

**Primary Study on Virtual (Digital) Chemical Standards in
Qualitative and Quantitative Analysis of Volatile Components in
Chinese Medicine**

By

Gao Xiaohui

Master of Science

2008



Institute of Chinese Medical Sciences

University of Macau

碩士學位論文

虛擬（數字）化學對照品在中藥揮發性成分定性定量 分析中的應用初探

研究生姓名： 高小惠
導 師： 李紹平 副教授
專 業： 中 藥 學
日 期： 2008.08



澳門大學中華醫藥研究院

目錄

符號說明.....	VIII
第一章 研究概述.....	1
第一節 研究意義及方法.....	1
1. 定性參數的虛擬化.....	2
2. 定量參數的虛擬化.....	2
第二節 中藥化學對照品的發展現狀.....	3
第三節 替代對照品的研究現狀.....	6
1. 定性方法.....	6
2. 定量方法.....	6
第二章 中藥揮發性成分數字對照品庫的構建.....	10
第一節 中藥揮發性成分化學對照品的獲取.....	10
1. 中藥揮發性對照品的收集.....	10
2. 揮發性成分對照品的分離製備.....	12
第二節 中藥揮發性成分對照品 EI-MS 圖庫的建立.....	16
1. 儀器與試劑.....	16
2. 中藥揮發性成分的對照品 EI-MS 圖及相關數據采集.....	16
第三節 莖術中 7 種揮發性化學對照品虛擬化 GC-MS 條件的確立.....	18
1. GC-MS 分析條件的優化及系列正構烷烴的選擇.....	20
2. 方法學考察.....	22
3. 小結.....	28
第四節 定性參數的虛擬化.....	29
1. 原理.....	30
2. 莖術中各成分定性係數的計算.....	30
3. 討論與小結.....	33
第五節 定量參數虛擬化.....	35
1. 原理.....	35
2. 不同方法的定量準確度比較及定量方法選擇.....	36
3. 小結與討論.....	58
第三章 數字化對照品在莖術藥材 7 種揮發性成分定性定量分析中的應用.....	60
第一節 儀器與試藥.....	60
第二節 方法與結果.....	61
1. 實驗方法.....	61
2. 定性分析及結果.....	62

3. 定量分析及結果.....	62
第三節 討論與小結.....	67
1. 影響定量準確度的因素.....	67
2. 小結.....	67
參考文獻.....	68
附錄 I 各揮發性成分 GC-MS 色譜圖及 MS 圖	72
附錄 II 各藥材提取液的 GC-MS 色譜圖.....	88
攻讀學位期間發表的學術論文目錄.....	93