

# 利用化学计量学和 Agilent 5975 GC/MSD 对洋甘菊花及其精油和商品进行类别鉴定

## 应用简报

食品检测与农业

### 作者

Mei Wang, Bharathi Avula,  
Yan-Hong Wang, Jianping Zhao, Amar  
G. Chittiboyina, Cristina Avonto, Jon F.  
Parcher, Vijayasankar Raman 和 Ikhlas  
A. Khan

国家天然产物研究中心,  
密西西比大学  
大学, 密西西比州  
美国

Jerry A. Zweigenbaum 和  
Philip L. Wylie  
安捷伦科技有限公司  
特拉华州威尔明顿  
美国

### 摘要

本文中, 开发出了一种高精度统计学模型用于确定商品草药生产中所使用的洋甘菊的确切类型。该模型是根据 Agilent 7890 GC 和 Agilent 5975 GC/MSD 系统得到的精确 GC/MS 数据而开发。样品的质量控制采用主成分分析法 (PCA), 而样品类别预测模型的建立是基于偏最小二乘判别分析法 (PLS-DA)。该模型具有 100% 的识别和预测准确性。此外还通过基于 PLS-DA 的模型对据称含有洋甘菊的 35 种商品和 11 种精油进行了后续预测。



**Agilent Technologies**

## 前言

洋甘菊作为在全世界广泛使用的药用植物之一，具有缓解睡眠障碍、痢疾、疝气、伤口疼痛、黏膜炎和湿疹的功效 [1,2]。洋甘菊的其他药物属性还包括抗过敏、抗菌、抗炎和抗痉挛等 [3]。然而，也有报道称洋甘菊会引发过敏反应，包括皮疹、咽喉肿胀、呼吸短促和过敏症。

遗憾的是，目前并没有一种普遍接受的洋甘菊表征方法，因而对于含有这种性状不明确的天然产物的草药来说，确定和控制它们的质量、安全性和功效会变得相当困难。实际上，推广草药洋甘菊产品最大的障碍之一是产品掺假。

本文介绍了新近发表的一篇研究 [4]，该研究涉及商品中最常见的三类洋甘菊的化学组成：德国洋甘菊 (*Matricaria chamomilla* L. syn: *M. recutita* L.); 罗马洋甘菊 (*Chamaemelum nobile* (L.) All. syn: *Anthemis nobilis* L.) 和菊花 (*Chrysanthemum morifolium* Ramat.)。我们开发出了一种气相色谱/质谱 (GC/MS) 方法，并利用该方法将收集的洋甘菊样品（包括已验证的植物及其商品和精油）就其易挥发、非极性的化合物进行非目标分析。

该方法通过 Agilent 7890 GC 和 Agilent 5975 GC/MSD 系统采集数据。通过使用自动数据处理程序和采用不同标准的数据筛选工具实现控制输入变量、校准保留时间和简缩数据。PLS-DA 法用于建立对目标样品进行分类和辨别的模型。该模型用于评估声称含有洋甘菊的商品。同时也用于鉴定与每类洋甘菊相关的主要标志化合物。

## 实验部分

### 样品

本文所研究的样品包括 27 种已验证的植物、35 种固体商品和 11 种精油。所有样品的标本都保存于美国密西西比大学国家天然产物研究中心 (NCNPR) 的植物药材贮藏室（并具有 NCNPR 登记号）[4]。

### 试剂和标样

化学品和标样按所描述方式获得和使用 [4]。

### 仪器

本研究采用配备 Agilent 7693A 自动液体进样器的 Agilent 7890 气相色谱仪，并与 Agilent 5975 GC/MSD 系统联用。表 1 中列出了仪器条件。

表 1. 气相色谱和质谱条件

| 气相色谱条件   |  |
|----------|--|
| 预柱       | 无  |
| 分析柱      | Agilent J&W HP-5MS 30 m × 0.25 mm, 0.25 μm<br>5% 苯甲基硅氧烷 (部件号 19091S-133) |
| 进样口温度    | 250 °C   |
| 进样模式     | 分流比设置为 25:1  |
| 柱箱温控程序   | 45 °C 保持 2 分钟<br>以 1.5 °C/min 升至 100 °C<br>以 2 °C/min 升至 200 °C          |
| 色谱柱流速    | 1 mL/min, 恒流模式   |
| 载气       | 氦气   |
| 传输线温度    | 280 °C   |
| 气相色谱运行时间 | 90 min   |
| 质谱条件     |  |
| 电离模式     | EI 模式, 70 eV   |
| 离子源温度    | 230 °C   |
| 溶剂延迟时间   | 5 min  |
| 采集模式     | 全扫描 (40–550 amu)   |

## 样品前处理

固体样品经研磨并混匀，以获得均匀的基质。大约 1 g 的细粉末经准确称量后，分散在 4 mL 正己烷溶液中，超声处理 1 小时。在 GC/MS 分析之前采用 Millex GV (0.22 μm) 过滤器过滤上层清液。而对于精油样品，取 10 μL 样品溶于 1 mL 正己烷溶液中。然后将内标正十三烷 ( $n\text{-C}_{13}\text{H}_{28}$ ) 加入到每个样品溶液中，最终浓度为 90 μg/mL。

## 数据处理与统计分析

采用 Agilent MSD Productivity ChemStation 软件 (E.02.02) 采集 GC/MS 数据。同时使用 NIST 自动质谱解卷积和鉴定软件 (AMDIS) 提取 GC/MS 数据。把具有相同洗脱曲线和相似质谱数据的离子鉴定为实体 (Entity)，并以保留时间 ( $t_R$ )、峰强度和  $m/z$  进行表征。

将每个样品的 ELU 文件 (由 AMDIS 创建) 导入到 Mass Profiler Professional (MPP) 软件中，该软件包含了几种样品分类预测 (SCP) 算法。丰度最小设置为 5000 响应值 (Counts)，以用于选择 5-90 分钟保留时间窗口内的实体做进一步分析。0.15 分钟的保留时间窗口容差范围和谱型相似性被用来在整个样品组中进行实体的匹配。考虑到每个样品间丰度的差异，使用了内标物对峰强度进行归一化处理。

基于在样品中的存在性和参数值 (按标志筛选)、出现频率 (通过频率筛选)、不同种类中各自实体的丰度 (通过样品差异筛选) 和单因素方差分析 (ANOVA) 的结果，对实体进行逐级降维处理。PCA 用于样品数据的质量控制，并建立了基于 PLS-DA 的样品分类预测模型。

通过使用一系列在之前模型训练中使用的 12 种已验证植物样品和不包含在模型训练中的已知标签商品进行交叉验证流程来验证此模型。

## 结果与讨论

### 数据采集

由于事先没有定义目标分析物的具体分组，因此采用全扫描模式进行非目标分析来获取尽可能多的信息。采用 GC/MS 分析法检测到已验证洋甘菊植物样品中的大量化合物。虽然在给定类型洋甘菊植物样品中的组分浓度稍有一些变动，但是相同种类洋甘菊拥有一致的色谱图型。不同类型的洋甘菊具有显著不同的化学组分分布 (图 1)。

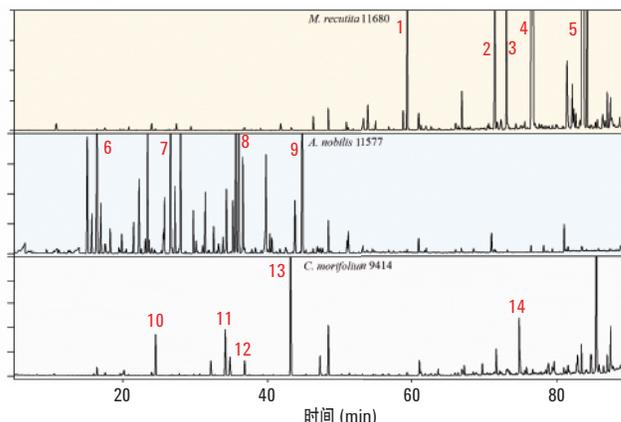


图 1. 德国洋甘菊 (上图)、罗马洋甘菊 (中图) 和菊花 (下图) 的典型色谱图。不同类型洋甘菊中鉴定出的主要化合物包括: (1) 金合欢烯; (2) 红没药醇氧化物 B; (3)  $\alpha$ -红没药醇; (4) 红没药醇氧化物 A; (5) 顺-烯炔双环醚; (6)  $\alpha$ -蒎烯; (7) 3-甲基-2-丁烯酸, 丁酯; (8) 3-甲基-2-丁烯酸, 3-甲基丁基乙酸酯; (9) 3-甲基-2-丁烯酸, 十六烷基酯; (10) 桉叶油素; (11) 三甲基环己醛; (12) 冰片; (13) 蒎烯乙酸酯; (14) 澳白檀醇

## 数据挖掘

MPP 软件对 2560 种实体进行了分析，强度阈值为 5000 响应值。采用逐级筛选程序对代表不同类型洋甘菊的最具特征性标志化合物进行鉴定，并在使用 PCA 和 PLS DA 方法前对数据作降维处理。本流程的第一步为“按标志筛选”。标志是用于标示一种样品中实体的品质，并指示每个样品中被检测的实体是“存在”或处于“临界”状态的属性。如果在所有样品中都有该实体，就无需进入分析。只有每个样品中独特的实体才会被保留作进一步分析。

第二步筛选中，在“通过频率筛选”的步骤中，需要实体在至少一个样品组（如所有的罗马洋甘菊样品组）中完全存在，否则将会被移除。第三步为“通过样品差异筛选”，此筛选基于实体的丰度变异系数 (CV) 小于 25%。

最后的筛选步骤会依据单因素方差分析计算出每个实体的  $p$  值，然后选择最具重现性的数据。 $p$  值截止值取 0.05 用于确保只有各个种类中的实体间差异具有 95% 的统计显著性才能认为通过。

尽管在实施筛选程序之前，初始的实体数为 2560，但是经过逐级筛选后，该数量降到 50。该筛选程序确保只有最具判别能力的实体才被用来建立预测模型。

## 化学计量学分析

PCA 是一种数学方法，在保留数据鉴别力的同时，能实现数据的降维。它使用一种非监督方法（无需使用条件或样品组）来发现样品间的差异、确定样品组的关联、衡量化合物对样品组区分的相对贡献。采用 PCA 后，主要成分 1 (PC1) 可以阐明数据 74% 的差异性，可以很好地区分罗马洋甘菊、德国洋甘菊和菊花这三种洋甘菊类型（图 2A）。其他 22% 的差异性可在 PC2 中找到，并进一步区分了德国洋甘菊和菊花。菊花样品在 PC3 中变化显著，

但是该主成分只影响总差异性的 1.5%。因此，PCA 作为一种质量控制工具，能通过图像化表示数据的聚类情况，并确定离群样本。通过筛选处理和 PCA 质量控制分析的这组数据随后用于创建样品预测模型。

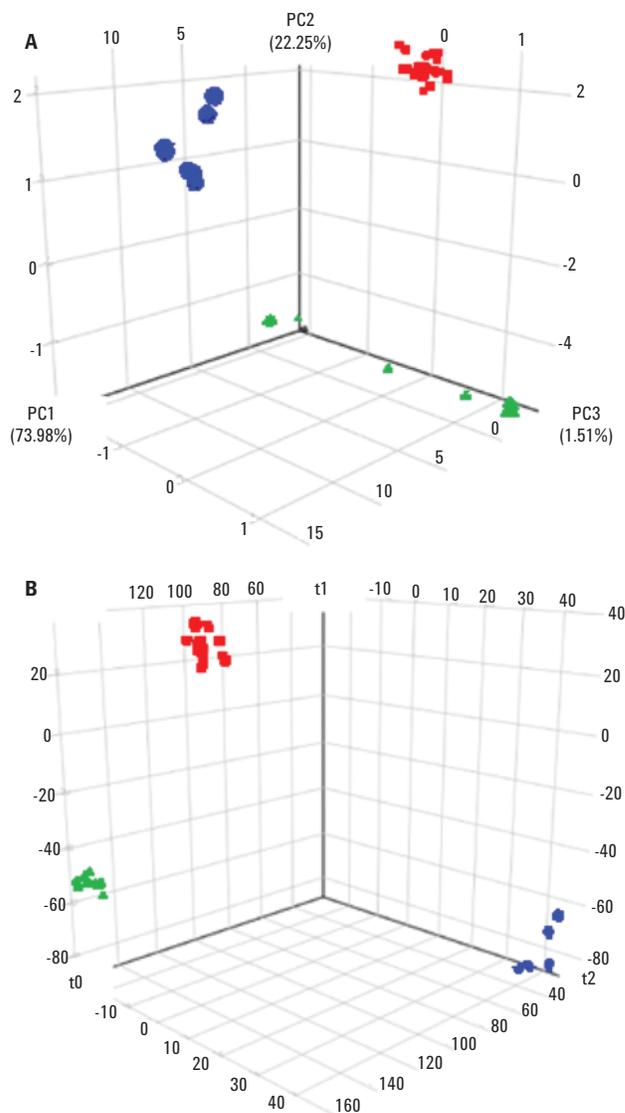


图 2. (■) 德国洋甘菊、(●) 罗马洋甘菊和 (▲) 菊花的得分图。(A) PCA 法；(B) PLS-DA 法

## 分类预测模型

为创建样品预测模型，开发了几种技术手段。MPP 软件提供了五种算法来建立样品预测模型：PLS-DA、支持向量机 (SVM)、朴素贝叶斯 (NB)、决策树 (DT) 和神经网络 (NN) 方法。PLS-DA 是一种成熟的基于回归的方法，特别适用于包含的样品数少于被测变量的情况。它常用于加大观测组之间的区别，最大程度区分不同的类别。在本研究中发现 PLS-DA 是建立洋甘菊分类和差异化统计学模型的最佳算法。

建立预测模型的第一步是使用已验证植物样品（包括 15 种德国洋甘菊、8 种菊花和 4 种罗马洋甘菊）的质谱数据训练此模型。使用六种用于模型训练的已验证样品以及六种未用于建立模型的商品对模型进行验证。尽管过程冗长，但它是合理的统计程序 (K 次交叉验证) [5]。

使用此模型进行样品分类的结果汇总在表 2 中。在模型训练和验证过程中，识别和预测能力分别用样品准确归类的百分值来表示。验证过程用于从五种算法生成的模型中选择最恰当的一种，训练和验证结果的差别可用来表明过度拟合。我们的结果表明在模型训练和验证过程中没有发生样品分类错误。三种类型的洋甘菊得到了很好的区分。

表 2. 洋甘菊分类模型训练和验证结果

|             | 德国洋甘菊 | 罗马洋甘菊 | 菊花 | 准确度 (%) |
|-------------|-------|-------|----|---------|
| <b>模型训练</b> |       |       |    |         |
| 德国洋甘菊       | 15    | 0     | 0  | 100.0   |
| 罗马洋甘菊       | 0     | 4     | 0  | 100.0   |
| 菊花          | 0     | 0     | 8  | 100.0   |
| 识别能力 (%)    | —     | —     | —  | 100.0   |
| <b>模型验证</b> |       |       |    |         |
| 德国洋甘菊       | 4     | 0     | 0  | 100.0   |
| 罗马洋甘菊       | 0     | 4     | 0  | 100.0   |
| 菊花          | 0     | 0     | 4  | 100.0   |
| 预测能力 (%)    | —     | —     | —  | 100.0   |

与 PCA 不同，图 2B 所示的 PLS-DA t 得分图经过监督，该图使用不同条件使模块与数据“相匹配”。t 得分图以图形化方式表现了每个组别中样品的分离情况。尽管 PCA 和 PLS-DA 的得分图看起来很相似，但是 PCA 揭示的是数据结构，而 PLS-DA 显示的是模型与数据的匹配情况。图 2B 显示出良好的分离（尽管菊花还聚集在一起），这表明模型如果不是过度拟合的话，它能够预测三种类型的洋甘菊。

## 洋甘菊样品的分类

使用经验证的 PLS-DA 模型，对 35 种固体样品和 11 种洋甘菊精油进行了分类和鉴别。固体样品包含洋甘菊花、提取物、茶叶、花和叶、含草本洋甘菊的膳食补充剂和水果茶。预测结果以“置信度”的方式表示（表 3）。置信度在大于 0.7 的范围内表明此样品属于此类洋甘菊类型的可能性很大，而置信度在 0.5-0.7 之间，表明样品分类可能有问题。置信度小于 0.5 则表明很可能存在误分类、误处理、掺假或样品含有杂质。所有置信度小于 0.6 的样品均进行了进一步调查。有几种精油样品归为由罗马洋甘菊制成，但是出人意料的是，没有一个固体商品样品经模型分类为含有罗马洋甘菊。

除了四种异常样品外（样品 2061、3998、9384 和 9425），模型预测出的结果同标签上的标识相一致。该结果表明，美国市场上主要使用的洋甘菊类型是德国洋甘菊，因为所有来自美国的标签不明的洋甘菊茶或提取物均被鉴定为德国洋甘菊。与此相反，所有从中国购买的洋甘菊样品均被鉴定为菊花。虽然精油通过水蒸汽蒸馏获得，而固体样品通过正己烷提取，但是 PLS-DA 模型对所有洋甘菊精油样品均显示出良好的预测结果（表 3）。

表 3. 采用 PLS-DA 样品分类预测模型对洋甘菊商品和精油的类型预测结果

| 编号                            | NCPR<br>登记号 | 标签上的产品信息                         | 预测结果  | 置信度  |
|-------------------------------|-------------|----------------------------------|-------|------|
| <b>固体商品样品购自食品市场、零售药房和在线商店</b> |             |                                  |       |      |
| 1                             | 2061        | 罗马洋甘菊                            | 德国洋甘菊 | 0.47 |
| 2                             | 3670        | 洋甘菊花                             | 德国洋甘菊 | 0.92 |
| 3                             | 3998        | 洋甘菊提取物                           | 德国洋甘菊 | 0.53 |
| 4                             | 4903        | 洋甘菊粉末                            | 德国洋甘菊 | 0.90 |
| 5                             | 5770        | 洋甘菊粉末                            | 德国洋甘菊 | 0.93 |
| 6                             | 7359        | 洋甘菊粉末                            | 德国洋甘菊 | 0.81 |
| 7                             | 9357        | 洋甘菊花                             | 德国洋甘菊 | 0.82 |
| 8                             | 9359        | 洋甘菊花                             | 德国洋甘菊 | 0.84 |
| 9                             | 9361        | 含有洋甘菊花和叶的膳食补充剂                   | 德国洋甘菊 | 0.76 |
| 10                            | 9362        | 洋甘菊花                             | 德国洋甘菊 | 0.84 |
| 11                            | 9364        | 洋甘菊花                             | 德国洋甘菊 | 0.92 |
| 12                            | 9365        | 散装德国洋甘菊花                         | 德国洋甘菊 | 0.65 |
| 13                            | 9367        | 洋甘菊花, 草本膳食补充剂                    | 德国洋甘菊 | 0.68 |
| 14                            | 9382        | 洋甘菊有机茶 (花和叶)                     | 德国洋甘菊 | 0.94 |
| 15                            | 9383        | 草本洋甘菊和水果茶 (玫瑰果、洋甘菊、桔皮、柠檬皮和柠檬香桃木) | 德国洋甘菊 | 0.72 |
| 16                            | 9384        | 洋甘菊草茶                            | 德国洋甘菊 | 0.58 |
| 17                            | 9385        | 有机茶                              | 德国洋甘菊 | 0.81 |
| 18                            | 9386        | 洋甘菊茶                             | 德国洋甘菊 | 0.75 |
| 19                            | 9387        | 洋甘菊草茶                            | 德国洋甘菊 | 0.91 |
| 20                            | 9388        | 洋甘菊草本膳食补充剂                       | 德国洋甘菊 | 0.89 |
| 21                            | 9389        | 洋甘菊草茶                            | 德国洋甘菊 | 0.61 |
| 22                            | 9390        | 洋甘菊草茶                            | 德国洋甘菊 | 0.92 |
| 23                            | 9391        | 洋甘菊草茶                            | 德国洋甘菊 | 0.77 |
| 24                            | 9393        | 德国全洋甘菊花                          | 德国洋甘菊 | 0.87 |
| 25                            | 9422        | 洋甘菊草本膳食补充剂                       | 菊花    | 0.80 |
| 26                            | 9423        | 洋甘菊草本膳食补充剂                       | 菊花    | 0.83 |
| 27                            | 9424        | 洋甘菊草本膳食补充剂                       | 菊花    | 0.84 |
| 28                            | 9425        | 洋甘菊草本膳食补充剂                       | 菊花    | 0.60 |
| 29                            | 9426        | 洋甘菊草本膳食补充剂                       | 菊花    | 0.86 |
| 30                            | 9427        | 洋甘菊草本膳食补充剂                       | 菊花    | 0.78 |
| 31                            | 9428        | 洋甘菊草本膳食补充剂                       | 菊花    | 0.82 |
| 32                            | 9429        | 洋甘菊草本膳食补充剂                       | 菊花    | 0.81 |
| 33                            | 9430        | 洋甘菊草本膳食补充剂                       | 菊花    | 0.77 |
| 34                            | 9431        | 洋甘菊草本膳食补充剂                       | 菊花    | 0.72 |
| 35                            | 9432        | 洋甘菊草本膳食补充剂                       | 菊花    | 0.99 |

下页续

表 3. 采用 PLS-DA 样品分类预测模块对洋甘菊商品和精油的类型预测结果 (续表)

| 编号                                  | NCPR 登记号 | 标签上的产品信息  | 预测结果  | 置信度  |
|-------------------------------------|----------|---|-------|------|
| 洋甘菊精油采用水蒸汽蒸馏法从植物样品中获得, 或通过不同的商业渠道购得 |          |   |       |      |
| 1                                   | 9254E    | 洋甘菊油 (罗马洋甘菊, <i>Anthemis nobilis</i> ), (9254) 植物的水蒸汽蒸馏             | 罗马洋甘菊 | 0.72 |
| 2                                   | 9359E    | 洋甘菊油 (德国洋甘菊, <i>Matricaria recutita</i> ), (9359) 植物的水蒸汽蒸馏          | 德国洋甘菊 | 0.76 |
| 3                                   | 9362E    | 洋甘菊油 (德国洋甘菊, <i>Matricaria recutita</i> ), (9362) 植物的水蒸汽蒸馏          | 德国洋甘菊 | 0.71 |
| 4                                   | 11577E   | 洋甘菊油 (罗马洋甘菊, <i>Anthemis nobilis</i> ), (11577) 植物的水蒸汽蒸馏            | 罗马洋甘菊 | 0.70 |
| 5                                   | 11680E   | 洋甘菊油 (德国洋甘菊, <i>Matricaria recutita</i> ), (11680) 植物的水蒸汽蒸馏 (11680) | 德国洋甘菊 | 0.77 |
| 6                                   | 11681E   | 洋甘菊油 (德国洋甘菊, <i>Matricaria recutita</i> ), (11681) 植物的水蒸汽蒸馏         | 德国洋甘菊 | 0.89 |
| 7                                   | 9368     | 洋甘菊精油 (罗马洋甘菊, <i>Anthemis nobilis</i> )                             | 罗马洋甘菊 | 0.70 |
| 8                                   | 9369     | 德国洋甘菊油  | 德国洋甘菊 | 0.91 |
| 9                                   | 9370     | 洋甘菊精油 (罗马洋甘菊, <i>Anthemis nobilis</i> )                             | 罗马洋甘菊 | 0.76 |
| 10                                  | 9380     | 洋甘菊精油 (罗马洋甘菊, <i>Chamaemelum nobilis</i> )                          | 罗马洋甘菊 | 0.69 |
| 11                                  | 9381     | 罗马洋甘菊精油   | 罗马洋甘菊 | 0.73 |

该模型使用的三组实体, 与三种类型洋甘菊的每一种基本对应。图 3 的文氏图 (Venn) 显示了所描述的这三个组及它们间的最小重叠。表 4 为鉴定出的每种洋甘菊中与这些实体相对应的主要化合物。这些化合物与之前文献中报道的洋甘菊的组成一致。

由于这种模型可以将新样品毫无偏差地归类到预先确定的样品组中, 因此对于许多天然产品和膳食补充剂的质量控制非常有用。同时, 可对批量样品进行自动采集、处理和分类预测。

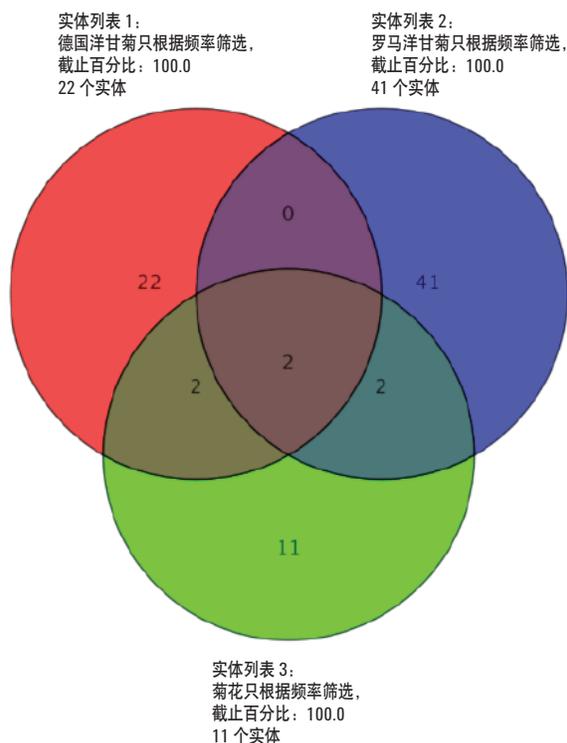


图 3. 洋甘菊样品文氏图

表 4. 在构建的洋甘菊分类预测模型中尝试性鉴定出的主要标志化合物

| 实体           | <i>m/z</i>        | <i>t<sub>R</sub></i> (min) | 尝试性鉴定化合物 *  | 分子量 | CAS 号       |
|--------------|-------------------|----------------------------|---|-----|-------------|
| <b>罗马洋甘菊</b> |                   |                            |   |     |             |
| 1            | 71.0              | 15.10                      | 异丁酸异丁酯 <sup>a</sup>   | 144 | 97-85-8     |
| 2            | 93.0              | 16.43                      | 1 <i>R</i> - $\alpha$ -蒎烯 <sup>a,b</sup>  | 136 | 7785-70-8   |
| 3            | 71.0              | 23.42                      | 异丁酸 2-甲基丁酯 <sup>a</sup>   | 158 | 2445-69-4   |
| 4            | 55.0, 83.0        | 26.64                      | 3-甲基-2-丁烯酸丁酯 <sup>a</sup>   | 156 | 54056-51-8  |
| 5            | 70.0              | 34.33                      | Trans-(-)-松香芹醇 <sup>a</sup>   | 152 | 547-61-5    |
| 6            | 55.0, 83.0, 100.0 | 36.01                      | 3-甲基-2-丁烯酸-3-甲基丁酯 <sup>a</sup>  | 170 | 56922-73-7  |
| 7            | 81.0              | 36.58                      | 松香芹酮  | 150 | 30460-92-5  |
| 8            | 83.0              | 39.75                      | 3-甲基-2-丁烯酸, 3-甲基-2-丁烯酯  | 168 | 299309      |
| 9            | 100.0             | 44.75                      | 3-甲基-2-丁烯酸十六酯 <sup>a</sup>  | 324 | 60129-26-2  |
| <b>德国洋甘菊</b> |                   |                            |   |     |             |
| 1            | 205.0             | 66.94                      | 斯巴醇 <sup>a,b</sup>  | 220 | 77171-55-2  |
| 2            | 143.0             | 71.43                      | $\alpha$ -红没药醇氧化物 B <sup>a,b</sup>  | 238 | 26184-88-3  |
| 3            | 93.0, 141.0       | 73.04                      | $\alpha$ -红没药醇 <sup>a,b</sup>   | 222 | 515-69-5    |
| 4            | 176.0             | 75.07                      | 7-甲氧基-香豆素   | 176 | 531-59-9    |
| 5            | 143.0             | 76.07                      | 红没药醇氧化物 A <sup>a,b</sup>  | 238 | 22567-36-8  |
| 6            | 143.0             | 81.36                      | $\alpha$ -红没药醇氧化物 A 衍生物 <sup>c</sup>  |     |             |
| 7            | 143.0             | 82.30                      | $\alpha$ -红没药醇氧化物 A 衍生物 <sup>c</sup>  |     |             |
| 8            | 128.0             | 83.70                      | E-1,6-二氧杂螺[4.4]壬-3-烯, 2-(2,4-己二炔亚基)- <sup>b</sup>   | 200 | 50257-98-2  |
| 9            | 200.0             | 84.10                      | Z-1,6-二氧杂螺[4.4]壬-3-烯, 2-(2,4-己二炔亚基)- <sup>b</sup>   | 200 | 4575-53-5   |
| <b>菊花</b>    |                   |                            |   |     |             |
| 1            | 95.0              | 36.82                      | 冰片 <sup>b</sup>   | 154 | 10385-78-1  |
| 2            | 132.0             | 61.06                      | $\alpha$ -姜黄烯 <sup>a</sup>  | 202 | 644-30-4    |
| 3            | 91.0              | 67.27                      | 石竹烯氧化物 <sup>a</sup>   | 220 | 1139-30-6   |
| 4            | 105.0, 121.0      | 69.75                      | 别香树烯氧化物 <sup>a</sup>  | 220 | 156128      |
| 5            | 204.0             | 71.69                      | 桉烷-7(11)烯-4-醇 <sup>a</sup>  | 222 | 473-04-1    |
| 6            | 69.0              | 79.61                      | 异香树烯环氧化物  | 220 | 159366      |
| 7            | 109.0             | 85.38                      | 环丙甲醇, $\alpha$ ,2-二甲基-2-(4-甲基-3-戊烯基)-, [1 $\alpha$ ( <i>R'</i> ),2 $\alpha$ ]- <sup>c</sup> | 182 | 121959-70-4 |

\* 由数据库检索鉴定。

<sup>a</sup> 通过比较文献资料的相对保留指数来鉴定。

<sup>b</sup> 由参比标样鉴定。

<sup>c</sup> 由低的数据库匹配率鉴定。

## 结论

使用 Agilent 7890 GC 和 Agilent 5975C GC/MSD 进行 GC/MS 非目标物筛查，可提供用于分类及鉴别如洋甘菊等天然产品所需的丰富数据信息。Agilent MSD Productivity ChemStation 和 Agilent Mass Profiler Professional 软件可实现自动数据挖掘和处理，从而发现最具特征性的标志化合物，建立高准确度的预测模型，预测某种商品使用的是三种主要类型的洋甘菊中的哪一种。该工具能够对洋甘菊衍生的产品进行明确界定，从而提高产品质量、安全性、功效，以及利于检测掺假物和替代品。

## 参考文献

1. D.L. McKay and J.B. Blumberg "A review of the bioactivity and potential health benefits of chamomile tea (*Matricaria recutita* L.)" *Phytotherapy Research* **20**, 519–530 (2006)
2. S. Petronilho, *et al.* "In vitro and in vivo studies of natural products: A challenge for their valuation. The case study of chamomile (*Matricaria recutita* L.)" *Industrial Crops and Products* **40**, 1–12 (2012)
3. G.E. Bueno-Core, *et al.* "Structural elucidation of bioactive principles in floral extracts of German chamomile (*Matricaria recutita* L.)" *Journal of the Chilean Chemical Society* **56**, 549–553 (2011)
4. M. Wang, *et al.* "An integrated approach utilising chemometrics and GC/MS for classification of chamomile flowers, essential oils and commercial products" *Food Chem* **152**, 391–398 (2014)
5. L.A. Berrueta, R.M. Alonso-Salces, K. Heberger "Supervised pattern recognition in food analysis" *J. Chromatogr A* **1158**, 196–214 (2007)

## 更多信息

这些数据代表典型结果。有关我们的产品与服务的信息，请访问我们的网站 [www.agilent.com/chem/cn](http://www.agilent.com/chem/cn)

[www.agilent.com/chem/cn](http://www.agilent.com/chem/cn)

安捷伦对本资料可能存在的错误或由于提供、展示或使用本资料所造成的间接损失不承担任何责任。

本资料中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

安捷伦科技（中国）有限公司，2014  
2014年2月17日，中国印刷  
5991-3969CHCN

