

基于指纹图谱和多成分定量结合化学模式识别法评价不同产地狭叶薰衣草的质量

王 聪¹, 朱静平¹, 刘仟禧¹, 陈祥相¹, 张 淋¹, 李红伟^{1,2,3}, 尹海龙⁴, 尹 强^{4*}, 李 凯^{1,2,3*}

1. 河南中医药大学, 河南 郑州 450046

2. 豫药全产业链研发河南省协同创新中心, 河南 郑州 450046

3. 河南省中药特色炮制技术工程研究中心, 河南 郑州 450046

4. 新疆维吾尔药业有限责任公司, 新疆 乌鲁木齐 830026

摘要: 目的 建立不同产地狭叶薰衣草 *Lavandula angustifolia* 的 HPLC 指纹图谱及多成分含量测定方法, 结合化学模式识别法评价狭叶薰衣草的质量, 为其进一步研究和开发提供依据。方法 采用 ZORBAX Eclipse XDB-C₁₈ 色谱柱 (250 mm×4.6 mm, 5 μm), 乙腈-0.1%磷酸水溶液为流动相, 梯度洗脱, 检测波长 350 nm, 柱温 30 ℃, 体积流量 0.6 mL/min, 进样量 10 μL, 建立新疆产地狭叶薰衣草 HPLC 指纹图谱并分析相似度, 结合对照品对比指认化学成分并进行定量测定。通过 Origin2025b、IBM SPSS Statistics 27 和 SIMCA 14.1 软件进行聚类分析 (hierarchical clustering analysis, HCA)、主成分分析 (principal component analysis, PCA) 及正交偏最小二乘法判别分析 (orthogonal partial least squares-discriminant analysis, OPLS-DA), 对不同产地狭叶薰衣草进行质量评价, 筛选差异性标志物。结果 建立了不同产地狭叶薰衣草的 HPLC 指纹图谱, 共标定 14 个共有色谱峰, 指出其中 5 个成分, 分别为绿原酸 (峰 2)、木犀草苷 (峰 8)、迷迭香酸 (峰 12)、木犀草素 (峰 13)、芹菜素 (峰 14); 15 批样品相似度均在 0.9 以上; HCA 将 15 批狭叶薰衣草分为 3 类; PCA 提取了 4 个主成分, 其方差累积贡献率为 93.310%; PCA 结果显示新疆霍城样品 (批号 YC23072402) 质量最优; OPLS-DA 筛选出狭叶薰衣草样品中木犀草素、迷迭香酸和芹菜素等 7 个质量差异标志物, 狭叶薰衣草中木犀草素、迷迭香酸、芹菜素质量分数分别为 0.018~0.230、0.380~3.095、0.144~0.481 mg/g。结论 建立的新疆不同产地狭叶薰衣草 HPLC 指纹图谱及多成分含量测定方法简单、准确、重复性好, 可用于狭叶薰衣草的质量评价, 为其质量控制提供依据。

关键词: 狭叶薰衣草; 指纹图谱; 木犀草素; 迷迭香酸; 芹菜素; 化学模式识别; 主成分分析

中图分类号: R282.6 文献标志码: A 文章编号: 0253-2670(2026)17-6946-09

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2026.17.024

Quality evaluation of *Lavandula angustifolia* from different origins based on fingerprint combined with multi-component quantification and chemical pattern recognition

WANG Cong¹, ZHU Jingping¹, LIU Qianxi¹, CHEN Xiangxiang¹, ZHANG Lin¹, LI Hongwei^{1,2,3}, YIN Hailong⁴, YIN Qiang⁴, LI Kai^{1,2,3}

1. Henan University of Traditional Chinese Medicine, Zhengzhou 450046, China

2. Collaborative Innovation Center of Research and Development on the Whole Industry Chain of Yu-Yao, Zhengzhou 450046, China

3. Henan Research Center for Special Processing Technology of Chinese Medicine, Zhengzhou 450046, China

4. Xinjiang Uygur Pharmaceutical Co., Ltd., Urumqi 830026, China

Abstract: Objective To establish the HPLC fingerprint and multi-component content determination method of *Lavandula angustifolia* from different origins, and to evaluate the quality of *L. angustifolia* medicinal materials from different origins by combining chemical pattern recognition methods, providing a basis for further research and development. **Methods** A Zorbax Eclipse XDB-C₁₈

收稿日期: 2026-02-03

基金项目: 河南省杰出青年基金项目 (252300421028); 河南省高校科技创新团队 (26IRTSTHN018)

作者简介: 王 聪 (1999—), 女, 河南新密人, 硕士研究生, 研究方向为中药饮片质量控制及临床应用研究。

E-mail: wangcong662024@163.com

*通信作者: 尹 强 (1981—), 男, 湖北鄂州人, 博士, 正高级工程师、正高级经济师, 主要从事中药民族药新药研究。

Tel: (0991)3727587 E-mail: yinqiang@renfu.com.cn

李 凯 (1982—), 男, 河南许昌人, 博士, 教授, 博士生导师, 主要从事中药炮制研究。E-mail: cpulikai@163.com

column (250 mm × 4.6 mm, 5 μm) was used, with acetonitrile-0.1% phosphoric acid solution as the mobile phase, and gradient elution. The detection wavelength was 350 nm, the column temperature was 30 °C, the flow rate was 0.6 mL/min, and the injection volume was 10 μL. The HPLC fingerprint of *L. angustifolia* from Xinjiang was established and the similarity was analyzed. At the same time, the chemical components were identified by comparison with reference substances and quantitatively determined. Hierarchical clustering analysis (HCA), principal component analysis (PCA), and orthogonal partial least squares-discriminant analysis (OPLS-DA) were performed using Origin2025b, IBM SPSS Statistics 27 and SIMCA 14.1 software to evaluate the quality of *L. angustifolia* medicinal materials from different origins and screen the quality difference markers. **Results** The HPLC fingerprint chromatograms of *L. angustifolia* from different regions in Xinjiang were established. A total of 14 common chromatographic peaks were identified, and five components were recognized: Chlorogenic acid (peak 2), luteolin-7-*O*-glucoside (peak 8), rosmarinic acid (peak 12), luteolin (peak 13), and apigenin (peak 14). The similarity of 15 batches of samples was all above 0.9. HCA divided 15 batches of *L. angustifolia* into three categories. PCA extracted four principal components, with a cumulative contribution rate of 93.310%. PCA results showed that batch YC23072402 from Huocheng, Xinjiang, had the best quality. OPLS-DA identified seven quality difference markers, namely luteolin, rosmarinic acid and apigenin, in *L. angustifolia* samples. The contents of luteolin, rosmarinic acid and apigenin in *L. angustifolia* were 0.018—0.230, 0.380—3.095 and 0.144—0.481 mg/g respectively. **Conclusion** The HPLC fingerprint and multi-component content determination method for *L. angustifolia* from different origins is simple, accurate, and has good repeatability. It can be used for the quality evaluation of *L. angustifolia* from Xinjiang and provide a basis for its quality control.

Key words: *Lavandula angustifolia* Mill.; fingerprint chromatogram; luteolin; rosmarinic acid; apigenin; chemical pattern recognition; principal component analysis

新疆伊犁地区为中国狭叶薰衣草主产区, 占到全国人工种植面积的 95%, 被誉为中国的“狭叶薰衣草之乡”^[1]。我国药用薰衣草为狭叶薰衣草 *Lavandula angustifolia* Mill. 干燥地上部分^[2], 其味辛, 性凉, 具有清热解毒、散风止痒的功效^[3], 用于治疗心悸气短、感冒头痛、咽喉红肿、口舌生疮等病症。现代研究发现狭叶薰衣草主要活性成分为挥发油类(芳樟醇、乙酸芳樟酯 1,8-桉叶素等)、黄酮类(芹菜素、木犀草素等)、苯丙素类(8-羟基松脂醇 4-*O*-β-吡喃葡萄糖苷、落叶松脂醇-4'-*O*-β-*D*-葡萄糖苷等)及酚酸类(绿原酸、迷迭香酸等)成分等^[4-5], 具有抗焦虑抑郁、抗菌、抗炎、抗氧化、抗痴呆、镇静催眠等药理作用^[6-16]。

目前, 市场上狭叶薰衣草药材质量良莠不齐, 虽然《卫生部药品标准·维吾尔药分册》载有狭叶薰衣草药用标准, 但仅记录其性状、鉴别及检查项, 未建立色谱鉴定方法与含量控制指标的综合性评价体系。本实验拟对 15 批新疆不同产地狭叶薰衣草药材进行 HPLC 指纹图谱研究, 并同时测定迷迭香酸、绿原酸、木犀草苷、木犀草素、芹菜素 5 种成分的含量, 旨在建立多指标、多成分含量测定方法综合评价新疆狭叶薰衣草的质量; 此外, 运用相似度评价分析、聚类分析(hierarchical clustering analysis, HCA)、主成分分析(principal component analysis, PCA)与正交偏最小二乘法判别分析(orthogonal partial least squares-discriminant analysis, OPLS-DA), 对不同产地狭叶薰衣草进行综合评价, 旨在探寻影响其质量优劣的关键

成分, 为质量控制研究提供参考。

1 材料

1.1 仪器

岛津 LC-20AD 型高效液相色谱仪(配备 PDA 检测器, 北京中兴汇力科技发展有限公司); DLH-200 型高速多功能粉碎机(武义祺腾电器有限公司); KQ-500DV 型数控超声波清洗器(昆山市超声仪器有限公司); Sartorius BT25S 型十万分之一电子分析天平(赛多利斯科学仪器(北京)有限公司); FA2104B 型万分之一电子分析天平(上海越平科学仪器(苏州)制造有限公司); UPR-II-10TNZP 型优普超纯水机(四川优普超纯科技有限公司); DZTW 型智能恒温电热套(上海力辰邦西仪器科技有限公司); TGL-16M 型高速冷冻离心机(上海卢湘仪离心机仪器有限公司)。

1.2 药物与试剂

对照品迷迭香酸(批号 Y06A9K67402)、绿原酸(批号 A22GB158496)、木犀草苷(批号 A22GB141264)、木犀草素(批号 S08GB160295)、芹菜素(批号 M29GB150104), 质量分数≥98%, 均购自上海源叶生物科技有限公司; 甲醇、乙腈(色谱纯, 安徽天地高纯溶剂有限公司); 磷酸(色谱纯, 天津市科密欧化学试剂有限公司); 实验用水为纯净水。

收集 15 批新疆狭叶薰衣草药材, 经河南中医药大学药学院李凯教授鉴定为唇形科植物狭叶薰衣草 *L. angustifolia* Mill. 的干燥地上部分, 具体样品信息见表 1。

表 1 狭叶薰衣草样品信息
Table 1 *Lavandula angustifolia* sample information

样品编号	产地	批号	采集时间	样品编号	产地	批号	采集时间
xyz-1	新疆吉木萨尔县	YC2203013	2023-07-26	xyz-9	新疆新源县	YC240202	2024-03-03
xyz-2	新疆霍城县	YC23090405	2023-09-17	xyz-10	新疆昭苏县	YC202403	2024-03-03
xyz-3	新疆霍城县	YC23072403	2023-10-29	xyz-11	新疆霍城县	YC240204	2024-03-03
xyz-4	新疆霍城县	YC23072402	2023-10-29	xyz-12	新疆查布查尔锡伯自治县	YC240205	2024-03-03
xyz-5	新疆伊犁州	YC2308012	2023-10-29	xyz-13	新疆巩留县	YC240206	2024-03-03
xyz-6	新疆吉木萨尔县	YC1912014	2023-10-29	xyz-14	新疆伊宁县	YC240207	2024-03-03
xyz-7	新疆伊犁州	YP11-21012901	2023-10-29	xyz-15	新疆尼勒克县	YC240208	2024-03-03
xyz-8	新疆伊宁县	YC240201	2024-03-03				

2 方法与结果

2.1 HPLC 指纹图谱的建立

2.1.1 对照品溶液的制备 分别取迷迭香酸、绿原酸、木犀草苷、木犀草素和芹菜素对照品适量，精密称定，加入 70%甲醇水溶液溶解并稀释，制成含迷迭香酸 0.354 mg/mL、绿原酸 0.145 mg/mL、木犀草苷 0.077 mg/mL、木犀草素 0.053 mg/mL、芹菜素 0.057 mg/mL 的混合对照品溶液。

2.1.2 供试品溶液的制备 取狭叶薰衣草样品粉末（过 2 号筛）约 2.0 g，精密称定，置具塞锥形瓶中，精密加入 70%甲醇 50 mL，称定质量，超声处理（功率 500 W，40 kHz）30 min，放冷，再称定质量，用 70%甲醇补足减失的质量，摇匀，6 000 r/min 离心 15 min，取上清液，经 0.45 μm 滤膜滤过，即得。

2.1.3 色谱条件 ZORBAX Eclipse XDB-C₁₈ 色谱柱（250 mm×4.6 mm，5 μm）；以乙腈（A）和 0.1% 磷酸水（B）为流动相，梯度洗脱（0~15 min，10%~17%A；15~23 min，17%~19%A；23~33 min，19%~37%A；33~38 min，37%~60%A；38~43 min，60%~10%A；43~53 min，10%A）；体积流量 0.6 mL/min；柱温为 30 ℃；进样量为 10 μL；检测波长为 350 nm。

2.1.4 精密度试验 取同一批狭叶薰衣草粉末（编号 xyz-3）1 份，按照“2.1.2”项下方法进行供试品溶液的制备，按照“2.1.3”项下色谱条件连续 6 次进样测定，以迷迭香酸（峰 12）为参照峰 S，测得 14 个特征峰的相对保留时间 RSD≤0.05%，相对峰面积的 RSD≤2.89%，表明仪器精密度良好。

2.1.5 稳定性试验 取同一批狭叶薰衣草粉末（编号 xyz-3）1 份，按照“2.1.2”项下的方法进行供试品溶液的制备，按照“2.1.3”项下色谱条件分别在 0、2、4、8、12、24 h 进样，以迷迭香酸（峰 12）

为参照峰 S，测得各特征峰的相对保留时间 RSD≤3.79%，相对峰面积的 RSD≤3.96%，表明狭叶薰衣草的供试品溶液在 24 h 内稳定。

2.1.6 重复性试验 分别称取同一批狭叶薰衣草粉末（编号 xyz-3）按照“2.1.2”项下的方法平行制备 6 份样品溶液，按照“2.1.3”项下色谱条件进样分析，以迷迭香酸（峰 12）为参照峰，测得各特征峰的相对保留时间 RSD≤2.55%，相对峰面积的 RSD≤3.70%，表明该方法重复性较好。

2.1.7 HPLC 指纹图谱的建立及共有峰的指认 取 15 批狭叶薰衣草粉末，按“2.1.2”项下方法制备供试品溶液，按照“2.1.3”项下色谱条件进样分析，记录色谱图。HPLC 色谱图结果见图 1，利用对照品紫外光谱及保留时间，标定出其中 5 种成分如图 2 所示，依次为绿原酸（峰 2）、木犀草苷（峰 8）、迷迭香酸（峰 12）、木犀草素（峰 13）、芹菜素（峰 14）。其中 12 号峰（迷迭香酸）峰面积相对较大，分离效果及稳定性较好，保留时间适中，故将其作为参照峰（S）。将所得 15 批狭叶薰衣草特征图谱以 AIA 格式导入《中药色谱指纹图谱相似度评价软件（2012 版）》中进行处理分析，以编号为 xyz-1 样品图谱为参照图谱，时间窗宽度设为 0.1 min，按中位数法生成对照图谱，并进行多点校正和 Mark 峰匹配。各样品指纹图谱叠加图见图 3，15 批狭叶薰衣草共指认 14 个共有峰，以迷迭香酸（峰 12）为参照峰 S，计算得到其他 13 个特征峰的相对保留时间 RSD 值在 0.012%~0.128%；相对保留峰面积 RSD 值为 24.63%~137.99%，相对保留峰面积相差较大，表明样品化学成分含量在不同批次间存在较大差别，推测可能与其产地、生长时间、保存环境等因素有关。

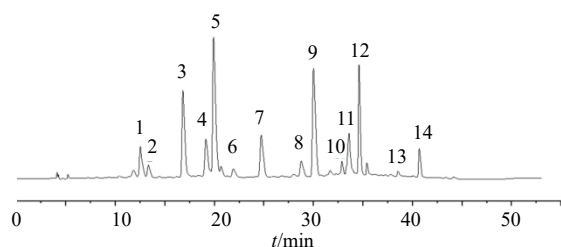
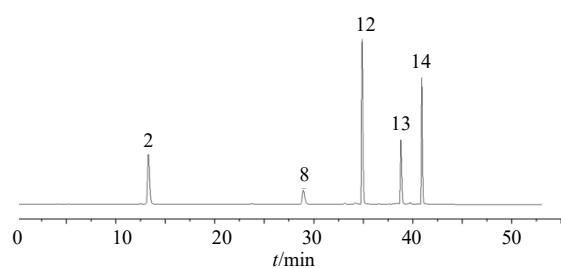


图 1 狭叶薰衣草样品 HPLC 色谱图

Fig. 1 HPLC chromatogram of *L. angustifolia*



2-绿原酸; 8-木犀草苷; 12-迷迭香酸; 13-木犀草素; 14-芹菜素。
2-chlorogenic acid; 8-luteolin; 12-rosmarinic acid; 13-luteolin; 14-apigenin.

图 2 混合对照品色谱图

Fig. 2 Chromatogram of mixed reference substances

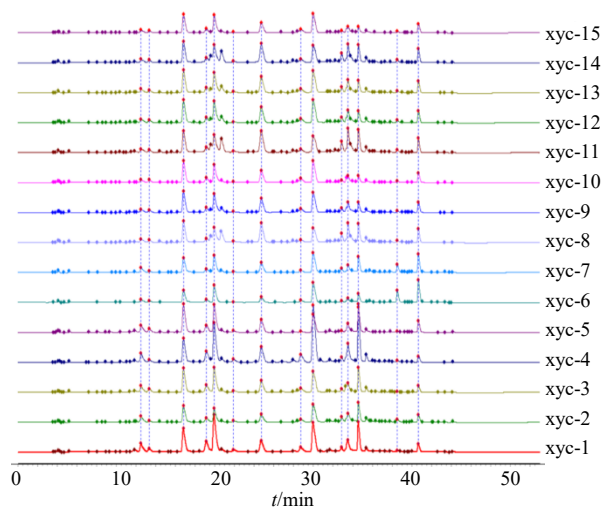


图 3 狭叶薰衣草样品 HPLC 指纹图谱叠加图

Fig. 3 Overlay of HPLC fingerprint spectra of *L. angustifolia* samples

2.1.8 相似度评价 对 15 批狭叶薰衣草样品 HPLC 图谱与对照图谱进行计算, xyc-1~xyc-15 相似度均在 0.9 以上, 相似度较高, 表明各批次狭叶薰衣草样品相似度良好, 所含化学成分差异较小, 质量较为稳定, 所建立的 HPLC 特征图谱可用于狭叶薰衣草的质量评价。相似度分析结果见表 2。

表 2 15 批狭叶薰衣草指纹图谱相似度评价结果

Table 2 Evaluation results of similarity of 15 batches *L. angustifolia* fingerprint patterns

编号	相似度	编号	相似度
xyc-1	0.972	xyc-9	0.989
xyc-2	0.985	xyc-10	0.978
xyc-3	0.990	xyc-11	0.967
xyc-4	0.944	xyc-12	0.992
xyc-5	0.971	xyc-13	0.992
xyc-6	0.906	xyc-14	0.979
xyc-7	0.974	xyc-15	0.979
xyc-8	0.964		

2.2 化学模式识别

2.2.1 HCA 热图 以 15 批狭叶薰衣草样品 14 个共有峰的峰面积作为变量, 运用 Origin2025b 软件, 采用平均聚类方法, 以 Euclidean 距离为测度对狭叶薰衣草进行 HCA, 结果见图 4。15 批狭叶薰衣草样品可被明显聚为 3 类, xyc-1~xyc-3、xyc-5、xyc-8~xyc-15 聚为第 1 类, xyc-6、xyc-7 聚为第 2 类, xyc-4 聚为第 3 类。从 HCA 结果可知, 狭叶薰衣草药材分类存在产地交叉现象; xyc-1~xyc-3、xyc-5、xyc-8~xyc-15 质量较为接近, 推测与其均在新疆且土壤、经纬度差较小、环境气候条件相似等因素有关。xyc-6、xyc-7 推测成因同上。而霍城、吉木萨尔、伊犁 3 个地区质量差异较大, 推测可能与种植管理、采收时间、储存方式有关。

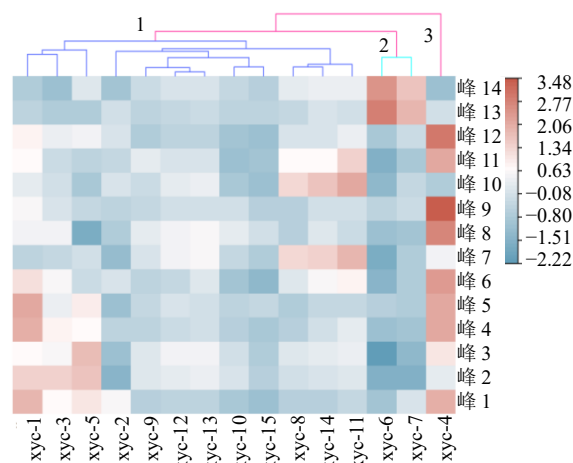


图 4 15 批狭叶薰衣草样品 HCA 热图

Fig. 4 Heatmap of HCA for 15 batches of *L. angustifolia* samples

2.2.2 PCA 以 15 批狭叶薰衣草样品 14 个共有峰的峰面积作为变量, 运用 IBM SPSS Statistics 27 软件对上述的 15×14 阶数据矩阵进行 PCA。Bartlett

球形度检验显示 $P < 0.05$, 说明该数据适合 PCA, 以主成分特征值 > 1 为提取标准并生成因子得分系数矩阵。以特征值及累积方差贡献率作为确定主成分个数的选择依据, 共有 4 个主成分的特征值大于 1, 其累积方差贡献率为 93.310%, 可以代表狭叶薰衣草特征图谱 14 个共有色谱峰的大部分信息, 结合碎石图 (图 5) 的突变点, 提取 4 个成分进行质量评价, 其特征值及贡献率见表 3, 说明这 4 个主成分可解释原有变量 93.310% 的信息, 在一定程度上可以代表指纹图谱 14 个共有峰来评价狭叶薰衣草样品质量。

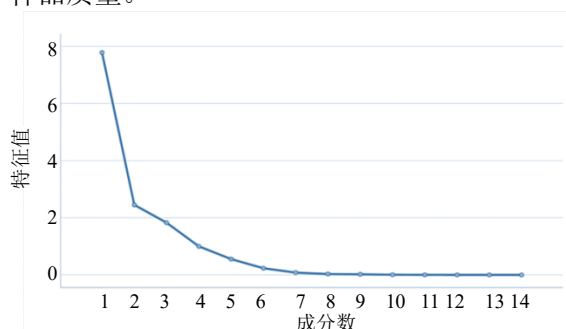


图 5 狭叶薰衣草 PCA 碎石图

Fig. 5 *L. angustifolia* PCA stone fragmentation chart

表 3 特征值及方差贡献率

Table 3 Eigenvalues and variance contribution rates

主成分因子	特征值	方差贡献率/%	累积方差贡献率/%
1	7.782	55.589	55.589
2	2.453	17.518	73.107
3	1.828	13.056	86.163
4	1.001	7.147	93.310

因子载荷矩阵反映了各主成分与 14 个共有峰, 即原始变量之间的相关系数, 结果见表 4, 第 1 主成分主要反映了色谱峰 1、2 (绿原酸)、3、4、5、6、8 (木犀草苷)、9、11、12 (迷迭香酸)、14 (芹菜素) 的信息, 第 2 主成分主要反映了色谱峰 7、10 的信息, 第 3 主成分主要反映了色谱峰 13 (木犀草素) 的信息, 第 4 主成分的特征值为 1.001, 方差贡献率为 7.147%, 主要反映了色谱峰 8 (木犀草苷)、峰 14 (芹菜素) 以及峰 13 (木犀草素) 的信息, 体现了样品中黄酮类成分之间的比例关系, 反映出样品中的微量特征成分信息。该主成分虽然贡献率较低, 但对于累积方差贡献率 93.310% 具有重要作用, 因此予以保留。这些成分是影响狭叶薰衣草质量的重要因素。

表 4 因子载荷矩阵

Table 4 Factor loadings matrix

共有峰	载荷			
	因子1	因子2	因子3	因子4
1	0.792	-0.438	-0.041	0.278
2	0.702	0.193	-0.550	0.290
3	0.815	0.284	-0.373	0.173
4	0.940	-0.229	-0.067	0.186
5	0.840	-0.403	-0.103	0.202
6	0.925	0.048	0.312	0.052
7	0.443	0.807	0.301	0.033
8	0.696	-0.131	0.193	-0.598
9	0.770	-0.428	0.353	-0.242
10	0.244	0.828	0.383	0.159
11	0.822	0.324	0.428	-0.052
12	0.869	-0.271	0.310	0.104
13	-0.577	-0.448	0.610	0.259
14	-0.677	-0.091	0.470	0.455

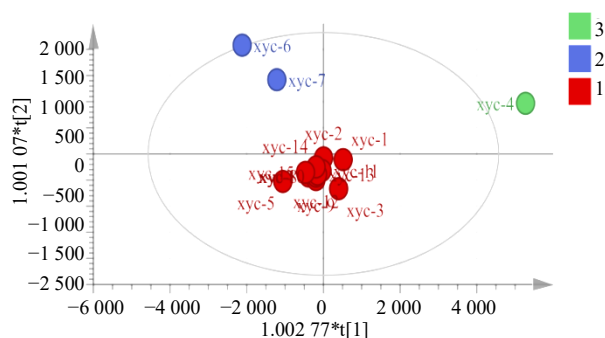
运用 IBM SPSS Statistics 27 软件将 15 批狭叶薰衣草共有峰面积进行标准化处理, 结合主成分特征值和因子得分, 计算 15 批样品的主成分得分, 最终得到各样品的综合得分并进行排序, 结果见表 5。从表中可以看出排名最高的 2 个名次为 xyc-4、xyc-1, 排名最低的 2 个名次为 xyc-7、xyc-6, 说明霍城的 xyc-4 和吉木萨尔的 xyc-1 这 2 个批次狭叶薰衣草样品质量较好。由于 4 个主成分的方差贡献率 (表 3) 不同, 在做评价时, 须以各主成分的贡献率为权重, 根据方差贡献率和标准化数据, 得出各主成分表达式: $Y_1 = 0.284 X_1 + 0.252 X_2 + 0.292 X_3 + 0.337 X_4 + 0.301 X_5 + 0.332 X_6 + 0.159 X_7 + 0.249 X_8 + 0.276 X_9 + 0.087 X_{10} + 0.295 X_{11} + 0.312 X_{12} + 0.200 X_{13} + 0.243 X_{14}$; $Y_2 = -0.280 X_1 + 0.123 X_2 + 0.181 X_3 - 0.146 X_4 - 0.257 X_5 + 0.031 X_6 + 0.515 X_7 - 0.084 X_8 - 0.273 X_9 + 0.529 X_{10} + 0.207 X_{11} - 0.173 X_{12} - 0.286 X_{13} - 0.058 X_{14}$; $Y_3 = -0.303 X_1 - 0.407 X_2 - 0.276 X_3 - 0.050 X_4 - 0.076 X_5 + 0.231 X_6 + 0.223 X_7 + 0.143 X_8 + 0.261 X_9 + 0.283 X_{10} + 0.317 X_{11} + 0.229 X_{12} + 0.451 X_{13} + 0.348 X_{14}$; $Y_4 = 0.278 X_1 + 0.290 X_2 + 0.173 X_3 + 0.186 X_4 + 0.202 X_5 + 0.052 X_6 + 0.033 X_7 - 0.598 X_8 - 0.242 X_9 + 0.159 X_{10} - 0.052 X_{11} + 0.104 X_{12} + 0.259 X_{13} + 0.455 X_{14}$; 式中, Y_1 、 Y_2 、 Y_3 、 Y_4 分别为主成分 1、2、3、4 的得分, $X_1 \sim X_{14}$ 分别为共有峰 1~14 标准化处理后的数据。由各主成分得分和对应的权重相乘求和, 构建综合评价函数: $Y = 0.55589 Y_1 + 0.17518 Y_2 + 0.13056 Y_3 + 0.07147 Y_4$; 综合评价函数中, Y 代表不同批次狭叶薰衣草品质综合得分。

表 5 15 批狭叶薰衣草的主成分因子得分和排序

Table 5 Principal component factor scores and rankings of 15 batches of *L. angustifolia* samples

样品编号	得分				综合得分	排序
	主成分1	主成分2	主成分3	主成分4		
xyz-1	3.748	-1.219	-1.234	1.117	1.789	2
xyz-2	-1.412	-0.547	-0.247	-0.708	-0.964	11
xyz-3	1.763	-0.216	-1.691	-0.026	0.720	5
xyz-4	6.486	-2.459	1.426	-1.117	3.281	1
xyz-5	1.168	-0.438	-2.628	2.220	0.388	6
xyz-6	-5.090	-2.508	1.747	0.789	-2.984	15
xyz-7	-3.217	-1.312	1.557	0.778	-1.760	14
xyz-8	-0.359	2.228	0.877	0.257	0.324	7
xyz-9	-0.669	0.626	-0.452	-0.781	-0.377	10
xyz-10	-1.540	-0.125	-1.159	-1.147	-1.111	12
xyz-11	1.120	2.655	1.714	0.651	1.358	3
xyz-12	-0.113	0.755	-0.233	-0.468	0.006	9
xyz-13	0.127	0.863	0.022	-0.386	0.197	8
xyz-14	0.344	2.084	1.343	0.198	0.746	4
xyz-15	-2.358	-0.386	-1.041	-1.377	-1.613	13

2.2.3 OPLS-DA 为了更好地分析不同批次样本之间的差异和寻找各批次含量之间的差异性标志化合物, 将 15 批样品 14 个共有峰面积导入 SIMCA14.1 软件中, 进行 OPLS-DA 建模分析, 经分析生成散点得分图 (图 6), 得分结果与聚类分析结果基本一致。其中, xyz-1~xyz-3、xyz-5、xyz-8~xyz-15 分布在第 3、4 象限比较集中分为一类。xyz-6、xyz-7 分布在第 2 象限距离较近分为一类。xyz-4 分布在第 1 象限距离其他较远单独分为一类。此外, 不同批次狭叶薰衣草分布离散程度较大, 说明各样品之间质量存在较大差异。OPLS-DA 模型中累积解释能力参数 R^2_{Xcum} 为 0.966, R^2_{Ycum} 为 0.966, 预测能力参数 Q^2_{cum} 为 0.815 > 0.5, 表明所建模型稳定、可靠。为进一步评估模型的准确性和预测能力, 对 OPLS-DA 模型进行了 200 次迭代的置换检验, 结果如图 7 所示, 分析显示, 模型累积贡献率 $R^2 < 0.4$, 模型预测能力 $Q^2 < 0.05$, 表明该模型不存在拟合过现象, 稳定可靠, 可作为狭叶薰衣草药材指纹图谱的模式识别方法。变量重要性投影 (variable importance in projection, VIP) 值是筛选差异化合物的重要指标, VIP 值越高, 对组间差异的影响越大。为进一步筛选引起狭叶薰衣草样品之间差异的标志性成分, 通过对 VIP 值进行分析, 得到差异性标记物的 VIP 得分图 (图 8), 以 VIP 值 > 1 为阈值, 筛选出 7 个变量, 根据 VIP 值依次为峰 9、12 (迷迭香酸)、3、7、5、13 (木犀草素)、14 (芹菜素),



$R^2_{X[1]}=0.510$ $R^2_{X[2]}=0.132$ Ellipse: Hotelling's $T^2(95\%)$

图 6 15 批狭叶薰衣草的 OPLS-DA 得分图
Fig. 6 OPLS-DA score plot of 15 batches of *L. angustifolia* samples

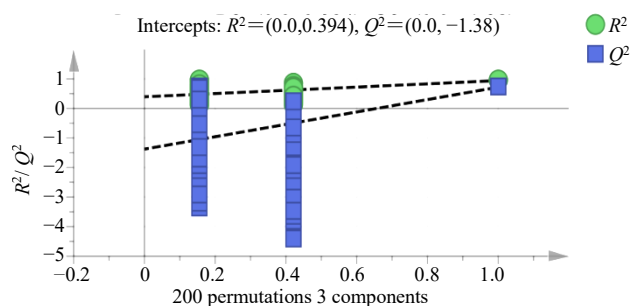


图 7 置换检验结果

Fig. 7 Result of substitution test

表明这 7 个成分是影响各批次狭叶薰衣草样品质量差异的标志性成分。

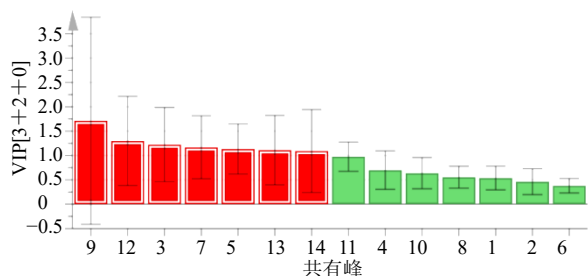


图 8 狭叶薰衣草 14 个色谱峰的 VIP 得分图

Fig. 8 VIP score plot of 14 chromatographic peaks of *L. angustifolia*

2.3 狭叶薰衣草 HPLC 多成分含量测定

为了进一步分析、评价狭叶薰衣草药材质量的差异性,本研究建立了狭叶薰衣草多成分含量测定

方法。通过 VIP 值>1 筛选结合对照品指认,拟对木犀草素、迷迭香酸和芹菜素进行含量测定;为实现药材质量的全面评价,最终确定为对绿原酸、木犀草苷、迷迭香酸、木犀草素、芹菜素 5 种成分进行同步测定。

2.3.1 溶液的制备 对照品溶液和供试品溶液的制备同“2.1.1”“2.1.2”项。

2.3.2 色谱条件 色谱条件同“2.1.3”项。

2.3.3 线性关系考察 精密吸取“2.3.1”项下混合对照品溶液适量,置 5 mL 量瓶中,用 70%甲醇水溶液稀释至刻度,制成 5 个不同质量浓度的对照品溶液,按“2.3.2”项下色谱条件测定,以峰面积为纵坐标(Y),各对照品质量浓度为横坐标(X)进行回归,结果见表 6。

表 6 狭叶薰衣草中 5 个成分的线性关系考察结果

Table 6 Results of linear relationship examination of five components in *L. angustifolia*

化学成分	回归方程	<i>r</i>	线性范围/($\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$)
绿原酸	$Y=15\,510\,X-3\,798.9$	0.999 8	0.565~36.180
木犀草苷	$Y=46\,664\,X-16\,412$	0.999 9	0.299~76.500
迷迭香酸	$Y=27\,268\,X+7\,198.2$	0.999 9	0.173~353.800
木犀草素	$Y=74\,891\,X+1\,112.7$	0.999 9	0.026~52.900
芹菜素	$Y=67\,749\,X-820.04$	0.999 9	0.028~57.100

2.3.4 精密度考察 精密吸取适量“2.3.1”项下混合对照品溶液,按“2.3.2”项下色谱条件连续测定 6 次,记录绿原酸、木犀草苷、迷迭香酸、木犀草素及芹菜素峰面积,计算得 5 个化合物日内精密度 RSD 依次为 0.35%、0.09%、0.07%、0.11%、0.22%,表明仪器日内精密度良好。

精密吸取适量“2.3.1”项下混合对照品溶液,按“2.3.2”项下色谱条件连续测定 6 次,连续 3 d,记录 5 个化合物的峰面积,计算得 5 个化合物日间精密度 RSD 依次为 0.39%、0.13%、0.11%、0.14%、0.17%,表明仪器日间精密度良好。

2.3.5 重复性考察 取同一批狭叶薰衣草样品(xyc-3),按“2.3.1”项下方法平行制备 6 份供试品溶液,按“2.3.2”项下色谱条件测定,计算得样品中绿原酸、木犀草苷、迷迭香酸、木犀草素及芹菜素的质量分数依次为 0.45、0.27、1.30、0.02、0.14 mg/g, RSD 依次为 0.73%、1.96%、0.89%、3.70%、2.62%,表明该方法重复性良好。

2.3.6 稳定性考察 取同一供试品溶液(xyc-3),按“2.3.1”项下方法平行制备供试品溶液,分别于

0、2、4、8、12、24 h 按“2.3.2”项下色谱条件测定,计算得绿原酸、木犀草苷、迷迭香酸、木犀草素及芹菜素的含量 RSD 依次为 0.81%、0.81%、0.63%、4.03%、1.11%,表示供试品溶液在 24 h 内测定稳定。

2.3.7 加样回收率考察 取 9 份已知含量的狭叶薰衣草样品(xyc-2)粉末约 1.0 g,精密称定,分别加入低、中、高 3 种不同质量浓度的混合对照品溶液适量,用 70%甲醇水溶液补足至 50 mL,按“2.3.1”项下方法制备供试品溶液,按“2.3.2”项下色谱条件测定,计算得加样回收率,5 个成分的平均加样回收率为 97.1%~100.3%,RSD 均小于 4.1%,表明该方法回收率良好。

2.3.8 样品含量测定 取不同批次狭叶薰衣草粉末,按“2.3.1”项下方法制备供试品溶液,按“2.3.2”项下色谱条件测定,记录峰面积并按标准曲线法计算各主要色谱峰的含量,结果见表 7。结果表明,受产地生长环境、干燥方式及储藏条件的影响,不同批次狭叶薰衣草各成分含量差异较大,波动明显。15 批狭叶薰衣草药材中绿原酸质量分数为 0.208~

表 7 各成分含量测定结果

Table 7 Measurement results of component contents

编号	质量分数/(mg·g ⁻¹)				
	绿原酸	木犀草苷	迷迭香酸	木犀草素	芹菜素
xye-1	0.470	0.238	1.429	0.038	0.174
xye-2	0.225	0.142	1.033	0.053	0.158
xye-3	0.471	0.242	1.306	0.018	0.144
xye-4	0.362	0.420	3.095	0.059	0.145
xye-5	0.490	0.067	1.361	0.021	0.253
xye-6	0.208	0.115	1.635	0.230	0.481
xye-7	0.214	0.118	0.867	0.175	0.402
xye-8	0.331	0.150	1.048	0.043	0.266
xye-9	0.355	0.221	0.574	0.037	0.221
xye-10	0.346	0.223	0.380	0.034	0.212
xye-11	0.357	0.183	1.231	0.059	0.276
xye-12	0.365	0.241	0.673	0.043	0.245
xye-13	0.371	0.250	0.701	0.052	0.250
xye-14	0.350	0.209	0.948	0.064	0.279
xye-15	0.293	0.193	0.427	0.037	0.194
平均值	0.347	0.201	1.114	0.064	0.247

0.490 mg/g, 平均值为 0.347 mg/g; 木犀草苷质量分数为 0.067~0.420 mg/g, 平均值为 0.201 mg/g; 迷迭香酸质量分数为 0.380~3.095 mg/g, 平均值为 1.114 mg/g; 木犀草素质量分数为 0.018~0.230 mg/g, 平均值为 0.064 mg/g; 芹菜素质量分数为 0.144~0.481 mg/g, 平均值为 0.247 mg/g。

3 讨论

本实验在研究前期进行色谱条件优化时, 对狭叶薰衣草供试品溶液在 190~400 nm 紫外-可见光全波长扫描, 结果表明 350 nm 下色谱峰的数目、峰形和分离度比较好, 对指纹图谱的研究更合适, 故本研究选择 350 nm 作为检测波长; 此外本实验为了寻求较优的色谱条件, 先后考察了不同提取方式(加热回流提取、超声提取), 不同提取溶剂(100%、70%、60%、50%、30%甲醇), 不同的提取时间(30、45、60 min), 不同流动相与溶剂的配比(甲醇-0.1%磷酸水、甲醇-0.1%甲酸水、甲醇-水、乙腈-水、乙腈-0.1%磷酸水、乙腈-0.1%甲酸水)、柱温(25、30、35 ℃)、体积流量(0.6、0.8、1.0 mL/min)下所得色谱结果的色谱峰数目、峰形以及分离度。结果表明, 选择 30 ℃柱温, 体积流量 0.6 mL/min, 流动相体系为乙腈-0.1%磷酸水, 70%甲醇超声 30 min 提取的供试品溶液时, 所得色谱峰的分离效果较好、分离度高。综上, 基于已确定的 HPLC 色谱条件及

样品制备方法, 建立狭叶薰衣草药材指纹图谱。

本实验对 15 批狭叶薰衣草指纹图谱进行研究, 结合化学模式识别技术, 实现对狭叶薰衣草质量的全面、客观评价。结果表明新疆不同地区的狭叶薰衣草化学成分组成较为相似, 但各批次样品之间化学成分含量存在一定差异。HCA 热图结果显示, 狭叶薰衣草样品聚为 3 类, 霍城 xye-4 聚为一类, 吉木萨尔 xye-6 和伊犁 xye-7 聚为一类, 其他 12 批地区狭叶薰衣草聚为一类, 存在产地交叉现象, 说明同一产区、不同产地狭叶薰衣草药材质量均存在差异。结合含量测定可知霍城 xye-4 这类聚类中木犀草苷和迷迭香酸含量普遍较高, 吉木萨尔 xye-6 和伊犁 xye-7 这类聚类中木犀草素和芹菜素含量普遍较高, 其他 12 批地区狭叶薰衣草这类聚类中绿原酸含量普遍较高。PCA 结果进一步显示新疆霍城 xye-4 的狭叶薰衣草药材质量较好, 可能与霍城种植区内土壤土质松软, 略微偏碱性, 与地中海相类似的逆温带气候和地理条件的条件有关^[17]。

OPLS-DA 结果表明木犀草素、迷迭香酸、芹菜素和未知峰 9、3、7、5 是影响狭叶薰衣草质量的主要因素, 未知成分有待后续进一步研究指认。含量测定结果表明绿原酸、木犀草苷、迷迭香酸、木犀草素、芹菜素在不同地区之间存在显著差异, 木犀草苷和迷迭香酸含量为霍城地区较高, 木犀草素和芹菜素含量为吉木萨尔地区高, 绿原酸含量为伊犁地区较高, 与 PCA 分析与 OPLS-DA 分析结果大致一致。综合评价显示, 霍城产狭叶薰衣草的质量优势主要体现在其较高的迷迭香酸含量上。鉴于迷迭香酸已被证实具有显著的抗炎及抗氧化活性^[18-19], 这一差异可能是霍城产区药材品质更优的关键因素。

本实验通过 HPLC 技术建立了狭叶薰衣草指纹图谱, 结合化学模式识别法对新疆不同地区狭叶薰衣草的质量进行了综合评价; 同时, 基于 HPLC 方法同步测定了 5 种特征成分的含量, 筛选得到了影响狭叶薰衣草各批次间的显著性差异成分, 结果表明, 所收集的 15 批狭叶薰衣草以新疆霍城地区质量较优。但需要注意的是, 受样本采集条件限制, 本研究涉及的部分产地样本数量相对较少(部分地区仅有单一样本), 在不同地区间的代表性和统计学分布上存在一定的不均衡性, 后续仍需通过扩大样本量进一步验证。尽管如此, 该研究有效补充了关于不同产区狭叶薰衣草有效成分系统分析方向的空

缺,所建立的HPLC指纹图谱及多成分含量测定方法,可清晰反映狭叶薰衣草中主要成分的特征,方法简便、准确、重复性好,可为狭叶薰衣草的整体质量评价及相关质量标准的完善提供参考。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 韩凯乐, 张卫明, 杨建新, 等. 伊犁河谷有机薰衣草栽培技术 [J]. 中国野生植物资源, 2013, 32(5): 59-61.
- [2] 李慕春, 曹雪琴, 买吾兰江·买提努尔. 基于指纹图谱和化学计量学的两种薰衣草差异研究 [J]. 中国野生植物资源, 2025, 44(4): 18-26.
- [3] 欧文, 张海燕, 汪镇朝, 等. 薰衣草挥发油的化学成分及药理作用研究进展 [J]. 中成药, 2022, 44(1): 170-176.
- [4] 王伟娥, 田丽华, 张会竹, 等. 薰衣草有效成分研究进展 [J]. 山东化工, 2020, 49(9): 55-56.
- [5] 陈莘雨, 陈新梅. 薰衣草化学成分与药理作用研究进展 [J]. 中华中医药杂志, 2022, 37(3): 1600-1604.
- [6] Yeung K S, Hernandez M, Mao J J, *et al.* Herbal medicine for depression and anxiety: A systematic review with assessment of potential psycho-oncologic relevance [J]. *Phytother Res*, 2018, 32(5): 865-891.
- [7] Linck V M, da Silva A L, Figueiró M, *et al.* Effects of inhaled linalool in anxiety, social interaction and aggressive behavior in mice [J]. *Phytomedicine*, 2010, 17(8/9): 679-683.
- [8] Sayout A, Ouarhach A, Rabie R, *et al.* Evaluation of antibacterial activity of *Lavandula pedunculata* subsp. *Atlantica* (Braun-blanc) Romo essential oil and selected terpenoids against resistant bacteria strains-structure-activity relationships [J]. *Chem Biodivers*, 2020, 17(1): e1900496.
- [9] 单孔荣, 王红丽, 姚乃捷, 等. 薰衣草精油与罗勒精油对痤疮致病菌的体外抑菌作用研究 [J]. 广东药科大学学报, 2017, 33(5): 677-680.
- [10] Huang M Y, Liao M H, Wang Y K, *et al.* Effect of lavender essential oil on LPS-stimulated inflammation [J]. *Am J Chin Med*, 2012, 40(4): 845-859.
- [11] Zhao C Z, Sun J B, Fang C Y, *et al.* 1, 8-cineol attenuates LPS-induced acute pulmonary inflammation in mice [J]. *Inflammation*, 2014, 37(2): 566-572.
- [12] 赵鑫, 鲍其冷, 王改香. 薰衣草精油成分分析及其抗菌和抗氧化活性研究 [J]. 日用化学品科学, 2013, 36(4): 32-34.
- [13] Kozics K, Srancikova A, Sedlackova E, *et al.* Antioxidant potential of essential oil from *Lavandula angustifolia* in *in vitro* and *ex vivo* cultured liver cells [J]. *Neoplasma*, 2017, 64(4): 485-493.
- [14] Hritcu L, Cioanca O, Hancianu M. Effects of lavender oil inhalation on improving scopolamine-induced spatial memory impairment in laboratory rats [J]. *Phytomedicine*, 2012, 19(6): 529-534.
- [15] Velasco-Rodríguez R, Pérez-Hernández M G, Maturano-Melgoza J A, *et al.* The effect of aromatherapy with lavender (*Lavandula angustifolia*) on serum melatonin levels [J]. *Complementary Ther Med*, 2019, 47: 102208.
- [16] Coelho L S, Correa-Netto N F, Masukawa M Y, *et al.* Inhaled *Lavandula angustifolia* essential oil inhibits consolidation of contextual- but not tone-fear conditioning in rats [J]. *J Ethnopharmacol*, 2018, 215: 34-41.
- [17] 古力娜·太来提, 任燕, 张莉. 新疆霍城薰衣草种植区土壤养分元素地球化学特征分析 [J]. 新疆地质, 2024, 42(4): 640-645.
- [18] Yi D D, Liu X, Wang M H, *et al.* Rosmarinic acid alleviated intestinal barrier damage caused by *Escherichia coli* by regulating the gut microbiota and inhibiting the NF- κ B signalling pathway in mice [J]. *Food Funct*, 2024, 15(23): 11740-11756.
- [19] Sim Y E, Kim C L, Kim D H, *et al.* Rosmarinic acid promotes cartilage regeneration through Sox9 induction via NF- κ B pathway inhibition in mouse osteoarthritis progression [J]. *Heliyon*, 2024, 10(19): e38936.

[责任编辑 时圣明]