HS-GC-IMS 结合化学计量学方法分析菟丝子不同炮制品的挥发性成分差异

宋艺君[1,2]，郭　涛[3]，冯雨欣[1]，陈天乐[1]，张世茂[1]

（1. 陕西中医药大学药学院，陕西咸阳 712046；2. 陕西省中药饮片工程技术研究中心，陕西咸阳 712046；3. 空军第九八六医院，陕西西安 710054）

摘要：采用顶空 - 气相色谱 - 离子迁移谱（HS-GC-IMS）检测生菟丝子、炒菟丝子、盐菟丝子、酒菟丝子饼 4 种菟丝子炮制品中的挥发性成分。菟丝子不同炮制品中共检出 127 个挥发性成分特征信号，定性鉴别出 89 种成分，包括醛类 27 种、酮类 19 种、醇类 17 种、酯类 13 种、酸类和吡嗪类各 3 种、单萜类和硫醚类各 2 种，以及萘烯类、呋喃类、吡咯类各 1 种。使用主成分分析、正交偏最小二乘 - 判别分析和聚类分析等化学计量学方法，可视化解析菟丝子不同炮制品中挥发性成分的差异。聚类热图分析结果显示，吡咯、乙酸二聚体、羟基丙酮二聚体等 34 种特征挥发性成分可作为鉴别标志物。该研究结果可为菟丝子不同炮制品的辨识提供思路，为菟丝子饮片的质量控制和临床应用提供参考。

关键词：菟丝子；炮制品；挥发性成分；顶空 - 气相色谱；离子迁移谱；化学计量学；鉴别；质量控制

中图分类号：R283.1；R917　　**文献标志码：**A　　**文章编号：**1001-8255(2026)05-0590-12

引用：宋艺君, 郭　涛, 冯雨欣, 等. HS-GC-IMS结合化学计量学方法分析菟丝子不同炮制品的挥发性成分差异[J]. 中国医药工业杂志, 2026, **57**(5): 590-601. DOI：10.16522/j.cnki.cjph.2026.05.013

Analysis of Volatile Component Differences in Different Processed Products of *Cuscutae Semen* by HS-GC-IMS Combined with Chemometrics

SONG Yijun[1,2], GUO Tao[3], FENG Yuxin[1], CHEN Tianle[1], ZHANG Shimao[1]

(*1. College of Pharmacy, Shaanxi University of Chinese Medicine, Xianyang 712046; 2. Shaanxi Engineering Technology Research Center of Prepared Slices, Xianyang 712046; 3. The 986th Hospital of PLAAF, Xi'an 710054*)

ABSTRACT: A headspace-gas chromatography-ion mobility spectrometry (HS-GC-IMS) was used to detect the volatile components of four different processed products of *Cuscutae Semen*, namely raw *Cuscutae Semen*, stir-baked *Cuscutae Semen*, *Cuscutae Semen* stir-baked with salt-water and *Cuscutae Semen* cakes stir-baked with wine. A total of 127 characteristic signals of volatile components were detected in the processed products, among which 89 components were qualitatively identified, including 27 aldehydes, 19 ketones, 17 alcohols, 13 esters, 3 acids, 3 pyrazines, 2 monoterpenes, 2 sulfides, 1 pinene derivative, 1 furan derivative, and 1 pyrrole derivative. Chemometric methods including principal component analysis, orthogonal partial least squares-discriminant analysis, and cluster analysis were used to visualize the differences in volatile components among the different processed products. The results of the cluster heatmap showed that 34 characteristic volatile components, including pyrrole, acetic acid dimer, and hydroxyacetone dimer, could be used as discriminative markers for distinguishing different processed products of *Cuscutae Semen*. The results of this study can provide a scientific basis for the identification of different processed products of *Cuscutae Semen*, and offer references for the quality control and clinical application of *Cuscutae Semen* decoction pieces.

Key Words: *Cuscutae Semen*; processed product; volatile component; headspace-gas chromatography; ion mobility spectrometry; chemometrics; identification; quality control

菟丝子（*Cuscutae Semen*）为旋花科植物南方菟丝子（*Cuscuta australis* R. Br.）或菟丝子（*Cuscuta chinensis* Lam.）的干燥成熟种子，始载于《神农本草经》，是临床常用的肾阳肾阴双补类中药。菟丝子主要含有黄酮、多糖、生物碱、挥发油等成分[1]，具有补益肝肾、固精缩尿、安胎、止泻、明目的作用。菟丝子的现代炮制方法有盐炙法、清炒法[2]、酒炙法[3]和制饼法等[4]，ChP 2025 年版收录了盐菟丝子（YTSE）的炮制方法。生菟丝子（TSE）养肝明目；炒菟丝子（CCTSE）可提高煎出效果，便于粉碎和制剂；盐菟丝子不温不寒，能增强补肾、固精、安胎的作用；酒菟丝子饼（JTSEB）温肾、壮阳、固精。当前，菟丝子的炮制研究多集中在菟丝子炮制前后化学成分和药理作用的变化[5]、质控体系的建立[6]、炮制工艺的规范化研究[7]、炮制工艺对方剂临床效果的影响[8]等。

挥发性成分是菟丝子的主要活性物质，目前多采用 GC-MS 法[9-11]。但 GC-MS 法的样品制备耗时长、费用高，后期图谱解析复杂[12]。顶空 - 气相色谱（headspace-gas chromatography，HS-GC）- 离子迁移谱（ion mobility spectrometry，IMS）技术分离度和灵敏度高、稳定性强、检测速度快，适合于痕量挥发性成分的分析[13]。近年来，该技术被广泛用于不同产地中药材的鉴别[14-15]、不同炮制品种类的区分[16]、不同采收期和不同药用部位中挥发性有机化合物的差异鉴别[17-18]等。目前尚未见采用 HS-GC-IMS 技术分析菟丝子不同炮制品中挥发性成分的研究。鉴于此，本研究采用 HS-GC-IMS 技术建立菟丝子不同炮制品（生菟丝子、炒菟丝子、盐菟丝子、酒菟丝子饼）的指纹图谱，结合主成分分析（principal component analysis，PCA）、正交偏最小二乘法 - 判别分析（orthogonal partial least squares-discriminant analysis，OPLS-DA）和聚类分析区分炮制品，旨在系统解析菟丝子不同炮制品中的挥发性成分，筛选其特征挥发性成分，为菟丝子不同炮制品的鉴别及质控新方法的建立提供技术支撑。

收稿日期：2025-09-29

基金项目：陕西省重点研发计划项目（2024SF-YBXM-456）、陕西省高水平中医药重点学科（中药炮制学）（174010324027/2024）、全国老药工传承工作室［国中医药人教函（2024）255 号］

作者简介：宋艺君，博士，教授，从事中药炮制研究。

1 仪器与试药

FlavourSpec® 型气相色谱 - 离子迁移谱联用仪（德国 G.A.S. 公司）；AF240 型电子天平（瑞士梅特勒 - 托利多公司）；XL-60C 型超微粉碎机（安徽旭航机械有限公司）。

生菟丝子（购自陕西西安红杏林药材市场，产地为宁夏），经陕西中医药大学王继涛高级实验师鉴定为旋花科植物菟丝子的干燥成熟种子。黄酒（绍兴柯桥第三酒厂，批号 20250102，酒精度 10%）；食盐（陕西省盐业专营有限责任公司，批号 X20240827B10）；面粉（五得利面粉集团有限公司，批号 20240524D）。按 ChP 2025 年版收载方法炮制得到盐菟丝子，按《中药炮制学》收载方法[19]炮制得到炒菟丝子、酒菟丝子饼（表 1）。

表 1 菟丝子不同炮制品信息

Tab.1 Sample Information on Different Processed Products of *Cuscutae Semen*

样品信息	平行样品编号	来源	采购或炮制时间
生菟丝子	TSZ-1	西安红杏林药材市场	2024 年 10 月
生菟丝子	TSZ-2	西安红杏林药材市场	2024 年 10 月
生菟丝子	TSZ-3	西安红杏林药材市场	2024 年 10 月
盐菟丝子	YTSZ-1	自制	2024 年 11 月
盐菟丝子	YTSZ-2	自制	2024 年 11 月
盐菟丝子	YTSZ-3	自制	2024 年 11 月
炒菟丝子	CTSZ-1	自制	2024 年 11 月
炒菟丝子	CTSZ-2	自制	2024 年 11 月
炒菟丝子	CTSZ-3	自制	2024 年 11 月
酒菟丝子饼	JTSZB-1	自制	2024 年 11 月
酒菟丝子饼	JTSZB-2	自制	2024 年 11 月
酒菟丝子饼	JTSZB-3	自制	2024 年 11 月

2 方法与结果

2.1 检测条件

顶空进样条件：孵育温度 80 ℃；孵育转速 500 r/min；孵育时间 20 min；进样针温度 85 ℃；进样体积 200 μL。

GC-IMS 条件：色谱柱 MXT-WAX 型毛细管柱（30 m×0.53 mm×1.0 μm）；柱温 60 ℃；载气 / 漂移气氮气；IMS 温度 45 ℃；漂移气体积流量 75 mL/min；载气体积流量 梯度洗脱（0—2 min，2 mL/min；2—10 min，2—10 mL/min；10—20 min，10—100 mL/min；

20—40 min，100 mL/min）；洗脱时间 40 min。

2.2 样品测定

精密称取菟丝子不同炮制品粉末 0.5 g，过筛［筛孔内径（250.0±9.9）μm］，置 20 mL 顶空瓶中，于 80 ℃孵育 20 min 后测定。

2.3 数据处理

菟丝子不同炮制品的组内试验均重复 3 次。使用 VOCal（0.4.03）软件分析谱图，通过与美国国家标准与技术研究院（National Institute of Standards and Technology，NIST）2020 质谱数据库和 IMS 数据库对比进行定性分析；使用内置的 Reporter、Gallery Plot 插件绘制差异谱图和指纹图谱；使用 Fingerprint Similarity Analysis 插件进行最近邻指纹分析；使用 SMICA（14.0）软件和欧易云平台（https://cloud.oebiotech.cn/#/home）进行 PCA、OPLS-DA 和聚类分析。

2.4 菟丝子不同炮制品的 GC-IMS 谱图分析

使用 Reporter 插件直接对比菟丝子不同炮制品特征挥发性成分的谱图差异。图 1 横坐标 1.0 处的红色竖线为反应离子峰（reactive ion peak，RIP），该 RIP 迁移时间为 8.17 ms。横坐标为相对迁移时间，即各成分与该 RIP 迁移时间的比值。RIP 两侧的每个点代表 1 种挥发性成分；颜色越浅表示该成分的浓度越低（图 1A）。采用差异对比模式，选取菟丝子谱图作为对照，其他样品谱图减去对照，可得不同炮制品的差异对比图（图 1B）。若目标样品和对照样品的挥发性成分含量一致，则扣减后背景呈白色；蓝色背景代表该成分浓度低于对照；红色背景代表该成分浓度高于对照。由图 1 可见，菟丝子不同炮制品的挥发性成分存在明显差异。

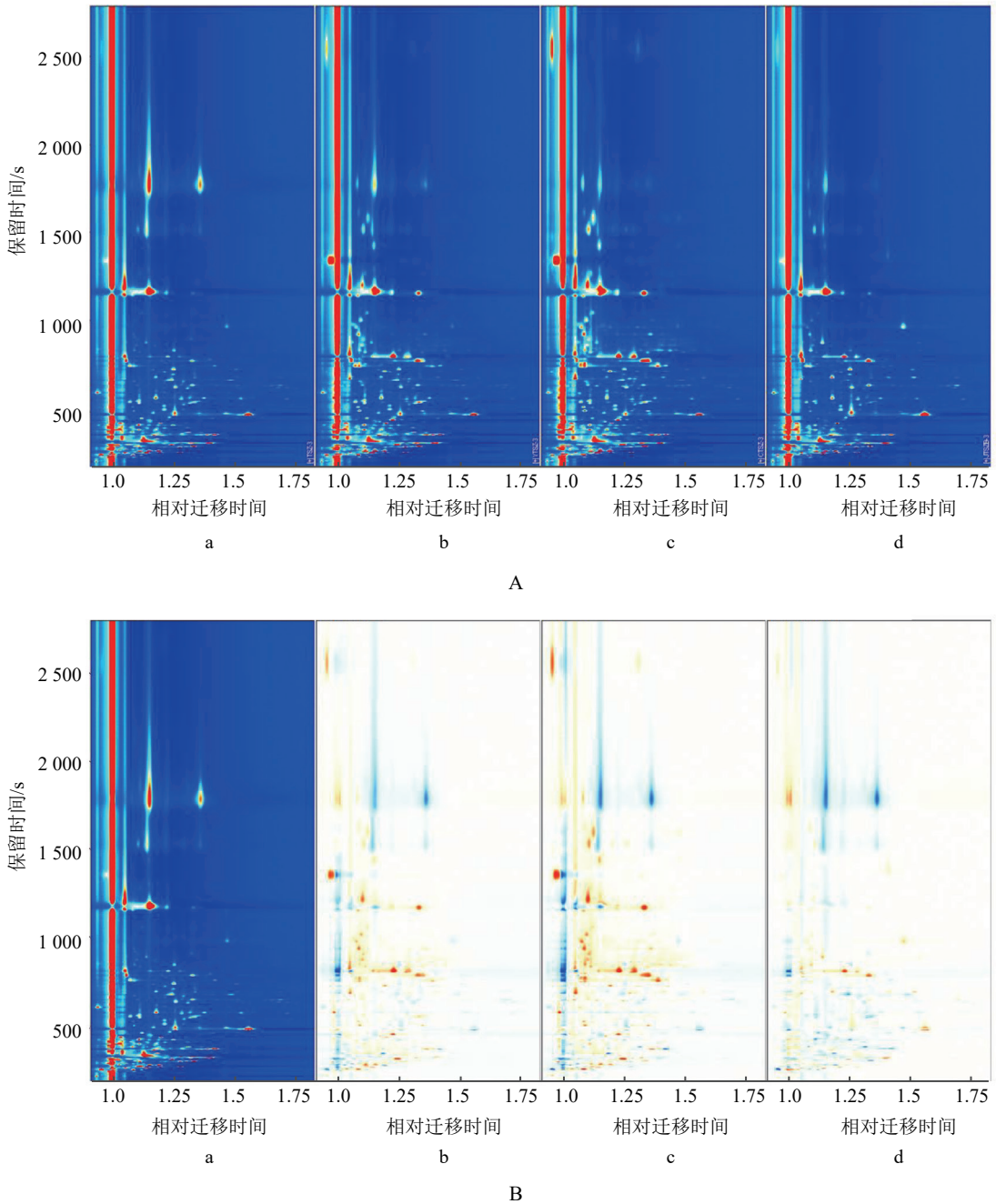
2.5 菟丝子不同炮制品的 GC-IMS 指纹图谱分析

为明确引起菟丝子不同炮制品出现差异的成分，使用 Gallery Plot 插件将不同炮制品的 GC-IMS 二维图谱中的待分析峰生成指纹图谱（图 2）。图中每一列代表同一挥发性成分在不同菟丝子样品中的信号峰，每一行代表 1 个菟丝子样品中选取的全部信号峰，图中颜色从浅到深表示浓度从低到高。通过初步对比，菟丝子不同炮制品所含的挥发性成分既有相同区域，也有特征区域。成分差异主要与炮制方法相关。盐菟丝子、炒菟丝子和酒菟丝子饼均经加热处理，其成分差异可能与加热强度、加热时间及工艺参数不同有关；同时，盐菟丝子与酒菟丝子饼在炮制过程中分别使用了食盐、黄酒作为辅料，这也是造成成分差异的重要原因。

图 2 中，A 区域的成分是菟丝子不同炮制品的共有挥发性成分（以下化合物名称中的 M、D 和 P 分别表示单体、二聚体和多聚体），包括乳酸乙酯 M、1- 戊醇 M、1- 戊醇 D、烯丙醛、2- 戊基呋喃、2- 己烯醛、庚醛 M、庚醛 D、己醛 M、己醛 D、异戊醛、2- 甲基丁醛、异丁醛、*β*- 蒎烯、乙酸丁酯、乙酸乙酯、二甲基硫 M、二甲基硫 D、乙酸甲酯 M、乙酸甲酯 D、丁醛 M、丁醛 D、丁酸乙酯、3- 戊烯 -2- 酮 M、3- 戊烯 -2- 酮 D、反式 -2- 戊烯醛 M、反式 -2- 戊烯醛 D、1- 戊烯 -3- 酮 M、1- 戊烯 -3- 酮 D、正丁醇 M、正丁醇 D、正丁醇 P、1- 戊烯 -3- 醇、异丙醇、1,8- 环氧对孟烷、戊醛、1,4- 桉叶素、正辛醛、丙醇 M、丙醇 D、（*E*）-2- 庚烯醛、正己醇、3- 甲基 -3- 丁烯 -1- 醇、3- 甲基 -2- 丁烯醛、丙酸甲酯、2- 丁酮 M、2- 丁酮 D、甲基庚烯酮、异丁醇、丙酸丁酯 M、丙酸丁酯 D、乙酸 M、乙酸 D、3- 羟基 -2- 丁酮 M、3- 羟基 -2- 丁酮 D、2- 庚酮、丙醛 M、丙醛 D、羟基丙酮 M、2,3- 丁二酮、丙酮、乙醇，还有编号为 1 ～ 13、15 ～ 19、29、33 的成分（表 2 中的未定性成分，下同），共 82 个成分。

B 区域的成分是盐菟丝子和炒菟丝子的共有挥发性成分，包括 3- 辛酮、3- 甲基 -2- 丁烯乙酸酯 M、3- 甲基 -2- 丁烯乙酸酯 D、2- 甲基吡嗪、2,5- 二甲基吡嗪 M、2,5- 二甲基吡嗪 D、5- 甲基 -2（3*H*）呋喃酮、5- 甲基呋喃醛 M、5- 甲基呋喃醛 D、糠醛、丙酸、吡咯、3- 甲硫基丙醇、1- 辛烯 -3- 酮、环戊酮、苯甲醛、2- 甲基四氢呋喃 -3- 酮 D、2- 甲基丁酸乙酯，还有编号为 23 ～ 28、30 ～ 32、35 ～ 38 的成分，共 31 个成分。

C 区域的成分为酒菟丝子饼特征挥发性成分，包括壬醛 M、壬醛 D、反式 -2- 己烯醛 M、反式 -2- 己烯醛 D，共 4 个成分。D 区域的成分为生菟



A—直接对比图；B—扣除对照（菟丝子）后的对比图。

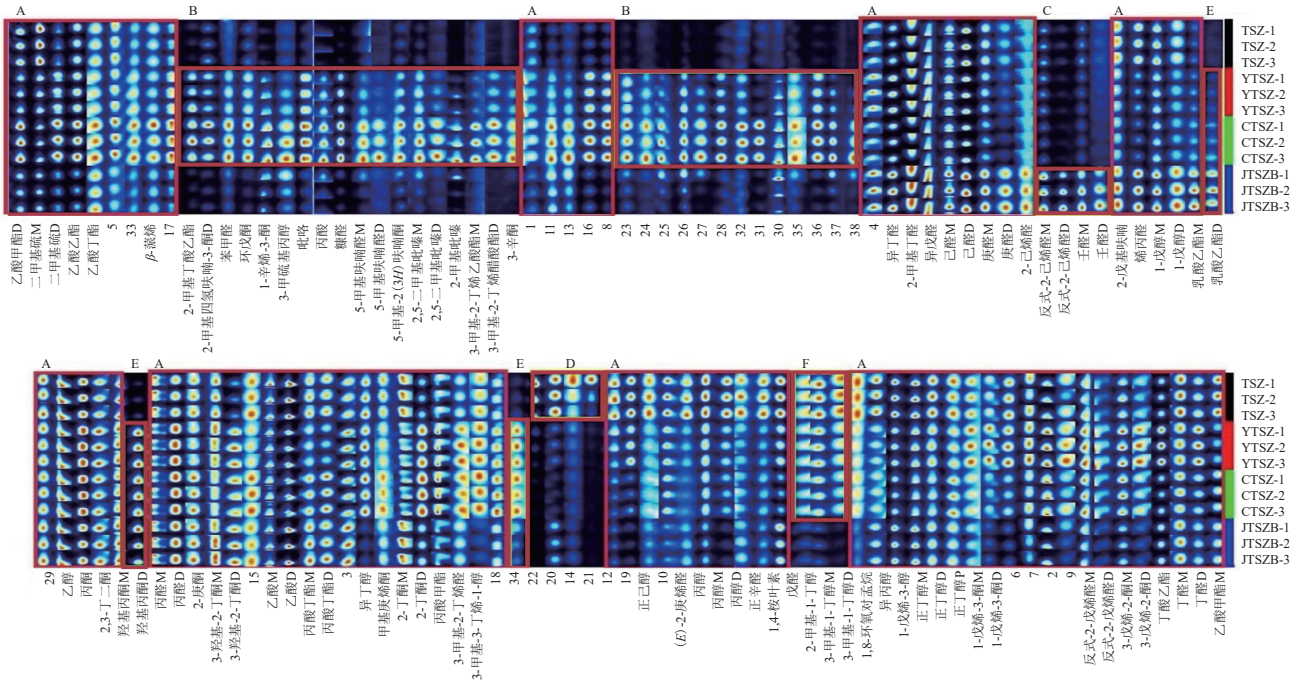
a—生菟丝子；b—盐菟丝子；c—炒菟丝子；d—酒菟丝子饼。

注：各图中相对迁移时间 1.0 处的红线表示 RIP。

图 1　菟丝子不同炮制品挥发性成分的对比图

Fig.1　Comparison Diagrams of Volatile Components in Different Processed Products of *Cuscutae Semen*

丝子特征挥发性成分，包括编号为 14、20 ～ 22 的 4 个成分。E 区域的成分是盐菟丝子、炒菟丝子和酒菟丝子饼的共有挥发性成分，包括羟基丙酮 D、乳酸乙酯 D，还有编号为 34 的成分，共 3 个成分。F 区域的成分是生菟丝子、盐菟丝子和炒菟丝子的共有挥发性成分，包括 3- 甲基 -1- 丁醇 M、3- 甲基 -1- 丁醇 D 和 2- 甲基 -1- 丁醇，共 3 个成分。



注：各数字编号指与表 2 中对应的未定性成分。

图 2　菟丝子不同炮制品挥发性成分的指纹图谱对比

Fig.2　Fingerprints Comparison of Volatile Components of Different Processed Products of *Cuscutae Semen*

2.6　菟丝子不同炮制品的定性鉴别

根据菟丝子不同炮制品挥发性成分的相对迁移时间，以 C4 ～ C9 正酮作为外标，计算每种成分的保留指数和峰体积，使用 NIST 2020 质谱数据库和 IMS 数据库的定性功能对菟丝子不同炮制品中的挥发性成分进行分析。结果如表 2 所示，已定性的挥发性成分有 89 个（含单体、二聚体和多聚体）。菟丝子不同炮制品中检测出的挥发性成分有醛类 27 个，酮类 19 个，醇类 17 个，酯类 13 个，酸类和吡嗪类各 3 个，单萜类和硫醚类各 2 个，萜烯类、呋喃类、吡咯类各 1 个。醛类、酮类、醇类和酯类是主要成分，占所有已鉴别成分的 85.4%，对菟丝子的整体气味影响很大。其中，有 24 种化合物以单体、二聚体和 / 或多聚体存在，上述成分分别为丙醛、乙酸甲酯、2- 丁酮、丁醛、二甲基硫、己醛、1- 戊烯 -3- 酮、丙醇、正丁醇、反式 -2- 戊烯醛、3- 戊烯 -2- 酮、庚醛、反式 -2- 己烯醛、1- 戊醇、3- 甲基 -1- 丁醇、羟基丙酮、3- 羟基 -2- 丁酮、乙酸、5- 甲基呋喃醛、壬醛、丙酸丁酯、2,5- 二甲基吡嗪、乳酸乙酯、3- 甲基 -2- 丁烯乙酸酯。

2.7　化学计量学方法识别

2.7.1　PCA

以所有挥发性成分的峰体积作为变量，对菟丝子不同炮制品所含的挥发性成分进行 PCA 分析。第 1 主成分（PC1）、第 2 主成分（PC2）和第 3 主成分（PC3）贡献率分别为 53.4%、29.3%、12.3%，累积贡献率为 95.0%，表明 PCA 模型可以作为有效的分离模型（图 3）。菟丝子不同炮制品能够各自聚为一类，且不同炮制品之间能够区分开，证实受到不同炮制方法的影响，菟丝子不同炮制品所含的挥发性成分存在差异。

2.7.2　OPLS-DA

以菟丝子不同炮制品 127 个挥发性成分的峰体积为变量，使用 SIMCA（14.1）软件得到 OPLS-DA 模型。模型在 X 轴和 Y 轴方向的累积解释率 R^2_X 和 R^2_Y 分别为 0.994 和 0.996，模型的累积预测率 Q^2 为 0.986，说明模型具有较好的解释和预测能力。OPLS-DA 结果和 PCA 的一致，能够有效区分菟丝

表 2 菟丝子不同炮制品挥发性成分的定性分析

Tab.2 Qualitative Analysis of Volatile Components of Different Processed Products of *Cuscutae Semen*

化合物	类型	CAS 号	分子式	相对分子质量	保留指数	保留时间 /s	相对迁移时间	峰体积均值（*n*=3）			
								TSZ	YTSZ	CTSZ	JTSZB
丙醛 M	醛类	123-38-6	C_3H_6O	58.1	800.9	266.6	1.0	1 373.65	976.73	952.66	1 318.38
丙醛 D	醛类	123-38-6	C_3H_6O	58.1	800.3	266.4	1.1	3 153.95	4 185.20	4 184.47	3 847.17
丙酮	酮类	67-64-1	C_3H_6O	58.1	822.8	275.4	1.1	4 695.34	6 240.38	5 584.46	4 742.35
异丁醛	醛类	78-84-2	C_4H_8O	72.1	816.4	272.8	1.2	685.08	847.20	688.01	1 259.13
乙酸甲酯 M	酯类	79-20-9	$C_3H_6O_2$	74.1	837.2	281.4	1.0	787.92	434.80	558.42	634.47
乙酸甲酯 D	酯类	79-20-9	$C_3H_6O_2$	74.1	835.3	280.6	1.1	2 322.83	1 906.46	3 371.87	1 725.53
烯丙醛	醛类	107-02-8	C_3H_4O	56.1	851.9	287.6	1.0	911.61	467.91	368.54	1 081.48
2- 丁酮 M	酮类	78-93-3	C_4H_8O	72.1	914.4	316.0	1.0	1 106.12	951.68	900.45	1 115.32
2- 丁酮 D	酮类	78-93-3	C_4H_8O	72.1	914	315.7	1.2	1 982.01	5 010.82	5 706.02	2 563.46
乙酸乙酯	酯类	141-78-6	$C_4H_8O_2$	88.1	893	305.7	1.3	1 877.76	2 115.59	2 625.93	981.00
丁醛 M	醛类	123-72-8	C_4H_8O	72.1	882.1	300.7	1.1	743.31	711.75	625.50	696.67
丁醛 D	醛类	123-72-8	C_4H_8O	72.1	884.4	301.8	1.2	820.24	1 068.79	729.92	740.57
二甲基硫 M	硫醚类	75-18-3	C_2H_6S	62.1	770.9	255.0	0.9	4 565.70	2 819.56	2 276.88	2 249.73
二甲基硫 D	硫醚类	75-18-3	C_2H_6S	62.1	770.2	254.7	1.0	1 422.43	2 950.27	3 774.92	1 303.65
乙醇	醇类	64-17-5	C_2H_6O	46.1	941	334.4	1.1	12 372.33	13 012.15	13 533.39	11 317.71
丙酸甲酯	酯类	554-12-1	$C_4H_8O_2$	88.1	927.3	324.7	1.3	2 592.85	3 109.67	3 163.71	2 439.60
异戊醛	醛类	590-86-3	$C_5H_{10}O$	86.1	929.6	326.3	1.4	1 987.77	2 568.04	1 940.09	3 011.96
2- 甲基丁醛	醛类	96-17-3	$C_5H_{10}O$	86.1	921.8	321.0	1.3	1 783.09	1 897.46	1 432.69	2 785.31
己醛 M	醛类	66-25-1	$C_6H_{12}O$	100.2	1 094.7	482.2	1.2	4 392.06	3 910.46	3 671.09	5 164.46
己醛 D	醛类	66-25-1	$C_6H_{12}O$	100.2	1 097.6	485.9	1.5	8 423.77	7 103.50	6 565.32	12 844.56
2- 甲基丁酸乙酯	酯类	7452-79-1	$C_7H_{14}O_2$	130.2	1 070.8	453.9	1.2	317.83	2 006.57	2 257.27	321.63
2,3- 丁二酮	酮类	431-03-8	$C_4H_6O_2$	86.1	988	369.4	1.1	1 539.26	1 780.44	1 700.91	1 842.65
戊醛	醛类	110-62-3	$C_5H_{10}O$	86.1	992.3	372.8	1.4	2 660.57	2 013.93	1 179.78	1 943.04
1- 戊烯 -3- 酮 M	酮类	1629-58-9	C_5H_8O	84.1	1 033	412.6	1.0	384.58	419.82	357.00	317.32
1- 戊烯 -3- 酮 D	酮类	1629-58-9	C_5H_8O	84.1	1 032.7	412.2	1.3	225.60	313.59	198.62	87.46
丙醇 M	醇类	71-23-8	C_3H_8O	60.1	1 045.7	426.0	1.1	1 778.31	1 471.27	1 407.78	829.36
丙醇 D	醇类	71-23-8	C_3H_8O	60.1	1 045	425.2	1.2	719.85	485.26	423.69	151.53
丁酸乙酯	酯类	105-54-4	$C_6H_{12}O_2$	116.2	1 055.9	437.1	1.2	894.19	1 486.03	838.92	1 036.37
乙酸丁酯	酯类	123-86-4	$C_6H_{12}O_2$	116.2	1 083.8	469.2	1.2	393.58	440.67	540.10	425.64
正丁醇 M	醇类	71-36-3	$C_4H_{10}O$	74.1	1 154.5	578.5	1.1	2 276.91	2 367.06	2 279.03	2 179.14
正丁醇 D	醇类	71-36-3	$C_4H_{10}O$	74.1	1 154.1	577.8	1.3	532.46	504.70	439.92	457.21
正丁醇 P	醇类	71-36-3	$C_4H_{10}O$	74.1	1 154.5	578.5	1.5	428.54	354.38	355.65	317.19
1- 戊烯 -3- 醇	醇类	616-25-1	$C_5H_{10}O$	86.1	1 170.8	608.1	0.9	2 038.72	1 709.99	1 564.66	1 862.86
反式 -2- 戊烯醛 M	醛类	1576-87-0	C_5H_8O	84.1	1 144.8	561.5	1.1	1 250.50	1 509.40	1 318.20	929.04
反式 -2- 戊烯醛 D	醛类	1576-87-0	C_5H_8O	84.1	1 143	558.6	1.3	603.94	1 048.67	811.77	368.23
3- 戊烯 -2- 酮 M	酮类	625-33-2	C_5H_8O	84.1	1 140.4	554.1	1.0	939.41	1 161.50	1 056.49	650.28
3- 戊烯 -2- 酮 D	酮类	625-33-2	C_5H_8O	84.1	1 140	553.4	1.3	1 042.14	1 845.97	1 325.79	479.70
异丁醇	醇类	78-83-1	$C_4H_{10}O$	74.1	1 102.7	493.5	1.1	500.13	515.38	521.74	149.76
庚醛 M	醛类	111-71-7	$C_7H_{14}O$	114.2	1 193.5	650.9	1.3	1 158.87	990.67	809.12	1 507.71
庚醛 D	醛类	111-71-7	$C_7H_{14}O$	114.2	1 193.5	650.9	1.6	280.29	174.48	117.22	495.76
反式 -2- 己烯醛 M	醛类	6728-26-3	$C_6H_{10}O$	98.1	1 228.5	697.5	1.1	812.62	840.72	605.02	1 701.08
反式 -2- 己烯醛 D	醛类	6728-26-3	$C_6H_{10}O$	98.1	1 226.9	695.3	1.5	190.04	150.68	150.23	627.97
1- 戊醇 M	醇类	71-41-0	$C_5H_{12}O$	88.1	1 258.7	740.4	1.2	1 411.25	1 161.27	1 065.18	1 603.20
1- 戊醇 D	醇类	71-41-0	$C_5H_{12}O$	88.1	1 257.7	738.9	1.5	164.40	110.60	114.03	216.40
2- 戊基呋喃	呋喃类	3777-69-3	$C_9H_{14}O$	138.2	1 239.1	712.4	1.2	375.00	267.64	232.12	369.16

（续表 2）

化合物	类型	CAS 号	分子式	相对分子质量	保留指数	保留时间 /s	相对迁移时间	峰体积均值（*n*=3）			
								TSZ	YTSZ	CTSZ	JTSZB
3- 甲基 -1- 丁醇 M	醇类	123-51-3	$C_5H_{12}O$	88.1	1 216.1	680.6	1.2	1 104.14	846.88	725.76	268.69
3- 甲基 -1- 丁醇 D	醇类	123-51-3	$C_5H_{12}O$	88.1	1 215.6	680.0	1.4	400.00	288.80	229.54	39.49
2- 甲基 -1- 丁醇	醇类	137-32-6	$C_5H_{12}O$	88.1	1 215.2	679.4	1.2	525.71	435.58	393.40	154.01
羟基丙酮 M	酮类	116-09-6	$C_3H_6O_2$	74.1	1 306.5	813.8	1.0	5 506.41	6 365.70	5 566.04	6 696.21
羟基丙酮 D	酮类	116-09-6	$C_3H_6O_2$	74.1	1 305.7	812.6	1.2	1 059.81	8 523.11	9 221.05	6 847.68
3- 羟基 -2- 丁酮 M	酮类	513-86-0	$C_4H_8O_2$	88.1	1 290.7	788.7	1.0	3 153.99	3 557.36	2 989.69	3 827.73
3- 羟基 -2- 丁酮 D	酮类	513-86-0	$C_4H_8O_2$	88.1	1 290.3	788.1	1.3	1 275.67	3 971.33	3 983.97	3 880.76
2- 甲基四氢呋喃 -3- 酮	酮类	3188-00-9	$C_5H_8O_2$	100.1	1 270.3	757.7	1.4	354.19	603.17	929.97	192.68
正辛醛	醛类	124-13-0	$C_8H_{16}O$	128.2	1 295.6	796.5	1.4	252.35	181.89	202.13	169.36
(*E*)-2- 庚烯醛	醛类	18829-55-5	$C_7H_{12}O$	112.2	1 327.5	848.4	1.2	717.02	382.08	304.44	432.83
甲基庚烯酮	酮类	110-93-0	$C_8H_{14}O$	126.2	1 342.1	873.3	1.1	182.30	172.24	191.78	168.27
正己醇	醇类	111-27-3	$C_6H_{14}O$	102.2	1 363.5	911.1	1.3	213.22	145.47	150.73	106.63
乙酸 M	酸类	64-19-7	$C_2H_4O_2$	60.1	1 498.4	1 190.1	1.0	38 251.40	35 267.18	37 969.26	34 736.29
乙酸 D	酸类	64-19-7	$C_2H_4O_2$	60.1	1 497	1 186.8	1.1	30 796.46	24 865.57	29 655.96	27 381.17
1,4- 桉叶素	单萜类	470-67-7	$C_{10}H_{18}O$	154.3	1 184.6	634.4	1.3	440.28	200.10	219.59	195.67
2- 庚酮	酮类	110-43-0	$C_7H_{14}O$	114.2	1 186.4	638.0	1.2	1 081.98	962.86	1 100.04	1 152.82
3- 甲基 -2- 丁烯醛	醛类	107-86-8	C_5H_8O	84.1	1 210.9	673.7	1.0	148.57	254.55	255.39	164.16
2- 己烯醛	醛类	505-57-7	$C_6H_{10}O$	98.1	1 212.4	675.7	1.1	74.63	76.30	74.83	109.77
3- 甲基 -3- 丁烯 -1- 醇	醇类	763-32-6	$C_5H_{10}O$	86.1	1 257.4	738.5	1.1	116.40	104.85	114.06	45.64
3- 甲硫基丙醇	醇类	505-10-2	$C_4H_{10}OS$	106.2	1 705.3	1 792.8	1.0	665.45	1 573.45	3 034.20	1 784.66
1- 辛烯 -3- 酮	酮类	4312-99-6	$C_8H_{14}O$	126.2	1 306.5	813.7	1.2	936.62	4 122.48	6 954.47	3 060.42
β- 蒎烯	蒎烯类	127-91-3	$C_{10}H_{16}$	136.2	1 128.1	533.6	1.2	555.73	503.51	734.81	446.10
异丙醇	醇类	67-63-0	C_3H_8O	60.1	920.6	320.1	1.2	335.54	221.97	257.51	215.68
糠醛	醛类	98-01-1	$C_5H_4O_2$	96.1	1 491.9	1 174.9	1.3	833.26	5 046.95	7 570.16	1 378.63
苯甲醛	醛类	100-52-7	C_7H_6O	106.1	1 596.4	1 445.0	1.1	1 404.24	2 386.40	3 501.15	1 114.20
吡咯	吡咯类	109-97-7	C_4H_5N	67.1	1 564.8	1 357.3	0.9	8 725.16	192 361.41	23 600.23	9 871.10
丙酸	酸类	79-09-4	$C_3H_6O_2$	74.1	1 511.7	1 221.7	1.1	2 594.02	6 731.48	9 609.58	3 818.75
5- 甲基呋喃醛 M	醛类	620-02-0	$C_6H_6O_2$	110.1	1 647.7	1 599.4	1.1	1 521.96	2 071.39	4 075.24	1 107.56
5- 甲基呋喃醛 D	醛类	620-02-0	$C_6H_6O_2$	110.1	1 645.2	1 591.7	1.4	227.37	243.67	540.09	210.68
5- 甲基 -2(3*H*) 呋喃酮	酮类	591-12-8	$C_5H_6O_2$	98.1	1 442.2	1 064.7	1.1	389.63	886.39	1 318.99	474.70
壬醛 M	醛类	124-19-6	$C_9H_{18}O$	142.2	1 400.1	979.5	1.4	109 2.97	806.98	712.78	2 469.10
壬醛 D	醛类	124-19-6	$C_9H_{18}O$	142.2	1 400.7	980.7	1.9	165.87	165.00	182.18	369.59
丙酸丁酯 M	酯类	590-01-2	$C_7H_{14}O_2$	130.2	1 150.1	570.8	1.2	606.93	453.73	576.15	621.59
丙酸丁酯 D	酯类	590-01-2	$C_7H_{14}O_2$	130.2	1 150.8	572.0	1.7	233.55	143.57	223.40	221.71
桉叶油醇	单萜类	470-82-6	$C_{10}H_{18}O$	154.3	1 210.5	673.2	1.2	201.79	170.40	166.60	83.91
环戊酮	酮类	120-92-3	C_5H_8O	84.1	1 194.4	652.1	1.1	147.70	360.65	444.83	79.40
2- 甲基吡嗪	吡嗪类	109-08-0	$C_5H_6N_2$	94.1	1 271.3	759.1	1.3	239.20	1 086.43	3 232.42	794.15
2,5- 二甲基吡嗪 M	吡嗪类	123-32-0	$C_6H_8N_2$	108.1	1 322.6	840.2	1.1	189.35	738.35	1 003.47	395.27
2,5- 二甲基吡嗪 D	吡嗪类	123-32-0	$C_6H_8N_2$	108.1	1 321.9	839.0	1.4	48.62	99.78	231.89	64.20
乳酸乙酯 M	酯类	1191-16-8	$C_5H_{10}O_3$	118.1	1 354.3	894.6	1.1	763.85	591.67	623.92	1 586.76
乳酸乙酯 D	酯类	97-64-3	$C_5H_{10}O_3$	118.1	1 352.4	891.3	1.5	81.45	98.98	128.21	239.76
3- 辛酮	酮类	106-68-3	$C_8H_{16}O$	128.2	1 251.3	729.7	1.3	36.29	75.10	173.28	32.62
3- 甲基 -2- 丁烯乙酸酯 M	酯类	1191-16-8	$C_7H_{12}O_2$	128.2	1 250.3	728.2	0.9	97.94	112.26	197.83	116.95
3- 甲基 -2- 丁烯乙酸酯 D	酯类	1191-16-8	$C_7H_{12}O_2$	128.2	1 252.2	731.0	1.4	36.61	130.97	215.31	40.69
1	*	*	*	*	*	850.7	287.0	1.13	243.88	369.24	395.46
2	*	*	*	*	*	831.0	278.7	1.16	2 421.14	3 675.77	4 044.72

（续表 2）

化合物	类型	CAS 号	分子式	相对分子质量	保留指数	保留时间 /s	相对迁移时间	峰体积均值（*n*=3）			
								TSZ	YTSZ	CTSZ	JTSZB
3	*	*	*	*	*	817.1	273.0	1.20	490.79	481.45	443.68
4	*	*	*	*	*	932.7	328.4	1.28	676.14	813.97	665.08
5	*	*	*	*	*	1 043.6	423.7	0.95	162.98	149.77	178.17
6	*	*	*	*	*	1 079.1	463.5	1.12	592.02	608.19	374.05
7	*	*	*	*	*	1 135.6	545.9	1.11	688.35	810.33	634.48
8	*	*	*	*	*	1 123.9	526.7	1.09	193.08	600.37	806.00
9	*	*	*	*	*	1 135.6	545.9	1.32	366.44	542.46	369.85
10	*	*	*	*	*	1 101.2	491.3	1.47	1 278.28	1 187.09	1 172.56
11	*	*	*	*	*	1 328.2	849.4	1.10	391.24	980.55	1 661.86
12	*	*	*	*	*	1 626.9	1 534.9	1.11	34 871.42	19 954.38	10 943.38
13	*	*	*	*	*	1 702.9	1 784.1	1.15	921.62	2 076.92	4 199.54
14	*	*	*	*	*	1 625.0	1 529.1	1.15	8 033.15	3 073.68	2 007.27
15	*	*	*	*	*	1 133.5	542.5	1.30	304.48	277.82	325.00
16	*	*	*	*	*	1 110.9	506.1	1.09	254.00	834.81	1 160.21
17	*	*	*	*	*	1 019.4	398.5	1.11	864.13	1 200.31	1 518.97
18	*	*	*	*	*	1 019.4	398.5	1.18	821.49	982.06	1 115.22
19	*	*	*	*	*	1 004.3	383.6	1.32	974.99	842.29	413.92
20	*	*	*	*	*	957.8	346.4	1.19	1 204.75	354.77	221.98
21	*	*	*	*	*	1 625.5	1 530.6	1.36	3 508.67	741.18	481.41
22	*	*	*	*	*	1 704.2	1 788.5	1.37	29 576.92	7 354.70	3 699.19
23	*	*	*	*	*	1 421.4	1 021.6	1.09	248.65	1 274.80	1 660.23
24	*	*	*	*	*	1 420.3	1 019.4	1.37	75.36	179.62	268.62
25	*	*	*	*	*	1 400.6	980.5	1.08	293.10	1 508.10	2 745.11
26	*	*	*	*	*	1 379.2	939.8	1.09	426.34	2 350.62	3 247.06
27	*	*	*	*	*	1 378.6	938.7	1.39	67.87	348.18	760.60
28	*	*	*	*	*	1 110.1	504.9	1.35	164.39	442.82	652.61
29	*	*	*	*	*	1 114.8	512.1	1.22	1 056.97	955.91	945.84
30	*	*	*	*	*	1 222.9	689.9	1.05	2 189.94	3 967.39	5 874.41
31	*	*	*	*	*	1 191.3	647.6	1.14	137.21	113.40	448.78
32	*	*	*	*	*	1 192.9	650.1	1.04	213.02	402.88	631.80
33	*	*	*	*	*	1 175.8	617.5	1.18	262.23	374.89	437.03
34	*	*	*	*	*	1 344.9	878.1	1.10	221.22	927.55	1 004.02
35	*	*	*	*	*	1 363.1	910.3	1.11	127.40	796.36	1 070.76
36	*	*	*	*	*	1 251.7	730.2	1.19	176.17	820.39	1 012.13
37	*	*	*	*	*	1 883.6	2 551.7	0.95	5 243.29	11 415.29	19 496.51
38	*	*	*	*	*	1 883.6	2551.7	1.31	528.47	694.52	1 741.34

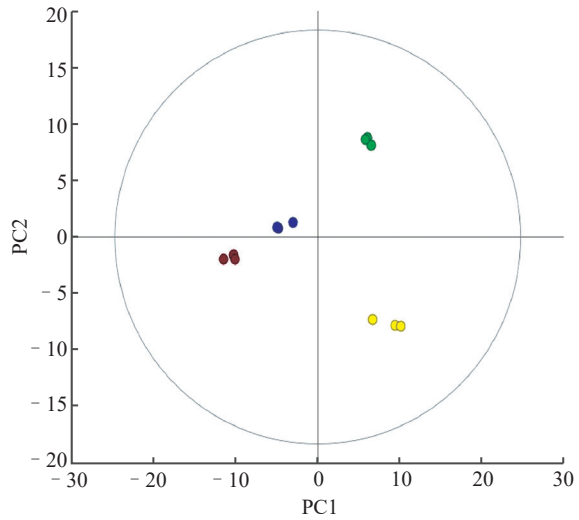
注：M—单体；D—二聚体；P—多聚体；*—未定性成分。

子不同炮制品（图 4）。

变量重要性投影（variable importance in the projection，VIP）值是评价各挥发性成分对样品间差异贡献程度的重要指标，VIP 值越小，差异越小。按 VIP 值大于 1 的标准对获得的挥发性成分进行筛选，得到 34 种菟丝子不同炮制品的特征挥发性成分（图 5）。

2.7.3 聚类分析

采用 Fingerprint Similarity Analysis 插件对菟丝子不同炮制品中的挥发性成分进行最近邻指纹分析（图 6），横坐标代表样本在最近邻指纹分析中的距离 / 相似度轴，越往右代表与其他组的差异越大；纵坐标为区分样本的占位轴。计算每 2 个样本之间



■—TSZ；■—YTSZ；■—CTSZ；■—JTSZB。

图 3　菟丝子不同炮制品中挥发性成分的 PCA 分析图

Fig.3　PCA Analysis Plots of Volatile Components in Different Processed Products of *Cuscutae Semen*

的欧氏距离（表 3）。结果显示，菟丝子各炮制品的聚类无重叠，特征清晰、区分效果良好。酒菟丝子饼与其他炮制品的聚类距离较远、相似度较低，说明酒菟丝子饼的挥发性成分显著区别于其他炮制品；而生菟丝子、盐菟丝子与炒菟丝子的聚类相对集中、彼此相似度较高，提示炮制对后二者挥发性成分的影响较为相近。此外，炒菟丝子组内样品的分布最为集中，表明其挥发性成分的个体差异较小。

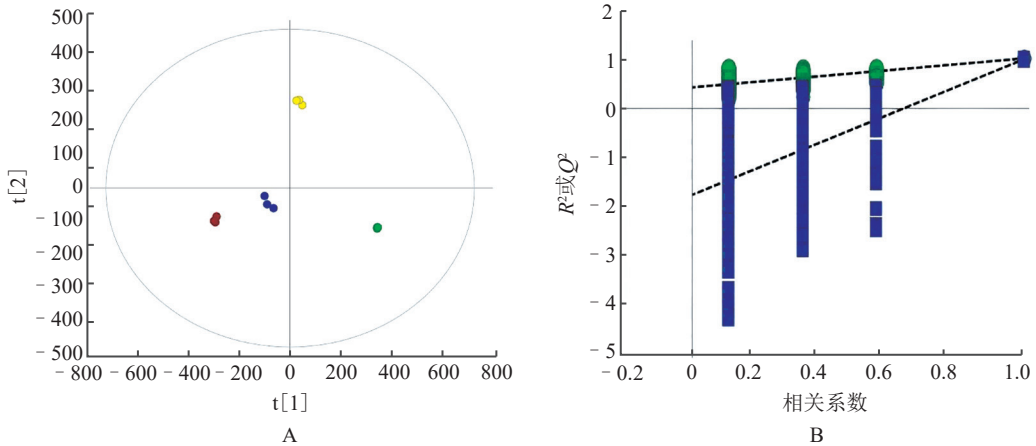
以 VIP 值大于 1 的 34 种特征挥发性成分的峰体积绘制聚类热图（图 7）。结果显示，炒菟丝子和盐菟丝子聚类关系较近，二者随后和酒菟丝子饼聚为一类，生菟丝子则单独聚为一类。可能是炒菟丝子、盐菟丝子和酒菟丝子饼均受到加热因素的影响，同属于菟丝子熟品。

聚类分析与上述 PCA、OPLS-DA、欧式距离的结果一致，筛选出的 34 个特征挥发性成分能有效区分菟丝子不同炮制品，且能直观呈现特征挥发性成分在菟丝子不同炮制品之间的相对含量。

3　讨论

不同炮制品气味存在差异，这可能与其挥发性成分的种类及含量不同有关。本研究采用 GC-IMS 技术检测生菟丝子、炒菟丝子、盐菟丝子及酒菟丝子饼的挥发性成分。结果显示醛类、酮类、醇类和酯类是其中的主要成分，占所有已鉴别成分的 85.4%，这是影响菟丝子整体气味的主要因素。在可视化指纹图谱中，酒菟丝子饼与生菟丝子各含有 4 个特征挥发性成分，炒菟丝子和盐菟丝子未检出特征挥发性成分。

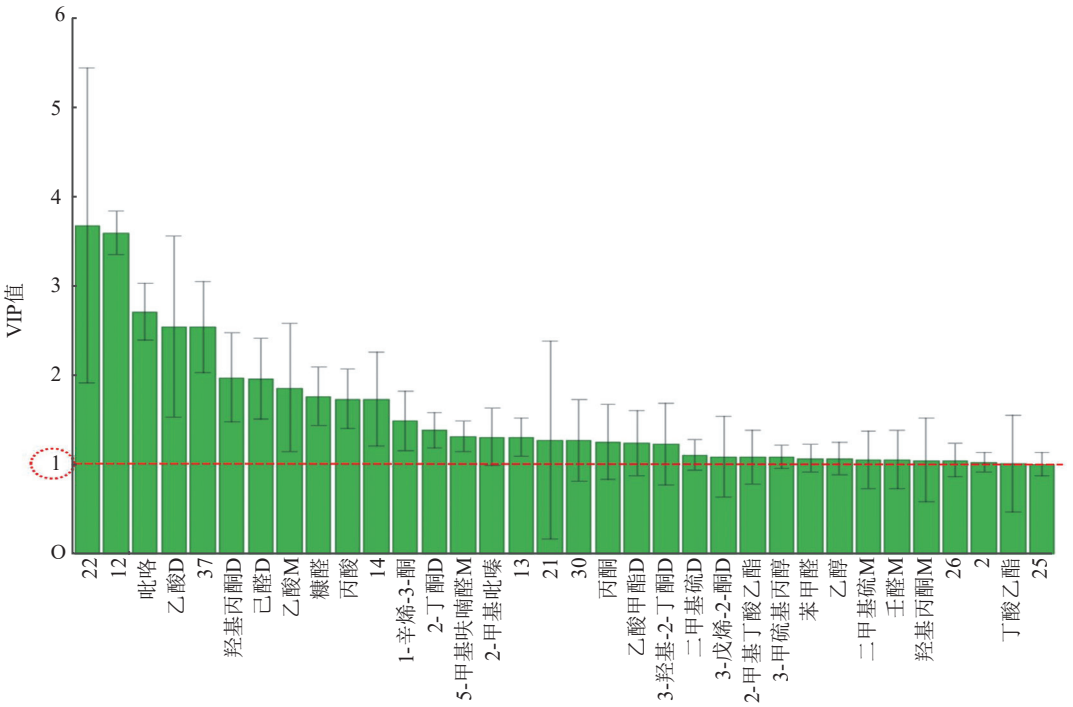
在 HS-GC-IMS 检测中，同一化合物的单体（M）与二聚体（D）为同一物质的不同存在形式，二者分子式、相对分子质量、CAS 号一致，仅在离子迁移谱中因离子迁移速率、峰形、相对迁移时间不同而



A—得分图（■—TSZ；■—YTSZ；■—CTSZ；■—JTSZB）；B—置换图（●—R^2；■—Q^2）。

图 4　菟丝子不同炮制品中挥发性成分的 OPLS-DA 分析图

Fig.4　OPLS-DA Analysis Plots of Volatile Components in Different Processed Products of *Cuscutae Semen*



注：各数字编号指与表 2 中对应的未定性成分。

图 5 菟丝子不同炮制品 OPLS-DA 模型中部分挥发性成分的 VIP 值

Fig.5 VIP Scores of Selected Volatile Components in OPLS-DA Model of Different Processed Products of *Cuscutae Semen*

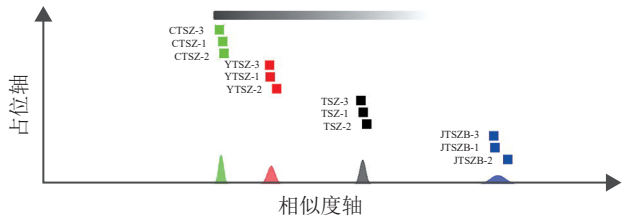
表 3 菟丝子不同炮制品的欧式距离

Tab.3 Euclidean Distance of Different Processed Products of *Cuscutae Semen*

样品编号	样品编号											
	TSZ-1	TSZ-2	TSZ-3	YTSZ-1	YTSZ-2	YTSZ-3	CTSZ-1	CTSZ-2	CTSZ-3	JTSZB-1	JTSZB-2	JTSZB-3
TSZ-1	0	360 533	759 736	8 774 151	10 858 550	11 308 136	18711 268	18 728 975	20 621 036	12 202 106	11 310 822	11 292 680
TSZ-2	360 533	0	249 447	8 278 563	10 400 459	10 810 088	18 081 406	18 052 349	20 138 775	11 101 399	10 014 902	9 973 818
TSZ-3	759 736	249 447	0	7 538 672	9505 007	9847 337	17545 424	17 599 700	19 492 652	10 778 026	9 818 553	9 786 398
YTSZ-1	8 774 151	8 278 563	7 538 672	0	601 381	643 084	5 398 519	5 578 651	6 766 941	10 016 439	11 152 198	11 553 002
YTSZ-2	10 858 550	10 400 459	9 505 007	601 381	0	103 836	3 900 731	4 160 940	4 619 256	10 025 070	12 461 344	13 226 695
YTSZ-3	11 308 136	10 810 088	9 847 337	643 084	103 836	0	3 976 325	4 095 147	4 625 951	10 086 629	12 575 539	13 371 125
CTSZ-1	18 711 268	18 081 406	17 545 424	5 398 519	3 900 731	3 976 325	0	136 655	324 043	12 769 741	16 625 454	17 749 533
CTSZ-2	18 728 975	18 052 349	17 599 700	5 578 651	4 160 940	4 095 147	136 655	0	328 809	12 106 625	16 071 679	17 268 087
CTSZ-3	20 621 036	20 138 775	19 492 652	6 766 941	4 619 256	4 625 951	324 043	328 809	0	13 578 081	18 276 412	19 632 286
JTSZB-1	12 202 106	11 101 399	10 778 026	10 016 439	10 025 070	10 086 629	12 769 741	12 106 625	13 578 081	0	1 149 425	1 965 388
JTSZB-2	11 310 822	10 014 902	9 818 553	11 152 198	12 461 344	12 575 539	16 625 454	16 071 679	18 276 412	1 149 425	0	144 620
JTSZB-3	11 292 680	9 973 818	9 786 398	11 553 002	13 226 695	13 371 125	17 749 533	17 268 087	19 632 286	1 965 388	144 620	0

区分差异，在实际工作中，可通过以下规则区分：依据外标验证法配制标准品溶液，按“**2.1**”项下方法进样测定，记录标准品单体与二聚体的保留时间、相对迁移时间、峰形特征、离子迁移速率。表 2 中的同一成分编号，相对迁移时间较小者判定为单体，较大者为二聚体。二聚体多为拖尾峰 / 双峰，峰强度较高，且随样品浓度升高，二聚体峰占比显著上升。

PCA、OPLS-DA 及最近邻指纹分析结果均表明，菟丝子各炮制品的组内差异较小、组间区分明显，可用以有效实现不同炮制品的精准鉴别。炒菟丝子、



■—TSZ；■—YTSZ；■—CTSZ；■—JTSZB。

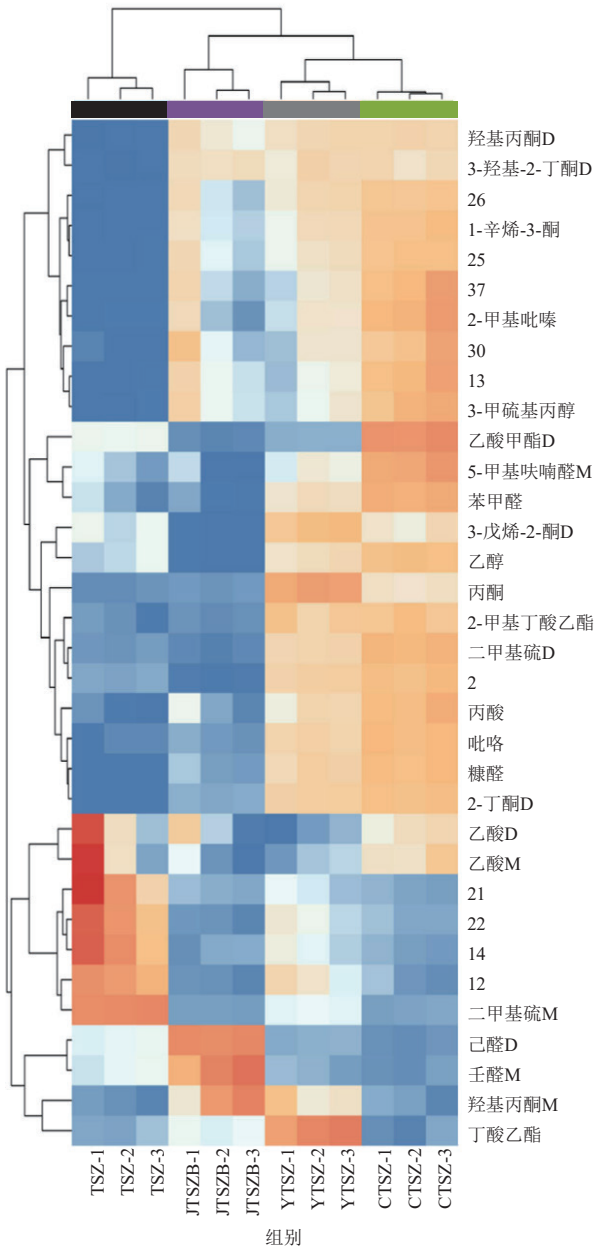
注：上方黑色的色阶越深代表样品相似度越高。

图 6　菟丝子不同炮制品挥发性成分的最近邻指纹分析

Fig.6　Nearest Neighbor Fingerprint Analysis of Volatile Components of Different Processed Products of *Cuscutae Semen*

盐菟丝子与酒菟丝子饼因挥发性成分的种类及相对含量较为接近，聚类距离相近。通过 VIP 值筛选出的 34 个特征挥发性成分，可作为菟丝子不同炮制品的鉴别标志物。本研究筛选出的特征挥发性成分中包括己醛，已有研究[20]证实其可提高免疫器官指数及总 T 淋巴细胞水平，提示菟丝子的免疫调节作用可能与该成分相关。

本研究采用 GC-IMS 技术结合化学计量学方法，比较了菟丝子不同炮制品的挥发性成分差异，为不同炮制品的快速鉴别提供了技术支撑，也可为菟丝子饮片的质量控制提供科学参考。



■—TSZ；■—YTSZ；■—CTSZ；■—JTSZB。

注：红色越深，代表该成分在对应样品中的含量越高；蓝色越深，代表含量越低。

图 7　菟丝子不同炮制品特征挥发性成分的聚类热图

Fig.7　Cluster Heatmap of Characteristic Volatile Components in Different Processed Products of *Cuscutae Semen*

参考文献：

[1]　陈鲁宁, 胡　扬, 辛国松, 等. 菟丝子化学成分、药理作用研究进展及其质量标志物(Q-Marker)预测[J]. 中草药, 2024, **55**(15): 5298-5314.

[2]　张雨婷, 杨之童, 刘子路, 等. UPLC-MS/MS测定菟丝子不同炮制品中3种黄酮类成分在大鼠体内的药物代谢动力学研究[J]. 安徽中医药大学学报, 2025, **44**(2): 100-107.

[3]　张秀如, 于　明, 崔雅晴, 等. 基于UPLC指纹图谱的菟丝子酒炙前后化学模式识别及多成分定量测定[J]. 中草药, 2023, **54**(9): 2733-2740.

[4]　闫凯莉. 菟丝子饼质量评价及对急性肾损伤小鼠保护作用研究[D]. 长春: 长春中医药大学硕士学位论文, 2022.

[5]　黄　玉, 余欢迎, 熊俊伟, 等. UHPLC-Q-TOF-MS技术结合多元统计分析研究菟丝子盐炙前后化学成分变化[J]. 中国新药杂志, 2022, **31**(15): 1542-1552.

[6]　徐维茵, 董坤园, 李世昌, 等. 炒菟丝子工艺优选及质量标准研究[J]. 时珍国医国药, 2021, **32**(5): 1130-1133.

[7]　张秀如, 杨金平, 焦春梅, 等. 基于正交试验设计-组合赋权TOPSIS法的菟丝子酒炙工艺优化[J]. 山东中医药大学学报, 2024, **48**(5): 596-602.

[8] 东宝花, 彭 颖, 蒋云秀, 等. UPLC-Q-TOF-MS联合网络药理学和分子对接分析五子衍宗丸中药物“盐制增效”的炮制机制[J]. 中药药理与临床, 2023, **39**(12): 15-24.

[9] 裴学军, 卢金清, 黎 强, 等. HS-SPME-GC-MS法分析不同产地菟丝子中的挥发性成分[J]. 中国药房, 2016, **27**(21): 3006-3009.

[10] 侯冬岩, 李铁纯, 于 冰. 两种菟丝子挥发性成分的比较研究[J]. 质谱学报, 2003, **24**(2): 343-345.

[11] 刘天琪, 江汉美, 田 宇, 等. 菟丝子及其炮制品中挥发性成分比较及主成分分析[J]. 中国药房, 2022, **33**(6): 729-734.

[12] 国 阳, 张鹤之, 印春艳. 食品中的有害物质检测：现代液相液质和气相气质分析技术的应用与进展[J]. 现代食品, 2023, **29**(20): 70-72.

[13] 李丽丽, 张敏敏, 李 蒙, 等. 不同干燥方法下西洋参的挥发性成分研究[J]. 山东科学, 2020, **33**(3): 62-67.

[14] DUAN H, ZHOU Y, WANG D, *et al*. Differences in volatile organic compounds in *Rhizoma gastrodiae* (Tian Ma) of different origins determined by HS-GC-IMS [J]. *Molecules*, 2023, **28**(13): 4883.

[15] YUAN Z Y, QU H Y, XIE M Z, *et al*. Direct authentication of three Chinese materia medica species of the Lilii Bulbus family in terms of volatile components by headspace-gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. *Anal Methods*, 2019, **11**(4): 530-536.

[16] 宋艺君, 郭 涛, 李诗博, 等. 基于HS-GC-IMS比较柴胡醋炙前后挥发性成分的差异[J]. 药物分析杂志, 2023, **43**(9): 1586-1596.

[17] SUN B, YAN Y, MA M, *et al*. Based on HPLC and HS-GC-IMS techniques, the changes in the internal chemical components of *Schisandra chinensis* (Turcz.) Baill. fruit at different harvesting periods were analyzed [J]. *Molecules*, 2024, **29**(8): 1893.

[18] 谢玉芬, 张昆明, 杨文丽, 等. 采用GC-IMS对4个薄荷品种不同组织部位挥发性物质的研究[J]. 食品与生物技术学报, 2021, **40**(12): 88-98.

[19] 钟凌云. 中药炮制学[M]. 北京: 中国中医药出版社, 2021: 237.

[20] 马迪成, 窦道龙, 刘峰. 植物挥发性有机化合物在农业病害防控中的潜能与应用[J]. 农药学学报, 2022, **24**(4): 682-691.