

超分子“印迹模板”理论结合因子旋转法的鱼腥草挥发油“物质单元”筛选与关联分析

何文君^{1,2}, 王一楠^{1,2#}, 陈旺^{1,2}, 刘霞^{1,2}, 袁琴^{1,2}, 任馨宁^{1,2}, 潘雪^{1,2*}, 贺福元^{1,2*}

1. 湖南中医药大学药学院, 湖南 长沙 410208

2. 中药成药性与制剂制备湖南省重点实验室, 湖南 长沙 410208

摘要: 目的 基于超分子“印迹模板”理论, 整合匹配频数法、总量统计矩法与因子旋转法, 结合体外抗肿瘤活性, 解析鱼腥草 *Houttuynia cordata* 挥发油的药效物质基础, 为其质量评价及潜在药效相关成分群筛选提供新思路。方法 收集 58 批不同产地鱼腥草挥发油 (S1~S58), 采用 GC-MS 法建立指纹图谱, 以匹配频数法划分“印迹模板”为结构性“物质单元”; 利用总量统计矩参数与信息熵值验证图谱整合前后特征的一致性; 采用因子旋转法提取功能性“物质单元”并构建质量评价模型, 对各批次样品评分; 通过 CCK-8 法测定 58 批样品对人肺腺癌 A549 细胞的半数抑制浓度 (half maximal inhibitory concentration, IC₅₀) 值, 采用皮尔逊相关性分析考察评分与 IC₅₀ 值的关联。结果 58 批样品经匹配频数法降维至 34 个结构性“物质单元” (A1~A34); 整合后平均色谱峰数及信息熵值显著降低 ($P < 0.01$), 而总量零阶矩、一阶矩、二阶矩及信息量无显著差异; 因子旋转法提取 8 个公因子, 综合评分结果显示, S16、S54 等批次综合评分较高, S24、S27 等批次综合评分较低; 各批次 IC₅₀ 值差异显著 (73.6~269.9 nL/mL); 综合评分与 IC₅₀ 值呈负相关 ($r = -0.739$, $P < 0.01$); 初步筛选出贡献度较大的 A34、A31、A7 等作为潜在药效成分群。结论 基于超分子“印迹模板”理论, 利用匹配频数法划分结构性“物质单元”, 总量统计矩法验证其科学性, 结合因子旋转法构建综合评价模型, 通过样品评分与抗肿瘤活性的关联分析, 初步筛选出鱼腥草挥发油中的关键结构性“物质单元”, 提示了潜在的核心药效成分群, 为后续精准筛选与验证提供了参考。

关键词: 鱼腥草; 挥发油; 超分子; 印迹模板; 匹配频数法; 物质单元; 因子旋转法; 总量统计矩; 抗肿瘤活性

中图分类号: R283.6 文献标志码: A 文章编号: 0253-2670(2026)16-6288-15

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2026.16.007

Screening and correlation analysis of “material units” in *Houttuynia cordata* volatile oil based on supramolecular “imprinting template” theory combined with factor rotation

HE Wenjun^{1,2}, WANG Yinan^{1,2}, CHEN Wang^{1,2}, LIU Xia^{1,2}, YUAN Qin^{1,2}, REN Xinning^{1,2}, PAN Xue^{1,2}, HE Fuyuan^{1,2}

1. School of Pharmacy, Hunan University of Chinese Medicine, Changsha 410208, China

2. Hunan Provincial Key Laboratory of Drugability and Preparation Modification of TCM, Changsha 410208, China

Abstract: Objective Based on the supramolecular “imprinting template” theory, this study integrates the matching frequency method, total statistical moment, and factor rotation method, combined with *in vitro* anti-tumor activity, to elucidate the pharmacodynamic material basis of Yuxingcao (*Houttuynia cordata*) volatile oil, providing a new approach for its quality evaluation and screening of potential pharmacodynamic-related component groups. **Methods** Volatile oil samples from 58 batches of *H. cordata*

收稿日期: 2026-03-25

基金项目: 国家自然科学基金项目 (82274215); 湖南中医药大学 2022 年度校级“揭榜挂帅”专项 (2022-XJJB001); 国家自然科学基金青年基金 (82404815); 湖南省自然科学基金项目 (2026JJ80968); 湖南中医药大学研究生科研创新项目 (2025CX091); 湖南中医药大学本科生科研创新基金项目 (2024BKS081)

作者简介: 何文君, 硕士研究生, 从事中药超分子、中药分析研究。E-mail: hewenj@stu.hnucm.edu.cn

#共同第一作者: 王一楠, 硕士研究生, 从事中药药理、中药分析研究。E-mail: 2504428377@qq.com

*通信作者: 贺福元, 博士生导师, 教授, 主要从事中药药理学、中药药剂学、中医超分子与数理特征化研究。

Tel: (0731)85381372 E-mail: pharmsharking@163.com

潘雪, 博士, 高级实验师, 主要从事中药复方物质基础及超分子化学研究。E-mail: 405465029@qq.com

collected from different origins (S1—S58) were analyzed by GC-MS to establish fingerprints. The matching frequency method was employed to categorize “imprinting template” into structural “material units”. Total-statistical-moment parameters and information entropy were applied to verify the consistency of fingerprint characteristics before and after integration. Functional “material units” were extracted via factor rotation to construct a quality evaluation model to score each batch. The half maximal inhibitory concentration (IC_{50}) values of the 58 volatile oil batches against human lung adenocarcinoma A549 cells were determined using the CCK-8 assay, and Pearson correlation analysis was conducted to examine the relationship between the comprehensive scores and IC_{50} values. **Results** The 58 batches were effectively reduced to an “imprinting template” consisting of 34 structural “material units” (A1—A34) by the matching frequency method. After integration, the average number of chromatographic peaks and information entropy decreased significantly ($P < 0.01$), while no significant differences were observed in the total zero-order moment, first-order moment, second-order moment, or information content. Factor rotation extracted eight characteristic common factors. Comprehensive scoring results showed higher scores for batches such as S16 and S54, and lower scores for batches such as S24 and S27. Pharmacodynamic experiments revealed significant differences in IC_{50} values among batches (73.6—269.9 nL/mL). Correlation analysis confirmed a negative correlation between comprehensive scores and IC_{50} values ($r = -0.739$, $P < 0.01$). Accordingly, structural “material units” with high contributions, including A34, A31, and A7, were preliminarily screened as potential pharmacodynamic component groups. **Conclusion** Based on the supramolecular “imprinting template” theory, this study categorized structural “material units” using the matching frequency method and verified the scientific validity of this division with the total statistical moment. Subsequently, functional “material units” were extracted via factor rotation to construct a comprehensive evaluation model, and the sample scores were correlated with anti-lung cancer activity. This approach preliminarily screened key structural “material units” in *H. cordata* volatile oil, indicating potential core pharmacodynamic component groups, and providing a basis for subsequent precise screening and validation.

Key words: *Houttuynia cordata* Thunb.; volatile oil; supramolecular; imprinting template; matching frequency method; material units; factor rotation method; total statistical moment; anti-tumor activity

鱼腥草 *Houttuynia cordata* Thunb. 为三白草科蕺菜属植物的新鲜全草或干燥地上部分，传统上用于治疗肺痈吐脓、肺热咳嗽等症^[1-2]。其挥发油作为主要的药效物质基础，具有显著的抗炎、抗菌、抗肿瘤及抗病毒活性，在临床治疗中应用广泛^[3]。然而，中药挥发油是一类组成复杂、含量波动极大的非稳态体系，受种质资源、采收季节及加工方式的影响，其化学成分常表现出显著的差异性^[4]。传统的质量评价模式多局限于单一或少数指标成分（如甲基正壬酮）的含量测定，难以全面反映药材多成分协同发挥药效的整体特征。

精准定位关键药效成分群是阐明中药物质基础的关键。近年来，中药指纹图谱技术因能较好地表征中药“整体性”特征而被广泛采纳^[5]。然而，现有方法仍面临背景干扰大、降维过程中化学信息丢失以及缺乏药效验证等瓶颈。鉴于此，本课题组前期在相关研究中引入了超分子“印迹模板”（supramolecular imprint template）理论^[6-7]。该理论认为，中药成分并非简单的化合物堆叠，而是一个天然的超分子体系。其成分群受植物体内特定生物合成路径的“生物印迹”修饰，往往呈现出具有“同母核”特征的稳态聚集。在指纹图谱中，这种内在的生物学关联表现为理化性质相近的成分在色谱行

为上的聚集分布。本研究将这类具有稳定聚集特征的化合物集合（成分群）定义为结构性“物质单元”。因此，如何对复杂色谱数据进行科学降维，划分出能充分保留主要化学信息的结构性“物质单元”，并在此基础上构建评价模型，进一步挖掘能够映射药效特征的功能性“物质单元”，为解决上述问题提供了新的研究路径。基于此研究思路，本研究构建了 58 批鱼腥草挥发油的指纹图谱，利用“匹配频数法”对色谱峰进行降维聚类，划分出表征“印迹模板”的结构性“物质单元”；同时，引入总量统计矩与信息熵参数，验证该降维方法在简化数据的同时是否完整保留了核心化学信息。

在此基础上，通过人肺腺癌 A549 细胞模型评估其体外抗肿瘤活性，进一步利用因子旋转法提取出承载核心数据结构的功能性“物质单元”以构建综合质量评价模型，并结合皮尔逊相关性分析考察模型评分与生物活性的关联性。本研究旨在建立一种由结构到功能的质量评价新模式，并探索其与药效活性的关联性，为中药复杂体系的质量控制提供科学参考。

1 仪器与材料

1.1 仪器

GCMS-QP2010 型气质联用仪，日本岛津公司；

PINETREE 型超纯水制备仪, 北京湘顺源科技有限公司; CP-114 型电子天平, 奥豪斯仪器上海有限公司; DZTW 型调温电加热套, 北京市永光明医疗仪器有限公司; 挥发油提取器, 由挥发油测定管、冷凝管及圆底烧瓶组成, 盐城新明特玻璃仪器有限公司; Forma STERI-CYCLE-i250 型 CO₂ 培养箱、3001-1758 型多功能酶标仪, 美国赛默飞世尔科技公司; U-HGLGPS 型倒置显微镜, 日本 Olympus 公司; 75007201-C 型医用离心机, 赛默飞世尔(苏州)仪器有限公司; HVE-50 型自动消毒锅, 日本 Hirayama 公司; DW-HL100 型超低温冻存箱, 中科美菱低温科技股份有限公司; FYC-335 型实验室冷藏箱, 飞世尔实验器材(上海)有限公司; GZX-9145A 型恒温鼓风干燥箱, 上海双旭电子有限公司; LUX-11 型恒温水浴锅, 北京陆希科技有限公司; DJ-CJ-2ND1 型净化工作台, 北京东联哈尔仪器制造有限公司。

1.2 药品与试剂

甲基正壬酮对照品, 批号 110834-201603, 质量分数 99.8%, 中国食品药品检定研究院; 正己烷, 批号 K46764991524, 德国默克公司; RPMI 1640 基础培养基, 批号 AG29643109, Cytiva 公司; 胎牛血清, 批号 20030402, 浙江天杭生物科技股份有限公司; 1%双抗, 批号 69080500, Biosharp 公司; 胰酶(含 EDTA), 批号 1944021, BI 公司; 磷酸盐缓冲液(PBS), 批号 AF29496676, 美国 HyClone 公司; CCK-8 试剂盒, 批号 20210815, CryoMedia 公司; 二甲基亚砜(dimethyl sulfoxide, DMSO), 批号 C12472742, 上海麦克林生化科技有限公司; 吉非替尼, 批号 X05J8H39270, 上海源叶生物科技有限公司; 无水硫酸钠分析纯, 批号 20201116, 国药集团化学试剂有限公司; 实验用水为超纯水。

1.3 药材样品

共收集 58 批次鱼腥草样品(S1~S58), 采集时间集中于 6~9 月, 产地覆盖中国主要产区, 包括广西、江苏、江西、浙江、湖南、四川及贵州 7 个省份, 各样品产地及采收时间见表 1。所有样品均经湖南中医药大学炮制教研室石继连教授鉴定, 均为三白草科蕺菜属植物蕺菜 *H. cordata* Thunb. 的新鲜全草或干燥地上部分, 符合《中国药典》2025 年版规定。

1.4 细胞株

人非小细胞肺癌细胞株(A549), 批号 CL-0016, 购自武汉普诺赛生物科技有限公司。

表 1 58 批鱼腥草样品信息

Table 1 Information of 58 batches of *H. cordata* samples

编号	产地	采收时间	编号	产地	采收时间
S1	广西	2025-08-11	S30	贵州	2025-07-27
S2	广西	2025-08-12	S31	贵州	2025-07-31
S3	广西	2025-08-18	S32	贵州	2025-08-08
S4	贵州	2025-07-25	S33	湖南	2025-06-26
S5	贵州	2025-08-08	S34	湖南	2025-07-11
S6	贵州	2025-08-18	S35	湖南	2025-07-21
S7	湖南	2025-07-15	S36	湖南	2025-07-28
S8	湖南	2025-07-19	S37	湖南	2025-08-02
S9	湖南	2025-07-29	S38	江苏	2025-06-23
S10	江苏	2025-07-18	S39	江苏	2025-06-27
S11	江苏	2025-08-07	S40	江苏	2025-07-13
S12	江苏	2025-08-10	S41	江苏	2025-07-25
S13	江西	2025-07-23	S42	江西	2025-08-02
S14	江西	2025-08-10	S43	江西	2025-06-27
S15	江西	2025-08-13	S44	江西	2025-07-15
S16	四川	2025-07-20	S45	江西	2025-07-23
S17	四川	2025-08-10	S46	江西	2025-07-29
S18	四川	2025-08-18	S47	江西	2025-08-09
S19	浙江	2025-07-21	S48	四川	2025-07-01
S20	浙江	2025-08-07	S49	四川	2025-07-16
S21	浙江	2025-08-12	S50	四川	2025-07-24
S22	广西	2025-06-24	S51	四川	2025-07-30
S23	广西	2025-06-25	S52	四川	2025-08-06
S24	广西	2025-07-17	S53	四川	2025-08-17
S25	广西	2025-07-24	S54	浙江	2025-06-24
S26	广西	2025-07-31	S55	浙江	2025-07-14
S27	广西	2025-08-06	S56	浙江	2025-07-22
S28	贵州	2025-06-25	S57	浙江	2025-07-27
S29	贵州	2025-07-16	S58	浙江	2025-08-05

2 方法与结果

2.1 样品的制备

2.1.1 鱼腥草挥发油的提取 参照《中国药典》2025 年版挥发油测定通则, 采用水蒸气蒸馏法提取挥发油。取剪切后的鱼腥草样品 600 g, 加入蒸馏水 3 000 mL, 加热回流提取 4 h, 收集挥发油, 经无水硫酸钠干燥后备用。

2.1.2 供试品溶液制备 精密吸取挥发油 50 μ L, 加正己烷定容至 1 mL, 混匀, 经 0.22 μ m 微孔滤膜滤过后作为供试品溶液。

2.2 GC-MS 测定条件

2.2.1 色谱条件 采用日本岛津公司 GCMS-QP2010 型气相色谱-质谱联用仪; 色谱柱为 DB-5

(60 m×0.25 mm, 0.25 μm); 进样口温度 250 ℃; 载气为氦气, 分流比 10:1, 进样量 1 μL。升温程序: 初始温度 80 ℃, 保持 2 min; 以 10 ℃/min 升至 125 ℃, 保持 5 min; 以 10 ℃/min 升至 165 ℃, 保持 10 min; 以 2 ℃/min 升至 185 ℃, 随后以 10 ℃/min 升至 240 ℃, 保持 20 min。

2.2.2 质谱条件 采用日本岛津公司 GCMS-QP2010 型气相色谱-质谱联用仪; 接口温度 280 ℃; 离子源温度 250 ℃; 电子轰击离子源 (EI); 电子能量 70 eV; 质量扫描范围为 m/z 35~500; 扫描方式为全扫描。

2.3 方法学考察

2.3.1 精密度试验 取同一鱼腥草挥发油供试品溶液 (S56), 按照“2.2”项 GC-MS 测定条件连续进样测定 6 次, 以甲基正壬酮为参照峰, 计算各共有峰相对保留时间 (relative retention time, RRT) 及相对峰面积 (relative peak area, RPA) 的 RSD 值。结果显示, 各共有峰 RRT 和 RPA 的 RSD 均小于 5%, 表明该仪器精密度良好。

2.3.2 稳定性试验 取同一批鱼腥草挥发油供试品溶液 (S56), 在制备后 0、2、4、8、12、24 h 分别进样分析, 以甲基正壬酮为参照峰, 计算各共有峰 RRT 及 RPA 的 RSD 值。结果显示, 各共有峰 RRT 和 RPA 的 RSD 均小于 5%, 结果表明该供试品溶液在 24 h 内稳定性良好。

2.3.3 重复性试验 取同一批鱼腥草挥发油样品 (S56) 6 份, 按照“2.1.2”项下方法制备供试品溶液, 按照“2.2”项 GC-MS 测定条件进样测定, 以甲基正壬酮为参照峰, 计算各共有峰 RRT 及 RPA 的 RSD 值。结果显示, 各共有峰 RRT 和 RPA 的 RSD 均小于 5%, 结果表明该方法重复性良好。

2.4 指纹图谱的建立

将 58 批鱼腥草挥发油样品, 按照“2.1.2”项下方法制备成供试品溶液, 按照“2.2”项下色谱条件进样分析, 获得 GC-MS 总离子流色谱图。将 58 批样本数据导入《中药色谱指纹图谱相似度评价系统 (2012 版)》, 经多点校正与自动匹配后建立鱼腥草挥发油指纹图谱。如图 1 所示, 整体来看, 各批样品色谱轮廓基本一致, 提示其化学组成具有较高的一致性。其中, 主要色谱峰集中分布于 7~25 min, 该区间出现多个稳定且响应信号较强的共有峰, 检出的成分以单萜类、醇类、醛类及部分酮类等挥发性成分为主, 构成了鱼腥草挥发油指纹图谱的主要特征区域。相比之下, 25 min 以后色谱峰数量逐渐减少, 不同批次样品间部分色谱峰的响应强度及分布特征存在一定差异, 该差异可能与样本产地、生长环境及采收时期等因素有关。

对 58 批样本的 GC-MS 全谱数据进行分析, 通过 NIST 质谱数据库自匹配检索各成分, 共初步鉴定出挥发性成分 612 种。其核心成分群如表 2 所示,

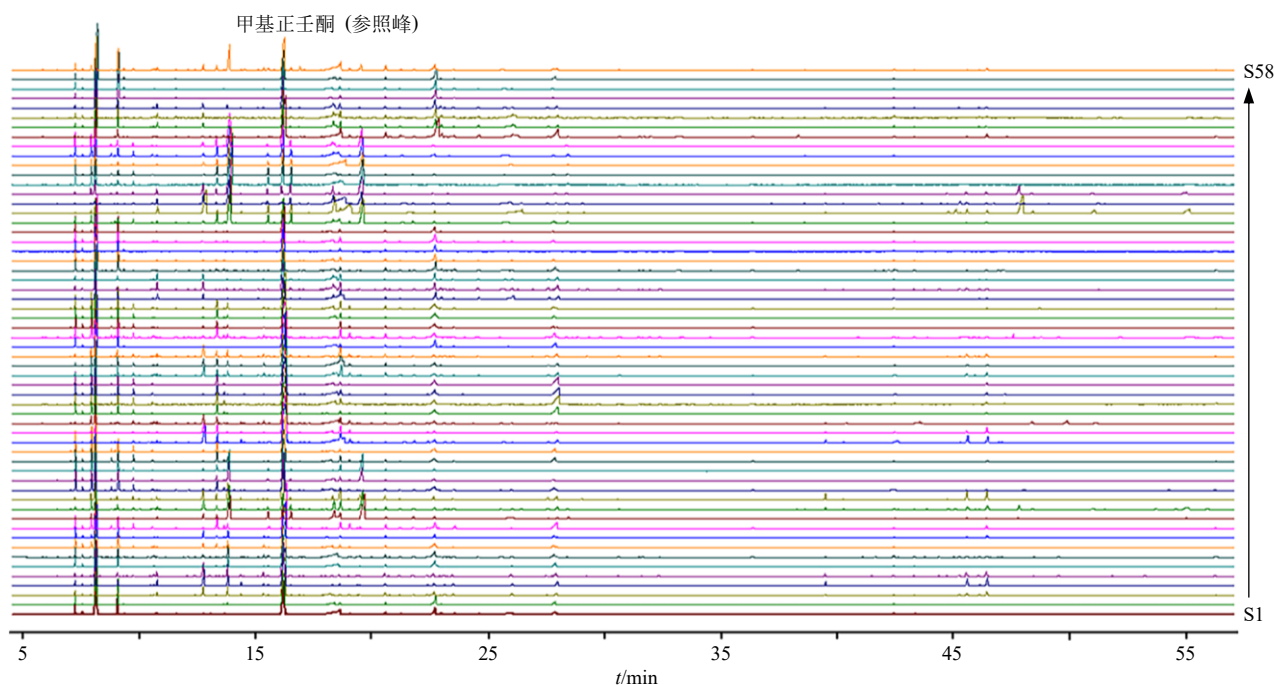


图 1 58 批鱼腥草挥发油指纹图谱

Fig. 1 Fingerprints of volatile oil from 58 batches of *H. cordata*

表 2 鱼腥草挥发油中出现频率前 15 种挥发性成分

Table 2 Frequency of occurrence of top 15 volatile components in volatile oil of *H. cordata*

峰号	名称	化学类别	出现频率/%
1	1-壬醇 (1-nonanol)	醇类	100.00
2	苈烯 (camphene)	萜烯类	100.00
3	癸醛 (decanal)	醛类	100.00
4	甲基正壬酮 (2-undecanone)	酮类	98.30
5	β -石竹烯 (β -caryophyllene)	萜烯类	98.30
6	桉烯 (sabinene)	萜烯类	96.50
7	2-十二酮 (2-dodecanone)	酮类	94.80
8	顺式- β -罗勒烯 (<i>cis</i> - β -ocimene)	萜烯类	93.10
9	4-松油醇 (terpinen-4-ol)	醇类	93.10
10	乙酸松油酯 (α -terpinyl acetate)	酯类及其他	93.10
11	植醇 (phytol)	醇类	87.90
12	γ -松油烯 (γ -terpinene)	萜烯类	86.20
13	乙酸橙花酯 (neryl acetate)	酯类及其他	84.50
14	十二醛 (dodecanal)	醛类	84.50
15	1-癸醇 (1-decanol)	醇类	82.80

出现频数排名前 15 位的成分表现出极高的群体普遍性,其出现频率均超过 80%。其中前 3 位 1-壬醇 (1-nonanol)、癸醛 (decanal) 和苈烯 (camphene) 的出现频率均达到了 100%。从化学结构来看,该核心成分群涵盖了酮类、醇类、醛类、萜烯类及酯类 5 大类。

这种高频出现的特征说明,尽管不同产地或采收期的鱼腥草可能存在差异,但这 15 种成分在物种遗传上具有高度的稳定性,是鉴定鱼腥草真伪和基础质量的重要依据。然而,鱼腥草挥发油成分十分复杂,GC-MS 全谱包含的化学信息过于繁杂,直接将未经处理的全谱数据,用于后续的质量评价和药效关联分析,极易带入大量的冗余信息和背景干扰。基于此,本研究将对复杂的图谱数据进行降维简化,在保留原始核心化学信息的前提下解析其药效物质基础。

2.5 基于匹配频数法的图谱降维与结构性“物质单元”划分

为了实现上述图谱数据的有效简化,本研究引入了匹配频数法。该方法通过分析指纹图谱色谱峰的相对保留时间 (t_R) 和匹配频数分布特征,划分中药成分簇的“印迹模板”^[8-10]。具体步骤包括:统计匹配频数以确定成分簇;计算 t_R 频数统计值以归属“印迹模板”;通过总量统计矩参数筛选特征模板。该方法整合指纹图谱信息,构建结构性“物质单

元”,为中药研究提供简化工具。由于匹配频数与色谱峰面积大小呈显著相关性,其整合生成新的指纹图谱在保留原图谱总量统计矩特征的同时,能极大降低数据维度,为中医药理论及实践提供有效分析工具。

为了在保留整体特征的同时实现有效降维,本研究基于上述原理,对检出的 332 个色谱峰采用匹配频数法进行处理。结果显示,所有色谱峰的平均匹配频数 ($\bar{N}_p$) 为 14.60,标准差 (standard deviation, SD) 为 14.83。基于概率密度函数分布特征,设定置信系数为 0.95,自由度 (ν) = 4 847,查得 $t(\alpha, \nu) = 1.96$ 。

依据阈值公式计算得划分为“印迹模板”的最低界值为 43.66,最终确定匹配频数阈值 $N_{pc} = 43$ 。即选取匹配频数 $N_p \geq 43$ 的色谱峰构建“印迹模板”成分簇,并将簇内成分定义为结构性“物质单元”^[11]。在此定义下,结构性“物质单元”并非代指单一的化合物单体,而是指在色谱行为上高度接近、理化性质相似的一组化合物集合(成分群)。结合超分子“印迹模板”相关理论推断,这些在图谱上表现出稳态聚集的成分群,其内在的生物学联系可能在于它们受植物体内相似的生物合成途径调控,并具有共同的结构母核^[6-7]。最终,基于上述色谱聚类规律,将 332 个原始色谱峰整合为 34 个结构性“物质单元”(A1~A34),各单元的保留时间及相对峰面积见表 3。

2.6 指纹图谱整合前后的总量统计矩及信息熵信息量的对比

尽管通过匹配频数法成功筛选出 34 个结构性“物质单元”,实现了数据的有效降维,但这种简化是否会导致关键化学信息的丢失,仍需进一步确证。为此,引入总量统计矩与信息熵法,对图谱整合前后的特征一致性进行评价。总量统计矩法是将指纹图谱看作多成分一定特性变量以响应值表达的曲线函数,再按统计矩原理应用于指纹图谱的一种分析方法。该方法可用于中药超分子“印迹模板”的印迹性表征,其参数包括总量零阶矩 (area under curve of total quantum, AUCT)、总量一阶矩 (mean chromatographic retention time of total quantum, MCRTT)、总量二阶矩 (variance of chromatographic retention time of total quantum, VCRTT)。AUCT 表示样品图谱一定总量下曲线的总响应面积,可用于表征成分总含量的差异性;MCRTT 表示样品总量

表3 58批鱼腥草挥发油“物质单元”指纹图谱的保留时间与峰面积

Table 3 Retention times and peak areas of structural “material units” in volatile oil of 58 batches of *H. cordata*

物质 单元	t_R / min	峰面积 ($\times 10^4$)											
		S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12
A1	6.02	10.10	9.32	10.40	10.70	12.20	9.70	0.00	4.70	6.62	6.85	21.00	13.20
A2	7.14	163.90	172.70	119.80	63.46	129.80	104.50	37.13	11.75	68.04	60.09	145.20	105.00
A3	7.74	75.41	110.10	98.24	220.55	442.29	296.67	110.42	76.10	286.35	220.63	460.42	374.94
A4	8.33	2 730.20	2 757.20	2 737.50	875.16	2 111.20	1 351.40	435.12	304.38	1 028.20	475.22	1 457.20	1 064.10
A5	8.78	0.00	5.92	3.50	25.00	42.53	48.63	18.35	0.00	44.09	24.29	62.83	44.74
A6	8.96	0.00	3.78	162.40	107.00	17.27	185.00	31.88	64.78	14.02	9.34	27.52	337.80
A7	9.12	236.78	282.45	9.89	6.44	231.60	20.18	48.35	0.00	77.05	179.22	383.25	6.13
A8	9.37	25.30	27.90	26.50	14.00	27.40	25.00	6.93	12.10	13.00	11.00	27.90	30.00
A9	9.85	17.27	62.28	28.10	74.33	137.60	191.10	135.50	67.64	134.40	68.44	159.10	170.90
A10	10.49	30.20	71.90	43.60	73.10	73.80	57.50	74.80	55.10	40.00	19.30	48.00	47.00
A11	10.64	80.20	98.96	119.10	12.28	36.34	48.85	22.89	33.96	73.00	29.90	79.99	63.03
A12	10.81	132.00	313.20	250.10	94.36	174.50	186.20	103.00	77.15	82.56	49.01	109.10	157.60
A13	11.61	6.05	13.80	5.47	12.00	32.80	35.90	32.60	14.00	19.70	9.05	35.90	36.50
A14	12.21	33.70	62.00	49.90	8.24	22.70	36.20	23.00	17.00	42.20	11.80	55.30	39.10
A15	13.02	604.15	1 407.20	1 053.10	557.96	803.73	1 113.80	1 661.00	1 443.50	933.26	324.04	894.56	1 177.90
A16	13.76	497.58	708.20	650.82	2 440.60	1 986.60	1 112.90	687.54	108.69	82.92	133.80	328.76	389.37
A17	14.62	98.75	195.50	123.20	46.93	110.70	149.10	178.50	137.50	92.64	35.94	115.30	155.30
A18	15.64	147.28	3 812.20	4 674.60	1 326.10	1 340.70	3 959.70	140.57	101.75	137.76	80.25	243.23	217.31
A19	16.69	6 554.10	2 427.00	117.09	494.22	296.14	218.88	9 427.10	8 798.30	7 647.20	988.69	6 272.50	5 620.70
A20	17.83	38.30	45.70	31.60	14.80	24.30	26.60	26.30	28.60	12.40	4.71	12.40	13.90
A21	18.16	491.30	148.60	80.42	32.87	38.06	308.33	664.69	512.98	93.71	71.37	99.35	238.21
A22	18.58	88.26	137.50	121.55	1 999.20	1 475.30	803.33	2 441.40	489.61	1 481.70	275.41	3 481.70	737.40
A23	19.05	71.72	52.77	42.61	49.21	36.11	120.07	254.64	187.81	162.18	58.72	174.34	146.36
A24	19.46	102.45	143.25	112.11	4 064.30	2 171.90	427.63	63.92	43.03	32.78	13.91	57.67	57.38
A25	20.43	231.20	216.80	200.60	160.70	232.60	345.30	77.76	73.09	76.27	65.63	229.10	174.20
A26	21.21	47.54	39.28	32.35	92.29	38.91	86.99	96.59	93.07	37.62	12.29	112.50	37.62
A27	21.77	57.79	71.81	95.18	200.50	69.67	90.02	144.50	79.33	54.56	16.63	82.65	54.83
A28	22.38	68.42	119.90	83.56	6.51	15.67	55.67	129.00	66.16	54.79	0.00	0.00	0.00
A29	22.70	369.51	186.35	196.35	207.73	160.86	241.81	408.86	218.54	304.91	44.28	527.21	109.15
A30	23.10	160.00	159.60	98.87	32.56	95.88	48.56	58.43	73.50	32.07	29.77	125.30	123.80
A31	24.77	347.45	351.97	264.24	878.39	255.70	212.07	179.21	140.50	122.06	34.47	219.36	110.21
A32	29.45	414.98	681.19	371.45	486.75	538.14	1 040.90	435.38	272.63	157.89	92.63	618.95	526.32
A33	40.53	621.90	460.10	274.90	165.50	447.60	685.30	557.90	235.80	283.20	30.76	254.20	107.50
A34	50.65	1 195.40	1 721.00	850.80	615.49	1 762.90	1 759.30	1 179.70	602.93	622.71	115.05	423.76	818.95
物质 单元	t_R / min	峰面积 ($\times 10^4$)											
		S13	S14	S15	S16	S17	S18	S19	S20	S21	S22	S23	S24
A1	6.02	21.60	4.46	7.28	23.60	13.80	14.50	0.00	2.94	3.73	0.00	7.54	19.80
A2	7.14	89.28	143.60	151.90	38.79	18.11	95.20	150.90	161.40	106.90	351.00	331.50	476.60
A3	7.74	53.95	80.30	76.96	122.74	19.37	270.79	84.87	92.24	70.06	111.89	86.33	127.31
A4	8.33	2 304.00	2 192.40	2 681.90	428.68	125.06	780.49	4 453.80	3 389.50	3 038.10	5 466.60	5 220.70	5 222.20
A5	8.78	3.83	4.51	3.38	10.82	6.90	41.05	0.00	0.00	4.38	5.94	5.26	8.25
A6	8.96	3.18	181.30	206.30	15.55	25.03	127.50	0.00	0.00	2.29	4.23	8.08	0.00
A7	9.12	319.92	6.40	6.20	42.89	0.00	7.52	1 028.80	827.38	701.77	967.23	1 401.10	688.36
A8	9.37	47.80	40.70	39.60	6.59	11.30	15.60	49.80	52.70	45.90	52.10	45.80	19.80

表3 (续)

物质 单元	t_R / min	峰面积 ($\times 10^4$)											
		S13	S14	S15	S16	S17	S18	S19	S20	S21	S22	S23	S24
A9	9.85	14.86	23.49	19.34	77.52	38.20	115.40	8.74	13.76	17.30	4.87	7.44	13.78
A10	10.49	81.40	68.30	69.90	65.60	25.20	47.60	93.20	68.20	55.00	41.10	19.40	31.50
A11	10.64	52.00	73.01	61.98	0.00	0.00	7.50	55.84	83.46	65.74	36.89	31.54	60.88
A12	10.81	289.60	417.60	335.80	406.70	249.50	277.30	224.60	235.50	197.10	69.73	19.10	27.98
A13	11.61	42.60	52.30	34.80	14.30	3.27	28.50	69.30	84.60	63.70	40.70	40.70	0.00
A14	12.21	35.10	72.70	54.50	8.11	9.15	11.30	31.90	62.50	36.30	19.30	15.20	19.80
A15	13.02	346.64	496.06	358.53	3 011.50	807.02	1 201.70	219.93	255.26	276.29	113.35	72.34	146.33
A16	13.76	114.39	148.25	100.90	4 776.40	2 908.30	5 799.50	46.49	89.24	177.29	79.56	132.76	544.59
A17	14.62	97.96	110.20	75.93	134.00	36.79	63.04	34.55	72.12	62.82	22.51	7.79	20.50
A18	15.64	2 773.50	3 145.40	2 840.20	920.26	404.70	832.44	1 969.90	2 531.90	2 633.30	3 370.80	41.87	3 002.60
A19	16.69	160.77	216.51	175.35	730.88	404.49	855.68	105.14	142.54	134.13	1 327.20	4 499.80	3 447.40
A20	17.83	41.90	62.80	42.40	0.00	0.00	8.32	29.00	38.40	33.80	28.50	32.20	31.00
A21	18.16	833.52	1 012.70	903.66	0.00	1 249.40	736.78	850.42	1 065.40	965.19	611.62	109.52	91.58
A22	18.58	2 054.50	803.85	757.83	2 161.90	2 628.30	106.40	646.87	1 121.20	460.65	1 032.10	704.66	1 084.20
A23	19.05	50.20	12.05	10.03	4 267.70	38.00	66.65	8.01	43.18	14.01	53.66	39.20	47.05
A24	19.46	67.65	61.31	46.22	2 178.30	1 196.10	2 622.70	74.28	86.43	90.05	48.57	49.46	75.77
A25	20.43	171.50	115.20	97.97	124.20	19.34	99.61	214.60	231.00	201.40	153.50	144.90	147.70
A26	21.21	77.63	50.48	48.62	0.00	159.10	24.25	90.12	118.10	67.36	60.30	47.41	28.08
A27	21.77	42.33	44.98	31.86	506.40	31.33	55.46	38.40	55.94	40.98	26.35	24.97	38.47
A28	22.38	58.15	63.54	47.81	21.85	0.00	0.00	48.85	58.79	47.58	31.93	29.26	31.66
A29	22.70	871.69	729.87	721.00	180.85	42.01	101.87	808.12	981.97	908.18	779.79	1 113.40	1 044.10
A30	23.10	317.60	253.40	207.30	0.00	35.92	77.73	311.00	328.70	259.70	172.60	161.60	55.86
A31	24.77	1 221.40	659.55	610.47	1 743.30	574.36	151.73	1 295.00	1 684.50	673.39	576.89	265.63	162.33
A32	29.45	948.40	1 115.90	800.35	456.03	133.01	360.02	757.24	943.08	697.21	394.19	438.87	550.07
A33	40.53	467.00	322.40	249.50	842.90	217.70	305.70	134.20	440.80	314.10	68.15	179.60	202.30
A34	50.65	423.04	406.47	216.36	5 540.60	454.29	1 990.60	114.04	517.62	648.44	108.77	122.57	87.98
物质 单元	t_R / min	峰面积 ($\times 10^4$)											
		S25	S26	S27	S28	S29	S30	S31	S32	S33	S34	S35	S36
A1	6.02	20.30	12.40	17.30	7.11	2.47	33.70	12.07	5.97	8.78	7.40	18.45	4.80
A2	7.14	328.00	697.30	426.80	483.90	976.50	747.30	867.10	532.20	862.30	567.70	434.60	464.90
A3	7.74	108.30	421.85	275.20	536.97	1 114.50	549.18	877.35	752.40	1 528.10	641.10	534.62	649.28
A4	8.33	4 886.30	4 773.70	3 508.40	2 875.80	2 650.70	3 005.70	3 348.30	2 490.40	3 354.30	2 914.30	2 350.00	2 030.40
A5	8.78	5.79	30.11	17.83	95.81	133.60	67.63	31.19	141.40	128.10	88.96	93.27	49.79
A6	8.96	0.00	4.99	5.31	6.76	9.29	3.36	11.90	16.50	92.90	16.80	20.70	36.50
A7	9.12	434.51	790.97	606.05	748.16	926.66	636.13	826.87	678.91	732.09	577.47	550.71	510.26
A8	9.37	28.00	28.60	26.40	15.10	9.83	17.70	38.10	18.20	10.40	11.90	12.00	8.34
A9	9.85	10.66	63.80	58.84	193.00	234.10	120.10	144.80	290.90	301.70	195.00	299.40	276.80
A10	10.49	36.80	51.70	65.30	79.10	83.60	55.00	68.90	98.30	97.54	67.35	103.60	87.87
A11	10.64	99.46	91.66	87.76	22.03	9.45	15.67	15.90	35.50	15.00	23.80	34.60	21.80
A12	10.81	45.07	51.77	88.56	13.38	18.75	21.07	40.60	16.00	28.10	12.10	10.10	12.30
A13	11.61	0.00	8.59	8.33	35.00	29.60	15.30	15.40	27.20	36.10	22.40	17.90	22.90
A14	12.21	37.20	37.00	31.70	25.70	22.80	6.38	9.10	26.20	27.40	16.10	46.10	23.30
A15	13.02	168.99	430.25	563.12	761.66	691.51	326.87	468.70	766.10	128.70	638.80	63.37	70.62
A16	13.76	658.34	388.86	441.39	405.57	210.48	1 828.70	1 795.50	336.74	1 098.50	144.93	1 265.90	1 211.90
A17	14.62	27.30	34.14	52.18	16.02	17.70	6.79	34.00	39.20	40.00	35.70	60.00	48.00

表3 (续)

物质 单元	t_R / min	峰面积 ($\times 10^4$)											
		S25	S26	S27	S28	S29	S30	S31	S32	S33	S34	S35	S36
A18	15.64	232.30	3 818.30	231.66	167.63	3 406.30	2 675.10	155.79	2 759.10	10.63	30.37	75.73	3 203.80
A19	16.69	5 490.00	3 660.50	6 348.70	8 580.90	47.91	102.64	4 664.60	2 268.50	4 863.50	6 033.40	6 495.30	4 421.60
A20	17.83	27.00	44.70	39.70	60.90	59.20	19.70	37.70	41.10	41.30	34.30	48.20	47.60
A21	18.16	0.00	463.44	176.55	60.44	495.08	507.82	0.00	1 249.40	736.78	850.42	1 065.40	965.19
A22	18.58	1 434.70	147.31	164.48	391.33	163.71	273.14	2 161.90	2 628.30	106.40	646.87	1 121.20	460.65
A23	19.05	62.80	39.73	57.63	285.92	61.64	39.10	4 267.70	38.00	66.65	8.01	43.18	14.01
A24	19.46	110.01	54.18	88.82	119.07	11.27	1 181.40	2 178.30	1 196.10	2 622.70	74.28	86.43	90.05
A25	20.43	177.20	127.00	189.90	259.20	88.28	85.71	124.20	19.34	99.61	214.60	231.00	201.40
A26	21.21	38.86	17.92	23.18	62.13	19.05	34.34	0.00	159.10	24.25	90.12	118.10	67.36
A27	21.77	44.00	30.01	54.36	62.88	20.05	46.15	506.40	31.33	55.46	38.40	55.94	40.98
A28	22.38	0.00	28.83	45.25	83.37	53.03	11.17	21.85	0.00	0.00	48.85	58.79	47.58
A29	22.70	1 012.00	763.48	393.23	813.96	839.90	246.10	180.85	42.01	101.87	808.12	981.97	908.18
A30	23.10	70.81	30.59	91.10	33.35	11.97	21.72	0.00	35.92	77.73	311.00	328.70	259.70
A31	24.77	240.65	136.64	160.27	289.02	70.45	137.07	1 743.30	574.36	151.73	1 295.00	1 684.50	673.39
A32	29.45	423.24	377.71	514.49	1 129.70	363.78	226.97	456.03	133.01	360.02	757.24	943.08	697.21
A33	40.53	151.30	101.00	142.00	170.60	146.40	44.45	842.90	217.70	305.70	134.20	440.80	314.10
A34	50.65	211.57	153.15	620.81	433.59	85.40	60.52	5 540.60	454.29	1 990.60	114.04	517.62	648.44

物质 单元	t_R / min	峰面积 ($\times 10^4$)											
		S37	S38	S39	S40	S41	S42	S43	S44	S45	S46	S47	S48
A1	6.02	6.27	101.60	0.00	25.20	6.43	11.80	3.12	14.10	0.00	15.60	3.92	11.70
A2	7.14	508.20	601.80	300.80	717.40	516.20	524.60	390.40	527.80	546.20	539.80	607.70	215.10
A3	7.74	765.53	873.21	98.64	994.50	669.70	872.90	86.82	130.50	141.70	136.10	201.40	333.20
A4	8.33	2 275.90	3 248.30	5 384.30	3 219.20	2 921.40	2 945.60	5 201.40	5 275.70	5 346.30	5 406.70	3 596.90	1 390.60
A5	8.78	107.30	85.24	6.47	86.92	108.50	70.80	25.89	11.14	8.85	9.99	13.42	17.22
A6	8.96	22.00	73.30	0.00	7.62	9.48	18.47	0.00	0.00	0.00	0.00	3.18	88.68
A7	9.12	562.96	1 243.20	1 163.50	1 139.10	1 009.00	1 134.00	1 300.00	1 441.90	1 519.20	1 405.70	1 079.20	261.87
A8	9.37	11.00	46.40	46.70	38.10	33.40	62.90	72.40	61.20	80.70	53.70	39.80	6.31
A9	9.85	300.80	213.10	5.17	173.10	194.80	211.90	12.99	11.67	11.40	11.83	23.64	147.40
A10	10.49	95.31	71.85	24.82	57.70	64.70	69.70	25.90	26.30	24.00	24.60	30.70	57.40
A11	10.64	29.50	87.40	26.00	55.70	61.70	66.10	28.70	32.80	27.70	39.50	31.60	6.99
A12	10.81	8.45	34.50	24.80	37.60	18.20	27.70	20.00	46.30	32.80	33.90	45.00	74.00
A13	11.61	29.20	47.00	44.80	30.40	32.20	45.50	32.60	54.50	48.90	56.20	31.00	27.50
A14	12.21	36.50	60.90	16.20	32.40	40.40	45.00	10.90	16.40	13.80	20.70	33.50	20.50
A15	13.02	890.70	878.80	58.30	536.40	623.90	615.90	129.20	103.30	70.21	89.69	133.20	845.70
A16	13.76	141.07	309.59	51.40	246.18	260.62	369.81	103.78	90.13	58.82	72.83	136.82	4 306.70
A17	14.62	33.10	45.60	10.10	26.80	19.00	34.20	16.60	9.96	6.81	9.29	21.30	22.20
A18	15.64	51.14	230.93	10.75	3 269.90	124.77	165.32	3 727.10	19.33	3 369.70	31.32	45.54	2 323.40
A19	16.69	5 291.60	7 516.10	4 221.80	2 735.40	5 580.40	5 692.90	93.01	3 388.20	72.63	3 820.30	3 835.70	612.05
A20	17.83	42.80	29.40	24.20	33.50	17.00	22.80	53.00	49.70	41.80	48.80	71.20	10.70
A21	18.16	611.62	109.52	91.58	0.00	463.44	176.55	60.44	495.08	507.82	573.49	457.03	618.46
A22	18.58	1 032.10	704.66	1 084.20	1 434.70	147.31	164.48	391.33	163.71	273.14	255.70	226.00	746.10
A23	19.05	53.66	39.20	47.05	62.80	39.73	57.63	285.92	61.64	39.10	0.00	40.75	101.80
A24	19.46	48.57	49.46	75.77	110.01	54.18	88.82	119.07	11.27	1 181.40	33.52	40.10	2 469.50
A25	20.43	153.50	144.90	147.70	177.20	127.00	189.90	259.20	88.28	85.71	133.10	154.30	56.09
A26	21.21	60.30	47.41	28.08	38.86	17.92	23.18	62.13	19.05	34.34	35.20	31.80	94.00

表3 (续)

物质	t_R	峰面积 ($\times 10^4$)											
单元	min	S37	S38	S39	S40	S41	S42	S43	S44	S45	S46	S47	S48
A27	21.77	26.35	24.97	38.47	44.00	30.01	54.36	62.88	20.05	46.15	19.94	27.73	149.20
A28	22.38	31.93	29.26	31.66	0.00	28.83	45.25	83.37	53.03	11.17	26.30	35.70	0.00
A29	22.70	779.79	1113.40	1044.10	1012.00	763.48	393.23	813.96	839.90	246.10	1007.40	724.80	113.96
A30	23.10	172.60	161.60	55.86	70.81	30.59	91.10	33.35	11.97	21.72	140.60	121.10	12.89
A31	24.77	576.89	265.63	162.33	240.65	136.64	160.27	289.02	70.45	137.07	245.50	226.20	310.70
A32	29.45	394.19	438.87	550.07	423.24	377.71	514.49	1129.70	363.78	226.97	249.10	299.70	410.80
A33	40.53	68.15	179.60	202.30	151.30	101.00	142.00	170.60	146.40	44.45	118.40	139.70	68.08
A34	50.65	108.77	122.57	87.98	211.57	153.15	620.81	433.59	85.40	60.52	65.48	241.20	87.20

物质	t_R	峰面积 ($\times 10^4$)										
单元	min	S49	S50	S51	S52	S53	S54	S55	S56	S57	S58	
A1	6.02	12.50	7.75	10.80	7.06	17.20	14.20	3.57	3.99	1.71	29.30	
A2	7.14	187.30	212.20	150.00	321.10	565.20	44.70	118.10	146.30	134.80	140.40	
A3	7.74	190.60	203.60	144.60	323.20	628.70	10.33	40.71	46.21	38.11	128.10	
A4	8.33	505.98	603.17	466.27	720.75	1724.10	592.73	864.68	1104.70	1182.40	712.63	
A5	8.78	33.78	46.78	36.31	51.86	84.26	0.00	0.00	2.56	2.70	22.15	
A6	8.96	11.57	8.68	2.30	8.45	299.00	4.88	0.00	0.00	0.00	5.21	
A7	9.12	95.74	108.60	73.48	170.99	20.28	163.53	520.66	633.38	589.54	455.01	
A8	9.37	5.22	2.51	4.97	7.35	10.50	9.44	47.00	47.60	56.50	41.20	
A9	9.85	72.23	85.93	59.43	96.54	173.00	0.00	0.00	2.46	5.30	45.49	
A10	10.49	20.70	25.30	18.00	30.30	72.00	9.31	7.73	5.77	5.87	18.10	
A11	10.64	1.56	1.97	0.00	1.76	4.21	13.30	7.79	8.00	11.80	28.50	
A12	10.81	17.40	9.15	24.80	20.20	47.30	22.00	14.00	7.12	11.60	49.90	
A13	11.61	4.03	2.99	4.20	8.60	22.90	7.69	37.50	23.10	20.20	21.60	
A14	12.21	2.58	2.10	4.18	7.58	13.50	7.09	3.82	4.43	3.22	17.40	
A15	13.02	178.50	191.50	184.90	263.70	787.10	35.63	18.71	14.51	17.91	217.90	
A16	13.76	806.56	920.01	821.95	763.53	3965.00	46.51	10.96	13.51	16.88	567.33	
A17	14.62	3.24	2.40	3.87	7.76	14.60	9.09	3.62	3.53	0.00	46.50	
A18	15.64	536.16	583.16	456.94	614.31	2132.50	733.38	532.58	593.65	9.92	102.63	
A19	16.69	175.41	166.02	150.03	160.65	371.17	921.86	21.69	25.23	631.67	805.76	
A20	17.83	4.73	4.73	3.57	7.66	20.00	13.80	11.00	7.01	0.00	6.79	
A21	18.16	62.54	53.28	69.14	92.72	1052.50	65.46	47.64	47.25	15.12	64.41	
A22	18.58	165.10	71.97	204.60	84.41	114.60	202.10	73.62	49.69	91.05	124.30	
A23	19.05	19.35	18.76	15.30	24.56	79.23	43.14	9.77	9.08	7.86	31.44	
A24	19.46	349.92	370.71	337.80	367.51	1916.90	24.61	18.88	10.64	14.07	112.71	
A25	20.43	9.62	9.98	8.40	12.78	36.02	110.20	44.21	37.43	46.71	104.60	
A26	21.21	13.10	5.61	14.50	12.50	40.90	38.70	14.50	11.50	14.50	6.65	
A27	21.77	22.77	19.45	9.52	4.24	45.26	16.77	7.40	3.96	5.47	13.63	
A28	22.38	0.00	0.00	0.00	0.00	5.55	17.70	5.73	4.70	5.83	2.32	
A29	22.70	19.83	21.88	17.64	40.02	140.16	381.36	201.03	180.42	230.07	111.50	
A30	23.10	0.00	1.56	0.00	1.91	46.95	77.95	41.58	31.74	27.38	4.02	
A31	24.77	32.34	20.91	35.66	40.12	165.00	178.50	63.99	51.83	67.02	28.50	
A32	29.45	45.62	48.11	36.29	49.46	244.80	206.30	43.05	26.73	68.29	75.25	
A33	40.53	2.47	11.67	3.35	5.03	82.97	67.76	57.90	22.75	58.04	46.57	
A34	50.65	12.42	4.03	0.00	6.66	71.27	76.58	22.02	10.73	25.95	65.77	

平均保留时间;VCRTT 表示样品的平均保留时间方差,数值越大图谱越分散,两者可用于表征各个化学成分的含量与种类的差异性^[12]。此外,信息熵是离散值的概率性表达,中药材指纹图谱上每个色谱峰对应 1 个化学成分,即 1 个离散值,峰的强度即表明其化学信息显现的概率,且此概率受色谱条件、相互作用等的综合影响。因此,将每个成分看成 1 个信息元,则可用信息熵表征 1 张指纹图谱的信息载荷特征。通过计算和比较信息熵能够反映指纹图谱所携带成分的信息总量的变化,若再乘以总峰面积就能转变成信息量,表征整个指纹图谱信息容量大小^[13-14]。

通过对指纹图谱整合前后的上述各项参数进行配对 t 检验,结果见表 4。整合后,58 批样品的平均色谱峰数由 83.59 ± 23.51 显著降至 32.98 ± 1.28 ($t=9.41$, $P<0.01$),RSD 由 98.49% 降至 3.87%;整合前后的零阶矩 ($t=0.00$)、一阶矩 ($t=0.21$) 及二阶矩 ($t=0.15$) 均无显著性差异;信息熵显著降低 ($t=6.59$, $P<0.01$);而信息量保持稳定 ($t=1.84$)。这证明该方法在大幅简化数据复杂度的同时,完整保留了原图谱的有效化学信息,保证了后续采用该数据构建评价模型的合理性。

表 4 58 批鱼腥草指纹图谱整合前后总量统计矩参数及信息熵、信息量的综合比较 ($n=58$)

Table 4 Comprehensive comparison of total-statistical-moment parameters, information entropy and information content before and after integration for 58 batches of *H. cordata* ($n=58$)

参数	状态	$\bar{x} \pm s$	RSD/%	t 值
色谱峰数目	整合前	83.59 ± 23.51	98.49	9.41**
	整合后	32.98 ± 1.28	3.87	
零阶矩/(V·s)	整合前	137.00 ± 52.20	38.19	0.00
	整合后	137.00 ± 52.20	38.19	
一阶矩/min	整合前	16.04 ± 2.38	14.87	0.21
	整合后	16.13 ± 2.42	15.02	
二阶矩/min ²	整合前	68.01 ± 35.23	51.80	0.15
	整合后	69.02 ± 37.73	54.67	
信息熵	整合前	3.84 ± 0.44	11.57	6.59**
	整合后	3.37 ± 0.31	9.25	
信息量/(V·s)	整合前	524.00 ± 209.00	39.91	1.84
	整合后	458.00 ± 177.00	38.75	

$t_{(0.05, 57)}=2.002$, $t_{(0.01, 57)}=2.665$; 当 $|t|>2.665$ 时, 标记为**, 表示差异极显著 ($P<0.01$)。

$t_{(0.05, 57)}=2.002$, $t_{(0.01, 57)}=2.665$; When $|t|>2.665$, it is marked with **, which means that the difference is extremely significant ($P<0.01$).

2.7 基于因子旋转法的鱼腥草挥发油成分群特征解析与综合评价

因子分析法 (factor analysis method) 作为主成分分析 (principal component analysis, PCA) 的扩展方法^[15], 通过解析变量间协方差矩阵的内在关联, 在保留主要信息的前提下将多维数据降维至少数潜在因子, 进而揭示数据集本质结构。经方差最大化正交旋转后, 因子载荷矩阵可明确变量与因子的归属关系, 使各因子具有明确的功能解释性, 为复杂系统解析提供数学工具^[11,16]。

基于此, 本研究将上述整合后的 34 个结构性“物质单元”作为变量, 利用 IBM SPSS Statistics 27 软件进行分析。首先进行数据适用性检验, 结果显示抽样适合性检验 (KMO 检验) 检验值为 0.620 (>0.5), Bartlett 球形度检验显著性 $P<0.001$, 表明变量间存在相关性, 满足因子分析的基本条件。随后, 采用 PCA 提取特征值 >1 的公共因子, 并经最大方差法进行正交旋转。根据多元统计分析常用判定标准, 以旋转后因子载荷绝对值 ≥ 0.50 作为高贡献度结构性“物质单元”的筛选阈值, 用于确定各因子的主要组成成分。

结果如表 5 与图 2 所示, 共提取出 8 个主成分, 本研究将其定义为 8 个功能性“物质单元”, 其累积方差贡献率达到 83.713%。根据多元统计分析的常规准则, 当主成分的特征值大于 1 且累积方差贡献率超过 80% 时, 即可认为提取的公共因子已充分捕获了原始高维数据的核心变异信息。因此, 这表明上述 8 个功能性“物质单元”有效保留了 34 个结构性“物质单元”绝大部分的数据特征。从统计学数据结构维度来看, 这 8 个功能性“物质单元”能够较好地代表 58 批鱼腥草挥发油体系的主要化学变异特征, 可作为后续构建质量评价模型的有效变量。

通过分析表 5 中各功能性“物质单元”的方差贡献率, 以及表 6 旋转后因子载荷矩阵中载荷绝对值 ≥ 0.50 的结构性“物质单元”, 可明确各成分群的组成及归属关系: 第 1 公因子由 8 个结构性“物质单元”构成, 贡献率最高 (15.91%), 是决定不同批次鱼腥草挥发油质量差异的首要潜在变量; 第 2 公因子由 6 个结构性“物质单元”组成 (14.16%), 构成了第 2 大特征成分群; 第 3 和第 4 公因子分别由 6 个和 4 个结构性“物质单元”构成 (14.13%、13.52%)。

表 5 鱼腥草挥发油功能性“物质单元”主要因子的总方差解析

Table 5 Total variance explanation of main factors for functional “material units” in *H. cordata* volatile oil

主成分	初始特征值			提取载荷平方和			旋转载荷平方和		
	总计	方差贡献率/%	累积方差贡献率/%	总计	方差贡献率/%	累积方差贡献率/%	总计	方差贡献率/%	累积方差贡献率/%
1	7.460	21.942	21.942	7.460	21.942	21.942	5.409	15.908	15.908
2	6.893	20.274	42.216	6.893	20.274	42.216	4.814	14.158	30.066
3	4.925	14.487	56.702	4.925	14.487	56.702	4.804	14.129	44.194
4	2.509	7.378	64.081	2.509	7.378	64.081	4.596	13.518	57.713
5	2.399	7.055	71.135	2.399	7.055	71.135	2.868	8.435	66.147
6	1.735	5.104	76.239	1.735	5.104	76.239	2.187	6.432	72.580
7	1.515	4.457	80.696	1.515	4.457	80.696	1.926	5.665	78.245
8	1.026	3.017	83.713	1.026	3.017	83.713	1.859	5.468	83.713
9	0.899	2.643	86.356						
10	0.760	2.236	88.592						
11	0.704	2.069	90.662						
12	0.571	1.678	92.340						
13	0.452	1.329	93.668						
14	0.382	1.124	94.793						
15	0.319	0.937	95.729						
...	...	...	...						
34	0.005	0.013	100.000						

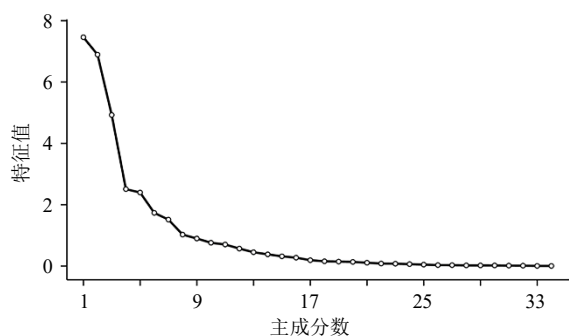


图 2 旋转后“物质单元”的碎石图

Fig. 2 Scree plot of rotated “material units”

前 4 个公因子累积贡献率达到 57.71%，提示这些成分群在鱼腥草挥发油的质量表征中起主导作用。随后，以各功能性“物质单元”的方差贡献率占总提取方差的比重作为权重，构建质量综合评价模型。

对不同批次鱼腥草挥发油的数据进行归一化处理后，计算其在各公因子上的得分，并进一步加权求得综合得分。结果如表 7 所示，S16 批次样品综合得分最高，提示其在核心特征成分群上的累积表达最为丰富，整体化学品质相对最优；而 S24 批次得分最低，表明其关键化学组分含量较低或变异较大，综合质量表现相对较弱。

2.8 鱼腥草挥发油体外抗肺癌活性评价

2.8.1 细胞培养 A549 细胞采用 RPMI 1640 完全培养基（含 10% 胎牛血清、1% 双抗及 1% 谷氨酰胺）进行培养。细胞置于 37℃、5% CO₂ 恒温培养箱中，当细胞生长密度达到 70%~80% 时，使用胰酶（含 EDTA）进行消化传代，实验过程中保持细胞处于对数生长期。

2.8.2 药物配制与给药 用 DMSO 将 58 批鱼腥草挥发油溶解配制成母液，临用时使用 RPMI 1640 基础培养基稀释至所需浓度，确保终浓度中 DMSO 体积分数不影响细胞生长（<0.1%）。以吉非替尼为阳性对照，同法配制，终浓度设定为 60 μmol/L。

2.8.3 CCK-8 法测定细胞活力 取对数生长期的 A549 细胞，制成密度为 1×10⁵ 个/mL 的细胞悬液，以每孔 100 μL 接种于 96 孔板中，于培养箱中培养 24 h 待细胞贴壁。弃去旧培养基，实验组加入不同浓度梯度的鱼腥草挥发油稀释液，对照组加入等量含 DMSO 的基础培养基，每组设置 5 个复孔。继续培养 24 h 后，弃去孔内液体并用 PBS 清洗 1~2 次，每孔加入 100 μL 含 10% CCK-8 的工作液，避光孵育 1 h。使用酶标仪在 450 nm 波长处测定各孔吸光度（A）值，根据公式计算细胞抑制率。

表 6 旋转后功能性“物质单元”与结构性“物质单元”的关系矩阵

Table 6 Relationship matrix between functional “material units” and structural “material units” after rotation

物质单元	成分							
	1	2	3	4	5	6	7	8
A34	0.947							
A23	0.928							
A27	0.917							
A15	0.782							
A33	0.722							
A31	0.561							
A12	0.531							
A16	0.486							
A7		0.924						
A4		0.855						
A29		0.785						
A8		0.650						
A6		0.540						
A20		0.519						
A9			0.942					
A3			0.902					
A5			0.901					
A10			0.768					
A2			0.648					
A32			0.493					
A11				0.908				
A14				0.838				
A25				0.678				
A17				0.646				
A21					0.783			
A13					0.773			
A30					0.616			
A26						0.826		
A22						0.809		
A18							0.813	
A19							0.652	
A24							0.444	
A1								0.726
A28								0.618

$$\text{抑制率} = (A_{\text{对照}} - A_{\text{实验}}) / A_{\text{对照}}$$

2.8.4 数据处理及 IC₅₀ 值计算 采用 GraphPad Prism 7 软件进行数据分析。为减少实验误差, 5 个复孔中去除 1 个最大值和 1 个最小值, 取剩余 3 个孔的 *A* 值平均值进行计算。利用软件中的非线性回归模型拟合药物浓度与抑制率的量效曲线, 从而计

表 7 58 批鱼腥草挥发油基于功能性“物质单元”的综合评分排名

Table 7 Comprehensive score ranking of 58 batches of *H. cordata* volatile oil based on functional “material units”

批次	得分	排名	批次	得分	排名	批次	得分	排名
S16	1.21	1	S53	0.78	21	S40	0.43	41
S54	1.16	2	S43	0.76	22	S9	0.42	42
S51	1.03	3	S4	0.74	23	S7	0.40	43
S14	1.02	4	S13	0.72	24	S5	0.37	44
S36	0.98	5	S38	0.70	25	S18	0.33	45
S15	0.96	6	S30	0.68	26	S26	0.33	46
S48	0.95	7	S28	0.64	27	S44	0.31	47
S21	0.93	8	S17	0.62	28	S25	0.30	48
S23	0.92	9	S2	0.60	29	S41	0.30	49
S50	0.89	10	S29	0.59	30	S11	0.28	50
S56	0.89	11	S6	0.57	31	S31	0.28	51
S10	0.88	12	S45	0.56	32	S39	0.27	52
S57	0.88	13	S32	0.55	33	S34	0.26	53
S49	0.87	14	S37	0.55	34	S47	0.25	54
S55	0.86	15	S8	0.54	35	S1	0.24	55
S20	0.84	16	S22	0.53	36	S3	0.24	56
S52	0.82	17	S46	0.52	37	S27	0.22	57
S35	0.80	18	S42	0.47	38	S24	0.20	58
S58	0.80	19	S33	0.46	39			
S19	0.79	20	S12	0.43	40			

算出各批次鱼腥草挥发油的半数抑制浓度 (half maximal inhibitory concentration, IC₅₀) 值。

2.8.5 58 批鱼腥草挥发油 IC₅₀ 测定结果 为确保实验的准确性, 以 S56 鱼腥草样品为例, 进行了预实验。结果显示, 鱼腥草挥发油对 A549 细胞的抑制作用呈良好的时间与剂量相关性。在给药时间考察中, 24、48、72 h 的 IC₅₀ 值分别为 161.3、162.7、153.8 nL/mL, 无显著差异, 基于实验效率与细胞状态考虑, 确定 24 h 为最佳给药时间。在浓度考察中, 发现 IC₅₀ 主要落在 50~250 nL/mL, 故以此作为后续 58 批样品的检测浓度范围。

按照优化后的条件, 测定 58 批样品的抗肺癌活性, 结果如表 8 所示, 不同批次样品间药效差异显著, IC₅₀ 值分布在 73.6~269.9 nL/mL。其中, S54、S36 等批次 IC₅₀ 值较低 (<90 nL/mL), 表现出较强的抗肿瘤活性; 而 S24、S2、S27 等批次 IC₅₀ 值较高 (>250 nL/mL), 活性相对较弱。

2.9 综合评分与药效活性的关联分析及高贡献度结构性“物质单元”筛选

为验证基于功能性“物质单元”构建的质量评

表 8 不同批次鱼腥草挥发油抑制 A549 细胞的 IC₅₀ 值
Table 8 IC₅₀ values of volatile oil from different batches of
H. cordata against A549 cells

批次	IC ₅₀ 值/ (nL·mL ⁻¹)	批次	IC ₅₀ 值/ (nL·mL ⁻¹)	批次	IC ₅₀ 值/ (nL·mL ⁻¹)
S1	225.1	S21	109.5	S41	163.4
S2	254.5	S22	145.1	S42	202.9
S3	208.8	S23	119.1	S43	123.1
S4	126.7	S24	269.9	S44	176.9
S5	240.7	S25	237.6	S45	139.4
S6	134.1	S26	241.1	S46	147.4
S7	181.5	S27	257.6	S47	171.1
S8	145.1	S28	155.4	S48	116.6
S9	161.4	S29	206.7	S49	150.4
S10	197.3	S30	129.8	S50	162.3
S11	236.2	S31	183.7	S51	130.5
S12	180.1	S32	141.5	S52	146.4
S13	128.1	S33	203.1	S53	122.9
S14	104.2	S34	162.4	S54	73.6
S15	111.4	S35	121.5	S55	192.0
S16	121.2	S36	89.6	S56	149.7
S17	142.7	S37	147.6	S57	148.4
S18	257.3	S38	128.7	S58	164.8
S19	122.3	S39	210.0		
S20	131.8	S40	189.5		

价模型是否与药效有关,本研究采用 Pearson 相关性分析法,考察了 58 批鱼腥草挥发油的综合评分与抗肺癌活性 IC₅₀ 值之间的相关性。利用 SPSS 27.0 软件分析结果显示,两者呈良好的负相关 ($r = -0.739$, $P < 0.01$)。这一结果表明,本研究基于因子旋转法构建的质量评价模型与体外药效具有较好的一致性。同时也提示构成该评价模型的功能性“物质单元”可能包含与药效相关的成分群,为后续进一步分析高贡献度结构性“物质单元”及筛选潜在药效成分群提供了参考依据。

基于上述相关性结果,进一步解析旋转后的因子载荷矩阵,以筛选与质量评价模型密切相关的主要结构性“物质单元”,并探讨其可能的药效物质基础。参考多元统计分析中关于因子载荷解释的常用准则,当旋转后因子载荷绝对值 ≥ 0.50 时,可认为该变量与相应公因子具有较强相关性并具有实际解释意义。因此,本研究以因子载荷绝对值 ≥ 0.50 作为结构性“物质单元”对相应公因子具有重要贡献的判定标准,并据此筛选各公因子的主要贡献成分。其中,第 1 公因子(即第 1 功能性“物质单元”)

解释了最大的方差变异,是影响整体质量的首要因素。在该因子上,A34、A23、A27、A15 及 A31 等结构性“物质单元”是构成该功能性“物质单元”的主要贡献成分;经 GC-MS 指纹图谱与 NIST 质谱数据库比对,确定这些结构性“物质单元”代表的化学成分主要为植醇、2-十二酮、1-十二醇、龙脑及榄香烯类成分等。其余各公因子也分别由特定的结构性“物质单元”主导:例如第 2 公因子中 A7 载荷最高(对应代表成分为 β -水芹烯与 *D*-柠檬烯);第 3 公因子主要包含 A2 与 A10(对应代表成分为 α -蒎烯与 4-松油醇);第 4 公因子则主要涵盖 A25、A11、A17(对应代表成分为石竹烯、芳樟醇及香叶醇)。上述结果表明,这些分布于核心公因子中的高贡献度结构性“物质单元”构成了鱼腥草挥发油的重要化学特征,并提示其可能与体外抗肺癌活性相关,可为后续筛选、分离富集及验证潜在药效成分群提供参考依据。

3 讨论

3.1 基于“物质单元”的指纹图谱评价策略优势

中药挥发油成分复杂,受产地、采收期及提取工艺影响,色谱峰往往存在显著的保留时间漂移与峰面积波动,传统的“全成分”指纹图谱分析常因峰匹配困难而导致信息失真或冗余。在此背景下,本研究依次引入并界定了结构性以及功能性“物质单元”这 2 个核心概念。在这一体系下,通过匹配频数法降维得到的结构性“物质单元”并非单一化合物,而是具有相似理化性质的成分群;而在此基础上通过因子分析提取的功能性“物质单元”,则是用于表征这些成分群协同变异及整体药效的载体。与以往主要依赖单一或少数指标成分进行定性定量的研究不同,本研究创新性地提出了这种由结构到功能的降维评价策略。

通过引入总量统计矩与信息熵参数进行验证,结果表明,将原本繁杂的 332 个原始色谱峰降维至 34 个结构性“物质单元”后,在色谱峰数以及信息熵大幅减少的同时($P < 0.01$),图谱整合前后的总量零阶矩、一阶矩、二阶矩及信息量均无显著性差异($P > 0.05$),这说明该划分方法可以在减少峰的同时保持原来的色谱信息,极大地降低了复杂中药体系质量控制的分析难度。

3.2 高贡献度结构性“物质单元”的筛选与药效关联分析

本研究通过因子分析与药效关联性分析,初步

筛选出前 4 个公因子（即核心功能性“物质单元”）中的高贡献度结构性“物质单元”，并提示其可能与鱼腥草挥发油的抗癌活性相关。现有药理学研究也印证了这些核心成分具有明确的抗肺癌活性及协同作用潜力。（1）第 1 公因子主导的活性成分群：该类成分解释了最大的方差变异，主要包括植醇、 β -榄香烯等成分。其中，植醇可抑制 A549 细胞增殖、迁移并通过磷脂酰肌醇-3-羟激酶/蛋白激酶 B（phosphatidylinositol-3-hydroxykinase/protein kinase B, PI3K/Akt）通路抑制非小细胞肺癌（non-small cell lung cancer, NSCLC）生长^[17]； β -榄香烯在肺癌中具有多靶点潜力，能诱导细胞凋亡、阻滞细胞周期，并能增强放化疗敏感性^[18]。（2）第 2~4 公因子主导的特征性萜类成分：主要富集 *D*-柠檬烯、 α -蒎烯及石竹烯等萜类成分。其中，石竹烯对 A549 细胞具有显著的选择性细胞毒性，能激活线粒体途径诱导凋亡^[19]；*D*-柠檬烯与 α -蒎烯则被证实可通过抑制相关信号通路发挥抗癌作用^[20]，且 *D*-柠檬烯还能诱导自噬。这些成分为鱼腥草的抗肿瘤作用提供了重要的补充机制^[21]。（3）多组分协同药效与质量评价的关联特征：上述综合评价与药效的关联结果提示，鱼腥草挥发油的药效并非单一成分作用的结果，而是多成分共同构成的协同效应。

因子旋转结果显示，这些特征成分归属于不同的特征公因子，提示在质量评价中需关注这几类核心成分群的整体分布。值得注意的是，基于主成分构建的质量综合评分与单一的体外药效指标之间，并非绝对的映射关系，但两者在总体趋势上表现出较强的一致性。

3.3 质量评价模型的局限性

综上所述，本研究基于功能性“物质单元”构建的质量评价模型，与体外抗肿瘤活性展现了良好的相关性，这为后续筛选和验证潜在药效相关成分群提供了一定的参考依据。

然而，本研究也客观存在一些局限性：（1）成分覆盖面有限，本研究仅聚焦于挥发油成分，未涉及黄酮、生物碱等非挥发性成分，因此对鱼腥草整体质量的表征尚不够全面。（2）药效验证仍有一定局限性，本研究药效评价仅采用人肺腺癌细胞株 A549，并通过 CCK-8 法检测细胞活力，以 IC_{50} 值作为体外药效评价指标，主要用于验证质量评价模型与抗肿瘤活性之间的相关性。由于尚未开展细胞凋亡、细胞周期等机制层面的研究，也未纳入其他

肺癌细胞株及正常肺上皮细胞作为对照，因此尚无法全面评价鱼腥草挥发油及其相关成分群的抗肿瘤作用机制和选择性毒性。后续研究将进一步结合多种肺癌细胞模型、正常肺上皮细胞及体内外实验，从细胞凋亡、细胞周期调控等方面系统验证其抗肿瘤作用机制。（3）质量评价模型仍存在一定局限性，本研究构建的质量评价模型虽与体外抗肿瘤活性呈良好的负相关（ $r=-0.739$, $P<0.01$ ），能够较好反映不同批次鱼腥草挥发油药效变化的总体趋势，但两者之间并非完全一一对应。例如，综合评分最高的 S16 样品，其药效活性虽未表现为所有样品中最优，但仍位居前列，表现出较好的抗肿瘤活性。分析其原因，一方面，实验过程中可能存在一定程度的实验操作误差；另一方面，本研究所得综合评分主要基于样品整体化学特征构建，而 IC_{50} 仅作为单一体外药效评价指标，两者评价维度并不完全一致。因此，本研究建立的质量评价模型更适用于反映不同批次样品药效变化的总体趋势，而非对单一样品药效进行精确预测。（4）关键结构性“物质单元”仍需进一步验证：此外，本研究筛选出的高贡献度结构性“物质单元”仍属于基于统计学模型获得的潜在药效相关成分群，尚未进行分离富集及独立药效验证。后续还需进一步开展成分分离、富集及体内外药效实验，对其抗肿瘤活性及可能的协同作用机制进行系统验证。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 罗政, 李俊良, 王姝懿, 等. 基于免疫激活的鱼腥草抗病毒机制 [J]. 中草药, 2025, 56(9): 3140-3151.
- [2] 中国药典 [S]. 一部. 2025: 22.
- [3] 王连睿, 苗明三. 天南星的研究进展及其质量标志物的预测分析 [J]. 中药新药与临床药理, 2023, 34(11): 1640-1647.
- [4] 张潇文, 黄俊峰, 谢子鸿, 等. 中药挥发油稳定化技术及其制剂应用研究进展 [J]. 中草药, 2025, 56(14): 5258-5266.
- [5] 李强, 杜思邈, 张忠亮, 等. 中药指纹图谱技术进展及未来发展方向展望 [J]. 中草药, 2013, 44(22): 3095-3104.
- [6] 贺福元, 邓凯文, 樊启猛, 等. 基于中医药超分子“气析”理论破解中医药重大科学问题和工程技术难题 [J]. 中草药, 2020, 51(20): 5381-5388.
- [7] 潘雪, 樊启猛, 余格, 等. 基于超分子“印迹模板”特性的中药质量标志物研究模式的思考 [J]. 中草药, 2019,

- 50(19): 4569-4575.
- [8] 钱学兵, 张良琦, 肖音, 等. 基于分子连接性指数和匹配频数总量统计矩法的辛味药“印迹模板”特征分析 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2023, 29(9): 218-224.
- [9] 王玉钗, 刘湘, 田丽, 等. 基于匹配频数统计矩法的六味地黄浓缩丸谱量学质量控制与评价研究 [J]. 中草药, 2024, 55(3): 757-769.
- [10] 李文姣, 肖美凤, 李海英, 等. 中药超分子“印迹模板”作用对成分簇动态性与稳态性变化规律的理论研究 [J]. 中草药, 2023, 54(8): 2659-2667.
- [11] 陈旺, 谯茹, 贺鹏, 等. 基于因子旋转法与超分子“印迹模板”的活血化瘀中药“物质单元”解析 [J]. 中草药, 2025, 56(17): 6159-6172.
- [12] 贺福元, 周宏灏, 邓凯文, 等. 指纹图谱的一种定性定量研究新方法: 总量统计矩分析法 [J]. 药学报, 2008, 43(2): 195-201.
- [13] 朱志飞, 刘金玲, 樊启猛, 等. 基于指纹图谱段带总量统计矩法和信息熵的桑源药材成分比较分析研究 [J]. 中国中药杂志, 2021, 46(10): 2547-2555.
- [14] 周敏, 陈泽, 盛丹丹, 等. 归大肠经和肺经中药材 UPLC 指纹图谱的总量统计矩及信息熵分析 [J]. 中华中医药杂志, 2022, 37(12): 7413-7417.
- [15] 高湘婷, 贺鹏, 谯茹, 等. 基于总量统计矩法、因子分析及化学模式识别的补阳还五汤质量评价研究 [J]. 中国中医药信息杂志, 2025, 32(12): 128-135.
- [16] 肖雄坤, 陈旺, 贺鹏, 等. 基于因子旋转法的 27 味清热解毒药“印迹模板”特征分析 [J]. 中国中医药信息杂志, 2026, 33(1): 108-115.
- [17] Yu J, Jin F, Tang Y Q, *et al.* *In vitro* anticancer activity of phytol on human non-small cell lung cancer A549 cells [J]. *Integr Cancer Ther*, 2025, 24: 15347354251344592.
- [18] Bao J H, Li Z L, Zhang D. β -elemene: A promising natural compound in lung cancer therapy [J]. *Eur J Pharmacol*, 2025, 997: 177399.
- [19] Jin L, Ran Y Q, Yang N, *et al.* Anti-lung cancer effects and related mechanisms of α -caryophyllene *in vitro* and *in vivo* [J]. *Food Sci Nutr*, 2025, 13(9): e70862.
- [20] Huang K C, Chew V H, Chen Y Y, *et al.* Targeting chemical carcinogenesis: α -Pinene and *D*-limonene as chemopreventive agents against NNK/TCDD- and urethane-induced lung tumorigenesis [J]. *J Food Drug Anal*, 2025, 33(4): 405-420.
- [21] Gbadebo O S, Oke E D, Ajibuwa F A. Anticancer properties of beta-caryophyllene and *D*-limonene terpenes: A review [J]. *Asian Pac J Trop Biomed*, 2025, 15(4): 129-140.

[责任编辑 郑礼胜]