

• 方药研究 •

不同产地药材牛膝的红外光谱及红外
导数光谱鉴别研究

解玫莹,单圣男,李欢欢,程旺兴

(安徽中医药大学药学院 安徽省中医药研究院中药资源保护与开发研究所,安徽 合肥 230012)

[摘要]目的 建立不同产地牛膝的红外光谱和红外导数光谱并对其差异性进行分析,为牛膝药材的快速鉴别提供依据。**方法** 运用傅里叶红外光谱技术结合二阶导数光谱对不同产地的牛膝药材进行鉴别,采用聚类分析和主成分分析对红外光谱数据进行统计分析。**结果** 牛膝的红外吸收峰主要在 $3\,289$ 、 $2\,975$ 、 $2\,890$ 、 $1\,723$ 、 $1\,630$ 、 $1\,403$ 、 $1\,321$ 、 $1\,241$ 、 $1\,018$ 、 927 、 814 、 773 cm^{-1} 附近,虽然不同产地牛膝所含化学成分具有相似性,但不同产地牛膝红外吸收峰的位置和相对强度存在一定差异;并且在二阶导数红外图谱的 $1\,800\sim 800\text{ cm}^{-1}$ 波段中有更加明显差别,可以为其鉴别提供更准确的依据。聚类分析显示不同批次间相似度很高,主成分分析结果表明在 $1\,723$ 、 $1\,630$ 、 927 、 814 、 651 cm^{-1} 等处的吸收峰对区分不同产地牛膝药材的贡献较大,内蒙古自治区赤峰市和河南省焦作市武陟县的牛膝药材综合评分较高。**结论** 红外光谱法与二阶导数光谱相结合不仅可以提供中药材所含化学成分的相关信息,还可以对其不同产地进行区分,实现对牛膝的快速鉴别。

[关键词]牛膝;傅里叶红外光谱法;二阶导数光谱**[中图分类号]**R917 **[DOI]**10.3969/j.issn.2095-7246.2021.06.019

中药牛膝为苋科植物牛膝 *Achyranthes bidentata* Bl. 的干燥根,味苦、酸,性平,归肝、肾经,具有

逐瘀通经、补肝肾、强筋骨、利尿通淋、引血下行等功效^[1]。牛膝的根含有多种生物活性成分,包括皂苷类、甾酮类、糖类、氨基酸、生物碱及香豆素类等^[2],具有抗肿瘤、镇痛消炎、促进蛋白质合成和促进胃肠兴奋性等多重临床药理作用^[3]。牛膝种植范围较广,主产于河南、河北、山东、内蒙古、安徽等地也有

基金项目:安徽省重点研究和开发计划项目(201904a07020073)**作者简介:**解玫莹(1997-),女,硕士研究生**通信作者:**程旺兴(1971-),男,教授,wxcheng@ahtcm.edu.cn

skin and soft tissue infections in rabbits. **Methods** The paper agar diffusion method was used to conduct an anti-bacterial experiment to compare the growth inhibition effect of the powder solution of Furong ointment, compound Phellodendri Chinensis Cortex lotion, and penicillin on *Staphylococcus aureus* and *Escherichia coli*. A total of 50 New Zealand white rabbits were selected for an anti-inflammatory experiment and were randomly divided into normal group, model group, mupirocin group, low-dose Furong ointment group, and high-dose Furong ointment group, with 10 rabbits in each group. Drug intervention was given after successful modeling, and histopathological changes were observed under a light microscope; white blood cell (WBC) count, neutrophil (NE) count, and the levels of high-sensitivity C-reactive protein (hs-CRP), tumor necrosis factor- α (TNF- α), and interleukin-6 (IL-6) were measured at 8 hours after administration on days 2, 4, and 7. **Results** The powder solution of Furong ointment had an antibacterial effect on *Staphylococcus aureus* (diameter of the inhibition ring: 2.5 mm). Histopathological observation showed that both low- and high-dose Furong ointment reduced inflammatory cell infiltration in the area of skin and soft tissue infection at the back of the rabbits, and high-dose Furong ointment had a better effect than low-dose Furong ointment. Compared with the model group on days 2, 4, and 7 after modeling, the mupirocin group and the low- and high-dose Furong ointment groups had significant reductions in whole blood WBC, NE count, and the serum levels of hs-CRP, TNF- α , and IL-6 ($P<0.05$) or a tendency of reductions in these markers ($P>0.05$), and Furong ointment reduced whole blood WBC in a dose-dependent manner ($P<0.05$). **Conclusion** Furong ointment can inhibit the growth of *Staphylococcus aureus*, and high-dose Furong ointment can reduce inflammatory reaction and promote wound healing in skin and soft tissue infection model rabbits.

[Keywords] Furong ointment; skin and soft tissue infection; antibacterial effect; inflammatory response; rabbit

栽培,而产于河南焦作市武陟县、温县等地的牛膝,由于生长环境得天独厚而成为久负盛名的道地药材,习称“怀牛膝”^[4]。目前,市场上售卖牛膝的渠道较多,许多商家将非道地产区的牛膝冒充道地药材出售,导致药材质量的稳定性下降。与此同时,牛膝为常用中药,其市场销售的不稳定性也使得临床药效难以得到保障,故对不同产地的牛膝进行有效的区分具有重要意义。牛膝的主要鉴定技术包括显微鉴定和理化鉴定等^[5-12],但常规的高效液相色谱指纹图谱技术也存在一定的缺陷,其样品需要经过提取和纯化等预处理过程,不仅不能完整反映中药所含的信息,而且实验繁琐。

红外光谱法是目前鉴别化学物质结构的一种常用方法,能直观地表现出中药材所含复杂成分的化学结构信息。红外光谱技术应用于中药类鉴别可以实现全组分分析且无损耗,具有分析速度快、分析成本低、分析效率高等特点,可以对中药的来源、所含化学物质等进行有效地分类识别^[13]。庞丹清等^[14]构建不同产地和不同极性部位的当归藤红外光谱图,对其进行特征分析。皇甫义静等^[15]利用傅里叶变换红外光谱,对金银花产地进行鉴别。黄冬兰等^[16]采用红外光谱、二阶导数红外光谱和二维相关红外光谱,对 4 种不同产地的黄芪原材料进行鉴别研究。因此,本研究采用傅里叶变换红外光谱法结合红外二阶导数图谱深层次地辨别不同产地牛膝所含化学成分的差异,初步建立牛膝的鉴别和质量控制新方法。

1 仪器与材料

1.1 仪器 傅里叶红外光谱仪(Nicolet iN10 MX):美国 Thermo 公司;红外光谱分析软件(OMNIC V8.3):美国 Thermo 公司;高速多功能打粉机(BJ-150 型):德清拜杰电器有限公司;真空干燥箱(BZF-30 型):上海博讯实业有限公司。

1.2 样品来源与制备 牛膝药材信息如表 1 所示,经安徽中医药大学杨青山老师鉴定为苋科植物牛膝 *Achyranthes bidentata* Bl. 的干燥根,按文献^[17]的方法将干燥后的牛膝药材放入打粉机中打碎,粉末过 80 目筛,备用。

2 方法

2.1 实验方法 红外光谱测定前用无水乙醇擦拭检测台,再取样品粉末适量,置于实验测定的金刚石表面,旋转 SMART ITR 附件的固定旋钮将样品固定并压成透明薄片,选择实验条件(每张光谱累加扫描 16 次,光谱分辨率 4 cm⁻¹,扫描过程中实时扣除

水和二氧化碳干扰,纵坐标为吸光度),扫描,可得样品粉末相对应的红外光谱图。二阶导数谱是取原始谱图各点的二阶导数,平滑点数为 13。

表 1 牛膝药材来源信息表

编号	产地	批次	来源
S1	山东省菏泽市	201023	安徽省亳州市药材市场
S2	内蒙古自治区赤峰市	201003	赤峰市喀喇沁
S3	内蒙古自治区赤峰市	201025	赤峰市喀喇沁
S4	内蒙古自治区赤峰市	201110	赤峰市喀喇沁
S5	内蒙古自治区赤峰市	201122	赤峰市喀喇沁
S6	内蒙古自治区赤峰市	201201	赤峰市喀喇沁
S7	河南省焦作市武陟县	191002	诚实通有限公司
S8	河南省焦作市武陟县	191004	诚实通有限公司
S9	河南省焦作市武陟县	191110	诚实通有限公司
S10	河南省焦作市武陟县	191111	诚实通有限公司
S11	河南省焦作市武陟县	191112	诚实通有限公司
S12	河南省焦作市武陟县	191220	四川郝胜堂
S13	河南省焦作市武陟县	200301	安徽省亳州市药材市场
S14	河南省焦作市武陟县	200303	安徽省亳州市药材市场
S15	河南省焦作市武陟县	200306	安徽省亳州市药材市场
S16	河南省焦作市温县	191113	安徽省亳州市药材市场
S17	河南省焦作市温县	200304	安徽省亳州市药材市场
S18	河北省保定市	201016	安国药材市场
S19	河北省安国市	201019	安国药材市场
S20	河北省安国市	210312	安国药材市场
S21	云南省昆明市	201009	云川百草药店
S22	云南省昆明市	201013	云川百草药店
S23	云南省昆明市	210309	云川百草药店
S24	云南省昆明市	210316	云川百草药店
S25	贵州省毕节市	201016	玲源地产药行
S26	贵州省毕节市	210311	玲源地产药行
S27	贵州省毕节市	210314	玲源地产药行
S28	安徽省亳州市	201021	安徽省亳州市药材市场
S29	陕西省商洛市	201017	秦岭百草堂

2.2 数据处理 聚类分析法是一种用于研究分类的多元统计方法,其目的就是在相似的基础上对收集来的数据进行归类^[18],本实验应用聚类分析法分析红外图谱的各项数据,用 SPSS 23.0 软件进行数据整理、作图,得到样品的聚类分析树状图,直观地反映各样本间的相似关系。

主成分分析也称主分量分析,是一种通过降维,以少量综合指标代替原来多个指标的统计方法^[19-20],本实验采用 SPSS 23.0 软件进行主成分分析,为不同产地牛膝鉴别提供依据。

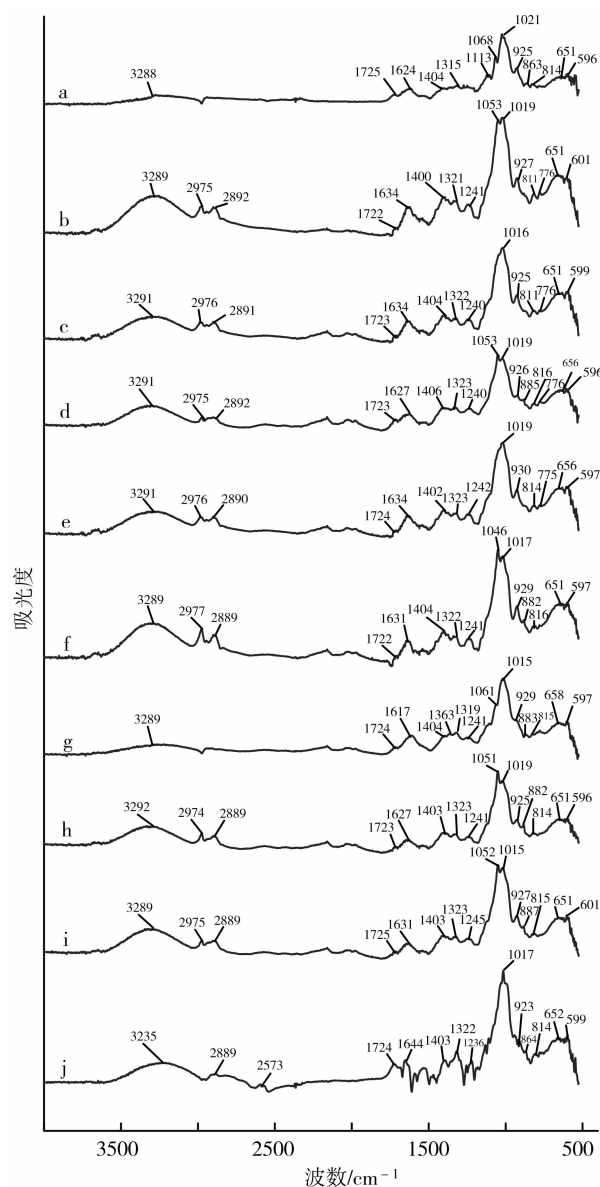
3 结果

3.1 不同产地牛膝的红外光谱图分析 图 1 为 10 个不同产地牛膝药材粉末的红外光谱图。由图 1 可看出中药牛膝的粉末主要在 3 289、2 975、2 890、1 723、1 630、1 403、1 321、1 241、1 018、927、814、773 cm⁻¹附近出现吸收峰。3 400~3 200 cm⁻¹的强宽吸收峰为分子间氢键 O—H 伸缩振动吸收峰;

2 975 cm^{-1} 处和2 890 cm^{-1} 处为 C—H 产生的伸缩振动峰;1 725~1 630 cm^{-1} 为 C=O 伸缩振动吸收峰;1 403 cm^{-1} 附近为甲基 C—H 弯曲振动峰;1 321 cm^{-1} 和773 cm^{-1} 附近为 C=O 键的伸缩振动特征峰;1 200~800 cm^{-1} 是糖类的特征吸收区,表明牛膝药材中含有多糖类物质,927 cm^{-1} 和814 cm^{-1} 附近吸收峰显示多糖类物质结构中存在呋喃环构型;927 cm^{-1} 为呋喃环的对称伸缩振动吸收峰,814 cm^{-1} 为呋喃环的 C—H 变角振动^[3,17]。

通过对不同产地牛膝药材红外光谱图的分析可知,在4 000~1 800 cm^{-1} 范围内,10个产地的牛膝药材相似度较高,但在1 800~800 cm^{-1} 区间,红外光谱图中吸收峰位置和相对峰强具有一定的差异。例如,陕西省商洛市的牛膝药材在1 723 cm^{-1} 附近的吸收峰强度明显高于其他9个产地;在1 630 cm^{-1} 附近,贵州省毕节市的出峰位置相较于平均峰位向右偏移了13个波数;在1 321 cm^{-1} 附近,内蒙古自治区赤峰市和河南省焦作市武陟县的牛膝药材吸收峰强度相近,且高于其他8个产地;山东省菏泽市的牛膝样品在1 113 cm^{-1} 附近存在有相对明显的吸收峰;山东省菏泽市、内蒙古自治区赤峰市、河南焦作市温县、河北省安国市、安徽省亳州市和云南省昆明市的牛膝样品在1 018 cm^{-1} 附近出现双峰。综上所述,红外光谱可为不同产地牛膝药材的鉴别提供依据。

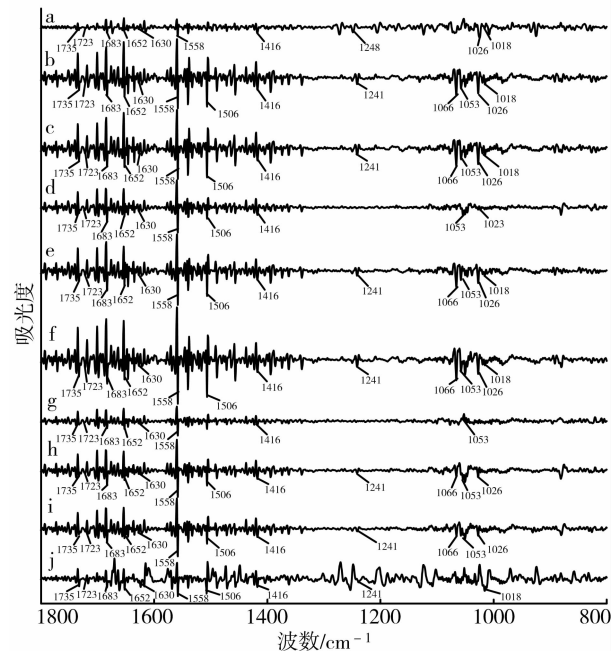
3.2 不同产地牛膝的二阶导数红外光谱分析 红外二阶导数图谱是对红外光谱图的重叠峰进行一定程度的剥离,从而提高图谱的分辨率^[21],本研究采用二阶导数光谱(见图2)对不同产地牛膝的红外峰在1 800~800 cm^{-1} 范围内进行比较分析,山东省菏泽市和贵州省毕节市牛膝的二阶导数红外吸收峰强度相对较弱;陕西省商洛市牛膝的吸收峰形状相较于其他9个产地有明显的差异。在1 800~1 600 cm^{-1} 范围内,河北省安国市在1 735 cm^{-1} 处的吸收峰峰强是10个产地中最高的;在1 630 cm^{-1} 附近,内蒙古自治区赤峰市、河南省焦作市武陟县两个产地的吸收峰强度明显高于其他产地;河南省焦作市温县、河北省保定市、河北省安国市、安徽省亳州市和云南省昆明市5个产地牛膝在1 652 cm^{-1} 附近的吸收峰强度明显大于1 683 cm^{-1} 附近的,而山东省菏泽市、内蒙古自治区赤峰市、河南省焦作市温县、贵州省毕节市和陕西省商洛市5个产地牛膝在1 652 cm^{-1} 附近的吸收峰强度明显小于



注:a.山东省菏泽市;b.内蒙古自治区赤峰市;c.河南省焦作市武陟县;d.河南省焦作市温县;e.河北省保定市;f.河北省安国市;g.贵州省毕节市;h.安徽省亳州市;i.云南省昆明市;j.陕西省商洛市

图1 不同产地牛膝的红外光谱图

1 683 cm^{-1} 附近的吸收峰强度;在1 300~1 000 cm^{-1} 区段,各产地牛膝药材的吸收峰形状差异较大,山东省菏泽市、河南省焦作市温县、贵州省毕节市和陕西省商洛市的吸收峰形状各不相同,易于区分;内蒙古自治区赤峰市、河南省焦作市武陟县、河北省保定市和河北省安国市在1 241 cm^{-1} 附近有较为明显的吸收峰;安徽省亳州市和云南省昆明市在1 058 cm^{-1} 附近吸收峰形状相似。综上所述,二阶导数红外光谱可为不同产地牛膝药材的鉴别提供更准确的依据。

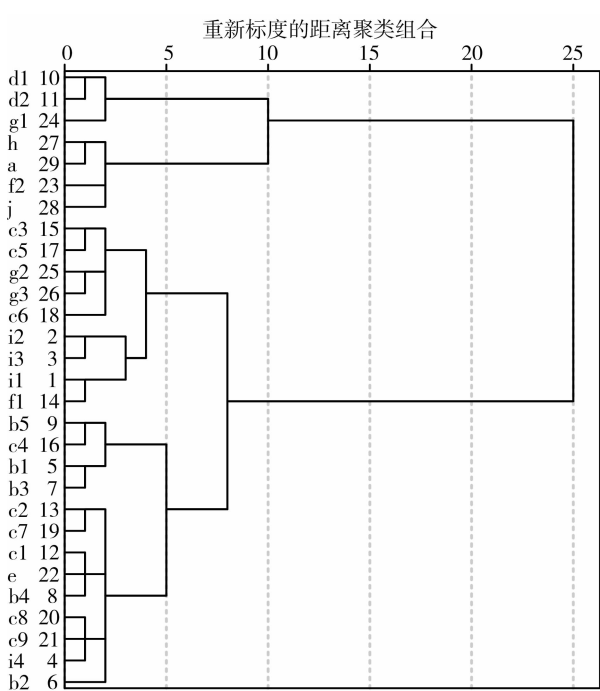


注:a. 山东省菏泽市;b. 内蒙古自治区赤峰市;c. 河南省焦作市武陟县;d. 河南省焦作市温县;e. 河北省保定市;f. 河北省安国市;g. 贵州省毕节市;h. 安徽省亳州市;i. 云南省昆明市;j. 陕西省商洛市

图 2 不同产地牛膝的二阶导数红外光谱图

3.3 不同产地牛膝的聚类分析 本实验不同产地牛膝样品中河南省 11 批,内蒙古自治区 5 批,河北省 3 批,云南省 4 批,贵州省 3 批,其余产地由于产量较小,各 1 批,每个批次样本测定 3 次,取平均图谱,再利用聚类分析法对 29 批不同产地牛膝的红外图谱进行分析,所得树状图如图 3 所示。由图 3 可知,当欧氏距离大于 5 时,同一产地不同批次的牛膝药材大致聚为一类,表明不同批次的药材相似度较高;当欧式距离为 11 时,29 份牛膝样品聚成两大类,一类主要为河南省焦作市武陟县、内蒙古自治区赤峰市、河北省保定市、云南省昆明市和贵州省毕节市所产牛膝,另一类主要为山东省菏泽市、安徽省亳州市、陕西省商洛市、河南省焦作市温县所产牛膝。

3.4 不同产地牛膝的主成分分析 主成分分析是通过收集数据中主要信息,采用降维的方式,用尽量少的数据概括尽量多的信息的数据处理方法^[22]。本研究选择不同产地牛膝药材红外图谱中 10 个共有峰^[23],将其吸光度值导入 SPSS 23.0 软件,建立主成分分析模型。由表 2 和图 4 可知,牛膝药材的主成分分析中前 2 个主成分的特征值>1,累积方差贡献率高达 90.593%,且碎石图的连线较陡峭,因此选取前两个主成分进一步分析。



注:a. 山东省菏泽市;b. 内蒙古自治区赤峰市;c. 河南省焦作市武陟县;d. 河南省焦作市温县;e. 河北省保定市;f. 河北省安国市;g. 贵州省毕节市;h. 安徽省亳州市;i. 云南省昆明市;j. 陕西省商洛市

图 3 29 批不同产地牛膝的聚类分析图

成分	初始特征值		
	总计	方差百分比/%	累积方差贡献率/%
1	7.963	79.633	79.633
2	1.096	10.959	90.593
3	0.679	6.791	97.384
4	0.145	1.453	98.837
5	0.055	0.552	99.389
6	0.027	0.267	99.656
7	0.020	0.195	99.851
8	0.009	0.090	99.941
9	0.004	0.037	99.978
10	0.002	0.022	100.000

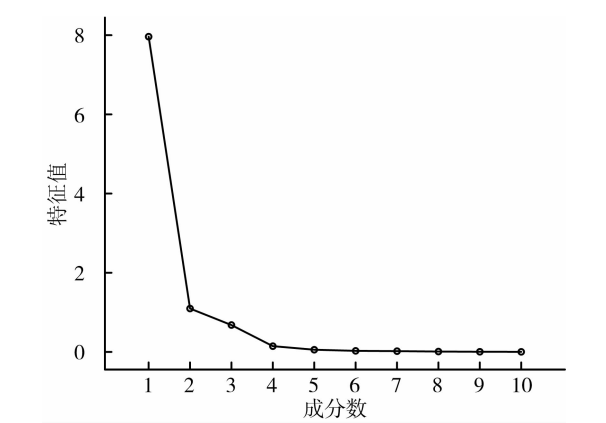


图 4 主成分分析碎石图

成分载荷矩阵反映各成分与原始指标之间相互关系的密切程度与作用的方向,载荷的绝对值越大,其对主成分的影响就越大^[24]。表3为本实验的主成分载荷矩阵。

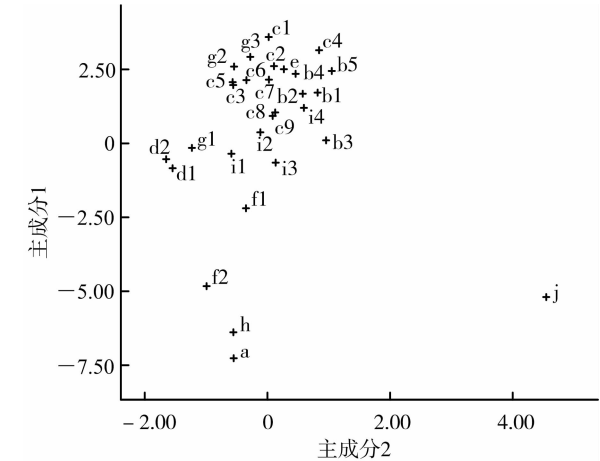
表3 主成分载荷矩阵		
吸收峰 波数/cm ⁻¹	主成分	
	1	2
3 289	0.940	0.007
1 723	-0.142	0.916
1 630	0.935	0.210
1 403	0.912	0.194
1 321	0.918	0.283
1 018	0.905	-0.146
927	0.976	-0.048
814	0.993	0.020
651	0.947	-0.177
596	0.925	-0.198

由主成分矩阵可知,对主成分1贡献较大的有1 630 cm⁻¹处的吸收峰以及糖类特征吸收峰等,对主成分2贡献较大的是1 723 cm⁻¹附近的吸收峰。

图5为29批牛膝的主成分得分图,由图可看出不同产地牛膝药材的分布具有一定的规律性,陕西省商洛市、安徽省亳州市和山东省菏泽市均处于主成分1得分小于-5处,但陕西省商洛市的主成分2得分较高;云南省昆明市集中处在主成分1和2得分均为0处;河南省焦作市温县处于云南的左侧,主成分2得分小于0;河北省安国市处于河南省焦作市温县和安徽省亳州市之间;贵州省毕节市主要集中于主成分2得分小于0处,与河南省焦作市武陟县相邻;河南省焦作市武陟县和内蒙古自治区赤峰市均集中于主成分1得分为2.5处,但河南省焦作市武陟县的主成分2得分小于0,内蒙古自治区赤峰市的主成分2得分大于0。由此可见,红外光谱技术结合主成分分析不仅能鉴别不同产地的牛膝药材,并且能够反映牛膝药材中部分有效成分含量的差异。

4 讨论

由于不同产地的牛膝药材生长环境不同,其所含化学成分的量也有所差别,故本实验利用红外光谱结合红外二阶导数光谱,依据各类红外特征吸收峰形状、位置和强度的差异对不同产地牛膝药材进行鉴别。在红外光谱中,各产地牛膝药材的吸收峰形状相似度较高,主要通过吸收峰位置和相对峰强对不同产地牛膝进行区分;二阶导数图谱由于一定程度剥离了红外光谱中复杂成分所产生的重叠峰,可以更加明显地体现出不同产地牛膝药材的差异



注:a, 山东省菏泽市;b. 内蒙古自治区赤峰市;c. 河南省焦作市武陟县;d. 河南省焦作市温县;e. 河北省保定市;f. 河北省安国市;g. 贵州省毕节市;h. 安徽省亳州市;i. 云南省昆明市;j. 陕西省商洛市

图5 不同产地牛膝的主成分得分图

性。同时聚类分析结果表明,同一产地不同批次之间相似度很高,但不同产地牛膝药材在一定的欧氏距离下分为两大类;其中河南省焦作市温县和武陟县也被分为不同的两类,可见即便地理位置相近,牛膝药材的化学成分可能也有一定的差异性。主成分分析结果表明,内蒙古自治区赤峰市和河南省焦作市武陟县的牛膝药材综合评分较高。综上所述,红外光谱法结合二阶导数图谱能够为鉴别不同产地的牛膝药材提供很好的依据,是牛膝药材质量控制研究的一种新方法。

参考文献:

[1] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典:一部[M]. 北京:中国医药科技出版社,2020:74.

[2] 付国辉,陈随清,刘嘉,等. 牛膝化学成分及等级分类研究[J]. 海峡药学,2018,30(2):29-32.

[3] 王昌盛. 怀牛膝糖聚物的分离纯化、结构鉴定及生物活性测试[D]. 广州:广东药科大学,2016.

[4] 孙素琴,白雁,余振喜,等. 红外光谱与计算机辅助解析技术对中药牛膝的鉴别研究[J]. 中药材,2005,28(3):181-184.

[5] 王耐. 牛膝、川牛膝、防风各组织、性状的特征提取与模式识别[D]. 广州:广州中医药大学,2017.

[6] 王耐,卢文彪,凌秀华,等. 牛膝和川牛膝药材的特征提取与图像识别[J]. 中国药房,2017,28(12):670-1673.

[7] 张磊,王彦志,胡慧玲. 怀牛膝地上部分化学成分的分离鉴定[J]. 中药材,2018,41(1):107-110.

[8] 梁献葵,雷敬卫,龚海燕,等. 牛膝指纹图谱分析[J]. 中国实验方剂学杂志,2019,25(19):109-116.

[9] 刘天亮,董诚明,杨朝帆,等. 不同产地及不同种源栽培品牛膝的品质评价[J]. 中药材,2020,43(10):2363-2368.

[10] 白雁,余振喜,孙素琴,等. 近红外漫反射光谱技术测定

牛膝中蜕皮甾酮[J]. 中草药, 2005, 36(9): 1391-1392.

[11] 张留记, 刘晓苗, 屠万倩, 等. HPLC法同时测定怀牛膝中5个成分的含量[J]. 药物分析杂志, 2018, 38(4): 623-629.

[12] 胡康慧, 王玉红, 张忠豪, 等. 牛膝中甾酮类提取物的HPLC测定[J]. 广东化工, 2018, 45(5): 47-49.

[13] 梅德强, 王建华. 红外光谱法研究中药进展[J]. 重庆大学学报(自然科学版), 2003, 36(11): 56-59.

[14] 庞丹清, 阙祖亮, 陈勇, 等. 广西不同产地及不同极性部位当归藤药材红外光谱特征分析[J]. 辽宁中医药大学学报, 2019, 21(3): 140-143.

[15] 皇甫义静, 杨春燕, 毛贻龙, 等. 基于傅里叶变换红外光谱的金银花产地鉴别[J]. 湖北农业科学, 2018, 57(14): 105-108.

[16] 黄冬兰, 陈小康, 徐永群. 不同产地黄芪的红外光谱鉴别研究[J]. 分析科学学报, 2015, 31(3): 379-383.

[17] 刘洁, 单晓晓, 李国转, 等. 红外光谱结合化学计量学快速鉴别不同环境发汗丹参[J]. 安徽中医药大学学报, 2021, 40(2): 85-90.

[18] 张智敏, 聂蕊, 李亚梅, 等. 聚类分析结合主成分分析评价不同产地枳壳药材的一致性与差异性[J]. 亚太传统医药, 2019, 15(4): 30-36.

[19] 蔡晓洋, 张思荻, 曾俊, 等. 基于主成分分析和聚类分析的栀子种质资源评价[J]. 中国实验方剂学杂志, 2017, 23(14): 30-37.

[20] 王婷, 于凡, 李国转, 等. “发汗”与非“发汗”丹参中10种活性成分含量测定及其质量的主成分分析[J]. 安徽中医药大学学报, 2019, 38(1): 75-79.

[21] 王元媛, 李欢欢, 刘梅, 等. 不同产地、不同部位的丹参与南丹参的红外光谱研究[J]. 化学世界, 2019, 60(3): 142-148.

[22] 岳星宇, 王乐新, 赵新月, 等. 基于主成分分析法识别不同产地防风和黄芩[J]. 黑龙江八一农垦大学学报, 2019, 31(3): 45-50.

[23] 陈前锋, 侯鹏, 刘巧, 等. 红外光谱法快速鉴别不同产地中药党参的研究[J]. 西南大学学报(自然科学版), 2016, 38(6): 188-194.

[24] 陈林杰, 程俊文, 魏海龙, 等. 基于聚类分析和主成分分析法的不同产地桑黄红外指纹图谱研究[J]. 中国食品添加剂, 2020, 31(9): 1-7.

(收稿日期: 2021-07-29)

Identification of Radix Achyranthis Bidentatae From Different Producing Areas by Infrared Spectroscopy and Infrared Derivative Spectrophotometry

XIE Mei-ying, SHAN Sheng-nan, LI Huan-huan, CHENG Wang-xing
(School of Pharmacy, Anhui University of Chinese Medicine & Institute of Traditional Chinese Medicine Resources Protection and Development, Anhui Academy of Chinese Medicine, Anhui Hefei 230012, China)

[Abstract] **Objective** To establish the spectra of Radix Achyranthis Bidentatae from different producing areas by infrared spectrometry and infrared derivative spectrophotometry, to investigate their differences, and to provide a basis for rapid identification of Radix Achyranthis Bidentatae. **Methods** Fourier transform infrared spectroscopy combined with second-order derivative spectrophotometry was used to identify Radix Achyranthis Bidentatae from different producing areas, and cluster analysis and principal component analysis were used to perform a statistical analysis of infrared spectrometry data. **Results** The infrared absorption peaks of Radix Achyranthis Bidentatae were around 3 289, 2 975, 2 890, 1 723, 1 630, 1 403, 1 321, 1 241, 1 018, 927, 814, and 773 cm⁻¹. Although Radix Achyranthis Bidentatae from different producing areas had similar chemical components, there are certain differences in the position and relative intensity of the infrared absorption peaks of Radix Achyranthis Bidentatae from different producing areas. Significant differences were observed in the 1 800-800 cm⁻¹ band of the spectrum of second-order derivative spectrophotometry, which provided a more accurate basis for identification. The cluster analysis showed a degree of similarity between different batches, and the results of principal component analysis showed that the absorption peaks at 1 723, 1 630, 927, 814, and 651 cm⁻¹ had a greater contribution to distinguishing Radix Achyranthis Bidentatae from different producing areas. Radix Achyranthis Bidentatae from Chifeng City of Inner Mongolia and Wuzhi County of Jiaozuo City in Henan Province had a relatively high comprehensive score. **Conclusion** The combination of infrared spectroscopy and second-order derivative spectrophotometry can not only provide the information on the chemical components of Chinese medicinal material, but also distinguish the Chinese medicinal material from different producing areas, which can realize the rapid identification of Radix Achyranthis Bidentatae.

[Key words] Radix Achyranthis Bidentatae; Fourier transform infrared spectroscopy; second-order derivative spectrophotometry