DOI:10.13193/j.issn.1673-7717.2026.04.032

不同产地香附的傅里叶变换红外光谱快速鉴别研究

薛洋洁[1],杨颜溶[1],桑宏扬[1],李运法[1],乔俊昊[1],龚海燕[1,2],谢彩侠[1,2],杨春静[1,3],雷敬卫[1]
(1.河南中医药大学药学院,河南 郑州 450046;2.河南省中药质量控制与评价工程技术研究中心,河南 郑州 450046;
3.河南中医药大学第三附属医院,河南 郑州 450046)

摘要:目的 通过分析不同产地香附样品的傅里叶变换红外光谱(Fourier transform infrared spectroscopy,FT-IR),寻找不同产地样品间差异的主要贡献波段,以便对不同产地香附药材进行溯源。方法 采用FT-IR技术,结合多种化学计量学方法,对3个产区共30批香附药材样本进行分析,按其主要有效成分筛选特征波段峰,分析出样品的主要差异波段。结果 筛选出991、1018、526、1081、2930、932、1514、708、579、1159、763、1461 cm^{-1}波段为差异主要贡献波段,层次聚类分析(Hierarchical cluster analysis,HCA)、主成分分析(Principal component analysis,PCA)与正交偏最小二乘判别分析(Orthogonal partial least squares discriminant analysis,OPLS-DA)结果均可聚为3类。结论 根据选定的特征波段可以有效区分不同产地香附,实验结果还表明不同产地香附应重点关注糖类、酸类成分的差异。

关键词:香附;产地溯源;傅里叶变换红外光谱;多元统计分析;多糖;质量评价
中图分类号:R282.71 **文献标志码**:A **文章编号**:1673-7717(2026)04-0153-07

Study on FT-IR Rapid Identification of Xiangfu(Cyperi Rhizoma) from Different Origins

XUE Yangjie[1],YANG Yanrong[1],SANG Hongyang[1],LI Yunfa[1],QIAO Junhao[1],
GONG Haiyan[1,2],XIE Caixia[1,2],YANG Chunjing[1,3],LEI JingWei[1]
(1. College of Medicine,Henan University of Chinese Medicine,Zhengzhou 450046,Henan,China;
2. Henan Engineering Technology Research Center of Quality Control and Evaluation of Traditional Chinese Medicine,Zhengzhou 450046,Henan,China;
3. The Third Affiliated Hospital of Henan Medical University,Zhengzhou 450046,Henan,China)

Abstract:*Objective* By analyzing the Fourier Transform Infrared Spectroscopy(FT-IR) spectrum of Xiangfu(Cyperi Rhizoma) from different origins,the main contribution band of the differences among the samples from different regions can be founded,so as to trace the origin of Xiangfu(Cyperi Rhizoma). *Methods* Using FT-IR and combining a variety of chemometric methods,30 batches of samples from 3 producing areas were analyzed. Then the characteristic band peaks were screened according to the main active components,getting the main difference bands of the samples. *Results* Selecting 991,1018,526,1081,2930,932,1514,708,579,1159,763,1461 cm^{-1} as the main difference contribution bands,and the results of Hierarchical Cluster Analysis(HCA),Principal Component Analysis(PCA) and Orthogonal Partial Least Squares Discriminant Analysis(OPLS-DA) could be clustered into three categories. *Conclusion* According to the selected characteristic bands,Xiangfu(Cyperi Rhizoma) from different producing areas can be effectively distinguished. The experimental results also show that the differences of saccharides and acids in Xiangfu(Cyperi Rhizoma) from different producing areas can be focused on.

Keywords:Xiangfu(Cyperi Rhizoma);origin traceability;FT-IR;multivariate statistical analysis;polysaccharide;quality evaluation

香附,莎草科植物莎草 *Cyperus rotundus* L. 的干燥根茎。始载于《名医别录》[1-2],现代药理学研究认为香附在抗肿瘤、抗抑郁、抑菌等方面疗效显著[3-6],是一种临床常用大宗药材。香附在中医上主要用于妇科疾病治疗,诸多典籍中均有记载,评价其为“气病之总司,女科之主帅也”“妇人要药也”“乃血中气药,凡诸血气方中所必用者也”。

香附主产于山东、浙江、湖南、河南等地,其他省份也多有生产,因此有习惯以产地将香附分为山东的东香附和浙江的南香附[7]。现行2020版《中华人民共和国药典》中香附的检测项目较少,难以有效控制不同香附的质量。有学者统计了我国目前中药资源现状,常用的718种动物、植物、矿物和人工合成来源中药中,已有300种以上可以实现人工种养,中药资源产地溯源作为中药质量控制的重要内容,市场对合理快速而有效的产地鉴别方法的需求日益迫切[8]。中药在发展演变的数千年中,同基源的植物药材也因为地理环境和历史变迁,药理药性出现了差异性的分化[9-11],另有研究指出不同生长条件会影响植物各类代谢产物的产生[12]。现有的传统检测方法主要是以性状[13]、显微[14]、薄层等为依据,辅以色谱[15]等方法,对不同产地药材进行溯源[16],对操作者自身经验要求比较高。

基金项目:国家重点研发计划项目(2018YFC1707000);河南省中医药科学研究专项(20-21ZY2095);河南省高等学校重点科研项目(24A360009);河南省本科高校大学生创新创业训练计划项目(202310471041)
作者简介:薛洋洁(1999-),女,山西运城人,硕士在读,研究方向:中药质量分析。
通讯作者:雷敬卫(1972-),男,河南郑州人,教授,硕士研究生导师,博士,研究方向:中药质量分析。E-mail:925390812@qq.com。
杨春静(1972-),女,河南南阳人,主任药师,硕士研究生导师,学士,研究方向:临床药学。E-mail:ycj5961@163.com。

傅里叶变换红外光谱技术因其快速、无损、信息量大、样品需求量少、对技术要求不高等特点，在药物分析和中药分析领域越来越受关注[17-19]。基于以上情况，本研究采用傅里叶红外光谱技术，结合多种化学计量学方法，对 3 个产区共 30 批香附药材样本进行分析，按其主要有效成分筛选特征波段峰，分析样品的主要差异波段，以期更加简便有效地对不同产地香附药材进行溯源，为建立香附产地加工化学质量评价体系提供理论参考。

1 仪器与材料

1.1 仪器

玛瑙研钵；傅里叶变换红外分光光度计为 Spectrum100 型，美国 Pekin Elmer 公司；FW-100 型高速万能粉碎机，北京科伟永兴仪器有限公司；粉末压片机为 FW-4A 型，天津市拓扑仪器有限公司；101-3AB 型点热恒温鼓风干燥箱，北京中兴伟业仪器有限公司；ME204E/OL 型万分之一天平，上海梅特勒-托利多仪器有限公司。

1.2 试剂

溴化钾（KBr，光谱纯），天津市科密欧化学试剂有限公司。

1.3 药材

香附药材于 2022 年采集于广东省湛江市（GDY1～10）、浙江金华市（ZJY1～10）、河南省焦作市（HNY1～10），经河南中医药大学陈随清教授鉴定为莎草科莎草属植物莎草 *Cyperus rotundus* L. 的干燥根茎，按《中华人民共和国药典》规定燎去毛须后直接晒干，切成厚片，即香附饮片，备用[16]。

2 方法与结果

2.1 光谱采集

样品粉碎，过 200 目筛；取样品 2 mg 与 120 mg KBr 置于玛瑙研钵，研磨均匀，取适量混合均匀的样品置于专用压片模具中，用 8 MPa 的压力压制 30 s，压成均匀半透明薄片，取出，置红外光谱仪中采集各样品红外光谱图。光谱范围 4000～450 cm^{-1}，每张光谱扫描次数 16 次·s^{-1}，光谱分辨率为 4 cm^{-1}，扫描速度 0.2 cm·s^{-1}，扫描时实时扣除 CO_2 和 H_2O，室温 20～25 ℃，相对湿度 25%～35%[20]。

2.2 数据分析

OMNIC 9.2 软件进行红外光谱数据平滑，并计算相关系数；Spectrum for window 3.02 软件进行基线校正、归一化处理并计算红外光谱相对峰高[21]；SPSS 22.0、SIMCA 14.1 软件对各样品进行聚类分析、主成分分析、正交偏最小二乘法-判别分析。

2.3 方法学考察

2.3.1 精密度试验 取 HNY1 样品，按 2.1 项下方法制备样品片，连续测定 6 次，将得到的红外光谱图导入 OMNIC 9.2 软件，计算得相关系数为 0.996 6、0.998 7、0.997 5、0.999 1、0.998 3、0.998 7，RSD 为 0.09%，表明仪器精密性良好。

2.3.2 重复性试验 取 HNY1 样品 6 份，按 2.1 项下方法平行制备样品片，分别扫描红外光谱图，将得到的红外光谱图导入 OMNIC 9.2 软件，计算得相关系数为 0.998 3、0.997 8、0.998 2、0.996 1、0.997 4、0.998 1，RSD 为 0.08%，表明方法重复性良好。

2.3.3 稳定性试验 取 HNY1 样品，按 2.1 项下方法制备样品片，每隔 30 min 扫描红外光谱图，将得到的红外光谱图导入 OMNIC 9.2 软件，计算得相关系数为 0.995 7、0.997 9、0.995 6、0.996 5、0.998 6、0.996 7，RSD 为 0.12%，表明样品稳定性良好。

2.4 红外光谱图采集结果

按照 2.2 项下方法采集各样品的红外光谱，从得到的 30 张红外光谱图可看出，红外光谱图峰形、峰位、峰强基本相似，所含的特征峰、形状基本一致，其中有个别特征峰的强度突出[22]，存在差异，结果见插页ⅩⅩⅦ图 1。

将广东、浙江、河南产地香附的红外光谱图分别进行处理后，得到其平均红外光谱图，结果见插页ⅩⅩⅦ图 2。3428 cm^{-1} 波段处峰强而宽，为多糖或糖苷甾醇的羟基 O-H 的伸缩振动峰；2930 cm^{-1} 波段处为亚甲基 C-H_2 不对称伸缩振动吸收峰；1640 cm^{-1} 波段处为水的 O-H 弯曲振动、酰胺类 N-H 弯曲振动、共轭羰基 C=O 的伸缩振动峰；1246 cm^{-1} 波段处为多糖类、糖类、脂类中 C=C 骨架 C=O-C 的伸缩振动峰；1159 cm^{-1} 波段处为 COOH 弯曲振动吸收峰；1081、1018、991、932 cm^{-1} 波段处为糖类、苷类等物质 C-O 键的伸缩振动吸收峰[23-24]。

由插页ⅩⅩⅦ图 3 可知，浙江产地香附在 1623 cm^{-1} 波段处有出现新峰，广东、河南产地未见；浙江、河南产地在 1427 cm^{-1} 波段处出现新峰，广东产地未见；河南产地在 1018、991 cm^{-1} 波段处为“平行峰”，浙江、广东产地在 1018、991 cm^{-1} 波段处为“阶梯峰”。

3 分析与讨论

3.1 共有峰相对峰高

采用 Spectrum for Window 3.02 软件，选择 3500～3000 cm^{-1} 波段范围内的最强吸收峰进行归一化处理，筛选计算出广东、浙江、河南产地的 20 个共有峰相对峰高，结果见表 1。对比文献可知：1700～1900 cm^{-1} 主要为酯类、1500～1700 cm^{-1} 主要为酸类、950～1200 cm^{-1} 主要为糖类[21]，3428、2930 cm^{-1} 波段处为 O-H 与 C-H_2 的吸收峰，并且为强吸收峰，因此，选择 20 个共有峰中 3428、2930、1640、1514、1159、1081、1018、991 cm^{-1} 波段处的 8 个共有峰进行分析。结果见图 4 和表 2。由图 4 可知，2930、1514 cm^{-1} 波段处广东产地香附相对峰高最高，浙江次之，河南最低；1081、1018、991 cm^{-1} 波段处河南产地香附相对峰高最高，浙江次之，广东最低。

3.2 聚类分析

如表 1 所示，以 3 个产地香附饮片的 20 个共有峰的相对峰高为原始数据，将数据导入 SPSS 22.0 软件进行聚类分析，采用组间连接法，以欧氏距离为分类依据，横坐标为组间距离，纵坐标为样品编号，结果见图 5。当组间距离为 20 时，样品聚为 2 类，ZJY1～ZJY10 与 GDY1～GDY10 聚为一类，HNY1～HNY10 聚为一类。

3.3 主成分分析

以 3 个产地的 20 个共有峰的相对峰高为原始数据，进行主成分分析，结果见插页ⅩⅩⅧ图 6。由插页ⅩⅩⅧ图 6 可知，30 批样品可聚为 3 类，ZJY1～ZJY10 聚为一类，GDY1～GDY10 聚为一类，HNY1～HNY10 聚为一类。

3.4 正交偏最小二乘法-判别分析

以 3 个产地的 20 个共有峰的相对峰高为变量，采用 SIMCA 14.1 软件进行正交偏最小二乘法-判别分析，结果见插页ⅩⅩⅧ图 7。结果显示，数据矩阵的解释率参数（$R^2X=0.883$）、模型区分参数（$R^2Y=0.901$）、模型预测能力参数（$Q^2=0.850$）均大于 0.5，表明模型拟合度较好，具有较高的稳定性与预测能力[25]。30 批样品可聚为 3 类，其中 ZJY1～ZJY10 聚为一类，GDY1～GDY10 聚为一类，HNY1～HNY10 聚为一类。

利用 200 次置换试验分别进行置换检验，检验所建立的模

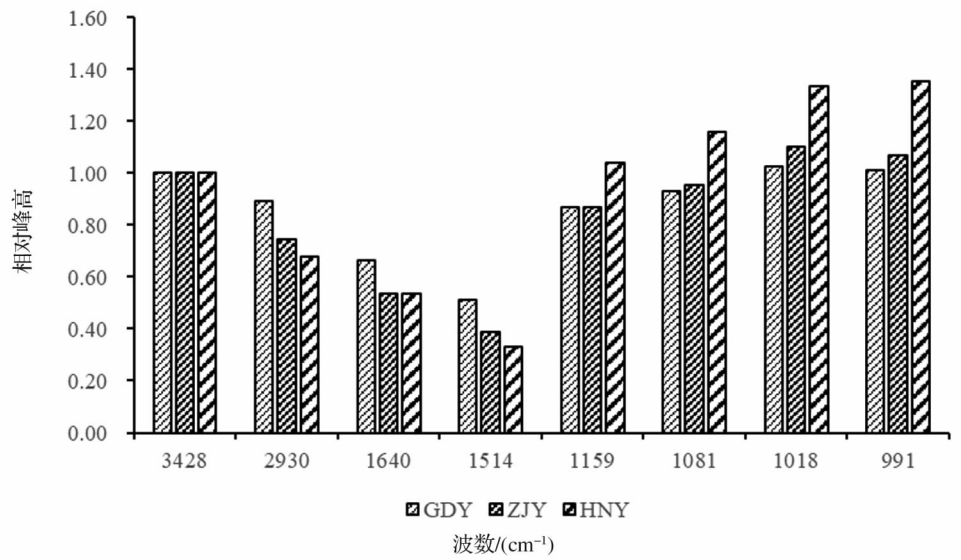


图 4 8 个共有峰的平均相对峰高对比

表 1 不同产地香附的 20 个共有峰的相对峰高

编号	主要特征峰的波数/(cm⁻¹)																			
	3428	2930	1640	1514	1463	1375	1340	1246	1159	1081	1018	991	932	859	763	708	610	579	526	442
GDY1	1.000 1	0.923 4	0.667 2	0.529 4	0.763 3	0.663 7	0.622 2	0.633 3	0.916 9	0.986 9	1.087 3	1.075 8	0.558 7	0.220 2	0.152 9	0.174 7	0.284 1	0.356 5	0.335 4	0.191 0
GDY2	1.000 1	0.852 8	0.654 0	0.489 8	0.711 3	0.628 0	0.577 2	0.565 1	0.811 8	0.872 9	0.956 5	0.941 3	0.485 9	0.193 5	0.140 9	0.163 5	0.255 2	0.316 5	0.292 3	0.160 2
GDY3	1.000 1	0.922 5	0.664 9	0.527 3	0.761 3	0.661 5	0.619 8	0.630 4	0.913 7	0.983 2	1.083 4	1.072 2	0.555 9	0.218 8	0.153 1	0.175 1	0.284 0	0.357 5	0.335 4	0.189 0
GDY4	1.000 1	0.918 1	0.658 0	0.522 5	0.752 7	0.654 9	0.612 9	0.619 8	0.904 7	0.974 5	1.072 4	1.061 2	0.550 7	0.215 9	0.152 3	0.175 4	0.286 0	0.359 6	0.335 5	0.191 0
GDY5	1.000 1	0.918 6	0.657 4	0.522 3	0.751 8	0.654 2	0.612 3	0.619 0	0.903 3	0.973 0	1.070 8	1.059 5	0.549 6	0.215 8	0.152 5	0.176 1	0.285 4	0.358 9	0.336 8	0.194 2
GDY6	1.000 1	0.913 9	0.672 8	0.519 5	0.744 0	0.652 6	0.606 8	0.609 9	0.881 6	0.947 0	1.042 9	1.031 4	0.530 4	0.205 5	0.153 2	0.179 7	0.281 6	0.348 8	0.328 9	0.192 4
GDY7	1.000 1	0.913 5	0.671 5	0.518 4	0.743 6	0.652 1	0.606 1	0.609 2	0.881 5	0.947 1	1.043 2	1.031 8	0.530 0	0.204 7	0.153 2	0.179 9	0.281 4	0.349 4	0.327 6	0.187 1
GDY8	1.000 1	0.859 6	0.661 9	0.495 5	0.718 6	0.634 8	0.584 6	0.578 2	0.823 7	0.885 1	0.971 4	0.957 2	0.495 8	0.198 6	0.142 7	0.165 5	0.260 2	0.322 6	0.297 9	0.162 2
GDY9	1.000 1	0.859 6	0.661 0	0.495 1	0.718 0	0.634 3	0.584 1	0.577 4	0.823 0	0.884 0	0.970 3	0.955 8	0.494 8	0.198 1	0.143 3	0.165 5	0.260 7	0.322 4	0.298 3	0.165 7
GDY10	1.000 1	0.852 4	0.655 3	0.490 5	0.712 1	0.628 8	0.578 0	0.566 1	0.812 8	0.874 0	0.957 6	0.942 9	0.487 3	0.194 5	0.141 0	0.163 2	0.256 2	0.317 1	0.293 5	0.160 9
ZJY1	1.000 0	0.743 0	0.551 7	0.381 6	0.614 8	0.562 1	0.533 0	0.498 8	0.844 9	0.926 0	1.065 7	1.036 9	0.400 5	0.179 8	0.154 1	0.178 7	0.262 4	0.335 2	0.300 1	0.157 3
ZJY2	1.000 0	0.739 1	0.522 1	0.380 4	0.614 0	0.567 5	0.540 3	0.508 0	0.875 3	0.965 4	1.118 6	1.079 5	0.412 7	0.186 9	0.153 1	0.171 6	0.255 3	0.332 3	0.291 6	0.142 3
ZJY3	1.000 0	0.743 8	0.550 8	0.381 0	0.614 7	0.562 1	0.533 0	0.498 6	0.845 3	0.926 4	1.066 6	1.037 6	0.400 0	0.179 4	0.154 0	0.179 2	0.262 3	0.335 1	0.299 2	0.156 0
ZJY4	1.000 0	0.743 5	0.551 0	0.384 9	0.617 7	0.564 7	0.534 0	0.491 3	0.840 2	0.923 2	1.061 3	1.031 0	0.399 4	0.179 1	0.155 4	0.182 1	0.267 9	0.340 3	0.301 5	0.155 4
ZJY5	1.000 0	0.743 9	0.550 6	0.384 7	0.617 6	0.564 6	0.533 9	0.491 1	0.840 2	0.922 9	1.060 9	1.030 9	0.399 1	0.179 0	0.155 3	0.182 5	0.267 9	0.340 2	0.302 4	0.154 8
ZJY6	1.000 1	0.731 8	0.530 4	0.382 4	0.617 3	0.565 1	0.534 3	0.494 1	0.844 2	0.927 1	1.065 8	1.033 9	0.405 7	0.183 4	0.152 2	0.174 3	0.259 5	0.331 5	0.289 1	0.140 9
ZJY7	1.000 1	0.726 7	0.528 0	0.379 0	0.618 7	0.566 7	0.535 9	0.496 1	0.853 7	0.938 4	1.080 9	1.049 1	0.410 6	0.185 7	0.155 8	0.179 5	0.267 8	0.343 0	0.296 9	0.144 9
ZJY8	1.000 0	0.765 7	0.535 8	0.402 7	0.640 3	0.576 5	0.553 4	0.529 2	0.915 9	1.002 2	1.157 5	1.128 9	0.441 8	0.199 0	0.162 3	0.185 7	0.276 6	0.356 6	0.316 4	0.162 6
ZJY9	1.000 0	0.762 5	0.531 3	0.398 2	0.638 7	0.575 3	0.552 0	0.527 8	0.918 8	1.006 2	1.163 4	1.134 9	0.442 2	0.198 9	0.164 1	0.188 5	0.281 2	0.361 8	0.320 0	0.161 6
ZJY10	1.000 1	0.760 9	0.528 0	0.402 8	0.643 8	0.584 0	0.559 2	0.534 1	0.928 8	1.016 8	1.176 2	1.143 2	0.441 3	0.200 4	0.164 5	0.183 8	0.276 2	0.359 7	0.318 3	0.164 1
HNY1	1.000 2	0.623 8	0.566 8	0.337 8	0.715 5	0.629 7	0.644 0	0.539 5	1.193 7	1.350 0	1.317 5	1.565 0	0.481 7	0.214 2	0.289 7	0.221 7	0.292 0	0.586 2	0.534 3	0.110 3
HNY2	1.000 2	0.694 7	0.583 8	0.330 1	0.398 9	0.397 5	0.533 1	0.556 0	0.954 9	0.966 5	1.530 8	1.340 0	0.538 3	0.341 9	0.355 5	0.397 8	0.284 8	0.544 1	0.424 1	0.176 4
HNY3	1.000 2	0.693 9	0.531 4	0.351 5	0.683 4	0.693 6	0.669 5	0.590 5	1.202 1	1.350 7	1.413 4	1.565 8	0.522 9	0.260 5	0.250 8	0.286 7	0.336 7	0.408 3	0.545 8	0.196 4
HNY4	1.000 1	0.604 7	0.535 4	0.357 8	0.696 5	0.570 7	0.578 6	0.607 7	1.235 0	1.386 9	1.455 3	1.308 6	0.543 8	0.276 4	0.266 2	0.303 9	0.354 9	0.427 8	0.465 6	0.116 9
HNY5	1.000 2	0.799 6	0.603 0	0.358 4	0.500 3	0.615 6	0.609 0	0.507 3	1.053 3	1.183 3	1.401 1	1.352 8	0.426 3	0.192 6	0.359 6	0.379 6	0.238 0	0.322 7	0.571 3	0.173 9
HNY6	1.000 3	0.672 6	0.492 5	0.316 0	0.536 2	0.570 7	0.578 6	0.512 3	0.952 0	1.079 3	1.259 3	1.271 4	0.545 4	0.350 5	0.373 9	0.421 8	0.334 0	0.609 5	0.596 3	0.258 5
HNY7	1.000 2	0.680 4	0.458 8	0.275 3	0.490 1	0.518 1	0.523 5	0.550 0	0.879 1	0.998 1	1.171 3	1.280 7	0.454 3	0.254 2	0.267 5	0.309 4	0.409 5	0.481 0	0.461 8	0.114 4
HNY8	1.000 2	0.673 1	0.537 6	0.341 2	0.588 1	0.620 8	0.598 1	0.526 3	0.961 9	1.085 4	1.254 9	1.263 2	0.549 6	0.351 6	0.365 8	0.412 5	0.324 6	0.606 6	0.587 6	0.248 9
HNY9	1.000 2	0.673 9	0.530 0	0.331 9	0.578 2	0.610 1	0.587 4	0.513 9	0.948 0	1.070 1	1.238 7	1.247 0	0.533 0	0.335 7	0.349 4	0.395 6	0.306 0	0.586 0	0.565 6	0.226 5
HNY10	1.000 4	0.686 2	0.513 1	0.325 1	0.573 0	0.612 7	0.602 4	0.536 4	1.000 7	1.133 8	1.321 2	1.333 1	0.575 6	0.371 5	0.393 1	0.445 7	0.275 1	0.663 0	0.652 5	0.116 2

型的准确性，结果见插页XXⅦ图 8。置换后的 $R^2 = 0.057\ 7 < 0.3$、$Q^2 = -0.374 < 0.05$，表明所建模型可靠，未出现过度拟合现象，可用于标志物的筛选。

以 VIP > 1 为筛选标准，得到主要引起样品间差异的吸收峰，结果见插页XXⅦ图 9。由插页XXⅦ图 9 可知，引起样品间差异的主要吸收峰依次为 991、1018、526、1081、2930、932、1514、708、579、1159、763、1461 cm^{-1}。

3.5 讨论

研究表明，红外光谱图中 1700 ~ 1900 cm^{-1} 波段主要为酯类成分、1500 ~ 1700 cm^{-1} 波段主要为酸类成分、950 ~ 1200

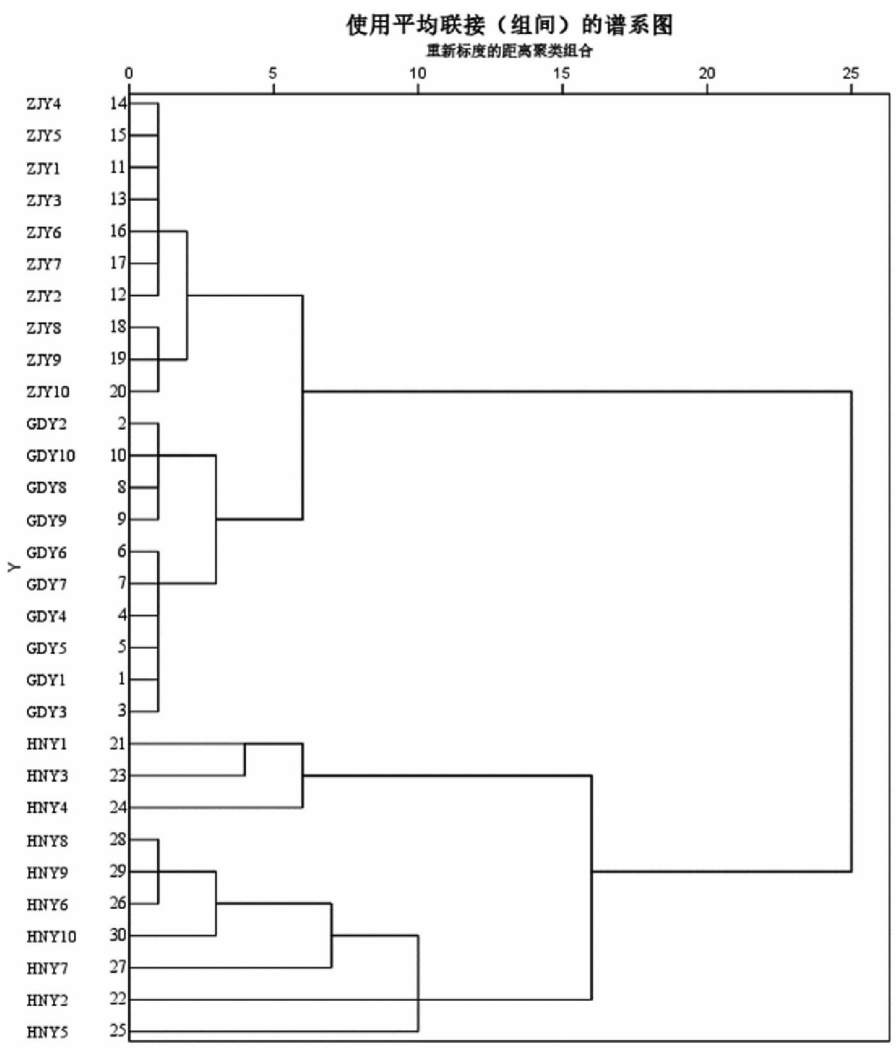


图5 聚类分析结果

表2 筛选出的8个共有峰相对峰高

编号	主要特征峰的波数/(cm^{-1})								编号	主要特征峰的波数/(cm^{-1})							
	3428	2930	1640	1514	1159	1081	1018	991		3428	2930	1640	1514	1159	1081	1018	991
GDY1	1.000 1	0.923 4	0.667 2	0.529 4	0.916 9	0.986 9	1.087 3	1.075 8	ZJY6	1.000 1	0.731 8	0.530 4	0.382 4	0.844 2	0.927 1	1.065 8	1.033 9
GDY2	1.000 1	0.852 8	0.654 0	0.489 8	0.811 8	0.872 9	0.956 5	0.941 3	ZJY7	1.000 1	0.726 7	0.528 0	0.379 0	0.853 7	0.938 4	1.080 9	1.049 1
GDY3	1.000 1	0.922 5	0.664 9	0.527 3	0.913 7	0.983 2	1.083 4	1.072 2	ZJY8	1.000 0	0.765 7	0.535 8	0.402 7	0.915 9	1.002 2	1.157 5	1.128 9
GDY4	1.000 1	0.918 1	0.658 0	0.522 5	0.904 7	0.974 5	1.072 4	1.061 2	ZJY9	1.000 0	0.762 5	0.531 3	0.398 2	0.918 8	1.006 2	1.163 4	1.134 9
GDY5	1.000 1	0.918 6	0.657 4	0.522 3	0.903 3	0.973 0	1.070 8	1.059 5	ZJY10	1.000 1	0.760 9	0.528 0	0.402 8	0.928 8	1.016 8	1.176 2	1.143 2
GDY6	1.000 1	0.913 9	0.672 8	0.519 5	0.881 6	0.947 0	1.042 9	1.031 4	HNY1	1.000 2	0.623 8	0.566 8	0.337 8	1.193 7	1.350 0	1.317 5	1.565 0
GDY7	1.000 1	0.913 5	0.671 5	0.518 4	0.881 5	0.947 1	1.043 2	1.031 8	HNY2	1.000 2	0.694 7	0.583 8	0.330 1	0.954 9	0.966 5	1.530 8	1.340 0
GDY8	1.000 1	0.859 6	0.661 9	0.495 5	0.823 7	0.885 1	0.971 4	0.957 2	HNY3	1.000 2	0.693 9	0.531 4	0.351 5	1.202 1	1.350 7	1.413 4	1.565 8
GDY9	1.000 1	0.859 6	0.661 0	0.495 1	0.823 0	0.884 0	0.970 3	0.955 8	HNY4	1.000 1	0.604 7	0.535 4	0.357 8	0.696 5	0.570 7	0.578 6	0.607 7
GDY10	1.000 1	0.852 4	0.655 3	0.490 5	0.812 8	0.874 0	0.957 6	0.942 9	HNY5	1.000 2	0.799 6	0.603 0	0.358 4	0.500 3	0.615 6	0.609 0	0.507 3
ZJY1	1.000 0	0.743 0	0.551 7	0.381 6	0.844 9	0.926 0	1.065 7	1.036 9	HNY6	1.000 3	0.672 6	0.492 5	0.316 0	0.536 2	0.570 7	0.578 6	0.512 3
ZJY2	1.000 0	0.739 1	0.522 1	0.380 4	0.875 3	0.965 4	1.118 6	1.079 5	HNY7	1.000 2	0.680 4	0.458 8	0.275 3	0.490 1	0.518 1	0.523 5	0.550 0
ZJY3	1.000 0	0.743 8	0.550 8	0.381 0	0.845 3	0.926 4	1.066 6	1.037 6	HNY8	1.000 2	0.673 1	0.537 6	0.341 2	0.588 1	0.620 8	0.598 1	0.526 3
ZJY4	1.000 0	0.743 5	0.551 0	0.384 9	0.840 2	0.923 2	1.061 3	1.031 0	HNY9	1.000 2	0.673 9	0.530 0	0.331 9	0.578 2	0.610 1	0.587 4	0.513 9
ZJY5	1.000 0	0.743 9	0.550 6	0.384 7	0.840 2	0.922 9	1.060 9	1.030 9	HNY10	1.000 4	0.686 2	0.513 1	0.325 1	0.573 0	0.612 7	0.602 4	0.536 4

cm^{-1}波段主要为糖类成分，这些初级代谢产物在相应波段范围内的振动吸收均有差别[23]。本实验研究结果显示，2930、1514 cm^{-1}波段处广东产地香附相对峰高最高；1081、1018、991 cm^{-1}波段处河南产地香附相对峰高最高。因此，可考虑将这5个波段所对应吸收峰的相对峰高用于区分不同产地香附。在3428 cm^{-1}处的广泛吸收峰为多糖或糖苷甾醇的O－H伸缩振动，1081、1018、991 cm^{-1}波段处属于糖类或苷类的C－O伸缩振动[23]，这组峰相互印证。由表1可知河南产地香附相对峰

高最高，浙江次之，广东最低，以此判断不同产地样品中糖类和苷类的含量差异。

聚类分析结果显示当组间距离为 20 时，样品聚为 2 类，ZJY1 ~ ZJY10 与 GDY1 ~ GDY10 聚为一类，HNY1 ~ HNY10 聚为一类。主成分分析结果与正交偏最小二乘法 - 判别分析结果均显示 30 批样品可分为 3 类，其中 ZJY1 ~ ZJY10 聚为一类，GDY1 ~ GDY10 聚为一类，HNY1 ~ HNY10 聚为一类，表明不同产地香附的质量存在差异。对广东、浙江、河南产地香附进行差异性评价，通过 VIP 法（VIP > 1）筛选引起样品间差异的主要波段，筛选出 991、1018、526、1081、2930、932、1514、708、579、1159、763、1461 cm^{-1} 波段为差异主要贡献波段，其中 991、1018、1081、1159 cm^{-1} 波段处属于糖类成分的特征吸收峰，1514 cm^{-1} 波段处属于酸类成分的特征吸收峰，提示区分不同产地香附应重点关注糖类、酸类成分的变化。

本实验采集不同产地香附样品的红外光谱图，寻找了样品间差异的主要贡献波段，提示区分不同产地香附应重点关注糖类、酸类成分的变化。目前对香附的研究主要针对挥发性成分如 α - 香附酮、香附烯酮[26-27]，认为其具有调节激素、炎症和氧化应激，调控 SIRT3/活性氧，抑制 NLRP3 炎症小体，增强神经可塑性的作用[28-29]，故香附药材以醇提物进行药理作用考察。但水溶性成分如多糖和酸类也具有抗抑郁和镇痛的作用，有学者将香附以水不同温度提取 3 次后，得到的水提物都具有一定的抗抑郁活性[30-31]，欧润妹等[32]的研究表明，香附水提物具有良好的镇痛作用，尚双艳等[33]的研究证实了香附多糖的抗肝硬化作用。此外，现代药理研究认为中药多糖具有提高免疫力、抗肿瘤、抗应激的作用，香附多糖作为香附内的主要成分之一，不同产地的多糖含量差异可相差 10 倍以上，其药理作用也有待发掘[34]。

综上所述，本实验不同产地香附的质量存在一定差异，所建立的香附红外光谱图方法简单、准确度高，可用于不同产地香附的鉴别研究，后续实验可以用其他方法测定不同产地香附多糖含量和药理活性，为建立香附产地加工化学质量评价体系提供理论参考。

参考文献

[1] 蔡金阳，岳天祥，张月林，等. 经典名方越鞠丸的历史沿革与处方考证[J]. 中草药，2023，54(19)：6511 - 6519.
[2] 吴鑫雨，邱丽媛，王又迪，等. 基于智能感官与多源信息融合技术的香附炮制程度快速辨识方法研究[J]. 中草药，2023，54(21)：7007 - 7016.
[3] 候雯，徐建. 中药香附在人体不同生理系统中的药理作用研究进展[J]. 四川中医，2022，40(1)：213 - 216.
[4] 赵威，于志勇. 香附烯酮与卡铂联合应用对三阴性乳腺癌细胞株 MDA - MB - 231 增殖、凋亡的影响及其机制[J]. 山东医药，2022，62(21)：5 - 9.
[5] 张康丽，李凌宇，于猛，等. 香附醇提物抗神经炎症活性及化学成分分析[J]. 药物评价研究，2022，45(8)：1549 - 1557.
[6] 叶晓滨，孙越. 含香附治疗肝郁脾虚证的中成药干预抑郁症伴功能性消化不良的研究进展[J]. 中医研究，2021，34(10)：63 - 67.
[7] 赵国平，戴慎，陈仁寿. 中药大辞典(下)[M]. 2 版. 上海：上海科学技术出版社，2006：3281.
[8] 邓彬，国锦琳，华桦，等. 基于全产业链标准整合的中药材质量保障与溯源系统[J]. 世界中医药，2021，16(14)：2073 - 2076.
[9] 顾艳，梅瑜，徐世强，等. 广藿香种质资源及栽培技术研究进展[J]. 热带作物学报，2022，43(8)：1595 - 1603.
[10] 王仕宝，张慧，房宇，等. 经典名方中漏芦的本草考证[J]. 中国实验方剂学杂志，2023，29(19)：72 - 87.
[11] 薛紫鲸，常鑫鑫，张丹，等. 经典名方中防己的本草考证[J]. 中国实验方剂学杂志，2023，29(8)：103 - 115.
[12] 杨钰颖，苗水，李雯婷，等. 植物代谢组学在根及根茎类中药材中的研究进展[J]. 中草药，2023，54(20)：6856 - 6865.
[13] 李文飞，赵威维，孟庆鸿，等. 历史地理视域下赤芍、白芍分化的文献考证[J]. 中华中医药杂志，2023，38(5)：2150 - 2154.
[14] 叶建根. 川贝与浙贝粉末的显微及理化鉴别[J]. 浙江中西医结合杂志，1996，6(4)：256 - 257.
[15] 晏露婷，宋永贵，艾志福，等. 基于 UPLC - Q - TOF - MS/MS 技术结合多元统计分析比较不同品种牛膝药材化学成分的差异[J]. 中草药，2024，55(7)：2160 - 2174.
[16] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典：一部[S]. 北京：中国医药科技出版社，2020.
[17] 申云霞，赵艳丽，张霁，等. 红外光谱在中药质量研究中的应用[J]. 世界科学技术 - 中医药现代化，2015，17(3)：664 - 669.
[18] 周健，金城，罗云，等. 应用红外光谱技术鉴别中药麝香的真伪[J]. 光谱学与光谱分析，2010，30(9)：2368 - 2371.
[19] 郭晓玉，雷敬卫，樊克锋，等. 傅立叶红外技术在中药鉴别中的应用研究[J]. 世界中西医结合杂志，2006，1(1)：26 - 28.
[20] 张维方，樊克锋，雷敬卫，等. 地黄药材的红外指纹图谱及多元统计分析[J]. 光谱学与光谱分析，2021，41(11)：3392 - 3398.
[21] 李莹莹，张维方，雷敬卫，等. 经典名方一贯煎颗粒剂的红外指纹图谱及多元统计分析[J]. 时珍国医国药，2023，34(7)：1634 - 1638.
[22] 贾豪，张维方，雷敬卫，等. 经典名方一贯煎红外指纹图谱研究[J]. 光谱学与光谱分析，2023，43(10)：3202 - 3210.
[23] 纪亮，雷敬卫，张维方，等. 基于表里关联研究不同产地加工方法对香附化学成分的影响[J]. 中华中医药杂志，2023，38(7)：3059 - 3064.
[24] 张明丽，张维方，樊克锋，等. FTIR 结合化学计量学鉴别不同储存条件下的生地黄[J]. 时珍国医国药，2021，32(6)：1391 - 1393.
[25] 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.
[26] 何桂英，邓竹君，郑好，等. 高效液相色谱法测定香附中 α - 香附酮的含量[J]. 实验室检测，2024(5)：18 - 21.
[27] 马晓静，王丹，崔业波，等. 高效液相色谱法测定紫蔻丸中香附烯酮、α - 香附酮的含量[J]. 中国卫生工程学，2024，23(4)：465 - 467.
[28] QIAO N，WANG Q N，TAO Y，et al. α - Cyperone ameliorates depression in mammary gland hyperplasia and chronic unpredictable mild stress rat by regulating hormone，inflammation，and oxidative stress[J]. Immunopharmacol Immunotoxicol，2023，45(1)：73 - 82.
[29] XIA B M，TONG Y，XIA C B，et al. α - cyperone confers antidepressant - like effects in mice *via* neuroplasticity enhancement by SIRT3/ROS mediated NLRP3 inflammasome deactivation[J]. Front Pharmacol，2020，11：577062.
[30] 王君明，马艳霞，张蓓，等. 香附提取物抗抑郁作用研究[J]. 时珍国医国药，2013，24(4)：779 - 781.
[31] HAO G F，TANG M Q，WEI Y J，et al. Determination of antidepressant activity of *Cyperus rotundus* L extract in rats[J]. Trop J Pharm Res，2017，16(4)：867.
[32] 欧润妹，邓远辉，李伟英，等. 香附不同溶剂提取物解热镇痛效应的比较[J]. 山东中医杂志，2004，23(12)：740 - 742.
[33] 尚双艳，高翔. 香附多糖对牛血清白蛋白诱导的肝纤维化大鼠血清 MMP - 2、TIMP - 2 和 TGF - β1 水平的影响[J]. 实用肝脏病杂志，2018，21(1)：42 - 45.
[34] 李英霞，韦朋. 山东不同产地香附中多糖含量比较研究[J]. 内蒙古中医药，2013，32(28)：93，128.

不同产地香附的傅里叶变换红外光谱快速鉴别研究

(正文见 153 – 157 页)

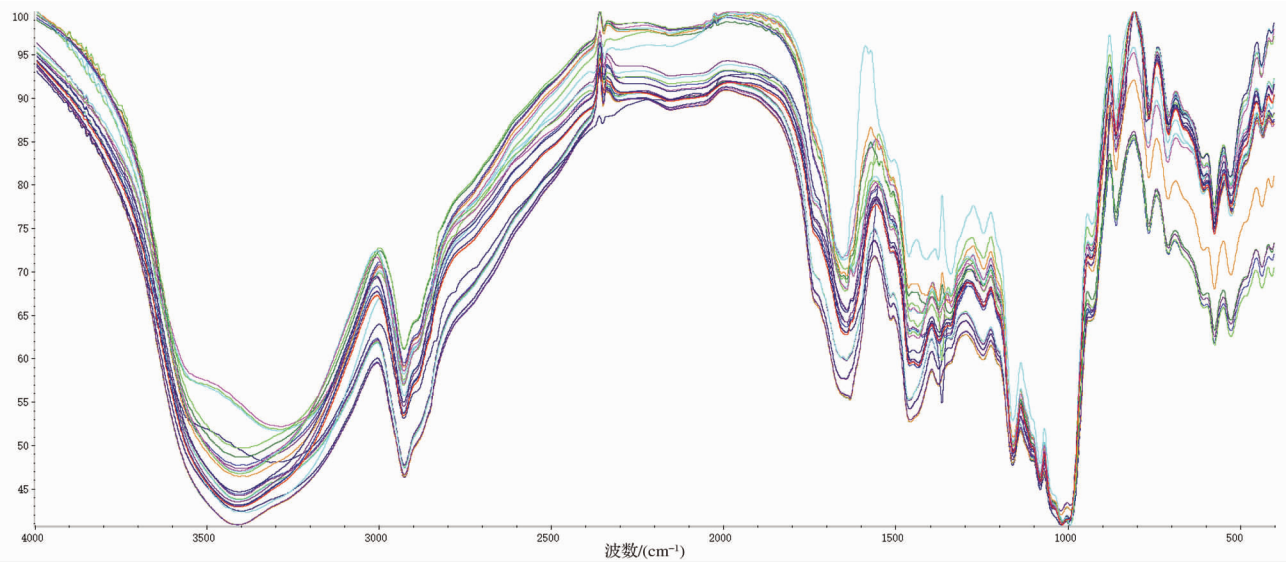


图 1 30 批香附的 FT – IR 图

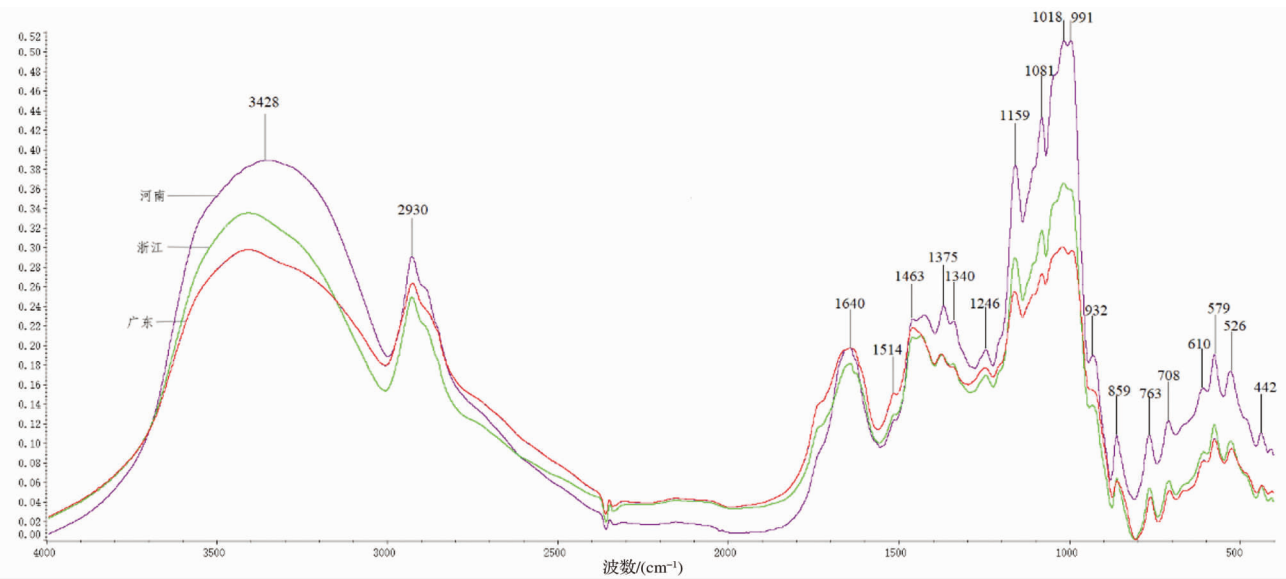


图 2 不同产地香附平均红外光谱图

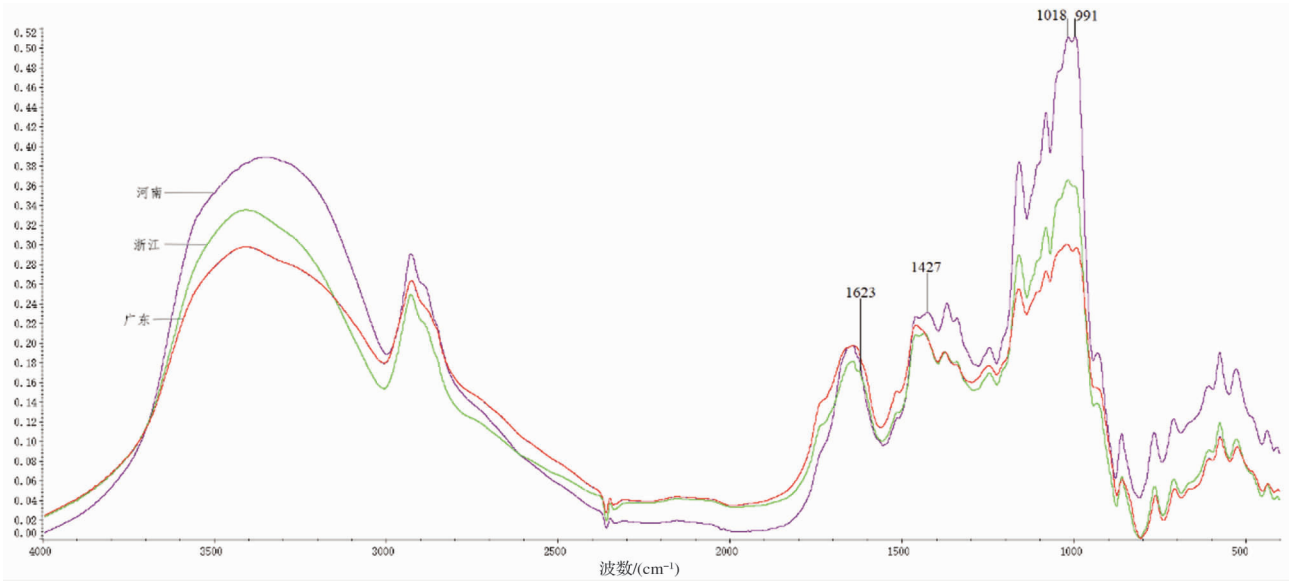


图 3　不同产地香附平均红外光谱图差异对比

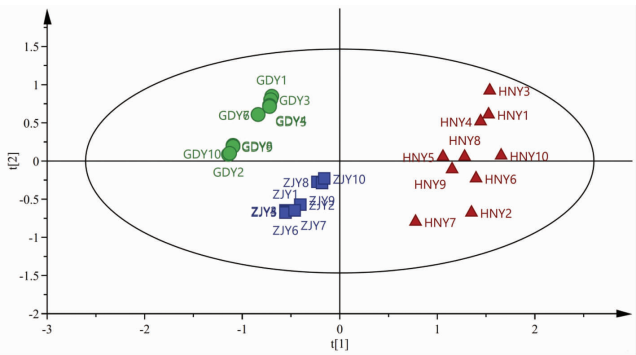


图 6　主成分分析结果

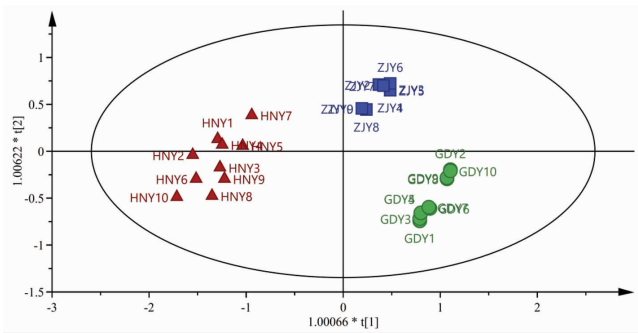


图 7　正交偏最小二乘法 - 判别分析结果

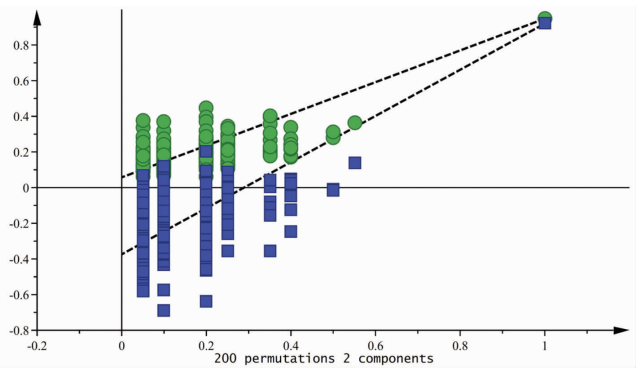


图 8　200 次响应排序检验结果

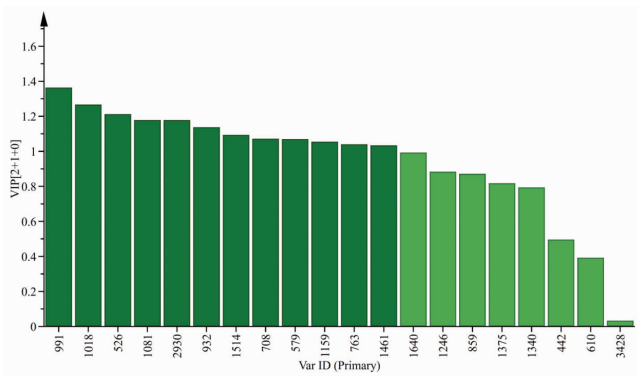


图 9　20 个共有峰的 VIP 值