

# 基于电子鼻和 GC-MS 分析菟丝子不同炮制品的挥发性成分变化



李晓雨<sup>1</sup>, 薛剑楠<sup>2</sup>, 王 腾<sup>1</sup>, 唐思杨<sup>1</sup>, 齐 滨<sup>1</sup>

1. 长春中医药大学药学院 (长春 130117)
2. 辽源市中心医院药学部 (吉林辽源 136200)

**【摘要】目的** 探究生菟丝子、清炒菟丝子、盐菟丝子、酒菟丝子等炮制品中挥发性成分变化, 筛选不同炮制品的差异成分。**方法** 运用电子鼻和气相色谱-质谱联用 (GC-MS) 法对不同炮制品菟丝子气味和挥发性成分进行鉴别, 通过 Origin2024 软件和 SIMCA 14.1 软件进行主成分分析 (PCA) 及正交偏最小二乘判别分析 (OPLS-DA), 以变量重要性投影 (VIP) 值 > 1 且  $P < 0.05$  的原则, 筛选得到菟丝子炮制前后的差异成分。**结果** 电子鼻检测出 4 种菟丝子炮制品对醇类、醛酮类物质敏感。GC-MS 法共检测到 89 种挥发性成分, 其中生菟丝子检测到 49 种, 清炒菟丝子 66 种, 盐菟丝子 56 种, 酒菟丝子 65 种。与生菟丝子相比, 清炒菟丝子新增了 27 种化合物, 减少了 10 种化合物, 盐菟丝子新增了 17 种化合物, 减少了 10 种化合物, 而酒菟丝子新增了 32 种化合物, 减少了 16 种化合物。经 OPLS-DA 发现菟丝子不同炮制品的挥发性成分具有明显差异, 共筛选出异戊醇、2-甲基丁醛、异戊醛等 12 个差异成分。**结论** 炮制后菟丝子的挥发性成分种类和数量均有明显增加。电子鼻结合 GC-MS 法可用于明确菟丝子不同炮制品挥发性成分的差异, 为后续质量标准和临床应用提供参考。

**【关键词】** 菟丝子; 炮制品; 气相色谱-质谱联用法; 电子鼻; 挥发性成分

**【中图分类号】** R283.1

**【文献标识码】** A

## Analysis of the changes in volatile components of different processed products of *Cuscutae Semen* based on electronic nose and GC-MS

LI Xiaoyu<sup>1</sup>, XUE Jiannan<sup>2</sup>, WANG Teng<sup>1</sup>, TANG Siyang<sup>1</sup>, QI Bin<sup>1</sup>

1. School of Pharmacy, Changchun University of Chinese Medicine, Changchun 130117, China

2. Department of Pharmacy, Liaoyuan Central Hospital, Liaoyuan 136200, Jilin Province, China

Corresponding author: QI Bin, Email: qibin88@126.com

**【Abstract】Objective** To explore the changes in volatile components among four processed products of raw *Cuscutae Semen*, stir-fried *Cuscutae Semen*, salt-processed *Cuscutae Semen*, and wine-processed *Cuscutae Semen*, and to screen the differential components among different processed products. **Methods** The odor and volatile components of different processed products of *Cuscutae Semen* were identified using an electronic nose and GC-MS. Principal component analysis (PCA) and orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA) were conducted using Origin2024 software and SIMCA 14.1 software. According to the principle of variable importance in projection (VIP) value > 1 and  $P < 0.05$ , the differential

DOI: 10.12173/j.issn.2097-4922.202604049

基金项目: 吉林省科技发展计划 (YDZJ202501ZYTS178)

通信作者: 齐滨, 博士, 教授, 硕士研究生导师, Email: qibin88@126.com

<https://yxqy.whuzhmedj.com>

components before and after the processing of *Cuscutae Semen* were screened. **Results** The electronic nose detected that the four processed products of *Cuscutae Semen* were sensitive to alcohols, aldehydes, and ketones. A total of 89 volatile components were detected by GC-MS, including 49 in raw *Cuscuta chinensis*, 66 in stir-fried *Cuscutae Semen*, 56 in salt-processed *Cuscutae Semen*, and 65 in wine-processed *Cuscutae Semen*. Compared with raw *Cuscuta chinensis*, stir-fried *Cuscuta chinensis* had 27 newly added compounds and 10 reduced compounds. Salt-processed *Cuscuta chinensis* had 17 newly added compounds and 10 reduced compounds, while wine-processed *Cuscuta chinensis* had 32 newly added compounds and 16 reduced compounds. OPLS-DA revealed significant differences in volatile components among the different processed products of *Cuscutae Semen*, and a total of 12 differential components after processing, such as isopentanol, 2-methylbutanal, and isovaleraldehyde, were screened out. **Conclusion** After processing, both the types and quantities of volatile components in *Cuscuta chinensis* significantly increased. The combination of electronic nose with GC-MS method can be used to identify the differences in volatile components among different processed products of *Cuscuta chinensis*, providing references for subsequent quality standards and clinical applications.

**【Keywords】** *Cuscutae Semen*; Processed products; Gas chromatography-mass spectrometry; Electronic nose; Volatile components

菟丝子为旋花科植物南方菟丝子 (*Cuscuta australis* R. Br.) 或菟丝子 (*Cuscuta chinensis* Lam.) 的干燥成熟种子<sup>[1]</sup>, 具有补益肝肾、固精缩尿、安胎、明目、止泻的功效, 常用于肝肾不足、阳痿遗精、脾肾虚泻等症状, 外用能消风祛斑<sup>[2]</sup>。菟丝子主要含黄酮、多糖、生物碱, 以及挥发油等化学成分, 具有保护生殖系统、拟雌激素、抗肿瘤、强筋骨等药理作用<sup>[3]</sup>。炮制是中药临床应用前的重要加工环节, 合理的炮制能够提高药物疗效, 增加药物应用范围, 降低有毒药物的毒性<sup>[4]</sup>。菟丝子的炮制品多种多样, 《中国药典》2025年版<sup>[1]</sup>记载的炮制品为盐炙菟丝子。盐炙不仅可以促进有效成分的溶出, 还可以改变药性, 引药入肾, 增强补肾固涩之功<sup>[5]</sup>。此外, 历代古籍记载的菟丝子炮制方法有净制、酒制、盐制、黄精汁制等, 现代菟丝子炮制品多采用酒制、炒制、盐制方法<sup>[6]</sup>。经过炮制后菟丝子的挥发性成分种类和含量会发生改变, 如刘天琪等<sup>[7]</sup>比较生品与酒制、盐制菟丝子挥发性成分差异, 发现菟丝子炮制后挥发性成分种类有所增加。但目前对于菟丝子不同炮制品挥发性成分的研究尚不够全面, 仅为简单对比且未涉及更多品种。有研究表明菟丝子挥发性成分具有止痛、抗肿瘤、降血脂的药理作用<sup>[8]</sup>, 因此研究菟丝子不同炮制品之间挥发性成分的差异, 对于深入了解菟丝子及其炮制品的药用价值具有重要意义。

电子鼻是一种拟人嗅觉系统的气味检测技

术, 该技术操作简单, 无需复杂的前处理, 具有良好的重复性和实时性, 如今已广泛运用于食品以及中药产地鉴别等领域<sup>[9]</sup>; 气相色谱-质谱联用 (GC-MS) 法具有高分辨率和灵敏度, 能够准确鉴定挥发性有机化合物的种类和含量, 提供详细的化学组成信息, 是检测挥发性成分强有力的手段<sup>[10]</sup>; 二者相结合可实现样品气味特征的快速筛选和化学成分的精准分析。本研究基于电子鼻与GC-MS法探讨菟丝子不同炮制品挥发性成分的变化差异, 以期为药材质量评价与临床应用提供更为科学的实验依据。

## 1 仪器与试剂

### 1.1 主要仪器

GC-2010 气相色谱-QP 2010plus 质谱联用仪和AOC进样器 (日本岛津公司); cNose 电子鼻 (上海保圣实业发展有限公司); DV215CD 型十万分之一电子天平 (美国奥豪斯公司)。

### 1.2 主要药品与试剂

菟丝子药材 (批号: 240401, 产地: 内蒙古赤峰) 购自河南尚华堂药业股份有限公司, 经长春中医药大学肖井雷教授鉴定为旋花科植物南方菟丝子 (*Cuscuta australis* R. Br.) 或菟丝子 (*Cuscuta chinensis* Lam.) 的干燥成熟种子; 2-辛醇 (阿拉丁有限公司, 货号: S161171); 黄酒 (浙江圣塔绍兴酒有限公司, 批号: 20250115); 食盐 (中盐东兴盐化有限公司, 批号: 20250617); 试验用水为屈臣氏纯净水 (广

州屈臣氏食品饮料有限公司)。

## 2 方法与结果

### 2.1 菟丝子不同炮制品的制备

#### 2.1.1 生菟丝子

取净菟丝子饮片适量，粉碎后过四号筛，密封保存。

#### 2.1.2 清炒菟丝子

取净菟丝子饮片适量，170 °C炒炙 5 min 至表面呈棕黄色，微有裂口，略有香气，取出，放凉<sup>[11]</sup>，粉碎后过四号筛，密封保存。

#### 2.1.3 酒炙菟丝子

取净菟丝子饮片适量，加药材量 10% 的黄酒，闷润 6 h，300 °C炒炙 10 min 至表面呈棕黄色或棕褐色，微有裂口，略有香气，取出，放凉<sup>[12]</sup>，粉碎后过四号筛，密封保存。

#### 2.1.4 盐炙菟丝子

取净菟丝子饮片适量，加药材量 2% 的食盐，参照《中国药典》2025 年版四部通则“0213 盐炙法”<sup>[13]</sup>炒至微鼓起，取出，放凉，粉碎后过四号筛，密封保存。

### 2.2 菟丝子不同炮制品挥发性成分电子鼻分析

#### 2.2.1 电子鼻分析条件

准确称取菟丝子 4 种炮制品各 5 g，加盖密封，每个样品平行检测 6 次，电子鼻设置进样时间 60 s，清洗时间 90 s，其他参数设为默认值。18 个传感器性能描述见表 1。

#### 2.2.2 电子鼻分析结果

4 种菟丝子炮制品电子鼻检测结果雷达图见图 1。由图可知，生菟丝子在 18 个传感器的响应值最低，清炒菟丝子和盐炙菟丝子的响应值相近，酒炙菟丝子的响应值最高，且远高于其他 3 种炮制品。4 种炮制品在 S3 和 S10 这两个传感器的响应值高度重合，表明炮制方法对氢气和含氢气体类物质几乎没有影响；在 S7 和 S13 传感器的响应值较低，表明 4 种炮制品对短链烷烃类和短链烷氢类及可燃性气体等物质不太敏感；在 S1、S6、S9、S14、S18 传感器的响应值较高，分别对应丙烷、醛酮类、烷烃、醇类、酮类、甲烷、甲苯、丙酮、乙醇等物质，其中丙烷和甲烷属于烷烃类，丙酮属于酮类，表明 4 种炮制品对醇类、醛酮类以及烷烃类物质比较敏感。

表 1 cNose 电子鼻传感器主要响应物质  
Table 1. Main response substances of cNose electronic nose sensors

传感器名称	主要响应物质
S1	丙烷、烟雾等
S2	含碳类物质
S3	氢气
S4	硫化物
S5	含氮类物质
S6	醛酮类
S7	短链烷氢类、可燃性气体等
S8	液化气
S9	烷烃、醇类、酮类等
S10	氢气、含氢气体类
S11	烷烃、一氧化碳等
S12	液化气，甲烷类
S13	短链烷烃类
S14	甲烷，燃气，烟雾等
S15	含碳类物质、醇类、醛类等
S16	硫化氢
S17	氨气，胺类等
S18	甲苯、丙酮、乙醇等

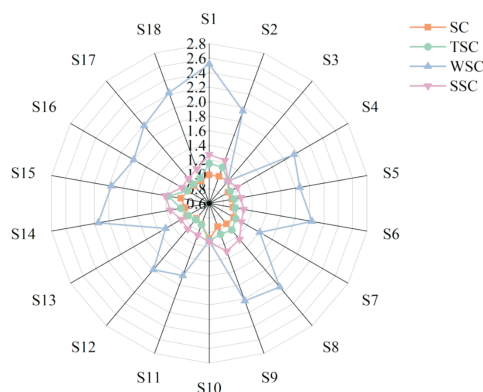


图 1 电子鼻雷达图

Figure 1. Radar chart of electronic nose

注：SC. 生菟丝子；SSC. 盐炙菟丝子；TSC. 清炒菟丝子；WSC. 酒炙菟丝子。

为直观判断菟丝子不同炮制品挥发性成分是否存在差异，采用 Origin2024 软件对菟丝子不同炮制品电子鼻原始数据进行数据分析和主成分分析 (principal components analysis, PCA)，结果见图 2。由图可知，PCA 第 1 主成分的贡献率为 89.6%，第 2 主成分的贡献率为 7.7%，第 1 和第 2 主成分的贡献率之和为 97.3%，表明 4 种炮制品的气味具有明显差异，能很好地进行区分。酒炙菟丝子位于一、四象限，其他 3 种炮制品位于二、三象限，说明酒炙菟丝子与其他 3 种炮制品挥发

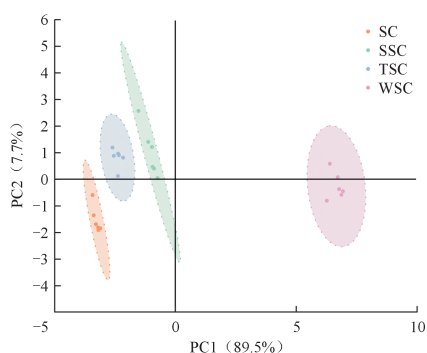


图2 菟丝子不同炮制品挥发性成分的PCA得分图

Figure 2. PCA score plot of volatile components in different processed products of *Cuscutae Semen*

注: SC. 生菟丝子; SSC. 盐炙菟丝子; TSC. 清炒菟丝子; WSC. 酒炙菟丝子。

性成分不同,可能与辅料黄酒有一定关系。

## 2.3 菟丝子不同炮制品挥发性成分的GC-MS分析

### 2.3.1 样品前处理方法

称取3.0 g样品至20 mL顶空瓶中,每瓶加入100 mg/L的2-辛醇标准溶液50  $\mu$ L,拧紧顶空瓶盖,置于自动进样器上。每个样品平行测定3组。

### 2.3.2 顶空固相微萃取条件

萃取头: Supelco 二乙烯基苯/碳分子筛/聚二甲基硅氧烷 (DVB/CAR/PDMS, 50/30  $\mu$ m); 孵化温度: 80  $^{\circ}$ C; 孵化时间: 15 min; 萃取时间: 15 min; 进样口温度: 220  $^{\circ}$ C, 解析时间: 1 min; 不分流进样; 老化温度: 250  $^{\circ}$ C, 老化时间: 10 min。

### 2.3.3 GC条件

色谱柱: Agilent HP-INNOWax 毛细管色谱柱 (60 m  $\times$  0.25 mm, 0.25  $\mu$ m); 载气: 高纯氮气

(纯度  $\geq$  99.999%); 程序升温: 初始温度 50  $^{\circ}$ C, 保持 1 min, 3  $^{\circ}$ C/min 升至 180  $^{\circ}$ C, 再以 10  $^{\circ}$ C/min 升至 230  $^{\circ}$ C 保持 10 min。载气流速: 1.0 mL/min; 进样口温度: 220  $^{\circ}$ C。

### 2.3.4 MS条件

电子能量 70 eV, 离子源温度 230  $^{\circ}$ C, 扫描模式为全扫描 (scan), 质量扫描范围  $m/z$  50~500。

### 2.3.5 GC-MS分析结果

经GC-MS分析,得到菟丝子不同炮制品挥发性成分的总离子流图(图3)。对4种菟丝子炮制品的挥发性成分进行定性与定量分析,共检测出89种挥发性成分(表2)。菟丝子不同炮制品中挥发性成分的种类分布见表3。其中,清炒菟丝子的挥发性成分总含量最高,为24.650 mg/kg,其次是酒炙菟丝子和盐炙菟丝子,生菟丝子的总含量最低,为15.930 mg/kg。与生菟丝子相比,其他炮制品的挥发性成分种类变化如下:清炒菟丝子增加27种、减少10种;盐炙菟丝子增加17种、减少10种;酒炙菟丝子增加32种、减少16种。

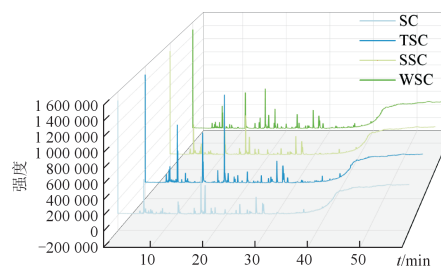


图3 菟丝子不同炮制品总离子流图

Figure 3. Total ion current diagram of different processed products of *Cuscutae Semen*

注: SC. 生菟丝子; SSC. 盐炙菟丝子; TSC. 清炒菟丝子; WSC. 酒炙菟丝子。

表2 不同菟丝子炮制品的挥发性有机物成分及其含量 (mg/kg)

Table 2. Volatile organic compounds and their content in different processed products of *Cuscutae Semen* (mg/kg)

分类	CAS号	化合物名称	分子式	含量 (mg/kg)			
				SC	TSC	SSC	WSC
醇类	23261-20-3	1,2:5,6-二脱水半乳糖醇 (1,2:5,6-dianhydrogalactitol)	$C_6H_{10}O_8$	0.169	—	—	0.172
	71-36-3	正丁醇 (1-butanol)	$C_4H_{10}O$	0.071	0.054	0.049	0.040
	616-25-1	1-戊烯-3-醇 (1-penten-3-ol)	$C_5H_{10}O$	0.370	0.630	0.364	0.381
	123-51-3	异戊醇 (3-methyl-1-butanol)	$C_5H_{12}O$	2.763	0.702	—	—
	71-41-0	正戊醇 (pentanol)	$C_5H_{12}O$	0.457	0.434	2.001	1.664
	1576-95-0	(Z)-2-戊烯-1-醇 [(Z)-2-penten-1-ol]	$C_5H_{10}O$	0.074	0.129	0.082	0.129
	111-27-3	正己醇 (1-hexanol)	$C_6H_{14}O$	0.737	0.457	0.457	0.406
	928-97-2	反-3-己烯醇 [(E)-3-hexen-1-ol]	$C_6H_{12}O$	0.332	0.287	0.197	0.214
	3391-86-4	1-辛烯-3-醇 (1-octen-3-ol)	$C_8H_{16}O$	0.898	0.698	0.637	0.735
	3761-94-2	1-甲基环庚醇 (1-methyl-cycloheptanol)	$C_8H_{16}O$	0.059	—	0.039	0.096
	584-2-1	3-戊醇 (3-pentanol)	$C_5H_{12}O$	—	0.037	—	—

续表2

分类	CAS号	化合物名称	分子式	含量 (mg/kg)			
				SC	TSC	SSC	WSC
	111-70-6	庚醇 (heptanol)	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> O	—	0.017	0.050	0.080
	104-76-7	2-乙基己醇 (2-ethyl-1-hexanol)	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O	—	0.024	0.037	0.030
	98-0-0	糠醇 (furfuryl alcohol)	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	—	0.045	—	0.119
	35301-43-0	2-乙基环丁醇 (2-ethyl-cyclobutanol)	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O	—	0.011	—	—
	100-51-6	苯甲醇 (benzyl alcohol)	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> O	—	—	0.038	—
醛类	96-17-3	2-甲基丁醛 (2-methyl-butanal)	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O	0.098	2.248	0.325	1.134
	590-86-3	异戊醛 (isovaleraldehyde)	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O	0.145	1.296	0.479	0.851
	110-62-3	正戊醛 (pentanal)	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O	0.062	0.514	0.181	0.222
	66-25-1	己醛 (hexanal)	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O	0.779	2.648	1.363	2.215
	124-19-6	壬醛 (nonanal)	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O	0.091	0.244	0.104	0.130
	123-38-6	丙醛 (propanal)	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	—	0.061	—	0.030
	123-72-8	正丁醛 (butanal)	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O	—	0.037	—	0.077
	18829-55-5	反式-2-庚烯醛 [ (E)-2-heptenal ]	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O	—	0.031	0.024	0.048
	100-52-7	苯甲醛 (benzaldehyde)	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O	—	0.196	0.092	0.224
	497-3-0	(E)-2-甲基-2-丁烯醛 [ (E)-2-methyl-2-butenal ]	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O	—	0.079	0.081	—
	124-13-0	正辛醛 (octanal)	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O	—	0.184	—	0.119
	78-84-2	2-甲基丙醛 (2-methyl-propanal)	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O	—	—	0.095	—
	620-2-0	5-甲基呋喃醛 (5-methyl-2-furancarboxaldehyde)	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	—	—	—	0.071
	1115-11-3	2-甲基-2-丁烯醛 (2-methyl-2-butenal)	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O	—	—	—	0.093
酸类	6628-79-1	3-甲基-4-氧代戊酸 (3-methyl-4-oxo-pentanoic acid)	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	0.170	0.085	0.058	0.337
	107-92-6	丁酸 (butanoic acid)	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	0.024	0.067	0.029	0.047
	64-19-7	乙酸 (acetic acid)	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	—	1.929	1.478	1.501
	105-43-1	3-甲基戊酸 (3-methyl-pentanoic acid)	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	—	0.290	0.267	0.262
	109-52-4	正戊酸 (pentanoic acid)	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	0.039	0.074	0.051	0.049
	142-62-1	己酸 (hexanoic acid)	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	0.115	0.229	0.137	0.157
酮类	67-64-1	丙酮 (acetone)	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	0.051	—	—	—
	110-43-0	2-庚酮 (2-heptanone)	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O	0.057	0.134	0.070	0.087
	541-85-5	5-甲基-3-庚酮 (5-methyl-3-heptanone)	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O	0.037	—	—	—
	600-14-6	2,3-戊二酮 (2,3-pentanedione)	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	—	0.024	—	—
	6704-19-4	环丙基乙基甲酮 (1-cyclopropyl-1-propanone)	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O	—	0.027	—	0.028
	110-93-0	6-甲基-5-庚烯-2-酮 (6-methyl-5-hepten-2-one)	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O	—	0.023	0.032	—
	38284-27-4	3,5-辛二烯酮 (3,5-octadien-2-one)	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> O	—	0.071	—	0.078
	579-7-7	1-苯基-1,2-丙二酮 (1-phenyl-1,2-propanedione)	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	—	—	—	0.074
烷烃类	558-30-5	甲基环氧丙烷 (isobutylene oxide)	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O	0.031	0.149	0.052	0.340
	124-18-5	癸烷 (decane)	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	0.057	0.067	0.065	0.084
	17301-32-5	4,7-二甲基-十一烷 (4,7-dimethyl-undecane)	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	0.066	0.046	0.061	—
	112-40-3	十二烷 (dodecane)	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	0.154	0.121	0.144	0.118
	2847-72-5	4-甲基癸烷 (4-methyldecane)	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub>	—	—	—	0.031
烯烃类	111-66-0	1-辛烯 (1-octene)	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub>	—	0.012	0.011	—
	34067-75-9	3-丙基环戊烯 (3-propyl-cyclopentene)	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub>	—	0.057	—	0.048
	5989-27-5	D-柠檬烯 (D-limonene)	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	—	—	—	0.028
酯类	79-20-9	乙酸甲酯 (methyl esteracetic acid)	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	2.405	0.892	2.056	0.462
	121-43-7	硼酸三甲酯 (trimethyl esterboric acid)	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> BO <sub>3</sub>	0.064	0.076	0.069	0.055
	554-12-1	丙酸甲酯 (methyl propionate)	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	0.217	0.107	0.176	0.059
	547-63-7	异丁酸甲酯 (methyl isobutyrate)	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	0.068	—	0.067	—
	623-42-7	丁酸甲酯 (methyl ester butanoic acid)	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	0.177	0.099	0.129	0.033
	868-57-5	2-甲基丁酸甲酯 (methyl 2-methylbutyrate)	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	0.078	—	0.058	—

续表2

分类	CAS号	化合物名称	分子式	含量 (mg/kg)			
				SC	TSC	SSC	WSC
	556-24-1	异戊酸甲酯 (methyl isovalerate)	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	0.050	0.015	0.042	—
	624-24-8	戊酸甲酯 (methyl valerate)	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	0.615	1.220	0.683	0.678
	539-82-2	戊酸乙酯 (ethyl ester pentanoic acid)	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	0.024	0.046	—	0.317
	141-32-2	丙烯酸正丁酯 (n-butyl acrylate)	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	0.036	0.043	0.026	0.044
	106-70-7	己酸甲酯 (methyl ester hexanoic acid)	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	2.797	5.415	2.856	2.921
	123-66-0	正己酸乙酯 (ethyl ester hexanoic acid)	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	0.163	0.203	0.136	1.544
	106-73-0	庚酸甲酯 (methyl ester heptanoic acid)	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	0.350	0.659	0.366	0.376
	1745-17-1	甲基6-庚烯酸酯 (methyl ester 6-heptenoic acid)	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	0.078	—	0.126	—
	111-11-5	辛酸甲酯 (methyl ester octanoic acid)	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	0.212	0.366	0.215	0.192
	1731-84-6	壬酸甲酯 (methyl ester nonanoic acid)	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	—	0.050	—	0.051
	96-48-0	γ-丁内酯 (γ-butyrolactone)	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	—	0.031	—	—
	122-45-2	苯乙酸辛酯 (octyl ester benzeneacetic acid)	C <sub>16</sub> H <sub>24</sub> O <sub>2</sub>	—	—	0.035	—
	591-81-1	4-羟基丁酸乙酯 (4-hydroxy-butanoic acid)	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	—	—	0.023	—
	105-37-3	丙酸乙酯 (ethyl ester propanoic acid)	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	—	—	—	0.086
	105-54-4	丁酸乙酯 (ethyl ester butanoic acid)	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	—	—	—	0.060
	106-30-9	庚酸乙酯 (ethyl ester heptanoic acid)	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	—	—	—	0.104
	106-32-1	辛酸乙酯 (ethyl ester octanoic acid)	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	—	—	—	0.048
	591-81-1	4-羟基丁酸乙酯 (4-hydroxy-butanoic acid)	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	—	—	—	0.035
呋喃类	534-22-5	2-甲基呋喃 (2-methyl-furan)	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> O	0.053	0.119	0.077	0.071
	3208-16-0	2-乙基呋喃 (2-ethyl-furan)	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O	0.094	0.140	0.097	0.083
	4229-91-8	2-正丙基呋喃 (2-propyl-furan)	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> O	0.034	0.017	0.032	—
	4466-24-4	2-丁基呋喃 (2-butylfuran)	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> O	0.042	0.044	0.022	0.031
	3777-69-3	2-正戊基呋喃 (2-pentyl-furan)	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> O	0.357	0.295	0.324	0.333
吡嗪类	109-8-0	2-甲基吡嗪 (2-methylpyrazine)	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	—	0.142	—	0.150
	123-32-0	2,5-二甲基吡嗪 (2,5-dimethyl-pyrazine)	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	—	0.047	—	0.026
	290-37-9	吡嗪 (pyrazine)	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	—	—	—	0.033
其他	95-47-6	邻二甲苯 (o-xylene)	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	0.025	—	0.025	—
	108-88-3	甲苯 (methylbenzene)	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	—	0.054	—	0.054
	142-96-1	正丁醚 (n-butyl ether)	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O	0.037	0.035	—	—
	1014-60-4	1,3-二叔丁基苯 [1,3-bis (1,1-dimethylethyl) -benzene]	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub>	0.050	0.039	0.024	—
	62-75-9	N-亚硝基甲胺 (N-nitrosodimethylamine)	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	—	0.031	—	—

注: SC. 生菟丝子; SSC. 盐炙菟丝子; TSC. 清炒菟丝子; WSC. 酒炙菟丝子; “—”表示未检出。

表3 菟丝子不同炮制品挥发性成分类别分布

Table 3. Distribution of volatile component categories in different processed products of *Cuscutae Semen*

成分类别	生菟丝子	清炒菟丝子	盐炙菟丝子	酒炙菟丝子
酯类	15	14	16	17
醛类	5	11	9	12
醇类	10	13	11	12
酮类	3	5	2	4
酸类	4	6	6	6
烷烃类	4	4	4	4
烯烃类	0	2	1	2
呋喃类	5	5	5	4
吡嗪类	0	2	0	3
总计	49	66	56	65

## 2.4 菟丝子不同炮制品挥发性成分正交偏最小二乘判别分析

为了进一步寻求菟丝子不同炮制品的差异性成分,使用Microsoft Excel 2010 软件进行数据处理, SIMCA 14.1 软件进行正交偏最小二乘判别分析 (orthogonal partial least squares discriminant analysis, OPLS-DA),以89个挥发性成分作为因变量,不同炮制品作为自变量,通过OPLS-DA可实现菟丝子不同炮制品的有效区分。模型解释率参数 $R^2X=0.979$ 和 $R^2Y=0.996$ ,模型预测能力参数 $Q^2=0.992$ , $R^2$ 和 $Q^2$ 超过0.5表示模型拟合结果可接受。4种菟丝子炮制品样品分别聚集在各自的区域,且呈现

明显的4类，表明菟丝子炮制后挥发性成分发生明显改变，且不同炮制方法对其挥发性成分的影响具有差异性（图4）。通过对4种菟丝子炮制品的挥发性成分进行OPLS-DA模型200次交叉置换检验，所有左侧蓝色的 $Q^2$ 点均低于右侧原始 $Q^2$ 点，且 $Q^2$ 回归线与纵轴的相交点小于0，表明不存在过拟合，具有显著的统计学意义（图5）。

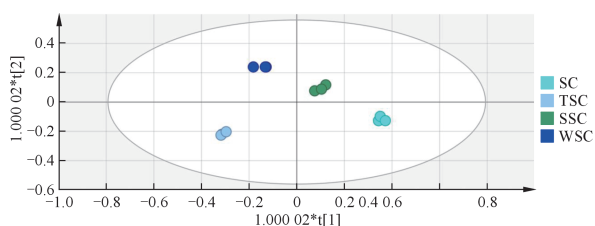


图4 菟丝子不同炮制品挥发性成分的OPLS-DA得分图  
Figure 4. OPLS-DA score plot of volatile components in different processed products of *Cuscutae Semen*

注：SC. 生菟丝子；SSC. 盐炙菟丝子；TSC. 清炒菟丝子；WSC. 酒炙菟丝子。

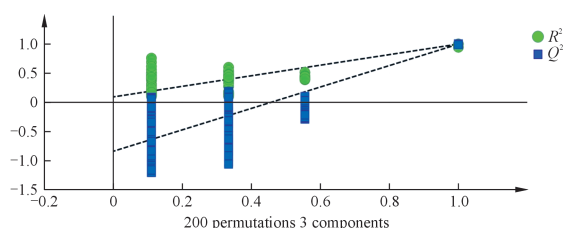


图5 菟丝子不同炮制品挥发性成分的OPLS-DA模型置换检验

Figure 5. Permutation test of OPLS-DA model for volatile components in different processed products of *Cuscutae Semen*

### 2.5 菟丝子不同炮制品差异性成分分析

由于菟丝子不同炮制品间存在挥发性成分差异，为了减少组内无关变量对结果的干扰，以变量重要性投影（variable importance in the projection,

VIP) > 1且 $P < 0.05$ 为标准，筛选菟丝子不同炮制品的差异性成分，结果见图6和表4。结果显示，酯类、醛类、醇类、酸类是菟丝子不同炮制品间差异性成分的主要化合物类别，这与电子鼻数据结果相一致。其中2-甲基丁醛、异戊醛、正戊醛的含量炮制后有所增加，而正己醇、异戊醇的含量炮制后有所下降，这可能是导致炮制后不同炮制品菟丝子气味出现差异性的原因，结果见表5。

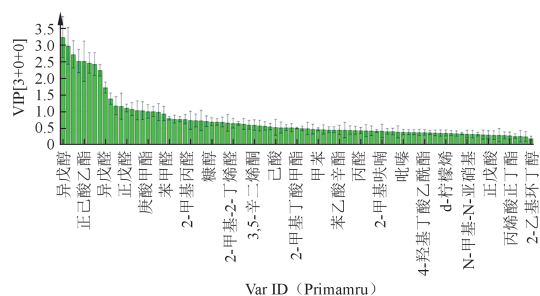


图6 OPLS-DA模型VIP图

Figure 6. VIP plot of the OPLS-DA model

表4 菟丝子不同炮制品VIP > 1的差异性成分  
Table 4. Differential components with VIP > 1 in different processed products of *Cuscutae Semen*

化合物名称	VIP值	P
异戊醇	3.230 15	< 0.05
2-甲基丁醛	2.457 96	< 0.05
乙酸	2.421 94	< 0.05
异戊醛	1.717 85	< 0.05
戊酸乙酯	1.174 78	< 0.05
3-甲基-4-氧代戊酸	1.159 40	< 0.05
正戊醛	1.104 53	< 0.05
甲基环氧丙烷	1.073 93	< 0.05
1,2,5,6-二脱水半乳糖醇	1.034 06	< 0.05
正己醇	1.028 08	< 0.05
庚酸甲酯	1.001 61	< 0.05
3-甲基戊酸	1.001 02	< 0.05

表5 菟丝子不同炮制品特征性成分含量 (mg/kg)

Table 5. Contents of characteristic components in different processed products of *Cuscutae Semen* (mg/kg)

化合物名称	生菟丝子	清炒菟丝子	盐炙菟丝子	酒炙菟丝子
2-甲基丁醛	0.098	2.248	0.325	1.134
正戊醛	0.062	0.514	0.181	0.222
正戊醇	0.457	0.434	2.001	1.664
正己酸乙酯	0.163	0.203	0.136	1.544
戊酸乙酯	0.024	0.046	—	0.317
异戊醇	2.763	0.702	—	—

注：“—”表示未检出。

### 3 讨论

目前，对菟丝子的研究多聚焦于非挥发性

成分，如黄酮、多糖等，并已证实其在抗氧化、抗衰老、免疫调节等方面具有显著活性<sup>[14-15]</sup>，而对其挥发性成分的关注较少。因此，本研究

关注菟丝子不同炮制品挥发性成分的差异，以期为菟丝子的炮制加工和临床应用提供理论基础。

醇类、醛类、酯类和酸类化合物是构成差异成分的主要类别，这可能因为炮制过程可能涉及加成、美拉德、氧化等化学反应<sup>[16-18]</sup>。进一步分析得出，生菟丝子的特征性成分为异戊醇，清炒菟丝子为2-甲基丁醛、正戊醛，盐炙菟丝子为正戊醇，酒炙菟丝子为正己酸乙酯、戊酸乙酯，可作为区分生品和炮制品的标志性成分。李冬芳等<sup>[19]</sup>发现烘焙过程中的热作用促使醇类等成分发生氧化分解，并生成新的化合物，所以菟丝子炒制过程中醇类成分含量明显降低；而醛类和酸类成分明显升高，因为醛类是脂质氧化的典型产物，炮制加热可能会加速不饱和脂肪酸的氧化，氧化反应更加剧烈，导致醛类含量增加<sup>[20-21]</sup>；酸类物质含量的升高，可部分归因于酒炙菟丝子使用的黄酒辅料，严文怡等<sup>[22]</sup>发现酸类物质是黄酒的重要成分。本研究利用PCA、OPLS-DA筛选了12个主要差异性成分，酯类物质有戊酸乙酯、庚酸甲酯，醛类物质有2-甲基丁醛、异戊醛、正戊醛，醇类物质有异戊醇、1,2:5,6-二脱水半乳糖醇、正己醇，酸类物质有3-甲基-4-氧代戊酸、乙酸、3-甲基戊酸以及烷烃类物质甲基环氧丙烷。其中2-甲基丁醛在生菟丝子中的含量为0.098 mg/kg，而在清炒菟丝子中的含量为2.248 mg/kg。炮制过程中会发生非酶促褐变反应等一系列复杂反应，Ding<sup>[23]</sup>、Acquaticci等<sup>[24]</sup>发现2-甲基丁醛与 $\beta$ -酪氨酸等物质反应产生焦香气味。中医认为“脾常为湿困，焦香健脾”，这可能是菟丝子炒制后增加健脾止泻功效的原因之一。盐炙可引药入肾，增加补益肝肾、固精缩尿功效，盐炙菟丝子中正戊醇含量明显升高，该成分可作用于肾脏相关通路，为“引药入肾”提供物质基础。1,2:5,6-二脱水半乳糖醇属于己糖醇类<sup>[25]</sup>，文献报道这类成分具有抗肿瘤作用，在肾癌、膀胱癌临床研究中有明显效果<sup>[26]</sup>，该成分可能与菟丝子“补益肝肾、固精缩尿”这一功效有关联。由此可见，菟丝子炮制后其药性和药理作用会发生改变。

综上所述，基于电子鼻结合GC-MS法分析可有效鉴别并分析菟丝子不同炮制品的挥发性成分。今后可对不同炮制方法引起的差异性成分的

物质基础进行深入实验探索，为后续菟丝子及其炮制品的临床研究提供理论依据。

## 参考文献

- 1 中国药典2025年版.一部[S]. 2025:331.
- 2 赵唯年, 潘新波, 赵丽娟, 等. 不同炮制方法对菟丝子醇提取物中总黄酮、总多糖及7种成分的影响[J]. 中国中医药信息杂志, 2022, 29(11): 97-103. [Zhao WN, Pan XB, Zhao LJ, et al. Effects of different processing methods on total flavonoids, total polysaccharides and seven components in the alcohol extract of *Cuscutae Semen*[J]. Chinese Journal of Information on Traditional Chinese Medicine, 2022, 29(11): 97-103.] DOI:10.19879/j.cnki.1005-5304.202201308.
- 3 陈思奇, 冯静, 姜庆丽. 菟丝子的药理作用及临床研究进展[J]. 中医药导报, 2025, 31(7): 125-129. [Chen SQ, Feng J, Jiang QL. Pharmacological effects and clinical research progress of tusizi (*Cuscuta chinensis*) [J]. Guiding Journal of Traditional Chinese Medicine and Pharmacy, 2025, 31(7): 125-129. ] DOI:10.13862/j.cn43-1446/r.2025.07.021.
- 4 邓青. 水处理、炮制前分档在中药炮制中对临床疗效及不良反应的影响[J]. 内蒙古中医药, 2022, 41(7): 131-133. [Deng Q. Influence of water treatment and pre-processing grading on clinical efficacy and adverse reactions in traditional Chinese medicine processing [J]. Inner Mongolia Journal of Traditional Chinese Medicine, 2022, 41(7): 131-133.] DOI:10.16040/j.cnki.cn15-1101.2022.07.070.
- 5 李雅娟, 李莎莎, 陈曦, 等. 菟丝子及盐菟丝子指纹图谱对比研究[J]. 中药材, 2023, 46(9): 2185-2189. [Li YJ, Li SS, Chen X, et al. Comparative study on the fingerprint spectra of *Cuscuta chinensis* Lam. and salt-processed *Cuscuta chinensis* Lam. [J]. Journal of Chinese Medicinal Materials, 2023, 46(9): 2185-2189.] DOI:10.13863/j.issn1001-4454.2023.09.013.
- 6 张振凌, 刘艳芳. 菟丝子炮制历史沿革研究[A]. 中华中医药学会中药炮制分会2009年学术研讨会论文集[C]. 武汉: 中华中医药学会, 2009: 125-128.
- 7 刘天琪, 江汉美, 田宇, 等. 菟丝子及其炮制品中挥发性成分比较及主成分分析[J]. 中国药房, 2022, 33(6): 729-734. [Liu TQ, Jiang HM, Tian Y, et al. Comparison of volatile components and principal component analysis of *Cuscuta chinensis* and its processed products[J]. China Pharmacy 2022, 33(6): 729-734.] DOI:10.6039/j.issn.1001-0408.2022.06.14.
- 8 裴学军, 卢金清, 黎强, 等. HS-SPME-GC-MS法分析不同产地菟丝子中的挥发性成分[J]. 中国药房, 2016, 27(21): 3006-3009. [Pei XJ, Lu JQ, Li Q, et al. Analysis on volatile components in *Cuscuta chinensis* from different habitats by HS-SPME-GC-MS[J]. China Pharmacy, 2016, 27(21): 3006-3009.] DOI:10.6039/j.issn.1001-0408.2016.21.42.
- 9 Shi H, Zhang M, Adhikari B. Advances of electronic nose and its application in fresh foods: a review [J]. Crit Rev Food Scid Nutr, 2018, 58(16): 2700-2710. DOI:10.1080/10408398.2017.1327419.
- 10 谢景, 何金明. GC-MS技术在植物挥发油检测分析中的应用研究进展[J]. 韶关学院学报, 2020, 41(6): 61-65. [Xie J, He JM. The application of gas chromatography-mass spectrometry (GC-

- MS) in the detection and analysis of volatile oil in plants [J]. Journal of Shaoguan University, 2020, 41(6): 61–65.] DOI: 10.3969/j.issn.1007-5348.2020.06.013.
- 11 徐鑫, 张学兰, 唐超. 正交法优选炒菟丝子的最佳炮制工艺[J]. 中成药, 2011, 33(2): 359–361. [Xu X, Zhang XL, Tang C. Orthogonal method for optimizing the best processing technique of fried purslane seeds [J]. Chinese Traditional Patent Medicine, 2011, 33(2): 359–361.] DOI:10.3969/j.issn.1001-1528.2011.02.050.
- 12 张秀如, 杨金平, 焦春梅, 等. 基于正交试验设计-组合赋权 TOPSIS 法的菟丝子酒炙工艺优化 [J]. 山东中医药大学学报, 2024, 48(5): 596–602. [Zhang XR, Yang JP, Jiao CM, et al. Optimization of rice wine processing technology of tusizi (*Cuscuta semen*) based on orthogonal experimental design-combination weighting TOPSIS method [J]. Journal of Shandong University of Traditional Chinese Medicine, 2024, 48(5): 596–602.] DOI:10.16294/j.cnki.1007-659x.2024.05.013.
- 13 中国药典 2025 年版. 四部[S]. 2025: 34.
- 14 Ahmad A, Tandon S, Xuan T, et al. A review on phytoconstituents and biological activities of *Cuscuta* species [J]. Biomed Pharmacother, 2017, 92: 772–795. DOI: 10.1016/j.biopha.2017.05.124.
- 15 张妍, 李杨, 高娜娜, 等. 3 种中药多糖对自然衰老小鼠卵巢功能的延缓作用 [J]. 中国兽医杂志, 2024, 60(9): 114–121. [Zhang Y, Li Y, Gao NN, et al. The delaying effects of three traditional Chinese medicine polysaccharides ovarian function innaturally aging mice[J]. Chinese Journal of Veterinary Medicine, 2024, 60(9): 114–121.] DOI: 10.20157/j.cnki.zgsyzz.2024.sf.003.
- 16 严林, 宋亚南, 贾哲, 等. HS-GC-IMS 结合化学计量学分析栀子炭炮制过程中挥发性成分的变化 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2025, 31(14): 190–197. [Yan L, Song YN, Jia Z, et al. Analysis of volatile component changes during processing of gardeniaefructus carbonisata by HS-GC-IMS combined with chemometrics[J]. Chinese Journal of Experimental Traditional Medical Formulae, 2025, 31(14): 190–197.] DOI:10.13422/j.cnki.syfjx.20250867.
- 17 李鑫, 付娜, 王红强. 基于可控氧化-美拉德反应的牛油风味特征分析 [J]. 现代食品科技, 2025, 41(12): 278–290. [Li X, Fu N, Wang HQ. Analysis of the flavor characteristics of beef tallow based on controllable oxidation-maillard reaction[J]. Modern Food Science & Technology, 2025, 41(12): 278–290.] DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2025.12.1270.
- 18 程莹莹, 王云, 宋亚南, 等. 基于 HS-SPME-GC-Q-TOF-MS 分析黄连姜制前后挥发性成分的差异 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2025, 31(23): 181–187. [Chen YY, Wang Y, Song YN, et al. Differences of volatile components in *Coptidis Rhizoma* before and after ginger processing analyzed by HS-SPME-GC-Q-TOF-MS [J]. Chinese Journal of Experimental Traditional Medical Formulae, 2025, 31(23): 181–187.] DOI: 10.13422/j.cnki.syfjx.20251969.
- 19 李冬芳, 吴扬, 张孟聪, 等. 不同品种轻焙火武夷岩茶的香气特征差异分析 [J/OL]. 现代食品科技, 1–13(2026-03-26). [Li DF, Wu Y, Zhang MC, et al. Nalysis of Aromatic characteristics differences among lightly Roasted Wuyi rock teas of different varieties [J/OL]. Modern Food Science and Technology, 1–13 (2026-03-26).] DOI:10.13982/j.mfst.1673-9078.2027.3.0087.
- 20 Dragoev S. Lipid peroxidation in muscle foods: impact on quality, safety and human health[J]. Foods, 2024, 13(5):797.DOI:10.3390/foods13050797.
- 21 Nikmaram N, Keener K. The effects of cold plasma technology on physical, nutritional, and sensory properties of milk and milk products[J]. LWT, 2022, 154.DOI:10.1016/j.lwt.2021.112729.
- 22 严文怡, 杨艳, 谢雅婷, 等. 传统黄酒风味物质研究进展 [J]. 食品安全质量检测学报, 2023, 14(14): 115–124. [Yan WY, Yang Y, Xie YT, et al. Research progress of the flavor compounds in traditional Huangjiu[J]. Journal of Food Safety & Quality, 2023, 14(14): 115–124.] DOI:10.19812/j.cnki.jfsq11-5956/ts.2023.14.011.
- 23 Ding Y, Cheng R, Li Y, et al. Effects of stir-frying on chemical profile, sensory quality and antioxidant activity of Chrysanthemi Flos: a metabolomics and sensory study[J]. Food Res Int, 2025, 200: 115391. DOI:10.1016/j.foodres.2024.115391.
- 24 Acquaticci L, Schouten M, Angeloni S, et al. Influence of baking conditions and formulation on furanic derivatives, 3-methylbutanal and hexanal and other quality characteristics of lab-made and commercial biscuits [J]. Food Chem, 2024, 437(Pt 1): 137791. DOI:10.1016/j.foodchem.2023.137791.
- 25 吴余燕, 邓超澄, 林坤河, 等. 己糖醇衍生物抗肿瘤作用的研究进展 [J]. 广西中医药, 2017, 40(5): 78–80. [Wu YY, Deng CC, Lin KH, et al. Research progression the antitumor effects of hexitol derivatives[J]. Guangxi Journal of Traditional Chinese Medicine, 2017, 40(5): 78–80.] DOI:10.3969/j.issn.1003-0719.2017.05.033.
- 26 Eagan T, Moertel CG, Hahn G, et al. Phase I study of a five-day intermittent schedule for 1,2,5,6-dianhydrogalactitol (NSC-132313)[J]. J Natl Cancer Inst, 1976, 56(1): 179–181. DOI: 10.1093/jnci/56.1.179.

收稿日期: 2026 年 03 月 03 日 修回日期: 2026 年 05 月 08 日  
本文编辑: 周璐敏 洗静怡