

# HS-SPME-GC-MS结合香味数据库分析 不同叶色紫苏叶挥发性成分差异



刘雯丽<sup>1#</sup>, 吴炎培<sup>2#</sup>, 聂黎行<sup>2</sup>, 康 帅<sup>2</sup>, 陈丽枝<sup>3</sup>, 于 爽<sup>3</sup>, 李灵犀<sup>1</sup>, 魏 锋<sup>2</sup>

1. 沈阳药科大学功能食品与葡萄酒学院 (沈阳 117004)

2. 中国食品药品检定研究院 (北京 100050)

3. 岛津企业管理(中国)有限公司 (北京 100020)

**【摘要】目的** 探究双紫紫苏叶 (PP)、面绿背紫紫苏叶 (GP)、双绿紫苏叶 (GG) 中挥发性成分的差异, 并分析其与叶色的相关性。**方法** 采用顶空固相微萃取-气相色谱-质谱法 (HS-SPME-GC-MS) 结合香味数据库鉴定不同叶色紫苏叶的挥发性成分。基于挥发性成分的色谱峰面积, 采用偏最小二乘判别分析 (PLS-DA) 筛选指标性成分。对挥发性成分与色数值进行 Pearson 相关性分析。**结果** 从不同叶色的紫苏叶中共鉴定出了 94 个挥发性成分, 其中有 28 个化合物为首次从紫苏叶中鉴定得到。通过 PLS-DA 模型, 从不同叶色紫苏叶中筛选出变量投影重要度 (VIP) 值 > 1 的关键差异性成分共计 42 个, 包括  $\beta$ -紫罗酮、苯甲酸甲酯、壬醛等。单因素方差结果表明, PP、GP、GG 中紫苏醛的相对含量无显著性差异, 而紫苏酮的相对含量为 PP > GG > GP。红色像元分量均值 (R 值) 与苯甲醇、苯乙醇、叶醇、1-辛烯-3-醇、苯甲酸甲酯、紫苏酮、(E)-3-辛烯-2-酮、 $\beta$ -紫罗酮、苯甲醛、苯甲酸呈中等正相关。**结论** 研究筛选出不同叶色紫苏叶的指标性成分, 揭示了挥发性化学成分与叶色的相关性, 可为药用紫苏叶的质量控制和评价提供科学依据。

**【关键词】** 紫苏叶; 顶空固相微萃取-气相色谱-质谱; 香味数据库; 颜色; 相关性; 差异

**【中图分类号】** R284.1

**【文献标识码】** A

Differences of volatile components in *Perilla folium* with different leaf colors analyzed by HS-SPME-GC-MS combined with smart aroma database

LIU Wenli<sup>1#</sup>, WU Yanpei<sup>2#</sup>, NIE Lixing<sup>2</sup>, KANG Shuai<sup>2</sup>, CHEN Lizhi<sup>3</sup>, YU Shuang<sup>3</sup>, LI Lingxi<sup>1</sup>, WEI Feng<sup>2</sup>

1. Faculty of Functional Food and Wine, Shenyang Pharmaceutical University, Shenyang 117004, China

2. China National Institute for Food and Drug Control, Beijing 100050, China

3. Shimadzu Enterprise Management (China) Co., Ltd., Beijing 100020, China

<sup>#</sup>Co-first authors: LIU Wenli and WU Yanpei

Corresponding author: NIE Lixing, Email: nielixing@163.com

**【Abstract】Objective** To investigate the differences of volatile components in *Perilla folium* with both surfaces purple (PP), *Perilla folium* with upper surface green and the lower surface purple (GP), and *Perilla folium* with both surfaces green (GG), and analyze their correlation with leaf colors.

DOI: 10.12173/j.issn.2097-4922.202503004

<sup>#</sup> 共同第一作者

基金项目: 国家重点研发计划中医药现代化专项 (2023YFC3504100); 中国食品药品检定研究院关键技术研究基金项目 (GJJS-2022-10-2)

通信作者: 聂黎行, 博士, 教授, 硕士研究生导师, Email: nielixing@163.com

**Methods** Headspace solid-phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry (HS-SPME-GC-MS) combined with a smart aroma database was used to identify the volatile components in *Perilla folium* with different leaf colors. Based on the peak areas of the volatile components, partial least squares-discriminant analysis (PLS-DA) was used to screen the indicator components. Pearson correlation analysis was performed on volatile components and the color values of the leaves. **Results** A total of 94 volatile components were identified from *Perilla folium* with different leaf colors, among which 28 compounds were identified for the first time from *Perilla folium*. A total of 42 key differential components with variable importance in projection (VIP) values >1, including  $\beta$ -loneone, methyl benzoate and nonanal, were screened by PLS-DA model. The one-way ANOVA results showed that there was no significant difference among the relative content of perilla aldehyde in PP, GP and GG, while the relative content of perilla ketone was ranked as PP>GG>GP. The red image element component means (R values) were moderately positively correlated with benzyl alcohol, phenylethyl alcohol, follicular alcohol, 1-octen-3-ol, methyl benzoate, perilla ketone, (*E*)-3-octen-2-one,  $\beta$ -perilla ketone, benzaldehyde and benzoic acid. **Conclusion** The study screens out the index components of *Perilla folium* with different leaf colors, reveals the correlation between volatile components and leaf colors, and can provide scientific basis for the quality control and evaluation of medicinal *Perilla folium*.

**【Keywords】** *Perilla folium*; Headspace solid-phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry; Smart aroma database; Color; Correlation; Difference

紫苏 *Perilla frutescens* (L.) Britt. 是唇形科 1 年生草本植物, 其茎、叶和种子均可用作中药材, 尤以紫苏叶最为常用, 具有解表散寒、行气和胃的作用, 可用于治疗风寒感冒、咳嗽呕恶、妊娠呕吐、鱼蟹中毒等病症<sup>[1]</sup>。紫苏在全国各地均有种植, 植物变异较大, 其叶片颜色存在显著差异<sup>[2]</sup>。《慈利县志》记载, 明代南方地区将紫苏叶作为当地药材, 并根据叶色将其分为 3 种类型: 双面紫色、面绿背紫和双面绿色, 其中以紫色品相为佳。古人将两面紫色的紫苏叶称为“苏”, 而两面绿色的则称为“荏”。《本草经集注》中描述“荏, 状如苏, 高大白色, 不甚香”, 所指的“荏”即现代所称的双绿紫苏叶。该书还提到: “叶下紫色, 而气甚香, 其无紫色不香似荏者, 名野苏, 不堪用”, 明确区分了双紫紫苏叶与双绿紫苏叶, 并指出双绿紫苏叶不可替代双紫紫苏叶入药<sup>[3]</sup>。此外, 《本草图经》<sup>[4]</sup>、《雷公炮制药性解》<sup>[5]</sup>、《本草衍义》<sup>[6]</sup>等传统医药典籍均认为紫苏“叶紫者为佳”, 但关于不同叶色紫苏叶成分差异的系统研究仍鲜见报道。

紫苏叶含有多种成分, 主要包括挥发油类、花青素类、黄酮类、酚酸类、三萜类、氨基酸类及糖类等<sup>[7]</sup>。其中, 挥发油类化合物是紫苏叶最重要的药理活性成分之一。《中国药典(2020 年版)》一部明确规定, 紫苏叶的挥发油含量不得少于 0.40% (mL/g)<sup>[1]</sup>。研究表明, 紫苏不同部位

的挥发油均具有显著的清除自由基能力, 其中叶片提取物的 DPPH 自由基清除活性最强, 表明其具有优异的抗氧化作用<sup>[8]</sup>。此外, 紫苏挥发油还具有广谱的生物活性, 包括抗菌、抗炎<sup>[9]</sup>及抗肿瘤<sup>[10]</sup>等作用。这些药理特性为紫苏叶在传统医药和现代功能性食品中的应用提供了科学依据。

气相色谱-质谱联用技术 (gas chromatography-mass spectrometry, GC-MS) 是分析挥发性成分的常用方法, 在食品和药品行业中得到广泛应用<sup>[11-13]</sup>。陈家宝等<sup>[14]</sup>采用 GC-MS 法对不同种质紫苏叶的挥发性成分进行分析, 发现其化学型与叶片颜色存在一定相关性: 两面紫色和单面紫色的紫苏叶多属于紫苏醛型, 而两面绿色的紫苏叶则不属于紫苏醛型, 其中白苏均属于紫苏酮型。黎文珊<sup>[15]</sup>利用 GC-MS 技术对紫苏叶挥发油进行检测, 共鉴定出 36 种化学成分, 其中紫苏酮相对含量最高 (52.8%), 其次为异白苏烯酮、 $\beta$ -石竹烯、顺, 反- $\alpha$ -金合欢烯、紫苏醛、芳樟醇、肉豆蔻醚、环氧石竹烯和  $\alpha$ -律草烯。向福等<sup>[16]</sup>通过 GC-MS 技术系统研究了不同栽培品种及生育阶段对紫苏叶挥发油成分的影响, 结果表明重庆丰都栽培种 P11-1 是挥发油的优势品种, 且紫苏叶的最佳采收时期为开花期。

香味数据库是一种收录 508 种香气成分化合物的专用数据库, 能够实现数百种香气成分的高效筛查, 显著减少数据分析的工作量并提高检测

结果的准确性。该数据库支持自动化创建化合物的测量和分析方法，包含从前处理装置的分析条件设置、方法建立，到数据分析和报告生成等完整的分析流程。在实际应用中，首先使用模板方法文件测定正构烷烃标准品，通过保留时间自动调整（automatic adjustment of retention time, AART）技术，结合保留指数和正构烷烃的保留时间，对目标化合物的保留时间进行自动校准。香味数据库的强大之处在于，其能够通过色谱峰和特征离子比对，快速识别传统分析方法难以确认的香味物质<sup>[17]</sup>。这一技术极大提升了复杂香气成分的鉴定效率和可靠性。

本研究创新性地采用顶空固相微萃取气相色谱-质谱法（headspace solid-phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry, HS-SPME-GC-MS）结合香味数据库，对不同叶色紫苏叶中的挥发性成分进行系统鉴定。通过偏最小二乘判别分析（partial least squares-discriminant analysis, PLS-DA）方法，基于变量投影重要度（variable importance for the projection, VIP）筛选不同叶色紫苏叶的特征性差异成分，深入探讨叶片颜色与挥发性成分组成之间的相关性。该研究旨在为紫苏叶的质量评价和品种鉴别提供科学依据和新的研究方法。

## 1 材料

### 1.1 主要仪器

GCMC-TQ8050 NX 三重四极杆气质联用仪，包括 AOC-6000 多功能自动进样器（日本岛津公司）；XPE105 电子天平（瑞士梅特勒托利多公司）。

### 1.2 主要药品与试剂

从紫苏叶栽培基地和药材市场收集双面紫色的紫苏叶（以下简称“PP”）、表面绿色、背面紫色的紫苏叶（以下简称“GP”）、双面绿色的紫苏叶（以下简称“GG”）各 10 批，均经中国食品药品检定研究院康帅副研究员鉴定为 *Perilla frutescens* (L.) Britt. 的干燥叶，具体信息见表 1。

## 2 方法与结果

### 2.1 HS-SPME-GC-MS检测

紫苏叶样品经干燥处理后，使用高速粉碎机研磨成粉末。精密称取 0.2 g 样品粉末置于 20 mL 顶空瓶中，立即加盖密封。采用 HS-SPME 法进

表1 30批紫苏叶样品信息

Table 1. Information on 30 batches of *Perilla folium* samples

| 叶色   | 编号   | 收集时间     | 收集地点     |
|------|------|----------|----------|
| 双面紫色 | PP1  | 20220710 | 河北省安国市   |
|      | PP2  | 20220705 | 河北省安国市   |
|      | PP3  | 20220710 | 河北省安国市   |
|      | PP4  | 20220810 | 河北省安国市   |
|      | PP5  | 20220810 | 河北省安国市   |
|      | PP6  | 20220825 | 河北省安国市   |
|      | PP7  | 20220905 | 河北省安国市   |
|      | PP8  | 20220905 | 河北省安国市   |
|      | PP9  | 20230405 | 河北省安国市   |
|      | PP10 | 20230405 | 河北省安国市   |
| 面绿背紫 | GP1  | 20220710 | 重庆涪陵区百胜镇 |
|      | GP2  | 20220807 | 重庆涪陵区百胜镇 |
|      | GP3  | 20220705 | 重庆忠县汝溪镇  |
|      | GP4  | 20220810 | 重庆忠县汝溪镇  |
|      | GP5  | 20220810 | 重庆忠县汝溪镇  |
|      | GP6  | 20220805 | 重庆垫江县    |
|      | GP7  | 20220822 | 重庆垫江县    |
|      | GP8  | 20220825 | 重庆涪陵区大顺镇 |
|      | GP9  | 20220905 | 重庆涪陵区大顺镇 |
|      | GP10 | 20230505 | 广西玉林市    |
| 双面绿色 | GG1  | 20230410 | 重庆涪陵区百胜镇 |
|      | GG2  | 20230410 | 重庆忠县汝溪镇  |
|      | GG3  | 20230410 | 重庆忠县汝溪镇  |
|      | GG4  | 20230410 | 重庆忠县汝溪镇  |
|      | GG5  | 20230410 | 重庆忠县汝溪镇  |
|      | GG6  | 20230505 | 重庆涪陵区大顺镇 |
|      | GG7  | 20230505 | 重庆涪陵区大顺镇 |
|      | GG8  | 20230505 | 重庆涪陵区大顺镇 |
|      | GG9  | 20230505 | 甘肃省庆阳市   |
|      | GG10 | 20230505 | 甘肃省庆阳市   |

行样品前处理，随后使用气相色谱-质谱联用仪进行检测分析。

#### 2.1.1 HS-SPME条件

萃取纤维在使用前于 260℃ 条件下老化 3 min；样品在 50℃ 恒温条件下孵育 10 min，期间以 250 r/min 的转速持续搅拌；在 50℃ 恒温条件下进行 40 min 的顶空萃取；萃取完成后，于进样口解析 3 min；进样结束后，纤维再次在 260℃ 条件下老化 3 min 以确保清洁。

#### 2.1.2 GC条件

进样口温度维持在 250℃；采用高纯氮气作为载气；色谱柱采用程序升温模式：初始温度 40℃ 保持 5 min，随后以 3℃/min 的升温速率升至 250℃，并在终温保持 15 min。

2.1.3 MS条件

采用电子轰击型离子源 (electron impact ionization, EI) 模式, 离子源温度设定为 200℃; 质量扫描范围设置为  $m/z$  35~400; 选择 Scan 全扫描采集方式; 扫描速度为 1 250 amu/s; 电子能量为 70 eV。

2.2 不同紫苏叶挥发性成分的鉴定

本研究采用 HS-SPME-GC-MS 结合香味数据库技术对 3 种不同叶色紫苏叶的挥发性成分

进行分析, 结果见表 2。通过面积归一化法计算各组分相对含量, 共鉴定出 94 种化学成分, 包括醇类 24 个、酯类 13 个、醛类 12 个、酮类 8 个、酸类 10 个、芳香族化合物 7 个、萜类 18 个、酚类 1 个、烯类 1 个。其中 (*E*)-2-戊烯-1-醇、辛醇、2-(4-甲基苯基)丙-2-醇、1-戊醇、环氧芳醇异构体-1、法尼醇异构体-1、 $\gamma$ -丁内酯、 $\gamma$ -己内酯、己酸甲酯、邻氨基苯甲酸甲酯、壬酸甲酯、五甲基呋喃溴酸酯、(*E*)-3-辛烯-2-

表2 不同叶色紫苏叶挥发性香气成分  
Table 2. Volatile aroma components of Perilla folium with different leaf colors

| 类别 | 编号 | 化合物                                 | 分子式                                            | CAS号       | SI | $m/z$ | 保留时间<br>(min) | 平均相对含量 (%) |      |      |
|----|----|-------------------------------------|------------------------------------------------|------------|----|-------|---------------|------------|------|------|
|    |    |                                     |                                                |            |    |       |               | PP         | GP   | GG   |
| 醇  | 1  | ( <i>E</i> )-2-戊烯-1-醇               | C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O               | 1576-96-1  | 82 | 57.1  | 25.60         | 0.01       | 0.00 | 0.00 |
|    | 2  | ( <i>E</i> )-橙花叔醇                   | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O              | 40716-66-3 | 97 | 161.2 | 54.16         | 0.24       | 0.33 | 0.29 |
|    | 3  | ( <i>Z</i> )-2-戊烯醇                  | C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O               | 1576-95-0  | 90 | 68.1  | 25.91         | 0.14       | 0.05 | 0.11 |
|    | 4  | ( <i>Z</i> )-橙花叔醇                   | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O              | 3790-78-1  | 76 | 161.2 | 52.81         | 0.07       | 0.00 | 0.00 |
|    | 5  | ( <i>Z</i> )-氧化芳樟醇                  | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub> | 1365-19-1  | 98 | 111.1 | 31.50         | 0.24       | 0.21 | 0.33 |
|    | 6  | 1-壬醇                                | C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> O               | 143-08-8   | 79 | 70.1  | 40.51         | 0.01       | 0.00 | 0.00 |
|    | 7  | 2-乙基己醇                              | C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O               | 104-76-7   | 76 | 83.1  | 33.47         | 0.15       | 0.04 | 0.40 |
|    | 8  | 3-辛醇                                | C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O               | 589-98-0   | 81 | 101.1 | 29.21         | 0.06       | 0.04 | 0.07 |
|    | 9  | ( <i>E</i> )-氧化芳樟醇                  | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub> | 34995-77-2 | 97 | 111.1 | 32.77         | 0.10       | 0.16 | 0.28 |
|    | 10 | $\alpha$ -松油醇                       | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | 98-55-5    | 98 | 136.1 | 42.10         | 1.83       | 2.76 | 1.60 |
|    | 11 | 桉叶油醇                                | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | 470-82-6   | 94 | 154.1 | 20.33         | 0.17       | 0.28 | 0.18 |
|    | 12 | 苯甲醇                                 | C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> O                | 100-51-6   | 91 | 108.0 | 48.84         | 0.97       | 0.49 | 0.76 |
|    | 13 | 苯乙醇                                 | C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O               | 22258      | 96 | 92.0  | 50.09         | 1.00       | 0.45 | 1.01 |
|    | 14 | 芳樟醇                                 | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | 78-70-6    | 97 | 121.1 | 35.90         | 5.87       | 7.28 | 6.28 |
|    | 15 | 香茅醇                                 | C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O              | 106-22-9   | 91 | 95.1  | 44.55         | 0.21       | 0.21 | 0.41 |
|    | 16 | 辛醇                                  | C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O               | 111-87-5   | 82 | 56.0  | 35.97         | 0.00       | 0.27 | 0.01 |
|    | 17 | 叶醇                                  | C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O               | 928-96-1   | 96 | 82.1  | 28.83         | 0.16       | 0.04 | 0.07 |
|    | 18 | 正己醇                                 | C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> O               | 111-27-3   | 93 | 69.1  | 27.38         | 0.00       | 0.01 | 0.13 |
|    | 19 | 2-(4-甲基苯基)丙-2-醇                     | C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O              | 1197-01-9  | 94 | 135.1 | 47.81         | 0.00       | 0.02 | 0.00 |
|    | 20 | 1-戊醇                                | C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O               | 30899-19-5 | 77 | 70.0  | 22.54         | 0.00       | 0.02 | 0.06 |
|    | 21 | <i>L</i> -薄荷醇                       | C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O              | 2216-51-5  | 90 | 95.0  | 39.59         | 0.00       | 0.01 | 1.17 |
|    | 22 | 1-辛烯-3-醇                            | C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O               | 3391-86-4  | 87 | 72.1  | 31.72         | 0.29       | 0.17 | 0.24 |
|    | 23 | 环氧芳醇异构体-1                           | —                                              | —          | 91 | 94.1  | 44.47         | 0.00       | 0.00 | 0.06 |
|    | 24 | 法尼醇异构体-1                            | —                                              | —          | 72 | 107.1 | 62.51         | 0.17       | 0.37 | 0.20 |
| 酯  | 25 | ( <i>E</i> )-3,7-二甲基-2,6-辛二烯酸甲酯     | C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub> | 1189-09-9  | 94 | 123.2 | 41.94         | 0.46       | 0.37 | 0.41 |
|    | 26 | ( <i>Z</i> )-3,7-二甲基-2,6-辛二烯-1-醇乙酸酯 | C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub> | 141-12-8   | 89 | 136.1 | 43.08         | 0.00       | 0.02 | 0.02 |
|    | 27 | $\alpha$ -乙酸松油酯                     | C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub> | 80-26-2    | 88 | 136.1 | 42.10         | 1.83       | 2.77 | 1.59 |
|    | 28 | $\gamma$ -丁内酯                       | C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>   | 96-48-0    | 81 | 86.1  | 39.93         | 0.00       | 0.12 | 0.38 |
|    | 29 | $\gamma$ -己内酯                       | C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>  | 695-06-7   | 81 | 85.0  | 42.78         | 0.00       | 0.00 | 0.16 |
|    | 30 | 苯甲酸甲酯                               | C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>   | 93-58-3    | 71 | 136.1 | 39.40         | 0.10       | 0.02 | 0.00 |
|    | 31 | 丙位壬内酯                               | C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>  | 104-61-0   | 92 | 85.1  | 54.45         | 0.04       | 0.03 | 0.04 |
|    | 32 | 己酸甲酯                                | C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>  | 106-70-7   | 94 | 99.1  | 19.48         | 0.06       | 0.06 | 0.07 |
|    | 33 | 邻氨基苯甲酸甲酯                            | C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>  | 134-20-3   | 82 | 151.1 | 61.34         | 0.01       | 0.00 | 0.01 |
|    | 34 | 壬酸甲酯                                | C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub> | 1731-84-6  | 71 | 141.1 | 33.59         | 0.03       | 0.02 | 0.02 |
|    | 35 | 五甲基呋喃溴酸酯                            | C <sub>15</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub> | 124-10-7   | 82 | 199.2 | 53.20         | 0.00       | 0.00 | 0.01 |
|    | 36 | 辛酸甲酯                                | C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>  | 111-11-5   | 96 | 127.0 | 29.06         | 0.04       | 0.02 | 0.02 |
|    | 37 | 棕榈酸甲酯                               | C <sub>17</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub> | 112-39-0   | 98 | 227.2 | 59.84         | 0.30       | 0.24 | 0.27 |

续表2

| 类别         | 编号 | 化合物                  | 分子式                                            | CAS号        | SI | m/z   | 保留时间<br>(min) | 平均相对含量 (%) |       |       |
|------------|----|----------------------|------------------------------------------------|-------------|----|-------|---------------|------------|-------|-------|
|            |    |                      |                                                |             |    |       |               | PP         | GP    | GG    |
| 酮          | 38 | 紫苏酮                  | C <sub>19</sub> H <sub>24</sub> O <sub>3</sub> | 142546-15-4 | 78 | 95.1  | 38.40         | 12.35      | 6.38  | 10.80 |
|            | 39 | (E)-3-辛烯-2-酮         | C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O               | 18402-82-9  | 85 | 111.1 | 30.15         | 0.11       | 0.03  | 0.06  |
|            | 40 | (E)-橙化基丙酮            | C <sub>5</sub> H <sub>26</sub> O               | —           | 95 | 151.2 | 47.95         | 0.27       | 0.19  | 0.28  |
|            | 41 | 6-甲基-5-庚烯-2-酮        | C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O               | 110-93-0    | 91 | 111.1 | 26.79         | 0.71       | 0.83  | 0.98  |
|            | 42 | β-紫罗酮                | C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> O              | 14901-07-6  | 78 | 177.0 | 51.11         | 2.14       | 0.48  | 0.95  |
|            | 43 | 薄荷酮                  | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | 10458-14-7  | 89 | 154.2 | 32.62         | 0.00       | 0.00  | 0.02  |
|            | 44 | 胡椒酮                  | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O              | 89-81-6     | 80 | 152.2 | 43.61         | 0.00       | 0.00  | 0.14  |
| 醛          | 45 | 顺-5-甲基-2-(1-甲基乙基)环己酮 | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | 36977-92-1  | 85 | 139.1 | 33.86         | 0.00       | 0.00  | 0.01  |
|            | 46 | 2-己烯醛                | C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O               | 505-57-7    | 96 | 83.1  | 20.94         | 0.00       | 0.00  | 0.07  |
|            | 47 | α-己基肉桂醛              | C <sub>15</sub> H <sub>20</sub> O              | 101-86-0    | 87 | 216.1 | 64.24         | 0.00       | 0.00  | 0.01  |
|            | 48 | (E)-柠檬醛              | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O              | 141-24-5    | 85 | 137.1 | 43.63         | 0.00       | 0.09  | 0.23  |
|            | 49 | (Z)-柠檬醛              | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O              | 5392-40-5   | 88 | 109.1 | 41.74         | 0.00       | 0.03  | 0.08  |
|            | 50 | 2,6-二甲基-5-庚烯醛        | C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> O               | 106-72-9    | 78 | 82.1  | 27.53         | 0.04       | 0.16  | 0.19  |
|            | 51 | 紫苏醛                  | C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O              | 2111-75-3   | 94 | 135.1 | 45.82         | 37.71      | 38.93 | 32.85 |
|            | 52 | 苯甲醛                  | C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O                | 100-52-7    | 96 | 106.0 | 35.47         | 2.26       | 1.02  | 1.37  |
|            | 53 | 丙醛                   | C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O                | 123-38-6    | 80 | 58.0  | 5.68          | 0.04       | 0.03  | 0.00  |
|            | 54 | 壬醛                   | C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O               | 124-19-6    | 95 | 98.1  | 29.37         | 0.02       | 0.11  | 0.30  |
|            | 55 | 十六醛                  | C <sub>16</sub> H <sub>32</sub> O              | 629-80-1    | 76 | 96.1  | 57.09         | 0.00       | 0.00  | 0.02  |
|            | 56 | 正己醛                  | C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O               | 66-25-1     | 98 | 82.1  | 14.58         | 0.12       | 0.09  | 0.13  |
|            | 57 | 正戊醛                  | C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O               | 110-62-3    | 89 | 58.1  | 10.30         | 0.00       | 0.02  | 0.04  |
| 酸          | 58 | (E)-2-己烯酸            | C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>  | 13419-69-7  | 90 | 99.1  | 51.91         | 0.09       | 0.04  | 0.02  |
|            | 59 | 苯甲酸                  | C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>   | 65-85-0     | 93 | 122.0 | 66.45         | 0.68       | 0.22  | 0.59  |
|            | 60 | 丙酸                   | C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>   | 29102       | 91 | 73.0  | 35.72         | 1.80       | 1.20  | 1.47  |
|            | 61 | 醋酸                   | C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>   | 64-19-7     | 97 | 43.0  | 32.09         | 6.19       | 4.96  | 7.28  |
|            | 62 | 丁酸                   | C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>   | 107-92-6    | 87 | 60.0  | 39.37         | 0.73       | 0.29  | 0.89  |
|            | 63 | 己酸                   | C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>  | 142-62-1    | 97 | 60.0  | 47.51         | 2.97       | 2.58  | 3.19  |
|            | 64 | 壬酸                   | C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>  | 112-05-0    | 94 | 129.1 | 58.21         | 0.18       | 0.12  | 0.13  |
|            | 65 | 辛酸                   | C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>  | 124-07-2    | 92 | 101.1 | 54.83         | 0.04       | 0.02  | 0.03  |
|            | 66 | 异丁酸                  | C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>   | 79-31-2     | 96 | 73.1  | 36.87         | 0.33       | 0.22  | 0.37  |
|            | 67 | 正戊酸                  | C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>  | 109-52-4    | 88 | 73.1  | 43.62         | 0.29       | 0.11  | 0.15  |
| 芳香族<br>化合物 | 68 | 1,2,4-三甲基苯           | C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>                 | 95-63-6     | 72 | 120.1 | 24.20         | 0.00       | 0.00  | 0.34  |
|            | 69 | 2-乙基呋喃               | C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O                | 3208-16-0   | 84 | 96.1  | 9.28          | 0.06       | 0.04  | 0.02  |
|            | 70 | 2-乙酰基吡咯              | C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> NO               | 1072-83-9   | 75 | 109.1 | 52.34         | 0.00       | 0.00  | 0.01  |
|            | 71 | 2-正戊基呋喃              | C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> O               | 3777-69-3   | 94 | 138.1 | 21.54         | 0.05       | 0.03  | 0.05  |
|            | 72 | 4-异丙基甲苯              | C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>                | 99-87-6     | 89 | 134.1 | 23.45         | 0.06       | 0.05  | 0.14  |
|            | 73 | 对二甲苯                 | C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>                 | 106-42-3    | 92 | 91.0  | 16.54         | 0.00       | 0.00  | 0.36  |
|            | 74 | 间二甲苯                 | C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>                 | 108-38-3    | 94 | 91.0  | 17.40         | 0.00       | 0.00  | 0.12  |
| 萜          | 75 | 樟脑                   | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O              | 464-49-3    | 79 | 152.1 | 34.89         | 0.02       | 0.01  | 0.02  |
|            | 76 | (E)-β-罗勒烯            | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 3779-61-1   | 84 | 93.1  | 22.53         | 0.20       | 0.25  | 0.44  |
|            | 77 | (Z)-β-罗勒烯            | C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub> | 13877-91-3  | 95 | 93.1  | 21.72         | 0.11       | 0.14  | 0.12  |
|            | 78 | 桉烯                   | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 3387-41-5   | 88 | 136.1 | 16.08         | 0.03       | 0.04  | 0.02  |
|            | 79 | 莰烯                   | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 79-92-5     | 88 | 121.0 | 13.42         | 0.01       | 0.03  | 0.01  |
|            | 80 | 双戊烯                  | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 138-86-3    | 97 | 93.0  | 19.88         | 5.32       | 9.07  | 7.23  |
|            | 81 | 水芹烯                  | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 4221-98-1   | 75 | 136.1 | 18.41         | 0.00       | 0.01  | 0.01  |
|            | 82 | 1-甲基-4-(1-甲基乙基)苯     | C <sub>10</sub> H <sub>12</sub>                | 1195-32-0   | 91 | 132.1 | 31.42         | 0.15       | 0.16  | 0.16  |
|            | 83 | α-蒎烯                 | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 80-56-8     | 93 | 93.0  | 11.57         | 0.76       | 1.34  | 0.88  |
|            | 84 | α-松油烯                | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 99-86-5     | 90 | 136.1 | 18.94         | 0.08       | 0.11  | 0.07  |
|            | 85 | β-蒎烯                 | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 18172-67-3  | 95 | 121.1 | 15.34         | 0.13       | 0.21  | 0.14  |
|            | 86 | γ-松油烯                | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 99-85-4     | 81 | 136.1 | 22.17         | 0.07       | 0.10  | 0.07  |
|            | 87 | δ-蒎品油烯               | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | —           | 82 | 136.1 | 23.95         | 0.07       | 0.10  | 0.09  |
|            | 88 | 月桂烯                  | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 123-35-3    | 94 | 93.1  | 18.26         | 0.62       | 0.88  | 0.82  |
|            | 89 | (E)-β-金合欢烯           | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 18794-84-8  | 99 | 133.1 | 40.63         | 0.41       | 0.49  | 0.64  |
|            | 90 | α-律草烯                | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 6753-98-6   | 97 | 147.1 | 40.98         | 1.98       | 3.30  | 2.13  |
|            | 91 | 石竹素                  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O              | 1139-30-6   | 98 | 177.1 | 52.75         | 0.23       | 0.33  | 0.22  |
|            | 92 | β-石竹烯                | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 87-44-5     | 96 | 189.1 | 38.06         | 5.64       | 7.83  | 5.75  |
| 酚          | 93 | 丁香酚                  | C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub> | 97-53-0     | 94 | 164.1 | 58.52         | 0.40       | 0.43  | 0.79  |
|            | 94 | 苯乙烯                  | C <sub>8</sub> H <sub>8</sub>                  | 100-42-5    | 81 | 104.1 | 23.08         | 0.01       | 0.01  | 0.07  |

注：“—”表示化学式、CAS号未确定。

酮、(E)-橙化基丙酮、 $\alpha$ -己基肉桂醛、2,6-二甲基-5-庚烯醛、 $\delta$ -蒎品油烯、(E)-2-己烯酸、苯甲酸、丙酸、丁酸、壬酸、异丁酸、正戊酸、1,2,4-三甲基苯、2-乙酰基吡咯、4-异丙基甲苯、间二甲苯等 28 个化合物为首次从紫苏叶中鉴定得到。

2.3 不同叶色紫苏叶挥发性成分PLS-DA分析

本研究采用 SIMCA14.1 软件对不同叶色紫苏叶（各 10 批样品）的化学成分峰面积数据进行化学计量学分析。建立的 PLS-DA 模型分析结果见图 1，其中主成分 PCA1 和 PCA2 的贡献率分别为 22.5% 和 13.3%。模型分析表明：样品分布特征方面，3 种紫苏叶（PP、GP、GG）的组内差异较小，组间样品大致分离，但存在部分重叠区域，整体上 3 种紫苏叶的化学成分差异显著；模型验证参数方面，拟合参数： $R^2X=0.516$ 、 $R^2Y=0.946$ ，预测能力参数： $Q^2=0.784$  ( $> 0.4$ )，表明模型可接受且稳定性良好；模型可靠性验证方面，置换检验结果显示  $R^2=0.61$ 、 $Q^2=-0.388$ ， $Q^2$  负值证实模型无过拟合现象，表明所建 PLS-DA 模型可靠 [18]，适用于不同叶色紫苏叶的判别分析。该分析结果为进一步研究不同叶色紫苏叶的化学特征差异提供了可靠的数学模型基础。

为深入解析不同化合物对紫苏叶颜色分型的贡献程度，本研究基于 VIP 值进行差异成分筛选。VIP 值量化了各挥发性化合物对组间差异的贡献度，其判别标准为：VIP>1 表示该变量具有重要区分作用，且 VIP 值越大则贡献度越高，表明该化合物在不同叶色组间的差异越显著（图 1 和表 3） [19]。

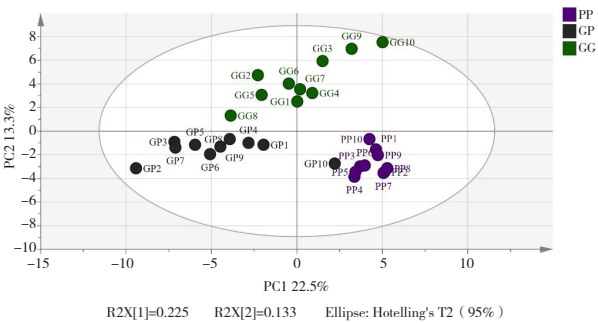


图1 不同叶色紫苏叶PLS-DA载荷图  
Figure 1. PLS-DA loading plot of Perilla folium with different leaf colors

表3 PLS-DA模型中VIP>1的挥发性成分

Table 3. Volatile components with VIP>1 in

| PLS-DA model |                        |      |        |       |
|--------------|------------------------|------|--------|-------|
| 序号           | 化合物                    | VIP值 | 分类     | P     |
| 1            | (E)-柠檬醛                | 1.67 | 醛      | <0.05 |
| 2            | 苯甲醇                    | 1.63 | 醇      |       |
| 3            | 壬醛                     | 1.47 | 醛      |       |
| 4            | $\alpha$ -乙酸松油酯        | 1.47 | 酯      |       |
| 5            | $\alpha$ -松油醇          | 1.47 | 醇      |       |
| 6            | $\beta$ -紫罗酮           | 1.45 | 酮      |       |
| 7            | 苯甲酸甲酯                  | 1.43 | 酯      |       |
| 8            | 紫苏酮                    | 1.40 | 酮      |       |
| 9            | 苯乙醇                    | 1.39 | 醇      |       |
| 10           | $\gamma$ -松油烯          | 1.38 | 萜      |       |
| 11           | 芳樟醇                    | 1.35 | 醇      | >0.05 |
| 12           | $\alpha$ -律草烯          | 1.34 | 萜      |       |
| 13           | $\beta$ -石竹烯           | 1.32 | 萜      |       |
| 14           | $\alpha$ -松油烯          | 1.30 | 萜      |       |
| 15           | 胡椒酮                    | 1.28 | 酮      |       |
| 16           | L-薄荷醇                  | 1.27 | 醇      |       |
| 17           | (Z)- $\beta$ -罗勒烯      | 1.27 | 萜      |       |
| 18           | (E)-3-辛烯-2-酮           | 1.26 | 酮      |       |
| 19           | 石竹素                    | 1.23 | 萜      |       |
| 20           | $\gamma$ -己内酯          | 1.22 | 酯      |       |
| 21           | 辛酸甲酯                   | 1.22 | 酯      |       |
| 22           | (E)- $\beta$ -罗勒烯      | 1.20 | 萜      |       |
| 23           | 1-辛烯-3-醇               | 1.20 | 醇      |       |
| 24           | 苯甲酸                    | 1.20 | 酸      |       |
| 25           | 桉烯                     | 1.18 | 萜      |       |
| 26           | 2,6-二甲基-5-庚烯醛          | 1.18 | 醛      |       |
| 27           | $\delta$ -蒎品油烯         | 1.15 | 萜      |       |
| 28           | 2-己烯醛                  | 1.14 | 醛      |       |
| 29           | 桉叶油醇                   | 1.13 | 醇      |       |
| 30           | 2-乙基己醇                 | 1.12 | 醇      |       |
| 31           | 月桂烯                    | 1.11 | 萜      |       |
| 32           | (Z)-柠檬醛                | 1.10 | 醛      |       |
| 33           | (Z)-2-戊烯醇              | 1.08 | 醇      |       |
| 34           | (E)- $\beta$ -金合欢烯     | 1.04 | 萜      |       |
| 35           | 叶醇                     | 1.03 | 醇      |       |
| 36           | 1-甲基-4-(1-甲基乙烯基)苯      | 1.03 | 萜      |       |
| 37           | 2-正戊基呋喃                | 1.02 | 芳香族化合物 |       |
| 38           | (E)-橙花叔醇               | 1.01 | 醇      |       |
| 39           | 紫苏醛                    | 1.21 | 醛      |       |
| 40           | 2-乙基呋喃                 | 1.12 | 芳香族化合物 |       |
| 41           | 正戊醛                    | 1.07 | 醛      | >0.05 |
| 42           | (E)-3,7-二甲基-2,6-辛二烯酸甲酯 | 1.01 | 酯      |       |

分析结果显示:VIP 值>1 的共有 7 类化合物,分别为醇类 11 个、萜类 12 个、醛类 7 个、酯类 5 个、芳香类化合物 2 个、酮类 4 个、酸类 1 个,说明萜类是 PP、GP、GG 化学成分差异的关键性成分,其次是醇类、醛类、酯类、酮类、酸类和芳香类化合物。共有 42 个化学成分的 VIP>1,分别为 (*E*)-柠檬醛、苯甲醇、 $\alpha$ -乙酸松油酯、 $\alpha$ -松油醇、 $\beta$ -紫罗酮、壬醛、苯甲酸甲酯、苯乙醇、紫苏酮、 $\gamma$ -松油烯、芳樟醇、 $\alpha$ -律草烯、 $\beta$ -石竹烯、 $\alpha$ -松油烯、胡椒酮、*L*-薄荷醇、(*Z*)- $\beta$ -罗勒烯、(*E*)-3-辛烯-2-酮、石竹素、 $\gamma$ -己内酯、辛酸甲酯、紫苏醛、(*E*)- $\beta$ -罗勒烯、1-辛烯-3-醇、苯甲酸、桉烯、2,6-二甲基-5-庚烯醛、 $\delta$ -萜品油烯、2-己烯醛、桉叶油醇、2-乙基己醇、2-乙基呋喃、月桂烯、(*Z*)-柠檬醛、(*Z*)-2-戊烯醇、正戊醇、(*E*)- $\beta$ -金合欢烯、叶醇、1-甲基-4-(1-甲基乙烯基)苯、(*E*)-3,7-二甲基-2,6-辛二烯酸甲酯、2-正戊基呋喃、(*E*)-橙花叔醇,表明这些化学成分在 PP、GP、GG 3 种紫苏叶的差异具有统计学意义,是 PP、GP、GG 化学成分差异的关键性指标。

通过 PLS-DA 分析发现,苯甲酸甲酯、苯甲酸、苯甲醇、苯乙醇、2-正戊基呋喃、叶醇、辛酸甲酯、 $\beta$ -紫罗酮、1-辛烯-3-醇、(*E*)-3-辛烯-2-酮、紫苏酮、(*Z*)-2-戊烯醇、2-乙基呋喃 13 个化合物与 PP 样品组接近; $\alpha$ -律草烯、 $\gamma$ -松油烯、月桂烯、 $\alpha$ -松油醇、 $\beta$ -石竹烯、 $\alpha$ -乙酸松油酯、石竹素、(*E*)- $\beta$ -罗勒烯、(*Z*)- $\beta$ -罗勒烯、1-甲基-4-(1-甲基乙烯基)苯、(*E*)-橙花叔醇、 $\delta$ -萜品油烯、桉烯、桉叶油醇、芳樟醇、紫苏醛、(*E*)-3,7-二甲基-2,6-辛二烯酸甲酯 17 个化合物与 GP 样品组接近;(*E*)-柠檬醛、壬醛、(*Z*)-柠檬醛、*L*-薄荷醇、2-己烯醛、2,6-二甲基-5-庚烯醛、2-乙基己醇、(*E*)- $\beta$ -金合欢烯、 $\gamma$ -己内酯、胡椒酮、正戊醛 11 个化合物与 GG 样品组接近,且这些化合物的 VIP 值>1,进一步表明这些化合物可能为区分不同叶色紫苏叶的潜在关键指标。

通过单因素方差分析结合 VIP 值筛选发现,37 种化合物[包括 (*E*)-柠檬醛、苯甲醇、壬醛等]同时满足  $P<0.05$  和 VIP 值>1 的条件,这些化合物可作为区分不同叶色紫苏叶的特征性标志物。3 种叶色样品间紫苏醛含量无显著差异 ( $P>$

0.05, 图 2),紫苏酮含量存在显著差异 ( $P<0.05$ , 图 3),PP、GG、GP 中紫苏酮的相对含量依次降低。这一结果不仅验证了紫苏叶化学型与表型的相关性,更为紫苏品种鉴别和质量评价提供了科学依据,特别是紫苏酮含量的梯度变化规律,可作为区分不同叶色紫苏叶的重要化学指标。

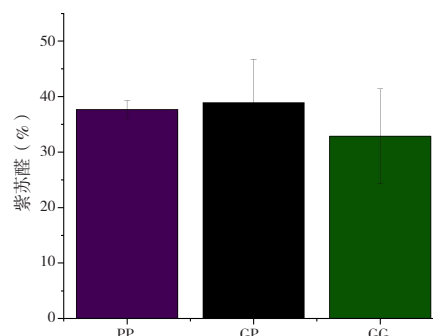


图2 紫苏醛在3种紫苏叶中相对含量的分布图

Figure 2. Distribution of the relative content of perilla aldehyde in three Perilla folium

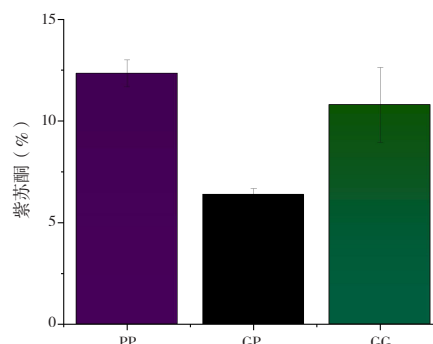


图3 紫苏酮在3种紫苏叶中相对含量的分布图

Figure 3. Distribution of the relative content of perillylketones in three Perilla folium

## 2.4 色数值和挥发性化合物的相关性分析

本研究采用 RGB 色彩模式对紫苏叶颜色特征进行量化分析,其中 R (红色分量)和 G (绿色分量)的像元均值具有重要鉴别价值<sup>[20]</sup>。本课题组前期研究证实,R 值可作为区分 PP、GP 和 GG 紫苏叶的关键参数<sup>[2]</sup>。通过 Origin 软件对 30 批样品中 94 种化学成分的峰面积与色度值<sup>[2]</sup>进行 Pearson 相关性分析,一般认为相关系数 R 的绝对值 $\geq 0.8$  是强相关,0.5~0.8 是中等相关,0.3~0.5 是低相关, $< 0.3$  则是基本不相关<sup>[21]</sup>。图4 结果显示:R 值与苯甲醇、苯乙醇、叶醇、1-辛烯-3-醇、苯甲酸甲酯、紫苏酮、(*E*)-3-辛烯-2-酮、 $\beta$ -紫罗酮、苯甲醛、苯甲酸 10 个化合物呈中等正相关,R 值与 (*E*)-柠檬醛、(*Z*)-柠檬醛、壬醛等 3 个化合物呈中等负相关。

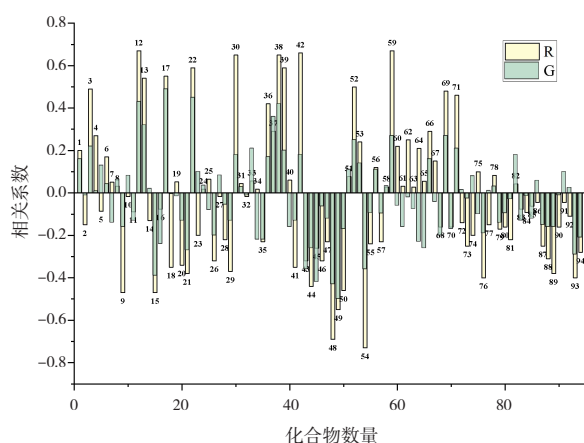


图4 化合物与R值、G值的相关性

Figure 4. Correlation of compounds with R-value and G-value

注：化合物编号同表2。

### 3 讨论

HS-SPME-GC-MS 是挥发性化合物较为常用的一种分析方法，该方法的提取过程具有简便、快速的特点。GC-MS 可结合不同的进样方法对样品进行分析，固相萃取法是常用的方法之一<sup>[22]</sup>。SPME 技术由 Pawlisyn 团队于 1989 年开发，其创新性地将采样、萃取、浓缩和进样等步骤集成一体，无需有机溶剂，现已广泛应用于食品、植物和生物样品的分析<sup>[23]</sup>。HS-SPME 结合 GC-MS 的分析方法，进一步实现了香气成分富集过程的自动化操作，具有简便、快速等特点<sup>[24]</sup>。本研究采用 HS-SPME-GC-MS 技术结合香味数据库的创新分析方法对不同叶色紫苏叶中的挥发性化合物进行提取及分析鉴定，利用香味数据库自动创建 GC-MS 分析方法，为本试验提供了极大的便利；通过 AART 功能，基于正构烷烃保留时间自动校正目标化合物保留时间，可快速识别 PP、GP、GG 中无法确认的挥发性化合物，显著提高了紫苏叶挥发性成分分析的效率和准确性，为植物挥发性成分研究提供了可靠的技术方案。

《中国药典（2020 年版）》中对紫苏叶的性状描述为“两面紫色或上表面绿色，下表面紫色”<sup>[1]</sup>。紫苏叶所含的化学成分是发挥药效的物质基础，本研究运用 HS-SPME-GC-MS 结合香味数据库分析 PP、GP、PP 3 种不同叶色紫苏叶的化学成分，共鉴定出了 94 个化学成分，这些化合物具有抗氧化<sup>[8]</sup>、提高免疫系统功能<sup>[25]</sup>、抗抑郁<sup>[26]</sup>等一系列的生物活性，且有 28 个化学

成分为首次鉴定得到。采用 PLS-DA 模型并结合化合物分析出不同叶色紫苏叶的关键性成分，通过  $VIP>1$  的方法得到 42 个化合物，并且筛选出  $VIP>1$ 、 $P<0.05$  且与样品相接近的 37 个化合物，与 PP、GP、GG 组接近的特征成分分别有 13、17 及 11 个，进一步说明这些化合物为区分不同叶色紫苏叶的潜在指标性成分。此外，PP、GP 和 GG 中，紫苏酮的相对含量呈现依次递减的趋势，与上述分析相互验证。

将不同叶色紫苏叶的色数值和 94 个化合物的峰面积进行相关性分析，发现苯甲醇、苯乙醇、叶醇、1-辛烯-3-醇、苯甲酸甲酯、紫苏酮、(E)-3-辛烯-2-酮、 $\beta$ -紫罗酮、苯甲醛、苯甲酸等 10 个化合物与 R 值呈正相关，且这些化合物的  $VIP$  值均  $>1$ ， $P<0.05$ ，表明这些化合物可能为与紫色叶色密切相关的指标性成分，本研究为不同叶色紫苏叶的质量控制及药效物质基础阐释提供了科学参考。

### 参考文献

- 1 中国药典 2020 年版. 一部 [S]. 2020: 354.
- 2 聂黎行, 王馨平, 康帅, 等. 紫苏叶和白苏叶叶色数字化表征及与花青素含量相关性研究 [J]. 中国医院药学杂志, 2024, 44(21): 2477–2483. [Nie LX, Wang XP, Kang S, et al. Digital characterization of color of Perilla leaf and White perilla leaf and correlation with contents of anthocyanin[J]. Chinese Journal of Hospital Pharmacy, 2024, 44(21): 2477–2483.] DOI: [10.13286/j.1001-5213.2024.21.07](https://doi.org/10.13286/j.1001-5213.2024.21.07).
- 3 南朝·陶弘景, 著. 尚志钧, 尚元胜, 辑校. 本草经籍注 [M]. 北京: 人民卫生出版社, 1994: 484, 490.
- 4 北宋·苏颂, 著. 本草图经 [M]. 福州: 福建科技出版社, 1988: 579–580.
- 5 明·李中梓, 著. 李中梓医学全书: (镌补) 雷公炮制药性解 [M]. 北京: 中国中医药出版社, 1999: 591.
- 6 宋·寇宗奭, 著. 颜正华, 常章富, 黄幼群, 点校. 本草衍义 [M]. 北京: 人民卫生出版社, 1990: 75.
- 7 王馨平, 聂黎行, 康帅, 等. 紫苏叶的化学成分、药理活性和质量控制研究进展 [J]. 中国药事, 2023, 37(10): 1193–1212. [Wang XP, Nie LX, Kang S, et al. Research progress on the chemical constituents, pharmacological activity and quality control of Perillae folium[J]. Chinese Pharmaceutical Affairs, 2023, 37(10): 1193–1212.] DOI: [10.16153/j.1002-7777.2023.10.011](https://doi.org/10.16153/j.1002-7777.2023.10.011).
- 8 王健, 薛山, 赵国华. 紫苏不同部位精油成分及体外抗氧化能力的比较研究 [J]. 食品科学, 2013, 34(7): 86–91. [Wang J, Xue S, Zhao GH. Comparative study on chemical components and *in vitro* antioxidant capacity of essential oil from different parts of Perilla frutescens[J]. Food Science, 2013, 34(7): 86–91.] DOI: [10.7506/spkx1002-6630-201307019](https://doi.org/10.7506/spkx1002-6630-201307019).

- 9 张琛武, 郭佳琪, 郭宝林. 紫苏中酚酸类成分研究进展 [J]. 中国现代中药, 2017, 19(11): 1651–1658. [Zhang CW, Guo JQ, Guo BL. Review on research of phenolic acids in *Perilla frutescens* [J]. Modern Chinese Medicine, 2017, 19(11): 1651–1658.] DOI: [10.13313/j.jissn.1673-4890.2017.11.031](https://doi.org/10.13313/j.jissn.1673-4890.2017.11.031).
- 10 袁芃, 牛晓涛, 宋梦薇, 等. 紫苏挥发油对人肺癌细胞的体外抑制作用研究 [J]. 食品科技, 2017, 42 (2): 235–238. [Yuan P, Niu XT, Song MW, et al. The inhibitory effect of the essential oil from *Folium perillae* on human lung cancer cells *in vitro* [J]. Food Science and Technology, 2017, 42(2): 235–238.] DOI: [10.13684/j.cnki.spkj.2017.02.046](https://doi.org/10.13684/j.cnki.spkj.2017.02.046).
- 11 胡强, 王延云, 王燕, 等. 两种生产工艺藤椒油产品挥发性成分对比分析 [J]. 食品工业科技, 2019, 40(13): 215–220. [Hu Q, Wang YY, Wang Y, et al. Comparison analysis of volatile components in two kinds of rattan pepper oil produced from different processing [J]. Science and Technology of Food Industry, 2019, 40(13): 215–220.] DOI: [10.13386/j.jissn1002-0306.2019.13.035](https://doi.org/10.13386/j.jissn1002-0306.2019.13.035).
- 12 章甫, 申子好, 尤倩倩, 等. 南天竹花挥发油化学成分的 GC-MS 分析及体外抗氧化活性 [J]. 化学研究与应用, 2014 26(7): 1084–1088. [Zhang F, Shen ZH, You QQ, et al. GC-MS analysis of the chemical constituent of volatile oil from the flowers of *Nadina domestica* and its antioxidant activity *in vitro* [J]. Chemical Research and Application, 2014, 26(7): 1084–1088.] DOI: [10.3969/j.jissn.1004-1656.2014.07.022](https://doi.org/10.3969/j.jissn.1004-1656.2014.07.022).
- 13 胡强, 王延云, 王燕, 等. 乐山甜皮鸭挥发性风味物质分析 [J]. 肉类研究, 2020, 34 (7): 64–69. [Hu Q, Wang YY, Wang Y, et al. Analysis of volatile flavor substances of Leshan sweet skin duck [J]. Meat Research, 2020, 34(7): 64–69.] DOI: [10.7506/rlyj1001-8123-20200520-127](https://doi.org/10.7506/rlyj1001-8123-20200520-127).
- 14 陈家宝, 郭龙, 温春秀, 等. 不同种质紫苏叶挥发性成分化学型研究 [J]. 中国药房, 2021, 32(8): 945–951. [Chen JB, Guo L, Wen CX, et al. Study on chemotypes of volatile components in *Perilla frutescens* leaves from different germplasms [J]. China Pharmacy, 2021, 32(8): 945–951.] DOI: [10.6039/j.jissn.1001-0408.2021.08.09](https://doi.org/10.6039/j.jissn.1001-0408.2021.08.09).
- 15 黎文珊. 紫苏叶挥发油的 GC-MS 定性分析 [J]. 河南科技, 2010, (14): 168–169. [Li WS. Qualitative analysis of volatile oil from *Perilla frutescens* leaves by GC-MS [J]. Journal of Henan Science and Technology, 2010, (14): 168–169.] DOI: [CNKI:SUN:HJKJ.0.2010-14-142](https://doi.org/CNKI:SUN:HJKJ.0.2010-14-142).
- 16 向福, 江安娜, 项俊, 等. 四种紫苏叶挥发油化学成分 GC-MS 分析 [J]. 食品研究与开发, 2015, 36(13): 90–94. [Xiang F, Jiang AN, Xiang J, et al. Study on chemical compositions of volatile oils from four kinds of *Perilla* leaves by GC-MS [J]. Food Research and Development, 2015, 36(13): 90–94.] DOI: [10.3969/j.jissn.1005-6521.2015.13.026](https://doi.org/10.3969/j.jissn.1005-6521.2015.13.026).
- 17 岛津. 食品气味分析应用文集 (第二版) [EB/OL]. (2022-12-13) [2025-01-24]. [https://support.shimadzu.com.cn/literature/AP\\_Notes\\_SGCOE-22-26.html](https://support.shimadzu.com.cn/literature/AP_Notes_SGCOE-22-26.html).
- 18 冯花, 王飞权, 张渤, 等. 不同茶树品种白牡丹茶香气成分的 HS-SPME-GC-MS 分析 [J]. 现代食品科技, 2021, 37(12): 252–264. [Feng H, Wang FQ, Zhang B, et al. Analysis of aroma components of Baimudan tea from different tea plant varieties using HS-SPME-GC-MS [J]. Modern Food Science & Technology, 2021, 37(12): 252–264.] DOI: [10.13982/j.mfst.1673-9078.2021.12.1273](https://doi.org/10.13982/j.mfst.1673-9078.2021.12.1273).
- 19 Liu HC, Wen J, Yu YJ, et al. Evaluation of dynamic changes and formation regularity in volatile flavor compounds in *Citrus reticulata* "Chachi" peel at different collection periods using gas chromatography-ion mobility spectrometry [J]. LWT-Food Sci Technol, 2022, 171: 114126. DOI: [10.1016/j.lwt.2022.114126](https://doi.org/10.1016/j.lwt.2022.114126).
- 20 刘徐冬雨, 郭潇潇, 付晨青, 等. 基于 RGB 和 CIELab 预测紫苏叶片花青素含量 [J]. 中国农业科技导报, 2024, 26(7): 103–110. [Liu XDY, Guo XX, Fu CQ, et al. Prediction of anthocyanin content in *Perilla frutescens* leaves based on RGB and CIELab [J]. Journal of Agricultural Science and Technology, 2024, 26(7): 103–110.] DOI: [10.13304/j.nykjdb.2023.0164](https://doi.org/10.13304/j.nykjdb.2023.0164).
- 21 彭嘉玉, 黄玉珍, 温佳文, 等. 基于 HS-GC-MS 和电子感官技术分析白芍不同炮制品的颜色、气味变化 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2024, 30(20): 141–150. [Peng JY, Huang YZ, Wen JW, et al. Analysis of color and odor changes in different processed products of *Paeoniae radix alba* based on HS-GC-MS and electronic sensory technology [J]. Chinese Journal of Experimental Traditional Medical Formulae, 2024, 30(20): 141–150.] DOI: [10.13422/j.cnki.syfjx.20240961](https://doi.org/10.13422/j.cnki.syfjx.20240961).
- 22 李冰洋. 基于电子鼻与 GC-MS 的潞仙酒特征香气研究 [D]. 北京: 北京化工大学, 2023. <https://d.wanfangdata.com.cn/thesis/Y4109150>.
- 23 Jayatilaka A, Poole SK, Poole CF, et al. Simultaneous micro steam distillation/solvent extraction for the isolation of semivolatile flavor compounds from cinnamon and their separation by series coupled-column gas chromatography [J]. Anal Chim Acta, 1995, 302(2): 147–162. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/000326709400445R>.
- 24 邵淑贤, 徐梦婷, 林燕萍, 等. 基于电子鼻与 HS-SPME-GC-MS 技术对不同产地黄观音乌龙茶香气差异分析 [J]. 食品科学, 2023, 44(4): 232–239. [Shao SX, Xu MT, Lin YP, et al. Differential analysis of aroma components of Huangguanyin oolong tea from different geographical origins using electronic nose and headspace solid-phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry [J]. Food Science, 2023, 44(4): 232–239.] DOI: [10.7506/spkx1002-6630-20220413-160](https://doi.org/10.7506/spkx1002-6630-20220413-160).
- 25 周美玲. 紫苏挥发油及其主要成分紫苏醛和柠檬烯对小鼠生长和免疫功能的影响 [D]. 江苏扬州: 扬州大学, 2014. DOI: [10.7666/d.Y2632375](https://doi.org/10.7666/d.Y2632375).
- 26 Yi LT, Li J, Geng D, et al. Essential oil of *Perilla frutescens*-induced change in hippocampal expression of brain-derived neurotrophic factor in chronic unpredictable mild stress in mice [J]. J Ethnopharmacol, 2013, 147(1): 245–253. DOI: [10.1016/j.jep.2013.03.015](https://doi.org/10.1016/j.jep.2013.03.015).

收稿日期: 2025 年 03 月 03 日 修回日期: 2025 年 04 月 15 日  
 本文编辑: 钟巧妮 李 阳