

基于电子鼻结合 HS-GC-MS 技术分析北苍术麸炒过程中挥发性成分差异

肖清蓉, 钟凌云*, 吴苏容, 覃祖玲, 王 艳, 叶焱蓉, 谢 秦, 赵瑞轩, 刘宇豪

江西中医药大学, 江西 南昌 330044

摘 要: **目的** 通过比较北苍术 *Atractylodes chinensis* 生品与北苍术麸炒过程样品之间挥发性成分的组成和含量差异, 探究北苍术麸炒过程中挥发性成分的变化, 为麸炒北苍术的质量标准制定提供依据。 **方法** 采用电子鼻识别北苍术生品与北苍术麸炒过程样品的气味, 联合顶空进样气相色谱质谱法 (headspace sampling gas chromatography-mass spectrometry, HS-GC-MS) 检测北苍术生品与北苍术麸炒过程样品的挥发性成分。采用峰面积归一化法测定各成分的相对质量分数, 通过 SIMCA 14.1 软件对所得样品数据进行主成分分析 (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), 根据变量重要性投影 (variable importance in projection, VIP) 值 >1 且 $P < 0.05$ 筛选得到的差异性成分; 应用短时间序列表达挖掘器 (short time-series expression miner, STEM) 对北苍术麸炒过程中挥发性成分进行分析。 **结果** 电子鼻检测结果显示, 生品和麸炒品气味差别大, 但麸炒过程取样的麸炒品差异小, 差异主要体现在传感器 S1、S2、S4~S6、S11 ($P < 0.05$)。从北苍术生品与北苍术麸炒过程样品中共鉴定出 76 个化合物, 其中北苍术生品及北苍术麸炒过程 6 个样品分别鉴定出 43、46、46、51、49、54、52 个化合物。生品与炮制不及间存在 8 个差异性成分; 生品与炮制适中间存在 10 个差异性成分; 生品与炮制太过间存在 8 个差异性成分; 炮制不及与炮制适中间存在 14 个差异性成分; 炮制不及与炮制太过间存在 10 个差异性成分; 炮制适中与炮制太过间存在 4 个差异性成分。STEM 结果表明, 检测出的挥发性成分可划分成 8 种变化趋势, 且在 2 种趋势模型中有显著性富集, 其中 α -蒎烯、水芹烯、4-异丙基甲苯、罗勒烯、 β -倍半水芹烯等挥发性成分带有特殊香气并随着麸炒时间的增加而发生变化。 **结论** 北苍术麸炒过程中挥发性成分类别的比例和所含物质都会随炮制过程而有所变化, 大部分挥发性成分含量发生了明显变化, 其中 β -倍半水芹烯、水芹烯、 β -榄香烯等成分可作为北苍术麸炒过程挥发性成分的候选差异性标志物。

关键词: 北苍术; 麸炒过程; 电子鼻; HS-GC-MS; 短时间序列表达挖掘器; 挥发性成分; β -倍半水芹烯; 水芹烯; β -榄香烯
中图分类号: R283.6 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-2670(2025)21-7713-12

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2025.21.006

Differences analysis in volatile components during stir-frying with bran process of *Atractylodes chinensis* based on technology of electronic nose combined with HS-GC-MS

XIAO Qingrong, ZHONG Lingyun, WU Surong, QIN Zuling, WANG Yan, YE Yanrong, XIE Qin, ZHAO Ruixuan, LIU Yuhao

Jiangxi University of Chinese Medicine, Nanchang 330044, China

Abstract: **Objective** To investigate the changes in volatile components during the stir-frying with bran process of *Atractylodes chinensis* by comparing the composition and content difference of volatile components between raw *A. chinensis* and samples at different bran-fried stages, and to provide a basis for establishing quality standards for bran-fried *A. chinensis*. **Methods** An electronic

收稿日期: 2025-06-18

基金项目: 国家重点研发计划“中医药现代化研究”重点专项 (2023YFC3504205); 国家自然科学基金资助项目 (82360771); 特色炮制技术规律发掘——麸制 (GZY-KJS-2022-051); 江西省中医药产业科技创新联合体产业链协同攻关项目 (20224BBG72001); 江西省自然科学基金项目 (20224ACB206048); 全国老药工传承工作室 (国中医药人教函 (2024) 255 号); 中药炮制技术传承创新团队 (CXTD22003); 中药炮制 (爇法) 等关键技术重点研究室 (赣中医药科教字 (2022) 8 号); 中药炮制传承创新与转化江西省重点实验室 (2024SSY07091); 江西省标准创新基地 (医药); 江西中医药流派调查研究项目; 附子系列产品开发转化; “樟帮”特色中药饮片炮制规范标准研究 (20223AAG02021)

作者简介: 肖清蓉, 硕士研究生, 从事中药炮制机制及其药效研究。E-mail: 2393498472@qq.com

***通信作者:** 钟凌云, 博士生导师, 教授, 主要从事中药炮制机制及其药效研究。E-mail: ly1638163@163.com

nose was used to identify the odor differences between raw *A. chinensis* and samples during the bran-fried process, combined with headspace sampling gas chromatography-mass spectrometry (HS-GC-MS) to detect volatile components. The relative mass fractions of each component were determined by the peak area normalization method. Principal component analysis (PCA) and orthogonal partial least squares-discriminant analysis (OPLS-DA) were performed on the sample data using SIMCA 14.1 software. Differential components were screened based on variable importance in projection (VIP) values > 1 and $P < 0.05$. The short time-series expression miner (STEM) was applied to analyze the volatile components during the bran-fried process. **Results** Electronic nose detection showed significant odor differences between raw and bran-fried samples, while differences among bran-fried samples at different stages were minimal. The main differences were reflected in sensors S1, S2, S4—S6, and S11 ($P < 0.05$). A total of 76 compounds were identified in raw *A. chinensis* and bran-fried process samples, with 43, 46, 46, 51, 49, 54, and 52 compounds identified in the raw material and six bran-fried process samples, respectively. There were eight differential components between raw and under-fried samples, 10 between raw and moderately-fried samples, eight between raw and over-fried samples, 14 between under-fried and moderately-fried samples, 10 between under-fried and over-fried samples, and four between moderately-fried and over-fried samples. STEM analysis showed that the detected volatile components could be divided into eight change trends, with significant enrichment in two trend models. Volatile components with special aromas, such as α -pinene, phellandrene, 4-isopropyltoluene, ocimene, and β -sesquiphellandrene have changed with prolonged bran-fried time. **Conclusion** The proportions of volatile component categories and the substances contained during the bran-fried process of *A. chinensis* change with the processing procedure, with significant content changes in most volatile components. Components such as β -sesquiphellandrene, phellandrene, and β -elemene can serve as candidate differential markers for volatile components during the bran-fried process of *A. chinensis*.

Key words: *Atractylodes chinensis* (DC.) Koidz.; stir-frying with bran process; electronic nose; HS-GC-MS; short time-series expression miner; volatile components; β -sesquiphellandrene; phellandrene; β -elemene

苍术为菊科苍术属植物茅苍术 *Atractylodes lancea* (Thunb.) DC. 或北苍术 *A. chinensis* (DC.) Koidz. 的干燥根茎, 为温燥之性代表药, 始载于《神农本草经》^[1], 列为上品。其味辛、苦, 性温。归脾、胃、肝经, 有燥湿健脾、祛风散寒、明目的功效^[2]。苍术属于芳香化湿药, 茅苍术香气特异, 北苍术香气稍淡, 麸炒后苍术香气转变为焦香气。苍术主要化学成分为倍半萜类、烯炔类、三萜及甾体类、芳香苷类等^[3], 其中挥发性成分作为药效的重要物质基础, 在苍术研究内容中占有重要地位^[4]。近年来研究多关注苍术中挥发性成分的变化对药效的影响^[5]。

中药麸炒法历史悠久, 最早可追溯至东汉末年的《华氏中藏经》^[6]中“枳实, 麸炒去瓢”的记载。麸炒法是将净制或切制的药物用麦麸熏炒^[7]。麦麸味甘性平, 明代《本草蒙筌》^[8]记载其有缓和药性的作用, 而其中麸炒法正是苍术最常用的制法。目前, 研究多集中于麸炒工艺的优化^[9-10]、不同药物麸炒前后成分变化及药效变化^[11-14]等多方面, 对苍术麸炒过程研究较少, 集中于果糖和 5-羟甲基糠醛的转化机制^[15], 对于挥发性成分动态变化的系统性研究仍相对缺乏。因此, 本研究旨在填补这一空白, 系统分析苍术麸炒过程中挥发性成分的动态变化, 以揭示其炮制机制。

随着现代分析技术的发展, 电子鼻和顶空进样气相色谱-质谱法 (headspace sampling gas chromatography-mass spectrometry, HS-GC-MS) 在中药研究中得到广泛应用。电子鼻以模仿人类嗅觉机制, 能够快速感知气味差异, 用于中药品质评估和炮制差异识别^[16]。HS-GC-MS 是成熟的挥发性物质检测技术, 能够检测固态物体挥发性成分, 具有操作简便、快速、经济安全、无需溶剂等优点, 可对样品中的挥发性成分进行定性和定量分析。电子鼻与 HS-GC-MS 结合应用, 可以更加全面、准确地揭示中药气味的变化及其物质基础, 在挥发性成分多的药材中联合应用较为常见^[17-18]。鉴于苍术中丰富的挥发性成分是药材气味特征、药效的重要体现, 系统研究其不同炮制阶段中的动态变化具有重要理论和实践价值。这不仅有助于揭示麸炒对苍术气味和品质的改善机制, 还能对中药炮制工艺的科学规范提供可靠的技术依据。本研究运用电子鼻及 HS-GC-MS 技术, 深入剖析北苍术麸炒过程中挥发性成分的演变规律, 实则是从微观层面揭示气味变化的物质基础。旨在精准鉴别北苍术生品与麸炒品, 明晰两者气味强度及挥发性成分的差异特征, 不仅能为北苍术炮制前后的鉴别提供精准的气味学依据, 还能从气味变化的角度, 探究麸炒缓和苍术燥性、优化药效的内在机制, 为中药气味鉴定从

经验判断向科学化、标准化迈进提供有力支撑，进一步完善中药鉴定体系与质量控制标准。

1 仪器与材料

1.1 仪器

7890A 型气相色谱-5975C 型质谱联用仪，配备 Mass Hunter 质谱工作站和美国国家标准与技术研究院（NIST）17.L 标准谱图库，美国 Agilent 公司；Super Nose 型电子鼻，上海瑞盼国际贸易有限公司；YF-1118 型高速中药粉碎机，瑞安市永历制药机械有限公司；TY2001 型万分之一电子天平，上海衡平仪器仪表有限公司。

1.2 药材

北苍术（批号 202420）购于江西江中中药饮片有限公司，麦麸（批号 240410）购于东莞市德康堂医药有限公司，经江西中医药大学龚千锋教授鉴定，北苍术为菊科苍术属多年生草本植物北苍术 *A. chinensis* (DC.) Koidz. 的干燥根茎，麦麸为禾本科小

麦属植物小麦 *Triticum aestivum* L. 麦粒中的外种皮。

2 方法与结果

2.1 北苍术样品制备

2.1.1 生北苍术 取北苍术饮片适量，粉碎过三号筛，备用。

2.1.2 麸炒北苍术 麦麸用量、炒制时间和炒制温度为课题组前期研究所得最佳条件优化而得，每 100 千克北苍术，用麦麸 10 kg。取北苍术饮片 1 kg，于锅温 220 ℃ 下投入麦麸，待冒烟时投入净北苍术片，不断翻炒，炒制 9 min，每隔 1.5 min 采用随机取样法取样 150~200 g，筛去麦麸，放凉，即得麸炒北苍术炮制过程饮片样品，重复 3 次。北苍术不同饮片外观见图 1。经老药工的鉴别，将不同炮制程度的北苍术饮片样品分为 4 大类，分别为生品、炮制不及（麸炒 1.5~4.5 min）、炮制适中（麸炒 6.0 min）、炮制太过（麸炒 7.5~9.0 min）。取适量饮片样品粉碎，过三号筛，备用。



自左至右分别为北苍术生品及麸炒 1.5、3.0、4.5、6.0、7.5、9.0 min 炮制过程饮片样品。
From left to right: raw *A. chinensis* and its medicinal slices stir-fried with wheat bran for 1.5, 3.0, 4.5, 6.0, 7.5, 9.0 min respectively.

图 1 北苍术生品及炮制过程中饮片性状变化

Fig. 1 Morphological changes of raw *A. chinensis* slices and its decoction pieces during processing

2.2 基于电子鼻技术分析检测北苍术生品及其炮制过程中样品的整体气味

2.2.1 电子鼻检测条件 分别精确称取北苍术生品、北苍术麸炒过程中样品粉末（过三号筛）2.0 g，置于 40 mL 电子鼻样品瓶中，静置，使顶空瓶中充盈样品气体，在室温下用电子鼻检测。设置清洗时间 180 s，进气体积流量 0.6 L/min，检测时间 120 s，进样量 10 mL，平行测定 3 组样品。14 个传感器性能描述见表 1^[18]。

2.2.2 北苍术生品及其炮制过程中样品的整体气味雷达图分析 将 Super Nose 型电子鼻采集的北苍术及其麸炒过程取样的麸炒北苍术样品的传感器数据分别输入 Origin Pro 2021 软件进行分析。采用 Origin 2021 软件对上述样品的平均响应值进行分析，绘制整体气味信息雷达图，结果见图 2。14 根传感器对各样品气味响应不同，其中生品和麸炒品气味差别大，但麸炒过程取样的麸炒北苍术样品差异小。结果显示，上述 7 个样品的气味均存在差异，

表 1 电子鼻传感器阵列及性能描述

Table1 Electronic nose sensor arrays and performance description

编号	化合物种类	编号	化合物种类
S1	芳香族化合物类	S8	胺类
S2	氮氧化合物，低分子胺类	S9	氢气类
S3	硫化物类	S10	呋喃类
S4	有机酸酯和萜类	S11	挥发性有机化合物
S5	萜类、酯类	S12	硫化物
S6	甾醇类、三萜类	S13	乙烯
S7	脂肪烃含氧衍生物类	S14	内酯类、吡嗪类

主要体现在传感器 S1、S2、S4~S6、S11 ($P<0.05$)，其余传感器差异较小。比较北苍术及北苍术麸炒过程样品在 6 个传感器上的响应值，发现生品初始响应强度较高，尤其在易挥发成分相关的传感器 S5 上表现突出，反映其挥发油类成分在初期快速释放的特点，但后续响应显著下降，这一动态变化与“麸炒缓和燥性”相一致。结果见表 2。

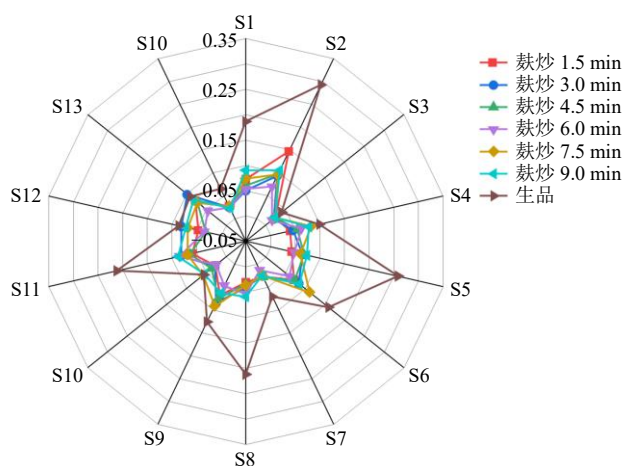


图 2 北苍术及北苍术麸炒过程样品气味信息雷达
Fig. 2 Radar chart of volatile flavor profiles in raw and bran-fried *A. chinensis* samples

表 2 北苍术及北苍术麸炒过程样品差异传感器响应值比较

Table 2 Comparison of differential sensor response values of raw and bran-fried *A. chinensis* samples

样品	传感器响应值					
	S1	S2	S4	S5	S6	S11
生品	0.186±0.061	0.292±0.189	0.099±0.033	0.259±0.188	0.159±0.037	0.211±0.096
麸炒1.5 min	0.072±0.025	0.146±0.008	0.040±0.004	0.043±0.006	0.072±0.014	0.059±0.012
麸炒3.0 min	0.050±0.004	0.093±0.011	0.046±0.002	0.066±0.005	0.084±0.009	0.081±0.006
麸炒4.5 min	0.060±0.009	0.097±0.004	0.055±0.001	0.068±0.006	0.074±0.003	0.064±0.009
麸炒6.0 min	0.053±0.009	0.070±0.016	0.063±0.008	0.049±0.010	0.060±0.012	0.084±0.012
麸炒7.5 min	0.073±0.006	0.096±0.017	0.083±0.013	0.061±0.012	0.111±0.011	0.069±0.018
麸炒9.0 min	0.090±0.008	0.106±0.004	0.078±0.004	0.074±0.003	0.086±0.008	0.087±0.008

进样量 1.0 μL , 载气为高纯氦气, 溶剂延迟时间 3 min; 质谱条件为电子轰击离子源 (EI), 电子碰撞能量 70 eV, 接口温度 280 $^{\circ}\text{C}$, 离子源温度 230 $^{\circ}\text{C}$, 四极杆温度 150 $^{\circ}\text{C}$ 。全扫描模式, 扫描范围 m/z 20~650。

2.3.3 北苍术麸炒过程中的挥发性成分分析 按照“2.3.2”项下方法检测, 得北苍术及北苍术麸炒过程饮片总离子流图, 结果见图 3。将生成的各样品图谱导入 Data Analysis 2013 软件中进行积分, 与美国国家标准与技术研究院 (NIST) 20.L 标准谱图库比对, 导出鉴定结果, 对总离子流图中的各色谱峰进行质谱扫描后, 通过检索比对 NIST 20.L, 导出谱库检索报告, 筛选出匹配度>80%的化合物, 通过 CAS 号进行化合物鉴定, 共鉴定出 76 个化合物, 其中北苍术生品 43 个; 麸炒 1.5 min 样品 46 个; 麸炒 3.0 min 样品 46 个; 麸炒 4.5 min 样品 51 个; 麸炒 6.0 min 样品 49 个; 麸炒 7.5 min 样品 54 个; 麸炒 9.0 min 样品 52 个; 北苍术生品及麸炒北苍术炮

2.3 HS-GC-MS 技术分析检测北苍术麸炒过程中的挥发性成分

2.3.1 顶空进样条件 精密称取北苍术生品、北苍术麸炒过程样品粉末 (过三号筛) 各 1.0 g, 放入 20 mL 顶空样品瓶中, 平行 3 次, 密封后依次放于样品盘上。样品瓶加热温度 120 $^{\circ}\text{C}$, 定量环温度 130 $^{\circ}\text{C}$, 传输线温度 140 $^{\circ}\text{C}$, 样品瓶平衡时间 15 min, 进行分析。

2.3.2 检测条件 色谱条件为 HP-5 石英毛细管色谱柱 (30 m $\times$ 0.25 mm, 0.25 μm), 程序升温 (初始温度 50 $^{\circ}\text{C}$, 保持 2 min; 以 10 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 的速度升温至 120 $^{\circ}\text{C}$; 以 2.5 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 的速度升温至 170 $^{\circ}\text{C}$; 以 10 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 的速度升温至 240 $^{\circ}\text{C}$; 维持 3 min), 体积流量 1 mL/min, 进样口温度 280 $^{\circ}\text{C}$, 分流比 30:1,

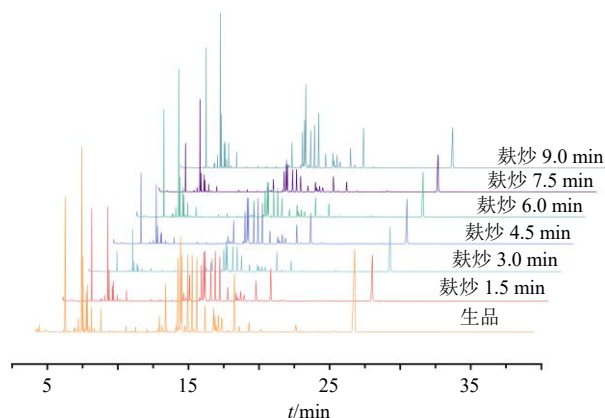


图 3 北苍术及北苍术麸炒过程样品的 HS-GC-MS 总离子流图

Fig. 3 Total ion chromatograms by HS-GC-MS for raw and bran-fried *A. chinensis* samples

制过程样品共有挥发性成分 34 种, 麸炒北苍术炮制过程样品共有挥发性成分 36 种, 主要为萜类、烯烃类成分, 北苍术麸炒前后化合物基本不变, 结果见表 3。通过对上述样品的挥发性成分按照化合物类别

表 3 北苍术及北苍术麸炒过程样品挥发性成分的 HS-GC-MS 鉴定

Table 3 Identification of volatile components in raw and bran-fried *A. chinensis* samples by HS-GC-MS

峰号	t/min	化学名	分子式	理论相对 分子质量	CAS	相对质量分数/%							类别
						生品	麸炒	麸炒	麸炒	麸炒	麸炒	麸炒	
							1.5 min	3.0 min	4.5 min	6.0 min	7.5 min	9.0 min	
1	3.257 4	2-甲基四氢呋喃-3-酮	C ₅ H ₈ O ₂	100.116	3188-00-9	—	—	—	—	—	0.033	—	酮
2	3.506 3	2-甲基吡嗪	C ₅ H ₆ N ₂	94.115	109-08-0	—	—	—	—	—	—	0.300	杂环
3	3.662 6	糠醛	C ₅ H ₄ O ₂	96.084	98-01-1	0.106	0.253	0.120	0.062	0.090	0.081	0.195	醛
4	4.039 5	糠醇	C ₅ H ₆ O ₂	98.100	98-00-0	—	—	—	—	—	—	0.116	醇
5	4.885 4	2,6-二甲基吡嗪	C ₆ H ₈ N ₂	108.141	108-50-9	—	—	—	—	—	—	0.953	杂环
6	5.148 4	α -thujene	C ₁₀ H ₁₆	136.234	2867-05-2	0.102	0.089	0.071	0.067	0.091	0.111	0.101	萜
7	5.262 0	α -蒎烯	C ₁₀ H ₁₆	136.234	80-56-8	6.825	4.453	3.472	4.822	7.453	7.923	7.826	萜
8	5.489 5	α -fenchene	C ₁₀ H ₁₆	136.234	471-84-1	—	—	—	—	0.077	0.067	0.113	萜
9	5.518 2	茨烯	C ₁₀ H ₁₆	136.234	79-92-5	—	—	—	—	0.072	0.072	—	萜
10	5.731 4	苯甲醛	C ₇ H ₆ O	106.122	100-52-7	—	0.089	—	—	—	—	—	醛
11	5.937 4	桉烯	C ₁₀ H ₁₆	136.234	3387-41-5	0.166	0.112	0.087	0.100	0.191	0.259	0.187	萜
12	5.994 2	β -蒎烯	C ₁₀ H ₁₆	136.234	18172-67-3	0.192	0.143	0.099	0.128	0.234	0.292	0.208	萜
13	6.221 7	月桂烯	C ₁₀ H ₁₆	136.234	123-35-3	0.561	0.431	0.296	0.285	0.606	0.744	0.585	萜
14	6.449 2	水芹烯	C ₁₀ H ₁₆	136.234	99-83-2	8.911	5.739	4.767	4.872	10.820	11.168	10.058	萜
15	6.548 7	(1S)-(+)-3-蒎烯	C ₁₀ H ₁₆	136.230	498-15-7	2.415	1.596	1.316	1.226	2.276	2.935	2.631	萜
16	6.655 3	α -松油烯	C ₁₀ H ₁₆	136.234	99-86-5	0.109	0.112	0.089	0.048	0.118	0.106	0.109	萜
17	6.790 4	4-异丙基甲苯	C ₁₀ H ₁₆	134.218	99-87-6	1.224	1.221	0.929	0.735	1.732	1.679	1.382	芳香烃
18	6.854 6	(+)-柠檬烯	C ₁₀ H ₁₆	136.234	5989-27-5	—	2.867	—	0.950	—	—	—	萜
19	6.996 5	trans- β -ocimene	C ₁₀ H ₁₆	136.234	3779-61-1	0.207	0.136	0.085	0.113	0.179	0.379	0.259	萜
20	7.124 5	2-苯基乙醛	C ₈ H ₈ O	120.148	122-78-1	0.052	0.062	—	—	0.035	—	—	醛
21	7.167 2	罗勒烯	C ₁₀ H ₁₆	136.234	13877-91-3	0.722	0.427	0.360	0.726	1.037	1.321	1.048	萜
22	7.352 0	γ -松油烯	C ₁₀ H ₁₆	136.234	99-85-4	0.239	0.187	0.113	0.089	0.138	0.161	0.158	萜
23	7.437 3	2-乙酰吡咯	C ₆ H ₇ NO	109.126	1072-83-9	—	0.328	0.099	0.026	0.037	0.049	0.167	杂环
24	7.700 4	2-乙基-3,6-二甲基吡嗪	C ₈ H ₁₂ N ₂	136.194	13360-65-1	—	—	—	—	—	—	0.092	杂环
25	7.835 4	蒎品油烯	C ₁₀ H ₁₆	136.234	586-62-9	0.685	0.656	0.602	0.729	0.729	0.993	0.937	萜
26	8.652 9	cyclene	C ₁₀ H ₁₆	136.234	508-32-7	—	—	—	—	—	0.031	—	烷烃
27	8.702 6	2,3-二氢-3,5-二羟基-6-甲基-4H-吡喃-4-酮	C ₆ H ₈ O ₄	144.125	28564-83-2	—	0.335	0.222	—	0.052	0.121	0.496	酮
28	9.356 7	4-异丙烯基甲苯	C ₁₀ H ₁₂	132.202	1195-32-0	0.039	0.047	0.078	—	0.046	0.037	0.044	芳香烃
29	10.167 0	2-异丙基-5-甲基茴香醚	C ₁₁ H ₁₆ O	164.244	1076-56-8	0.052	0.044	0.043	0.043	0.055	0.049	0.063	芳香醚
30	10.337 6	香芹酚甲醚	C ₁₁ H ₁₆ O	164.244	6379-73-3	0.196	0.192	0.186	0.178	0.285	0.216	0.212	芳香醚
31	11.176 4	1,7,7-三甲基双环[2.2.1]庚烷-2-基乙酸酯	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	196.286	92618-89-8	—	0.142	0.143	0.116	0.155	0.157	0.135	酯
32	11.460 8	猛杀威	C ₁₂ H ₁₇ NO ₂	207.269	2631-37-0	—	—	—	—	—	0.025	—	酯
33	11.923 0	香叶酸甲酯	C ₁₁ H ₁₈ O ₂	182.259	1189-09-9	0.107	0.134	0.148	0.112	0.094	0.077	0.095	酯
34	12.043 7	silphiperfol-5-ene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	138752-24-6	0.760	0.823	0.932	0.829	0.722	0.770	0.772	倍半萜
35	12.207 3	(-)-aristolene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	6831-16-9	0.339	0.408	0.427	0.357	0.299	0.340	0.336	倍半萜
36	12.242 7	巴伦西亚橘烯	C ₁₅ H ₂₄	204.351	4630-07-3	—	—	—	—	—	—	0.138	倍半萜
37	12.250 0	β -maaliene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	489-29-2	—	—	0.162	0.134	—	0.140	—	倍半萜
38	12.484 4	1-silphinene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	74284-57-4	2.770	3.028	3.422	2.993	2.553	2.759	2.720	倍半萜
39	12.584 1	2,6-octadiene,2,6-dimethyl-	C ₁₀ H ₁₈	138.250	2792-39-4	0.131	—	0.160	0.145	0.121	0.132	0.181	烯烃
40	13.230 8	缬草-4,7(11)-二烯	C ₁₅ H ₂₄	204.351	351222-66-7	—	0.426	—	—	—	—	0.352	倍半萜
41	13.237 9	α -guaiene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	3691-12-1	0.326	—	0.448	0.368	—	0.344	—	倍半萜

表 3 (续)

峰号	t/min	化学名	分子式	理论相对 分子质量	CAS	相对质量分数/%							类别
						生品	麸炒	麸炒	麸炒	麸炒	麸炒	麸炒	
							1.5 min	3.0 min	4.5 min	6.0 min	7.5 min	9.0 min	
42	13.365 9	modhephene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	68269-87-4	4.948	5.167	5.473	4.451	4.233	4.351	4.620	倍半萜
43	13.444 1	榄香烯	C ₁₅ H ₂₄	204.351	110823-68-2	—	—	—	—	—	—	0.398	倍半萜
44	13.536 5	berkheyaradulene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	65372-78-3	6.159	6.600	7.172	5.865	5.298	5.440	5.667	倍半萜
45	13.628 9	β-榄香烯	C ₁₅ H ₂₄	204.351	515-13-9	5.112	6.141	7.685	6.972	5.249	8.500	8.822	倍半萜
46	13.870 6	莎草烯	C ₁₅ H ₂₄	204.351	2387-78-2	0.414	0.340	0.285	0.292	0.284	0.387	0.268	倍半萜
47	13.955 9	cypera-2,4-二烯	C ₁₅ H ₂₂	202.335	50430-14-3	—	—	—	—	—	0.077	—	倍半萜
48	14.055 4	β-isocomene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	71596-72-0	5.135	5.562	5.968	4.318	4.388	—	4.697	倍半萜
49	14.218 9	2,6-dimethyl-6-(4-methyl-3-pentenyl) bicyclo[3.1.1]hept-2-ene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	17699-05-7	—	0.935	—	0.064	0.086	—	0.075	倍半萜
50	14.219 0	(E)-α-bergamotene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	13474-59-4	0.112	—	—	—	—	—	—	倍半萜
51	14.382 4	反式石竹烯	C ₁₅ H ₂₄	204.351	87-44-5	5.273	6.157	7.207	6.613	5.082	5.123	4.923	倍半萜
52	14.496 3	γ-elemene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	29873-99-2	—	—	0.219	0.232	—	0.199	0.135	倍半萜
53	14.716 6	germacrene B	C ₁₅ H ₂₄	204.351	15423-57-1	3.260	4.651	6.386	6.962	4.613	5.594	2.653	倍半萜
54	15.320 8	α-石竹烯	C ₁₅ H ₂₄	204.351	6753-98-6	1.624	1.888	2.158	2.057	1.611	1.609	1.529	倍半萜
55	15.932 1	2-isopropenyl-4a,8-dimethyl-1,2,3, 4,4a,5,6,7-octahydronaphthalene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	103827-22-1	1.575	1.407	1.902	1.534	2.049	2.053	1.959	烯烃
56	16.031 7	1-methyl-4-(6-methylhept-5-en-2- yl)cyclohexa-1,3-diene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	451-55-8	1.173	1.022	0.880	0.725	0.924	0.962	0.779	烯烃
57	16.131 1	α-姜黄烯	C ₁₅ H ₂₂	202.340	644-30-4	0.481	0.509	0.429	0.326	0.422	0.357	0.393	倍半萜
58	16.280 4	beta-selinene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	17066-67-0	1.292	1.630	1.771	2.489	1.877	1.635	1.604	倍半萜
59	16.529 4	γ-selinene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	515-17-3	—	—	1.571	—	1.502	—	—	倍半萜
60	16.536 4	(-)-β-花柏烯	C ₁₅ H ₂₄	204.351	18431-82-8	—	1.583	—	—	—	1.358	—	萜
61	16.913 2	β-bisabolene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	495-61-4	0.147	0.152	0.136	0.108	0.131	0.109	0.129	倍半萜
62	17.026 9	β-curcumene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	28976-67-2	0.093	—	—	—	0.092	0.092	0.083	倍半萜
63	17.311 3	(-)-10表带烯	C ₁₅ H ₂₄	204.351	41929-05-9	—	—	—	0.097	—	—	—	烯烃
64	17.410 7	β-倍半水芹烯	C ₁₅ H ₂₄	204.351	20307-83-9	4.392	—	—	2.921	3.349	3.061	3.584	倍半萜
65	17.773 3	eudesma-4(14),11-diene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	58893-88-2	0.449	—	—	—	—	—	—	倍半萜
66	17.773 5	(-)-异喇叭烯	C ₁₅ H ₂₄	204.351	95910-36-4	—	0.482	0.399	—	0.310	0.380	0.286	倍半萜
67	17.794 6	β-panasinsene	C ₁₅ H ₂₄	205.351	1000159-39-0	—	—	—	4.100	—	—	—	倍半萜
68	17.979 5	selina-3,7(11)-diene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	6813-21-4	—	—	0.123	0.147	—	0.101	—	倍半萜
69	18.747 2	β-vetivenene	C ₁₅ H ₂₂	202.335	27840-40-0	—	—	—	0.639	—	—	—	芳香烃
70	19.337 2	香橙烯	C ₁₅ H ₂₄	204.351	489-39-4	—	—	—	—	0.330	—	—	倍半萜
71	19.344 2	2-epi-trans-β-caryophyllene	C ₁₅ H ₂₄	204.351	68832-35-9	—	—	—	0.320	—	—	—	倍半萜
72	19.344 4	香树烯	C ₁₅ H ₂₄	204.351	25246-27-9	—	—	0.349	—	—	0.242	—	倍半萜
73	21.853 6	苍术酮	C ₁₅ H ₂₀ O	216.319	6989-21-5	0.524	0.351	—	9.714	3.490	0.216	—	酮
74	24.569 2	selina-4(15),7(11)-dien-8-one	C ₁₅ H ₂₂ O	218.330	1000424-42-8	—	—	—	1.141	—	—	—	倍半萜
75	25.990 8	苍术素	C ₁₃ H ₁₀ O	182.218	55290-63-6	17.126	17.691	16.287	9.814	13.536	10.431	12.887	炔
76	32.538 0	棕榈酸乙酯	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	284.477	628-97-7	—	—	—	0.057	—	—	—	酯

“—” 未检出或匹配度≤80%。

“—” means components that have not been detected or whose matching degree is less than 80%.

进行分类,结果显示,北苍术及其麸炒品中挥发性成分由酮类(3种)、杂环类(4种)、醛类(3种)、醇类(1种)、萜类(除倍半萜类,16种)、芳香烃类(3种)、烷烃类(1种)、芳香醚类(2种)、酯类(4种)、倍半萜类(34种)、烯烃类(4种)、炔类(1种)等12种类别组成,结果见表4。其中萜类和炔

表 4 北苍术及北苍术麸炒过程样品挥发性成分的种类及相对质量分数

Table 4 Types and relative mass fractions of volatile compounds in raw and bran-fried *A. chinensis* samples

化合物 类别	相对含量/%						
	生品	麸炒1.5 min	麸炒3.0 min	麸炒4.5 min	麸炒6.0 min	麸炒7.5 min	麸炒9.0 min
酮	0.524	0.686	0.222	9.714	3.543	0.370	0.496
杂环	0	0.328	0.099	0.026	0.037	0.049	1.512
醛	0.159	0.404	0.120	0.062	0.124	0.081	0.195
醇	0	0	0	0	0	0	0.116
萜	21.133	18.532	11.357	14.154	24.021	27.890	24.219
芳香烃	1.454	1.267	1.007	1.374	1.778	1.715	1.426
烷烃	0	0	0	0	0	0.031	0
芳香醚	0.248	0.236	0.229	0.221	0.340	0.265	0.275
酯	0.107	0.275	0.291	0.285	0.249	0.259	0.229
倍半萜	43.086	43.507	52.722	54.059	42.431	41.609	44.183
烯烃	2.879	2.429	2.941	2.501	3.094	3.147	2.920
炔	17.126	17.691	16.287	9.814	13.536	10.431	12.887

类是主要存在差异的化合物类别,表现为萜类化合物(除倍半萜类)在炮制过程中的相对百分含量先下降后上升,倍半萜类在炮制过程中相对百分含量先上升后下降,炔类(苍术素)化合物炮制后较生品相对百分含量减少但后期有所回涨,倍半萜类化合物在北苍术及麸炒品中含量最高,可能由于倍半萜类是北苍术挥发性成分中的主要类别^[19]。

2.3.4 北苍术麸炒过程差异性成分筛选 为了进一步寻找不同炮制方法引起北苍术生品及炮制过程饮片气味差异的相关挥发性成分,采用 SIMCA 14.1 软件对所制样品的挥发性成分进行主成分分析(principal component analysis, PCA)和正交偏最小二乘法-判别分析(orthogonal partial least squares-discriminant analysis, OPLS-DA),以 $VIP > 1$ 且 $P < 0.05$ 为标准筛选北苍术炮制过程中的差异性成分。

2.3.5 PCA 由于北苍术生品与北苍术麸炒过程样品之间挥发性成分种类的相对百分含量存在较大的差异,因此,为了确定各样品间的挥发性成分是造成北苍术麸炒过程气味差异的原因,所以将 7 个样品的所有挥发性成分数据导入 SIMCA 14.1 软件进行无监督 PCA,可得模型解释率参数 $R_X^2 = 0.763$,模型预测能力参数 $Q^2 = 0.411$,显示模型具备一定的预测能力,确保分析结果可靠。生北苍术所属样品聚集在一起,与北苍术炮制过程样品有着明显的区分,说明炮制过程中挥发性成分变化较大;同时炮制适中与炮制太过样品距离相近,说明两者挥发性成分存在差异不大,结果见图 4。从 PCA 得分图来看,生北苍术所属样品高度聚集在一起,与北苍

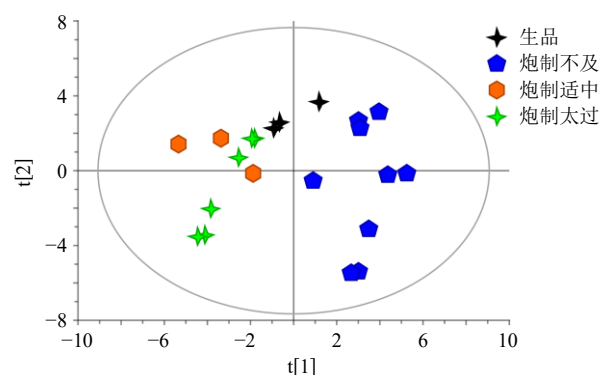


图 4 北苍术及北苍术麸炒过程样品的 PCA 得分图

Fig. 4 PCA score plot of raw and bran-fried *A. chinensis* samples

术炮制过程样品有着明显的区分,同时,炮制适中与炮制过当样品距离相近,结合挥发性成分分析发现,二者残留的稳定成分如苍术素在模型中的贡献度相似;而炮制不及的样品散开,可能是麸炒 1.5、3.0 min 样品由于短时热作用仅致表面挥发油轻度散失,而麸炒 4.5 min 样品正处于物理挥发向化学降解过渡阶段。

2.3.6 OPLS-DA 由 PCA 结果可知,北苍术生品与北苍术麸炒过程样品所属的挥发性成分,虽然存在一定的区分,但无法确定引起气味差异的相关挥发性成分。因此,在 PCA 基础上,进行有监督的 OPLS-DA,可得模型解释率参数 $R_X^2 = 0.991$ 和 $R_Y^2 = 0.995$,模型预测能力参数 $Q^2 = 0.933$ 。北苍术生品及麸炒北苍术炮制不及、炮制适中、炮制过当样品分别聚集在各自的区域,且呈现明显的 4 类,说明北苍术炮制过程中其挥发性成分发生明显的改变,且具有差

异性, 结果见图 5。

为了进一步说明北苍术炮制过程中其挥发性成

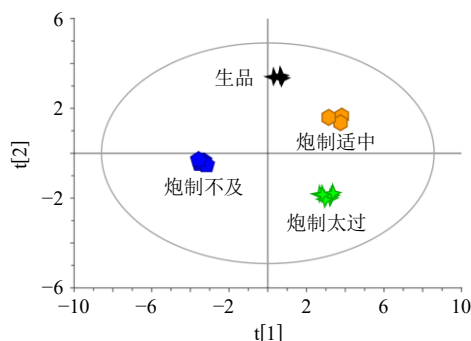


图 5 北苍术及北苍术麸炒过程样品的 OPLS-DA 得分图

Fig. 5 OPLS-DA score plot of raw and bran-fried *A. chinensis* samples

分, 再对北苍术生品及麸炒北苍术炮制不及、炮制适中、炮制过当样品进行两两组间 OPLS-DA 和 200 次置换检验, 6 组参数 R^2 、 Q^2 右侧数值均高于左侧, 且 Q^2 与纵坐标轴的交点为负值, 表明模型不存在过拟合, 不存在过拟合且质量稳定良好, 结果见图 6, 再次验证北苍术在麸炒过程中发生了明显变化。

2.3.7 差异性成分筛选 为了进一步明确北苍术生品及其麸炒品之间的差异性成分, 采用 OPLS-DA 模型对北苍术炮制过程中的挥发性成分进行分析, 以 $VIP > 1$ 且 $P < 0.05$ 为标准, 筛选差异性成分。由于北苍术生品与麸炒北苍术炮制不及、炮制适中、炮制过当样品之间存在挥发性成分差异, 为了减少组内无关变量对结果的干扰, 对 4 组之间进行差异性

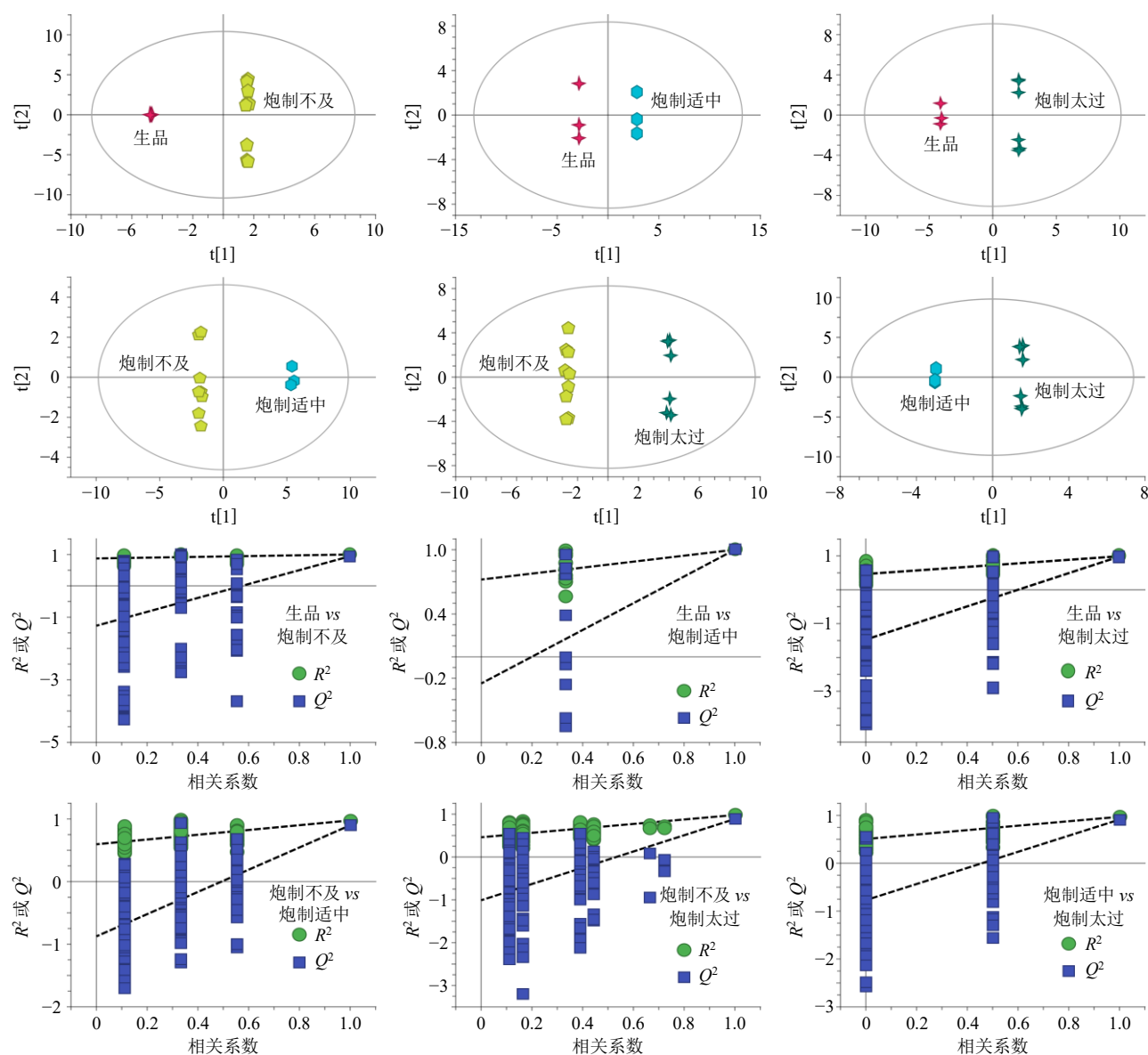


图 6 北苍术及北苍术麸炒过程样品两两 OPLS-DA 得分图与置换检验

Fig. 6 Pairwise OPLS-DA score plots and permutation tests for raw and bran-fried *A. chinensis* samples

成分筛选，以此寻找北苍术麸炒过程气味差异的相关挥发性成分，结果见表 5。北苍术生品与炮制不及间存在 8 个差异性成分，其中 4 个成分呈上升趋势，4 个成分呈下降趋势；北苍术生品与炮制适中存在 10 个差异性成分，其中 6 个成分呈上升趋势，4 个成分呈下降趋势；北苍术生品与炮制太过间存在 8 个差异性成分，其中 4 个成分呈上升趋势，

4 个成分呈下降趋势；炮制不及与炮制适中间存在 14 个差异性成分，其中 7 个成分呈上升趋势，7 个成分；炮制不及与炮制太过间存在 10 个差异性成分，其中 6 个成分呈上升趋势，4 个成分呈下降趋势；炮制适中与炮制太过间存在 4 个差异性成分，其中 1 个成分呈上升趋势，3 个成分呈下降趋势。

从生品与炮制各阶段对比来看，β-倍半水芹烯

表 5 北苍术生品及其不同炮制程度麸炒品的差异性成分

Table 5 Differential components between raw and bran-fried <i>A. chinensis</i> samples with different degrees of processing											
序号	化合物	生品vs炮制不及		生品vs炮制适中		生品vs炮制太过		炮制不及vs炮制适中		炮制不及vs炮制太过	
		VIP值	变化趋势	VIP值	变化趋势	VIP值	变化趋势	VIP值	变化趋势	VIP值	变化趋势
1	β-倍半水芹烯	2.608 7	↓	1.560 1	↓	1.615 7	↓	1.904 8	↑	1.916 8	↓
2	germacrene B	2.515 9	↑	—	—	—	—	2.085 2	↓	—	—
3	水芹烯	2.495 6	↓	—	—	—	—	3.821 1	↑	3.173 5	↑
4	β-榄香烯	2.105 6	↑	—	—	3.192 8	↑	1.779 5	↓	1.986 4	↑
5	反式石竹烯	1.870 5	↑	—	—	—	—	1.893 9	↓	1.805 7	↓
6	(1S)-(+)-3-萜烯	1.277 9	↓	—	—	—	—	1.474 1	↑	1.657 8	↑
7	eudesma-4(14),11-diene	1.091 5	↓	1.209 5	↓	1.128 6	↓	—	—	—	—
8	α-石竹烯	1.025 7	↑	—	—	—	—	1.037 1	↓	—	—
9	γ-selinene	—	—	2.206 1	↑	—	—	—	—	—	—
10	4-异丙基甲苯	—	—	1.516 1	↑	—	—	—	—	1.133 7	↑
11	β-isocomene	—	—	1.419 3	↓	—	—	1.485 5	↓	2.341 9	↓
12	2-isopropenyl-4a,8-dimethyl-1,2,3,4,4a,5,6,7-octahydronaphthalene	—	—	1.391 3	↑	1.004 2	↑	1.162 4	↑	—	—
13	罗勒烯	—	—	1.163 2	↑	1.110 2	↑	1.009 1	↑	1.114 6	↑
14	α-guaiene	—	—	1.055 0	↓	—	—	—	—	—	—
15	香橙烯	—	—	1.034 2	↑	—	—	—	—	—	—
16	(-)-异喇叭烯	—	—	1.001 6	↑	—	—	—	—	—	—
17	苍术素	—	—	—	—	4.086 6	↓	—	—	—	—
18	α-蒎烯	—	—	—	—	2.126 9	↑	2.568 1	↑	2.630 8	↑
19	苍术酮	—	—	—	—	1.003 9	↓	—	—	—	—
20	berkheyaradulene	—	—	—	—	—	—	1.443 8	↓	1.379 2	↓
21	1-silphinene	—	—	—	—	—	—	1.042 6	↓	—	—

“—” 无差异性；“↑” 上升；“↓” 下降。
 “—” not significant; “↑” up-regulated; “↓” down-regulated.

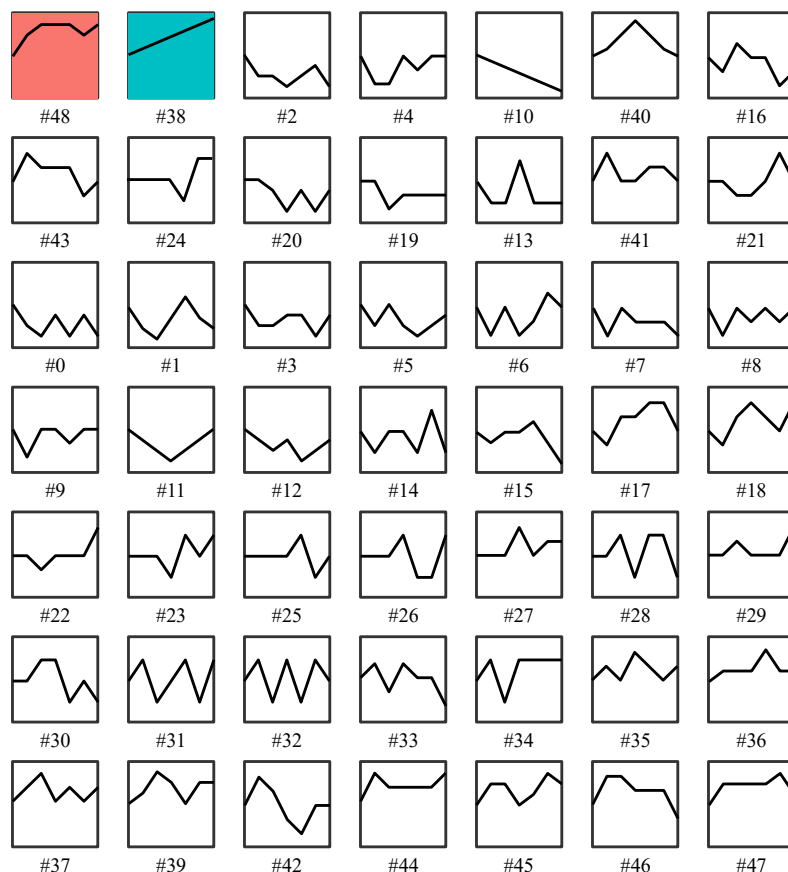
在生品至麸炒各阶段的 VIP 值高且持续下降，是生品向麸炒品转变中的关键消减成分；苍术素和苍术酮仅在生品与太过阶段差异显著，二者的变化反映出麸炒过度时成分的剧烈改变。聚焦炮制阶段间差异，不及到适中阶段，水芹烯、(1S)-(+)-3-萜烯等成分 VIP 值显著上升，表明热作用增强促使成分转化或生成；不及到太过阶段，β-榄香烯、α-蒎烯等成分变化明显；适中到太过阶段，γ-selinene 等成分下降，但在生品到适中阶段成分上升，体现该阶段成分生成与降解并存的复杂动态。这些差异性成分主要包

括倍半萜类、萜类、芳香烃类、烯烃类、炔类、酮类，这与电子鼻数据结果相仿。

2.3.8 北苍术麸炒过程中挥发性成分的动态变化为直观呈现北苍术麸炒过程中挥发性成分的整体变化模式，本研究参考毕婉君等^[20]的方法，采用 STEM 工具进行时间序列趋势分析。将挥发性成分数据处理为制表符分隔的文本格式后进行分析，分析后获得挥发性成分在麸炒过程中的动态变化趋势^[21-22]。结果显示，北苍术麸炒过程中挥发性成分在预设的 49 种模型轮廓中可归纳为 8 种变化趋势，其中 2 种

趋势模型（#48、#38）存在显著性富集（图 7）。具体来看，#48 中的 5 种挥发性成分，整体呈上升趋势，后期略有回落，暗示此类成分在炮制后期达到

生成极限后，部分因高温发生二次反应而减少；#38 包含 4 种挥发性成分，具有持续上升趋势，可能与麸炒过程中新的香气物质生成相关。



每个方框表示 1 种趋势模型，在方框正下方数字为模型编号，有颜色方框表示该模型有显著性富集（ $P < 0.05$ ），方框中的模型轮廓（黑色线条）自左至右分别为北苍术生品及麸炒 1.5、3.0、4.5、6.0、7.5、9.0 min 炮制过程饮片样品。

Each box represents a trend model, the number in the below-center of the box indicates the model ID. Colored boxes indicate significant enrichment of the model ($P < 0.05$). The model outlines (black lines) within the boxes, from left to right, correspond to raw *A. chinensis*, samples of decoction pieces processed by bran-fried for 1.5, 3.0, 4.5, 6.0, 7.5, and 9.0 min, respectively.

图 7 北苍术麸炒过程中基于 STEM 聚类法的挥发性成分变化趋势

Fig. 7 Variation trends of volatile components during bran-fried processing of *A. chinensis* based on STEM clustering analysis

3 讨论

麸炒是一种传统的中药炮制工艺，以其价廉、便捷和有效的优点沿用至今^[23]。苍术属芳香化湿药，长于祛湿健脾，但其“燥”性呈双刃剑特性，在祛除外感六淫邪气的同时，若临床运用不当，易致耗气伤阴^[24]。苍术主要有效成分为苍术挥发油，而挥发性成分过多会使苍术过“燥”，苍术经麸炒后燥性明显缓和，更易于临床调剂。有研究表明，苍术药效成分多为挥发性成分如苍术素、苍术酮、 α -蒎烯等成分具有良好的抗炎和抗肿瘤作用^[25-26]。

中药“以气鉴质”的传统经验，本质是通过嗅觉感知药材挥发性有机化合物（volatile organic compounds, VOCs）的组成特征。苍术“生品辛燥

峻烈，麸炒转香缓性”的炮制特性，《本草纲目》载其“麸炒制其燥性，取其芳香醒脾”，提示气味变化与药效调制的密切关联。苍术生品芳香与麸炒品焦香，在气味上存在显著差异，而这种差异正是内部挥发性成分变化的直观体现。

本研究采用电子鼻技术及 HS-GC-MS 技术对北苍术麸炒过程中的挥发性成分进行分析，电子鼻雷达图显示，北苍术及其麸炒过程样品气味差异主要体现在 6 种传感器上，芳香族化合物类、有机酸酯类、萜类、酯类、甾醇类、三萜类、挥发性有机化合物可作为区分北苍术麸炒过程的关键挥发性成分的选择，北苍术麸炒后单萜类成分如 α -蒎烯、水芹烯、(1S)-(+)-3-萜烯成分含量先下降后上升；倍

半萜类成分 β -榄香烯麸炒后含量上升、 β -倍半水芹烯麸炒后含量下降, 印证上述传感器中 S4、S5 的响应值差异。

本实验采用 STEM 对北苍术麸炒过程中挥发性成分的整体变化模式进行趋势分析结合差异性成分筛选结果分析, 发现随着麸炒过程的推进明显增加并带有特殊气味的物质有 α -蒎烯 (新鲜樟香、木香)、4-异丙基甲苯 (味道甜美且带有轻微类柠檬芳香)、罗勒烯 (草香、花香并伴有橙花油香气)、香橙烯 (果香、柑橘香)。香气特征主要表现为清新的自然花果香、草木香, 推测可能是麦麸和北苍术反应后气味变化有关, 说明随着炮制时间麸炒北苍术的清新香气可能更浓郁; 北苍术麸炒后发现随着麸炒过程的推进逐渐下降并带有特殊气味的物质有 β -倍半水芹烯 (草本和泥土的气味)、 α -松油烯 (茴香、薄荷味)、莎草烯 (干燥壤香)、水芹烯 (橘和胡椒的香味), 其中, α -松油烯与水芹烯均具有辛辣气味, 说明麸炒后可能减少北苍术生品的带有辛辣感的独特香气。结合以上研究推测麸炒后北苍术气味更易于被患者所接受。由于麦麸的加入, 可矫正北苍术气味, 而气味可作为中药饮片炮制程度及质量性状的参考指标之一, 影响着中药的功效。

美拉德反应是中药经过加热炮制产生香气物质最主要的反应之一, 其反应的挥发性产物是其焦香气味的主要来源^[27-28], 麦麸中含有大量的糖、蛋白质、氨基酸等物质, 在麸炒过程中, 麦麸会和药材发生复杂的相互作用^[29-30]; 在一定炒制温度下, 麦麸中的糖和氨基酸等成分可产生美拉德反应, 产生了 5-HMF、糠醛等焦香气味的产物, 具有一定的健脾作用。GC-MS 分析结果显示, 2,3-二氢-3,5-二羟基-6-甲基-4H-吡喃-4-酮在生品中并未检出, 仅在不同麸炒程度样品中出现, 该成分为美拉德反应中极其重要的中间体^[31], 可印证苍术在麸炒过程中发生了美拉德反应。后续可利用高光谱机器视觉感知、近红外光谱分析等技术对苍术麸炒过程进行更深层的理化研究、探究其中美拉德反应体系, 建立评价苍术麸炒品质量标准的模型, 实现对其质量的快速、准确评估。

当前对于苍术的研究多在于挥发性成分, 对水溶性成分研究较少^[3], 可通过仪器分析手段对苍术麸炒过程中非挥发性成分进行检测, 再进行药理实验进一步比较不同炮制程度麸炒品差异性成分的药效变化, 进行成分-药效关联分析, 通过网络药理

学构建“成分-通路-靶点”网络, 可为阐明苍术麸炒的内涵及后续质量标准提供数据支撑, 从多维度、多方面确保麸炒苍术饮片质量, 为后续麸炒苍术的合理用药、用药安全及患者临床体验提供参考。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 尚志钧校注. 神农本草经校注 [M]. 北京: 学苑出版社, 2008: 66-67.
- [2] 中国药典 [S]. 一部. 2025: 173.
- [3] 李科迪, 曹章净, 敖慧. 苍术化学成分及药理作用研究进展 [J]. 成都中医药大学学报, 2024, 47(6): 73-80.
- [4] 田佳旭, 吴浩然, 王玥玥, 等. 基于文献计量学的苍术研究热点可视化分析 [J]. 中医药导报, 2025, 31(1): 136-142.
- [5] 温佳文, 严世豪, 张金莲, 等. HS-GC-MS 与超快速气相电子鼻技术研究土 (赤石脂) 炒北苍术炮制过程中挥发性成分的变化 [J]. 中草药, 2025, 56(12): 4250-4261.
- [6] 东汉·华佗撰. 华氏中藏经 [M]. 北京: 中国医药科技出版社, 2018: 56.
- [7] 钟凌云. 中药炮制学 [M]. 5 版. 北京: 中国中医药出版社, 2021: 147.
- [8] 明·陈嘉谟撰, 张印生, 韩学杰, 赵慧玲主校. 本草蒙筌 [M]. 北京: 中医古籍出版社, 2009: 162, 213, 287, 347.
- [9] 叶喜德, 施林峰, 胡振宇, 等. 基于层次分析-熵权法结合响应面法优化麸炒芡实炮制工艺 [J]. 中药材, 2024, 47(5): 1141-1146.
- [10] 于艳, 于永铎, 韩宇, 等. 基于 Box-Behnken 设计响应面法苍术的麸炒工艺研究 [J]. 时珍国医国药, 2023, 34(11): 2669-2673.
- [11] 刘泽, 张硕, 徐欣雨, 等. 基于 UPLC-Q-TOF-MS 技术的枳实炮制前后化学成分的比较研究 [J]. 中药材, 2024, 47(9): 2208-2214.
- [12] 梅茜, 许金国, 苏联麟, 等. 基于 Heracles NEO 超快速气相电子鼻对枳壳麸炒前后气味差异标志物的快速识别研究 [J]. 中草药, 2023, 54(16): 5165-5171.
- [13] 薛东华, 徐宁阳, 金珈汐, 等. 基于靶向代谢组学研究苍术麸炒前后干预脾虚大鼠氨基酸水平变化的影响 [J]. 中华中医药学刊, 2024, 42(4): 113-119.
- [14] 涂济源, 刘艳菊, 肖波, 等. 苍术麸炒前后正丁醇部位燥湿健脾药效及关键成分研究 [J]. 中华中医药杂志, 2019, 34(7): 2949-2953.
- [15] 刘苗苗, 陈祥胜, 陈琪瑶, 等. 苍术麸炒过程中 5-羟甲基糠醛的转化机制研究 [J]. 中草药, 2016, 47(8): 1327-1331.
- [16] 贾文琿, 毕亮, 王松林, 等. 仿生嗅觉电子鼻的气室结

- 构优化 [J]. 包装与食品机械, 2025, 43(1): 26-31.
- [17] 杜玲玲, 孟晓伟, 胡伊涵, 等. 不同陈化年份陈皮(樟头红)挥发成分差异的电子鼻与 HS-GC-MS 对比分析 [J]. 食品科学, 2025, 46(11): 253-262.
- [18] 辛力, 温佳文, 龚文慧, 等. 基于 HS-GC-MS 及智能感官技术分析赤石脂炒陈皮炮制前后的挥发性成分差异 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2025, 31(7): 157-162.
- [19] 杜清, 吴光鹏, 叶明方, 等. 苍术挥发油的研究进展 [J]. 中华中医药学刊, 2024, 42(11): 89-97.
- [20] 毕婉君, 魏子淳, 郑玉成, 等. 基于 ATD-GC-MS 技术检测铁观音做青过程环境挥发性成分的动态变化 [J]. 食品科学, 2023, 44(8): 201-211.
- [21] 陈林, 张应根, 陈键, 等. 乌龙茶品种鲜叶加工白茶过程中香气成分动态变化规律 [J]. 茶叶科学, 2020, 40(6): 771-781.
- [22] Ernst J, Bar-Joseph Z. STEM a tool for the analysis of short time series gene expression data [J]. *BMC Bioinformatics*, 2006, 7: 191.
- [23] 王凡一, 高如汐, 郑威, 等. 麸炒法历史沿革与现代研究进展 [J]. 辽宁中医药大学学报, 2023, 25(2): 94-101.
- [24] 王彬, 赵梓辰, 张洪怡, 等. 中药燥性与燥性中药理论溯源与研究进展探析 [J]. 成都中医药大学学报, 2025, 48(1): 67-75.
- [25] Qu L H, Lin X, Liu C L, *et al.* Atractylodin attenuates dextran sulfate sodium-induced colitis by alleviating gut microbiota dysbiosis and inhibiting inflammatory response through the MAPK pathway [J]. *Front Pharmacol*, 2021, 12: 665376.
- [26] Kotawong K, Chaijaroenkul W, Muhamad P, *et al.* Cytotoxic activities and effects of atractylodin and β -eudesmol on the cell cycle arrest and apoptosis on cholangiocarcinoma cell line [J]. *J Pharmacol Sci*, 2018, 136(2): 51-56.
- [27] 崔小兵. 基于 Maillard 反应研究麸炒增加“焦香健脾”作用的共性物质 [D]. 南京: 南京中医药大学, 2013.
- [28] 郑郁清, 彭嘉玉, 郭静英, 等. 顶空气相色谱-质谱法结合相对气味活度值法分析谷糠、麦麸、蜜糠、蜜麸 4 种辅料的风味成分 [J]. 中草药, 2024, 55(13): 4361-4372.
- [29] 彭芳芳, 林桂梅, 臧彬如. 基于 UPLC-Q-TOF-MS^E 技术分析麸炒前后枳实及其辅料麦麸化学成分的差异 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2020, 26(24): 144-152.
- [30] 潘欢欢, 刘飞, 陈鸿平, 等. 白术麸炒过程中辅料蜜麸的挥发性成分动态变化研究 [J]. 药物分析杂志, 2017, 37(3): 386-392.
- [31] 白冰, 何静, 杨静, 等. 美拉德反应中间体 2,3-二氢-3,5-二羟基-6-甲基-4(*H*)吡喃-4-酮的研究进展 [J]. 食品与发酵工业, 2024, 50(5): 326-333.

[责任编辑 郑礼胜]