# 薰衣草化学成分探讨

来源：网络 作者：悠然小筑 更新时间：2023-12-26

*薰衣草香味浓郁而柔和，无毒副作用，被广泛用于香水、护肤品、洗发液等多种日用品中，下面是小编搜集整理的一篇探究薰衣草化学成分的论文范文，欢迎阅读参考。 摘要:采用顶空固相微萃取一气相色谱一质谱(HS-SPME-GC/MS)联用技术，结合保...*

薰衣草香味浓郁而柔和，无毒副作用，被广泛用于香水、护肤品、洗发液等多种日用品中，下面是小编搜集整理的一篇探究薰衣草化学成分的论文范文，欢迎阅读参考。

摘要:采用顶空固相微萃取一气相色谱一质谱(HS-SPME-GC/MS)联用技术，结合保留指数(Rl),建立了新疆不同品种薰衣草化学成分的快速分析方法，并采用多元统计分析方法对不同品种薰衣草的特征差异性标志物进行识别。选取薰衣草挥发性化合物中顺一R-罗勒烯、芳樟醇、乙酸芳樟酷、u品烯一个醇、石竹烯和石竹烯氧化物等6个代表性成分进行方法考察，首先优化HS-SPME萃取条件，然后运用GC/MS法分析3个品种26批薰衣草花中挥发性成分，最后采用主成分分析(PCA)和偏最小\_乘一判别分析(PLS-D八)对数据进行处理。结果显T:3个不同品种薰衣草样品间的化学成分得到有效区分;筛选识别出9个不同品种薰衣草间差异显著的化学成分标志物，薰衣草特征变量组分与差异标志物分析结果一致。这说明，SPME-GC/MS结合多元统计技术可以为薰衣草复杂体系的快速鉴定、差异标志物识别提供可行的方法参考。

关键词:顶空固相微萃取(HS-SPME);气相色谱一质谱(GC/MS);薰衣草;主成分分析(PCA);偏最小\_乘法一判别分析(PLS-DA )

薰衣草是唇型科薰衣草属植物，为多年生亚灌木，有着悠久的种植和应用历史口。在我国，薰衣草的主要栽培地区为新疆伊犁，其种植面积约占全国薰衣草种植面积的9500，是世界三大薰衣草基地之一。薰衣草香味浓郁而柔和，无毒副作用，被广泛用于香水、护肤品、洗发液等多种日用品中。此外，薰衣草还是一种传统的维吾尔族药材，用于治疗风寒感冒、湿痹关节痛、头疼头晕等疾病，还可治疗皮炎和湿疹等皮肤病}3}}。但不同品种薰衣草的化学组成及含量具有一定的差异性，使其药效及品质不同，直接影响市场价格和应用范围。薰衣草花中的挥发性成分决定了薰衣草的品质。目前对挥发性成分的提取方法主要有水蒸气提取法和超临界C():提取法，二者都存在样品用量大、费时及提取成本高等缺点。顶空固相微萃取(HS-SPME)是集采样、萃取及富集于一体的样品前处理技术，具有提取速度快、不使用溶剂、样品用量少等优点，在天然产物挥发性成分分析中得到了普遍应用。近年来，随着薰衣草应用范围的扩大，在薰衣草的栽培技术，精油的提取、应用及化学成分分析等方面已开展了广泛的研究阳。〕，但对新疆不同品种薰衣草挥发性成分的整体变化和显著差异性标志物成分的研究则鲜见报道。薰衣草精油的化学成分复杂，如何从大量信息中提取有用的数据是一个难点，而多元统计分析技术可以很好地解决数据复杂的问题}m-}s}。本研究拟采用顶空固相微萃取一气相色谱一质谱(HS-SPME-GC/MS技术结合保留指数(RI法对新疆3个品种26批薰衣草中挥发性成分进行快速提取与鉴定，并通过主成分分析(PCA)和偏最小二乘法(PLS-DA)对数据进行统计分析，以实现不同品种薰衣草特征差异性标志物的区分，从而为薰衣草化学成分的快速鉴定和品质控制提供科学依据。

1、实验部分

1.1仪器与试剂

78908UC-5977AMSD气相色谱一质谱联用仪:美国Aglient公司产品;DF-lO1S集热式磁力加热搅拌器:江苏省金坛市医疗仪器厂产品;57330-U手动固相微萃取装置、50/30pmDVB/CAR/PDMS萃取纤维、20mI玻璃样品瓶(配有PTFE/硅胶垫片的螺纹瓶盖):均为美国Supelc。公司产品;XA型粉碎机:江苏姜堰市分析仪器厂产品。C\_-,-Cz正构烷烃标准品:上海化学试剂有限公司一厂产品;实验所用薰衣草为202\_年采摘的盛花期的法国蓝、H-7O1和C-197(2),3个品种共26批，采摘地点为大量种植薰衣草的新疆伊犁生产建设兵团65团、69团和70团。

1.2薰衣草样品处理与进样

将薰衣草花粉碎，过20目筛，存放于生℃冰箱中，备用;实验时，准确称取20mg冷藏的薰衣草样品于20mI顶空瓶中，将其置于55℃水浴锅内平衡30min后，采用50/30}mDVB/CAR/PDMS萃取头进行固相微萃取，静态顶空萃取30min;萃取完成后，将纤维头插人到气相色谱仪进样口解吸30so

1.3实验条件

1.3.1色谱条件色谱柱:HP-INN()Wax毛细管柱(60mX0.25mmX0.5gym);升温程序:20℃保持1min，以30C/min升至220℃，再以100C/min升至250℃，保持1min;载气(He)流速1.0mI丫min;分流比10：1。

1.3.2质谱条件电子轰击(EI)离子源，电子能量70eV，传输线温度250℃，离子源温度230℃，质量扫描范围、7/二30-}-50001.4保留指数的测定取C}(`z正构烷烃标准品，在与样品相同的分析条件下测定正构烷烃的保留时间，并计算化合物的保留指数RI。通过谱库检索、化合物保留指数的计算值与KIST数据库在相同色谱柱HP-INN()Wax上的RI文献检索值的对比，对薰衣草花样品中的挥发性组分进行定性分析。

2、结果与讨论

2.1 SPME萃取条件的优化

本实验采用单变量的方法对法国蓝A,、样品的萃取温度、萃取时间和解吸时间等参数进行优化。优化过程中选取薰衣草挥发性化合物中具有不同沸点和不同含量的顺一R-罗勒烯、芳樟醇、乙酸芳樟醋、帖品烯理一醇、石竹烯和石竹烯氧化物等6个代表性化合物的色谱峰面积作为评价标准，实验平行3次，计算平均值和标准偏差。另外，萃取纤维涂层的极性也直接影响萃取方法的灵敏性和选择性。根据文献仁1侧6〕，选择DVB/CAR/PDMS纤维头萃取薰衣草挥发性化合物。

2.1.1 萃取温度的选择

温度对萃取过程具有双重影响。温度升高有助于分析物从样品基质中释放出来，但如果温度持续上升会降低分 析物在涂层和样品中的分配系数，降低萃取纤维吸附分析物的能力。因此，选择合适的温度是确保最佳萃取效率的关键。本实验对不同萃取温度(20}55}70}80和900C)下目标化合物的萃取效率进行研究，结果示于图1。可以看出，除顺-R-罗勒烯和石竹烯氧化物外，其余化合物的萃取效率都在55℃时达到最大值，之后，随温度升高萃取效率下降，因此选择55℃为最佳萃取温度。

2.1.2 萃取时间的选择

萃取时间是顶空固相微萃取过程的一个重要参数。对不同萃取时间(20,30,50,7。和90min)下目标化合物的萃取效率进行考察，结果示于图2。可以看出，除顺一户罗勒烯和石竹烯氧化物在90min时获得最大萃取效率外，其余化合物在20一90min内的萃取效率变化不大。经综合考虑，选择30min为样品的最佳萃取时间。

2.1.3 解析时间的选择

在气相色谱进样口解吸时，若解吸时间过短可能导致解吸不完全。实验考察了250℃解析温度下，不同解析时间(10,20,30,60和120s)对分析物萃取效率的影响，结果示于图3。可以看出，6个目标化合物均在30s时达到充分解析，且随着解析时间的延长萃取效率稍许下降。因此，选择30s为最佳解析时间。

2.2 样品测定

采用GC/MS法对26批薰衣草花样品进行分析，各成分质谱图经数据库检索，并结合保留指数RI，确定了薰衣草精油中的23个化学成分，结果列于表1。应用峰面积归一法确定薰衣草样品中化学成分的相对百分含量，结果列于表2，其中，样品A}B和C分别为薰衣草品种法国蓝、H-7O1和C-197(2)0薰衣草挥发性成分主要以帖烯氧化物类化合物为主，分别为芳樟醇、乙酸芳樟醋、乙酸薰衣草醋、帖品烯-小醇和石竹烯氧化物。其中，芳樟醇(含量1000)和乙酸芳樟醋(含量2200)是含量最高的2个化合物，并且被认为其含量越高薰衣草的品质越好。薰衣草挥发性化合物中还含有较多的顺廿罗勒烯、。一檀香烯、石竹烯和顺廿法呢烯等烯烃类化合物，且不同品种薰衣草中化学成分种类和含量存在一定的差异。

2.3 PCA分析

采用主成分分析(PCA)法对26批薰衣草样品品种的差异及样品与挥发性化合物的相关性进行分析。以薰衣草样品的GC/MS数据为研究对象，用23个色谱峰的面积百分含量构建主成分分析数据矩阵，对所构建数据标准化处理后进行PCA分析。结果表明，第一主成分(PC1)方差为56.300，第二主成分(PC2)方差为17.200，前2个累积方差贡献率为73.700,所以前2个主成分可以代表原数据的主要信息。主成分分析结果示于图生。由主成分PC1和PC2得分分布图(图2a)可见，薰衣草样品被明显分为3个区域，说明这3个品种的化学成分存在明显的差异。主成分分布图(图2a)和变量载荷图(图2b在分布和趋势上具有一致性和可比性。经过对比分析，根据品种不同，薰衣草样品可分成工、11、}3个类别。其中，工类主要包括法国蓝样品A,-,-A,，特征变量组分主要为石竹烯氧化物和乙酸薰衣草醋;11类主要包括H-7O1样品Yi}Yz和B:，特征变量组分主要为乙酸芳樟醋和石竹烯;111类包括C-197(2)样品C}^-C}，特征变量组分主要为芳樟醇、帖品烯理一醇、顺廿罗勒烯和顺廿法呢烯。

2.4 PLS-DA分析

采用PLS-DA法分析薰衣草不同品种之间的差异变量，即差异标志物成分。以常用变量载荷评价参数(VIP)值来描述变量的贡献程度，当VIP1即认为存在潜在的差异化学成分。对法国蓝和H-7O1样品进行PLS-IAA聚类分析，结果示于图5a，模型验证结果(RzY=0.900,Q2-0.861)显示其可靠有效;PLS-DA的VIP得分图示于图5b，其中，VIP1的化合物共有2个，分别为乙酸薰衣草醋、乙酸芳樟醋、石竹烯和吉玛烯n。对法国蓝和C-197(2)样品进行PLS-DA聚类分析，结果示于图6a，模型验证结果(RY=0.901,Q2=0.862)显示其可靠有效;PLS-DA的VIP得分图示于图6b,VIPI的化合物共有7个，分别为乙酸薰衣草醋、芳樟醇、帖品烯胜一醇、顺节罗勒烯、顺节法呢烯、乙酸芳樟醋和石竹烯氧化物。对H-701和C-197(2)样品进行PLS-DA聚类分析，结果示于图7a,模型验证结果(RzY=0.971,Q2-0.936)证明其可靠程度较高;PLS-DA的VIP得分图示于图7b,VIP1的化合物共有9个，分别为芳樟醇、石竹烯、顺廿法呢烯、乙酸芳樟醋、乙酸薰衣草醋、吉玛烯n、顺廿罗勒烯、帖品烯理一醇和石竹烯氧化物。3个不同品种薰衣草之间具有9个潜在的差异标志物成分，数据分析结果与PCA不同品种的特征变量组分分析结果一致，2种多元统计技术的分析结果可互相验证。其中，共有的差异性标志物为乙酸薰衣草醋和乙酸芳樟醋，乙酸薰衣草醋在法国蓝中的相对百分含量最高，并且是法国蓝的特征变量组分;乙酸芳樟醋在H-7O1中的相对百分含量最高，同时是H-7O1的特征变量组分。

3、结论

建立了HS-SPME与GC/MS联用分析薰衣草中挥发性成分的方法，并结合多元统计分析技术快速识别不同品种薰衣草花中差异标志物。采用该方法对3个品种26批新疆薰衣草样品进行了系统地研究。萃取条件优化过程中所选用的顺廿罗勒烯、芳樟醇、乙酸芳樟醋、帖品烯理一醇、石竹烯和石竹烯氧化物等6个具有代表性的化合物既是薰衣草样品的主要特征变量组分，又是差异标志物成分，使得建立的样品提取方法更具代表性和准确性。利用GC/MS结合保留指数RI进行定性分析，可以提高薰衣草挥发性化合物定性结果的准确性。采用PCA和PLS-DA技术对GC/MS数据进行分析，3个不同品种薰衣草样品被明显的分为3个区域，不同品种薰衣草间得到9个差异化学成分，特征变量组分与差异标志物分析结果一致。结果表明，SPME-GC/MS结合多元统计技术可以对薰衣草复杂体系实现快速分析、识别差异标志物成分。该方法具有样品用量少、灵敏度高、不需使用溶剂等优点，可为天然产物中挥发性成分的快速分析提供方法参考。

参考文献:

1.中华人民共和国药典委员会中华人民共和国I}\_生部药品标准:维吾尔药分册[M]乌鲁木齐:新疆科技I}\_生出版社，1998:112}.

2.候娅，马阳，邹立思，等基于UPLC-TripleT固-MS/MS技术分析不同产地太子参的差异化学成分}J刁质谱学报，202\_,360):359-366.

3.李伟，刘亚丽，结合OPLS-D八成分与识别差宋永贵，等UPLC-Q-T固-MSF:模式快速鉴定南、北五味子化学异标志物[J].中草药，202\_,6(15)\_2212-2218.

本DOCX文档由 www.zciku.com/中词库网 生成，海量范文文档任你选，，为你的工作锦上添花,祝你一臂之力！