

摘要

中藥化學對照品是中藥定性定量研究的物質基礎，是中藥品質控制的關鍵。然而由于中藥化學對照品特別是揮發性成分對照品存在難以獲得、不易保存的缺點，從很大程度上影響了中藥揮發性成分化學對照品的種類及數量，造成了中藥品質控制研究及日常檢測所需化學對照品的嚴重不足，阻礙了中藥品質控制研究的發展，成為中藥國際化的瓶頸。本研究針對中藥揮發性化學對照品缺乏的問題，以常用中藥材莪術為研究對象，應用系列正構烷烴及實物對照品構建虛擬對照品庫，並採用建立的虛擬對照品對其主要成分進行定性鑒別和定量測定研究，從而探討建立中藥揮發性成分虛擬（數字）化對照品庫的可行性。

本論文包括三個章節。第一章介紹本課題的研究背景並提出本文的研究方法，通過調研中藥化學對照品的供求現狀並參照目前替代對照品方法的研究進展分析了建立中藥揮發性成分數字化對照品的必要性及可行性。

第二章重點介紹了中藥（以莪術為實例）揮發性成分數字對照品庫的構建。第一、二節為中藥揮發性成分化學對照品質譜數據的獲取：一方面通過化學分離得到薑黃揮發油中的主要揮發性成分包括芳-薑黃烯、芳-薑黃酮、 α -薑黃酮、 β -薑黃酮；另一方面通過購買市售的對照品得到 39 個中藥揮發性成分，並對這些揮發性成分對照品進行 GC-MS 分析，獲得其 MS 數據，應用 AMDIS 系統建立 MS 圖庫。第三節建立了莪術主要揮發性成分（ β -欖香烯、莪術烯、異莪術烯醇、吉馬酮、莪術二酮、莪術烯醇、新莪術二酮及莪術雙環烯酮等 9 個成分）及其系列相鄰正構烷烴的 GC-MS 分析方法，並進行了方法學考察。第四節為對照品定性參數的虛擬化，通過計算有效成分對照品及其相鄰正構烷烴的校正保留時間的比值作為定性因子，求得各成分定性因子的變異係數 RSD%均小於 0.05%，表明運用該定性因子結合相應的 MS 數據可以作為揮發性成分定性鑒別的有效方法，達到了對照品定性參數虛擬化的目的。本章第五節主要為揮發性成分對照品定量參數的虛擬化，首先採用對照品及其相鄰正構烷烴的響應值的比值建立定量因子並驗證其準確度，但由于 MS 的響應具有一定的波動性，此定量因子在實際應用時需通過校正方可作為各化合物定量計算的依據。本文選取莪術中常見成分吉馬酮及其相鄰正構烷烴 C₁₇ 的校正曲線計算 MS 響應值校正因子，計算各化合物的校正定量因子並進行二次驗證。驗證結果顯示，在一定濃度範圍內，以虛擬

對照品進行定量的結果與各對照品的實際濃度基本一致，說明該方法在沒有對照品的情況下對莪術中揮發性成分進行定量分析是可行的。同時，本節中將本文的虛擬對照品法與文獻的一測多評法、類似物法進行了比較。

第三章是本研究在實際應用中的體現，用數字化對照品法對 19 批市售莪術藥材進行了定性定量分析，同時與經典的標準曲綫法的定量結果進行比較，結果基本一致，說明瞭本方法的實用性和可行性，體現了本研究的實際意義。

總之，本文針對對照品缺乏的問題，首次運用系列正構烷烴建立數字化對照品的構想，以常用中藥莪術為例進行了初步研究，為中藥替代對照品研究提供了有益參考。

關鍵詞：數字化對照品，中藥揮發性成分，定性分析，定量分析，莪術