

# 药对白术-茅苍术及其单味药中挥发油成分的比较分析

余金明<sup>1</sup> 梁逸曾<sup>\*1</sup> 彭友林<sup>2</sup> 华美铃<sup>1</sup> 谭斌斌<sup>1</sup> 李洪东<sup>1</sup>

<sup>1</sup>(中南大学化学化工学院, 中药现代化研究中心, 长沙 410083) <sup>2</sup>(湖南文理学院生命科学系, 常德 415000)

**摘 要** 采用水蒸气蒸馏法提取单味药白术、茅苍术及其药对中挥发油成分, 通过气-质联用技术(GC-MS) 对其分离检测, 利用直观推导式演进特征投影法(HELP) 分辨解析重叠色谱峰, 并结合程序升温保留指数辅助定性。从白术、茅苍术及其药对中依次鉴定出 29、50、62 个组分, 分别占各自挥发油总量的 95.93%, 97.44%, 97.47%; 其中 20 种挥发油成分共存于单味药与药对中, 主要是 2-(2-甲氧基) 苯甲氧基苯酚、 $\gamma$ -芹子烯、雅桉蓝树油烯、大根香叶烯 B 等。组成药对后, 白术减少 8 种组分, 茅苍术减少 12 种组分, 而药对新增 22 种组分, 主要是单萜烯类的低沸点化合物, 新增组分在药对中的作用不容忽视。

**关键词** 药对白术-茅苍术; 挥发油; 气相色谱-质谱; 直观推导式演进特征投影法

## 1 引言

药对, 又称对药、对子, 专指临床上相对固定的两味药所组成的方剂, 是中药复方配伍中最简单、最基本和最常见的形式, 在中医临床上发挥着重要作用。然而复方的配伍规律在中药方剂理论中的研究明显滞后, 加强药对的研究是解决此问题的基础和重要切入点<sup>[1]</sup>。分析药对配伍前后发生的化学变化和物理作用, 有利于剖析和阐明复方中药的配伍机理, 促进药对的理论研究和临床应用。

白术-茅苍术为常用脾胃相辅药对, 始载于《神农本草经》中, 被列为上品, 现为《中华人民共和国药典》第一部收载。白术系菊科植物白术(*Atractylodes macrocephala* Koidz., AM) 的根茎, 茅苍术(*Atractylodes lancea* (Thunb.) DC., AL) 亦为菊科植物, 是苍术的主要类别之一。它们主要分布于华东和华北地区, 二者相配, 一散一补, 一胃一脾, 补之不足, 互为促进。现代医学研究表明, 白术和茅苍术的挥发油都具有抗衰老、调节心血管功能和抗肿瘤等作用<sup>[2,3]</sup>。

白术、茅苍术中挥发油成分<sup>[4,5]</sup>是其主要活性成分, 但未见其药对挥发油成分的研究。通过气-质联用技术(GC-MS) 对其分离检测, 对于色谱峰的重叠体系, 利用直观推导式演进特征投影法(Heuristic evolving latent projections, HELP)<sup>[6,7]</sup>对 GC-MS 数据进行分辨解析, 采用局部主成分分析和满秩分辨技术得到重叠峰中各个组分的色谱和质谱, 结合程序升温保留指数进行定性及定量分析, 为寻找新的活性成分及研究药对的配伍规律提供依据。

## 2 实验部分

### 2.1 仪器与试剂

HP 6890-5973 型气-质联用仪(美国安捷伦科技有限公司, EI 源, 质量范围: 1.6 ~ 800 amu); 挥发油提取器(上海满贤经贸有限公司, 测定管容量: 5.0 mL, 最小分度: 0.1 mL)。正己烷(天津恒光化学试剂厂, AR); 正构烷烃标准品(美国 Sigma 公司); 白术(湖南平江白术生产基地); 茅苍术(湖北襄樊多邦药材公司) 经湖南文理学院彭友林教授鉴定为菊科植物白术、茅苍术干燥根茎的土炒品和麸炒品。

### 2.2 GC-MS 分析条件

**2.2.1 色谱条件** HP-5MS 弹性石英毛细管柱(30 m  $\times$  0.25 mm, 0.25  $\mu$ m); 载气: He(99.999%); 载气流速: 1.0 mL/min; 进样口温度: 280  $^{\circ}$ C; 程序升温: 初温 50  $^{\circ}$ C(2 min), 以 12  $^{\circ}$ C/min 升至 130  $^{\circ}$ C, 再以 4  $^{\circ}$ C/min 升至 240  $^{\circ}$ C, 最后以 10  $^{\circ}$ C/min 升至 260  $^{\circ}$ C(2 min); 进样量 1  $\mu$ L; 分流比 50:1。

2009-12-14 收稿; 2010-05-05 接受

本文系科技部国际合作项目(No. 2007DFA40680) 资助

\* E-mail: yizeng\_liang@263.net

**2.2.2 质谱条件** 电子轰击离子源(EI);电子能量:70 eV;离子源温度:230 ℃;接口温度280 ℃;扫描范围:35~450 U;扫描速率0.20 s/scan。

### 2.3 挥发油提取

**2.3.1 药对中挥发油提取** 将白术、茅苍术样品粉碎,过4号筛(筛孔内径 $(250 \pm 9.9) \mu\text{m}$ ),分别取40和60 g(临床用药要求),药粉混合装入1000 mL圆底烧瓶中,按《中国药典》(2005版)一部附录“挥发油提取法”甲法进行。连接挥发油测定器与回流冷凝管,然后进行水蒸气蒸馏,并保持微沸约4 h,至测定器中油量不再增加为止,停止加热。按规定操作,用移液管或吸管取出挥发油,用无水 $\text{Na}_2\text{SO}_4$ 干燥,测得其挥发油产率为0.92%,该挥发油为具有香味的黄棕色透明油状液体。

**2.3.2 单味药中挥发油提取** 分别称取上述粉碎过筛后的白术、茅苍术各100 g,按上述方法提取处理后,分别得到金黄色粘稠挥发油1.15 g,香郁亮红棕色油状物0.68 g。

### 2.4 保留指数测定

在完全相同的GC-MS分析条件下,测定各正构烷烃的保留时间和挥发油中各组分的保留时间。根据van den Dool和Kratz提出的线性程序升温的保留指数公式<sup>[8]</sup>计算:

$$I_x = 100n + 100 [(T_{R_x} - T_{R_n}) / (T_{R_{n+1}} - T_{R_n})] \quad (1)$$

其中 $I_x$ 为程序升温保留指数, $T_R$ 为保留时间,下标 $x$ 表示待分析的化合物,下标 $n$ 和 $n+1$ 分别表示正构烷烃的碳原子数。

## 3 结果与讨论

### 3.1 重叠色谱峰分辨与挥发油成分定性分析

在上述实验条件下,单味药与其药对挥发油的GC-MS总离子流出图如图1所示。通过质谱工作站检索NIST05质谱库,可以初步确定各色谱峰的质谱特征。

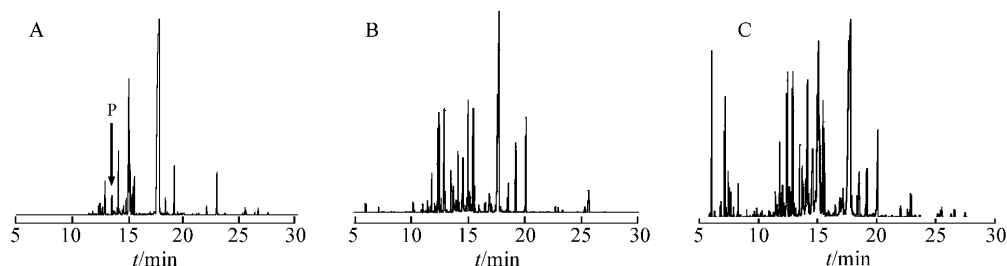


图1 白术(A)、茅苍术(B)和药对白术-茅苍术(C)挥发油的总离子流图

Fig.1 TICs of essential oil in *Atractylodes macrocephala koidz.* (AM) (A), *Atractylodes lancea* (Thunb.) DC. (AL) (B) and herbal pair (HP AM-AL) (C)

以图1A中的峰簇P(保留时间段为12.76~12.92 min)为例,将其放大(图2D<sub>1</sub>),通过比较色谱峰的形状与质谱特征发现,色谱峰中不同位置呈现出较大的质谱变化,从而可以确定它是一组重叠峰,直接检索,其定性结果从左至右依次为(+)-Sativene(56%);Bicyclic [5.2.0(1,7)]-nonane, 2-methylene-4,8,8-trimethyl-4-ethenyl(72%);Germacrene B(78%)和Elixene(83%),它们的可靠性与准确度都很低,不利于进行定量分析。但是利用HELP法对重叠峰进行解析后,得到它们的纯色谱图(图2D<sub>2</sub>)和质谱图(图3)。再通过质谱库检索,分别得到 $\delta$ -Guaiene(92%),Caryo-

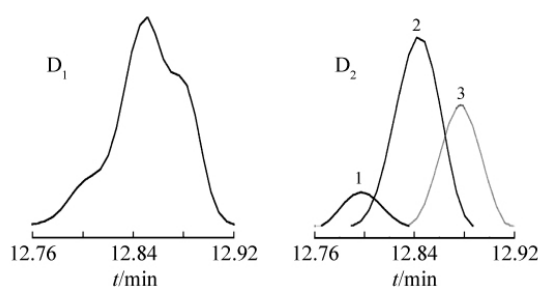


图2 图1A中峰簇P的TIC图(D<sub>1</sub>)及应用HELP解析后的色谱图(D<sub>2</sub>)

Fig.2 D<sub>1</sub>: TICs of P peak cluster in Fig. 1A, D<sub>2</sub>: resolved chromatograms of P peak cluster with heuristic evolving latent projection(HELP)

1.  $\delta$ -愈创木烯( $\delta$ -Guaiene); 2. 丁香香烯(Caryophyllene); 3. 甘香烯(Elixene)。

phyllene (99%) 和 Elixene (97%) ,这 3 个组分质谱特征明显 ,相似度很高 ,其中后两种物质 (10~11 号峰) 是药对与其单味药的共有组分。因此对于类似的重叠峰 ,通过 HELP 法解析后 ,将会极大地减少误检及漏检情况 ,从而提高分析的可信度。

用相同的方法对所有 TIC 图进行解析定性 ,再依据公式(1) 计算各组分的保留指数 ,并与美国 NIST 库( <http://webbook.nist.gov/chemistry>) 中的保留指数相对照 ,确定定性分析的结果。从白术、茅苍术及其药对挥发油中分别鉴定出 29 ,50 和 62 个组分 ,占系统自动检识峰数量的 87.9% ,96.2% 和 98.4% 。

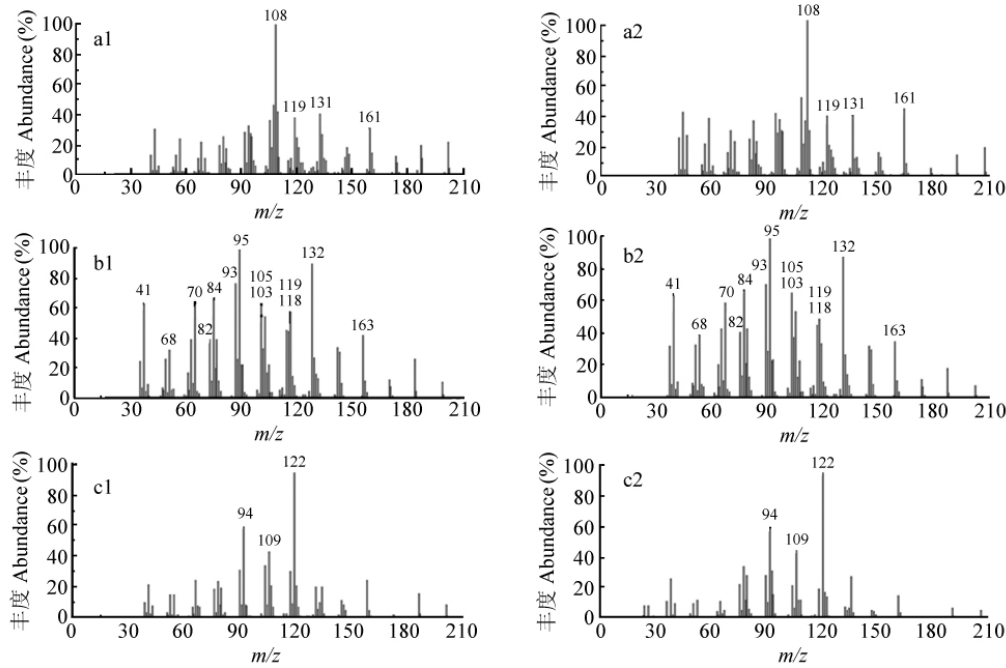


图 3 图 2D<sub>2</sub> 中 3 个解析出的 δ-愈创木烯( a )、丁子香烯( b )、甘香烯( c ) 质谱图( 1) 与标准质谱图( 2)

Fig. 3 Resolved pure mass spectrum ( 1) for δ-Guaiene( a ) , Caryophyllene( b ) , Elixenein( c ) in Fig. 2D<sub>2</sub> and Standard mass spectrum ( 2)

3.2 挥发油化学成分定量分析

对解析后的所有纯色谱峰通过面积归一法进行积分 ,得到单味药与药对挥发油中各化学成分的定量分析结果( 表 1) 。

表 1 白术、茅苍术和药对白术-茅苍术样品挥发油中主要化学成分分析结果

Table 1 Analysis result of main chemical compositions for essential oils in AM , AL and AM-AL samples

| 序号<br>No. | 化合物名称<br>Compound                                                                                        | 分子式/分子量<br>MF/M <sub>w</sub> *                                     | R <sub>T</sub> ( min) /R <sub>1</sub> /R <sub>C</sub> ( %) |                     |                     |
|-----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------|---------------------|---------------------|
|           |                                                                                                          |                                                                    | AM                                                         | AL                  | AM-AL               |
| 1         | 3-萜烯 3-Carene                                                                                            | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> /136                               | —                                                          | —                   | 6.00 /1006.1 /3.87  |
| 2         | α-水芹烯 α-Phellandrene                                                                                     | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> /136                               | —                                                          | 7.09 /1070.7 /0.19  | 7.12 /1072.5 /2.65  |
| 3         | 1,3-β-P-孟三烯 1,3-β-P-Menthatriene                                                                         | C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> /134                               | —                                                          | —                   | 7.40 /1089.1 /0.55  |
| 4         | 2-异丙烯基-4a,8-二甲基-1,2,3,4,4a,5,6,8a-八氢萘-2-Isopropenyl-4a,8-dimethyl-1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydronaphthalene | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                               | 11.77 /1348.6 /0.18                                        | 11.79 /1349.8 /1.35 | 11.81 /1350.9 /1.41 |
| 5         | 橙花醇乙酸酯 Neryl acetate                                                                                     | C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub> /196                | —                                                          | 12.00 /1362.2 /0.37 | 12.03 /1364.0 /0.56 |
| 6         | 6S-2,3,8,8-四甲基-三环[5.2.2.0(1,6)]十一(2)烯 6S-2,3,8,8-Tetramethyltricyclo[5.2.2.0(1,6)]undec-2-ene            | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                               | 12.28 /1378.7 /0.38                                        | 12.31 /1380.4 /3.37 | 12.32 /1381.0 /3.28 |
| 7         | 2,3-二氢-7-甲氧基-4-甲基-1H-5-苯并-2-氮卓-2-酮 2,3-Dihydro-7-methoxy-4-methyl-1H-5-benzodiazepin-2-one               | C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> /204 | 12.39 /1385.1 /0.46                                        | 12.42 /1386.9 /3.72 | 12.44 /1387.6 /3.61 |
| 8         | β-丁子香烯 β-Caryophyllene                                                                                   | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                               | 12.60 /1397.5 /0.25                                        | 12.61 /1398.1 /3.54 | 12.61 /1398.1 /0.44 |
| 9         | 莎草烯 Cyperene                                                                                             | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                               | 12.63 /1399.2 /0.35                                        | —                   | 12.66 /1401.0 /0.53 |
| 10        | 丁子香烯 Caryophyllene                                                                                       | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                               | 12.84 /1412.5 /1.34                                        | 12.85 /1413.2 /2.20 | 12.85 /1413.2 /3.60 |
| 11        | 甘香烯 Elixene                                                                                              | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                               | 12.88 /1415.1 /0.95                                        | 12.92 /1417.2 /3.64 | 12.92 /1417.2 /3.64 |

续表 1( Continued to Table 1)

| 序号<br>No. | 化合物名称<br>Compound                                                                                                    | 分子式/分子量<br>MF/M <sub>w</sub> *                      | R <sub>T</sub> ( min) /R <sub>1</sub> /R <sub>C</sub> ( %) |                      |                      |
|-----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|------------------------------------------------------------|----------------------|----------------------|
|           |                                                                                                                      |                                                     | AM                                                         | AL                   | AM-AL                |
| 12        | ( Z , Z , Z )-1 , 5 , 9 , 9-四甲基-4 , 7-环十一(三)烯-1 , 4 , 7-Cycloundecatriene , 1 , 5 , 9 , 9-tetramethyl-( Z , Z , Z )- | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                | 13.44 /1451.0 /0.88                                        | 13.47 /1452.9 /1.58  | 13.48 /1453.5 /1.74  |
| 13        | β-雪松烯 β-Himachalene                                                                                                  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                | 13.62 /1462.5 /0.20                                        | 13.67 /1465.7 /1.26  | 13.68 /1466.4 /1.32  |
| 14        | α-姜烯 α-Zingiberene                                                                                                   | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                | —                                                          | 13.94 /1483.0 /0.65  | 13.99 /1486.2 /0.90  |
| 15        | 雅桤蓝树油烯 Eremophilene                                                                                                  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                | 14.06 /1490.7 /3.63                                        | 14.08 /1492.0 /2.63  | 14.10 /1493.0 /5.01  |
| 16        | 倍半水芹烯 β-Sesquiphellandrene                                                                                           | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                | 14.49 /1512.8 /0.27                                        | 14.52 /1514.3 /2.57  | 14.55 /1515.9 /3.01  |
| 17        | γ-芹子烯 γ-Selinene                                                                                                     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                | 14.94 /1535.6 /13.28                                       | 14.94 /1535.6 /7.01  | 14.98 /1537.7 /10.14 |
| 18        | 3 , 7(11)-蛇床二烯 3 , 7(11)-Selinadiene                                                                                 | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                | 15.02 /1539.7 /5.10                                        | 15.02 /1539.7 /0.12  | 15.06 /1541.7 /3.56  |
| 19        | 4 , 11 , 11-三甲基-8-亚甲基-双环 [7 , 2 , 0]十一(4)烯 Bicyclo [7 , 2 , 0]undec-4-ene , 4 , 11 , 11-trimethyl-8-methylene-       | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                | —                                                          | 15.12 /1544.8 /1.53  | —                    |
| 20        | 大根香叶烯 B Germacrene B                                                                                                 | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                | 15.36 /1557.0 /1.60                                        | 15.42 /1560.1 /6.56  | 15.44 /1561.0 /4.41  |
| 21        | 脱氢香木兰烯 Aremadendrene αdehydro-                                                                                       | C <sub>15</sub> H <sub>22</sub> /202                | 15.50 /1563.9 /2.13                                        | —                    | —                    |
| 22        | 绿叶烯 Patchoulene                                                                                                      | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> /204                | —                                                          | 15.52 /1565.5 /1.10  | 15.58 /1567.8 /1.50  |
| 23        | 茅苍术醇 Hinesol                                                                                                         | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O /222              | —                                                          | 17.03 /1638.1 /0.61  | 17.11 /1641.8 /1.43  |
| 24        | 2-(2-甲氧基)苯甲氧基苯酚<br>2-(2-Methoxyphenoxy) phenol                                                                       | C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub> /216 | 17.70 /1661.2 /51.69                                       | 17.72 /1661.8 /29.22 | 17.77 /1663.5 /22.87 |
| 25        | 桧脑 Juniper camphor                                                                                                   | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O /222              | 18.30 /1680.7 /1.05                                        | 18.31 /1681.2 /0.16  | 18.35 /1682.4 /0.46  |
| 26        | 芹烷二烯酮<br>Selina-4(14) , 7(11)-dien-8-one                                                                             | C <sub>15</sub> H <sub>22</sub> O /218              | 19.11 /1699.3 /3.76                                        | 19.15 /1700.5 /4.42  | 19.16 /1700.8 /1.34  |
| 27        | 2-芴醇 2-Fluorenol                                                                                                     | C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> O /182              | —                                                          | 20.08 /1725.6 /7.77  | 20.11 /1726.5 /3.88  |

MF/M<sub>w</sub>\* : 分子式( Molecular formula) /分子量( Molecular weight) ; R<sub>T</sub>/R<sub>1</sub>/R<sub>C</sub>\* : 保留时间( Retention time) /保留指数( Retention index) /相对含量( Relative content) 。AM: 白术( *Atractylodes macrocephala*) ; AL: 茅苍术( *Atractylodes lancea* ) 。

3.3 比较单味药与药对之间的挥发油成分

由于药材产地与提取方法不同 ,导致它们主要成分的种类与含量存在较大差异。该药对与各单味药中挥发油成分含量最高的是 2-(2-甲氧基)苯甲氧基苯酚 ,同文献 [9 ,10 ]一致 ,与文献 [4 ,11 ]报道的苍术酮不一致 ,而文献 [12 ,13 ]未检测到苍术酮 ,含量最高的成分依次是 2 , 7-二甲氧基-3 , 6-二甲基萜 (38.11%) 和 1 , 7 , 7-三甲基双环 [2.2.1]庚-5-烯-2-醇 (20.66%) 。

另外 ,中药合煎过程中存在着水解、氧化-还原、异构化、脱羧等化学反应 ,同时伴有增溶作用 [14]。这些化学反应与物理作用是中药方剂在配伍过程中普遍存在的现象。因为药对挥发油中的萜烯、萜烯醇类物质化学稳定性较差 ,易被氧化分解而产生小分子的单萜烯类化合物 ,同时药对中单味药的互相溶出改变了整个溶剂体系的极性 ,可能增加了小分子的溶出。由于挥发油成分的复杂性与标准品的制备困难 ,因而这方面的研究尚需进一步加强。

3.4 小结

(1) 从白术、茅苍术及其药对中分别鉴定出 29、50 和 62 个组分 ,分别占各自挥发油总量的 95.9% , 97.4% 和 97.5%。其中 20 种挥发油成分同时存在于单味药与药对中 ,它们分别占对应总含量的 89.2% ,74.6% ,71.6% ,主要是 2-(2-甲氧基)苯甲氧基苯酚、γ-芹子烯、雅桤蓝树油烯、大根香叶烯 B 等。组成药对后 ,白术减少 8 种组分 ,茅苍术减少 12 种组分 ,药对新增 22 种组分 ,主要成分为 3-萜烯、1 , 3 , 8-*P*-孟三烯和柠檬烯等单萜烯类。(2) 药对白术-茅苍术中的挥发油成分种类与单味药白术、茅苍术相似 ,都含有大量的倍半萜烯类化合物及萜醇、萜酯、萜酮等。值得注意的是 ,该药对中还含有多种单萜烯类低沸点化合物 ,它们在药对中的作用应不容忽视。(3) 采用 HELP 方法与 GC-MS 技术研究药对中挥发油成分的种类与变化 ,并与代谢组学等研究结合在一起 ,据此可间接评价药对的药效。

References

1 SUN Yang( 孙 洋) ,CHEN Ting( 陈 婷) ,XU Qiang( 徐 强) . *World Science and Technology/Modernization of Traditional Chinese Medicine and Materia Medica*( 世界科学技术-中医药现代化) ,2004 ,6( 1) : 17 ~ 19  
2 SHEN Guo-Qing( 沈国庆) ,HE Fa-Lin( 何法霖) ,LI Feng-Xin( 李凤新) ,SUN Ying( 孙 莹) ,ZHANG Hong-Gui( 张宏

- 桂). *Journal of Beijing University of Traditional Chinese Medicine*(北京中医药大学学报), **2009**, 32(6): 413~414
- 3 WANG Jin-Hong(王锦鸿), CHEN Ren-Shou(陈仁寿). *Practical Dictionary of Traditional Chinese Herbs in Clinical*(临床实用中药辞典). Beijing(北京): Jindun Press(金盾出版社), **2003**: 228~229, 359~360
- 4 WANG Min-Zhuan(王敏娟), GONG Ting-Min(宫廷敏), YUAN Shi-Bao(阮时宝). *Journal of Changchun University of Traditional Chinese Medicine*(长春中医药大学学报), **2008**, 24(4): 375~376
- 5 OUYANG Zhen(欧阳臻), YANG Ling(杨凌), SU Shu-Lan(宿树兰), FENG Xu(冯煦), WANG Ming(王鸣). *Acta Pharmaceutica Sinica*(药科学报), **2007**, 42(9): 968~972
- 6 LIANG Yi-Zeng(梁逸曾). *White, Grey and Black Multicomponent System and Their Algorithms*(白灰黑复杂多组分分析体系及其化学计量学算法). Changsha(长沙): Hunan Publishing House of Science and Technology(湖南科学技术出版社), **1996**: 177~206
- 7 Kvalheim O M, Liang Y Z. *J. Anal. Chem.*, **1992**, 64(8): 936~946
- 8 van den Dool H, Kratz P D. *J. Chromatogr.*, **1963**, 11: 463~471
- 9 ZHOU Zhi-Feng(周枝凤), SHEN Ju-Wen(沈菊文), GONG Fan(龚范), LIANG Yi-Zeng(梁逸曾), QIU Xi-Min(邱细敏). *Chinese Traditional and Herbal Drugs*(中草药), **2004**, 35(1): 5~8
- 10 ZHANG Xiao-Chuan(张晓川), CHEN Qin-Hua(陈琴华), ZHU Jun(朱军). *China Pharmacy*(中国药房), **2006**, 17(23): 1835~1837
- 11 XU Xiao-Lan(徐晓兰), FENG Xu(冯煦), WANG Ming(王鸣), OUYANG Zhen(欧阳臻), XIA Bing(夏冰). *Journal of Plant Resources and Environment*(植物资源与环境学报), **2007**, 16(1): 28~30
- 12 ZHANG Zhong-Yi(张忠义), WANG Peng(王鹏), LEI Zheng-Jie(雷正杰), WU Hui-Qin(吴惠勤). *Journal of Instrumental Analysis*(分析测试学报), **2003**, 22(4): 61~63
- 13 QIU Qin(邱琴), CHUI Zhao-Jie(崔兆杰), LIU Ting-Li(刘廷礼), ZHANG Shan-Dong(张善东). *Chinese Traditional and Herbal Drugs*(中草药), **2002**, 33(11): 980~981
- 14 LI Xiao-Rou(李晓如), LIANG Yi-Zeng(梁逸曾), GUO Fang-Qiu(郭方遒), LI Xiao-Ning(李晓宁), ZENG Zhong-Da(曾仲大). *Chinese J. Anal. Chem.*(分析化学), **2007**, 35(4): 532~536

## Comparative Analysis of Volatile Constituents in Herbal Pair *Atractylodes Macrocephala*–*Atractylodes Lancea* and Its Single Herb

SHE Jin-Ming<sup>1</sup>, LIANG Yi-Zeng<sup>\*1</sup>, PENG You-Lin<sup>2</sup>, HUA Mei-Ling<sup>1</sup>,  
TAN Bin-Bin<sup>1</sup>, LI Hong-Dong<sup>1</sup>

<sup>1</sup>(Research Center of Modernization of Chinese Herbal Medicine, College of Chemistry and Chemical Engineering,  
Central South University, Changsha 410083)

<sup>2</sup>(Department of Life Sciences, Hunan University of Arts and Science, Changde 415000)

**Abstract** The volatile constituents in the single herb *Atractylodes macrocephala*(AM), *Atractylodes lancea*(AL) and their herbal pair(HP) were extracted by steam distillation. With temperature-programmed retention index for assistant identification, gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) combined with heuristic evolving latent projections (HELP), was used to identify and analyze the volatile constituents comparatively. 29, 50 and 62 kinds of constituents of the essential oils were identified from AM, AL and its HP respectively, and the relative amount accounted for 95.93%, 97.44% and 97.47% of the total relative contents in order. There were 20 volatile constituents in common in single herb and HP, mainly including 2-(2-methoxyphenoxy) phenol,  $\gamma$ -selinene, eremophilene, germacrene B, 3,7(11)-selinadiene, elixene, and so on. After the formation of the HP, 8 kinds of constituents in the single herb AM and 12 components in the AL were reduced, while 22 additional components increased in the HP. The new additional components mainly belonged to monoterpene with low boiling point, and they played an important role in the HP.

**Keywords** Herbal pair *Atractylodes macrocephala*–*Atractylodes lancea*; Essential oil; Gas chromatography-mass spectrometry; Heuristic evolving latent projections

(Received 14 December 2009; accepted 5 May 2010)