

中图分类号: R932; R284.1; R286.0 文献标志码: A 文章编号: 1006-4931(2026)15-0079-06
doi:10.3969/j.issn.1006-4931.2026.15.013



基于指纹图谱与多指标成分定量结合化学计量学评价 升阳十一味丸质量

邬倩

(中国人民解放军联勤保障部队第九〇〇医院, 福建 福州 350025)

摘要:目的 建立评价升阳十一味丸质量的指纹图谱与多指标成分定量结合化学计量学分析法。方法 通过中药色谱指纹图谱相似度评价系统(2012版)建立17批样品的高效液相色谱(HPLC)叠加指纹图谱,并指认共有峰,采用HPLC法同时测定8种成分含量。色谱柱为Capcell Pak MG C₁₈柱(250 mm×4.6 mm, 5 μm),流动相为乙腈-0.65%磷酸水溶液(梯度洗脱),流速为1.0 mL/min,检测波长分别为280 nm(没食子酸、鞣花酸、异鼠李素、桂皮醛、胡椒碱)、330 nm(阿魏酸、咖啡酸)、403 nm(羟基红花黄色素A),柱温为30℃,进样量为10 μL。结合聚类分析(CA)、主成分分析(PCA)、正交偏最小二乘法判别分析(OPLS-DA)评价17批样品的质量。结果 17批样品的指纹图谱相似度为0.950~0.989,共确定25个共有峰,指认出8种成分,分别为没食子酸(峰6)、咖啡酸(峰8)、阿魏酸(峰10)、羟基红花黄色素A(峰13)、鞣花酸(峰14)、异鼠李素(峰18)、桂皮醛(峰20)、胡椒碱(峰23)。上述8种成分分别在各自质量浓度范围内与峰面积线性关系良好($r \geq 0.999$, $n=6$);精密度、稳定性、重复性试验结果的RSD均小于2.0%($n=6$);平均回收率分别为98.85%, 99.58%, 99.10%, 99.08%, 100.11%, 98.23%, 99.18%, 98.29%, RSD分别为0.66%, 0.85%, 1.36%, 1.07%, 1.29%, 0.97%, 1.03%, 1.25%($n=6$)。17批样品中上述8种成分的含量分别为1.009~1.392 mg/g、1.182~1.241 mg/g、0.573~0.641 mg/g、0.533~0.563 mg/g、1.414~2.204 mg/g、0.590~0.622 mg/g、0.665~0.698 mg/g、0.988~1.137 mg/g($n=3$)。CA结果显示,3家生产企业的样品各自聚为1类。PCA结果与CA结果一致。OPLS-DA结果显示,25个共有峰中有6个共有峰的变量投影重要性(VIP)大于1.0,分别为峰14、峰8、峰6、峰18、峰23和峰9。结论 所建立的方法操作简便、专属性强、结果准确,可用于评价升阳十一味丸的质量。

关键词: 升阳十一味丸; 高效液相色谱法; 指纹图谱; 化学计量学; 质量评价

第一作者: 邬倩, 女, 大学本科, 药师, 研究方向为药品质量分析, (电子信箱)1596938750@qq.com。

446-462.

[19] Van Der Heijden R A, Sheedfar F, Morrison M C, et al. High-fat diet induced obesity primes inflammation in adipose tissue prior to liver in C57BL/6j mice [J]. Aging (Albany NY), 2015, 7(4): 256-268.

[20] Viola A, Munari F, Sánchez-Rodríguez R, et al. The Metabolic Signature of Macrophage Responses [J]. Front Immunol, 2019, 10: 1462.

[21] Murray P J. Macrophage Polarization [J]. Annu Rev Physiol, 2017, 79: 541-566.

[22] Shantaram D, Hoyd R, Blaszcak A M, et al. Obesity-associated microbiomes instigate visceral adipose tissue inflammation by recruitment of distinct neutrophils [J]. Nat Commun, 2024, 15(1): 5434.

[23] D'Alessio D. Is GLP-1 a hormone: Whether and When? [J]. J Diabetes Investig, 2016, 7 Suppl 1 (Suppl 1): 50-55.

[24] Lindquist P, Madsen J S, Bräuner-Osborne H, et al. Mutational Landscape of the Proglucagon-Derived Peptides [J]. Front Endocrinol (Lausanne), 2021, 12: 698511.

[25] Campbell J E, Drucker D J. Pharmacology, physiology, and mechanisms of incretin hormone action [J]. Cell Metab, 2013, 17(6): 819-837.

[26] Li X R, Ren Y K, Chang K W, et al. Adipose tissue macrophages as potential targets for obesity and metabolic diseases [J]. Front Immunol, 2023, 14: 1153915.

[27] Shimobayashi M, Albert V, Woelnerhanssen B, et al. Insulin resistance causes inflammation in adipose tissue [J]. J Clin Invest, 2018, 128(4): 1538-1550.

[28] Solinas G, Becattini B. JNK at the crossroad of obesity, insulin resistance, and cell stress response [J]. Mol Metab, 2017, 6(2): 174-184.

[29] Han M S, Jung D Y, Morel C, et al. JNK expression by macrophages promotes obesity-induced insulin resistance and inflammation [J]. Science, 2013, 339(6116): 218-222.

[30] Xiao Y L, Gong Y, Qi Y J, et al. Effects of dietary intervention on human diseases: molecular mechanisms and therapeutic potential [J]. Signal Transduct Target Ther, 2024, 9(1): 59.

[31] Zhang Y Q, Shi L, Mei H L, et al. Inflamed macrophage microvesicles induce insulin resistance in human adipocytes [J]. Nutr Metab (Lond), 2015, 12: 21.

[32] Chen X Q, Liu Z Q, Liu W J, et al. NF-κB-Inducing Kinase Provokes Insulin Resistance in Skeletal Muscle of Obese Mice [J]. Inflammation, 2023, 46(4): 1445-1457.

[33] Jeong S, Lee S, Kim K, et al. Isoliquiritigenin Derivatives Inhibit RANKL-Induced Osteoclastogenesis by Regulating p38 and NF-κB Activation in RAW 264.7 Cells [J]. Molecules, 2020, 25(17): 3908.

(收稿日期: 2025-06-10; 修回日期: 2026-01-29)

Quality Evaluation of Shengyang Shiyiwei Pills Based on Fingerprint and Multi - Index Components Quantitative Combined with Chemometrics

WU Qian

(The 900th Hospital of Joint Logistics Support Force of the PLA, Fuzhou, Fujian 350025, China)

Abstract: Objective To establish a fingerprint and multi - index component quantitative combined chemometrics analysis method for the quality evaluation of Shengyang Shiyiwei Pills. **Methods** High - performance liquid chromatography (HPLC) overlay fingerprints of 17 batches of samples were established by the traditional Chinese medicine chromatographic fingerprint similarity evaluation system (Version 2012), and eight components were identified. The content of common peaks was simultaneously determined by the HPLC method, the chromatographic column was Capcell Pak MG C₁₈ column (250 mm × 4.6 mm, 5 μm), the mobile phase was acetonitrile - 0.65% phosphoric acid aqueous solution (gradient elution), the flow rate was 1.0 mL / min, the detection wavelengths were 280 nm (gallic acid, tannic acid, isorhamnetin, cinnamaldehyde, and piperine), 330 nm (ferulic acid, and caffeic acid), and 403 nm (hydroxysaffron yellow A), the column temperature was 30 °C, and the injection volume was 10 μL. Meanwhile, the cluster analysis (CA), principal component analysis (PCA), and orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS - DA) methods were used to evaluate the quality of 17 batches of samples. **Results** The fingerprint similarity of 17 batches of samples was 0.950 - 0.989. Twenty - five common peaks were identified, and eight components were identified, which were gallic acid (peak 6), caffeic acid (peak 8), ferulic acid (peak 10), hydroxysafflor yellow A (peak 13), ellagic acid (peak 14), isorhamnetin (peak 18), cinnamaldehyde (peak 20), and piperine (peak 23). There was a good linear relationship between the mass concentrations of the above eight components and the peak area within their respective mass concentrations ($r \geq 0.999$, $n = 6$). The RSDs of precision, stability, and repeatability test results were lower than 2.0% ($n = 6$). The average recovery rates of the above eight components were 98.85%, 99.58%, 99.10%, 99.08%, 100.11%, 98.23%, 99.18%, and 98.29%, with RSDs of 0.66%, 0.85%, 1.36%, 1.07%, 1.29%, 0.97%, 1.03%, and 1.25% ($n = 6$), respectively. The contents of the above eight components in 17 batches of samples were 1.009 - 1.392 mg / mL, 1.182 - 1.241 mg / mL, 0.573 - 0.641 mg / mL, 0.533 - 0.563 mg / mL, 1.414 - 2.204 mg / mL, 0.590 - 0.622 mg / mL, 0.665 - 0.698 mg / mL, and 0.988 - 1.137 mg / mL ($n = 3$), respectively. The CA results showed that the samples from the three manufacturers were clustered into one category. The PCA results were consistent with those of the CA. The OPLS - Da results showed that the variable projection importance (VIP) of six common peaks in the twenty - five common peaks was greater than 1.0, which were peak 14, peak 8, peak 6, peak 18, peak 23, and peak 9, respectively. **Conclusion** The established method is simple, specific, and accurate, which can be used for the quality evaluation of Shengyang Shiyiwei Pills.

Key words: Shengyang Shiyiwei Pills; HPLC; fingerprint; chemometrics; quality evaluation

升阳十一味丸是由石榴、蒺藜、葶苈、冬葵果、红花、益智、黄精、肉桂、天冬、玉竹、天花粉11味中药材配伍制成的蜜丸,具有温肾、利水、消食功效,主治胃寒、消化不良、肾寒腰痛、遗精淋下、宫寒带多等症^[1]。现行质量标准仅有显微鉴别项及丸剂检查的通则项,文献[2-3]仅对制剂中胡椒碱、没食子酸等单一成分进行了定量控制,尚无高效液相色谱(HPLC)指纹图谱及化学计量学相关研究。中药复方制剂通过多种成分协同增效,而临床有效性的前提是产品批间质量稳定^[4]。为此,本研究中建立了17批升阳十一味丸的高效液相色谱(HPLC)叠加指纹图谱,采用HPLC法同时测定了其中8种成分的含量,并进行化学计量学分析,为该制剂建立更系统、全面的质量控制标准提供参考。现报道如下。

1 仪器与试药

1.1 仪器

Agilent1260 Infinity II型HPLC仪(美国Agilent公司);XP405型电子天平(瑞士Mettler Toledo公司,精度为十万分之一);KQ-600DBG型数控超声波清洗器(昆山市超声仪器有限公司,功率为600 W,频率为40 kHz)。

1.2 试药

没食子酸对照品(批号为110831-202407,含量为90.8%),阿魏酸对照品(批号为110773-202316,含量为99.3%),咖啡酸对照品(批号为110885-201703,含量为99.7%),胡椒碱对照品(批号为110775-202107,含量为98.2%),异鼠李素对照品(批号为110860-202012,含量为99.1%),羟基红花黄色素A对照品(批号为111637-202412,含量为97.7%),鞣花酸对照品(批号为111959-201602,含量为89.3%),桂皮醛对照品(批号为110710-202223,含量为98.8%),均购自中国食品药品检定研究院;甲醇、乙腈、磷酸(色谱纯,德国Merck公司);水为怡宝纯净水;17批升阳十一味丸(阜新蒙药有限责任公司,批号分别为20240129, 20240315, 20240422, 20240507, 20240610, 20240704, 20240902, 编号为S1-S7;内蒙古库伦蒙药有限公司,批号分别为231113, 240202, 240318, 240425, 240511, 编号为S8-S12;内蒙古蒙药股份有限公司,批号分别为202400307, 202400414, 202400526, 202400619, 202301023, 编号为S13-S17)。

2 方法与结果

2.1 色谱条件^[5-7]

色谱柱: Capcell Pak MG C₁₈柱(250 mm × 4.6 mm, 5 μm); 流动相: 乙腈(A) - 0.65% 磷酸水溶液(B), 梯度洗脱(0~25 min 时 89%A → 75%A, 25~40 min 时 75%A → 45%A, 40~55 min 时 45%A → 30%A); 流速: 1.0 mL/min; 检测波长: 280 nm(没食子酸、鞣花酸、异鼠李素、桂皮醛、胡椒碱), 330 nm(阿魏酸、咖啡酸), 403 nm(羟基红花黄色素A); 柱温: 30 °C; 进样量: 10 μL。

2.2 溶液制备

分别取没食子酸、阿魏酸、咖啡酸、胡椒碱、异鼠李素、羟基红花黄色素A、鞣花酸、桂皮醛对照品各适量, 精密称定, 加甲醇制成质量浓度分别为0.3863, 0.2215, 0.3609, 0.4518, 0.2604, 0.2628, 0.6572, 0.3001 mg/mL的混合对照品溶液。

取升阳十一味丸适量, 研细, 取2.0 g, 精密称定, 置具塞锥形瓶中, 精密加入55%甲醇50 mL, 密塞, 称定质量, 超声处理(功率为450 W, 频率为35 kHz)40 min, 放冷, 再称定质量, 用55%甲醇补足减失的质量, 摇匀, 0.45 μm微孔滤膜过滤, 即得供试品溶液。

按升阳十一味丸的制备工艺分别制备缺石榴、冬葵果、葶苈、蒺藜、红花、肉桂的阴性样品, 按供试品溶液制备方法制备阴性供试品溶液。

2.3 HPLC 指纹图谱建立

2.3.1 方法学考察

精密度试验: 取升阳十一味丸样品(编号为S5)适量, 按2.2项下方法制备供试品溶液, 按2.1项下色谱条件连续进样测定6次, 以14号峰为参照峰, 计算各共有峰相对保留时间和相对峰面积的RSD。结果分别为0.44%~1.23%(n=6)和1.35%~1.78%(n=6), 表明仪器精密度良好。

重复性试验: 取升阳十一味丸样品(编号为S5)适量, 平行6份, 按2.2项下方法制备供试品溶液, 按2.1项下色谱条件进样测定, 以14号峰为参照峰, 计算各共有峰相对保留时间和相对峰面积的RSD。结果分别为1.04%~1.21%(n=6)和1.29%~2.15%(n=6), 表明方法重复性良好。

稳定性试验: 取升阳十一味丸样品(编号为S5)适量, 按2.2项下方法制备供试品溶液, 分别于室温放置0, 4, 8, 12, 16, 20, 24 h时按2.1项下色谱条件进样测定, 以14号峰为参照峰, 计算各共有峰相对保留时间和相对峰面积的RSD。结果分别为0.98%~1.36%(n=7)和1.38%~2.07%(n=7), 表明供试品溶液室温放置24 h内稳定性良好。

2.3.2 指纹图谱建立与相似度评价

取17批升阳十一味丸样品(编号为S1-S17)各适

量, 按2.2项下方法制备供试品溶液, 按2.1项下色谱条件进样测定, 将HPLC图导入中药色谱指纹图谱相似度评价系统(2012版), 以S5样品为参照, 进行全谱自动匹配, 获得17批样品的HPLC叠加指纹图谱和HPLC对照指纹图谱。详见图1和图2。可见, 确定共有峰25个, 其中14号峰因其色谱峰响应最大、保留时间适中, 选为参照峰(S)。17批样品的相似度评价结果分别为0.982, 0.987, 0.981, 0.989, 0.985, 0.980, 0.983, 0.952, 0.951, 0.953, 0.950, 0.956, 0.964, 0.969, 0.962, 0.960, 0.961, 均大于0.95, 表明不同厂家和批次样品的质量稳定。

2.3.3 共有峰指认

将对照指纹图谱(图2)与混合对照品溶液HPLC图(图3)比对, 共指认8个成分, 分别为没食子酸(峰6)、咖啡酸(峰8)、阿魏酸(峰10)、羟基红花黄色素A(峰13)、

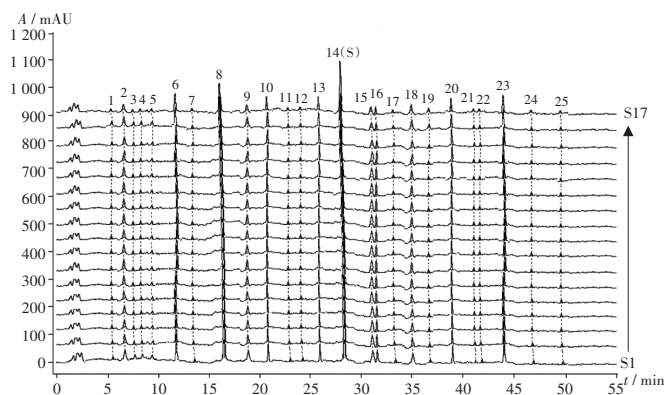


图1 17批样品高效液相色谱叠加指纹图谱

Fig. 1 HPLC overlay fingerprints of 17 batches of samples

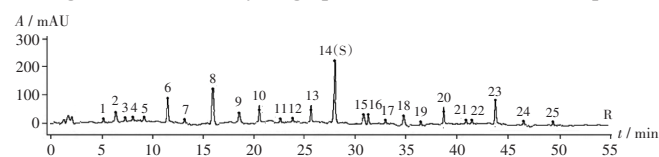
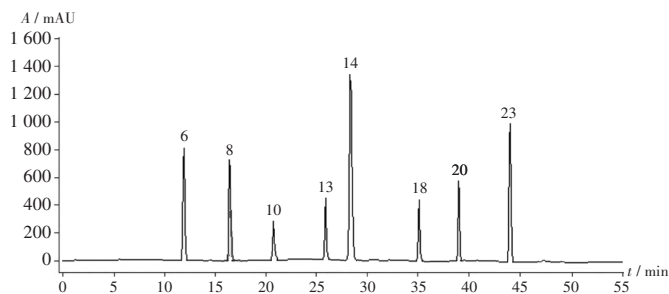


图2 样品高效液相色谱对照指纹图谱

Fig. 2 HPLC reference fingerprint of the sample



6. 没食子酸 8. 咖啡酸 10. 阿魏酸 13. 羟基红花黄色素A
14. 鞣花酸 18. 异鼠李素 20. 桂皮醛 23. 胡椒碱

图3 混合对照品溶液高效液相色谱图

6. Gallic acid 8. Caffeic acid 10. Ferulic acid 13. Hydroxysafflor yellow A
14. Ellagic acid 18. Isorhamnetin 20. Cinnamaldehyde 23. Piperine

Fig. 3 HPLC chromatograms of the mixed reference solution

鞣花酸(峰14)、异鼠李素(峰18)、桂皮醛(峰20)、胡椒碱(峰23)。

2.4 多指标成分含量测定

2.4.1 方法学考察

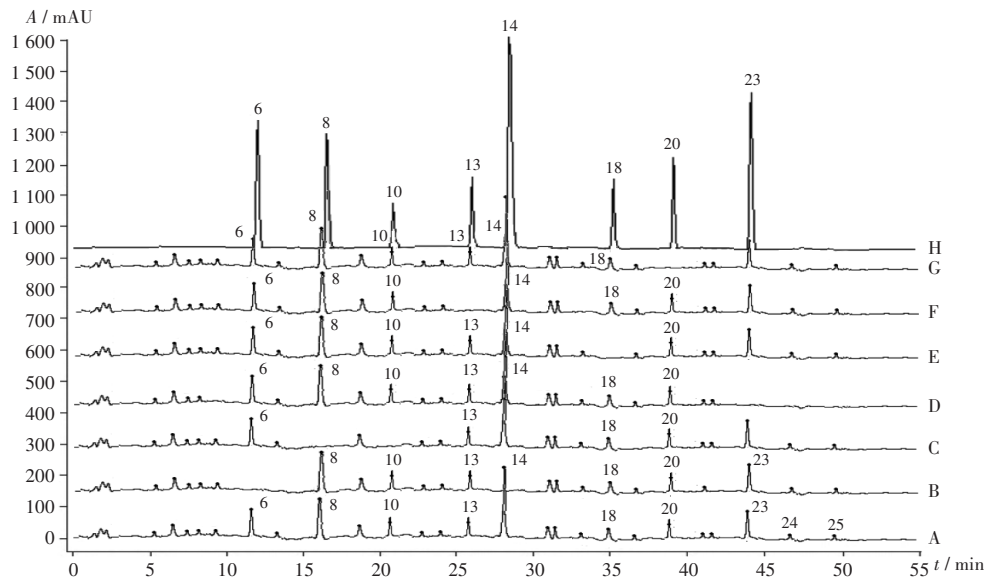
专属性试验:分别精密吸取2.2项下混合对照品溶液、供试品溶液、阴性对照品溶液各适量,按2.1项下色谱条件进样测定,记录色谱图。结果各待测组分与相邻色谱峰的分离度均大于1.5,供试品溶液色谱中,在与混合对照品溶液相同保留时间处有相应色谱峰出现,且阴性对照无干扰,表明方法专属性良好。详见图4。

线性关系考察:分别精密吸取2.2项下混合对照品溶液1.0、2.0、3.0、4.0、5.0、10.0 mL,置不同25 mL容

量瓶中,加甲醇定容,制成系列质量浓度的线性溶液,按2.1项下色谱条件进样测定,以对照品质量浓度(X , $\mu\text{g/mL}$)为横坐标、峰面积(Y)为纵坐标进行线性回归。结果见表1,表明各成分在各自质量浓度范围内与峰面积线性关系良好。

精密度试验:精密吸取2.2项下混合对照品溶液,按2.1项下色谱条件连续进样测定6次,记录峰面积。结果见表1,表明仪器精密度良好。

稳定性试验:取同一批升阳十一味丸样品(编号为S5)适量,按2.2项下方法制备供试品溶液,分别于室温放置0、3、9、12、20、24 h时按2.1项下色谱条件进样测定,记录峰面积。结果见表1,表明供试品溶液室温放置



6. 没食子酸 8. 咖啡酸 10. 阿魏酸 13. 羟基红花黄色素 A 14. 鞣花酸 18. 异鼠李素 20. 桂皮醛 23. 胡椒碱
A. 供试品溶液 B - G. 阴性对照品溶液(分别缺石榴、冬葵果、苹蓂、蒺藜、红花、肉桂) H. 混合对照品溶液

图4 专属性试验高效液相色谱图

6. Gallic acid 8. Caffeic acid 10. Ferulic acid 13. Hydroxysafflor yellow A 14. Ellagic acid 18. Isorhamnetin 20. Cinnamaldehyde 23. Piperine
A. Test solution B - G. Negative reference solution (lacking Punicae Granati Fructus, Malvae Fructus, Piperis Longi Fructus, Tribuli Fructus, Carthami Flos, and Cinnamomi Cortex, respectively) H. Mixed reference solution

Fig. 4 HPLC chromatogram of the specificity test

表1 方法学考察结果($n = 6$)

Tab.1 Results of the methodological investigation ($n = 6$)

成分	回归方程	r	线性范围 ($\mu\text{g/mL}$)	RSD(%)		重复性试验		加样回收试验(%)	
				精密度试验	稳定性试验	含量(mg/g)	RSD(%)	平均回收率	RSD
没食子酸	$Y = 85.16 X + 17.84$	0.999 7	15.45 ~ 154.52	0.35	0.88	1.201	1.25	98.85	0.66
阿魏酸	$Y = 76.27 X + 12.01$	0.999 6	8.86 ~ 88.60	0.29	0.72	0.623	0.91	99.10	1.36
咖啡酸	$Y = 69.83 X + 24.56$	0.999 5	14.44 ~ 144.36	0.61	0.65	1.215	0.99	99.58	0.85
胡椒碱	$Y = 97.84 X - 12.69$	0.999 4	18.07 ~ 180.72	0.58	0.59	1.015	1.38	98.29	1.25
异鼠李素	$Y = 45.57 X + 20.13$	0.999 3	10.42 ~ 104.16	0.47	0.81	0.601	1.44	98.23	0.97
羟基红花黄色素 A	$Y = 52.14 X + 19.15$	0.999 1	10.51 ~ 105.12	0.66	0.92	0.550	1.19	99.08	1.07
鞣花酸	$Y = 112.86 X - 29.25$	0.999 8	26.29 ~ 262.88	0.57	0.61	1.972	1.01	100.11	1.29
桂皮醛	$Y = 37.91 X + 12.04$	0.999 2	12.00 ~ 120.04	0.31	0.79	0.698	1.07	99.18	1.03

24 h内稳定性良好。

重复性试验:取同一批升阳十一味丸样品(编号为S5)适量,平行6份,按2.2项下方法制备供试品溶液,按2.1项下色谱条件进样测定,记录峰面积,并计算含量。结果见表1,表明方法重复性良好。

加样回收试验:取已知含量的升阳十一味丸样品(编号为S5)1.0 g,精密称定,平行6份,置不同锥形瓶中,分别按100%比例加入混合对照品溶液适量,按2.2项下方法制备供试品溶液,按2.1项下色谱条件进样测定,记录峰面积,并计算回收率。结果见表1,表明方法准确度良好。

2.4.2 样品含量测定

分别取17批升阳十一味丸样品(编号为S1-S17)各适量,按2.2项下方法制备供试品溶液,按2.1项下色谱条件进样测定,记录峰面积,并按外标法计算含量。结果见表2。

2.5 化学计量学分析

聚类分析(CA):将17批升阳十一味丸的25个共有峰峰面积数据导入SPSS 22.0统计学软件,以欧平方距离为度量进行CA。结果当类间距为15~25时,3家企业的样品各自聚类,S1-S7(阜新蒙药有限责任公司)聚为1类,S8-S12(内蒙古库伦蒙药有限公司)聚为1类,S13-S17(内蒙古蒙药股份有限公司)聚为1类。详见图5。

主成分分析(PCA)与正交偏最小二乘法判别分析

(OPLS-DA):将17批升阳十一味丸的25个共有峰峰面积数据导入SIMCA-P14.1软件,进行PCA和OPLS-DA。基于PCA得分图,样品可聚为3类,S1-S7聚为I类,S8-S12聚为II类,S13-S17聚为III类,与CA结果一致。详见图6。进一步对数据进行变量投影重要性(VIP)筛选,VIP值越高,对组间差异的影响越大^[8]。筛选出VIP>1.0的6个峰,按贡献率降序排列依次为峰14、峰8、峰6、峰18、峰23、峰9。详见图7。

3 讨论

3.1 指标性成分选择

升阳十一味丸方中,以暖胃、开郁消食的石榴、茺蔚、蒺藜、红花、肉桂为主药,配以利尿、消肿的冬葵果为辅药,再以滋补、祛肾寒的天冬、玉竹、天花粉、益智、

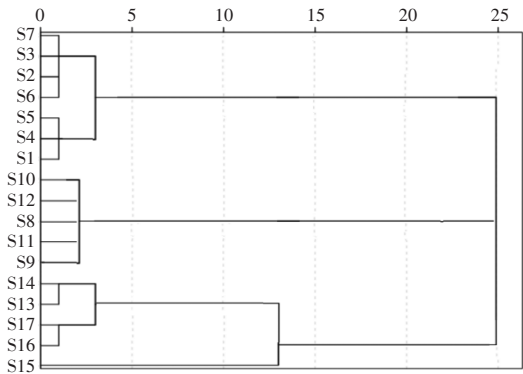


图5 17批样品聚类分析树状图

Fig. 5 Dendrogram of the cluster analysis of 17 batches of samples

表2 17批样品中8种成分含量测定结果(mg/g, n=3)

Tab. 2 Results of the content determination of eight components in 17 batches of samples (mg/g, n=3)

编号	没食子酸	咖啡酸	阿魏酸	胡椒碱	异鼠李素	羟基红花黄色素A	鞣花酸	桂皮醛	合计
S1	1.205	1.241	0.623	1.108	0.610	0.551	2.136	0.683	8.157
S2	1.196	1.239	0.624	1.012	0.622	0.540	1.999	0.682	7.914
S3	1.191	1.210	0.632	1.137	0.602	0.551	2.011	0.688	8.022
S4	1.392	1.227	0.641	1.129	0.604	0.557	1.985	0.690	8.225
S5	1.201	1.215	0.623	1.015	0.601	0.550	1.972	0.698	7.875
S6	1.259	1.224	0.620	1.024	0.610	0.563	1.916	0.692	7.908
S7	1.213	1.218	0.626	1.039	0.604	0.550	2.204	0.695	8.149
S8	1.224	1.201	0.600	1.005	0.600	0.550	1.921	0.695	7.796
S9	1.192	1.189	0.601	1.005	0.600	0.533	1.903	0.677	7.700
S10	1.188	1.203	0.611	1.000	0.594	0.546	1.925	0.680	7.747
S11	1.227	1.203	0.601	1.022	0.591	0.551	1.899	0.681	7.775
S12	1.303	1.217	0.600	1.001	0.590	0.548	1.826	0.681	7.766
S13	1.009	1.222	0.592	1.009	0.598	0.552	1.501	0.691	7.174
S14	1.033	1.199	0.589	1.011	0.594	0.550	1.416	0.690	7.082
S15	1.019	1.191	0.606	0.988	0.595	0.541	1.433	0.665	7.038
S16	1.072	1.197	0.600	0.994	0.596	0.543	1.559	0.691	7.252
S17	1.084	1.182	0.573	0.992	0.590	0.537	1.414	0.692	7.064
$\bar{X}$	1.177	1.210	0.610	1.029	0.600	0.548	1.825	0.687	7.685

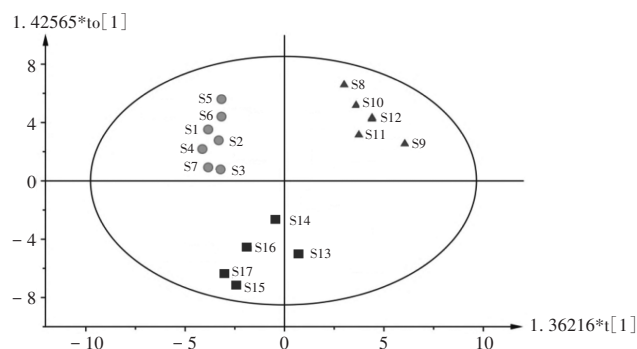


图6 17批样品主成分分析得分图

Fig. 6 PCA score plots of 17 batches of samples

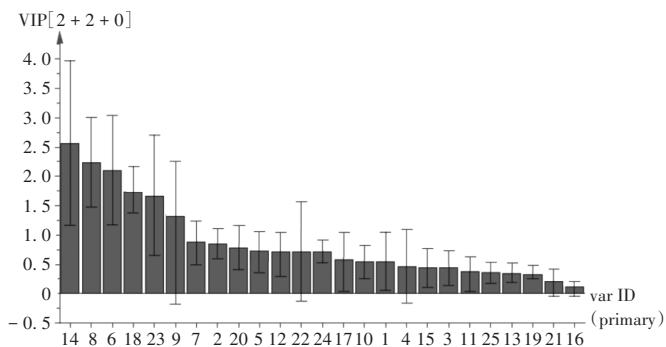


图7 17批样品的变量投影重要性图

Fig. 7 VIP plots of 17 batches of samples

黄精为佐药。其中,有机酸类成分鞣花酸、没食子酸来源于石榴,是发挥暖胃、开郁消食作用的物质基础^[8-9];荜茇温中散寒,行气止痛,其主要活性成分胡椒碱具有调节胃火、胃肠道痉挛的作用^[10],2020年版《中国药典(一部)》也以该成分为荜茇药材的指标性成分;蒺藜中的异鼠李素具有平肝解郁作用,可改善血液流变学指标^[11];红花散瘀止痛,以查耳酮类成分羟基红花黄色素A多见^[12];肉桂主治虚寒胃痛,其活性成分桂皮醛具有治疗胃炎、抑菌等作用^[13];冬葵果作为蒙药常用药,具有清热利尿、消肿功效,咖啡酸、阿魏酸等酚酸类成分具有抗氧化、调节免疫力等生物学活性^[14-15]。CA与PCA均将17批样品按生产企业来源聚为3类;OPLS-DA筛选出VIP值大于1.0的6个色谱峰,分别为峰14(鞣花酸)、峰8(咖啡酸)、峰6(没食子酸)、峰18(异鼠李素)、峰23(胡椒碱)及峰9。根据方中中药材的药理学作用,结合化学计量学分析结果,最终选择没食子酸、阿魏酸、咖啡酸、胡椒碱、异鼠李素、羟基红花黄色素A、鞣花酸、桂皮醛8种成分作为升阳十一味丸的指标性成分。

3.2 不同厂家质量评价

本研究中建立了17批升阳十一味丸的HPLC叠加指纹图谱,共确定25个共有峰,并通过与混合对照品溶液HPLC图比对,指认出没食子酸(峰6)、咖啡酸(峰8)、阿魏酸(峰10)、羟基红花黄色素A(峰13)、鞣花酸

(峰14)、异鼠李素(峰18)、桂皮醛(峰20)和胡椒碱(峰23)8个峰;17批样品的相似度均大于0.95,表明不同生产企业的产品整体化学组成具有良好的一致性和稳定性。含量测定结果发现,内蒙古蒙药股份有限公司的产品中没食子酸和鞣花酸含量低于其他2家生产企业,提示需关注其石榴原药材的质量控制。

3.3 方法评价

本研究中建立的方法操作简便、专属性强、结果准确,可用于评价升阳十一味丸的质量。

参考文献

- [1] 中华人民共和国卫生部药典委员会. 中华人民共和国卫生部药品标准·蒙药分册[M]. 赤峰:内蒙古科学技术出版社, 1998:72.
- [2] 郭宝凤,王玉华,侯海玲. 高效液相色谱法测定蒙成药升阳十一味丸中没食子酸含量[J]. 中国药业,2014,23(20):63-64.
- [3] 温爱平,王玉华,杨来秀. 高效液相色谱法测定蒙药升阳十一味丸中胡椒碱的含量[J]. 内蒙古医学院学报,2010,32(3):306-308.
- [4] 田莹莹,张金莲,戴迪,等. 基于HPLC指纹图谱及多成分含量测定的健儿消食口服液质量评价及稳定性研究[J]. 中国现代中药,2023,25(3):597-603.
- [5] 拜礼文,焦兴革,谭金华,等. 藏药石榴健胃丸(片、散)质量标准提升研究[J]. 中南药学,2023,21(2):437-441.
- [6] 李运等. 藏药六味石榴丸的质量标准研究[J]. 中国民族民间医药,2023,32(19):19-24.
- [7] 张昊,巩丽丽,王婧毅,等. 三子养亲汤中11种成分含量同时测定及其胰脂肪酶抑制作用研究[J]. 中成药,2024,46(6):1788-1793.
- [8] 张肖,张立华,卢永慧,等. 石榴不同部位化学成分及药用价值研究进展[J]. 特产研究,2024,12(18):1-8.
- [9] 唐大为,张梦晓,刘浩. 石榴的化学成分及在疾病中应用研究进展[J]. 蚌埠医学院学报,2023,48(1):138-141.
- [10] 王如梦,郭梓琪,杨宏新,等. 基于网络药理学及分子对接探讨荜茇治疗胃癌的作用机制研究[J]. 中国药物警戒,2023,20(10):1121-1128.
- [11] 武琴园,王琴,董梅,等. 基于HPLC多成分定量结合化学模式识别分析不同产地蒺藜质量差异[J]. 药物评价研究,2024,47(4):792-799.
- [12] 白启荣,郭姣洁,吴娇. 红花的化学成分及药理作用研究进展[J]. 新乡医学院学报,2024,41(1):88-94.
- [13] 王敏,魏谭军,陈飞,等. 基于一测多评法多成分定量结合多元统计分析技术评价不同产地肉桂品质[J]. 中国中医药信息杂志,2024,31(8):133-139.
- [14] 胡杨,李先芝,石豪,等. 不同提取方式对冬葵果中咖啡酸、阿魏酸含量的影响[J]. 亚太传统医药,2022,18(5):57-60.
- [15] 文娟. 蒙药那仁满都拉及组方药冬葵果的利尿作用研究[D]. 通辽:内蒙古民族大学,2024:11-12.

(收稿日期:2025-01-04;修回日期:2026-06-02)