一测多评法结合指纹图谱和化学模式识别分析在西黄丸质量评价中的应用Δ

刘凯丽[1*]，刘艳之[2]，王世晖[1]，卫春红[2]，王秀文[1]，王颖莉[1]，王　艳[1#]（1.山西中医药大学中药与食品工程学院，山西 晋中　030619；2.山西振东安欣生物制药有限公司，山西 晋中　030600）

中图分类号　R927.2　　**文献标志码**　A　　**文章编号**　1001-0408（2022）18-2219-05
DOI　10.6039/j.issn.1001-0408.2022.18.09

摘　要　目的　评价西黄丸的质量，并筛选影响其质量的差异标志物。**方法**　以麝香酮为内参物，采用一测多评（QAMS）法测定α-蒎烯等4个成分的含量，并与外标法进行比较；采用气相色谱（GC）法建立13批西黄丸的指纹图谱；采用SPSS 25.0软件、SIMCA 14.1软件进行聚类分析、正交偏最小二乘法-判别分析，以变量重要性投影（VIP）值大于1为标准筛选影响样品质量的差异标志物。**结果**　QAMS法测得α-蒎烯、乙酸辛酯、β-榄香烯含量分别为0～0.628 4、0.378 0～2.679 4、0.320 9～0.815 4 mg/g，外标法测得α-蒎烯、乙酸辛酯、β-榄香烯、麝香酮含量分别为0.001 5～0.627 1、0.378 0～2.594 7、0.329 2～0.837 0、0.385 7～0.806 0 mg/g，两种方法测得含量的相对误差均小于4%。13批西黄丸中共识别出26个共有峰，共指认了乙酸辛酯、β-榄香烯、麝香酮3个共有峰；相似度为0.912～0.946。13批样品可分为2类，S1～S2、S6～S10、S13为一类，S3～S5、S11～S12为一类。峰7、11、10、17、16的VIP值均大于1。**结论**　西黄丸中α-蒎烯等4个成分的含量，结合GC指纹图谱和化学模式识别分析可用于评价西黄丸的质量。峰7等5个共有峰对应的成分可能是影响样品质量的差异标志物。

关键词　西黄丸；一测多评法；含量测定；气相色谱指纹图谱；化学模式识别分析

Application of quantitative analysis of multi-components by single marker combined with fingerprint and chemical pattern recognition analysis in the quality evaluation of Xihuang pills

LIU Kaili[1], LIU Yanzhi[2], WANG Shihui[1], WEI Chunhong[2], WANG Xiuwen[1], WANG Yingli[1], WANG Yan[1]（1. College of Chinese Medicine and Food Engineering, Shanxi University of Chinese Medicine, Shanxi Jinzhong 030619, China; 2. Shanxi Zhendong Ante Biopharmaceutical Co., Ltd., Shanxi Jinzhong 030600, China）

ABSTRACT　OBJECTIVE To evaluate the quality of Xihuang pills, and to screen the differential markers affecting its quality. **METHODS** Using muskone as internal reference, the content of α-pinene and other 4 components were determined by quantitative analysis of multi-components by single marker (QAMS), and compared with the results of external standard method. The fingerprints of 13 batches of Xihuang pills were established by gas chromatography (GC) method. Cluster analysis (CA) and orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA) were performed by SPSS 25.0 software and SIMCA 14.1 software. The variable importance projection (VIP) value greater than 1 was used as the standard to screen differential markers affecting the quality of the samples. **RESULTS** The contents of α-pinene, octyl acetate and β-elemene measured by QAMS were 0-0.628 4, 0.378 0-2.679 4 and 0.320 9-0.815 4 mg/g, respectively. The contents of α-pinene, octyl acetate, β-elemene and musk ketone measured by external standard method were 0.001 5-0.627 1, 0.378 0-2.594 7, 0.329 2-0.837 0 and 0.385 7-0.806 0 mg/g, respectively. The relative error of the content determination results of the two methods was less than 4%. There were 26 common peaks in 13 batches of Xihuang pills, and 3 common peaks, such as octyl acetate, β-elemene and musk ketone, were identified; their similarities were 0.912-0.946. 13 batches of samples could be divided into two categories (S1-S2, S6-S10, S13 were clustered into one category and S3-S5, S11-S12 were clustered into one category). VIP values of peak 7, 11, 10, 17 and 16 were all greater than 1. **CONCLUSIONS** The content of 4 components such as α-pinene in Xihuang pills combined with GC fingerprint and chemical pattern recognition analysis can be used to evaluate the quality of Xihuang pills. The components corresponding to 5 common peaks such as peak 7 may be differential markers affecting the quality of the samples.

KEYWORDS　Xihuang pills; QAMS; content determination; GC fingerprint; chemical pattern recognition analysis

Δ**基金项目**　山西教育厅自然科学类项目（No.2021L362）；西黄丸对肝癌抑制作用的深入研究项目（No.SXZY202201）

＊**第一作者**　硕士研究生。研究方向：中药药理与毒理学。E-mail：liukaili0820@163.com

＃**通信作者**　副教授，硕士生导师，博士。研究方向：中药药理与毒理学。电话：0351-3179903。E-mail：wangyan81823@aliyun.com

西黄丸，又名犀黄丸，出自清代医家王洪绪《外科证治全生集》[1]，由牛黄或体外培育牛黄、麝香（或人工麝香）、醋乳香、醋没药制成，具有清热解毒、消肿散结之功效，主要用于治疗热毒壅结所致的痈疽疔毒、瘰疬、流注、癌肿[2]，以及肿瘤的长期辅助治疗。麝香、乳香和没药含有较多的挥发性成分，如麝香酮、α-蒎烯、β-榄香烯等，其中麝香酮为麝香的主要成分，具有抗肿瘤、抗炎、保护中枢神经系统和心血管系统等作用[3]；乳香的有效成分α-蒎烯具有抗肿瘤、抗炎、抗氧化等作用[4]，乙酸辛酯具有止痛的作用[5]；没药的有效成分β-榄香烯具有抗肿瘤、抗炎等作用[6]。西黄丸现收载于2020年版《中国药典》（一部），仅以猪去氧胆酸、游离胆红素为指标进行质量评价[2]。现有文献也仅对西黄丸中11-羰基-β-乳香酸进行含量测定[7]。由于中药复方制剂成分复杂，具有多成分、多靶点的特征[8]，现行质量标准未对西黄丸中挥发性成分进行分析，且现有文献中存在所测指标单一等问题。因此对单一成分进行检测，无法评价西黄丸的整体质量。

一测多评法（Quantitative analysis of multi-components by single marker，QAMS）具有节约对照品、快速等优点，适用于药效成分复杂多样的中药及中药制剂[8]。中药指纹图谱结合化学模式识别分析可用于评价中药的内在质量，可以客观、有效地控制中药质量，保证中药产品质量的一致性和稳定性[9]。基于此，本研究采用气相色谱（GC）-QAMS法同时测定了西黄丸中挥发性成分α-蒎烯、乙酸辛酯、β-榄香烯、麝香酮的含量，建立了GC指纹图谱并进行了化学模式识别分析，旨在为评价西黄丸的质量提供依据。

1 材料

1.1 主要仪器

本研究所用主要仪器有2010 Plus型GC仪（日本Shimadzu公司），7890A型GC仪（美国Agilent公司），ME104型万分之一分析天平[梅特勒-托利多仪器（上海）有限公司]，DL-5-B型低速离心机（上海安亭科学仪器厂）。

1.2 主要药品与试剂

α-蒎烯对照品（批号G1083952，纯度96.73%）购自上海泰坦科技股份有限公司；乙酸辛酯对照品（批号3879，纯度97.9%）购自上海诗丹德标准技术服务有限公司；β-榄香烯对照品（批号100268-201903，纯度99.4%）购自中国食品药品检定研究院；麝香酮对照品（批号wkq20030309，纯度≥98%）购自四川省维克奇生物科技有限公司；乙酸乙酯为色谱纯。乳香、没药药材均于2021年9月5日购自北京同仁堂科技发展股份有限公司，经山西中医药大学中药鉴定教研室裴香萍教授鉴定，分别为橄榄科植物乳香树*Boswellia carterii* Birdw.及同属植物*B. bhaw-dajiana* Birdw.树皮渗出的树脂、橄榄科植物地丁树*Commiphora myrrha* Engl.或哈地丁树*C. molmol* Engl.的干燥树脂。13批西黄丸（编号S1～S13）的样品来源信息见表1。

表1 13批西黄丸样品来源信息

编号	厂家	批号
S1～S2	武汉健民大鹏药业有限公司	210804，210103
S3	山东宏济堂制药集团股份有限公司	2106004
S4	浙江天一堂药业有限公司	2110001
S5	天津中新药业集团股份有限公司乐仁堂制药厂	1120124
S6～S8	山西振东安欣生物制药有限公司	20211108010，20211111010，20211112010
S9	山西振东安特生物制药有限公司	20180901003
S10	九寨沟天然药业股份有限公司	2109008
S11	长春人民药业集团有限公司	20211101
S12	北京同仁堂股份有限公司同仁堂制药厂	20041357
S13	通化金马药业集团股份有限公司	20210902

2 方法与结果

2.1 QAMS法测定挥发性成分含量

2.1.1 混合对照品溶液的制备 精密称取α-蒎烯、乙酸辛酯、β-榄香烯、麝香酮对照品各适量，用乙酸乙酯溶解，制成上述各成分质量浓度分别为274.56、636.48、344.80、337.20 μg/mL的混合对照品溶液。

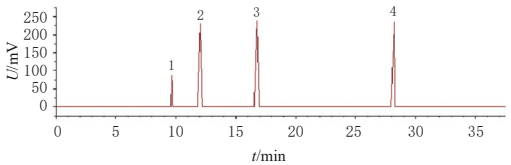
2.1.2 供试品溶液的制备 精密称取西黄丸粉末（过三号筛）1.00 g，精密加入乙酸乙酯5 mL，称定质量，超声（功率500 W，频率40 kHz）提取30 min，放冷至室温，再次称定质量，用乙酸乙酯补足减失的质量，以4 000 r/min离心20 min，取上清液，经0.22 μm微孔滤膜滤过，取续滤液，即得。

2.1.3 色谱条件 检测器为火焰离子化检测器；色谱柱为SE-54毛细管柱（30 m×0.25 mm，0.25 μm）；载气为高纯氮气（纯度为99.999%）；载气流量为1.39 mL/min；空气流量为400.0 mL/min；氢气流量为40.0 mL/min；氮气尾吹流量为30.0 mL/min；进样量为1 μL；分流比为10∶1。升温程序为初始柱温50 ℃，保持3.5 min；以25 ℃/min升至143 ℃，保持10 min；以10 ℃/min升至193 ℃，保持9 min；以10 ℃/min升至230 ℃，保持5 min。气化室和检测器温度均为250 ℃；总运行时间为36.42 min。

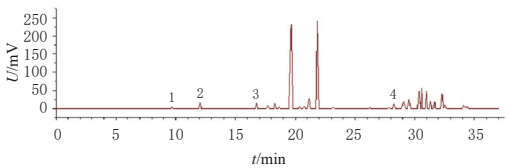
2.1.4 系统适用性试验 取上述混合对照品溶液、供试品溶液以及空白对照溶液（乙酸乙酯）各适量，按“2.1.3”项下色谱条件进样测定，记录色谱图（图1，空白对照溶液图略）。结果显示，空白对照溶液对测定无干扰，各待测成分色谱峰与相邻色谱峰的分离度均大于1.5。

2.1.5 线性关系考察 取“2.1.1”项下混合对照品溶液，用乙酸乙酯分别稀释2、4、8、16、32、64倍，制得系列线性工作溶液。取系列线性工作溶液及“2.1.1”项下混合对照品溶液适量，按“2.1.3”项下色谱条件进样测定，记录峰面积。以待测成分质量浓度为横坐标（X）、峰面积为纵坐标（Y）进行线性回归，结果见表2。

2.1.6 精密度试验 取“2.1.2”项下供试品溶液（编号S6），按“2.1.3”项下色谱条件连续进样测定6次，记录峰



A. 混合对照品溶液



B. 供试品溶液（编号S6）

1：α-蒎烯；2：乙酸辛酯；3：β-榄香烯；4：麝香酮

图1　西黄丸定量分析的GC图

表2　α-蒎烯等待测成分的回归方程与线性范围

待测成分	回归方程	r	线性范围/(μg/mL)
α-蒎烯	Y=624.2X−185.4	0.999 7	4.290～274.560
乙酸辛酯	Y=714.0X−2 008.4	0.999 8	9.945～636.480
β-榄香烯	Y=1 371.6X−213.9	0.999 9	5.388～344.800
麝香酮	Y=1 385.8X−644.0	0.999 8	5.269～337.200

面积。结果显示，α-蒎烯、乙酸辛酯、β-榄香烯、麝香酮峰面积的RSD分别为1.80%、1.88%、1.76%、1.74%（n=6），表明方法精密度良好。

2.1.7　重复性试验　精密称取西黄丸样品（编号S6），共6份，分别按“2.1.2”项下方法制备供试品溶液，再按“2.1.3”项下色谱条件进样测定，记录峰面积并按外标法计算含量。结果显示，α-蒎烯、乙酸辛酯、β-榄香烯、麝香酮含量的RSD分别为1.64%、1.74%、1.76%、1.78%（n=6），表明方法重复性良好。

2.1.8　稳定性试验　取“2.1.2”项下供试品溶液（编号S6），分别于室温下放置0、2.5、5、7.5、10、15、24 h时，按“2.1.3”项下色谱条件进样测定，记录峰面积。结果显示，α-蒎烯、乙酸辛酯、β-榄香烯、麝香酮峰面积的RSD分别为1.27%、1.28%、1.43%、1.40%（n=7），表明供试品溶液在室温下放置24 h内稳定性良好。

2.1.9　加样回收率试验　取已知含量的西黄丸样品（编号S6）约0.50 g，共6份，精密称定，分别精密加入相当于已知量100%的单一对照品溶液，按“2.1.2”项下方法制备供试品溶液，再按“2.1.3”项下色谱条件进样测定，记录峰面积并计算加样回收率。结果显示，α-蒎烯、乙酸辛酯、β-榄香烯、麝香酮的平均加样回收率分别101.99%、102.28%、98.43%、99.17%，RSD均小于3.0%（n=6），表明方法准确度良好。

2.1.10　相对校正因子的计算　取“2.1.1”项下混合对照品溶液及“2.1.5”项下系列线性工作溶液，按“2.1.3”项下色谱条件进样测定，记录峰面积。以麝香酮为内参物（因麝香酮在不同批次西黄丸中含量较为稳定），按下式计算麝香酮相对于其他成分的相对校正因子（$f_{k/s}$），$f_{k/s}$=(C_s×A_k)/(C_k×A_s)，式中C_s为内参物质量浓度，A_s为内参物色谱峰峰面积，C_k为待测成分质量浓度，A_k为待测成分色谱峰峰面积[10]。结果显示，α-蒎烯、乙酸辛酯、β-榄香烯的平均$f_{k/s}$分别为0.450、0.499、1.006，RSD分别为1.58%、1.98%、1.98%（n=7）。

2.1.11　耐用性考察　取“2.1.5”项下系列线性工作溶液，按“2.1.3”项下色谱条件进样测定，记录峰面积。分别考察不同GC仪（Agilent 7890A型、岛津2010 Plus型）、色谱柱[Agilent SE-54、Agilent HP-5MS、RESTEK Rtx-5（规格均为30 m×0.25 mm，0.25 μm）]对$f_{k/s}$的影响。结果显示，α-蒎烯、乙酸辛酯、β-榄香烯的平均$f_{k/s}$分别为0.451、0.499、1.018，RSD均小于5%，表明本方法耐用性良好。

2.1.12　样品含量测定　取13批西黄丸样品，分别按“2.1.2”项下方法制备供试品溶液，再按“2.1.3”项下色谱条件进样测定，记录峰面积，分别按外标法、QAMS法计算样品含量，每样品平行测定3次，取平均值，并按下式计算相对误差：相对误差=($W_{QAMS法}$−$W_{外标法}$)/$W_{QAMS法}$，式中$W_{QAMS法}$为QAMS法测得的含量，$W_{外标法}$为外标法测得的含量。结果显示，除编号S1～S2、S5、S9、S11、S13样品中未检出α-蒎烯外，两种含量测定方法所得含量结果的相对误差均小于4%，表明两种方法的测定结果无显著性差异。结果见表3。

表3　13批西黄丸中α-蒎烯等待测成分的含量测定结果（n=3）

样品编号	α-蒎烯			乙酸辛酯			β-榄香烯			麝香酮
	外标法/(mg/g)	QAMS法/(mg/g)	相对误差/%	外标法/(mg/g)	QAMS法/(mg/g)	相对误差/%	外标法/(mg/g)	QAMS法/(mg/g)	相对误差/%	外标法/(mg/g)
S1	0.001 5	0	−	0.565 2	0.572 3	1.23	0.592 6	0.578 1	−2.52	0.511 5
S2	0.001 5	0	−	0.533 6	0.539 5	1.10	0.5520	0.538 5	−2.52	0.494 2
S3	0.588 9	0.589 3	0.07	2.594 7	2.679 4	3.16	0.462 8	0.451 2	−2.56	0.515 2
S4	0.517 8	0.517 1	−0.13	0.730 8	0.7430	1.64	0.837 0	0.815 4	−2.65	0.806 0
S5	0.001 5	0	−	1.021 8	1.046 0	2.33	0.523 3	0.510 2	−2.55	0.525 5
S6	0.1090	0.107 9	−1.04	1.094 5	1.121 9	2.45	0.555 9	0.542 2	−2.52	0.500 6
S7	0.146 8	0.145 8	−0.65	1.994 5	2.057 2	3.05	0.623 4	0.608 0	−2.47	0.465 3
S8	0.167 5	0.166 7	−0.53	2.366 0	2.443 0	3.15	0.633 7	0.618 4	−2.47	0.472 0
S9	0.001 5	0	−	1.186 1	1.218 8	2.68	0.585 2	0.571 7	−2.37	0.385 7
S10	0.405 2	0.405 3	0.03	1.042 8	1.068 9	2.43	0.357 9	0.349 0	−2.54	0.448 3
S11	0.001 5	0	−	0.464 7	0.467 7	0.64	0.415 9	0.405 2	−2.62	0.563 1
S12	0.627 1	0.628 4	0.19	1.385 8	1.425 8	2.80	0.402 4	0.392 7	−2.48	0.417 3
S13	0.001 5	0	−	0.378 0	0.378 0	0.01	0.329 2	0.320 9	−2.59	0.469 8

−：未检出

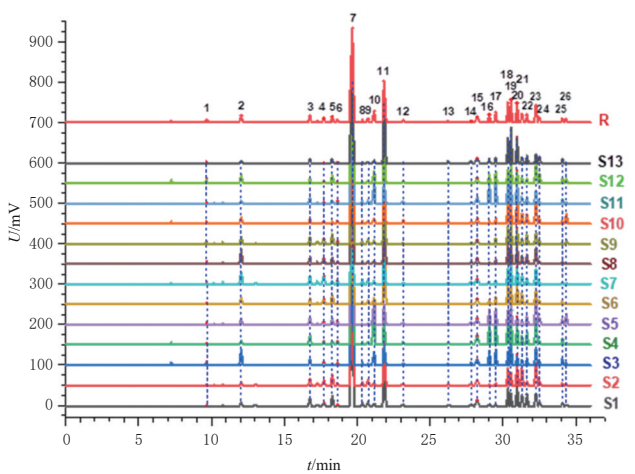
2.2　GC指纹图谱的建立

2.2.1　精密度试验　取“2.1.2”项下供试品溶液（编号S6），按“2.1.3”项下色谱条件连续进样6次，记录色谱图。以麝香酮为参照峰，计算各共有峰的相对保留时间和相对峰面积。结果显示，各共有峰相对保留时间和相对峰面积的RSD均小于3.0%（n=6），表明方法精密度良好。

2.2.2　重复性试验　精密称取西黄丸样品（编号S6），共6份，分别按“2.1.2”项下方法制备供试品溶液，再按“2.1.3”项下色谱条件进样测定，记录色谱图。以麝香酮为参照峰，计算各共有峰的相对保留时间和相对峰面积。结果显示，各共有峰相对保留时间和相对峰面积的RSD均小于3.0%（n=6），表明方法重复性良好。

2.2.3　稳定性试验　取“2.1.2”项下供试品溶液（编号S6），分别于室温下放置0、2.5、5、7.5、10、15、24 h时，按“2.1.3”项下色谱条件进样测定，记录色谱图。以麝香酮为参照峰，计算各共有峰的相对保留时间和相对峰面积。结果显示，各共有峰相对保留时间和相对峰面积的RSD均小于3.0%（n=7），表明供试品溶液在室温下放置24 h内稳定性良好。

2.2.4　指纹图谱的建立　取13批西黄丸样品，分别按“2.1.2”项下方法制备供试品溶液，按“2.1.3”项下色谱条件进样测定，将数据导入《中药色谱指纹图谱相似度评价系统（2012版）》，以S6为参照图谱（因S6样品保留时间和峰面积适中），采用中位数法，时间窗宽度设置为0.1 min，多点校正后自动匹配，生成叠加指纹图谱和对照指纹图谱（R）。结果显示，13批西黄丸共识别出26个共有峰，通过与混合对照品（图1A）进行比对，共指认了其中3个成分，分别为乙酸辛酯（峰2）、β-榄香烯（峰3）、麝香酮（峰15）。结果见图2。



2：乙酸辛酯；3：β-榄香烯；15：麝香酮

图2　13批西黄丸的GC叠加指纹图谱及对照指纹图谱

2.2.5　共有峰归属分析　取没药、乳香药材，按“2.1.2”项下方法制备供试品溶液，按“2.1.3”项下色谱条件进样测定，以对照指纹图谱为参照进行共有峰比对。结果显示，峰2～7、9～10、16、20、22～24、26来源于没药，峰1～3、5、7～8、10、19～20、22～25来源于乳香。结果见图3。

2.2.6　相似度评价　采用《中药色谱指纹图谱相似度评价系统（2012版）》对西黄丸指纹图谱的相似度进行评价。结果显示，13批样品与对照指纹图谱之间的相似度分别为0.943、0.940、0.915、0.918、0.912、0.936、0.933、0.941、0.946、0.928、0.921、0.916、0.939，表明不同厂家生产的西黄丸化学成分种类差异较小。

2.3　聚类分析

以13批西黄丸样品的26个共有峰峰面积为变量，选用组间连接法，以平方欧氏距离为度量，采用SPSS 25.0软件进行聚类分析。结果显示，当平方欧氏距离为20时，13批样品分为2类，S1～S2、S6～S10、S13为一类，S3～S5、S11～S12为一类。结果见图4。

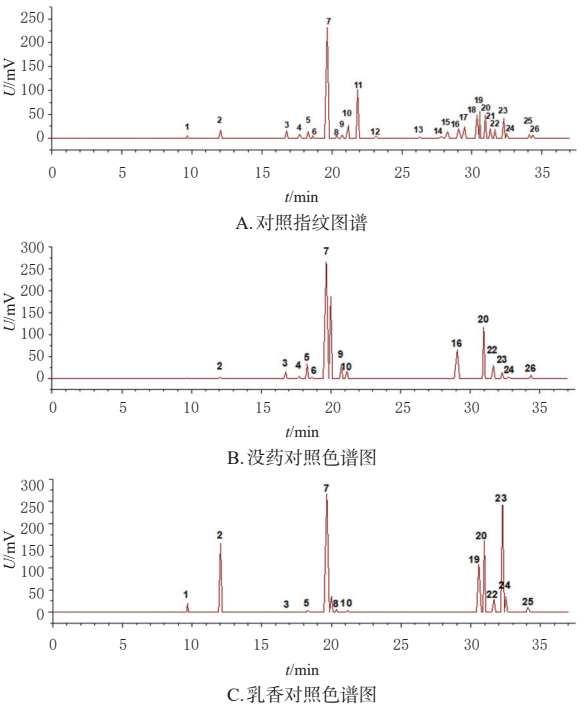


图3　没药、乳香药材的对照GC图

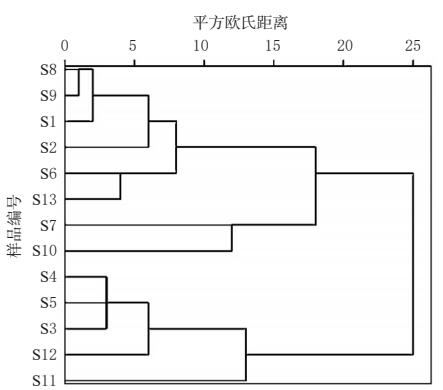


图4　13批西黄丸样品的聚类分析树状图

2.4　正交偏最小二乘法-判别分析

采用SIMCA 14.1软件进行正交偏最小二乘法-判别分析。结果显示，模型累计解释率（R^2X、R^2Y）分别为0.978、0.990，模型预测参数（Q^2）为0.877，其值越接近1表明模型的稳定性和预测性越好[11]。13批样品可分为两类，S1～S2、S6～S10、S13为一类，S3～S5、S11～S12为一类。结果见图5。

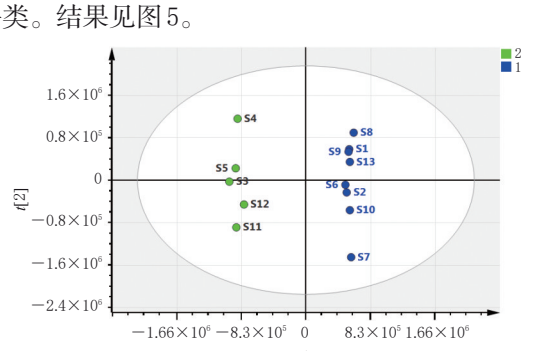


图5　13批西黄丸样品的正交偏最小二乘法-判别分析散点得分图

以变量重要性投影（variable importance in projection，VIP）值大于1为标准[12]筛选影响样品质量的差异标志物。结果显示，峰7、11、10、17、16的VIP值均大于1，表明这5个共有峰对应的成分可能是影响样品质量的差异标志物。结果见图6。

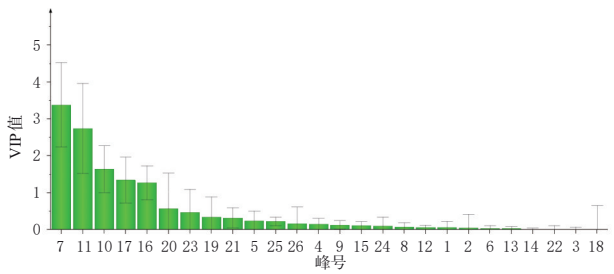


图6　26个共有峰的VIP值

3　讨论

3.1　供试品溶液制备方法的确定

本课题组前期参考相关文献后发现，超临界流体萃取法的挥发油得率及指标成分含量受萃取温度、压力、时间的影响较大[13]；水蒸气蒸馏法在提取过程中易出现乳化、难分离、得率低等问题，从而影响含量测定的结果[14]；超声提取法的挥发油得率受提取温度、压力的影响较小[14]，且操作简便，各成分色谱峰响应值高，提取效果好，色谱信息丰富，故选择超声提取法制备供试品溶液。

3.2　含量测定结果分析

α-蒎烯、乙酸辛酯分别为2020年版《中国药典》（一部）中索马里乳香和埃塞俄比亚乳香的标志成分，以α-蒎烯和乙酸辛酯为含量测定指标可以分析不同厂家西黄丸中乳香药材的来源。含量测定结果显示，S1～S2、S5、S9、S11、S13样品中均未检出α-蒎烯，表明这些批次的西黄丸所用乳香可能来源于埃塞俄比亚乳香[2]。不同批次西黄丸中α-蒎烯和乙酸辛酯含量差异较大，这可能与乳香药材的来源不同有关。β-榄香烯和麝香酮在不同批次西黄丸中含量差异较小，表明这两种成分在西黄丸的生产过程中较为稳定。

3.3　指纹图谱与化学模式识别结果分析

13批样品指纹图谱的相似度为0.912～0.946，表明不同厂家西黄丸化学成分种类差异较小。聚类分析结果显示，当平方欧氏距离为20时，13批样品可分为2类，S1～S2、S6～S10、S13为一类，S3～S5、S11～S12为一类，表明不同厂家西黄丸质量存在差异，可能是由于不同厂家所用药材来源和生产设备、工艺等不同所造成的。正交偏最小二乘法-判别分析结果显示，峰7、11、10、17、16的VIP值均大于1，其中峰7、10在乳香和没药中均有检出，峰16在没药中检出，表明这5个共有峰对应的成分可能是影响样品质量的差异标志物。虽然乙酸辛酯、β-榄香烯、麝香酮的VIP值均小于1，对西黄丸的质量差异影响较小，但作为药理活性的重要成分，仍有必要对其含量进行测定。在后续研究中，本课题组将采用质谱手段对峰7等5个共有峰对应的成分进行定性分析，同时结合药效学研究进一步探讨这些成分对西黄丸质量的影响。

综上所述，本研究成功建立了测定西黄丸中α-蒎烯等4个成分含量的方法，结合GC指纹图谱和化学模式识别分析可用于评价西黄丸的质量。峰7等5个共有峰对应的成分可能是影响样品质量的差异标志物。

参考文献

[1] 杨雨婷，曾瑾，陈平，等. 西黄丸抗肿瘤临床应用及药理作用机制研究进展[J]. 中国实验方剂学杂志，2022，28（3）：250-258.

[2] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典：一部[S]. 2020年版. 北京：中国医药科技出版社，2020：233，876-877.

[3] AN J，WANG H Y，MA X M，et al. Musk ketone induces apoptosis of gastric cancer cells via downregulation of sorbin and SH_3 domain containing 2[J]. Mol Med Rep，2021，23（6）：450.

[4] SALEHI B，UPADHYAY S，ERDOGANORHAN I，et al. Therapeutic potential of α- and β-pinene：amiracle gift of nature[J]. Biomolecules，2019，9（11）：E738.

[5] 李平华，赵汉臣，闫荟. CO_2超临界流体萃取法萃取乳香的工艺研究[J]. 中国药房，2007，18（33）：2584-2585.

[6] CAI S Z，XIONG Q W，ZHAO L N，et al. B-elemene triggers ROS-dependent apoptosis in glioblastoma cells through suppressing STAT3 signaling pathway[J]. Pathol Oncol Res，2021，27：594299.

[7] 马丽. 高效液相色谱法、气相色谱法及气相色谱-质谱法对西黄丸中11-羰基-β-乳香酸的鉴别及含量测定比较[J]. 贵州医药，2018，42（6）：666-667.

[8] 马梦鸽，杨莎，唐志书，等. 基于HPLC指纹图谱与一测多评法联用的血府逐瘀片质量控制研究[J]. 中草药，2021，52（22）：6856-6863.

[9] 鄢海燕，邹纯才.《中国药典》（2010年版～2020年版）中药指纹（特征）图谱应用进展与展望[J]. 南方医科大学学报，2022，42（1）：150-155.

[10] 任坤瑾，徐静，何胜利. 基于一测多评法对补肾康乐胶囊中7种成分的质量控制研究[J]. 中国药师，2020，23（8）：1539-1544.

[11] 庞会娜，范琳，肖凤琴，等. 指纹图谱结合化学计量法对葛根抗氧化活性部位的药效物质筛选[J]. 中国药房，2021，32（7）：839-844.

[12] 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.

[13] 王秀文，刘艳之，卫春红，等. 超临界流体萃取-GC-MS分析西黄丸中挥发性成分[J]. 化学研究与应用，2021，33（3）：423-429.

[14] 刘媛，臧振中，伍振峰，等. 中药挥发油质量控制的现状、问题与对策[J]. 中草药，2018，49（24）：5946-5951.

（收稿日期：2022-02-18　修回日期：2022-08-13）
（编辑：陈　宏）