新疆薰衣草精油抗氧化活性成分的组效关系研究Δ

陈　萍*，刘　兵，符继红#（新疆大学化工学院，乌鲁木齐　830046）

中图分类号　R284.1；R285　　**文献标志码**　A　　**文章编号**　1001-0408（2021）12-1460-06
DOI　10.6039/j.issn.1001-0408.2021.12.09

摘　要　目的：探讨薰衣草精油抗氧化活性成分的组效关系。方法：采用1，1-二苯基-2-三硝基苯（DPPH）自由基清除法评价薰衣草精油的抗氧化活性；采用气质联用技术（GC-MS）结合保留指数对薰衣草精油成分进行定性分析；采用主成分分析、偏最小二乘法分析薰衣草精油化学成分与抗氧化活性的关系，以变量投影重要性（VIP）＞1筛选对DPPH自由基消除有较大贡献的成分。结果：3个不同品种共9批薰衣草精油的平均半抑制浓度（IC_{50}）为4.82～9.88 mg/mL，法国蓝、H-701、Xinxun-4精油样品的平均IC_{50}分别为6.66～8.58、4.82～7.73、9.55～9.88 mg/mL；从中共鉴定出40个化学成分。PCA分析结果显示，前二个主成分的累积方差贡献率为81.8%；9批样品被分为3个区域，不同品种各归为一类；法国蓝薰衣草精油的特征变量成分为峰32对应的乙酸薰衣草酯、峰9对应的反式-β-罗勒烯；H-701蓝薰衣草精油的特征变量成分为峰16对应的芳樟醇、峰30对应的乙酸芳樟酯和峰21对应的萜品烯-4-醇；Xinxun-4蓝薰衣草精油的特征变量成分为峰8对应的桉树脑、峰18对应的樟脑和峰20对应的2-茨醇。薰衣草精油中对抗氧化活性贡献较大的成分为峰16对应的芳樟醇（VIP值为2.940 0）、峰21对应的萜品烯-4-醇（VIP值为2.863 1）、峰35对应的石竹烯（VIP值为2.570 8）、峰8对应的桉树脑（VIP值为2.115 8）。结论：薰衣草精油具有一定的抗氧化活性，H-701精油样品的抗氧化活性较强；峰16对应的芳樟醇可能是薰衣草精油消除DPPH自由基贡献最大的成分。

关键词　薰衣草精油；抗氧化活性；气质联用技术；组效关系

Study on the Composition-activity Relationship of the Antioxidant Active Component in Essential Oil of *Lavandula angustifolia* from Xinjiang

CHEN Ping, LIU Bing, FU Jihong (School of Chemical Engineering and Technology, Xinjiang University, Urumqi 830046, China)

ABSTRACT　OBJECTIVE: To investigate the composition-activity relationship of the antioxidant active component in essential oil of *Lavandula angustifolia* from Xinjiang. METHODS: Antioxidant activity of essential oil of *L. angustifolia* was evaluated with 1, 1-diphenyl-2-picrylhydrazyl (DPPH) free radicals scavenging method. GC-MS combined with retention index were adopted to qualitatively analyze the compounds. The relationship of chemical components with antioxidant activity of essential oil of *L. angustifolia* was analyzed by principal component analysis (PCA) and partial least squares analyses (PLS). The variable importance in projection (VIP>1) was used to screen the components which had great contribution to the elimination of DPPH free radical. RESULTS: The IC_{50} values of essential oil in 9 batches of *L. angustifolia* from 3 different varieties was 4.82-9.88 mg/mL, IC_{50} of France blue was 6.66-8.58 mg/mL, IC_{50} of H-701 and Xinxun-4 were 4.82-7.73 mg/mL and 9.55-9.88 mg/mL, respectively. A total of 40 chemical components were identified of essentil oil in 9 batches of *L. angustifolia*. Results of PCA analysis showed that accumulative variance contribution rate of former 2 main components was 81.8%; 9 batches of samples were divided into 3 regions, and different varieties were classified into one category; the characteristic variable components of the essential oil of French blue samples were lavandulyl acetate corresponding to peak 32 and trans-β-ocimene corresponding to peak 9; the characteristic variable components of the essential oil of H-701 samples were linalool corresponding to peak 16, linalyl acetate corresponding to peak 30 and terpinen-4-ol corresponding to peak 21; the characteristic variable components of the essential oil of Xinxun-4 samples were eucalyptol corresponding to peak 8, camphor corresponding to peak 18 and 2-borneol corresponding to peak 20. The compound with the greatest antioxidant activity was linalool corresponding to peak 16 (VIP=2.940 0), followed by terpenein-4-ol corresponding to peak 21 (VIP=2.863 1), caryophyllene corresponding to peak 35 (VIP=2.570 8) and eucalyptol corresponding to peak 8 (VIP=2.115 8). CONCLUSIONS: The essential oil of *L. angustifolia* has certain antioxidant activity, and H-701 sample has higher antioxidant activity. Linalool corresponding to peak 16 is the most important component of essential oil of *L. angustifolia* in eliminating DPPH free radical.

KEYWORDS　Essential oil of *Lavandula angustifolia*; Antioxidant activity; GC-MS; Composition-activity relationship

Δ 基金项目：新疆维吾尔自治区自然科学基金资助项目（No.2020D01C032）；国家自然科学基金资助项目（No.21565024）

* 硕士研究生。研究方向：天然产物活性成分。E-mail：cplw490311@163.com

通信作者：教授，硕士生导师，博士。研究方向：天然产物活性成分。E-mail：fjh.518@163.com

薰衣草*Lavandula angustifolia* Mill.为唇形科薰衣草属植物。新疆伊犁是我国薰衣草的主要种植地区，与法国的普罗旺斯、日本北海道的富良野同为世界三大薰衣草基地[1]。维吾尔医学认为，薰衣草能消散寒气、燥湿止

痛，可用于治疗胸腹胀满、感冒咳喘、头晕头痛、心悸气短等症[2]。薰衣草精油为薰衣草花穗的提取物，具有抗焦虑、镇静催眠等作用，还可用于治疗皮炎和湿疹等皮肤病[3－5]。薰衣草精油是一种潜在的广谱抗菌物质，也是一种抗氧化剂，其在较低的浓度下即可显示出较强的抗氧化能力[6－9]。有研究表明，肿瘤、衰老的发生多与人体内过量自由基的产生有关，抗氧化剂可以清除机体产生的自由基，因此其相关研究越来越受到学者的重视[10]。由于薰衣草精油所含的化学成分复杂，主要包括芳樟醇、乙酸芳樟酯、乙酸薰衣草酯、萜品烯-4-醇和罗勒烯等多种成分[11]，加之其现有相关研究主要集中在化学成分的定性和定量分析上，且药效学研究仅限于抗氧化活性的总体评价，尚未有研究对薰衣草精油中具体的抗氧化活性组分进行识别及鉴定。

中药组效关系为化学组成与药效的相关性研究提供了良好的解决思路。采用化学计量学方法构建中药化学组分与活性之间的数学模型，可实现对活性成分的辨识[12－13]。气质联用技术（GC-MS）具有分离效率高、重现性好、定性能力强等特点，特别适合于精油成分的分析[14]。基于此，本研究采用GC-MS技术分析了薰衣草精油中的化学成分，并以1，1-二苯基-2-三硝基苯（DPPH）自由基清除能力来初步评价其抗氧化活性；同时，采用组效学方法构建薰衣草精油GC-MS组分峰与抗氧化活性的数学模型，以识别其具有抗氧化活性的化学成分，旨在为相关药物的研究与开发提供科学依据。

1　材料

1.1　主要仪器

本研究所用主要仪器包括7890B GC-5977A MSD型GC-MS联用仪（美国Agilent公司）、UV-3600型紫外分光光度计（日本Shimadzu公司）、BS124S AG型万分之一电子天平（德国Sartorius公司）等。

1.2　主要药品与试剂

DPPH（色谱纯，批号G1712053）购自阿拉丁生化科技股份有限公司；正构烷烃C_5～C_{24}标准品（色谱纯，批号R11391，纯度均大于99%）购自百灵威科技有限公司；甲醇、无水硫酸钠均为分析纯，水为蒸馏水。

3个品种（法国蓝、H-701、Xinxun-4）共9批薰衣草样品均于2017年7月采自新疆伊犁地区，经新疆大学生命科学与技术学院谢丽琼教授鉴定均为唇形科薰衣草属植物薰衣草*L. angustifolia* Mill.的花穗。9批薰衣草样品信息来源见表1。

2　方法与结果

2.1　薰衣草精油的提取

采用水蒸气蒸馏法提取薰衣草精油。取薰衣草花穗样品40 g，加水560 mL，提取2 h，待其静置分层后，收集油层，用无水硫酸钠干燥，密封于2 mL的琥珀色样品瓶中，置于4 ℃冷藏，备用（9批薰衣草精油分别编号为a1～a4、b1～b3、c1～c2）。

表1　9批薰衣草样品信息来源

Tab 1　Source information of 9 batches of *L. angustifolia* samples

编号	品种	来源	编号	品种	来源
A1	法国蓝	伊犁65团1连	B2	H-701	伊犁70团3连
A2	法国蓝	伊犁65团3连	B3	H-701	伊犁70团7连
A3	法国蓝	伊犁69团2连	C1	Xinxun-4	伊犁70团3连
A4	法国蓝	伊犁70团4连	C2	Xinxun-4	伊犁70团4连
B1	H-701	伊犁65团11连			

2.2　抗氧化作用考察

采用DPPH自由基清除法评价薰衣草精油的抗氧化活性[15]。取DPPH 2.4 mg，加入甲醇10 mL，溶解，混匀；取上述溶液1 mL，加入甲醇45 mL稀释，制成DPPH甲醇溶液，置于4 ℃下保存，备用。取上述DPPH甲醇溶液2 mL，分别加入“2.1”项下不同体积（10、20、30、50、100 μL）的薰衣草精油，用甲醇定容至4 mL，制成不同质量浓度（2.45、4.92、7.45、12.25、25.5 mg/mL）的薰衣草精油样品，待其在室温阴暗处反应1 h，使用紫外分光光度计于515 nm波长处测定上述不同质量浓度薰衣草精油样品的吸光度（A），并计算样品对DPPH自由基的清除率：清除率（%）$=\frac{A_0-A_1}{A_0}\times100\%$。式中，$A_0$表示DPPH甲醇溶液的吸光度，$A_1$表示在阴暗处反应1 h后溶液的吸光度[16]。采用Excel 2016软件根据清除率绘制标准曲线，计算薰衣草精油清除50%DPPH自由基时所对应的半数清除浓度（IC_{50}），所得IC_{50}值越小，表明薰衣草精油清除自由基的能力越强[17]。上述实验重复3次，结果见表2。

表2　薰衣草精油的抗氧化活性实验结果（$\bar{x}\pm s$，$n=3$，mg/mL）

Tab 2　Results of antioxidant activity tests for essential oil of *L. angustifolia*（$\bar{x}\pm s$，$n=3$，mg/mL）

编号	IC_{50}	编号	IC_{50}
a1	6.66±0.22	b2	4.82±0.25
a2	7.05±0.18	b3	7.73±0.14
a3	7.67±0.08	c1	9.55±0.08
a4	8.58±0.08	c2	9.88±0.24
b1	5.85±0.03		

由表2可知，薰衣草精油的平均IC_{50}值为4.82～9.88 mg/mL；其中，法国蓝精油样品的平均IC_{50}值为6.66～8.58 mg/mL，H-701精油样品的平均IC_{50}值为4.82～7.73 mg/mL，Xinxun-4精油样品的平均IC_{50}值为9.55～9.88 mg/mL，表示薰衣草精油具有一定的自由基

清除能力，且以编号为b2的精油样品的抗氧化活性较强。

2.3 GC-MS分析条件

2.3.1 GC条件 以DB-5MS毛细管柱（30 m×0.25 mm，0.25 μm）为色谱柱，程序升温（起始温度50 ℃并保持20 min，以2 ℃/min升到120 ℃后再以10 ℃/min升到250 ℃），载气为氦气，流速为1 mL/min，进样量为0.2 μL，分流比为60∶1，进样口温度为250 ℃。

2.3.2 MS条件 离子源为电子轰击离子源（EI）；电子轰击能量为70 eV；离子源温度为230 ℃；接口温度为250 ℃；扫描方式为全扫描，扫描范围为*m/z* 30～500。

2.4 保留指数的测定

采用“2.2”项下GC-MS分析条件测定正构烷烃C_5～C_{24}标准品的保留时间，并计算薰衣草精油中各化合物的保留指数（RI）：$RI_X=100_n+100\times\frac{t_{R(X)}-t_{R(n)}}{t_{R(n+1)}-t_{R(n)}}$。式中，$RI_X$表示化合物$x$的烷烃保留指数，$t_{R(X)}$、$t_{R(n)}$、$t_{R(n+1)}$分别表示化合物$x$、第$n$个碳正构烷烃和第$n$+1个碳正构烷烃的保留时间[18]。

2.5 数据处理与分析

取“2.1”项下9批薰衣草精油各适量，按“2.2.1”“2.2.2”项下GC-MS条件进样分析，得总离子流图（图1）。通过检索NIST 2017谱库（https://webbook.nist.gov/chemistry/），将各化学成分的保留指数与NIST 2017谱库收录成分的保留指数进行对比，并结合相似度（相似度＞85%）对薰衣草精油的化学成分进行准确定性；采用峰面积归一化法计算各化学成分的相对面积百分含量，结果见表3（表中，RI^a表示计算的保留指数，RI^b表示谱库中的保留指数，“－”表示未检测出）。结果，经过检索和对比，从9批薰衣草精油中共鉴定出40个化学成分。其中，法国蓝（编号a1～a4）的主要成分分别为峰16、30、32、23、9对应的芳樟醇、乙酸芳樟酯、乙酸薰衣草酯、α-萜品醇、反式-β-罗勒烯；H-701（编号b1～b3）的主要成分分别为峰16、30、23、21、32对应的芳樟醇、乙酸芳樟酯、α-萜品醇、萜品烯-4-醇、乙酸薰衣草酯；Xinxun-4（编号c1～c2）的主要成分分别为峰16、8、18、30、20对应的芳樟醇、桉树脑、樟脑、乙酸芳樟酯、2-茨醇。

2.6 主成分分析

主成分分析（PCA）是一种非监督的学习方法，是从原始变量数据中导出少数几个互不相关的主成分（PCs），使PCs尽量完整地保留原有数据的信息，以此估计不同变量之间的关系[19－20]。采用Simca-P14软件以9批薰衣草精油中40个色谱峰的相对面积百分含量进行PCA。结果，第一主成分累积方差贡献率为63.1%，第

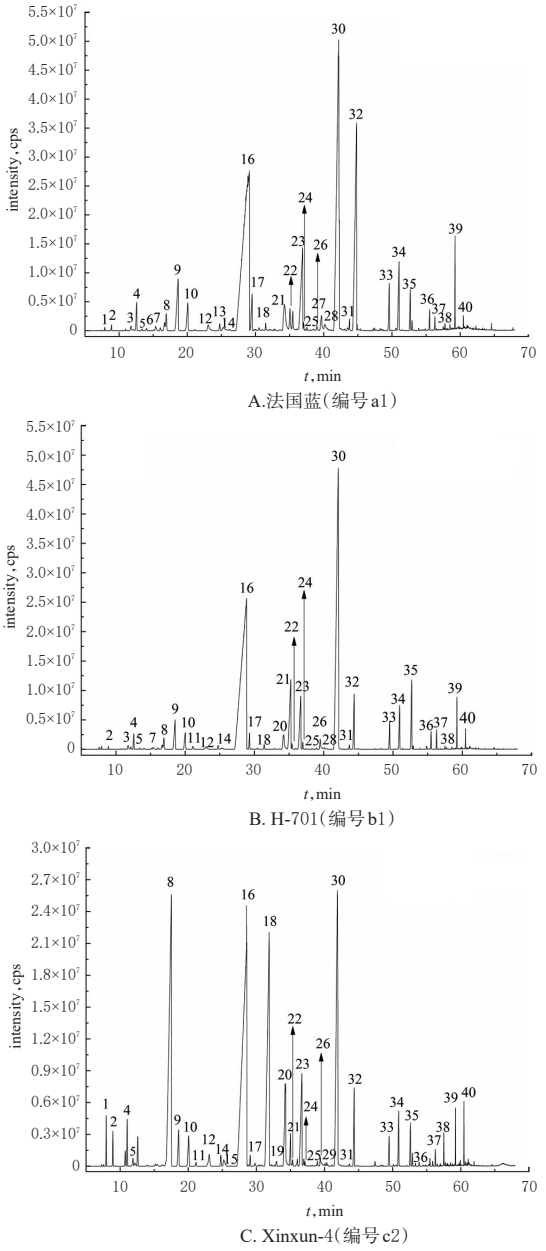


图1 薰衣草精油的总离子流图

Fig 1 Total ion chromatograms of essential oil of *L. angustifolia*

二主成分累积方差贡献率为18.7%，累积方差贡献率为81.8%，故前二个主成分可以代表原数据的主要信息，详见图2。其中，图2A可直观地给出各薰衣草精油样本在空间上的位置分布，可见3个不同品种、9批薰衣草精油样品被分为3个区域，且同一个品种薰衣草精油样品的位置相对集中，证明同一个品种的化学成分相似度较高。由图2B可以看出，离中心原点较远的化合物是区分3个不同品种薰衣草精油样品的特征化合物。法国蓝精油（编号a1～a4）的特征变量成分分别为峰32、9对应的乙酸薰衣草酯和反式-β-罗勒烯，H-701精油（编号b1～b3）的特征变量成分分别为峰16、30、21对应的成分芳樟醇、乙酸芳樟酯和萜品烯-4-醇，Xinxun-4精油（编号

c1～c2）的特征变量成分分别为峰8、18、20对应的桉树脑、樟脑和2-茨醇。

2.7 偏最小二乘法分析

偏最小二乘法（PLS）分析可用一个线性模型来描述独立变量*Y*（抗氧化活性值）与预测变量组*X*（化学成分）之间的关系，可以较好地解决许多以往用普通多元回归无法解决的问题，使数据分析更准确可靠[21]。采用Simca-P14软件进行PLS分析。以薰衣草精油中化学成分的相对面积百分含量为*X*变量、抗氧化活性值IC_{50}为*Y*变量建立PLS回归模型，并通过PLS回归模型得到变量投影重要性（VIP）值，通过描述变量的贡献程度来筛选变量组分。VIP＞1的变量被认为是对消除DPPH自由基有较大贡献的化学成分[22]。结果，对抗氧化活性有较大贡献的成分分别为峰16、21、35、8、20对应的芳樟醇（VIP值为2.940 0）、萜品烯-4-醇（VIP值为2.863 1）、石竹烯（VIP值为2.570 8）、桉树脑（VIP值为2.115 8）、2-茨醇（VIP值为1.329 8），详见图3[图3B中，在绘制VIP图时，由于其余3个化合物的VIP值过小（小于图中最后一个化合物1-辛烯-3醇的VIP值0.089 4），对模型解释程度极低，故图中只有37个化合物]。

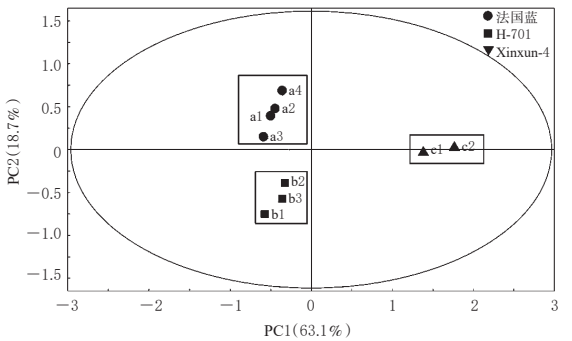
3 讨论

有研究表明，许多慢性病的发生和发展与机体的氧化、代谢和抗氧化能力密切相关[23]。人体在利用氧的过程中会因自然代谢或环境污染、食品污染等因素产生一

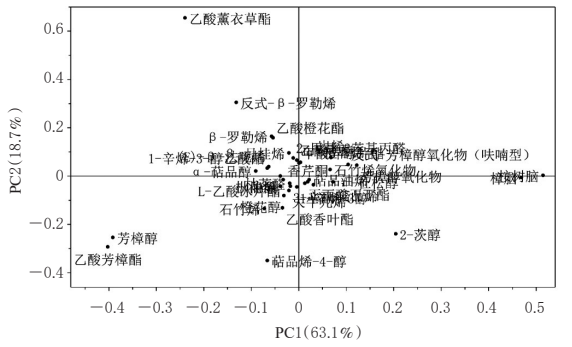
表3 薰衣草精油GS-MS成分分析结果

Tab 3 Results of GS-MS component analysis of essential oil of *L. angustifolia*

峰号	化学成分	分子式	分子量	RI[a]	RI[b]	相对面积百分含量，%									碎片离子*m/z*
						a1	a2	a3	a4	b1	b2	b3	c1	c2	
1	崁烯	$C_{10}H_{16}$	136.23	932	942	0.10	0.24	0.07	0.36	－	－	－	0.49	0.48	93,121,79,91,39
2	1-辛烯-3醇	$C_8H_{16}O$	128.21	969	980	0.15	0.24	0.21	－	0.19	0.16	0.24	0.22	0.12	29,43,57,72,85
3	3-辛酮	$C_8H_{16}O$	128.21	974	983	－	－	－	0.11	0.07	0.18	0.16	－	－	43,57,72,29,71
4	*β*-月桂烯	$C_{10}H_{16}$	136.23	979	987	0.77	0.70	0.42	1.29	0.54	0.66	0.63	0.64	0.49	41,93,69,39,27
5	乙酸己酯	$C_8H_{16}O_2$	144.21	1 009	1 015	－	－	0.21	0.47	－	0.13	0	0.07	0.10	43,56,61,69,84
6	*p*-伞花烃	$C_{10}H_{14}$	134.21	1 014	1 021	0.10	－	－	－	－	－	0.13	－	－	119,134,91,120,117
7	枞油烯	$C_{10}H_{16}$	136.23	1 018	1 027	－	0.45	0.19	－	0.22	0.30	0.29	－	－	41,53,68,79,93
8	桉树脑	$C_{10}H_{18}O$	154.24	1 020	1 023	0.58	0.92	0.46	2.23	0.53	1.58	1.56	20.13	18.88	43,81,108,71,111
9	反式-*β*-罗勒烯	$C_{10}H_{16}$	136.23	1 031	1 027	3.09	4.15	2.58	5.02	1.77	1.57	1.21	1.13	0.38	93,41,79,91,77
10	*β*-罗勒烯	$C_{10}H_{16}$	136.23	1 042	1 037	1.29	1.56	1.03	2.20	0.97	0.95	0.79	1.04	0.47	93,91,79,80,77
11	*γ*-萜品烯	$C_{10}H_{16}$	136.23	1 050	1 049	－	－	－	－	0.14	－	－	0.11	0.14	44,77,93,121,136
12	芳樟醇氧化物	$C_{10}H_{18}O_2$	170.24	1 064	1 067	0.42	0.73	0.36	0.88	0.14	0.79	0.57	0.57	2.96	59,94,43,55,68
13	*δ*-蓓烯	$C_{10}H_{16}$	136.23	1 076	1030	－	0.17	0.12	－	－	－	－	－	－	41,79,93,121,136
14	萜品油烯	$C_{10}H_{16}$	136.23	1 076	1 072	0.22	－	－	0.25	0.16	0.20	0.19	0.28	0.18	39,79,93,121,136
15	反式-芳樟醇氧化物（呋喃型）	$C_{10}H_{18}O_2$	170.24	1 080	1 085	0.27	0.58	0.29	0.68	0	0.61	0.45	0.33	2.31	59,94,43,55,68
16	芳樟醇	$C_{10}H_{18}O$	154.24	1 107	1 102	38.07	36.15	37.81	41.72	41.98	40.79	47.03	30.96	24.95	71,93,55,43,41
17	1-辛烯-3-醇乙酸酯	$C_{10}H_{18}O_2$	170.24	1 113	1 113	1.27	1.47	1.35	－	0.57	0.76	0.74	0.22	0.42	43,99,54,41,67
18	樟脑	$C_{10}H_{16}O$	152.23	1 134	1 144	0.19	0.22	0.15	0.25	－	0.44	0.45	14.52	16.17	41,69,81,95,108,152
19	橙花醇氧化物	$C_{10}H_{16}O$	152.23	1 146	1 151	－	－	－	－	－	－	－	－	0.18	27,41,55,68,83
20	2-茨醇	$C_{10}H_{18}O$	154.24	1 162	1 160	－	－	－	－	1.27	2.97	3.23	3.76	5.13	95,110,41,67,55
21	萜品烯-4-醇	$C_{10}H_{18}O$	154.24	1 172	1 172	0.69	0.68	0.88	0.70	5.30	1.96	2.82	0.69	1.06	71,111,93,43,86
22	隐酮	$C_9H_{14}O$	138.20	1 174	1 180	0.53	0.68	0.44	－	－	0.75	0.55	0.08	0.19	96,95,67,41,43
23	*α*-萜品醇	$C_{10}H_{18}O$	154.24	1 187	1 189	5.67	4.26	4.09	5.23	3.70	5.42	5.87	3.86	3.53	43,59,93,121,136
24	正丁酸正丁酯	$C_{10}H_{20}O_2$	172.26	1 190	1 191	0.17	0.23	0.21	－	0.22	0.14	0.15	0.15	0.27	43,56,71,84,89
25	甲酸异冰片酯	$C_{11}H_{18}O_2$	182.26	1 213	1 223	0.16	0.11	0.10	0.17	－	0.11	0.12	0.10	0.11	95,93,121,41,136
26	橙花醇	$C_{10}H_{18}O$	154.25	1 219	1 225	0.66	0.6	0.45	－	0.54	0.70	0.67	0.34	0.33	41,53,69,84,93
27	2-甲基-3苯基丙醛	$C_{10}H_{12}O$	148.20	1 227	1244	0.19	－	0.17	0.26	－	－	－	－	0.08	77,91,105,133,148
28	枯茗醛	$C_{10}H_{12}O$	148.20	1 227	1 226	－	0.23	－	－	－	0.29	0.21	－	－	77,105,119,133,148
29	香芹酮	$C_{10}H_{14}O$	150.22	1 231	1 234	－	0.10	－	－	－	0.13	0.11	0.07	0.12	39,54,82,93,108
30	乙酸芳樟酯	$C_{12}H_{20}O_2$	196.28	1 252	1 260	25.04	25.45	30.80	19.21	32.38	27.70	23.98	14.68	13.31	93,43,80,41,121
31	*L*-乙酸冰片酯	$C_{12}H_{20}O_2$	196.29	1 273	1 280	0.24	0.24	0.19	－	0.13	0.25	0.18	－	0.09	43,95,108,121,136
32	乙酸薰衣草酯	$C_{12}H_{20}O_2$	196.29	1 282	1 283	13.78	14.26	11.75	12.65	2.06	4.03	2.16	1.72	1.57	69,93,43,41,68
33	乙酸橙花酯	$C_{12}H_{20}O_2$	196.29	1 353	1 364	1.24	0.93	0.90	3.45	0.92	1.17	1.05	0.55	0.77	69,93,41,68,43
34	乙酸香叶酯	$C_{12}H_{20}O_2$	196.29	1 373	1 383	2.23	1.64	1.61	－	1.67	2.11	1.91	1.05	1.44	69,41,43,68,93
35	石竹烯	$C_{15}H_{24}$	204.35	1 397	1 403	0.95	1.03	1.25	0.98	2.63	1.14	0.93	0.80	0.50	93,133,91,41,79
36	*α*-檀香烯	$C_{15}H_{24}$	204.35	1 402	1 427	0.20	0.27	0.25	0.18	0.10	0.17	0.12	0.22	0.18	41,69,94,107,121
37	(*E*)-*β*-法呢烯	$C_{15}H_{24}$	204.35	1 454	1 457	0.37	0.45	0.58	0.49	0.46	0.29	0.24	0.11	0.09	41,69,93,67,79
38	大牛儿烯	$C_{15}H_{24}$	204.35	1 470	1 462	0.20	0.24	0.31	－	0.41	0.21	0.16	0.22	0.09	41,91,105,119,161
39	石竹烯氧化物	$C_{15}H_{24}O$	220.35	1 565	1 580	1.02	0.94	0.67	0.95	0.68	1.11	0.86	0.45	2.26	43,41,79,93,91
40	*τ*-杜松醇	$C_{15}H_{26}O$	222.37	1 627	1 636	0.12	0.11	0.09	0.25	0.24	0.21	0.26	0.45	0.65	161,43,41,204,105



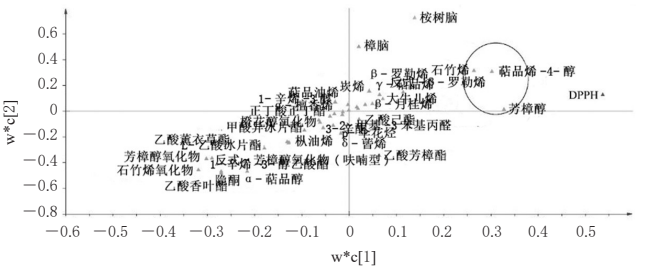
A.主成分分布图



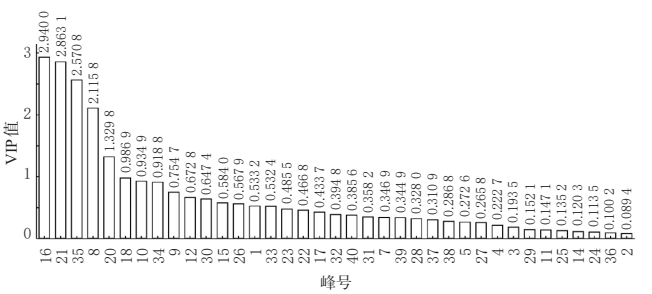
B.变量载荷图

图2　薰衣草精油的主成分分析

Fig 2　Principal component analysis of essential oil of *L. angustifolia*



A. PLS模型中各成分的载荷图



B. PLS模型中各成分的VIP值

图3　薰衣草精油各成分相对面积百分含量与IC_{50}的PLS模型分析图

Fig 3　PLS model analysis plots of relative area percentage content of components in essential oil of *L. angustifolia* to IC_{50}

些活性氧和自由基，当机体内环境中的“氧化和抗氧化”平衡被打破时，就会出现各种组织损伤并诱发疾病[24]。因此，为预防氧化对人体的不良影响，一些人工合成的抗氧化剂被研发和使用。但人工合成的抗氧化剂具有一定的生物毒性和致癌效应[25]，故临床对安全、无毒副作用的新型抗氧化剂的需求较为迫切。通过深入研究天然产物，从中寻找无毒副作用的抗氧化剂，并将其应用到食品、药品、化妆品等行业中将有助于提高人们的生活质量[24]。本研究基于组效关系探讨了薰衣草精油化学成分和抗氧化活性的关系，采用化学模式识别技术分析并提取了薰衣草精油中的抗氧化活性成分的特征信息，有助于揭示薰衣草精油抗氧化活性的药效物质基础，并对其相关产品的深入研发提供科学依据。

本研究采用GC-MS法分析了新疆3个品种9批薰衣草精油，以GC-MS结合RI对化学成分进行定性。结果表明，从3个品种薰衣草精油中共鉴定出40个化学成分，且其化学成分在组成和含量上存在差异。其中，峰16、30对应的芳樟醇和乙酸芳樟酯是法国蓝和H-701精油样品中含量较高的成分（两者总含量＞50%）；峰16、8对应的芳樟醇和桉树脑是Xinxun-4精油样品中含量较高的成分（含量为18.88%～30.96%）。抗氧化活性实验结果表明，薰衣草精油具有一定的抗氧化活性，对DPPH自由基具有较好的清除能力，其中H-701精油样品的抗氧化活性较强。PCA结果显示，3个不同品种9批薰衣草精油样品根据品种的不同被准确分为3个区域，法国蓝位于PC2的正半轴上，H-701位于PC2的负半轴上，Xinxun-4位于PC1的正轴上。法国蓝薰衣草精油的特征变量组分为峰32、9对应的乙酸薰衣草酯和反式-β-罗勒烯；H-701的特征变量组分为峰16、30、21对应的芳樟醇、乙酸芳樟酯和萜品烯-4-醇；Xinxun-4的特征变量组分为峰8、18、20对应的桉树脑、樟脑和2-茨醇。PLS分析结果显示，对薰衣草精油抗氧化活性贡献最大的成分为峰16对应的芳樟醇，其次分别为峰21、35、8、20对应的萜品烯-4-醇、石竹烯、桉树脑、2-茨醇等。其中，峰16对应的芳樟醇是对薰衣草精油消除DPPH自由基贡献最大的成分，与文献报道结果一致[26-28]。

综上所述，薰衣草精油具有一定的抗氧化活性，H-701样品的抗氧化活性较强；峰16对应的芳樟醇可能是对薰衣草精油消除DPPH自由基贡献最大的成分。

参考文献

[1] 张群，扎灵丽.薰衣草的研究和应用[J].时珍国医国药，2008，19(6)：1312-1314.

[2] 肖克来提，郭英芳.维药薰衣草的国内外应用简介[J].中国民族医药杂志，2006，12(4)：31-32.

[3] WELLS R，TRUONG F，ADAL A M，et al. Lavandula essential oils：a current review of applications in medicinal，food，and cosmetic industries of lavender[J]. Nat Prod Commun，2018，13(10)：1403-1417.

[4] 程鹏，潘勤，许善初.薰衣草精油的生物活性[J].国外医药（植物药分册），2008，23(1)：7-10.
[5] 王玉芹，孙亚军，施献儿.薰衣草精油的化学成分与药理活性[J].国外医药(植物药分册)，2004，19(1)：5-8.
[6] DANH L T，HAN L N，TRIET N D A，et al. Comparison of chemical composition，antioxidant and antimicrobial activity of lavender（Lavandula angustifolia L.）essential oils extracted by supercritical CO_2，hexane and hydrodistillation[J]. Food Bioprocess Tech，2012，6(12)：3481-3489.
[7] AMORATI R，FOTI M C，VALGIMIGLI L. Antioxidant activity of essential oils[J]. J Agric Food Chem，2013，61(46)：10835-10847.
[8] BLAŽEKOVIĆ B，YANG W，WANG Y，et al. Chemical composition，antimicrobial and antioxidant activities of essential oils of Lavandula×intermedia‘Budrovka’and L. angustifolia cultivated in Croatia[J]. Ind Crops Prod，2018，123：173-182.
[9] INSAWANG S，PRIPDEEVECH P，TANAPICHATSAKUL C，et al. Essential oil compositions and antibacterial and antioxidant activities of five lavandula stoechas cultivars grown in Thailand[J]. Chem Biodivers，2019，16(10)：1900371.
[10] MALDINI M，MONTORO P，ADDIS R，et al. A new approach to discriminate Rosmarinus officinalis L. plants with antioxidant activity，based on HPTLC fingerprint and targeted phenolic analysis combined with PCA[J]. Ind Crop Prod，2016，94：665-672.
[11] MSAADA K，SALEM N，TAMMAR S，et al. Essential oil composition of lavandula dentata，L.stoechas and L. multifida cultivated in Tunisia[J]. J Essent Oil Bear P，2012，15(6)：1030-1039.
[12] 蒋建兰，丁洪涛 苏鑫，等.基于组效关系的姜黄挥发油抗肿瘤活性成分辨识研究[J].分析化学，2012，40(10)：1488-1493.
[13] 符继红，唐军，廖享，等.基于抑菌活性成分的薰衣草精油组效关系研究[J].质谱学报，2015，36(5)：403-410.
[14] 黄小燕，乙引，张习敏，等.气相色谱-质谱联用测定黔产金钗石斛精油成分研究[J].时珍国医国药，2010，21(4)：889-891.
[15] 刘志东，郭本恒，王荫榆.抗氧化活性检测方法的研究进展[J].天然产物研究与开发，2008，20(3)：563-567.
[16] 熊双丽，卢飞，史敏娟，等. DPPH自由基清除活性评价方法在抗氧化剂筛选中的研究进展[J].食品工业科技，2012，33(8)：380-383.
[17] 赵二劳，王丽娟，李满秀.山楂提取物抗氧化能力的研究[J].食品研究与开发，2008，29(11)：19-21.
[18] 张洪权，佘嘉祎，杨英，等. GC/MS法结合保留指数分析香青花与叶挥发油的化学成分[J].化学研究与应用，2020，32(8)：1334-1340.
[19] MAIETTI S，ROSSI D，GUERRINI A，et al. A multivariate analysis approach to the study of chemical and functional properties of chemo-diverse plant derivatives：lavender essential oils[J]. Flavour Frag J，2013，28(3)：144-154.
[20] SARAJI M，MIRMAHDIEH S. Single drop microextraction followed by in-syringe derivatization and GC-MS detection for the determination of parabens in water and cosmetic products[J]. J Sep Sci，2009，32(7)：988-995.
[21] 姜红，史亚军，赵生玉，等.基于偏最小二乘法对三果汤抗氧化作用谱-效关系的分析[J].中国实验方剂学杂志，2018，24(3)：8-12.
[22] 王金梅，姚辰，李昌勤，等.基于DPPH、ABTS和FRAP法的红花抗氧化谱效关系研究[J].中国药学杂志，2017，52(10)：825-831.
[23] 杨思敏，陈瑞战，董航，等.高效液相色谱-质谱联用快速筛选并鉴定黄芩甲醇提取物中抗氧化活性成分[J].分析化学，2012，40(6)：8-12.
[24] 封家福，谯时文，张知贵，等.天然抗氧剂研究的进展[J].北方药学，2012，9(5)：37-39.
[25] VALENT P，FERNANDES E，CARVALHO F，et al. Antioxidative properties of cardoon（Cynara cardunculus L.）infusion against superoxide radical，hydroxyl radical，and hypochlorous acid[J]. J Agric Food Chem，2002，50(17)：4989-4993.
[26] BURT S. Essential oils：their antibacterial properties and potential applications in foods：a review[J]. Int J Food Microbiol，2004，4(3)：233-253.
[27] HAMDAOUI E I A，MSANDA F，BOUBAKER H，et al. Essential oil composition，antioxidant and antibacterial activities of wild and cultivated lavandula mairei humbert[J]. Biochem Syst Ecol，2018，76：1-7.
[28] 盛雪飞，彭燕，陈健初.天然抗氧化剂之间的协同作用研究进展[J].食品工业科技，2010，31(7)：414-417.

（收稿日期：2021-01-27　修回日期：2021-05-11）
（编辑：陈　宏）