制ESR1信号传导可减轻哮喘小鼠的气道炎症^[24]；JAK2活化可刺激下游STAT3蛋白的磷酸化，二者协调炎症级联反应，可导致持续的炎症和组织损伤^[25]；PPARG通过促进自噬加速活性氧（ROS）清除，从而抑制ROS介导的巨噬细胞极化和NLRP3炎性小体激活^[26]。

GO和KEGG富集结果共同揭示基因功能与疾病机制的整体性和复杂性。核心基因可调控花生四烯酸代谢、Th17细胞分化、过氧化物酶体增殖物，激活受体信号通路以及JAK-STAT信号通路；利用核受体活性、配体调控的转录因子活性和氧化还原酶活性，在膜筏与受体复合物等领域参与细胞对激素刺激、含氮化合物以及炎症反应的调节活动。取上述5个基因进行分子对接，结果显示， γ -桉叶醇效果最佳，其余成分与靶点的结合能均小于0 kcal/mol，提示艾纳香挥发性化合物在抗炎过程中扮演着重要角色，可进一步探索其相关机制。

3.5 艾纳香质量标志物预测分析

中药质量标志物的筛选与确定需以中药形成的全过程为视角，其考量范围应覆盖中药材从种植、加工、生产、流通及最终应用的各个环节^[27]。成分可稳定提取时，才具有成为质量标准物的潜在可能。艾纳香药材与艾粉指纹图谱标定的共有成分存在明显差异，其中艾纳香指纹图谱中后9个特征峰在艾粉中未检出，因此这些成分不宜作为质量标志物的候选对象。剔除艾纳香中峰16、峰18后，两样品中VIP>1的化合物有左旋龙脑、樟脑、花椒油素、 β -石竹烯、 β -蒎烯、 α -愈创木烯、百里烯二甲醚；其中，左旋龙脑、樟脑为二者共有的特征成分。通过“成分-靶点-通路”网络分析进一步筛选出5个关键成分，包括棕榈酸、3-辛醇、 α -桉叶醇、 γ -桉叶醇和紫苏醛。

左旋龙脑作为艾纳香质量标志物质^[28]，具有显著改善脑缺血、增加脑血流量^[29]及心肌保护^[30]等作用。樟脑作为天然促透剂，具有局部止痒、止痛^[31]、保护脑缺血^[32]以及镇静^[33]的作用。研究表明， α -、 β -和 γ -桉叶醇显示出对肿瘤细胞的毒性^[34]，同时能够减少细胞增殖以及通过半胱天冬酶介导的细胞凋亡途径诱导肿瘤细胞死亡^[35]，另

有研究还发现, α -桉叶醇能减轻氧化应激和炎症, 并具有抗脑损伤的作用^[36]。紫苏醛则具有抗炎和抗细胞凋亡的活性^[37]。3-辛酮作为一种安全的天然香料, 早已被列入我国食品添加剂使用标准中。棕榈酸具有一定脂毒性, 可引起细胞内过度炎症反应和氧化应激, 能促进巨噬细胞早期 M1 极化, 明显升高 TNF- α 和 IL-6 的分泌能力^[38]。在本研究中, 3-辛醇、棕榈酸在艾粉中未检测到, 样品中紫苏醛与 α -桉叶醇的峰面积较低, 检测难度较大, 因此根据 Q-marker 的质量传递、溯源性和可测性原则^[39], 剔除这 4 个化合物, 仅认为 γ -桉叶醇是艾纳香潜在的抗炎质量标志物。

4 结论

综上所述, 本研究通过指纹图谱技术结合化学识别模式, 从艾纳香与艾粉的对比分析中筛选出左旋龙脑、樟脑 2 个特征性成分。随后, 结合网络药理学及分子对接进一步筛选, 获得 γ -桉叶醇作为补充。最终从多维度综合分析, 确定左旋龙脑、樟脑、 γ -桉叶醇 3 个成分作为质量标志物。

参考文献

- [1] 邱德文, 杜江. 中华本草 苗药卷[M]. 贵阳: 贵州科技出版社, 2005.
QIU D W, DU J. Chinese herbal medicine (Miao medicine volume)[M]. Guiyang: Guizhou Science and Technology Press, 2005. (in Chinese)
- [2] 中国科学院中国植物志编辑委员会. 中国植物志[M]. 北京: 科学出版社, 1979.
Editorial Committee of Flora of China, Chinese Academy of Sciences. Flora of China[M]. Beijing: Science Press, 1979. (in Chinese)
- [3] 汪明蜀, 王可可, 张文龙, 龙友邻, 杜富强, 毛春茂, 李洪凤, 吴向莉. 苗药艾纳香挥发油提取工艺优化及不同产地的品质评价[J]. 中国民族民间医药, 2024, 33(14): 14-21.
WANG M S, WANG K K, ZHANG W L, LONG Y L, DU F Q, MAO C M, LI H F, WU X L. Optimization of extraction process of volatile oil from Miao medicine *Blumea balsamifera* and quality evaluation of different producing areas[J]. Chinese Journal of Ethnomedicine and Ethnopharmacy, 2024, 33(14): 14-21. (in Chinese)
- [4] 范东生, 李玲, 王可可, 胡玉洁, 黄健, 周婵媛, 阮婧华, 张文龙. 艾纳香化学成分及药理活性的研究进展[J]. 中国药房, 2022, 33(10): 1274-1280.
FAN D S, LI L, WANG K K, HU Y J, HUANG J, ZHOU C Y, RUAN J H, ZHANG W L. Research progress on chemical constituents and pharmacological activities of *Blumea balsamifera*[J]. China Pharmacy, 2022, 33(10): 1274-1280. (in Chinese)
- [5] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典: 一部[M]. 北京: 中国医药科技出版社, 2020.
Chinese Pharmacopoeia. Pharmacopoeia of the People's Republic of China: volume 1[M]. Beijing: China Medical Science Publishing House, 2020. (in Chinese)
- [6] 宝艳儒, 冯贻东, 曾伟珍, 叶文才, 冯汉林. 艾纳香挥发油化学成分及药理研究进展[J]. 人参研究, 2020, 32(6): 59-64.
BAO Y R, FENG Y D, ZENG W Z, YE W C, FENG H L. Research progress of chemical constituents and pharmacological activities of essential oil of *Blumea balsamifera* DC.[J]. Ginseng Research, 2020, 32(6): 59-64. (in Chinese)
- [7] WANG K, HU X, XIE X L, HUANG M, WANG D, YU F L. Phytocosmetic potential of *Blumea balsamifera* oil in mitigating UV-induced photoaging: evidence from cellular and mouse models[J]. Journal of Ethnopharmacology, 2024, 334(21): 118535.
- [8] DAI L P, CAI S G, CHU D, PANG R, DENG J H, ZHENG X L, DAI W. Identification of chemical constituents in *Blumea balsamifera* using UPLC-Q-Orbitrap HRMS and evaluation of their antioxidant activities[J]. Molecules, 2023, 28(11): 4504.
- [9] YANG H, GAO Y, LONG L, CAI Y L, LIAO J M, PENG J C, WANG L. Antibacterial effect of *Blumea balsamifera* (L.) DC. essential oil against *Staphylococcus aureus*[J]. Archives of Microbiology, 2021, 203(7): 3981-3988.
- [10] XIONG Y, YI P, LI Y H, GAO R M, CHEN J L, HU Z X, LOU H Y, DU C X, ZHANG J Y, ZHANG Y, YUAN C M, HUANG L J, HAO X J, GU W. New sesquiterpenoid esters from *Blumea balsamifera* (L.) DC. and their anti-influenza virus activity[J]. Natural Product Research, 2022, 36(5): 1151-1160.
- [11] ZHANG B, TANG M H, ZHANG W H, ZHANG J C, AI Y, LIANG X X, SHI Y H, CHEN Y B, ZHANG L Y, HE T G. Chemical composition of *Blumea balsamifera* and *Magnolia sieboldii* essential oils and prevention of UV-B radiation-induced skin photoaging[J]. Natural Product Research, 2021, 35(24): 5977-5980.
- [12] 庞玉新, 谢小丽, 陈振夏, 杨全, 王凯, 胡璇. 艾纳香本草考证[J]. 贵州农业科学, 2014, 42(6): 10-13.
PANG Y X, XIE X L, CHEN Z X, YANG Q, WANG K, HU X. Textual research of *Blumea balsamifera*[J]. Guizhou Agricultural Sciences, 2014, 42(6): 10-13. (in Chinese)
- [13] 孙绪, 付思红, 熊丹丹, 孙佳, 巩仔鹏, 兰燕宇, 李勇军,

- 王爱民. 艾纳香及其提取物的 GC-MS 指纹图谱和相关性研究[J]. 中草药, 2017, 48(4): 693-699.
- SUN X, FU S H, XIONG D D, SUN J, GONG Z P, LAN Y Y, LI Y J, WANG A M. Studies on correlation for GC-MS fingerprints of *Blumea balsamifera* and its extracts[J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2017, 48(4): 693-699. (in Chinese)
- [14] 周立强, 熊燕, 陈俊磊, 张嘉瑜, 郝小江, 顾玮. 艾纳香地上部分化学成分及其抗氧化与酪氨酸酶抑制活性研究[J]. 天然产物研究与开发, 2021, 33(7): 1112-1120.
- ZHOU L Q, XIONG Y, CHEN J L, ZHANG J Y, HAO X J, GU W. Study on the chemical constituents from the aerial parts of *Blumea balsamifera* DC. and their antioxidant and tyrosinase inhibitory activities[J]. Natural Product Research and Development, 2021, 33(7): 1112-1120. (in Chinese)
- [15] 黄梅, 陈振夏, 于福来, 王凯, 肖永锋, 庞玉新, 陈鸿发. NAA 处理对艾纳香扦插生根生理生化特性的影响[J]. 热带亚热带植物学报, 2022, 30(1): 97-103.
- HUANG M, CHEN Z X, YU F L, WANG K, XIAO Y F, PANG Y X, CHEN H F. Effects of NAA on physiological and biochemical characteristic of *Blumea balsamifera* during cutting rooting[J]. Journal of Tropical and Subtropical Botany, 2022, 30(1): 97-103. (in Chinese)
- [16] 孙懂华, 张影波, 庞玉新, 杨全, 于福来, 黄梅. 基于 GC 指纹图谱及聚类分析评价黔琼产艾纳香质量[J]. 中国现代中药, 2016, 18(4): 435-439, 447.
- SUN D H, ZHANG Y B, PANG Y X, YANG Q, YU F L, HUANG M. Study on quality evaluation of *Blumea balsamifera* from Hainan and Guizhou province by GC fingerprint and cluster analysis[J]. Modern Chinese Medicine, 2016, 18(4): 435-439, 447. (in Chinese)
- [17] 秦晋颖, 谢晓林, 赵元, 张新风, 吴倩, 王昌胜, 刘志刚. 一测多评法同时测定艾纳香油中 5 种成分[J]. 中成药, 2020, 42(2): 381-385.
- QIN J Y, XIE X L, ZHAO Y, ZHANG X F, WU Q, WANG C S, LIU Z G. Simultaneous determination of five constituents in the oil from *Blumea balsamifera* by QAMS[J]. Chinese Traditional Patent Medicine, 2020, 42(2): 381-385. (in Chinese)
- [18] 王中洋, 杨全, 庞玉新, 张影波, 孙懂华. 艾纳香提取前不同处理方法对左旋龙脑含量的影响[J]. 中国现代中药, 2016, 18(3): 353-356.
- WANG Z Y, YANG Q, PANG Y X, ZHANG Y B, SUN D H. Effect of different pretreatment of *Blumea balsamifera* on content of l-borneol[J]. Modern Chinese Medicine, 2016, 18(3): 353-356. (in Chinese)
- [19] JIRAKITTICHAROEN S, WISUITIPROT W, JITAREERAT P, WONGS-AREE C. Terpenoids and bio-functions of essential oils hydrodistilled differently from freshly immature and mature *Blumea balsamifera* leaves[J]. Journal of Tropical Medicine, 2023, 2023(1): 5152506.
- [20] 胡璇, 王凯, 于福来, 王丹, 谢小丽, 庞玉新, 陈鸿发. 艾纳香不同提取物 GC-MS 分析及其抑菌活性[J]. 福建农业学报, 2021, 36(10): 1131-1138.
- HU X, WANG K, YU F L, WANG D, XIE X L, PANG Y X, CHEN H F. Composition and antibacterial activity of *Blumea balsamifera* extracts[J]. Fujian Journal of Agricultural Sciences, 2021, 36(10): 1131-1138. (in Chinese)
- [21] TONG W J, SONG C L, JIN D Q, LI M, CHENG Z M, LU G P, YANG B, DENG F. QSOX1 exerts anti-inflammatory effects in sepsis-induced acute lung injury: regulation involving EGFR phosphorylation mediated M1 polarization of macrophages[J]. International Journal of Biochemistry & Cell Biology, 2024, 176(11): 106651.
- [22] ABDEL-AZIZ S A, TAHER E S, LAN P, ASAAD G F, GOMAA H A M, EL-KOUSSI N A, YOUSSEF B G M. Design, synthesis, and biological evaluation of new pyrimidine-5-carbonitrile derivatives bearing 1,3-thiazole moiety as novel anti-inflammatory EGFR inhibitors with cardiac safety profile[J]. Bioorganic Chemistry, 2021, 111(3): 104890.
- [23] CHENG Y H, LIU X H, QU W Q, WANG X, SU H, LI W L, XU W Q. Amentoflavone alleviated cartilage injury and inflammatory response of knee osteoarthritis through PTGS2[J]. Naunyn-Schmiedeberg's Archives of Pharmacology, 2024, 397(11): 8903-8916.
- [24] ZHANG L, WU Q, HUANG Y Y, ZHENG J, GUO S, HE L. Formononetin ameliorates airway inflammation by suppressing ESR1/NLRP3/Caspase-1 signaling in asthma[J]. Biomedicine & Pharmacotherapy, 2023, 168(12): 115799.
- [25] HE Y P, SHEN X L, PENG H Y. Effects and mechanisms of the xianhecao-huanglian drug pair on autophagy-mediated intervention in acute inflammatory bowel disease via the JAK2/STAT3 pathway[J]. Biological Procedures Online, 2024, 26(1): 27.
- [26] GENG Q H, XU J H, CAO X X, WANG Z R, JIAO Y, DIAO W Y, WANG X, WANG Z H, ZHANG M X, ZHAO L, YANG L, DENG T T, FAN B F, XU Y, JIA L S, XIAO C. PPAR γ -mediated autophagy activation alleviates inflammation in rheumatoid arthritis[J]. Journal of Autoimmunity, 2024, 146(5): 103214.
- [27] 赵鸿鹏, 许浚, 张洪兵, 韩彦琪, 张铁军, 刘昌孝. 基于质量传递与溯源的中药质量标志物 (Q-Marker) 的发现策略及应用[J]. 中草药, 2021, 52(9): 2557-2565.
- ZHAO H P, XU J, ZHANG H B, HAN Y Q, ZHANG T J, LIU C X. Discovery strategy and application of quality markers of traditional Chinese medicine based on quality

- transitivity and traceability[J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2021, 52(9): 2557-2565. (in Chinese)
- [28] 曹佳渊, 徐新, 张向胜, 刘炳楠, 魏永耀, 钟可, 庞玉新. 基于非靶向代谢组学分析“发汗”对艾纳香代谢产物的影响[J]. 中国实验方剂学杂志, 2025, 31(2): 200-207.
- CAO J Y, XU X, ZHANG X S, LIU B N, WEI Y Y, ZHONG K, PANG Y X. Effect of “Fahan” on metabolites of *Blumea balsamifera* analyzed by non-targeted metabolomics[J]. Chinese Journal of Experimental Traditional Medical Formulae, 2025, 31(2): 200-207. (in Chinese)
- [29] MA R, LU D N, XIE Q, YUAN J M, REN M H, LI Y, WANG J Y, LI J X, XU Z, WANG J. L-borneol and d-borneol promote transdifferentiation of astrocytes into neurons in rats by regulating Wnt/Notch pathway to exert neuroprotective effect during recovery from cerebral ischaemia[J]. Phytomedicine, 2023, 109(2): 154583.
- [30] 王立映, 王建, 樊亚梅, 王佳俊, 付尹, 杨显娟, 龚道银. 3 种冰片防治 AMI 模型大鼠的抗炎及调控 HIF-1 α /VEGF[J]. 中国实验方剂学杂志, 2022, 28(19): 61-72.
- WANG L Y, WANG J, FAN Y M, WANG J J, FU Y, YANG X J, GONG D Y. Anti-inflammation and regulation of HIF-1 α /VEGF of 3 kinds of borneolum in prevention and treatment of AMI model rats[J]. Chinese Journal of Experimental Traditional Medical Formulae, 2022, 28(19): 61-72. (in Chinese)
- [31] WANG Y X, CAO S S, YU K Y, YANG F D, YU X M, ZHAI Y H, WU C B, XU Y H. Integrating tacrolimus into eutectic oil-based microemulsion for atopic dermatitis: simultaneously enhancing percutaneous delivery and treatment efficacy with relieving side effects[J]. International Journal of Nanomedicine, 2019, 14(1): 5849-5863.
- [32] 马艺伦, 连佳宁, 皇冯玉, 卫文鑫, 张萌萌, 卫培峰, 董泰玮, 缪峰. 左旋龙脑与左旋樟脑配伍对永久性局灶性中动脉阻断脑缺血模型大鼠的脑保护作用[J]. 中国医院药学杂志, 2023, 43(23): 2607-2612.
- MA Y L, LIAN J N, HUANG F Y, WEI W X, ZHANG M M, WEI P F, DONG T W, MIAO F. Brain protective effect of L-borneol and L-camphor on permanent focal middle cerebral artery occlusion rat model[J]. Chinese Journal of Hospital Pharmacy, 2023, 43(23): 2607-2612. (in Chinese)
- [33] OSHIMA T, ITO M. Sedative effects of l-menthol, d-camphor, phenylethyl alcohol, and geraniol[J]. Journal of Natural Medicines, 2021, 75(2): 319-325.
- [34] BRITTO A C S, DE OLIVEIRA A C A, HENRIQUES R M, CARDOSO G M B, BOMFIM D S, CARVALHO A A, MORAES M O, PESSOA C, PINHEIRO M L B, COSTA E V, BEZERRA D P. *In vitro* and *in vivo* antitumor effects of the essential oil from the leaves of *Guatteria friesiana*[J]. Planta Medica, 2012, 78(5): 409-414.
- [35] BOMFIM D S, FERRAZ R P C, CARVALHO N C, SOARES M B P, PINHEIRO M L B, COSTA E V, BEZEERA D P. Eudesmol isomers induce caspase-mediated apoptosis in human hepatocellular carcinoma HepG2 cells[J]. Basic & Clinical Pharmacology & Toxicology, 2013, 113(5): 300-306.
- [36] YILDIZ D G, GEYIKOGLU F. Amelioration of diethylnitrosamine-induced acute brain injury by α -eudesmol and β -eudesmol[J]. Toxicon, 2025, 266(14): 108550.
- [37] ZHOU Q Q, LI X, HOU D C. Perillaldehyde protect chondrocytes from mitophagy-associated apoptosis and NLRP3-mediated inflammation by regulating ALOX5/NF- κ B signaling in osteoarthritis[J]. International Immunopharmacology, 2025, 158(6): 114820.
- [38] 朱天啸, 解杨, 王嘉, 徐新月, 陈发明. 棕榈酸在炎症因素下巨噬细胞 M1 极化进程中的作用[J]. 实用口腔医学杂志, 2023, 39(3): 300-306.
- ZHU T X, XIE Y, WANG J, XU X Y, CHEN F M. The effects of palmitic acid on inflammation-induced M1 macrophage polarization[J]. Journal of Practical Stomatology, 2023, 39(3): 300-306. (in Chinese)
- [39] 刘昌孝, 陈士林, 肖小河, 张铁军, 侯文彬, 廖茂梁. 中药质量标志物(Q-Marker): 中药产品质量控制的新概念[J]. 中草药, 2016, 47(9): 1443-1457.
- LIU C X, CHEN S L, XIAO X H, ZHANG T J, HOU W B, LIAO M L. A new concept on quality marker of Chinese materia medica: quality control for Chinese medicinal products[J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2016, 47(9): 1443-1457. (in Chinese)