

基于红外光谱结合化学计量学的青叶胆及其近缘种亲缘关系研究

黎氏文梅¹, 陶爱恩^{1#}, 赵飞亚¹, 夏从龙¹, 李水仙^{2*}

1. 大理学院药学与化学学院, 云南 大理 671000

2. 大理学院基础医学院, 云南 大理 671000

摘要: 目的 傅里叶变换红外光谱 (fourier transform infrared spectroscopy, FTIR) 结合化学计量学分析青叶胆及其同属近缘种的亲缘关系, 为青叶胆药用植物资源的开发利用提供理论依据。方法 采集青叶胆及近缘种共 39 份样品的红外光谱信息, 对光谱数据进行自动基线校正、自动平滑、纵坐标归一化、二阶求导等预处理, 结合化学计量学分析光谱数据。结果 青叶胆及其近缘种红外光谱主要吸收区域为 900~400、1 310~900、1 500~1 310、1 800~1 500、2 800~3 000、3 000~3 500 cm^{-1} 附近。二阶导数图谱在 400~1 000 cm^{-1} 指纹区吸收峰差异明显, 物种之间吸收峰的峰数、峰强、峰形差异较大。对预处理后的红外光谱数据进行主成分分析 (PCA) 以及偏最小二乘判别分析 (PLS-DA) 发现, 6 种獐牙菜属的 PCA 分析优于 PLS-DA 分析, 系统聚类分析表明青叶胆与圈纹獐牙菜、显脉獐牙菜亲缘关系较近。结论 FTIR 结合化学计量学方法, 能够快速鉴别不同种类獐牙菜属植物, 明确青叶胆及其近缘种之间的亲缘关系, 为獐牙菜属植物亲缘关系研究提供一种快速、有效的方法。关键词: 傅里叶红外光谱; 化学计量学; 青叶胆; 近缘种; 亲缘关系; 主成分分析; 偏最小二乘判别分析; 系统聚类分析
中图分类号: R282.6 文献标志码: A 文章编号: 0253-2670(2019)12-2983-07

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2019.12.035

Study on genetic relationship of *Swertia mileensis* and its related species based on infrared spectroscopy combined with chemometrics

LI Shi Wen-mei¹, TAO Ai-en¹, ZHAO Fei-ya¹, XIA Cong-long¹, LI Shui-xian²

1. College of Pharmacy, Dali University, Dali 671000, China

2. Department of Basic Medical Sciences, Dali University, Dali 671000, China

Abstract: Objective Genetic relationships between *Swertia mileensis* and its relatives have been researched using Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy combined with chemometrics methods in order to provide a theoretical basis for the development and utilization of medicinal plant resources of genus *Swertia*. **Methods** Infrared spectrum information of *Swertia mileensis*, *Swertia cincta*, *Halenia elliptica*, *Swertia nervosa*, *Swertia punicea*, and *Swertia binchuanensis* was collected and used in this study. Original infrared spectra data were pretreated by these methods including automatic baseline correction, automatic smoothing, ordinate normalization, multiplicative scatter correction and second derivative, and analyzed by principal component analysis (PCA), partial least squares discriminant analysis (PLS-DA) and hierarchical cluster analysis (HCA). **Results** Absorption area of relationship between *Swertia mileensis* and its relatives ranged from 900—400 cm^{-1} , 1 310—900 cm^{-1} , 1 500—1 310 cm^{-1} , 1 800—1 500 cm^{-1} , 2 800—3 000 cm^{-1} , and 3 000—3 500 cm^{-1} . Absorption peaks of the second derivative of fingerprint region in 400 to 1 000 cm^{-1} were distinct, and the absorption peaks as well as peak numbers, intensities and patterns among species were quite different. Analysis of preprocessed IR data showed that PCA analysis of six *Swertia* species was superior to PLS-DA analysis. The results of HCA analysis showed that *Swertia mileensis* was closely related to *Swertia cincta* and *Swertia nervosa*. **Conclusion** FTIR spectroscopy combined with chemometrics method could discriminate different species of genus *Swertia* and display the closely genetic relationship of *Swertia mileensis* and its relatives, furthermore, this research would provide a fast and effective method for studying genetic relationship of genus *Swertia*.

Key words: Fourier transform infrared spectroscopy; chemometrics; *Swertia mileensis* Herba; wild relatives; genetic relationship; PCA; PLS-DA; HCA

收稿日期: 2019-01-06

基金项目: 云南省应用基础研究计划项目-青年项目 (2018FD072)

作者简介: 黎氏文梅 (1993—), 女, 在读硕士, 研究方向为中药资源与品质评价。E-mail: 3215556571@qq.com

*通信作者 李水仙 (1987—), 女, 硕士, 讲师, 主要从事生药学及天然药物的化学成分分析工作。E-mail: 463368382@qq.com

#并列第一作者 陶爱恩 (1991—), 男, 在读硕士, 研究方向为中药资源与品质评价。E-mail: 2515073996@qq.com

青叶胆为龙胆科獐牙菜属植物 *Swertia mileensis* T. N. Ho et W. L. Shih 的干燥全草,具有清热利胆、退黄、除湿、平肝风、舒肝健胃的功效^[1]。其为青叶胆片、黄疸肝炎丸、胆胃康胶囊、复方青蒿搽剂等成药的重要原料。随着市场需求不断增加,原料药远不能满足市场需求,因此从獐牙菜属植物中寻找替代品种对扩大药源具有重要意义。獐牙菜属植物均是我国重要的药用资源,在我国民间有悠久的药用历史^[2-3]。研究表明该属植物主要含有环烯醚萜、三萜、生物碱、甾体皂苷等化学成分^[4],具有保肝、清肝利胆、舒肝健胃、降血糖、抗菌及抗病毒等活性^[4-5]。已有学者报道獐牙菜属植物 DNA 鉴别^[6]、UPLC 指纹图谱^[7]、遗传多样性^[8],但尚未见红外光谱结合化学计量学在青叶胆及其近缘种亲缘关系中的研究。鉴于此,本研究采集了青叶胆及其近缘种共 39 份样品的红外光谱信息,对光谱数据进行自动基线校正、自动平滑、纵坐标归一化、二阶求导等预处理后,进一步进行主成分分析(PCA)、偏最小二乘判别分析(PLS-DA)及系统聚类分析(HCA),快速鉴别青叶胆及其近缘种,分析青叶胆及其近缘种之间的亲缘关系,为其种质资源开发利用提供科学依据。

1 仪器与材料

1.1 仪器

Nexus 傅里叶变换红外光谱仪(美国热点尼高丽公司); HW-3 红外烘干箱(天津市光学仪器厂); AL204 电子天平(梅特勒-托利多仪器上海有限公司); FW-4A 型粉末压片机(天津市拓普仪器有限公司); FY135 型中草药粉碎机(天津泰斯特仪器有限公司)。

1.2 材料

獐牙菜属植物样品主要采集于云南大理、红河等地,均经大理大学夏从龙教授鉴定为青叶胆 *Swertia mileensis* T. N. Ho et W. L. Shih、圈纹獐牙菜 *Swertia cincta* Burkill、椭圆叶花锚 *Halenia elliptica* D. Don、显脉獐牙菜 *Swertia nervosa* (Wallich ex G. Don) C. B. Clarke、紫红獐牙菜 *Swertia punicea* Hemsl.、宾川獐牙菜 *Swertia binchuanensis* T. N. Ho & S. W. Liu, 凭证标本存放于大理大学中药标本馆,样品信息见表 1。

2 方法

2.1 原植物形态分析

6 种獐牙菜属原植物见图 1,主要是对鲜品上的茎、叶、叶鞘及花序的特征进行观察比较。

表 1 样品信息

Table 1 Information of sample

编号	名称	产地	编号	名称	产地
S1	青叶胆	云南省红河哈尼彝族自治州弥勒	S21	椭圆叶花锚	云南省大理白族自治州大理市苍山
S2	青叶胆	云南省红河哈尼彝族自治州弥勒	S22	椭圆叶花锚	云南省大理白族自治州宾川县
S3	青叶胆	云南省红河哈尼彝族自治州弥勒	S23	椭圆叶花锚	云南省大理白族自治州大理市苍山
S4	青叶胆	云南省红河哈尼彝族自治州弥勒	S24	椭圆叶花锚	云南省大理白族自治州大理市花甸坝
S5	青叶胆	云南省红河哈尼彝族自治州弥勒	S25	椭圆叶花锚	云南省大理白族自治州宾川县
S6	青叶胆	云南省红河哈尼彝族自治州弥勒	S26	椭圆叶花锚	云南省大理白族自治州宾川县
S7	青叶胆	云南省红河哈尼彝族自治州弥勒	S27	椭圆叶花锚	云南省大理白族自治州宾川县
S8	青叶胆	云南省红河哈尼彝族自治州弥勒	S28	显脉獐牙菜	云南省大理白族自治州大理市苍山
S9	青叶胆	云南省红河哈尼彝族自治州弥勒	S29	显脉獐牙菜	云南省大理白族自治州大理市苍山
S10	青叶胆	云南省红河哈尼彝族自治州弥勒	S30	显脉獐牙菜	云南省大理白族自治州宾川县
S11	青叶胆	云南省红河哈尼彝族自治州弥勒	S31	显脉獐牙菜	云南省大理白族自治州宾川县
S12	青叶胆	云南省红河哈尼彝族自治州弥勒	S32	紫红獐牙菜	云南省大理白族自治州大理市感通寺
S13	青叶胆	云南省红河哈尼彝族自治州弥勒	S33	紫红獐牙菜	云南省大理白族自治州大理市感通寺
S14	圈纹獐牙菜	云南省大理白族自治州云龙县	S34	紫红獐牙菜	云南省大理白族自治州大理市感通寺
S15	圈纹獐牙菜	云南省大理白族自治州云龙县	S35	紫红獐牙菜	云南省大理白族自治州宾川县
S16	圈纹獐牙菜	云南省大理白族自治州云龙县	S36	紫红獐牙菜	云南省大理白族自治州宾川县
S17	圈纹獐牙菜	云南省大理白族自治州宾川县	S37	紫红獐牙菜	云南省大理白族自治州宾川县
S18	圈纹獐牙菜	云南省大理白族自治州宾川县	S38	宾川獐牙菜	云南省大理白族自治州宾川县
S19	圈纹獐牙菜	云南省大理白族自治州宾川县	S39	宾川獐牙菜	云南省大理白族自治州宾川县
S20	椭圆叶花锚	云南省大理白族自治州宾川县			

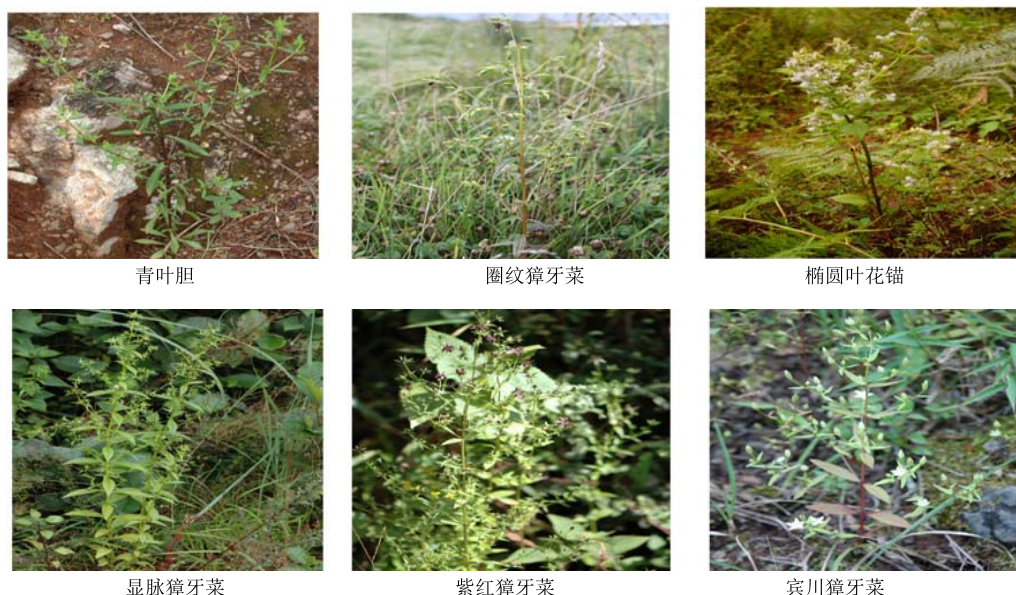


图 1 青叶胆及近缘种原植物图

Fig. 1 Photos of representative living plant of six *Swertia* species and its relatives

2.2 供试品的制备

取 6 种獐牙菜在 60 °C 下干燥至恒定质量，粉碎过 80 目筛，备用。取样品粉末 1 mg 至玛瑙研钵中，加入溴化钾粉末 200 mg 作为分散剂，研磨均匀，取适量细粉平铺于模具中，以 20 MPa 压力压制 1 min，取出，对光检视，以样品均匀，版透光为佳，作为供试品^[9-11]。

2.3 红外光谱分析

将制备好的供试品置于红外光谱仪中测定红外光谱。实验条件为光谱扫描范围 4 000~400 cm^{-1} ，扫描 32 次，分辨率为 4 cm^{-1} ，扫描时实时扣除 H_2O 和 CO_2 的背景。

2.4 精密度试验

以 S1 号青叶胆样品为考察对象，按“2.3”项下方法，连续重复扫描 5 次，所得红外图谱的相关系数在 0.998 2~0.999 5，RSD 为 0.05%，表明精密度良好。

2.5 稳定性试验

以 S1 号青叶胆样品为考察对象，每隔 10 min 扫描 1 次，总共扫描 5 次，所得红外图谱的相关系数在 0.997 3~0.999 9，RSD 为 0.1%，表明稳定性良好。

2.6 重复性试验

以 S1 号青叶胆样品为考察对象，按“2.3”项下方法分别压片 5 次，所得红外图谱的相关系数在 0.985 9~0.997 7，RSD 为 0.5%，表明重复性良好。

2.7 数据处理

通过软件 OMNIC 8.0 进行坐标归一化、基线校

正、自动平滑等处理，保存 CSV 格式数据；利用 Origin 8.5 软件计算二阶导数，绘制曲线；采用 SIMCA 13.0 软件进行 PCA 和 PLS-DA；采用 SPSS 20.0 软件进行 HCA。

3 结果与分析

3.1 不同种獐牙菜原植物“经典”形态特征鉴别

本研究比较了 6 种獐牙菜属植物的形态特征，其原植物见图 1，形态特征见表 2。从图 1、表 2 中可以看出，《中国药典》2015 年版青叶胆的基原种典型特征为茎四棱形，棱上具狭翅，花冠淡蓝色，下部具 2 个腺窝，腺窝杯状，仅顶端具短柔毛状流苏；与青叶胆比较，圈纹獐牙菜的典型特征为茎四棱形，棱上具狭翅，花冠淡蓝色，下部具 2 个腺窝，腺窝杯状，仅顶端具短柔毛状流苏；紫红獐牙菜的典型特征为茎四棱形，棱上具狭翅，花萼长通常为花冠的 1/2~2/3，花冠暗紫红色，基部具 2 个腺窝，腺窝距圆形，沟状，深凹陷，边缘具长柔毛状流苏；宾川獐牙菜的典型特征为茎四棱形，中上部有分支；花萼长通常为花冠的 1/2~2/3，花萼稍短于花冠，花冠黄色，基部具 2 个腺窝，腺窝长圆形，沟状，边缘具长柔毛状流苏；椭圆叶花锚的典型特征为茎圆形，中上部有分支，叶柄近无或抱茎，花萼 4 深裂；花冠四深裂，基部具一平展的距。药典基原种与其近缘种之间存在形态差异。

表 2 青叶胆及 5 种近缘种獐牙菜的形态鉴别

Table 2 Morphological identification of six *Sweria* species and its relatives

种名	形态特征
青叶胆	茎直立，四棱形，棱上具狭翅；叶片狭距圆形、披针形至线形，基出 3 脉；花冠淡蓝色，下部具 2 个腺窝，腺窝杯状，仅顶端具短柔毛状流苏
圈纹獐牙菜	茎直立，圆形，中上部有分支；基生叶花期凋谢，叶片基出 3 脉，下部叶脉被短柔毛；花萼稍长花冠，裂片不等大；花冠黄绿色，基部有一圈紫晕，基部具 1 个腺窝，腺窝马蹄形，裸露，上部有 2 个黑紫色斑点
显脉獐牙菜	茎直立，四棱形，棱上具宽翅；叶片狭椭圆形至披形，叶脉 1~3 条，于上面凹陷，下面突起；花萼绿色，长于花冠；花冠黄绿色，中部以上具黄绿色花纹，下部具 1 个腺窝，腺窝深陷，半圆形，上半部边缘具短流苏
紫红獐牙菜	茎直立，四棱形，棱上具狭翅；基生叶花期枯萎，叶片厚革质，基出 1~3 脉，于背面凸出；花萼长通常为花冠的 1/2~2/3；花冠暗紫红色，基部 2 个腺窝，腺窝距圆形，沟状，深凹陷，边缘具长柔毛状流苏
宾川獐牙菜	茎直立，四棱形，中上部有分支；基生叶花期枯萎，基出 3 脉，脉于背面明显突出，叶面不显；花萼长通常为花冠的 1/2~2/3；花萼稍短于花冠；花冠黄色，基部具 2 个腺窝，腺窝长圆形，沟状，边缘具长柔毛状流苏
椭圆叶花锚	茎直立，圆形，中上部有分支；叶柄近无或抱茎，叶脉 5，于叶面凹入，背面突出；花萼 4 深裂；花冠 4 深裂，基部具一平展的距

3.2 不同野生獐牙菜红外光谱对比

图 2 为獐牙菜属 6 种植物的平均红外光谱图，6 种不同獐牙菜的红外光谱相似度较高，但在 $1\ 800\sim 400\text{ cm}^{-1}$ 指纹区吸收峰重叠不明显。主要吸收区域为 $900\sim 400$ 、 $1\ 310\sim 900$ 、 $1\ 500\sim 1\ 310$ 、 $1\ 800\sim 1\ 500$ 、 $2\ 800\sim 3\ 000$ 、 $3\ 000\sim 3\ 500\text{ cm}^{-1}$ 附近，吸收峰以 $1\ 800\sim 400\text{ cm}^{-1}$ 波段内较为密集。其中 $900\sim 400\text{ cm}^{-1}$ 波段主要为烯的碳氢弯曲振动，苯环弯曲振动和面外弯曲振动等； $1\ 310\sim 900\text{ cm}^{-1}$ 波段为单键的伸缩振动区和部分含氢基团的弯曲振动； $1\ 500\sim 1\ 310\text{ cm}^{-1}$ 主要代表了 C-H 的弯曲振动； $1\ 800\sim 1\ 500\text{ cm}^{-1}$ 波段主要表征苯环的碳骨架弯

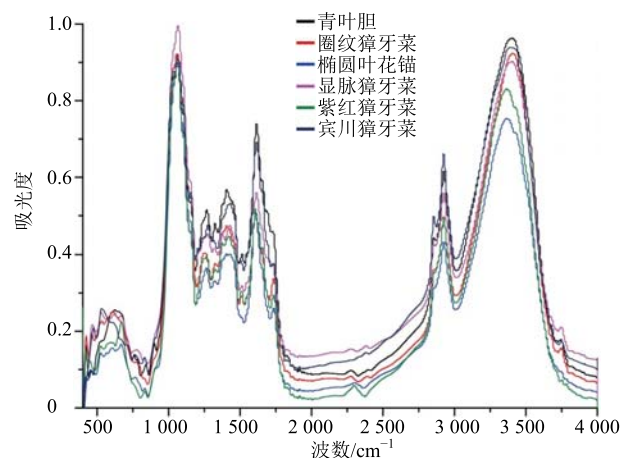


图 2 獐牙菜属 6 种原植物红外光谱图

Fig. 2 Average infrared spectra of six *Sweria* species and its relatives

曲振动以及 $\text{C}\equiv\text{N}$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{C}$ 等伸缩振动； $2\ 800\sim 3\ 000\text{ cm}^{-1}$ 主要为烷烃 C-H 的伸缩振动； $3\ 000\sim 3\ 500\text{ cm}^{-1}$ 出现的宽而大的吸收峰为 O-H 伸缩振动^[12]。平均光谱之间的差异很小，难以凭借肉眼鉴别，应进一步结合二阶导数和化学计量学方法将细小的差异区分，达到鉴别的目的。

3.3 不同獐牙菜二阶导数对比

对红外光谱进行二阶导数处理，可以提高谱图的分辨率，指示叠合的隐蔽峰^[13]。从图 3 中可以看出，6 种獐牙菜的二阶导数图谱整体吸收区域较为相似。对 6 种獐牙菜二阶导数图谱的指纹区 ($400\sim 1\ 800\text{ cm}^{-1}$) 进行局部放大，发现 $400\sim 1\ 000\text{ cm}^{-1}$ 为 6 种獐牙菜的主要鉴别区域，见图 3。从图 3 中可以看出，在 1 号区域，青叶胆、圈纹獐牙菜、显脉獐牙菜仅有 1 个向上的“锯齿”，紫红獐牙菜明显有 4 个向上的“锯齿”，宾川獐牙菜有 3 个向上的“锯齿”，椭圆叶花锚有 2 个向上的“锯齿”。在 4 号区域，青叶胆和显脉獐牙菜有 3 个向上的“锯齿”，而圈纹獐牙菜仅有 1 个向上的“锯齿”，可以与上述 2 种区分。在 5 号区域，青叶胆有 2 个向上的“锯齿”，而显脉獐牙菜有 3 个向上的“锯齿”，两者可相互区别。在 2、3 号区域紫红獐牙菜、宾川獐牙菜、椭圆叶花锚均有明显差异。利用二阶导数数据结合化学计量学分析，可以进一步对青叶胆及其近缘种进行快速鉴别。

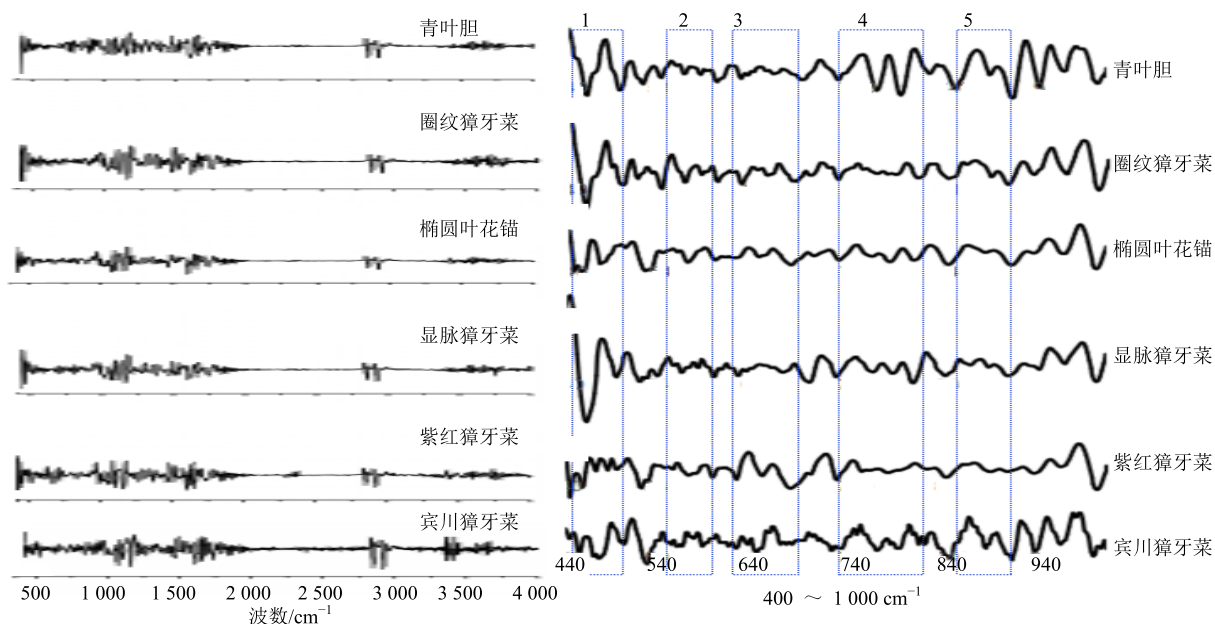


图 3 獐牙菜属 6 种原植物二阶导数平均红外光谱图

Fig. 3 Second derivative infrared spectra of six *Swertia* species

3.4 PCA 和 PLS-DA

化学计量学方法中 PCA 和 PLS-DA 都是常用的判别分类方法^[14]。PCA 是将多维具有相关性的数据压缩为少数几个相互独立数据的统计方法，在不丢失主要光谱信息的前提下选择较少的新变量代替原来较多的变量，排除化学信息共存并相互重叠的信息，简化数据，揭示变量间的关系，从而达到解决中药谱带重叠无法分析的困难^[14-15]。PLS-DA 综合了多元线性回归和主成分回归的优势，能够剔除不相关或非线性变量，通过潜在变量或者提取主成分进行聚类分析，是一种有监督模式识别的分析方法。将全波段谱图进行二阶求导预处理后，PCA 提取前 3 个主成分作为坐标轴，绘制了 6 种獐牙菜的 PCA 分析三维得分图；将 PLS-DA 提取的前 3 个主成分作为坐标轴，绘制了 PLS-DA 三维得分图。在 PCA 得分图中（图 4-A），青叶胆、宾川獐牙菜、紫红獐牙菜、椭圆叶花锚分别单独聚为一类，聚类效果较好；圈纹獐牙菜与显脉獐牙菜的距离很近，出现混杂，表明 2 种獐牙菜亲缘关系较近。在 PLS-DA 三维得分图中（图 4-B），青叶胆、宾川獐牙菜、紫红獐牙菜分别单独聚为一类，椭圆叶花锚、圈纹獐牙菜与显脉獐牙菜聚类出现混杂，聚类效果较差，上述结果表明 6 种獐牙菜的 PCA 聚类效果优于 PLS-DA。

3.5 HCA

HCA 是根据一定的标准，通过相应的方法，把相似元素归结为一类^[16]。基于平方欧式距离，应用

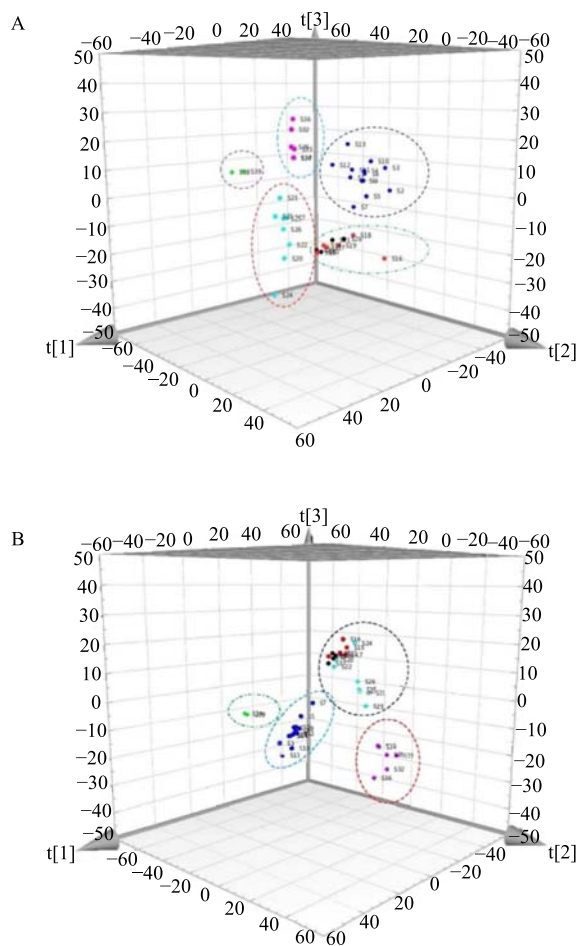


图 4 6 种不同獐牙菜的 PCA (A) 和 PLS-DA (B) 三维得分图

Fig. 4 3D Scattered scores plot for PCA (A) and PLS-DA (B) of six *Swertia* species

系统聚类中的 Ward 聚类法对 6 种獐牙菜植物进行系统分析^[11], 见图 5。从图 5 中可以看出, 在距离系数为 25 处, 6 种獐牙菜可聚为 1 类, 在距离系数为 20 处, 6 种獐牙菜可聚为 2 类, 青叶胆、圈纹獐牙菜、显脉獐牙菜聚为 1 类, 宾川獐牙菜、椭圆叶花锚、紫红獐牙菜聚为 1 类; 在距离系数为 15 处, 6 种獐牙菜被聚为 4 类。青叶胆, 宾川獐牙菜各单独聚为 1 类, 显脉獐牙菜与圈纹獐牙菜聚为 1 类, 椭圆叶花锚与紫红獐牙菜聚为 1 类, 显脉獐牙菜与圈纹獐牙菜 HCA 聚类效果与 PCA 一致。在距离为 5 处, 6 种獐牙菜分别单独聚为 1 类, 聚类效果较好。从图 5 可以看出, 椭圆叶花锚与青叶胆距离较远, 表明 2 种獐牙菜化学成分可能差异较大, 亲缘关系较远。其中青叶胆-圈纹獐牙菜、青叶胆-显脉獐牙菜、圈纹獐牙菜-显脉獐牙菜, 在距离为 20 处聚为一类, 表明 3 种獐牙菜亲缘关系相对较近。

4 讨论

本研究首先采用经典形态学比较青叶胆及其野生近缘种(圈纹獐牙菜、椭圆叶花锚、显脉獐牙菜、紫红獐牙菜、宾川獐牙菜)的形态差异, 结果

显示 6 种獐牙菜属植物形态差异明显。进一步采用傅里叶变换红外光谱探讨青叶胆及其野生近缘种的亲缘关系。红外光谱结果显示, 吸收区 $400\sim 1\ 000\text{ cm}^{-1}$ 为 6 种獐牙菜的主要鉴别区域, 其中青叶胆、圈纹獐牙菜和显脉獐牙菜吸收差异较小。进一步对 6 种獐牙菜属植物的二阶导数全谱数据进行 PCA、PLS-DA 和 HCA。PCA 结果显示青叶胆, 宾川獐牙菜, 紫红獐牙菜, 椭圆叶花锚均能独自聚为一类, 圈纹獐牙菜与显脉獐牙菜的距离很近, 但也有区分, 而 PLS-DA 分析椭圆叶花锚、圈纹獐牙菜与显脉獐牙菜聚类出现混杂, 聚类效果较差, 说明 PCA 优于 PLS-DA。HCA 分析结果显示, 青叶胆与其野生近缘种亲缘关系由近到远为圈纹獐牙菜、显脉獐牙菜、宾川獐牙菜、紫红獐牙菜、椭圆叶花锚。圈纹獐牙菜和显脉獐牙菜系统聚类结果与 PCA 分析结果较为吻合, 2 种亲缘关系较近。通过上述分析, 表明圈纹獐牙菜、显脉獐牙菜与青叶胆亲缘关系较近, 可以在扩大青叶胆原料使用中优先考虑。傅里叶变换红外光谱结合化学计量学方法可以有效地对青叶胆及其野生近缘种进行鉴别和亲缘关系研究, 对寻找青叶胆替代品种, 扩大药源具有指导意义, 为种质资源开发利用提供科学依据。

参考文献

- [1] 中国药典 [S]. 一部. 2015.
- [2] 陈家春, 万定荣, 难波恒雄. 獐牙菜属民族民间药物的整理 [J]. 中国民族民间医药, 1999(2): 98-101.
- [3] 刘黄刚, 张铁军, 王莉丽, 等. 獐牙菜属药用植物亲缘关系及其资源评价 [J]. 中草药, 2011, 42(8): 1646-1650.
- [4] 刘 瞳, 刘 越, 唐 丽. 獐牙菜属植物的药用民族植物学研究 [J]. 天然产物研究与开发, 2015, 27(1): 191-197.
- [5] 彭买姣, 夏新华, 罗 堃, 等. 獐牙菜属植物的研究进展 [J]. 农家参谋, 2017, (22): 64-114.
- [6] 侯典云, 杨萌萌, 周 爽, 等. 基于 ITS2 序列的獐牙菜属六种药材的分子鉴定 [J]. 天然产物研究与开发, 2018, 30(7): 1126-1131.
- [7] 狄 准, 张 霁, 赵艳丽, 等. 3 种獐牙菜属民族药 UPLC 指纹图谱研究 [J]. 中草药, 2017, 48(9): 1860-1865.
- [8] 杨春芳, 曾 阳, 郭凤霞, 等. 分子标记技术在獐牙菜属植物研究中的应用进展 [J]. 中草药, 2017, 48(15): 3238-3244.
- [9] 吴 喆, 张 霁, 张金渝, 等. 红外光谱法快速预测不

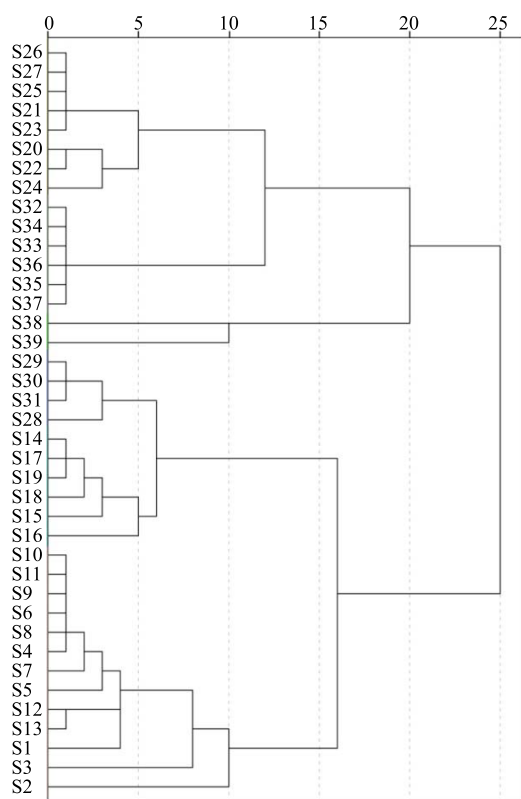


图 5 6 种不同獐牙菜的 HCA 图

Fig. 5 Dendrogram for HCA of six *Swertia* species

- 同种类獐牙菜中獐牙菜皂苷含量 [J]. 中国中药杂志, 2017, 42(17): 3403-3410.
- [10] 吴 喆, 张 霁, 金 航, 等. 红外光谱结合化学计量学对不同采收期滇獐牙菜的定性定量分析 [J]. 光谱学与光谱分析, 2017, 37(6): 1754-1758.
- [11] 吴 喆, 张 霁, 左智天, 等. 红外光谱结合化学计量学快速鉴别云南重楼不同炮制品 [J]. 光谱学与光谱分析, 2018, 38(4): 101-1106.
- [12] 狄 准. 川东獐牙菜及其两种近缘种的指纹图谱分析 [D]. 吉首: 吉首大学, 2016.
- [13] 李 运, 王元忠, 杨维泽, 等. 红外光谱对三七及其野生近缘种亲缘关系研究 [J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36(8): 2420-2424.
- [14] D'Agostino H, Ralph B. *Principal Components Analysis* [M]. New York: Springer, 2010.
- [15] Abdi H W L J. Principal component analysis [J]. *Comp Stat*, 2010, 4(2): 433-459.
- [16] Kniggeendorf A K, Gaul T W, Meinhardtvollweber M. Hierarchical cluster analysis (HCA) of microorganisms: An assessment of *Algorithms* for resonance raman spectra [J]. *Appl Spectr*, 2011, 65(2): 165-173.