

基于抑菌活性成分的 薰衣草精油组效关系研究

符继红, 唐 军, 廖 享, 高 晶

(新疆大学理化测试中心, 新疆 乌鲁木齐 830046)

摘要: 基于气相色谱-质谱联用(GC/MS)分析, 建立了薰衣草精油的化学成分与其抑制金黄色葡萄球菌的组效关系模型, 并寻找与药效显著相关的成分。通过分析新疆 3 个不同品种(C-197(2)、法国蓝、H-701)的 17 批薰衣草精油样品, 以 GC/MS 谱图结合保留指数(RI)对复杂未知物进行定性分析, 确定了 39 个特征峰。采用平板菌落计数法检测薰衣草精油对痤疮主要病原菌的抑菌活性, 以半抑制浓度 IC_{50} 为评价指标, 对特征峰的相对峰面积进行主成分分析(PCA), 从而将薰衣草精油分成 3 个类别, 其中特征变量组分为芳樟醇和薰衣草醇类别样品表现出较强的抑菌活性。采用偏最小二乘(PLS)法研究薰衣草精油化学组成与抑菌活性的相关性, 结果表明, 抑制金黄色葡萄球菌贡献最大的物质为芳樟醇, 其余依次为薰衣草醇、氧化石竹烯、 α -松油醇、隐品酮、顺式-罗勒烯、橙花叔醇、芳樟醇氧化物和 τ -萜澄茄醇。

关键词: 薰衣草精油; 抑菌活性; 主成分分析(PCA); 偏最小二乘(PLS); 组效关系

中图分类号: O657.63

文献标志码: A

文章编号: 1004-2997(2015)05-0403-08

doi: 10.7538/zpxb.youxian.2015.0033

Study on Composition-Activity Relationship of Lavender Essential Oil Based on Antibacterial Activity

FU Ji-hong, TANG Jun, LIAO Xiang, GAO Jing

(Center for Physical and Chemical Analysis, Xinjiang University, Urumqi 830046, China)

Abstract: The chemical composition-antibacterial activity relationship model of lavender essential oil was established to recognize the active compounds base on gas chromatography-mass spectrometry (GC/MS). Seventeen volatile oil samples collected in Xinjiang which belong to three different lavender species (C-197(2), French blue, H-701) were analyzed by GC/MS. In the three varieties of lavender, 39 characteristic peaks are identified by mass spectral data and retention indices from the literature. Functional properties of the essential oils were checked by determining antibacterial activity against *Staphylococcus aureus* and the IC_{50} value was determined. Principal component analysis (PCA) identified three main chemical clusters among lavender essential oils. PCA analy-

收稿日期: 2014-10-14; 修回日期: 2014-12-12

基金项目: 新疆高校科研计划科学研究重点项目(XJEDU2012I14); 新疆大学博士科研启动基金(BS120135); 新疆维吾尔自治区自然科学基金(2012211A016)资助

作者简介: 符继红(1977—), 女(汉族), 新疆人, 博士, 副教授, 从事天然产物研究。E-mail: fjh.518@163.com

网络出版时间: 2015-06-02; 网络出版地址: <http://www.cnki.net/kcms/detail/11.2979.TH.20150602.0851.007.html>

sis shows that the essential oils belong to the linalool and lavandulol cluster, which are the most antimicrobial activity. The chemical composition-antibacterial activity relationship of lavender essential oil was investigated by partial least squares analyses (PLS). The results show that linalool, lavandulol, caryophyllene oxide, α -terpineol, cryptone, *cis*-ocimene, nerolidol, linalool oxide and τ -cadinol are significantly related to antibacterial activity according to PLS analyses.

Key words: lavender essential oils; antibacterial activity; principal component analysis (PCA); partial least squares regression (PLS); composition-activity relationship

薰衣草 (*Lavandula angustifolia* Mill.) 是唇形科薰衣草属植物^[1]。我国最大的薰衣草种植基地在新疆伊犁, 约占全国总种植面积的 95%, 是世界三大薰衣草种植基地之一。薰衣草精油作为薰衣草花穗的提取物, 不仅广泛用于化妆品中, 还是一种传统的中药。有研究表明, 薰衣草精油对痤疮、皮炎和湿疹等皮肤病具有很好的疗效^[3-5], 而痤疮是一种最常见的慢性炎症性毛囊皮脂腺疾病。由于薰衣草精油的化学成分复杂, 其治疗痤疮的主要活性成分尚不清楚。但有研究表明, 在感染性痤疮的皮损中, 金黄色葡萄球菌为主要病原菌, 它与痤疮的感染及炎症的形成有着密切的关系, 当金黄色葡萄球菌感染得到控制时, 痤疮将明显好转^[6-7]。用药物减少痤疮主要致病菌的数量是治疗痤疮的主要途径之一。目前主要使用抗生素对痤疮进行治疗, 但长期使用易引起耐药菌株的出现, 因此寻找一种有效、安全的治疗方法非常必要。

薰衣草精油是一种潜在的广谱抗菌物质, 对金黄色葡萄球菌等多种病菌具有较强的抑菌活性^[8-10]。但在目前的研究中, 生物活性检测只能评价薰衣草精油对金黄色葡萄球菌的总体抑菌性强弱, 却无法识别薰衣草精油治疗痤疮的活性成分。中药组效关系 (combination-activity relationship, CAR) 为研究化学组成与药效的相关性提供了良好的解决思路。该方法采用化学计量学方法构建薰衣草精油组分与抑菌活性之间的数学模型, 通过研究指纹图谱特征峰与其活性相关性, 寻找与生物活性显著相关的成分, 实现对活性成分的辨识^[11-12]。

本研究拟采用气相色谱-质谱 (GC/MS) 联用技术分析薰衣草精油的化学成分, 结合

薰衣草精油对金黄色葡萄球菌的抑菌活性测试结果, 采用无监督的主成分分析法 (principal component analysis, PCA) 和有监督的偏最小二乘法 (partial least squares, PLS) 等化学计量学方法, 通过特征峰与生理活性之间的相关性来分析筛选活性成分, 以揭示薰衣草精油治疗痤疮的活性组分, 为相关药物的研究开发提供科学依据。

1 实验部分

1.1 仪器与试剂

QP2010 气相色谱-质谱联用仪: 日本岛津公司产品。金黄色葡萄球菌 (*Staphylococcus aureus*): 由新疆大学生命科学与技术学院微生物实验室提供; 芳樟醇标准品: 阿拉丁试剂有限公司产品; 正构烷烃标准品 $C_5 \sim C_{24}$: 上海试剂一厂产品; 牛肉膏、蛋白胨、琼脂: 国药集团化学试剂有限公司产品; 氯化钠、氢氧化钠、丙酮、无水硫酸钠 (分析纯): 天津市百世化工有限公司产品。实验所用薰衣草为新疆伊犁盛花期 C-197 (2)、法国蓝 (French blue) 和 H-701 三个薰衣草品种的花穗共 17 批, 采自大量种植薰衣草的新疆伊犁生产建设兵团 65 团、69 团、70 团和 71 团, 各样本经新疆药物研究所杨伟俊博士鉴定, 并存放于新疆药物研究所标本室。

1.2 薰衣草精油的提取

准确称取 20.0 g 干燥的薰衣草花粉末样品, 置于 500 mL 圆底烧瓶中, 加入 240 mL 蒸馏水, 用挥发油提取器提取 4 h, 得到黄色透明、具有特殊浓郁气味的精油, 用无水硫酸钠干燥, 低温密封保存。

1.3 菌悬液的制备

分别称取 3 g 牛肉膏, 10 g 蛋白胨, 5 g 氯

化钠和 20 g 琼脂,加入 1 000 mL 蒸馏水,调至 pH 7.0~7.2,制备牛肉膏蛋白胨培养基。将金黄色葡萄球菌接种于培养基中,于 37 ℃ 培养 24 h 进行活化。然后,将金黄色葡萄球菌菌种转移到营养肉汤液体培养基中进行培养,37 ℃ 培养 18~24 h 后取出。采用平板培养计数法测定菌悬液浓度,然后将其稀释至含菌量为 1×10^4 CFU/mL 的菌悬液,备用。

1.4 半抑制浓度 (IC_{50}) 的测定

移取 0.375 mL 薰衣草精油,在振荡条件下用丙酮稀释至 8.33%、4.17%、2.08%、1.04% 和 0.52% 等一系列浓度,然后分别移取 0.75 mL 溶液到无菌培养皿中,与 15 mL 培养基充分混匀,静置凝固后,制成含药液平板。再分别移取 100 μ L 菌液,涂于平板上(重复 3 次),用丙酮做对照,于 37 ℃ 培养 24 h 后,用平板菌落计数法计算菌落数。以抑菌率为纵坐标,薰衣草精油浓度为横坐标绘制标准曲线,计算抑菌率为 50% 时的半抑制浓度 IC_{50} 值。

1.5 实验条件

1.5.1 色谱条件 色谱柱:Rtx-5 毛细管柱 (30 m $\times$ 0.25 mm $\times$ 0.25 μ m);升温程序:柱温 50 ℃,保持 5 min,以 2 ℃/min 升至 100 ℃,保持 4 min,再以 8 ℃/min 升至 250 ℃;载气(He)流速 1.0 mL/min;进样量 0.4 μ L;分流比 30:1。

1.5.2 质谱条件 电子轰击(EI)离子源,电子能量 70 eV,传输线温度 250 ℃,离子源温度 200 ℃,质量扫描范围 m/z 30~500。

1.6 保留指数的测定

取 $C_5 \sim C_{24}$ 正构烷烃标准品,用与样品相同的分析条件测定正构烷烃的保留时间,并计算化合物的保留指数(RI)^[13]。通过谱库检索、化合物保留指数的计算值与 NIST 数据库在相同色谱柱 Rtx-5 上的 RI 文献检索值比对,对薰衣草精油组分进行准确定性。

2 结果与讨论

2.1 薰衣草精油的 GC/MS 分析

为了使色谱峰分离较好、分布均匀,对进样方式、程序升温条件、气化室温度等色谱条件进行了优化,在优化参数下对 17 批薰衣草精油样品进行 GC/MS 分析,其总离子流图示于图 1。在 GC 条件下,同一样品连续进样 5

次,主要色谱峰保留时间的相对标准偏差(RSD)小于 0.05%,峰面积的相对标准偏差小于 2.8%;平行制备 5 份样品,分别进样分析,主要色谱峰保留时间的 RSD 小于 0.1%,峰面积的 RSD 小于 4.3%。对同一样品分别在 0、2、5、8、10、24 h 进行测定,主要色谱峰保留时间的 RSD 小于 0.1%,峰面积的 RSD 小于 3.1%。以上结果表明,本方法的精密度、重现性及样品稳定性良好。

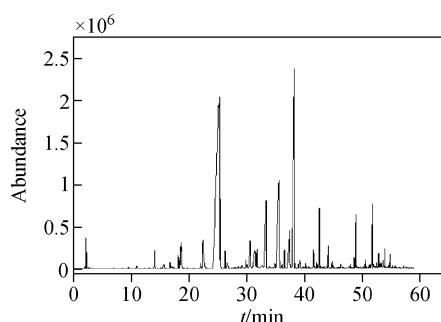


图 1 薰衣草精油的总离子流图
Fig. 1 Total ion chromatogram
of the lavender essential oil

由于植物精油的化学成分复杂,仅依靠质谱的匹配度来确定相应的化合物存在一定的不确定性。将样品质谱图经计算机数据库检索,结合保留指数 RI 进行验证,可极大地提高鉴定结果的准确性。本实验应用此方法确定了薰衣草精油中的 39 个化学成分,详情列于表 1。应用峰面积归一法确定了薰衣草精油样品中化学成分的相对百分含量,各化合物的峰面积相对百分含量列于表 2,其中样品 A、B 和 C 分别对应薰衣草品种 C-197(2)、法国蓝和 H-701。由实验结果可见,薰衣草精油中以单萜氧化物类化合物为主,主要成分为芳樟醇(含量大于 34%)和乙酸芳樟酯(含量大于 20%),其次为乙酸薰衣草酯、 α -松油醇、乙酸香叶酯、橙花叔醇和香叶醇等。不同品种薰衣草精油中的化学成分及含量存在一定的差异,其中 C-197(2)样品 A_1 、 A_2 和 A_3 的芳樟醇含量最高(大于 42%)。

2.2 薰衣草精油的抑菌活性

平板菌落计数法最大的优点是可获得活菌的统计信息,因此被广泛应用于生物制品的检测。本工作采用平板菌落计数法检测了 17 批

表 1 薰衣草精油的化学成分
Table 1 Chemical compositions of lavender essential oils

峰号	化合物	保留时间/min	保留指数	
			实验值	文献值
1	莰烯 Camphene	10.83	950	953
2	1-辛烯-3-醇 1-Octen-3-ol	13.80	985	986
3	β 月桂烯 β -Myrcene	15.42	988	990
4	3-辛酮 3-Octanone	16.63	990	994
5	乙酸己基酯 Hexyl acetate	16.87	1013	1011
6	柠檬烯 Limonene	18.02	1024	1028
7	1,8-桉叶素 1,8-Cineole	18.28	1030	1033
8	顺式-罗勒烯 <i>cis</i> -Ocimene	18.49	1036	1038
9	β 反式-罗勒烯 β <i>trans</i> -Ocimene	18.66	1045	1048
10	芳樟醇氧化物 Linalool oxide	21.92	1086	1088
11	α 异松油烯 α -Terpinolene	22.38	1087	1091
12	脱氢芳樟醇 Hotrienol	24.87	1112	1101
13	芳樟醇 Linalool	25.23	1107	1105
14	6-甲基-3,5-庚二烯-2-酮 6-Methyl-3,5-heptadien-2-one	26.17	1108	1106
15	1-辛烯-3-醇乙酸酯 1-Octen-3-yl acetate	29.75	1117	1114
16	樟脑 Camphor	29.92	1141	1143
17	橙花醚 Nerol oxide	30.59	1147	1149
18	薰衣草醇 Lavandulol	31.53	1174	1175
19	α -松油醇 α -Terpineol	33.21	1192	1191
20	丁酸己酯 Hexyl butyrate	35.34	1197	1199
21	香叶醇 <i>cis</i> -Geraniol	35.76	1233	1230
22	甲酸异茨酯 Isobornyl formate	36.43	1235	1239
23	隐品酮 Cryptone	37.24	1180	1184
24	枯茗醛 Cuminal	37.64	1236	1239
25	乙酸芳樟酯 Linalyl acetate	38.51	1262	1264
26	水芹醛 Phellandral	40.06	1277	1273
27	檀油醇 Teresantalol	41.54	1289	1286
28	枯茗醇 Cuminol	42.02	1280	1290
29	α -乙酸松油酯 α -Terpenyl acetate	42.28	1345	1351
30	乙酸薰衣草酯 Lavandulyl acetate	42.45	1376	1371
31	乙酸香叶酯 Geranyl acetate	43.12	1386	1383
32	檀香烯 Santalene	45.23	1412	1417
33	石竹烯 Caryophyllene	46.01	1420	1422
34	β 法呢烯 β -Farnesene	46.89	1456	1446
35	大牛儿烯 D Germacrene D	47.57	1481	1485
36	τ 萜澄茄醇 τ -Cadinol	48.85	1558	1563
37	氧化石竹烯 Caryophyllene oxide	49.23	1580	1584
38	橙花叔醇 Nerolidol	52.12	1647	1648
39	六氢合金欢丙酮 Hexahydrofarnesyl acetone	54.75	1849	1845

注:文献值是化合物在 Rtx-5 色谱柱上的保留指数

表 2 17 批薰衣草精油样品的特征峰面积相对百分含量

Table 2 Relative percentage content of each characteristic peak of 17 batches lavender essential oils

峰号	样品编号												
	A ₁	A ₂	A ₃	B ₁	B ₂	B ₃	B ₄	B ₅	B ₆ ~B ₁₀ *	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄
1	—	—	—	0.1	—	0.12	—	—		0.08	—	—	—
2	—	—	—	—	0.1	0.18	0.11	0.14		—	0.2	0.16	0.11
3	0.75	0.65	0.66	0.64	0.4	0.61	0.36	0.24		0.96	0.52	0.59	0.35
4	0.21	0.25	0.26	—	—	—	—	—		—	—	—	—
5	0.37	0.46	0.42	0.3	0.24	0.28	0.16	0.18		0.19	0.17	0.17	—
6	0.16	0.19	0.23	0.2	0.16	0.24	0.10	0.10		0.28	0.17	0.20	0.11
7	0.85	1.07	0.87	0.75	0.54	0.81	0.47	0.40		1.00	0.84	0.80	0.47
8	2.82	2.47	1.91	0.52	0.4	0.69	0.56	0.30		1.06	0.74	0.81	0.38
9	0.7	0.59	0.66	0.65	0.49	0.60	0.55	0.19		0.93	0.66	0.70	0.45
10	1.05	1.34	1.38	2.92	2.85	1.46	1.04	2.28		0.83	0.98	0.70	0.85
11	0.18	0.15	0.19	0.16	0.11	0.17	0.12	—		0.22	0.16	0.18	0.11
12	0.32	0.33	0.34	0.44	0.59	0.5	0.37	0.58		0.22	0.36	0.23	0.29
13	42.67	44.93	50.37	35.78	35.13	36.08	31.28	32.51		38.85	36.79	37.30	27.27
14	—	—	—	0.16	0.16	—	—	0.17		—	—	—	—
15	—	—	—	—	2.28	2.29	2.00	1.86		0.92	0.93	0.94	0.83
16	0.11	0.12	0.12	0.19	1.27	0.27	0.2	0.26		0.3	0.24	0.24	0.24
17	—	0.1	0.12	0.26	0.3	0.28	0.23	0.25		—	0.12	0.10	0.13
18	3.77	3.79	4.46	—	0.38	0.86	1.6	—		3.03	2.81	2.80	1.51
19	5.22	4.68	6.15	4.34	4.01	3.54	3.03	2.91		5.58	4.79	5.06	4.48
20	0.86	0.87	0.79	—	—	—	—	—		0.39	0.44	0.40	0.4
21	2.78	2.43	3.14	0.19	2.12	—	1.82	1.61		2.92	2.49	2.70	2.57
22	—	—	—	0.17	0.15	—	—	—		—	—	—	—
23	0.4	0.29	0.38	0.44	0.53	0.58	0.36	0.76		0.55	0.57	0.44	0.75
24	0.22	0.2	0.19	0.39	0.36	0.37	0.34	0.45		0.32	0.31	0.28	0.46
25	21.33	21.36	13.69	16.03	19.81	22.21	27.68	27.34		27.57	31.82	29.17	17.72
26	—	—	—	0.1	—	0.12	0.1	0.15		—	0.13	0.10	0.16
27	—	—	—	0.23	0.2	0.15	0.22	0.21		—	0.11	0.12	0.24
28	—	—	—	0.16	0.13	0.1	0.12	0.18		—	0.13	0.11	0.2
29	—	—	—	0.1	0.16	—	0.22	0.22		—	—	—	—
30	4.04	3.85	3.89	14.6	15	14.15	14.42	13.51		1.35	1.20	1.24	2.05
31	3.25	3.05	2.74	2.75	2.32	2.3	2.36	1.69		3.48	2.82	3.43	2.98
32	—	—	—	0.58	0.47	0.55	0.61	0.72		0.4	0.45	0.43	0.66
33	—	—	—	—	—	—	—	—		1.16	1.0	1.99	2.53
34	1.13	0.65	0.33	0.34	0.39	0.47	0.89	0.51		0.29	0.33	0.40	0.65
35	—	—	—	0.15	0.1	0	0.32	0.21		0.44	0.48	0.49	0.84
36	—	—	—	0.26	0.2	0.16	0.19	0.27		0.16	0.21	0.25	0.63
37	1.52	1.6	0.95	3.28	2.78	2.77	2.52	3.37		2.06	2.09	2.34	3.18
38	3.03	2.39	1.97	2.58	2.14	2.32	3.26	2.14		3.55	4.88	3.69	3.44
39	—	—	—	0.17	0.2	—	—	0.24		—	0.11	0.15	0.39

注: * 表示因篇幅所限,省略 B₆~B₁₀号样品的数据;—表示未检出;A 为 C-197(2);B 为法国蓝;C 为 H-701

薰衣草精油对金黄色葡萄球菌的抑菌活性,并以抑菌率为纵坐标,样品不同稀释浓度为横坐标,绘制标准曲线,计算抑菌率为 50% 时的半抑制浓度 IC_{50} 值,结果列于表 3。因为半抑制

浓度 IC_{50} 值越小,样品的抑菌活性越高,结合实验结果可知,薰衣草精油 C-197(2) 样品 A_1 、 A_2 和 A_3 均具有较高的抑菌活性,其中芳樟醇标准品表现出最强的抑菌活性。

表 3 薰衣草精油对金黄色葡萄球菌的半抑制浓度 IC_{50}

Table 3 The half inhibit concentration IC_{50} of lavender essential oils

样品	半抑制浓度 IC_{50}	样品	半抑制浓度 IC_{50}	样品	半抑制浓度 IC_{50}
A_1	0.600 ± 0.242	B_4	2.876 ± 0.028	B_{10}	4.684 ± 0.215
A_2	0.771 ± 0.317	B_5	2.243 ± 0.076	C_1	0.921 ± 0.037
A_3	0.530 ± 0.734	B_6	1.794 ± 0.049	C_2	2.479 ± 0.081
B_1	1.891 ± 0.119	B_7	1.407 ± 0.201	C_3	2.062 ± 0.067
B_2	1.675 ± 0.048	B_8	2.596 ± 0.352	C_4	1.843 ± 0.283
B_3	1.722 ± 0.036	B_9	2.286 ± 0.186	芳樟醇	0.168 ± 0.041

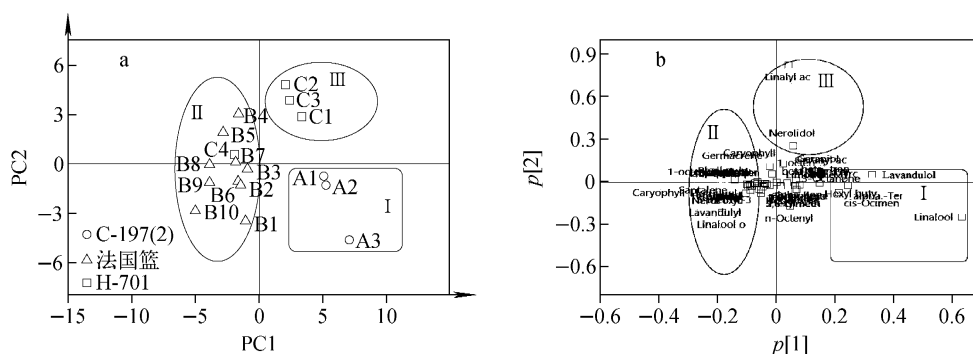
注: A 为 C-197(2); B 为法国蓝; C 为 H-701

2.3 活性成分的辨识

主成分分析是对数据压缩和信息提取的有效方法,仅用部分主成分就可表达原有变量的主要信息。偏最小二乘法只用一个线性模型就能描述独立变量 y 与预测变量组 x 之间的关系,可以较好地解决许多以往用普通多元回归无法解决的问题,使数据分析更准确可靠。本实验数据采用 Simca-P11 软件进行分析。

以薰衣草精油样品的 GC/MS 数据为研究对象,用 39 个色谱峰的峰面积相对百分含量构建主成分分析数据矩阵,对所构建的数据标准化处理后进行主成分分析。分析结果表明,第一主成分(PC1)方差为 47.1%,第二主成分(PC2)

方差为 24.7%,前两个累积方差贡献率为 71.8%,所以前两个主成分可以代表原数据的主要信息。主成分 PC1 和 PC2 得分分布图示于图 2a,变量载荷图示于图 2b,载荷图可反映所有化学成分之间的相关性结构,图 2a 和图 2b 在分布和趋势上具有一致性和可比性。经过对比分析,所有精油样品被分成 I、II、III 三个类别,其中 I 类包括 C-197(2) 样品 A_1 、 A_2 和 A_3 ,为抑菌实验中活性最高的样品,特征变量组分主要为芳樟醇和薰衣草醇;II 类主要包括法国蓝样品,特征变量组分主要为乙酸薰衣草酯和芳樟醇氧化物;III 类包括 H-701 样品 C_1 、 C_2 和 C_3 ,特征变量组分主要为乙酸芳樟酯和橙花叔醇。



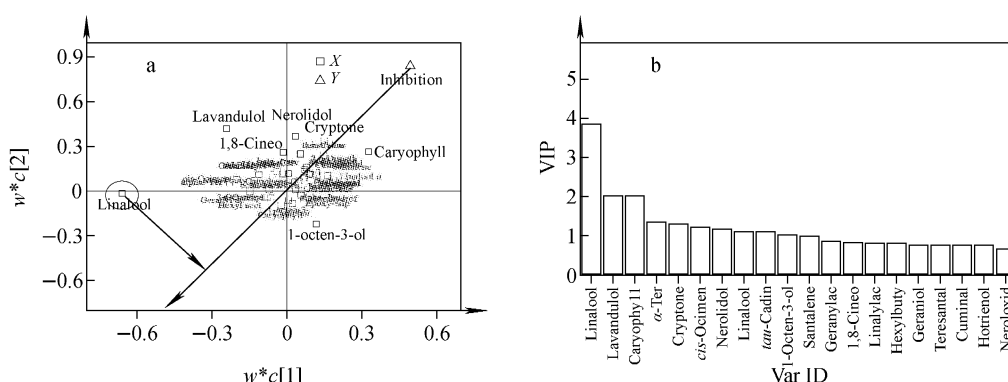
注: a. 主成分分布图; b. 主成分 PC1 和 PC2 变量载荷图

图 2 薰衣草精油化学成分主成分分析

Fig. 2 Principal component analysis involving compositions of lavender essential oils

采用 PLS 回归法分析薰衣草精油的化学成分与抑菌生物活性的相关性,其载荷权重图示于图 3a,变异权重系数值直方图示于图 3b。其中, w^* 和 c 分别为精油化学组成变量 x 和半抑制浓度 y (IC_{50}) 变量的载荷权重,可以反应 x 变量和 y 变量之间的相关性质和相关结构。图中沿 y 通过原点的直线, IC_{50} 值减小,抑菌活性增大。根据载荷图、变量权重系数(variation influence parameter, VIP)等信息可以判断 x 对 y 的贡献大小, $VIP > 1$ 的变量被认为是抑菌

活性有较大的贡献。数据分析结果表明,对抑制金黄色葡萄球菌有较大贡献的物质为芳樟醇、薰衣草醇和氧化石竹烯,其次为 α -松油醇、隐品酮、顺式-罗勒烯、橙花叔醇、芳樟醇氧化物和 τ -萜澄茄醇。从图 3a 中可以看出,芳樟醇附近没有化合物,说明芳樟醇协同效应弱,且 $VIP > 3$,是抑制金黄色葡萄球菌贡献最大的生物活性物质,这与芳樟醇含量高的样品 A_1 、 A_2 和 A_3 抑菌活性最大的实验结果一致;其余化合物的抑菌活性可能存在协同作用。



注:a. 载荷图;b. 变异权重系数值直方图

图3 薰衣草精油特征峰与半抑制浓度 IC_{50} 的 PLS 分析结果

Fig. 3 PLS of lavender essential oils based on characteristic peaks and IC_{50}

3 结论

本研究基于 GC/MS 指纹图谱数据,通过化学计量学分析方法探讨薰衣草精油化学成分与生物活性的相关性。实验结果表明,C-197(2)品种 A_1 、 A_2 和 A_3 的芳樟醇含量最高,且抑菌活性最大,PCA 分析将其归为一类,特征变量组分为芳樟醇和薰衣草醇。PLS 分析结果表明,芳樟醇是抑制金黄色葡萄球菌贡献最大的生物活性物质。本研究有助于揭示薰衣草精油治疗痤疮的药效物质基础,并为薰衣草精油产品的深入开发和药物研发提供依据。

参考文献:

- [1] 刘勇民. 维吾尔药志[M]. 新疆:新疆科技卫生出版社,1999:905.
- [2] TEUSCHER E, BRINCKMANN J A, LINDENMAIER M P. Medicinal spices: A handbook of culinary herbs, spices, spices mixtures

- and their essential oils[M]. Stuttgart, Germany, Medpharm Scientific Publishers, 2006: 309-310.
- [3] CAVANAGH H M, WILKINSON J M. Biological activities of lavender essential oil[J]. Phytother Res, 2002, 16(4): 301-308.
- [4] 张群,扎灵丽. 薰衣草的研究和应用[J]. 时珍国医国药,2008,19(6):1 312-1 314. ZHANG Qun, ZA Lingli. Research and application of lavender[J]. Shizhen Journal of Traditional Chinese Medicine Research, 2008, 19(6): 1 312-1 314(in Chinese).
- [5] 王玉芹,孙亚军,施献儿. 薰衣草精油的化学成分与药理活性[J]. 国外医药:植物药分册,2004, 19(1):5-8. WANG Yuqin, SUN Yajun, SHI Xianer. The chemical constituents and pharmacological activities of lavender essential oil[J]. Foreign Medical Sciences: Section of Pharmacology, 2004, 19(1): 5-8(in Chinese).
- [6] 胡忆雪,姚雷,黄健,等. 茶树油对 3 种痤疮致病

- 菌的抑制作用研究[J]. 上海交通大学学报, 2011, 29(1): 88-92.
- HU Yixue, YAO Lei, HUANG Jian, et al. Antimicrobial activity of tea tree oil against acne bacterias[J]. Journal of Shanghai Jiaotong University, 2011, 29(1): 88-92(in Chinese).
- [7] 陈红斌, 陈钧. 大黄对痤疮主要致病菌的体外抑菌作用研究[J]. 中药药理与临床, 2006, 22(3/4): 111-113.
- CHEN Hongbin, CHEN Jun. Bacteriostatic action of Rhubarb on main pathogenic bacterium of acnes[J]. Pharmacology and Clinics of Chinese Materia Medica, 2006, 22(3/4): 111-113 (in Chinese).
- [8] LIS-BALCLIN M, HART S. Studies on the mode of action of the essential oil of lavender (*Lavandula angustifolia* P. Miller)[J]. Phytother Res, 1999, 13(6): 540-542.
- [9] DADALIOGLU I, EVRENDILEK G A. Chemical compositions and antibacterial effects of essential oils of turkish oregano (*Origanum minutiflorum*), bay laurel (*Laurus nobilis*), spanish lavender (*Lavandula stoechas* L.), and fennel (*Foeniculum vulgare*) on common foodborne pathogens[J]. J Agric Food Chem, 2004, 52(26): 8 255-8 260.
- [10] SOKOVIĆ M, GLAMOČLIJA J, PETAR D M, et al. Antibacterial effects of the essential oils of commonly consumed medicinal herbs using an in vitro model [J]. Molecules, 2010, 15(11): 7 532-7 546.
- [11] 王毅, 程翼宇. 中药组效关系辨识方法学与计算理论研究思路与策略[J]. 中国天然药物, 2003, 1(3): 178-181.
- WANG Yi, CHENG Yiyu. A strategy for studies on the computational theory and methodology for identifying the composition-activity relationship of chinese medicine[J]. Chinese Journal of Natural Medicines, 2003, 1(3): 178-181(in Chinese).
- [12] MILADINOVIĆ D L, BUDIMIR S I, MIHAJLOV-KRSTEV T M, et al. Investigation of the chemical composition-antibacterial activity relationship of essential oils by chemometric methods[J]. Anal Bioanal Chem, 2012, 403(4): 1 007-1 018.
- [13] van den DOOL H, KRATZ P D. A generalization of the retention index system including linear temperature programmed gas-liquid partition chromatography[J]. J Chromatogr A, 1963, 11: 463-471.