多指标成分测定结合化学计量学鉴别石菖蒲及其伪品

邓香华[1,2]，贾小舟[2]，罗穆祥[1,2]，谢翡翡[2,3]，彭红星[2,3]，孙冬梅[2]，谭晓梅[1*]，陈向东[2*]

1. 南方医科大学 中医药学院 广东省中药制剂重点实验室，广东 广州 510515
2. 广东一方制药有限公司 广东省中药配方颗粒企业重点实验室，广东 佛山 528244
3. 广州中医药大学，广东 广州 510006

摘 要：目的 采用多指标成分测定结合化学计量学评价石菖蒲的质量，并与伪品水菖蒲、金钱菖蒲进行鉴别。**方法** 采用 GC 法测定石菖蒲中草蒿脑、甲基丁香酚、异丁香酚甲醚、γ-细辛醚、β-细辛醚、α-细辛醚 6 个成分，并结合偏最小二乘判别分析、正交偏最小二乘判别分析、层次聚类分析评价石菖蒲，与其伪品水菖蒲、金钱菖蒲进行鉴别。**结果** 石菖蒲、水菖蒲、金钱菖蒲分别聚为 3 类。草蒿脑、β-细辛醚可以作为石菖蒲区别于常见伪品水菖蒲、金钱菖蒲的差异特征标志物。**结论** 本方法简便、快速、稳定，同时定量 6 个成分，可用于石菖蒲与常见伪品水菖蒲、金钱菖蒲的区分。

关键词：石菖蒲；水菖蒲；金钱菖蒲；草蒿脑；β-细辛醚；气相色谱；偏最小二乘判别分析；正交偏最小二乘判别分析；层次聚类分析

中图分类号：R286.02 **文献标志码：**A **文章编号：**1674 - 5515(2024)11 - 2808 - 07

DOI: 10.7501/j.issn.1674-5515.2024.11.009

Identification of *Acorus tatarinowii* and its counterfeit products by multi-index component analysis combined with chemometrics

DENG Xianghua[1,2], JIA Xiaozhou[2], LUO Muxiang[1,2], XIE Feifei[2,3], PENG Hongxing[2,3], SUN Dongmei[2], TAN Xiaomei[1], CHEN Xiangdong[2]

1. Guangdong Provincial Key Laboratory of Traditional Chinese Medicine Preparations, College of Traditional Chinese Medicine, Southern Medical University, Guangzhou 510515, China
2. Guangdong Provincial Key Laboratory of Traditional Chinese Medicine Formula, Guangdong Yifang Pharmaceutical Co., Ltd., Foshan 528244, China
3. Guangzhou University of Traditional Chinese Medicine, Guangzhou 510006, China

Abstract: Objective To evaluate the quality of *Acorus tatarinowii* by multi-index component analysis combined with chemometrics, and to identify it from the common counterfeit products *A. calamus* and *A. gramineus*. **Methods** A GC method was established to determine the contents of estragole, methyl eugenol, isoeugenol methyl ether, γ-asarone, β-asarone, and α-asarone in *A. tatarinowii*. The method was combined with partial least squares discriminant analysis, orthogonal partial least squares discriminant analysis, and hierarchical cluster analysis to identify *A. tatarinowii* from its counterfeit products *A. calamus* and *A. gramineus*. **Results** *A. tatarinowii*, *A. calamus*, and *A. gramineu* were respectively classified into three categories. Estragole and β-asarone could be used as differential characteristic markers to distinguish *A. tatarinowii* from common counterfeit products *A. calamus* and *A. gramineus*. **Conclusion** This method is simple, rapid, and stable, and can quantify six components simultaneously. It can be used to distinguish *A. tatarinowii* from its counterfeit products *A. calamus* and *A. gramineus*.

Key words: *Acori Tatarinowii* Schott; *Acorus calamus* L.; *Acorus gramineus* Soland; estragole; β-asarone; gas chromatography; PLS-DA; OPLS-DA; HCA

收稿日期：2024-08-07

基金项目：工业信息化部产业技术基础公共服务平台项目（2022-230-221）；佛山市南海区重点领域科技攻关专项（南科[2023]20 号-18）

作者简介：邓香华（1997－），女，广东茂名人，硕士，从事中药饮片、中药配方颗粒研究。E-mail: 2843829280@qq.com

***通信作者：**谭晓梅（1963－），女，湖南澧县人，研究员，博士，主要从事中药新制剂及中药复方配伍规律研究。E-mail: txm@smu.edu.cn

陈向东（1975－），男，广东梅州人，教授，硕士，从事中药饮片、中药配方颗粒研究。E-mail: chenxd66@126.com

石菖蒲为天南星科石菖蒲 *Acorus tatarinowii* Schott 的干燥根茎，味辛、苦，性温，归心、胃经，具有开窍豁痰、醒神益智、化湿开胃的功效，可用于治疗神昏癫痫、健忘失眠、耳鸣耳聋、脘痞不饥、噤口下痢等症[1]。近年来围绕石菖蒲的质量评价进行了研究工作，评价方法多依赖于单一成分 β-细辛醚的测定[2-3]，或同时定量 α-细辛醚[4-5]，《中国药典》2020 年版一部中仅以挥发油得率不得少于 1.0%作为石菖蒲药材的质量控制标准，虽然这些方法可以初步反映石菖蒲的某些特性，但在准确性、全面性和科学性上仍有一定局限[6]。《神农本草经》将菖蒲以“菖蒲”“昌阳”之名作为药材收载其中，但由于时代久远、种类繁多、分布区域广泛、早期记载不全面等原因，导致历史上石菖蒲存在名称混乱、基原偏差、功效描述杂糅混乱等现象[7]。《中国药典》2020 年版一部已对石菖蒲基原做了唯一规定，但在长期的实际应用中，市场上出现水菖蒲 *Acorus calamus* L.、金钱菖蒲 *A. gramineus* Soland 等伪品作为石菖蒲销售使用的情况。石菖蒲作为一种重要的开窍药，具有广泛的药用价值[8-10]，因其形态相似替代品的存在，导致质量参差不齐，因此其质量控制、真伪鉴别成为当前研究热点之一[11-13]。化学计量学在中药真伪鉴别领域的应用非常广泛，可结合多种检测技术对数据进行分析。李振凯等[14]采用红外指纹图谱结合化学计量学的方式对宁夏银柴胡及其伪品进行判别分析，建立了快速的道地银柴胡溯源、真伪判别方法；王园等[15]采用 HPLC 指纹图谱技术结合化学计量学对枸杞多糖进行研究，发现了区分枸杞多糖样品的 3 个标志性单糖；胡爱芬等[16]通过构建紫外-可见光谱传感方法并结合偏最小二乘判别分析（PLS-DA）对甘草的品种和产地进行鉴别，构建了一种用于甘草品种和产地准确鉴别的紫外-可见光谱传感方法；为了更准确、全面地评价石菖蒲的质量，并区分其真伪，本研究建立了 GC 多指标成分定量检测方法，并对检测所得含量数据进行 PLS-DA、正交偏最小二乘判别分析（OPLS-DA）、层次聚类分析（HCA）处理，对石菖蒲药材与其最常见伪品水菖蒲、金钱菖蒲进行鉴别。

1　仪器与材料

GC 7890B 型气相色谱仪（美国安捷伦公司）；TC-15 套式恒温器（海宁市新华医疗器械厂）；JJ3000B 型电子天平（常熟市双杰测试仪器厂）；XPR36 型百万分之一分析天平（瑞士梅特勒－托利多公司）。

草蒿脑（批号 11032，质量分数 98%）、甲基丁香酚（批号 14674，质量分数 95%）、异丁香酚甲醚（批号 15331，质量分数 95%）、α-细辛醚（批号 14647，质量分数 98%）对照品均购自上海诗丹德标准技术服务有限公司；γ-细辛醚（批号 PS013475，质量分数 98%，成都普思生物科技股份有限公司）；β-细辛醚（批号 112018-201802，质量分数 99.3%，中国食品药品检定研究院）；甲醇（分析纯，西陇科学股份有限公司）；无水硫酸钠（分析纯，国药集团化学试剂有限公司）；水为纯化水。

石菖蒲经广东一方制药有限公司夏天睿副高级主任药师鉴定为石菖蒲 *Acorus tatarinowii* Schott，伪品鉴定为金钱菖蒲 *A. gramineus* Soland、水菖蒲 *A. calamus* L.，来源信息见表 1。

表 1　样品来源信息

Table 1　Sample source information

样品名称	批号	产地	样品名称	批号	产地
石菖蒲	A1	安徽省	石菖蒲	A12	安徽省
	A2	安徽省		A13	安徽省
	A3	安徽省		A14	重庆省
	A4	安徽省		A15	安徽省
	A5	安徽省	水菖蒲	B1	山东省
	A6	安徽省		B2	湖南省
	A7	安徽省		B3	湖北省
	A8	安徽省	金钱菖蒲	C1	贵州省
	A9	安徽省		C2	贵州省
	A10	湖北省		C3	贵州省
	A11	四川省		C4	贵州省

2　方法与结果

2.1　气相色谱条件

DB-1 毛细管柱（30 m×0.25 mm×0.25 μm）；进样口温度为 250 ℃；检测器温度为 300 ℃；程序升温（起始温度为 80 ℃，维持 3 min；以 10 ℃/min 升至 150 ℃，维持 13 min；以 10 ℃/min 升至 250 ℃，保持 2 min）；后运行 80 ℃，1 min；载气为氮气；体积流量为 1.0 mL/min；分流比为 15∶1；进样量为 1 μL。

2.2　供试品溶液的制备

按水蒸气蒸馏法（《中国药典》2020 年版一部 2204 挥发油测定法甲法）提取挥发油。分别精密称定石菖蒲、伪品药材粉末（过 3 号筛）约 50 g，置

于 2 000 mL 圆底烧瓶提取器中，加 10 倍量水，并将圆底烧瓶提取器置于电热套中，加热回流 5 h，直至挥发油不再增加，将所得挥发油收集，并定容至 10 mL 量瓶中，得到挥发油母液。从挥发油母液中移取 1 mL，置 10 mL 量瓶中，定容，得挥发油中间液。再从挥发油中间液中移取 1 mL，置 10 mL 量瓶中，定容，经适量无水硫酸钠干燥，滤过，即得。

2.3 对照品溶液的制备

精密称取草蒿脑、甲基丁香酚、异丁香酚甲醚、γ-细辛醚、β-细辛醚、α-细辛醚对照品适量，制成分别含草蒿脑、甲基丁香酚、异丁香酚甲醚、γ-细辛醚、β-细辛醚、α-细辛醚 372.3、82.0、16.7、887.7、1 848.6、477.9 μg/mL 的混合线性对照品溶液。

2.4 线性关系考察

精密吸取混合线性对照品溶液（溶液 I）2.5、1.0、1.0、1.0 mL，分别置于 5、5、10、20 mL 量瓶中，加甲醇稀释至刻度，摇匀，即得线性对照品溶液 II、III、IV、V；精密吸取溶液 II、III 各 1.0 mL，分别置于 10 mL 量瓶中，加甲醇稀释至刻度，摇匀，即得线性对照品溶液 VI、VII；进样测定对照品溶液 I～VII，以质量浓度为横坐标，峰面积为纵坐标，绘制标准曲线，结果见表 2。

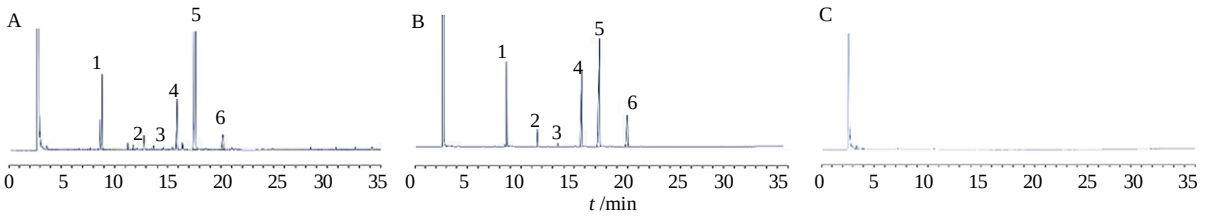
2.5 方法学考察

2.5.1 专属性试验 分别取甲醇空白溶剂、混合对照品溶液和石菖蒲挥发油供试品溶液，进样检测，见图 1。可见各峰之间分离良好，无溶剂干扰。

表 2 线性关系考察

Table 2 Results of linear relationship

成分	回归方程	R^2	线性范围/(μg·mL^{-1})	检测限/(μg·mL^{-1})	定量限/(μg·mL^{-1})
草蒿脑	Y=1.051 4 X−0.075 2	0.999 9	3.722 5～372.250 0	0.085	0.213
甲基丁香酚	Y=1.062 3 X−0.419 0	0.999 9	0.820 1～82.009 0	0.116	0.385
异丁香酚甲醚	Y=0.952 0 X−0.062 5	0.999 9	0.167 2～16.715 0	0.157	0.522
γ-细辛醚	Y=0.878 5 X−2.960 9	0.999 9	8.876 8～887.680 0	0.103	0.412
β-细辛醚	Y=0.869 3 X−5.102 7	0.999 9	18.486 0～1 848.600 0	0.154	0.513
α-细辛醚	Y=0.940 4 X+0.450 2	0.999 9	4.779 0～477.900 0	0.314	0.899



1-草蒿脑，2-甲基丁香酚，3-异丁香酚甲醚，4-γ-细辛醚，5-β-细辛醚，6-α-细辛醚。

1-estragole, 2-methyl eugenol, 3-isoeugenol methyl ether, 4-γ-asarone, 5-β-asar one, 6-α-asarone.

图 1 石菖蒲（A）、混合对照品（B）和空白溶液（C）的 HPLC 色谱图

Fig. 1 HPLC Chromatograms of *Acorus tatarinowii* (A), mixed reference substances (B), and blank solution (C)

2.5.2 定量限与检测限 将各对照品溶液不断稀释，进样测定，直至信噪比约为 10∶1 所对应的质量浓度即为定量限，信噪比约为 3∶1 所对应的质量浓度即为检测限。结果见表 2。

2.5.3 精密度试验 精密称取石菖蒲药材（批号 A12）粉末 1 份，分别制备供试品溶液，重复进样 6 次，计算得到草蒿脑、甲基丁香酚、异丁香酚甲醚、γ-细辛醚、β-细辛醚、α-细辛醚质量分数的 RSD 值分别为 0.62%、0.85%、0.97%、0.74%、0.72%、1.03%。

2.5.4 重复性试验 精密称取批号 A12 石菖蒲药材粉末 6 份，分别制备供试品溶液，进样测定，计算得到草蒿脑、甲基丁香酚、异丁香酚甲醚、γ-细辛醚、β-细辛醚、α-细辛醚的平均质量分数分别为 2.000、0.349、0.110、5.846、17.541、0.551 mg/g，RSD 值分别为 1.15%、1.37%、2.25%、1.26%、1.34%、1.69%。

2.5.5 稳定性试验 精密吸取石菖蒲供试品溶液

（批号 A12），分别于 0、2、4、8、12、16、24 h 进样测定峰面积值，计算得到草蒿脑、甲基丁香酚、异丁香酚甲醚、γ-细辛醚、β-细辛醚、α-细辛醚峰面积的 RSD 分别为 1.51%、1.36%、2.94%、1.39%、1.34%、3.42%，结果表明石菖蒲供试品溶液在 24 h 内比较稳定。

2.5.6　回收率试验　精密称取 6 个对照品适量，制成分别含草蒿脑、甲基丁香酚、异丁香酚甲醚、γ-细辛醚、β-细辛醚、α-细辛醚 465.3、75.3、27.5、1314.9、4 359.7、186.3 μg/mL 的混合对照品溶液 A。分别精密称取同一批石菖蒲药材粉末（批次 A12）约 25 g，共 9 份，制备挥发油供试品溶液。在挥发油供试品溶液定容前，分别精密移入混合对照品溶液各 0.5、1.0、1.5 mL，分别定容至刻度，经无水硫酸钠干燥后滤过，进样测定，计算回收率。结果草蒿脑、甲基丁香酚、异丁香酚甲醚、γ-细辛醚、β-细辛醚、α-细辛醚的平均回收率分别为 96.60%、100.01%、97.97%、97.78%、97.15%、101.74%，RSD 值分别为 3.40%、4.61%、4.68%、2.83%、2.58%、3.84%。

2.6　测定结果

根据前期文献调研和对照品比对，定性了 6 个成分，并且定量检测的 6 个成分在石菖蒲挥发油中含量相对较高，且其对照品易得。根据 GC 测定峰面积结果，采用线性方程计算草蒿脑、甲基丁香酚、异丁香酚甲醚、γ-细辛醚、β-细辛醚、α-细辛醚的质量分数，结果见表 3。

本研究建立了石菖蒲 6 个成分含量检测方法对石菖蒲和伪品进行定量研究，发现在不同批次石菖蒲挥发油中，总体而言成分质量分数从高到低依次为：β-细辛醚＞γ-细辛醚＞草蒿脑＞α-细辛醚＞甲基丁香酚＞异丁香酚甲醚。在不同批次石菖蒲中，β-细辛醚的质量分数最高，且样品间差异较小；γ-细辛醚质量分数样品间差异较大；草蒿脑的质量分数相对稳定；α-细辛醚的质量分数较低，但样品间差异较小；甲基丁香酚质量分数样品间差异较大；异丁香酚甲醚质量分数最少，但相对稳定。

各批次样品之间不同成分质量分数差异相对较大，造成这种现象的原因可能是石菖蒲中的挥发油类成分容易在加工干燥过程中造成不同程度损失，或在其生长过程中所处的生长环境不同，生物代谢过程发生变化所致，具体影响因素有待进一步研究。

2.7　多元统计分析

采用 SIMCA 14.1 软件对表 3 中质量分数进行 PLS-DA、HCA，以及石菖蒲与金钱菖蒲、石菖蒲与水菖蒲两两之间的 OPLS-DA；并在微生信平台对该量化指标进行热图分析。

表 3　石菖蒲中草蒿脑、甲基丁香酚、异丁香酚甲醚、γ-细辛醚、β-细辛醚、α-细辛醚的测定结果（*n*＝2）

Table 3　Determination of estragole, methyl eugenol, isoeugenol methyl ether, γ-asarone, β-asarone, and α-asarone in *Acori Tatarinowii Rhizoma* (*n*＝2)

批号	质量分数/(mg g^{-1})					
	草蒿脑	甲基丁香酚	异丁香酚甲醚	γ-细辛醚	β-细辛醚	α-细辛醚
A1	2.111	0.913	0.120	0.634	12.814	0.785
A2	4.794	0.089	0.093	1.323	25.079	0.907
A3	1.572	0.028	0.059	0.395	19.245	0.444
A4	2.907	0.036	0.058	0.521	20.011	0.403
A5	1.788	0.392	0.097	6.608	12.689	0.419
A6	1.204	0.092	0.104	2.013	24.462	0.780
A7	0.760	0.041	0.064	0.463	20.557	0.609
A8	1.283	0.429	0.096	7.955	15.050	0.345
A9	0.692	0.608	0.110	8.757	14.162	0.471
A10	1.321	0.049	0.053	0.708	25.945	1.048
A11	1.733	0.262	0.053	1.184	16.318	0.335
A12	1.994	0.351	0.113	5.779	16.773	0.547
A13	3.713	0.266	0.107	3.451	23.782	0.511
A14	2.661	0.027	0.024	0.503	28.744	0.451
A15	4.526	0.883	0.107	9.318	11.548	0.483
B1	6.698	0.016	0.038	0.160	3.708	0.776
B2	6.358	0.020	0.030	0.174	2.458	0.978
B3	10.897	0.021	0.074	0.367	10.739	1.040
C1	16.688	0.012	0.009	0.076	0.230	0.106
C2	9.526	0.012	0.009	0.077	0.293	0.057
C3	13.045	0.013	0.011	0.074	0.240	0.052
C4	19.794	0.016	0.011	0.187	0.408	0.047

PLS-DA 分析提取出 2 个主成分，主成分 1、2 的方差贡献率为 52.7%、19.2%，累积方差贡献率为 71.8%。累积解释能力模型参数 R^2_Y＝0.847 1，Q^2＝0.754 3，均大于 0.6，表明建立的模型稳定可靠。石菖蒲与伪品 PLS-DA 得分图见图 2，石菖蒲与伪品明显分为 3 类。依据“6 个共有峰峰面积相对于称样量”进行聚类分析，结果同样显示石菖蒲、水菖蒲、金钱菖蒲分别聚为 3 类，见图 3。

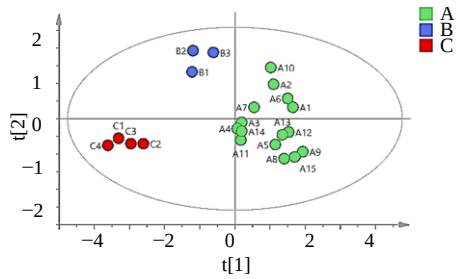


图 2 石菖蒲（A）、水菖蒲（B）、金钱菖蒲（C）的 PLS-DA 的得分图

Fig. 2 Score chart of PLS-DA model for *A. tatarinowii* (A), *A. calamus* (B), and *A. gramineus* (C)

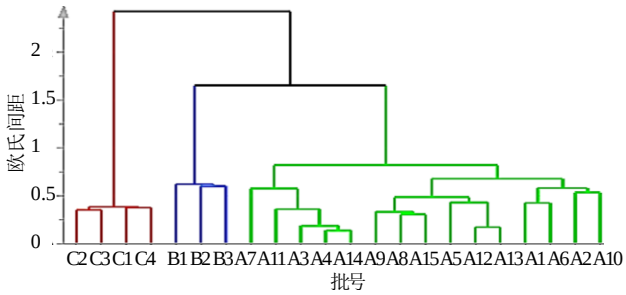


图 3 石菖蒲、水菖蒲、金钱菖蒲的 HCA 分析

Fig. 3 HCA analysis for *A. tatarinowii*, *A. calamus*, and *A. gramineus*

石菖蒲与金钱菖蒲、石菖蒲与水菖蒲两两之间的 OPLS-DA，结果见图 4～7，两个模型的 R^2 在 Y 轴的截距小于 0.4，Q^2 在 Y 轴的截距小于 0.05，说明两个模型均没有出现过拟合。根据 VIP 值大于 1 可认为是有显著性的差异，可得到石菖蒲与水菖蒲之间的差异特征标志物为草蒿脑和 β-细辛醚；石菖蒲与金钱菖蒲之间的差异特征标志物为草蒿脑、β-细辛醚、异丁香酚甲醚和 α-细辛醚；其中以草蒿脑和 β-细辛醚的差异较显著，这可以从图 8 热图中直观观察到。

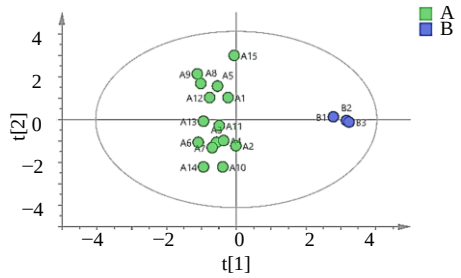
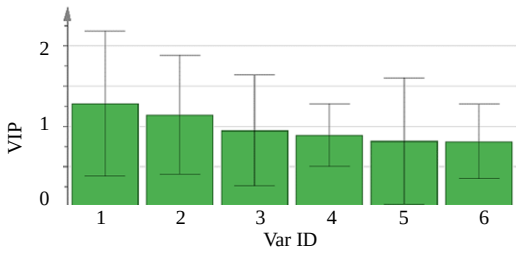


图 4 石菖蒲（A）、水菖蒲（B）OPLS-DA 得分图

Fig. 4 Score chart of OPLS-DA model for *A. tatarinowii* (A) and *A. calamus* (B)



1-草蒿脑，2-β-细辛醚，3-α-细辛醚，4-γ-细辛醚，5-异丁香酚甲醚，6-甲基丁香酚。

1-estragole, 2-β-asar one, 3-α-asarone, 4-γ-asarone, 5-isoeugenol methyl ether, 6-methyl eugenol.

图 5 石菖蒲、水菖蒲 OPLS-DA 的 VIP 值条形图

Fig. 5 VIP scores of OPLS-DA for *A. tatarinowii* and *A. calamus*

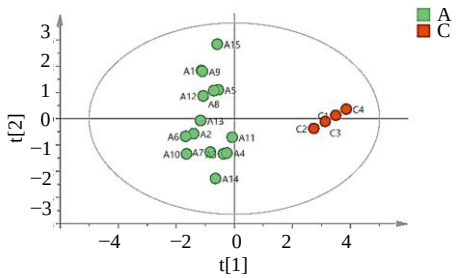
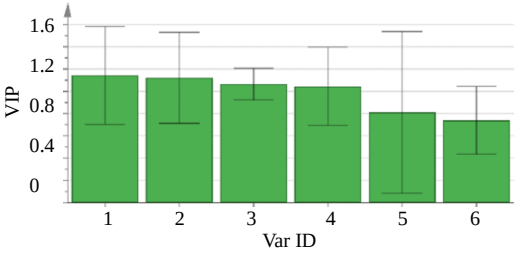


图 6 石菖蒲（A）、金钱菖蒲（C）的 OPLS-DA 得分图

Fig. 6 Score chart of OPLS-DA model for *A. tatarinowii* (A) and *A. gramineus* (C)



1-草蒿脑，2-β-细辛醚，3-异丁香酚甲醚，4-α-细辛醚，5-甲基丁香酚，6-γ-细辛醚。

1-estragole, 2-β-asar one, 3-isoeugenol methyl ether, 4-α-asarone, 5-methyl eugenol, 6-γ-asarone.

图 7 石菖蒲、金钱菖蒲 OPLS-DA 的 VIP 值条形图

Fig. 7 VIP scores of OPLS-DA for *A. tatarinowii* and *A. gramineus*

从 OPLS-DA 分析结果中可以得知：草蒿脑在石菖蒲中的质量分数低于其在水菖蒲和金钱菖蒲中，而 β-细辛醚在石菖蒲中的平均质量分数高于其在水菖蒲和金钱菖蒲中，因此认为草蒿脑、β-细辛醚可以作为石菖蒲区别于常见伪品水菖蒲、金钱菖蒲的差异特征标志物。

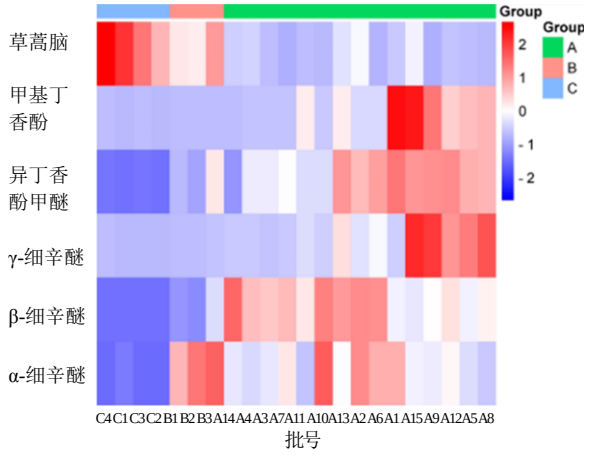


图 8　石菖蒲（A）、水菖蒲（B）、金钱菖蒲（C）的热图

Fig. 8　Heat maps of *A. tatarinowii*（A）, *A. calamus*（B）, and *A. gramineus*（C）

3　讨论

3.1　化学计量学方法比较

PLS-DA 是一种监督式学习方法，主要用于高维数据分类和判别分析。这种方法在生物信息学、化学计量学、代谢组学等领域中应用广泛，用于从复杂的数据集中提取和识别模式。PLS-DA 基于偏最小二乘回归法（PLS），但与 PLS 不同的是，PLS-DA 专注于分类问题。本研究采用 PLS-DA 对石菖蒲、水菖蒲和金钱菖蒲三者的质量分数进行分析，发现 PLS-DA 分析可以对三者进行较明显的分类；HCA 的步骤一般是首先根据一批数据或指标找出能度量这些数据或指标之间相似程度的统计量，然后以统计量作为划分类型的依据，把一些相似程度大的变量首先聚合为 1 类，而把另一些相似程度较小的变量，聚合为另一类，直到所有的变量都聚合完毕，最后根据各类之间的亲疏关系，逐步画成一张完整的分类系统图，又称谱系图。本研究 HCA 分析结果与 PLS-DA 分析结果一致。OPLS-DA 通过其特有的监督学习方式和 VIP 值计算，以及通过 R^2_Y、Q^2 的评估，成为分析两组数据差异的有效工具，特别是在代谢组学研究中，能够帮助研究者快速识别和筛选出对两组数据差异贡献较大的代谢物。石菖蒲与金钱菖蒲、石菖蒲与水菖蒲两两之间的 OPLS-DA 分析可以有效分析得到其差异特征标志物为草蒿脑和 β-细辛醚；热图分析把表达相似的基因归为一类，更有利于对结果进行观察分析。

3.2　实验条件优化

本实验希望建立包括 β-细辛醚和其他成分作为质量标志物的测定方法，但因其他成分的量较低，需要样品浓度较大，这会超出 β-细辛醚的检测范围，但 β-细辛醚作为石菖蒲主要有效成分，其在衡量石菖蒲质量中无疑是至关重要的。为了更准确、全面地评价石菖蒲的质量，并区分其真伪，本研究通过探索多批次、多个质量浓度稀释挥发油的实验探索，确定了石菖蒲 GC 多指标成分定量测定方法的挥发油样品稀释倍数，所建立的含量检测方法兼顾了草蒿脑等 6 个成分浓度的检测范围。

3.3　石菖蒲质量评价

本研究建立了石菖蒲中 6 个成分测定的气相方法，并测定了 15 批石菖蒲中 6 个成分，不同批次之间共有成分含量存在差异，这可能是多种因素导致的，但总体而言，各批次石菖蒲中的 6 个成分仍然在一定范围内，且草蒿脑和 β-细辛醚的量较有独特性和稳定性，因此建议以草蒿脑和 β-细辛醚作为石菖蒲质量评价指标。根据本研究结果，建议石菖蒲中草蒿脑质量分数不得高于 5.0 mg/g，β-细辛醚质量分数不得低于 11.0 mg/g。

根据本研究方法，15 批石菖蒲样品中的 6 个成分检测结果所对应的浓度均在线性范围内，而 3 批水菖蒲、4 批金钱菖蒲样品中 6 个成分检测结果所对应浓度多不在线性范围内，因此认为本方法可用于石菖蒲的质量评价，而不用于水菖蒲、金钱菖蒲质量评价，但可用于鉴别石菖蒲与伪品水菖蒲、金钱菖蒲。

本研究建立石菖蒲的 GC 多指标成分定量测定，方法简便、快速、稳定，同时定量 6 个成分，可用于石菖蒲与常见伪品水菖蒲、金钱菖蒲的区分，对于控制石菖蒲药材的质量具有参考意义。

利益冲突　所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

[1] 中国药典 [S]. 一部. 2020.
[2] 黄文治, 张宇航, 吴庆光. 三种烘干方法对石菖蒲中 β-细辛醚含量的影响 [J]. 中国处方药, 2020, 18(8): 28-29.
[3] 张影. 安徽产石菖蒲中挥发油成分的 GC-MS 研究及质量评价 [D]. 合肥: 安徽中医药大学, 2020.
[4] 赵俊赫, 霍志鹏, 连玉姣, 等. 一测多评法测定石菖蒲中 β-细辛醚、α-细辛醚的含量 [J]. 中国医药科学, 2024, 14(1): 87-90.
[5] 张影, 阮旭东, 程旺兴. 安徽 4 个不同地区石菖蒲中挥发油成分及其质量差异分析 [J]. 生物资源, 2021, 43(3): 225-231.

[6] 刘宏伟, 王虹, 王威, 等. GC-FID 同时测定石菖蒲油中七种成分的含量 [J]. 广东化工, 2021, 48(21): 157-158.

[7] 吴佳莹, 吴威, 杜佳蓉, 等. 石菖蒲本草考证 [J]. 辽宁中医药大学学报, 2022, 24(5): 148-156.

[8] 黑鑫鑫, 刘涛. 石菖蒲活性成分对过氧化氢诱导 PC12 细胞 Caspase-1、IL-18 表达的影响 [J]. 时珍国医国药, 2019, 30(5): 1025-1028.

[9] Liu H, Ren M, Wang H, *et al*. Effect and mechanism of beta asarone from *Acorus tatarinowii* Schott on neuron injury in rats with Parkinson's disease[J]. *Indian J Pharm Sci*, 2022, 84(2): 400-406.

[10] 梅婷婷, 闫珺, 陈晶. 石菖蒲化学成分及其药理作用概述 [J]. 中医药信息, 2022, 39(4): 77-80.

[11] Lam K Y C, Huang Y, Yao P, *et al*. Comparative study of different *Acorus* species in potentiating neuronal differentiation in cultured PC12 cells [J]. *Phytother Res*, 2017, 31(11): 1757-1764.

[12] Zhang X, Yi L, Deng B, *et al*. Discrimination of *Acori Tatarinowii Rhizoma* and *Acori Calami Rhizoma* based on quantitative gas chromatographic fingerprints and chemometric methods [J]. *J Sep Sc*i, 2015, 38(23): 4078-4085.

[13] Lam K Y C, Ku C F, Wang H Y, *et al*. Authentication of *Acori Tatarinowii Rhizoma* (Shi Chang Pu) and its adulterants by morphological distinction, chemical composition and ITS sequencing [J]. *Chin Med*, 2016, 11: 41.

[14] 李振凯, 马玲, 白明生,等. 基于化学计量学宁夏银柴胡红外指纹图谱及伪品判别分析 [J]. 世界科学技术—中医药现代化, 2023, 25(1): 175-183.

[15] 王园, 吴梦琪, 张文清, 等. HPLC 结合化学计量学的枸杞多糖指纹图谱研究 [J]. 中药材, 2019, 42(7): 1572-1577.

[16] 胡爱芬, 黄云, 任理雪, 等. 紫外-可见光谱传感对甘草品种及产地的准确鉴别 [J]. 光谱学与光谱分析, 2024, 44(9): 2647-2656.

[责任编辑 解学星]