

基于 HS-GC-IMS 技术解析紫褐色和 黄棕色酸枣仁挥发性有机物的差异性*

段道¹, 康秉涛¹, 赵璠¹, 颜永刚², 张岗², 彭亮^{2,3,*}

(1. 榆林市第五医院, 陕西 榆林 719000; 2. 陕西中医药大学药学院, 西安 712046;

3. 道地药材国家重点实验室, 北京 100700)

摘要 目的: 系统比较紫褐色与黄棕色酸枣仁中挥发性有机物 (VOCs) 的种类与含量差异, 为其快速鉴别与质量评价提供科学依据。**方法:** 采用顶空-气相色谱-离子迁移谱 (HS-GC-IMS) 技术测定两种色泽酸枣仁的 VOCs, 构建 HS-GC-IMS 图谱与指纹图谱, 结合主成分分析 (PCA) 和偏最小二乘判别分析 (PLS-DA) 等化学计量学方法, 可视化解析其挥发性成分差异。**结果:** 从两类样品中共鉴定出 44 种 VOCs, 包括醛类 1 种、酯类 9 种、酮类 10 种、烯醛 2 种、醇类 14 种、酸类 3 种、呋喃类 2 种、二硫化物 1 种及烃类 2 种, 其中醇类和酯类为主要成分。指纹图谱显示组内样品一致性较高, 但组间存在明显含量差异。PCA 与 PLS-DA 分析均能有效区分两类样品, 戊醇、丁酸甲酯、2-乙基呋喃、2-己醇和 2-甲基丙烯醛等成分为关键差异性标志物。**结论:** HS-GC-IMS 结合化学模式识别可准确识别不同色泽酸枣仁的挥发性成分差异, 该方法快速、灵敏, 适用于酸枣仁的质量控制与快速鉴定。

关键词: 酸枣仁; 顶空-气相色谱-离子迁移谱; 挥发性有机物; 化学模式识别

中图分类号: R 921.2

文献标识码: A

文章编号: 1009-3656(2026)01-0028-09

doi:10.19778/j.chp.2026.01.005

Analysing differences in volatile organic compounds between purple-brown and yellow-brown Ziziphi Spinosae Semen based on HS-GC-IMS technology*

DUAN Xiao¹, KANG Bingtao¹, ZHAO Fan¹, YAN Yonggang², ZHANG Gang², PENG Liang^{2,3,*}

(1. The Fifth Hospital of Yulin City, Yulin 719000, China; 2. School of Pharmacy, Shaanxi University of Chinese Medicine, Xi'an 712046, China; 3. State Key Laboratory of Dao-di Herbs, Beijing 100700, China)

Abstract Objective: To systematically compare the types and contents of volatile organic compounds (VOCs) in purplish-brown and yellow-brown Ziziphi Spinosae Semen, and to provide a scientific basis for their rapid identification and quality evaluation. **Methods:** Headspace-gas chromatography-ion mobility spectrometry (HS-GC-IMS) was employed to determine the VOCs in two colored samples. GC-IMS spectra and fingerprint profiles were established, and chemometric methods including principal component analysis (PCA) and partial least squares-discriminant analysis (PLS-DA) were applied to visualize the differences in volatile components. **Results:** A total of 44 VOCs were identified, including 1 aldehyde, 9 esters, 10 ketones, 2 enals, 14 alcohols, 3 acids, 2 furans, 1 di-

* **基金项目:** 中央本级重大增减支项目 (2060302); 陕西省中医药管理局中医药全省性专款专项项目 (2021-QYZL-02); 陕西省中医药管理局中医药科技创新计划 (2025-CXTD-01); 榆林市科技局项目 (YF-2021-73); 陕西中医药大学“秦药”品质评价及资源开发学科创新团队项目 (2019-QN01)

第一作者简介: 段道, 主管药师; 研究方向: 药品质量评价。E-mail: 876090749@qq.com

** **通信作者简介:** 彭亮, 博士, 教授, 硕士生导师; 研究方向: 中药资源评价与利用, 分子生药学。E-mail: ppengliang@126.com

sulfide, and 2 hydrocarbons. Alcohols and esters were the main volatile components. The fingerprint profiles showed high consistency within groups but significant differences between groups. Both PCA and PLS-DA effectively distinguished the two sample types. Compounds such as pentanol, methyl butyrate, 2-ethylfuran, 2-hexanol, and 2-methylpropanal were identified as key markers for differentiation. **Conclusion:** HS-GC-IMS combined with chemometrics accurately distinguishes the volatile compounds of Ziziphi Spinosae Semen with different colors. This method is rapid, sensitive, and suitable for quality control and rapid authentication of Ziziphi Spinosae Semen.

Key words: Ziziphi Spinosae Semen; headspace-gas chromatography-ion mobility spectrometry; volatile organic compounds; chemometrics

酸枣仁为鼠李科植物酸枣(*Ziziphus jujuba* Mill. var. *spinosa* (Bunge) Hu ex H. F. Chou)的干燥成熟种子,始载于《神农本草经》^[1],自1963年起被《中国药典》收载,此后历版药典均有收录。现代研究表明,酸枣仁主要含有黄酮类、皂苷及三萜类、生物碱类、脂肪油(以不饱和脂肪酸为主)、甾体类等化学成分,其中皂苷类和黄酮类被视为其特征性成分^[2]。该药材的粗提物及单体化合物均表现出显著的生物活性,临床上常用于治疗虚烦不眠、惊悸多梦、体虚多汗及津伤口渴^[3]等症,是中医治疗失眠的首选药物之一^[4,5]。唐代《新修本草》已有记载:“本经用实疗不得眠,不言用仁,今方皆用仁,补中益肝,坚筋骨,助阳气,皆酸枣仁之功”。酸枣仁主产于辽宁、内蒙古、河北、山东、山西、河南、陕西、甘肃、宁夏、新疆、江苏及安徽等地,多生长于向阳干燥的山坡、丘陵、岗地或平原^[6],并于2002年被卫生部列为首批药食同源中药材,具有较高的药用与市场价值,广泛应用于中成药及保健食品中^[7]。

近年来,多项研究致力于酸枣仁挥发油的提取与功效探索,发现其挥发油具有镇静催眠、降血脂及抗惊厥等药理作用^[8,9]。因此,建立快速、高效的挥发油提取与分析方法,并构建相应的指纹图谱,对酸枣仁的质量控制和产品开发具有重要意义。然而,传统挥发油提取方法普遍存在操作繁琐、样品用量大、耗时较长等问题。顶空-气相色谱-离子迁移谱(HS-GC-IMS)技术将气相色谱的高分离能力与离子迁移谱的高灵敏度相结合,适用于挥发性芳香化合物的快速分离与检测,目前已广泛应用于食品及中药品质评价领域^[10]。

酸枣仁外种皮通常呈紫红色或紫褐色^[11],但其颜色易受品种、生长环境(如土壤、光照和气候)以及加工与储存条件等因素影响,亦可见黄棕色变异类型^[12]。本研究采用HS-GC-IMS技术对紫褐色与黄棕色酸枣仁中的挥发性成分进行比较分析,旨在阐明不同色泽酸枣仁挥发性有机物的组成差异,为

其质量评价与功效物质研究提供依据。

1 仪器与试剂

1.1 仪器

FlavourSpec[®] 气相色谱-离子迁移谱联用仪(山东海能科学仪器有限公司);电热鼓风干燥箱(上海一恒科学仪器有限公司);XS-02型多功能高速粉碎机(上海兆申科技有限公司);FA2104型十万分之一电子分析天平(上海民桥精密科学仪器有限公司)。

1.2 试剂

紫褐色酸枣仁(SZ-ZH)和黄棕色酸枣仁(SZ-HZ)样品均于2024年10月采自陕西省榆林市的酸枣标准化种植基地,由陕西中医药大学杨新杰副教授鉴定,凭证标本保存在陕西省秦岭中药材应用开发工程中心(图1)。



图1 紫褐色(右)和黄棕色(左)酸枣仁样品

Fig. 1 Purplish Brown (Right) and Yellow-Brown (left) Ziziphi Spinosae Semen sample

2 方法

2.1 检测条件

气相-离子迁移谱单元:色谱柱为FS-SE-54-CB-0.5(15 m×0.53 mm,1 μm),分析时间20 min,柱温60℃,载气/漂移气N₂,IMS温度45℃。自动顶空进样单元:孵育温度80℃,孵育时间10 min,进样体积

1 mL, 进样针温度 85 °C, 孵育转速 500 r · min⁻¹。

气相色谱条件: E1 漂移气体积流量 0 ~ 20 min, 150 mL · min⁻¹; E2 气相载气体积流量 0 ~ 2 min, 2 mL · min⁻¹; 2 ~ 5 min, 5 mL · min⁻¹; 5 ~ 10 min, 15 mL · min⁻¹; 10 ~ 15 min 50 mL · min⁻¹, 15 ~ 20 min, 100 mL · min⁻¹。

2.2 样品制备

黄棕色和紫褐色酸枣仁样品于电热鼓风干燥箱内 40 °C 烘干 8 h (水分 < 11%), 取出, 放凉后粉碎, 过 5 号筛, 待用。称取两种不同色泽的酸枣仁干燥粉末各 3 g 置于 20 mL 顶空瓶中, 70 °C 孵育 10 min 后按方法“2.1”项下进样测定。

2.3 数据分析

每种酸枣仁样品均为 5 次重复, 利用仪器自带的 VOCal 软件、NIST 和 IMS 数据库完成分析谱图、定性和定量分析, 通过 Reporter 插件、Gallery Plot

插件和 Dynamic PCA 插件实现谱图差异、指纹图谱对比等进行, 基于 SMICA 14.0 软件和可视化多变量数据聚类的网络工具 (<https://www.metaboanalyst.ca/MetaboAnalyst/docs/>) 开展 PCA、PLS-DA 和可视化分析。

3 结果与分析

3.1 气相离子迁移谱分析

利用 HS-GC-IMS 分析了紫褐色和黄棕色酸枣仁中的挥发性有机物。图 1 是由仪器生成的数据三维谱图, 其中 X 轴代表离子迁移时间, Y 轴代表气相色谱保留时间, Z 轴代表用于定量的峰强度, 从图中可以看出两种酸枣仁样品中挥发性有机物的类型相似, 但在峰位、数量以及信号强度略有不同, 表明二者挥发性有机物存在一定差异。但三维谱图相对粗糙, 难以进行有效数据分析。

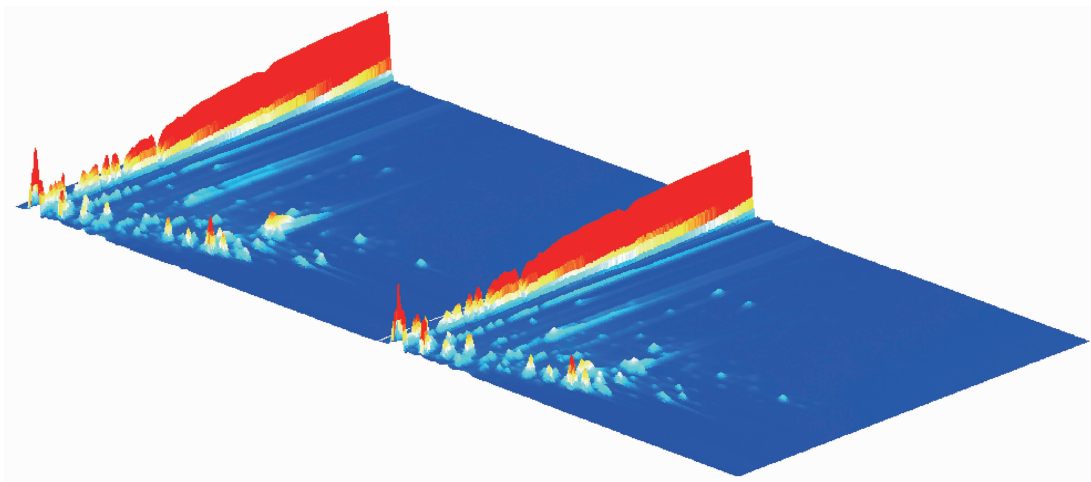


图 2 酸枣仁中挥发性有机物的 HS-GC-IMS 三维谱图

Fig. 2 HS-GC-IMS three-dimensional diagram

对离子迁移时间和反应离子峰 (RIP) 进行归一化处理后获得紫褐色酸枣仁和黄棕色酸枣仁挥发性有机物的 GC-IMS 谱图 (图 3)。其中, 横坐标代表离子迁移时间, 纵坐标代表气相色谱的保留时间 (s), RIP 峰两侧的每一个点代表一种挥发性有机物, 颜色代表物质的浓度, 白色表示浓度较低, 红色表示浓度较高, 颜色越深则浓度越大。结果发现, 大部分信号出现在 100 ~ 500 s 的保留时间和 1 ~ 12 ms 的漂移时间内, 说明紫褐色和黄棕色酸枣仁的挥发性成分相似。

进一步采用差异对比模式分析紫褐色和黄棕色酸枣仁中挥发性有机物的差异, 选取其中一个样品的谱图作为参比, 其他样品的谱图扣减参比。如果

二者挥发性有机物一致, 则扣减后的背景为白色, 而红色代表该物质的浓度高于参比, 蓝色代表该物质的浓度低于参比。由图 4 可以明显地看出, 紫褐色和黄棕色酸枣仁样品中的挥发性有机物存在明显差异。

3.2 挥发性成分的鉴定

基于气相离子迁移谱分析, 从紫褐色和黄棕色酸枣仁中均检测出 44 种挥发性有机物, 包括 1 种醛、9 种酯、10 种酮、2 种烯醛、14 种醇、3 种酸、2 种呋喃类化合物、1 种二硫化物、2 种烃类化合物 (表 1)。总体而言, 鉴定所得的 44 种挥发性有机物可大致分为 9 类, 其中醇和酯是酸枣仁中两种主要的挥发性有机物。

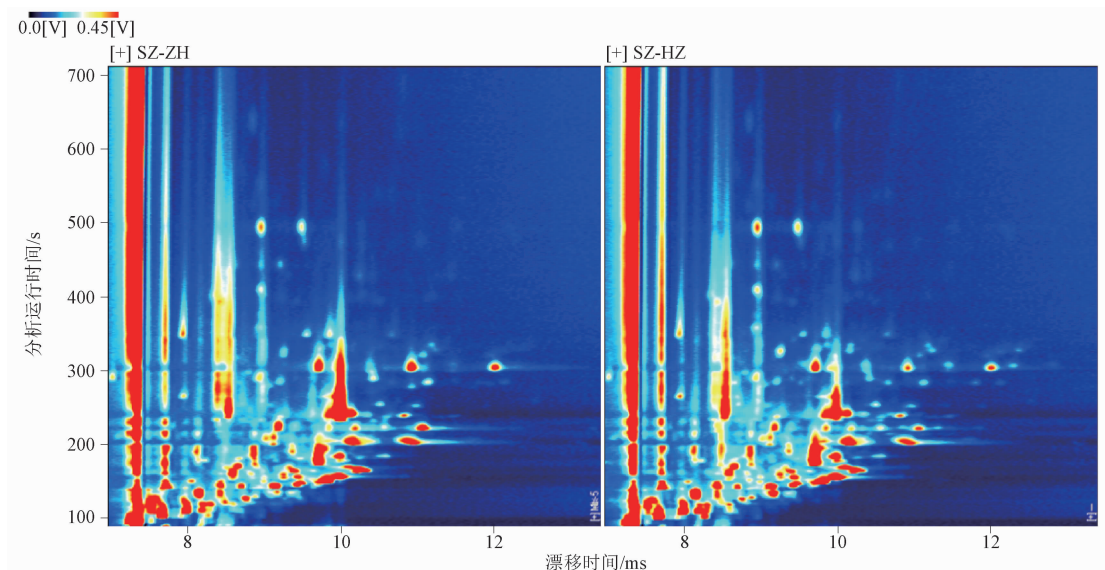


图3 紫褐色和黄棕色酸枣仁挥发性有机物的 HS-GC-IMS 谱图(直接对比)

Fig. 3 HS-GC-IMS spectra of volatile organic compounds in purplish brown and yellow-brown Ziziphi Spinosae Semen (direct comparison)

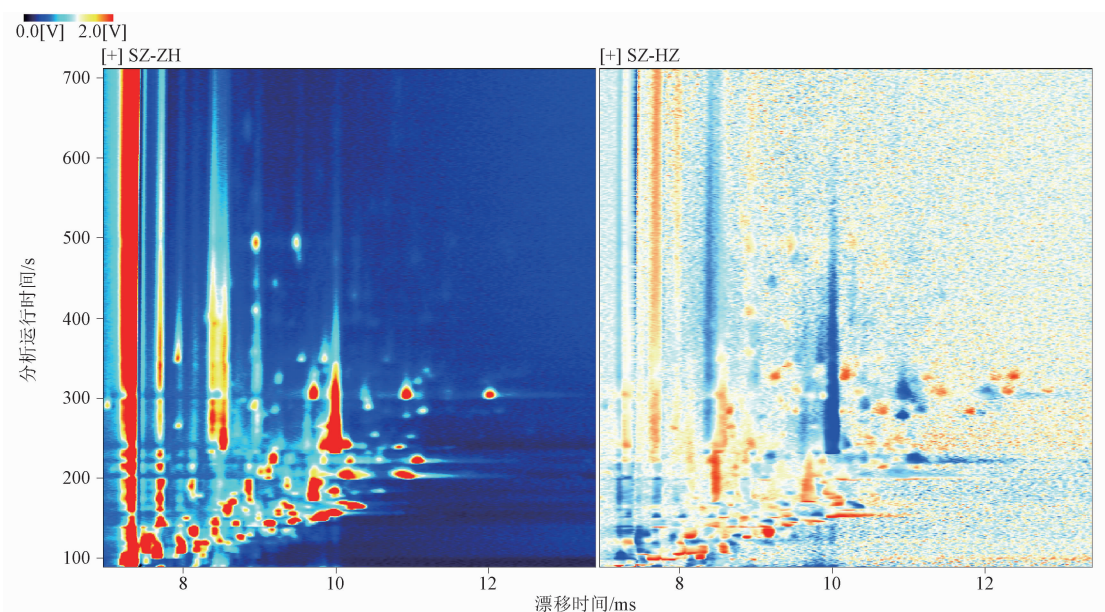


图4 紫褐色和黄棕色酸枣仁挥发性有机物的 HS-GC-IMS 谱图(差异对比)

Fig. 4 HS-GC-IMS spectra of volatile organic compounds in purplish brown and yellow-brown Ziziphi Spinosae Semen (difference comparison)

3.3 紫褐色和黄棕色酸枣仁挥发性有机物的指纹图谱

为了进一步比较紫褐色和黄棕色酸枣仁样品中挥发性有机物的差异性,进行了指纹图谱鉴定分析,见图5。样本从上到下依次为紫褐色酸枣仁 1-5 和黄棕色酸枣仁 1-5 中所有挥发性有机物的信号峰,每一列表示同一挥发性有机物在不同样品中的信号峰。斑点的颜色反映了信号的强度,随着含量的增

加,斑点颜色由蓝色变为红色。对比发现,两组样品的指纹图谱整体轮廓类似,各组内 5 个重复样本间的相对含量基本一致,但组间相对含量存在一定差异。紫褐色酸枣仁样品中挥发性有机物戊醇、丁酸甲酯、2-乙基呋喃的浓度高于黄棕色酸枣仁;黄棕色酸枣仁中挥发性有机物 2-己醇、2-甲基丙烯酸酯化合物的含量相对较高。因此,上述含量较高的挥发性有机物可作为区别两种不同颜色酸枣仁的特征性成分。

表1 紫褐色和黄棕色酸枣仁中挥发性成分鉴别

Tab. 1 Identification of volatile compounds in purplish brown and yellow-brown Ziziphi Spinosae Semen

序号	化合物	CAS号	分子式	相对分子质量	保留指数	保留时间/s	迁移时间/ms
1	gamma-butyrolactone	C96480	C ₄ H ₆ O ₂	86.1	924.7	483.264	1.302 02
2	2-Methyl-3-furanthiol	28588-74-1	C ₅ H ₆ OS	114.2	865.5	387.331	1.146 87
3	3-Heptanone	C106354	C ₇ H ₁₄ O	114.2	880.5	409.671	1.225 31
4	(E)-2-Pentenal	C1576870	C ₅ H ₈ O	84.1	746.2	249.344	1.368 26
5	Hexanal	C66251	C ₆ H ₁₂ O	100.2	817.6	324.251	1.267 15
6	cyclopentanone	C120923	C ₅ H ₈ O	84.1	801.5	305.563	1.329 19
7	2-methyltetrahydrofuran-3-one	C3188009	C ₅ H ₈ O ₂	100.1	786	288.54	1.427 18
8	2-Hexanol	C626937	C ₆ H ₁₄ O	102.2	804.5	308.967	1.566 97
9	Pentyl formate	C638493	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.2	815.5	321.735	1.640 46
10	Isopentyl formate	C110452	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.2	799.3	303.009	1.649 11
11	Dimethyl disulfide	C624920	C ₂ H ₆ S ₂	94.2	768.6	270.665	1.144 73
12	3-Methyl-3-buten-1-ol	C763326	C ₅ H ₁₀ O	86.1	754.5	257.047	1.164 9
13	pentan-1-ol	C71410	C ₅ H ₁₂ O	88.1	749	251.94	1.503 56
14	pentan-2-ol	C6032297	C ₅ H ₁₂ O	88.1	716.6	223.851	1.444 48
15	Butyl formate	C592847	C ₅ H ₁₀ O ₂	102.1	714.5	222.149	1.510 77
16	Propanoic acid	C79094	C ₃ H ₆ O ₂	74.1	714.5	222.149	1.255 69
17	ethyl acrylate	C140885	C ₅ H ₈ O ₂	100.1	694.8	206.828	1.402 68
18	3-Methyl-2-butanol	C598754	C ₅ H ₁₂ O	88.1	702.1	212.336	1.246 96
19	2,3-Pentadione	C600146	C ₅ H ₈ O ₂	100.1	665.3	185.969	1.209 2
20	n-propyl acetate	C109604	C ₅ H ₁₀ O ₂	102.1	690.4	203.547	1.493 99
21	pent-1-en-3-ol	C616251	C ₅ H ₁₀ O	86.1	675.5	192.908	1.334 33
22	1-Butanol	C71363	C ₄ H ₁₀ O	74.1	658.3	181.344	1.368 86
23	1-Propanol, 2-methyl-	C78831	C ₄ H ₁₀ O	74.1	628.9	163.303	1.175 76
24	methyl propanoate	C554121	C ₄ H ₈ O ₂	88.1	629.7	163.766	1.319 23
25	acetic acid ethyl ester	C141786	C ₄ H ₈ O ₂	88.1	604.7	149.888	1.336 49
26	1-Propanethiol	C107039	C ₃ H ₈ S	76.2	616.7	156.364	1.365 62
27	2-Butanone	C78933	C ₄ H ₈ O	72.1	590.4	142.487	1.248 03
28	3-Butenenitrile	C109751	C ₄ H ₅ N	67.1	652.5	177.643	1.123 98
29	2-Butanol	C78922	C ₄ H ₁₀ O	74.1	593.1	143.875	1.148 79
30	Methyl acetate	C79209	C ₃ H ₆ O ₂	74.1	553.2	125.177	1.199 46
31	2-Propanethiol	C75332	C ₃ H ₈ S	76.2	565.2	130.484	1.149 7
32	1-Propanol	C71238	C ₃ H ₈ O	60.1	572.1	133.669	1.115 71
33	Butanal	C123728	C ₄ H ₈ O	72.1	603.2	149.062	1.101 14
34	2-Propanone	C67641	C ₃ H ₆ O	58.1	513.6	109.232	1.119
35	ethanol	C64175	C ₂ H ₆ O	46.1	492.8	101.811	1.130 21
36	2-Propanol	C67630	C ₃ H ₈ O	60.1	518.5	111.088	1.088 35
37	Acetic acid	C64197	C ₂ H ₄ O ₂	60.1	601.1	147.961	1.053 56
38	3-Hepten-2-one	C1119444	C ₇ H ₁₂ O	112.2	931.3	495.357	1.222 36
39	Methyl isobutyl ketone	C108101	C ₆ H ₁₂ O	100.2	737.1	241.202	1.483 44
40	3-Penten-2-one	C625332	C ₅ H ₈ O	84.1	716.8	223.979	1.348 2
41	2,3-pentanedione	C600146	C ₅ H ₈ O ₂	100.1	708	216.905	1.212 97
42	Propanoic acid	C79094	C ₃ H ₆ O ₂	74.1	708.3	217.213	1.110 93
43	2-ethyl furan	C3208160	C ₆ H ₈ O	96.1	709	217.724	1.052 73
44	2-Methyl-2-propenal	C78853	C ₄ H ₆ O	70.1	565.3	130.564	1.213 35

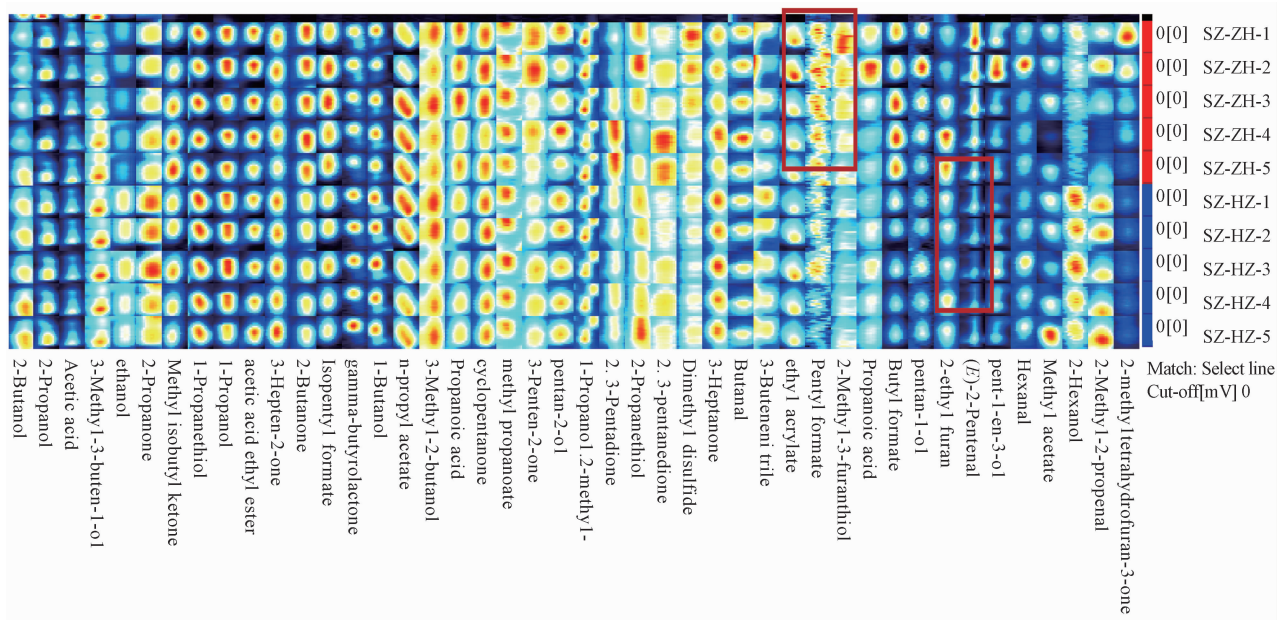


图5 SZ-ZH 和 SZ-HZ 中挥发性有机物的指纹图谱比较

Fig. 5 Comparison of fingerprints of volatile compounds of purplish brown and yellow-brown Ziziphi Spinosae Semen

3.4 主成分分析

主成分分析(PCA)是目前一种常用的数据分析方法,旨在将多个相关变量转化为少数几个不相关的综合变量,即主成分。此类主成分能够尽可能多地保留原始变量的信息。通过对原始数据的协方差矩阵或相关矩阵进行特征分解,得到特征值和特征向量。特征值表示主成分的方差大小,特征向量则确定了主

成分与原始变量之间的线性组合关系,便于数据的可视化和进一步分析^[13]。基于 SIMCAP19.0 软件对两种样品中 44 种挥发性有机物的峰体积结果进行了 PCA 导入分析,紫褐色和黄棕色酸枣仁在 PC1 上显示出较好的分离趋势,对 PC1 影响最大的化合物为 3-hepten-2-one、methyl isobutyl ketone、3-methyl-3-buten-1-ol、2-propanethiol 和 2,3-pentadione。

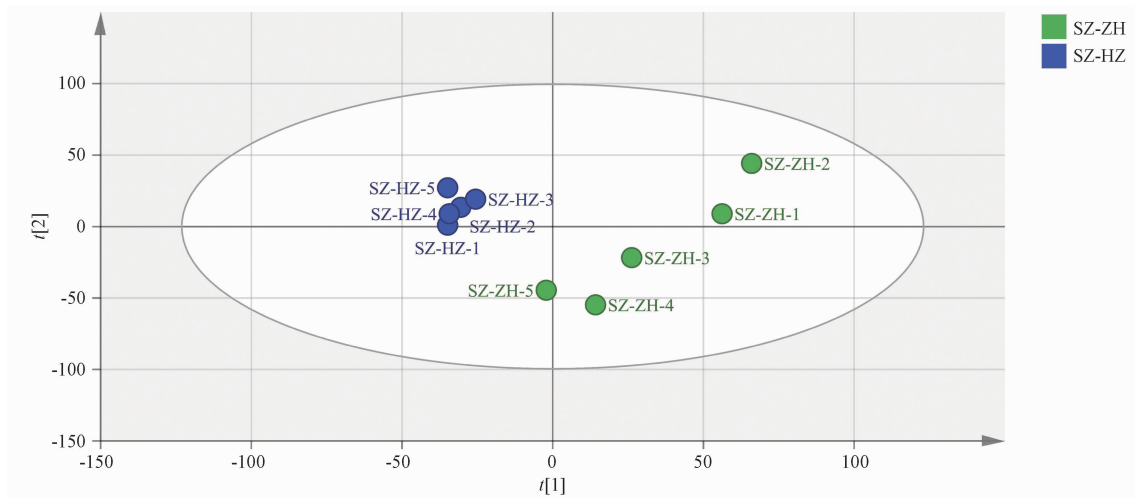


图6 紫褐色和黄棕色酸枣仁挥发性有机物 PCA 分析

Fig. 6 PCA analysis of volatile components of purplish brown and yellow-brown Ziziphi Spinosae Semen

3.5 偏最小二乘法判别分析

偏最小二乘法判别分析(PLS-DA)是一种监督统计方法,能够解释样本类别之间的差异以及与

响应变量之间的关系。为进一步区分两种典型色泽酸枣仁挥发性有机物的差异性,以上述样品中 44 个挥发性成分对应的强度为变量,采用 SIMCA

软件进行分析后得到 PLS-DA 评分图(图 7)。结果表明,PLS-DA 模型具有良好的预测能力和稳定性($Q^2 = 0.63 > 0.5$)。紫褐色和黄棕色酸枣仁在代谢物组成上存在显著差异。

变量权重值(variable important in projection, VIP)是样品中每种挥发性化合物对样品的差异性

影响程度大小的量化指标,VIP 值越大,则表明差异越显著。

通过对获得的酸枣仁挥发性化合物进行筛选排序,发现有乙酸、环戊酮、丁醇等 11 种 VIP >1 的挥发性化合物(图 8)。因此,以上 11 个成分可作为识别和区分两种典型色泽酸枣仁的关键标志物。

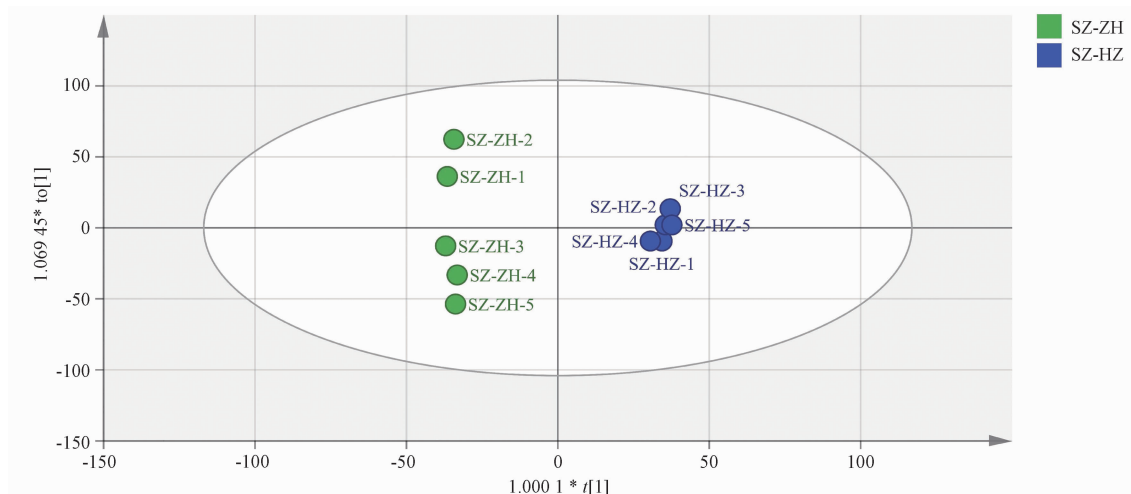


图 7 紫褐色和黄棕色酸枣仁挥发性有机物 PLS-DA 分析图

Fig. 7 PLS-DA analysis of volatile components of purplish brown and yellow-brown Ziziphi Spinosae Semen

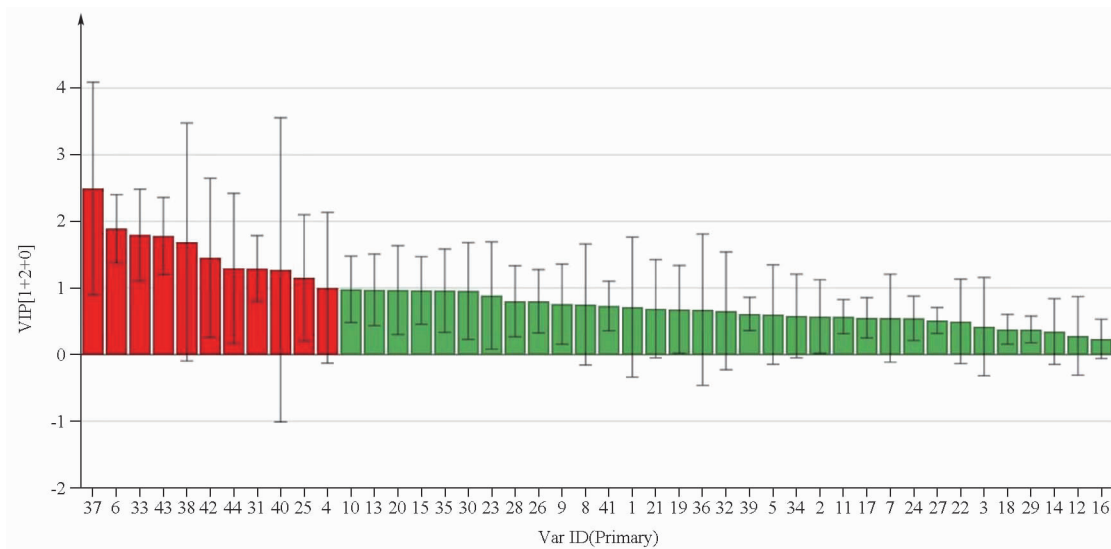


图 8 紫褐色和黄棕色酸枣仁挥发性有机物 VIP 值(ID 对应表 1)

Fig. 8 VIP values of volatile organic compounds in purplish-brown and yellow-brown Ziziphi Spinosae Semen (compound IDs correspond to Tab. 1)

3.6 两种不同色泽酸枣仁的聚类热图分析

为进一步筛选出区分和鉴别两种典型色泽酸枣仁的特征性化合物,采用可视化多变量数据聚类的网络平台对二者进行两个维度的 HCA 可视化(图 9)。横坐标示意两组不同样品,纵坐标表示挥发性

成分。其中,红色表示相对含量显著上调,绿色表示显著下调。结果显示,紫褐色酸枣仁中(*E*)-2-pentenal、2-methyl-3-furanthiol、dimethyl disulfide 等化合物的含量显著高于黄棕色酸枣仁;黄棕色酸枣仁中 2-butanol、ethanol、2-hexanol 等化合物的含量则显著

高于紫褐色酸枣仁。

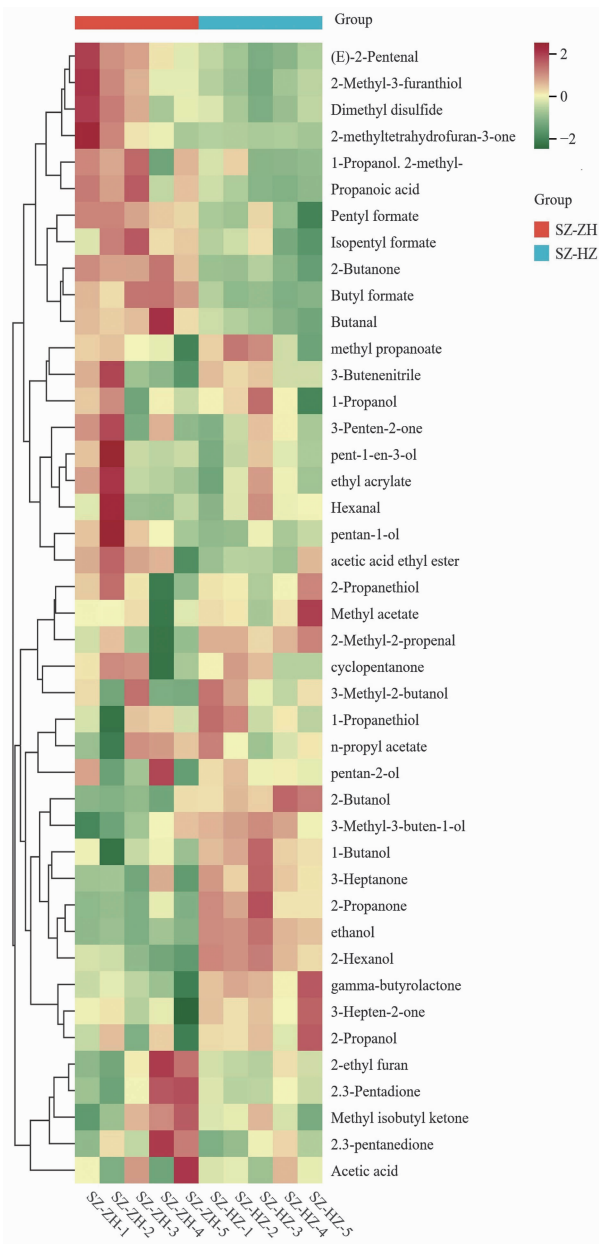


图9 紫褐色和黄棕色酸枣仁挥发性有机物聚类热图分析
Fig. 9 Cluster heatmap analysis of volatile organic compounds in purplish-brown and yellow-brown Ziziphi Spinosae Semen, respectively

4 讨论

酸枣仁素有“东方睡果”之称,具有养肝、宁心、安神、敛汗等功效,临床常用于镇静催眠、抗惊厥、抗心律失常及降血压等^[14,15]。研究表明,酸枣仁挥发性有机物(VOCs)亦具备一定生物活性。酸枣仁种皮颜色易受生长环境、光照、土壤条件、加工与储存方式等多种因素影响,常见紫褐色与黄棕色两种类

型,其 VOCs 组成与含量可能存在差异。本研究采用顶空-气相色谱-离子迁移谱(HS-GC-IMS)技术,对上述两种典型色泽酸枣仁的 VOCs 进行系统比较,以明确其组成差异,为后续相关研究提供理论依据。HS-GC-IMS 技术具有高灵敏度、高分辨率、分析速度快、无需复杂前处理等优点,近年来已被广泛用于食品及中药质量评价,显示出良好的应用潜力^[16]。

HS-GC-IMS 图谱分析结果表明,紫褐色和黄棕色酸枣仁的 VOCs 种类总体相似,但在出峰位置、数量及信号强度方面存在一定差异,提示 VOCs 组成可能受到品种、生长环境与加工储存条件的综合影响。有研究指出,土壤肥力与光照时长的差异可影响植物次生代谢途径,进而引起挥发性成分变化^[17]。这一发现为酸枣仁的质量控制及产地溯源提供了依据,今后可进一步开展环境因子与 VOCs 积累之间的定量关联研究。在挥发性成分鉴定方面,本研究共检出 44 种 VOCs,分属 9 类化合物,以醇类和酯类为主。这些成分不仅赋予酸枣仁特殊气味^[18],也可能参与其药用效应的发挥。因此,本研究从 VOCs 角度为酸枣仁功效物质基础的阐释提供了化学依据。后续可重点关注关键挥发性成分的药理活性,通过体内外实验验证其在镇静、安神等效应中的贡献及作用机制。

指纹图谱分析显示,两组样品指纹图谱整体轮廓相似,但组间相对含量存在差异,确定了戊醇、丁酸甲酯等特征性差异成分,说明 HS-GC-IMS 技术在区分不同颜色酸枣仁方面具有可靠性,且特征性成分可作为潜在的质量标志物,用于酸枣仁的质量评价。未来可扩大样本量,涵盖更多产地和批次的酸枣仁,验证该类特征性成分的稳定性,并建立更完善的质量评价体系。PCA 和 PLS-DA 均能有效区分酸枣仁的不同色泽,反映出不同样品间挥发性有机物的明显差异,为酸枣仁的分类和鉴别提供了一种高效的数据处理方法,后续可结合其他分析技术,全面深入地研究酸枣仁的化学成分,构建更精准的质量控制模型。

本研究初步揭示两种颜色酸枣仁 VOCs 的差异,但仍存在一定局限。样本仅涉及两种色泽类型,后续可扩展至不同产地、不同采收期的样品,更全面把握 VOCs 变异规律。此外,VOCs 与酸枣仁药效之间的直接关联尚未深入挖掘,未来需结合药理实验,探讨关键挥发性成分的生物活性,为酸枣仁的质量评价及产品开发提供更坚实的科学依据。

参考文献

- [1] 孙星衍, 孙冯翼. 神农本草经[M]. 南宁: 广西科学技术出版社, 2016: 49.
- [2] WANG D, HO C T, BAI N. *Ziziphi Spinosae Semen*: An updated review on pharmacological activity, quality control, and application[J]. *J Food Biochem*, 2022, 46(7): e14153.
- [3] 中国药典 2020 年版. 一部[S]. 2020: 283.
- [4] ZHANG Y, QIAO L, SONG M, et al. Hplc-ESI-MS/MS analysis of the water-soluble extract from *Ziziphi spinosae* semen and its ameliorating effect of learning and memory performance in mice [J]. *Pharmacogn Mag*, 2014, 10(40): 509.
- [5] HUA Y, GUO S, XIE H, et al. *Ziziphus jujuba* Mill. var. *spinosa* (Bunge) Hu ex H. F. Chou seed ameliorates insomnia in rats by regulating metabolomics and intestinal flora composition [J]. *Front Pharmacol*, 2021, 12: 653767.
- [6] 曲彤, 耿飞飞, 李宁, 等. 酸枣仁的化学成分、药理作用和临床应用研究进展[J]. *药学前沿*, 2024, 28(9): 98.
- [7] 曾凡正, 方伟, 周小叶, 等. 酸枣仁药理活性及其在保健食品中的应用研究进展[J]. *食品研究与开发*, 2025, 46(4): 208.
- [8] 贾颖, 郭亚菲, 孙胜杰, 等. 超临界 CO₂ 萃取生酸枣仁挥发油的镇静催眠作用研究[J]. *中华中医药杂志*, 2018, 33(9): 4181.
- [9] 李宝莉, 夏传涛, 袁秉祥. 不同提取工艺的酸枣仁油对小鼠镇静催眠作用的影响[J]. *西安交通大学学报(医学版)*, 2008, 29(2): 227.
- [10] WANG S Q, CHEN H T, SUN B G. Recent progress in food flavor analysis using gas chromatography-ion mobility spectrometry (GC-IMS)[J]. *Food Chem*, 2020, 315: 126158.
- [11] 张艳慧, 张明童, 刘丽丽, 等. 酸枣仁与理枣仁鉴别方法研究[J]. *中国药业*, 2024, 33(1): 68.
- [12] 杨馥源. 采收期对酸枣仁品质影响研究[D]. 太原: 山西大学, 2021.
- [13] YAO L, GUO S, WANG H, et al. Volatile fingerprints of different parts of *Chongming saffron* (*Crocus sativus*) flowers by head-space-gas chromatography-ion mobility spectrometry and *in vitro* bioactive properties of the saffron tepals[J]. *J Food Sci*, 2022, 87(10): 4491.
- [14] 黄娟, 邵笑笑, 张慧. 酸枣仁治疗卒中后失眠药理机制及研究进展[J]. *辽宁中医药大学学报*, 2024, 26(2): 176.
- [15] 李国龙, 陈佳昕, 史鑫波, 等. 酸枣仁油的脂质组成与功能特性初步分析[J]. *中国粮油学报*, 2024, 39(6): 141.
- [16] FAN X J, JIAO X, LIU J G, et al. Characterizing the volatile compounds of different *Sorghum cultivars* by both GC-MS and HS-GC-IMS[J]. *Food Res Int*, 2021, 140: 109975.
- [17] 毛怡宁. 不同产地酸枣仁化学成分差异性研究及抗氧化活性比较[D]. 北京: 北京中医药大学, 2020.
- [18] 李乳姝, 侯力天, 李若晗, 等. 桑葚酒生物活性成分及香气品质研究进展[J]. *食品工业科技*, 2024, 45(7): 328.

(收稿日期:2025-09-01)