

广西产香茅草挥发油的化学成分分析*

GC-MS Analysis of Chemical Components of Essential Oil from *Cymbopogon citratus* (DC.) Stapf in Guangxi

董晓敏¹, 刘布鸣^{1**}, 林霄¹, 莫建光²

DONG Xiao-min¹, LIU Bu-ming^{1**}, LIN Xiao¹, MO Jian-guang²

(1. 广西中医药研究院, 广西南宁 530022; 2. 广西分析测试研究中心, 广西南宁 530022)

(1. Guangxi Institute of Traditional Medical and Pharmaceutical Sciences, Nanning, Guangxi, 530022, China; 2. Guangxi Research Center of Analysis and Testing, Nanning, Guangxi, 530022, China)

摘要:采用水蒸气蒸馏法从广西产香茅草 [*Cymbopogon citratus* (DC.) Stapf] 中提取挥发油, 利用气相色谱-质谱-计算机 (GC-MS-DS) 联用技术对挥发油的化学组成进行分析鉴定, 确认了其中的39种成分, 占挥发油色谱总馏出峰面积的90%以上。广西产香茅油主要化学成分为月桂烯、橙花醛和柠檬醛。

关键词:成分分析 挥发油 香茅草 气相色谱-质谱-计算机联用

中图分类号: O657.63, R284.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 1005-9164(2009)03-0302-03

Abstract: The volatile oil was extracted from *Cymbopogon citratus* (DC.) Stapf by steam distillation, and its chemical composition was analyzed and identified by GC-MS-DS method. As a result, 39 components were identified, which accounted for over 90% of the total volatile oil. The main constituents in the volatile oils from *Cymbopogon citratus* (DC.) Stapf were found to be myrcene, neral and citral.

Key words: analysis of chemical constituents, volatile oil, *Cymbopogon citratus*, GC-MS-DS

禾本科植物香茅 [*Cymbopogon citratus* (DC.) Stapf] 在我国华南、西南、福建、台湾地区有栽培。香茅全草入药, 其性味辛温甘, 具有祛风通络、温中止泻、止痛的作用, 临床用于治疗感冒头身疼痛、风寒湿痹、脘腹冷痛、泄泻、跌打损伤等疾病^[1]。我国的香茅草资源十分丰富, 在广东、云南、四川等地民间有用香茅或香茅油治病的习惯, 文献^[2]研究报道香茅内含物具有抗菌、抗疟、抗癌、利尿降压等作用, 其中的香叶醛和橙花醛已被证实为香茅精油中的抗菌活性成分, 而月桂烯则为镇痛作用的主要成分。香茅油除用作肥皂、香水和化妆品的香料外, 还用于合成薄荷脑、消毒药剂, 如杀虫剂、驱蚊药等。已有学者对杭州栽培、引种自非洲的香茅叶挥发油^[3]和广东湛江栽培的香茅^[4]进行了初步的研究, 而广西产香茅油化学成分

研究未见报道。笔者应用现代分析技术首次对广西产香茅油进行了成分分析, 为开发利用广西本地资源提供科学数据。

1 实验部分

1.1 仪器与材料

仪器: 美国 HP 6890A 气相色谱-5973N 质谱联用仪。

香茅植物来源于广西田林, 经广西中医药研究院赖茂祥研究员鉴定为禾本科香茅 [*Cymbopogon citratus* (DC.) Stapf]。

1.2 实验方法

1.2.1 挥发油的提取

取香茅草, 按《中华人民共和国药典》2005年版一部附录^[5]中挥发油测定方法中的水蒸气蒸馏方法, 经水蒸气蒸馏得到淡黄色、具有浓郁柠檬香气的透明液体, 经无水硫酸钠干燥后得香茅油, 收油率为0.4%。

1.2.2 气相色谱-质谱分析条件

HP-5MS 石英毛细管色谱柱, 30 m × 0.25 mm × 0.25 μm; 柱温, 程序升温: 60~240 °C, 初始温度60

收稿日期: 2009-03-05

修回日期: 2009-04-30

作者简介: 董晓敏(1984-), 女, 硕士研究生, 主要从事药物分析测试与质量标准研究。

* 广西科学基金应用基础研究专项项目(桂科基0832024)资助。

** 通讯作者。

℃保持2min,升温速率5℃/min升至90℃保持2min,升温速率5℃/min升至130℃,升温速率10℃/min升至150℃保持1min,升温速率10℃/min升至200℃保持2min,升温速率10℃/min升至240℃;载气:He,柱流量1.0 ml/min,分流比:200:1;进样口温度250℃,EI电离方式,离子源温度250℃;电离能量70 eV;扫描质量范围:35~500 amu;进样量0.2 μl。用色谱峰面积归-化法计算各主要成分的相对含量。

2 结果

采用GC-MS-DS法对香茅油进行化学组成分

表1 香茅油化学成分分析结果

Table 1 Analytical result of the chemical components of essential oil from *Cymbopogon citratus*(DC.) Stapf

序号 No.	保留时间 Retention time(min)	化合物名称 Compound	分子量 M	MS基峰 Base peak	分子式 Formula	相对百分含量 Relative content(%)
1	5.9	6-甲基-5-庚烯-2-酮6-Methyl-5-Hepten-2-One	126	108	C ₈ H ₁₄ O	0.76
2	6.0	月桂烯 Myrcene	136	93	C ₁₀ H ₁₆	15.65
3	6.9	柠檬烯 Limonene	136	68	C ₁₀ H ₁₆	0.65
4	7.1	罗勒烯 Octatriene	136	93	C ₁₀ H ₁₆	0.61
5	7.4	β-罗勒烯 β-Octatriene	136	93	C ₁₀ H ₁₆	0.36
6	8.7	辣薄荷烯酮 Piperitenone	150	150	C ₁₀ H ₁₄ O	0.12
7	8.9	芳樟醇 Linalool	154	71	C ₁₀ H ₁₈ O	1.12
8	10.6	β-香茅烯 β-Citronellene	138	41	C ₁₀ H ₁₈	0.14
9	10.8	香茅醛 Citronellal	154	41	C ₁₀ H ₁₈ O	0.16
10	11.7	顺式香芹醇 Cis-Carveol	152	41	C ₁₀ H ₁₆ O	0.15
11	11.8	反式香芹醇 Trans-Carveol	152	41	C ₁₀ H ₁₆ O	1.55
12	12.3	香茅醇 Citronellol	156	41	C ₁₀ H ₂₀ O	1.10
13	13.4	香叶醇 Geraniol	154	69	C ₁₀ H ₁₈ O	1.55
14	13.9	橙花醛 Neral	152	69	C ₁₀ H ₁₆ O	31.97
15	14.3	橙花醇 Nerol	154	41	C ₁₀ H ₁₈ O	2.66
16	14.9	柠檬醛 Citral	152	69	C ₁₀ H ₁₆ O	37.40
17	15.5	2-十一酮2-Undecanone	170	58	C ₁₁ H ₂₂ O	0.67
18	18.1	乙酸香叶酯 Geranyl acetate	196	69	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	0.08
19	19.0	石竹烯 Caryophyllene	204	41	C ₁₅ H ₂₄	0.30
20	19.3	α-佛手柑烯 α-Bergamotene	204	93	C ₁₅ H ₂₄	0.17
21	19.5	α-古芸烯 α-Gurjunene	204	204	C ₁₅ H ₂₄	0.03
22	19.7	葎草烯 Humulene	204	93	C ₁₅ H ₂₄	0.05
23	20.3	α-芹子烯 α-Selinene	204	93	C ₁₅ H ₂₄	0.07
24	20.4	δ-芹子烯 δ-Selinene	204	204	C ₁₅ H ₂₄	0.06
25	20.6	2-十三烷酮2-Tridecanone	198	58	C ₁₃ H ₂₆ O	0.89
26	20.8	β-没药烯 β-Bisabolene	204	69	C ₁₅ H ₂₄	0.09
27	20.9	α-没药烯 α-Bisabolene	204	93	C ₁₅ H ₂₄	0.05
28	21.0	杜松烯 Cadinene	204	161	C ₁₅ H ₂₄	0.10
29	21.2	香橙烯 Aromadendrene	204	109	C ₁₅ H ₂₄	0.13
30	22.4	石竹烯氧化 Caryophyllene oxide	220	79	C ₁₅ H ₂₄ O	0.06
31	22.8	异香橙烯 Isoaromadendrene	204	109	C ₁₅ H ₂₄	0.11
32	23.0	蛇床-6-烯-4-醇 Selina-6-en-4-ol	222	81	C ₁₅ H ₂₆ O	0.54
33	23.7	杜松醇 Cadinol	222	161	C ₁₅ H ₂₆ O	0.10
34	24.2	2-十五烷酮2-Pentadecanone	226	58	C ₁₅ H ₃₀ O	0.17
35	24.3	α-杜松醇 α-Cadinol	222	161	C ₁₅ H ₂₆ O	0.05
36	24.5	法呢醇 Farnesol	222	69	C ₁₅ H ₂₆ O	0.04
37	24.8	反法呢醇 Trans-Farnesol	222	69	C ₁₅ H ₂₆ O	0.03
38	25.0	丁酸香叶酯 Geranyl butyrate	224	41	C ₁₄ H ₂₄ O ₂	0.09
39	26.6	2-十四醇2-Tetradecanol	214	45	C ₁₄ H ₃₀ O	0.08

析,样品的总离子流(TIC)如图1所示,保留时间列于表1。将GC-MS所测成分的质谱图与计算机质谱数据库检索结果进行比较,并结合文献[6~8]就质谱图的基峰、质荷比和相对丰度等进行比较,对各色谱峰的归属加以确认。共从香茅油的挥发性成分中分离出40多个组分,确认了其中的39种成分(表1)。这些成分主要为单萜及含氧单萜、倍半萜及含氧倍半萜、萜烯和醇等类化合物。所鉴定的组分占挥发油色谱总峰面积的90%以上。

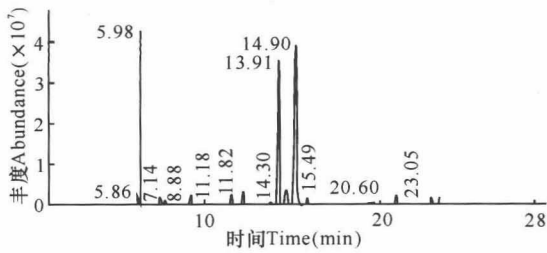


图1 香茅油总离子流

Fig. 1 TIC of the essential oil from *Cymbopogon citratus* (DC.) Stapf

3 结论

本文从广西产香茅油的挥发成分中分离出40多个组分,鉴定了39种成分,占挥发油总量的90%以上。本实验鉴定出的部分成分与文献[3,4]相同,但是在含量上却存在着很大的差异,这些差异可能与香茅的产地、气候、生长环境、采集时间等有关。鉴定出的部分成分为香茅挥发油中首次报道。香茅油具较高的经济价值,可用于医药和香料工业。本研究对开发利用广西产香茅这一植物资源提供了科学依据,有一定的

理论和实际意义。

参考文献:

- [1] 国家中医药管理局. 中华本草[M]. 上海:上海科学技术出版社,1999:335-336.
- [2] 江苏新医学院. 中药大词典:下册[M]. 上海:上海科学技术出版社,1986:1674-1675.
- [3] 陈集双,彭崇胜,杜琪珍,等. 香茅叶挥发油化学成分的研究[J]. 中国药学杂志,2000,35(7):264.
- [4] 刘家欣,蒋剑波,杨朝霞,等. 毛细管气相色谱-质谱法研究香茅油化学成分[J]. 吉首大学学报:自然科学版,1998,19(3):43-45.
- [5] 国家药典委员会. 中国药典2005年版一部[M]. 北京:化学工业出版社,2005:附录57.
- [6] 中国质谱学会有机专业委员会. 香料质谱图集[M]. 1992:1-261.
- [7] Massday Y. Analysis of essential oils by gas chromatography and mass spectrometry [M]. New York: John wiley and Sons Inc,1976:1-286.
- [8] 丛浦珠. 质谱学在天然有机化学中的应用[M]. 北京:科学出版社,2003:783-921.

(责任编辑:邓大玉)

(上接第299页 Continue from page 299)

得晶界迁移受阻增强,第三相颗粒对晶粒长大的阻碍作用增强,系统中晶粒迅速被周围的颗粒牢固钉扎,导致晶粒组织演化达到稳态,晶粒半径趋于定值。

3 结论

(1)采用相场方法模拟两相晶粒长大过程,创建一个能够模拟硬质颗粒对两相晶粒长大过程影响的新模型,该模型的模拟结果能够反映第三相粒子对两相晶粒长大过程的影响,与现有的相关理论相吻合。

(2)弥散分布的硬质第三相颗粒对基体组织的晶界具有钉扎作用,当第三相颗粒体积分数较大时,晶粒半径很快趋于稳定值。

参考文献:

- [1] Geiger J, Roos A, Barkoczy P. Simulation of grain coarsening in two dimensions by cellular-automaton[J]. Acta Mater, 2001, 49(4):623-629.
- [2] Yu Qiang, Esche S K. A monte carlo algorithm for single phase normal grain growth with improved accuracy and efficiency[J]. Computational Materials Science, 2003, 27(3):259-270.
- [3] Wang Li guo, Clancy P. Kinetic monte carlo simulation of growth of polycrystalline Cu films[J]. Surface Science, 2001, 473(1):25-38.
- [4] Chen L Q, Wang Y. Computer simulation of the domain dynamics of a quenched system with large number of nonconserved order parameters: The grain-growth kinetics[J]. Phys Rev B, 1994, 50:15752-15756.

- [5] Cahn J W, Hilliard J E. Free energy of a nonuniform system I. Interfacial freeenergy[J]. J Chem Phys, 1958, 28:258-260.
- [6] Chen L Q, Fan D N. Computer simulation model for coupled grain growth and ostwald ripening-application to Al_2O_3 - ZrO_2 two-phase systems [J]. J Am Ceram Soc, 1996, 79(5):1163-1168.
- [7] Fan D N, Chen L Q. Computer simulation of grain growth and ostwald ripening in Alumina-Zirconia two-phase composites [J]. J Am Ceram Soc, 1997, 80(7):1773-1780.
- [8] Moelans N, Blanpain B, Wollants P. Phase field simulations of grain growth in two-dimensional systems containing finely dispersed second-phase particles [J]. Acta Materialia, 2006, 54:1175-1184.
- [9] Moelans N, Blanpain B, Wollants P. An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution [J]. Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 2008, 32:268-294.
- [10] Allen S M, Cahn J W. A microscopic theory for anti phase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening[J]. Acta metal, 1979, 27(6):1085-1095.
- [11] Cahn J W. On spinodal decomposition [J]. Acta metal, 1961, 9(9):795-801.
- [12] Oono Y, Pori S. Computationally efficient modeling of ordering of quenched phases [J]. Phys Rev Lett, 1987, 58(8):836-839.
- [13] 毛卫民, 赵新兵. 金属的再结晶与晶粒长大[M]. 北京:冶金工业出版社, 1994.

(责任编辑:邓大玉)