

# 基于主成分和聚类分析评价国产不同批次肉豆蔻挥发油的质量

黄盼<sup>1</sup>, 周改莲<sup>1,2,3</sup>, 王倩<sup>1</sup>, 周文良<sup>2</sup>, 王乃斌<sup>1</sup>, 谢雪婷<sup>1</sup>

(1. 广西中医药大学药学院, 广西南宁 530020) (2. 中山大学生命科学学院, 广东广州 510275)

(3. 广西优势中成药与民族药开发工程技术中心, 广西南宁 530020)

**摘要:** 本文对 16 批次肉豆蔻样品的挥发油进行化学成分分析鉴定, 对其共有化学成分采用主成分分析和聚类分析, 从而对肉豆蔻挥发油进行综合质量评价。通过对其形状、气味、色泽等性状进行记录, 采用水蒸气蒸馏法提取肉豆蔻挥发油, 通过气相色谱-质谱联用色谱仪 (GC-MS) 所得挥发性成分, 结合 NIST08 系列标准谱库、人工检索等方式对其进行鉴定分析, 利用主成分分析和聚类分析对 16 批次肉豆蔻样品进行综合评价。16 批次肉豆蔻多为卵圆形或椭圆形、香气浓烈、灰棕色; 从肉豆蔻挥发油化学成分中共筛选出 17 个共有成分, 经主成分分析概括为 4 个主成分, 包含源信息量的 86.26%; 聚类分析结果显示, 16 批次肉豆蔻样品可聚为两大类, S<sub>15</sub> 批次聚为一类, S<sub>1</sub>-S<sub>14</sub>, S<sub>16</sub> 批次聚为一类; 两种分析结果达成一致。通过主成分分析和聚类分析, 同时结合性状品质与安全性分析, 可以建立肉豆蔻挥发油的质量评价体系, 为肉豆蔻挥发油的药食两用以及其他方面的进一步开发研究提供参考依据, 该评价方法综合性强、全面性高。

**关键词:** 肉豆蔻; 挥发油; 主成分分析法; 聚类分析法; 质量评价

文章编号: 1673-9078(2020)05-310-318

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2020.5.041

## Evaluation of the Quality of Domestically Produced Different Batches of Nutmeg Volatile Oil Based on Principal Component and Cluster Analysis

HUANG Pan<sup>1</sup>, ZHOU Gai-lian<sup>1,2,3</sup>, WANG Qian<sup>1</sup>, ZHOU Wen-liang<sup>2</sup>, WANG Nai-bin<sup>1</sup>, XIE Xue-ting<sup>1</sup>

(1.School of Pharmacy, Guangxi University of Traditional Chinese Medicine, Nanning 530020, China) (2.School of Life

Science, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China) (3.Guangxi Advantage Chinese Medicine and National Medicine Development Engineering Technology Center, Nanning 530020, China)

**Abstract:** In this work, the chemical compositions of 16 batches of nutmeg samples were identified and analyzed, and their common chemical components were analyzed by principal component analysis and cluster analysis. The color, odor, shape and other properties of 16 batches of nutmeg samples were recorded, and the essential oil of nutmeg was extracted by steam distillation. The volatile components were analyzed by gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) combined with the NIST08 series standard library, artificial identification and analysis. These 16 batches of nutmeg samples were comprehensively evaluated using principal component analysis and cluster analysis. Most of the 16 batches of nutmeg were oval, grayish brown, with strong aroma. The 17 compounds were identified from all the nutmeg volatile oil, which could be summarized into 4 main components by principal component analysis, including 86.26% of source information. The cluster analysis results showed that 16 batches of nutmeg samples could be clustered into two categories. The S<sub>15</sub> batch was clustered into one

引文格式:

黄盼,周改莲,王倩,等.基于主成分和聚类分析评价国产不同批次肉豆蔻挥发油的质量[J].现代食品科技,2020,36(5):310-318

HUANG Pan, ZHOU Gai-lian, WANG Qian, et al. Evaluation of the quality of domestically produced different batches of nutmeg volatile oil based on principal component and cluster analysis [J]. Modern Food Science and Technology, 2020, 36(5): 310-318

收稿日期: 2019-10-05

基金项目: 国家自然科学基金项目 (81860691); 广西高校中青年教师基础能力提升项目 (2019KY0355); 广西中医药大学研究生教育创新计划项目 (YGSY20190090)

作者简介: 黄盼(1994-), 男, 硕士研究生, 研究方向: 中药质量标准及炮制机理研究

通讯作者: 周改莲(1981-), 女, 副教授, 研究方向: 中药质量标准及炮制机理研究

category, S<sub>1</sub>-S<sub>14</sub> batches, S<sub>16</sub> batches were clustered into one category, respectively. The two analysis results were agreed with each other. Through principal component analysis and cluster analysis, combined with trait quality and safety analysis, a quality evaluation system for nutmeg volatile oil was established, which could provide a reference basis for further development and research of nutmeg volatile oil in other aspects. It will be a comprehensive method.

**Key words:** nutmeg; volatile oil; principal component analysis method; cluster analysis method; quality evaluation

肉豆蔻 (*Myristica fragrans* Houtt.) 为肉豆蔻科植物肉豆蔻的干燥种仁, 始载于《本草拾遗》, 又称咖拘勒、玉果、肉果等<sup>[1]</sup>, 主产于印度尼西亚、马来西亚等地区, 我国云南、广东、广西、台湾等地亦有种植<sup>[2]</sup>, 于春冬季节成熟期采收。其味辛, 性温, 归脾、胃、大肠经, 具有温中行气, 涩肠止泻的功效, 中医临床上常用于脾胃虚寒, 久泻不止, 脘腹胀痛, 食少呕吐<sup>[3]</sup>; 在蒙药中常用于多种心脏疾病, 如心赫依、心刺痛、谵语、晕厥和心慌等<sup>[4]</sup>。肉豆蔻是常见的药食两用药材<sup>[5]</sup>, 含有挥发油、黄酮、脂肪油、木脂素等多种化学成分, 其中挥发油约占 8%~15%, 脂肪油含量占 25%~46%, 肉豆蔻醚约占 4%<sup>[6]</sup>。肉豆蔻挥发油具有芳香独特的气味, 常用于调料制品、精油、香水、化妆品等方面<sup>[7,8]</sup>。现代研究表明, 肉豆蔻有抗菌、抗炎镇痛、抗氧化、抗癌、保肝、降血糖血脂、止泻、抗肿瘤、抗抑郁等多种药理学活性<sup>[9-13]</sup>。目前关于肉豆蔻挥发油的研究多集中在化学成分<sup>[14,15]</sup>、药理作用<sup>[16-18]</sup>、提取工艺<sup>[19-21]</sup>等方面, 而对于肉豆蔻的性状品质和其各批次的挥发油共有化学成分相对含量的质量研究方面鲜有报道。因此本实验采用水蒸气蒸馏法提取肉豆蔻挥发油, 利用 GC-MS 法以及相关检索手段对其进行分离和鉴定, 通过统计学软件 SPSS 中的主成分分析法和聚类分析方法对 16 批次肉豆蔻挥发油共有化学成分进行分析研究, 结合性状品质进行综合验证, 将安全性考虑其中, 进而探索肉豆蔻挥发油中起主导作用的综合指标, 为肉豆蔻挥发油其他方面的进一步开发研究提供理论参考依据和实践探索。

## 1 材料与方法

### 1.1 原料、试剂与仪器设备

#### 1.1.1 原料

16 批次肉豆蔻样品收集于多个大型中药饮片公司 (包含四个主要产地), 经广西中医药大学银胜高副教授鉴定为肉豆蔻科植物肉豆蔻的干燥种仁。具体样品信息见表 1。

表 1 16 批次肉豆蔻样品信息

Table 1 16 batches of nutmeg sample information

序号	产地	产品批号	饮片生产单位
S <sub>1</sub>	广西	1710080452	亳州市沪谯药业有限公司
S <sub>2</sub>	云南	1611110342	亳州市沪谯药业有限公司
S <sub>3</sub>	广西	1805150292	亳州市沪谯药业有限公司
S <sub>4</sub>	广东	180102331	康美药业股份有限公司
S <sub>5</sub>	广东	20180731	深圳华辉药业有限公司
S <sub>6</sub>	海南	20170501	湖北神农本草中药饮片有限公司
S <sub>7</sub>	海南	180301	安徽知源中药饮片有限公司
S <sub>8</sub>	广东	P20160857	云南向辉药业有限公司
S <sub>9</sub>	广西	1801001	江西樟树天齐堂中药饮片有限公司
S <sub>10</sub>	广西	1708003	江西樟树天齐堂中药饮片有限公司
S <sub>11</sub>	海南	20170401	广西仙菜中药科技有限公司
S <sub>12</sub>	云南	1808147	中山市仙逸堂中药饮片有限公司
S <sub>13</sub>	云南	R0318311	广东省药材公司中药饮片厂
S <sub>14</sub>	海南	1807001	广州市岭南中药饮片有限公司佛山分公司
S <sub>15</sub>	云南	180501	广州至信中药饮片有限公司
S <sub>16</sub>	广东	180801	广东天诚中药饮片有限公司

样品收集的说明: 研究发现肉豆蔻国内外产差异性不大, 因此本实验收集国内实力较强的企业的样品, 主要收集 16 个不同批次的样品 (四个主要产地) 进行研究。

#### 1.1.2 试剂

乙酸乙酯 (分析纯), 成都市科学化学品有限公司; 无水硫酸钠, 天津博迪化工股份有限公司。

#### 1.1.3 主要仪器设备

挥发油提取器: 98-1-B 电子调温电热套, 天津市泰斯特仪器有限公司; SQP 赛多利斯电子天平, 赛多利斯科学仪器 (北京) 有限公司; 7890B-5977B 气相色谱-质谱联用仪, 美国安捷伦公司; NIST08 系列标准谱库; 中药色谱指纹图谱相似度评价系统 (2003A); 药典标准过滤筛, 上海丰行筛网制造有限公司 (GB/T 6003.1-1997, 0.85 mm)。

## 1.2 实验方法

### 1.2.1 性状品质的记录

按照 2015 版《中国药典》对收集到的 16 批次肉豆蔻样品进行形状、气味、色泽等性状进行记录。

### 1.2.2 供试品溶液的制备

取 16 批次肉豆蔻样品各 20 g (粉碎, 过 2 号筛 0.85 mm), 加 8 倍量的水于室温浸泡 1 h, 按照 2015 版《中国药典》挥发油测定法提取肉豆蔻挥发油, 100 °C 连续提取 8 h, 得到肉豆蔻挥发油, 用无水硫酸钠脱水, 过夜处理, 经 0.45 μm 的微孔滤膜滤过, 用乙酸乙酯溶解, 装入样品瓶, 即得供试品溶液。

### 1.2.3 色谱条件

HP-5MS 毛细管柱 (30 m×0.25 mm×0.25 μm); 程序升温: 色谱柱的柱初始温度为 55 °C, 保持 2 min, 以 15 °C/min 的升温速率升至 70 °C, 保持 10 min, 然后 5 °C/min 的速率升至 180 °C, 保持 2 min。进样口温度: 230 °C; 载气: 99.999% 氦气; 载气流速 1.0 mL/min; 分流比为 1:10, 溶剂延迟 3 min。倍增管电压: 1.2 kV; 离子源温度: 250 °C; 电子能力: 70 eV; 接口温度: 250 °C; 质量范围: 35~550 m/z, 离子源: EI 源; 标准谱库 NIST08。

### 1.2.4 数据处理与分析

应用 IBM SPSS 21.0 对数据进行统计分析, 分别采用因子分析与系统聚类法进行主成分分析和聚类分析。主成分分析是利用降维的思想对其图谱进行数据重组, 考察多个变量的内在结构, 探索肉豆蔻挥发油中起主导作用的综合指标<sup>[22]</sup>。将共有色谱峰百分含量 (表 4) 导入 IBM SPSS 21.0 中, 选择所有变量进行描述统计分析保存为标准化数据后, 对 16 批次肉豆蔻挥发油进行主成分分析, 得到碎石图、主成分特征值、主成分因子的载荷矩阵、相关性矩阵、主成分综合得分, 进而对 16 批次肉豆蔻挥发油进行质量评价。聚类分析是将主成分得分值导入 IBM SPSS 21.0 中对 16 批次肉豆蔻挥发油成分进行聚类分析, 采用组间平均数联结法, 以欧式平方距离为度量标准进行系统聚类分析<sup>[23]</sup>。

## 2 结果与讨论

### 2.1 性状品质结果记录

肉豆蔻色泽、气味、形状等相关性状记录结果如表 2 所示。16 批次肉豆蔻有卵圆形或椭圆形、厚片、碎块 3 种, 其中卵圆形或椭圆形居多; 气味有微香, 香, 香气浓烈 3 种, 香气浓烈居多, 颜色有灰黄色、

灰棕色、灰黄或灰棕色 3 种, 以灰棕色居多。

表 2 16 批次肉豆蔻样品相关性状记录

Table 2 Record of related traits of 16 batches of nutmeg samples

编号	气味	颜色	形状
S1	气香浓烈	灰棕色	厚片
S2	气香浓烈	灰棕色	厚片
S3	气香	灰棕色	厚片
S4	气香	灰棕色	碎块
S5	气香	灰黄或灰棕色	卵圆形或椭圆形
S6	气香浓烈	灰黄或灰棕色	卵圆形或椭圆形
S7	气香浓烈	灰棕色	卵圆形或椭圆形
S8	气香浓烈	灰黄色	卵圆形或椭圆形
S9	气香浓烈	灰黄色	卵圆形或椭圆形
S10	气香浓烈	灰棕色	卵圆形或椭圆形
S11	气微香	灰棕色	卵圆形或椭圆形
S12	气香	灰黄或灰棕色	卵圆形或椭圆形
S13	气香浓烈	灰黄或灰棕色	碎块
S14	气微香	灰黄或灰棕色	卵圆形或椭圆形
S15	气香浓烈	灰棕色	卵圆形或椭圆形
S16	气微香	灰棕色	厚片

### 2.2 GC-MS 图谱的建立

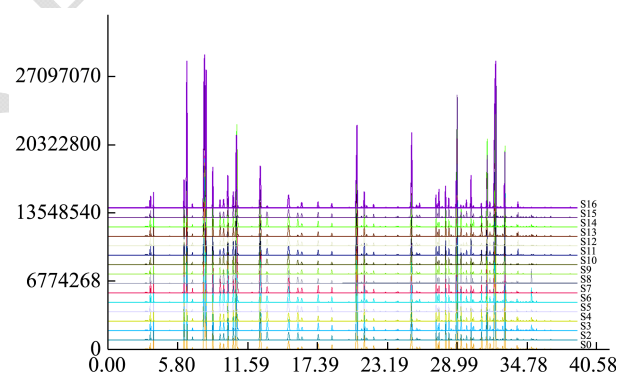


图 1 16 批次肉豆蔻挥发油指纹图谱叠加图

Fig.1 Overlay of fingerprints of 16 batches of nutmeg volatile oil

按选定的 GC-MS 条件对 16 批次肉豆蔻挥发油进行分析, 测得所有供试品的 GC-MS 总离子流图, 见图 1。通过标准库比对、文献查询进行人工检索, 确认其化学结构式及名称, 其相对含量采用面积归一化法, 经中药指纹图谱相似度评价系统 (2004A 版) 建立指纹图谱, 得到共有色谱峰相对含量与其相关信息 (表 3, 表 4)。

由表 4 可知 16 批次肉豆蔻含有的共有化学成分的相对含量差别甚大, 其原因可能与不同产地、不同企业、不同批次以及贮藏条件等影响因素有关; 其次不

同企业的前处理加工方式不同对于挥发油各成分含量 也有着显著的影响<sup>[24,25]</sup>。

表 3 16 批次肉豆蔻共有峰信息表

Table 3 Common peak information of 16 batches of nutmeg

峰号	化合物名称	英文名称	保留时间	分子式	分子量
1	蒎烯	(1R)-(+)-Alpha-pinene	6.558	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	136.234
2	$\beta$ -蒎烯	$\beta$ -Pinene	8.132	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	136.234
3	水芹烯	$\alpha$ -Phellandrene	9.328	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	136.234
4	3-萜烯	Carene	9.620	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	136.234
5	松油烯	$\alpha$ -Terpinene	9.975	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	136.234
6	邻-异丙基苯	o-Cymene	10.420	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	134.218
7	$\gamma$ -松油烯	$\gamma$ -Terpinene	12.668	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	136.234
8	芳樟醇	Linalool	16.121	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	154.250
9	(-)-4-萜品醇	(-)-Terpinen-4-ol	20.702	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	154.249
10	alpha-松油醇	alpha-Terpineol	21.310	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	154.249
11	黄樟素	Safrole	25.231	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	162.185
12	(-)-Alpha-蒎烯	$\alpha$ -Copaene	28.064	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	204.351
13	乙酸香叶酯	Acetic acid geranyl ester	28.333	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	196.286
14	甲基丁香酚	Methyl eugenol	29.026	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	178.228
15	异丁香酚甲醚	(E)-Methyl isoeugenol	31.492	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	178.228
16	肉豆蔻醚	Myristicin	32.202	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	192.211
17	榄香素	Elemicin	32.992	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> O <sub>3</sub>	208.254

表 4 16 批次肉豆蔻挥发油共有色谱峰相对百分含量

Table 4 Relative percentage of total peaks of 16 batches of nutmeg volatile oil

批次	相对百分含量%																
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
S <sub>1</sub>	4.84	4.89	0.50	0.40	1.78	0.94	3.02	0.26	7.23	0.88	2.82	1.32	0.57	12.35	3.65	17.34	6.08
S <sub>2</sub>	8.72	8.14	0.48	0.52	1.85	1.11	3.11	0.36	7.86	0.92	2.95	0.92	0.41	6.95	2.03	14.94	3.36
S <sub>3</sub>	5.00	4.74	0.57	0.49	1.77	1.02	3.16	0.27	7.69	0.84	2.91	1.30	0.41	12.47	4.93	12.78	6.63
S <sub>4</sub>	6.05	5.77	0.49	0.45	1.26	0.77	2.21	0.29	5.60	0.69	2.75	0.93	0.43	10.62	4.13	15.58	6.09
S <sub>5</sub>	7.35	7.49	0.76	0.70	3.04	0.88	5.10	0.54	9.86	1.32	2.17	0.69	0.40	1.85	0.63	7.94	3.51
S <sub>6</sub>	6.63	6.04	0.74	1.30	2.49	1.28	4.14	0.35	9.41	0.99	3.02	0.87	0.33	3.75	1.36	10.12	9.07
S <sub>7</sub>	8.68	7.93	0.82	0.47	2.81	0.96	4.60	0.38	9.04	0.97	3.47	0.72	0.40	5.53	1.69	10.12	2.52
S <sub>8</sub>	9.39	8.69	0.61	0.99	2.08	1.54	3.60	0.36	6.81	0.78	2.24	0.95	0.34	1.99	0.67	12.34	7.64
S <sub>9</sub>	6.73	7.06	0.53	0.40	2.42	1.28	4.31	0.44	9.48	1.01	4.68	1.19	0.41	4.37	1.22	16.06	2.87
S <sub>10</sub>	7.67	7.23	0.70	0.81	2.00	0.79	3.62	0.27	6.46	0.75	2.73	1.21	0.41	12.50	2.45	10.63	2.64
S <sub>11</sub>	7.51	7.68	0.41	0.51	1.78	1.12	3.23	0.33	6.87	0.78	3.39	0.75	0.36	9.11	1.99	19.47	2.11
S <sub>12</sub>	8.99	8.33	0.42	0.62	1.84	1.90	3.06	0.40	7.73	1.17	3.35	0.89	0.37	2.10	0.15	0.20	2.64
S <sub>13</sub>	6.30	5.70	0.72	0.56	1.86	0.71	3.27	0.31	6.21	0.62	2.71	1.15	0.49	9.14	4.62	12.94	5.15
S <sub>14</sub>	5.44	4.71	0.76	0.56	1.60	0.87	2.94	0.29	6.80	0.70	1.90	0.94	0.35	9.89	5.65	8.87	4.87
S <sub>15</sub>	4.94	5.33	0.36	0.39	1.39	0.87	2.58	0.38	6.99	0.85	3.27	1.09	0.44	10.54	5.66	22.43	3.74
S <sub>16</sub>	8.55	9.53	0.52	0.57	1.21	3.93	0.51	7.66	0.97	4.92	1.04	0.47	1.34	0.38	0.57	18.76	1.11

注: 1 代表蒎烯; 2 代表  $\beta$ -蒎烯; 3 代表水芹烯; 4 代表 3-萜烯; 5 代表松油烯; 6 代表邻异丙基苯; 7 代表  $\gamma$ -松油烯; 8 代表芳樟醇; 9 代表(-)-4-萜品醇; 10 代表 alpha 松油醇; 11 代表黄樟素; 12 代表 Alpha 蒎烯; 13 代表乙酸香叶酯; 14 代表甲基丁香酚; 15 代表异丁香酚甲醚; 16 代表肉豆蔻醚; 17 代表榄香素。



### 2.3 主成分分析结果

表5 相关性矩阵

Table 5 Correlation matrix

1	1																
2	0.95**	1															
3	0.08	-0.08	1														
4	-0.82**	-0.86**	-0.05	1													
5	-0.38	-0.52	0.23	0.27	1												
6	-0.35	-0.14	-0.47	0.34	-0.09	1											
7	-0.70**	-0.75**	-0.12	0.83**	0.17	0.33	1										
8	0.14	0.36	-0.17	-0.18	-0.39	0.36	-0.29	1									
9	0.32	0.20	0.44	-0.42	0.52*	-0.40	-0.40	-0.18	1								
10	-0.60*	-0.67**	-0.12	0.55*	0.39	0.10	0.69**	-0.42	-0.19	1							
11	-0.10	-0.14	-0.24	-0.03	-0.06	0.03	0.17	-0.57*	-0.23	0.43	1						
12	0.31	0.53*	-0.12	-0.39	-0.43	0.20	-0.52*	0.95**	-0.02	-0.60*	-0.56*	1					
13	0.28	0.19	0.62**	-0.49	0.05	-0.45	-0.39	-0.42	0.36	-0.11	0.32	-0.27	1				
14	0.46	0.63**	-0.24	-0.51*	-0.34	0.08	-0.63**	0.84**	0.09	-0.58*	-0.46	0.93**	-0.30	1			
15	-0.09	-0.23	0.29	-0.10	0.26	-0.38	-0.01	-0.81**	0.17	0.28	0.65**	-0.70**	0.78**	-0.66**	1		
16	0.08	-0.06	0.53*	-0.23	0.18	-0.43	-0.10	-0.73**	0.28	0.17	0.51*	-0.61*	0.92**	-0.62*	0.92**	1	
17	0.28	0.49	-0.12	-0.31	-0.40	0.27	-0.45	0.97**	-0.04	-0.57*	-0.59*	0.99**	-0.35	0.92**	-0.78**	-0.68**	1

注: \*\*在 0.01 水平 (双侧) 上显著相关; \*在 0.05 水平 (双侧) 上显著相关。

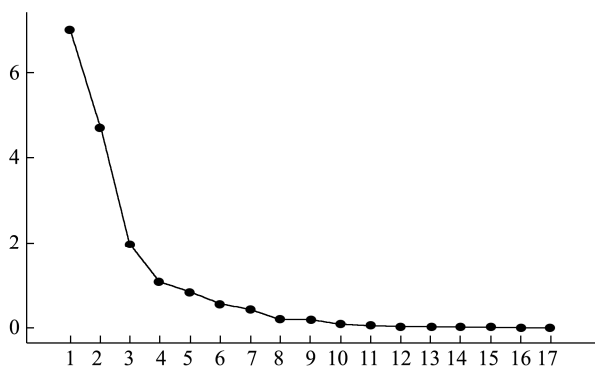


图2 碎石图

Fig.2 Gravel diagram

从碎石图 (图 2) 可发现主成分中特征值的变化趋势, 说明了保留前 4 个主成分能够概括原有数据的绝大部分信息; 由特征值大于 1 且贡献率大于 85% 的标准来看, 当提取前 4 个主成分时, 前 4 个特征值均大于 1, 其累计贡献率大于 85%, 即前 4 个主成分包含了 17 个共有成分的 86.26% 的信息 (表 6), 符合主成分分析条件; 碎石图和特征值信息对主成分的解释一致。

相关系数矩阵表 (表 5) 反映了不同批次肉豆蔻共有挥发性成分之间的相关性, 多成分之间的相互作用可反映肉豆蔻挥发油的综合质量, 由此可得 Alpha 蒎烯与芳樟醇之间正相关系数为 0.95, 反映其具有较强的正相关性; 蒎烯与  $\beta$ -蒎烯之间相关系数为 0.95, 反映了这两者具有较高的正相关性; 肉豆蔻醚与乙酸香叶酯之间相关系数为 0.92, 反映其具有较高正相关性。

表6 相关矩阵的特征值

Table 6 Characteristic values of the correlation matrix

因子	特征值 ( $\lambda$ )	方差/ %	累积/ %	因子	特征值 ( $\lambda$ )	方差/ %	累积/ %
1	7.00	41.17	41.17	9	0.17	1.02	98.96
2	4.67	27.49	68.65	10	0.09	0.53	99.48
3	1.93	11.37	80.02	11	0.05	0.27	99.75
4	1.06	6.24	86.26	12	0.02	0.14	99.89
5	0.81	4.75	91.01	13	0.01	0.07	99.96
6	0.55	3.23	94.24	14	0.01	0.04	100
7	0.43	2.5	96.74	15	0	0	100
8	0.2	1.2	97.94	16	0	0	100

表7 主成分因子的旋转载荷矩阵

Table 7 Rotational load matrix of principal component factors

因子	成分				因子	成分			
	1	2	3	4		1	2	3	4
1	0.05	0.91	0.05	0.01	10	-0.47	-0.63	-0.22	0.11
2	0.21	0.93	-0.05	-0.15	11	-0.83	0.04	-0.21	-0.29
3	0.03	-0.06	0.94	0.21	12	0.86	0.40	-0.05	-0.20
4	0.01	-0.96	-0.11	-0.04	13	-0.50	0.37	0.73	-0.02
5	-0.18	-0.36	0.05	0.84	14	0.75	0.56	-0.22	-0.03
6	0.24	-0.32	-0.49	-0.32	15	-0.86	0.03	0.39	0.05
7	-0.21	-0.86	-0.20	-0.11	16	-0.76	0.14	0.60	0.03
8	0.90	0.17	-0.14	-0.25	17	0.90	0.32	-0.09	-0.18
9	-0.01	0.35	0.29	0.81					

由表6、7可得第一主成分(PC<sub>1</sub>)特征值为7.00,贡献率为41.17%,对应的载荷量较大者为榄香素、芳樟醇、Alpha 蒎烯、甲基丁香酚,说明PC<sub>1</sub>受这几个成分的影响较大。第二主成分(PC<sub>2</sub>)特征值为4.67,贡献率为27.49%,对应的载荷量较大者为β蒎烯、蒎烯,说明PC<sub>2</sub>受这几个成分的影响比较大。第三主成分(PC<sub>3</sub>)特征值为1.93,贡献率为11.37%,对应载荷量较大者为水芹烯、乙酸香叶酯、肉豆蔻醚。第四主成分(PC<sub>4</sub>)特征值为1.06,贡献率为6.24%,对应的载荷量较大者为松油烯、(-)-4-萜品醇。各主成分中

部分变量同时也与相关系数矩阵有联系,反映了各主成分起主导作用作用的综合指标,可更好的区分出各成分所包含的具体指标成分。

4个主成分是多化学成分相互作用的结果,可体现出不同批次肉豆蔻挥发油的质量高低,而单一的化学成分则无法做综合评价。由表8中16批次肉豆蔻挥发油主成分得分、综合得分及排名可得出,排名前5的批次是S<sub>15</sub>、S<sub>10</sub>、S<sub>7</sub>、S<sub>6</sub>、S<sub>13</sub>,排名后5的批次是S<sub>14</sub>、S<sub>16</sub>、S<sub>8</sub>、S<sub>3</sub>、S<sub>11</sub>。结合性状品质记录结果来看,得分高低与其气味关系成正比,气味浓烈,得分较高;颜色越深,得分越高;从形状来看,卵圆形或椭圆形形状的肉豆蔻得分排名相对靠前,这些性状皆与2015版《中国药典》要求的性状品质相符。

从表1、2分析可得,这些样品其批次与生产企业均不一样,但其产地却有部分相同,因此其质量的高低可能与不同批次以及企业有关,另外也可能与其他因素等有一定的关系。S<sub>15</sub>批次的肉豆蔻挥发油综合得分最高,远大于其他批次得分值,这说明其质量最佳;S<sub>11</sub>批次的挥发油质量最差,更详细的影响因素还有待进一步研究。因此,可通过肉豆蔻挥发油综合得分来区分肉豆蔻挥发油的质量优劣,为其多领域的应用提供一定的参考价值。

表8 16批次肉豆蔻挥发油的主成分因子得分

Table 8 Principal component factor scores of 16 batches of nutmeg essential oil

肉豆蔻编号	F1	F1 排名	F2	F2 排名	F3	F3 排名	F4	F4 排名	综合得分	综合排名
S <sub>15</sub>	9.04	1	2.43	3	-0.56	9	-0.66	12	4.28	1
S <sub>10</sub>	-0.48	9	2.49	2	-0.59	10	2.01	2	0.55	2
S <sub>7</sub>	-0.46	8	1.40	4	2.98	1	-0.44	11	0.50	3
S <sub>6</sub>	-0.63	11	0.78	9	1.00	4	2.41	1	0.22	4
S <sub>13</sub>	-1.76	15	3.40	1	-1.23	13	0.23	6	0.08	5
S <sub>1</sub>	1.68	2	-3.09	16	1.49	3	0.27	5	0.03	6
S <sub>2</sub>	-1.31	13	1.28	6	2.35	2	-1.39	16	-0.01	7
S <sub>9</sub>	-0.43	7	-0.43	10	0.54	6	0.03	8	-0.23	8
S <sub>4</sub>	0.54	3	-2.11	12	0.74	5	0.08	7	-0.27	9
S <sub>5</sub>	-1.24	12	1.34	5	-1.02	12	-0.32	10	-0.28	10
S <sub>12</sub>	0.43	4	-1.79	11	-1.28	14	0.37	3	-0.44	11
S <sub>14</sub>	-1.44	14	0.94	8	-1.40	15	-0.87	14	-0.55	12
S <sub>16</sub>	-0.05	5	-2.65	14	-0.65	11	-0.06	9	-0.83	13
S <sub>8</sub>	-0.18	6	-2.86	15	-0.19	7	0.33	4	-0.86	14
S <sub>3</sub>	-0.49	10	-2.34	13	-1.75	16	-0.68	13	-1.09	15
S <sub>11</sub>	-3.21	16	1.20	7	-0.43	8	-1.33	15	-1.12	16

## 2.4 聚类分析结果

在聚类分析图中15.0距离处,16批次肉豆蔻挥发

油被聚为2类,S<sub>15</sub>批次聚为一类,其性状品质与2015版《中国药典》一致,其肉豆蔻醚与其他批次相比含量最高,质量最好,S<sub>1</sub>-S<sub>14</sub>、S<sub>16</sub>批次聚为另一类,质

量次之。

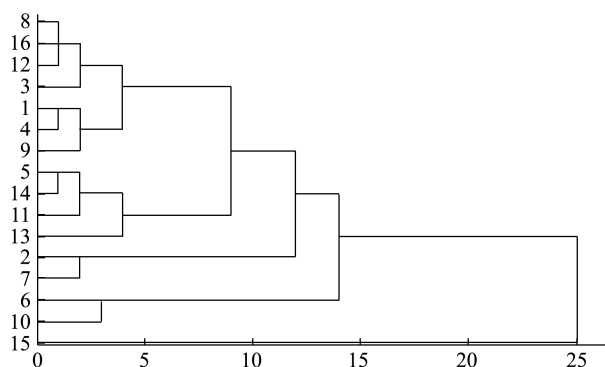


图3 16批次肉豆蔻挥发油的聚类分析树状图

Fig.3 Cluster analysis tree diagram of 16 batches of nutmeg volatile oil

肉豆蔻挥发油聚类树状图见图3。此结果与主成分分析结果一致，可以较好的体现各批次肉豆蔻挥发油共有化学成分相对含量的差异性。肉豆蔻挥发油化

学成分其含量也受采收季节、种植环境以及贮存条件等多因素影响，也是导致聚类分析结果的一些原因，此方法可以为肉豆蔻挥发油的药食两用以及质量控制提供更加科学的参考依据。

### 2.5 安全性分析

肉豆蔻挥发油中含有的黄樟素、甲基丁香酚、异丁香酚甲醚、肉豆蔻醚及榄香素成分，其既是有效成分也是有毒性成分。针对毒性及危险化学成分，我国食品药品监督管理局（SF-DA）、美国食品药品监督管理局（FDA）、FEMA对肉豆蔻危险成分做了明确的限量规定，因此在疾病治疗过程中以及化妆品制作过程中，必须在医师或有丰富经验的香精香料师指导下应用，否则会导致生命危险。现总结肉豆蔻有毒成分的使用规定：见表9。

表9 肉豆蔻多种毒性成分在不同物质中的最大限度

Table 9 Maximum of various toxic components of nutmeg in different substances

中文名称	英文名称	分子式	物质名称	限度/(mg/kg)
黄樟素	Safrole	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	食品添加剂	0
			天然精油	0
			肉及肉制品	15.0
甲基丁香酚	Methyl Eugenol	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	软饮料	10.0
			冰制品	4.8
			糖果	11.0
			焙烤食品	13.0
			果冻	52.0
异丁香酚甲醚	(E)-methyl Isoeugenol	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	无	0
肉豆蔻醚	Myristicin	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	软饮料	700
			冷饮	550
			焙烤食品	2200
			调味品	100
			肉类制品	670
			腌制品	100
榄香素	Elemicin	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> O <sub>3</sub>	按照 FEMA1788 执行	

肉豆蔻作为常用药材，其挥发油含有的主要成分包括一些有毒性成分，如黄樟素、甲基丁香酚、异丁香酚甲醚、肉豆蔻醚及榄香素等成分。研究<sup>[26]</sup>发现甲基丁香酚具有镇静、麻醉等作用，异丁香酚甲醚具有止泻、抑菌、清除甲氧基等<sup>[27,28]</sup>作用，研究<sup>[29]</sup>发现肉豆蔻挥发油致幻及中度兴奋大脑是由黄樟素、甲基丁香酚、β-没药烯、肉豆蔻醚及榄香素等成分综合作用的结果。黄樟素<sup>[30]</sup>是口腔疾病的致病原因，同时具有致幻作用，易致昏迷。2015版《中国药典》并未对有毒成分做限度要求。肉豆蔻精油可作为调味品、化妆

品等进行使用，但过量易导致危险，因此使用过程中应严格控制，或者采用炮制品来降低相关毒性成分，促进其安全性使用。

### 3 结论

肉豆蔻挥发油作为其主要成分之一，在食品、医药、日化等领域具有广阔的开发潜力。本研究通过对16批次肉豆蔻的挥发油做GC-MS分析研究，采用主成分和聚类分析对其内在共有化学成分进行分析，筛选得到4个主成分和2个类别，可以为肉豆蔻的选择

提供一定优质的生产企业以及相对较好的批次; 结合其性状品质评价, 发现肉豆蔻的气味、颜色、形状对其挥发油质量有一定影响; 同时对安全性分析进行考虑, 对肉豆蔻挥发油中的有毒性成分进行合理控制, 从而对肉豆蔻挥发油的质量进行综合分析评价, 为食品、药品及其他方面的安全使用提供一定的基础, 为肉豆蔻挥发油质量的进一步开发研究和控制提供一定的参考依据。

### 参考文献

- [1] 马存, 洗少华, 相雨, 等. 肉豆蔻药理作用研究进展[J]. 中国现代中药, 2017, 19(8): 1200-1206  
MA Cun, XIAN Shao-hua, XIANG Yu, et al. Research progress on pharmacological activities of *Myristica fragrans* Houtt [J]. Modern Chinese Medicine, 2017, 19(8): 1200-1206
- [2] 张爱武, 刘乐乐, 何学敏, 等. 肉豆蔻化学成分与药理活性的研究进展[J]. 内蒙古医科大学学报, 2014, 36(1): 85-88  
ZHANG Ai-wu, LIU Le-le, HE Xue-min, et al. The research progress of chemical composition and pharmacological activity of nutmeg [J]. Journal of Inner Mongolia Medical University, 2014, 36(1): 85-88
- [3] 国家药典委员会. 中国药典, 一部[S]. 北京: 中国医药科技出版社, 2015: 136  
National Pharmacopoeia Commission. A Pharmacopoeia of the People's Republic of China [S]. Beijing: China Pharmaceutical Science and Technology Press, 2015: 136
- [4] 国家中药管理局《中华本草》编委会. 中华本草, 蒙药卷[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 2004: 192-193  
Chinese Materia Medica Editorial Board of Chinese Materia Medica. Chinese Materia Medica, Mongolian Medicine Volume [M]. Shanghai: Shanghai Science and Technology Press, 2004: 192-193
- [5] 黄复兴. 对几种药品“药食两用”的商榷[J]. 海峡药学, 2006, 6: 191-192  
HUANG Fu-xing. Discussion on the "drug and food dual use" of several medicines [J]. Strait Pharmaceutical, 2006, 6: 191-192
- [6] 方爱娟, 徐凯节. 肉豆蔻的化学成分及生物活性研究进展[J]. 中国药业, 2013, 22(15): 113  
FANG Ai-juan, XU Kai-jie. Research progress on chemical constituents and biological activities of *Myristica fragrans* Houtt [J]. Chinese Pharmaceuticals, 2013, 22(15): 113
- [7] 杨进军. 香料植物肉豆蔻[J]. 植物杂志, 2001, 6: 11  
YANG Jin-jun. The spice plant nutmeg [J]. Plant Magazine, 2001, 6: 11
- [8] 赵秀玲. 肉豆蔻生理活性成分研究进展[J]. 中国调味品, 2013, 38(10): 1-6  
ZHAO Xiu-ling. Research progress on physiologically active components of nutmeg [J]. China Condiment, 2013, 38(10): 1-6
- [9] 黄赛金, 尹爱武, 龚灯. 肉豆蔻挥发油抑菌及抗花生油氧化作用研究[J]. 中国粮油学报, 2015, 30(5): 58-61, 66  
HUANG Sai-jin, YIN Ai-wu, GONG Deng. Antibacterial and antioxidant activities on peanut oil of volatile oil from nutmeg [J]. Journal of the Chinese Cereals and Oils Association, 2015, 30(5): 58-61, 66
- [10] 权美平. 肉豆蔻挥发油的化学成分分析及药理活性研究进展[J]. 中国调味品, 2013, 38(9): 10-13  
QUAN Mei-ping. Research progress on chemical component analysis and pharmacological activity of volatile Oils in nutmeg [J]. China Condiment, 2013, 38(9): 10-13
- [11] 贾天柱, 李浩, 周粮, 等. 肉豆蔻不同炮制品止泻作用及急性毒性比较[J]. 中国中药杂志, 1997, 22(4): 216  
JIA Tian-zhu, LI Hao, ZHOU Liang, et al. Comparison of antidiarrheal effects and acute toxicity of different processed products of *Myristica fragrans* Houtt [J]. China Journal of China Materia Medica, 1997, 22(4): 216
- [12] Husan S, Jannul. The action of anti-tumor in uterme about *Myristica fragrans* Houtt [J]. Cancer Lett, 1991, 56(3): 231
- [13] 孙婷婷. 肉豆蔻挥发油抗抑郁作用及机制研究[D]. 郑州: 河南中医学院, 2014  
SUN Ting-ting. Antidepressant effect of volatile oil of *Myristica fragrans* Houtt [D]. Zhengzhou: Henan College of Traditional Chinese Medicine, 2014
- [14] 张根荣, 胡静, 丁斐, 等. 肉豆蔻挥发性成分的气相色谱/质谱分析[J]. 时珍国医国药, 2016, 27(11): 2596-2598  
ZHANG Gen-rong, HU Jing, DING Fei, et al. Gas chromatography/mass spectrometry analysis of volatile components in *Myristica fragrans* Houtt [J]. Lishizhen Medicine and Materia Medica Research, 2016, 27(11): 2596-2598
- [15] 林杰, 卢金清, 江汉美, 等. 春、冬季采收肉豆蔻中挥发性成分分析[J]. 中国调味品, 2017, 42(3): 118-120  
LIN Jie, LU Jin-qing, JIANG Han-mei, et al. Analysis of volatile components in *Myristica fragrans* Houtt harvested in spring and winter [J]. China Condiment, 2017, 42(3): 118-120
- [16] 马可, 南星梅, 苏姗姗, 等. 肉豆蔻挥发油对低氧诱导肺动脉平滑肌细胞增殖的抑制作用及其抗氧化活性[J]. 中国药理

- 学与毒理学杂志,2018,32(7):535-542
- MA Ke, NAN Xing-mei, SU Shan-shan, et al. Inhibitory effect of volatile oil from *Myristica fragrans* on hypoxia induced proliferation of pulmonary artery smooth muscle cells and its antioxidant activity [J]. Chinese Journal of Pharmacology and Toxicology, 2018, 32(7): 535-542
- [17] 唐裕芳,曾永德,张妙玲. 商品肉豆蔻挥发油化学组成及抑菌活性研究[J].湘潭大学自然科学学报,2014,36(4):56-62
- TANG Yu-fang, ZENG Yong-de, ZHANG Miao-ling. Composition and antimicrobial activity of the volatile oil from nutmeg [J]. Journal of Xiangtan University (Natural Science Edition), 2014, 36(4): 56-62
- [18] 李力.肉豆蔻挥发油缓解慢性疼痛谱效关系研究[D].武汉:湖北中医药大学,2018
- LI Li. Study on the spectrum effect of volatile oil from nutmeg on relieving chronic pain [D]. Wuhan: Hubei University of Traditional Chinese Medicine, 2018
- [19] 弓宝,黄立标,冯锦东,等.正交实验法优化提取肉豆蔻挥发油的最佳工艺研究[J].时珍国医国药,2011,22(8):1957-1959
- GONG Bao, HUANG Li-biao, FENG Jin-dong, et al. Optimization of extraction conditions for nutmeg oil by orthogonal test [J]. Lishizhen Medicine and Materia Medica Research, 2011, 22(8): 1957-1959
- [20] 李荣,姜子涛.微波辅助水蒸气蒸馏调味香料肉豆蔻挥发油化学成分的研究[J].中国调味品,2011,36(3):102-104,108
- LI Rong, JIANG Zi-tao. Chemical composition analysis of spice grown in *Myristica fragrans* Houtt volatile oil obtained using microwave-assisted hydrodistillation [J]. China Condiment, 2011, 36(3): 102-104, 108
- [21] 好巴斯哈啦图,毕力格.正交试验法优化超临界CO<sub>2</sub>萃取蒙药肉豆蔻挥发油的工艺[J].中国民族医药杂志,2010,16(6):49-51
- GOOD Bisha, BI Li-ge. Optimization of supercritical CO<sub>2</sub> extraction of Mongolian medicine nutmeg volatile oil by orthogonal test [J]. Journal of Medicine & Pharmacy of Chinese Minorities, 2010, 16(6): 49-51
- [22] 朱星宇,陈勇强.SPSS 多元统计分析方法及应用[M].北京:清华大学出版社,2005:241-247
- ZHU Xing-yu, CHEN Yong-qiang. SPSS Multivariate Statistical Analysis Method and Application [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2005: 241-247
- [23] 傅静,张莹,李宇辉,等.基于聚类分析和主成分分析的壮瑶药三妹木 HPLC 指纹图谱研究[J].中国药房,2019,30(17):2355-2359
- FU Jing, ZHANG Ying, LI Yu-hui, et al. Study on HPLC fingerprints of Zhuang and Yao medicine *Lespedeza formosa* based on cluster analysis and principal component analysis [J]. China Pharmacy, 2019, 30(17): 2355-2359
- [24] 刘媛,臧振中,伍振峰,等.中药挥发油质量控制的现状、问题与对策[J].中草药,2018,49(24):5946-5951
- LIU Yuan, ZANG Zhen-zhong, WU Zhen-feng, et al. Current status, problems and countermeasures of quality control of volatile oils from Chinese material medica [J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2018, 49(24): 5946-5951
- [25] 赵清.不同贮存条件对医院库房中中药饮片石菖蒲质量的影响[J].当代医学,2018,24(32):143-145
- ZHAO Qing. Effect of different storage conditions on quality of Chinese herbal medicine Shichangpu in hospital stores [J]. Contemporary Medicine, 2018, 24(32): 143-145
- [26] 秦华珍,柳俊辉,李世阳,等.小茴香等三种温里药不同提取物的镇痛作用观察[J].广西中医药,2009,32(1):50-53
- QIN Hua-zhen, LIU Jun-hui, LI Shi-yang, et al. Observation of analgesic effects of different extracts of fennel and other three kinds of medicinal herbs [J]. Guangxi Journal of Traditional Chinese Medicine, 2009, 32(1): 50-53
- [27] 李荣,孙健平,姜子涛.肉豆蔻精油抗氧化性能及清除自由基能力的研究[J].食品研究与开发,2009,30(11):75
- LI Rong, SUN Jian-ping, JIANG Zi-tao. Study on antioxidant activity and free radical scavenging ability of nutmeg essential oil [J]. Food Research and Development, 2009, 30(11): 75
- [28] 贾天柱,李浩,周粮,等.肉豆蔻不同炮制品止泻作用及急性毒性比较[J].中国中药杂志,1997,22(4):216
- JIA Tian-zhu, LI Hao, ZHOU Liang, et al. Comparison of antidiarrheal effects and acute toxicity of different processed products of nutmeg [J]. China Journal of China Materia Medica, 1997, 22(4): 216
- [29] 袁子民,王静,贾天柱.肉豆蔻挥发油透过大鼠血脑屏障的化学成分研究[J].中成药,2007,3:442-443
- YUAN Zi-min, WANG Jing, JIA Tian-zhu. Study on the chemical constituents of the volatile oil of nutmeg passing through the blood brain barrier in rats [J]. Chinese Traditional Patent Medicine, 2007,3: 442-443
- [30] Hung S L, Chen Y L, Chen Y T. Effects of safrole on the de-fensive functions of human neutrophils [J]. J. Periodontal Res., 2003, 38(2): 130-134