

· 中药与天然药 ·

数量分类方法用于中药材黄芩的鉴定

广东医药学院药学系(广州, 510224) 苏薇薇*

提要 本文以微量元素作为判别指标, 采用数量分类方法, 鉴别出药典规定的正品黄芩与非正品黄芩。本文为黄芩的鉴定提供了一个有效的新途径。

关键词 数量分类学; 微量元素; 正品黄芩; 中药鉴定。

数量分类学(Numerical taxonomy)是近年来发展起来的一门新兴学科, 其涵义就是用计算机代替人对客观事物进行分类和描述。数量分类学在农业、医学等领域已有应用报道。本文尝试将数量分类方法引入中药鉴定领域, 对正品黄芩与非正品黄芩的鉴定结果令人满意。

本文用以鉴别分类的化学特征(即判别指标)是黄芩中的微量元素, 选择其为判别指标是因为微量元素与中药品种有关。不同种属的中药, 其自身代谢从土壤中摄取和形成的微量元素的含量就不同, 而同种中药在微量元素的含量上应有规律可循。近年来, 已有人提出用微量元素来识别地道药材, 并建立了TE图谱法^[1]。TE图谱法是一种几何模板方法, 具有明显的直观性, 但该法还存在一些技术性问题。因为中药内微量元素的形成除与品种有关外, 还受到生长环境(如产地、采收季节等因素)的影响, TE图谱法无法消除后者的影响。而本文则采用数量分类法, 从建立“标准模式”入手, 在数学处理过程中, 环境的影响可作为噪音和干扰而被消除, 使得微量元素与黄芩品种之间的规律表现得更为明确。然后用微量元素数据求得待鉴定样本与“标准模式”之间的亲近度, 根据亲近度的大小来鉴定该样本是否属于正

品黄芩, 结果准确可靠。

基本方法与结果

一、建立“标准模式”

所谓“标准模式”就是假定的理想正品黄芩样本, 它由若干个已知的正品黄芩样本组合而成, 并且成为这些样本的核心, 它的各个指标是这若干个样本所对应指标的平均值。本文用下列15个样本来建立“标准模式”: 1. 河北承德产正品黄芩 *Scutellaria Baicalensis Georgi*; 2. 承德市药品检验所提供的正品黄芩; 3. 承德中药厂提供的正品黄芩; 4. 山西晋城产正品黄芩; 5. 山西汾阳产正品黄芩; 6. 内蒙古喀喇沁旗产正品黄芩; 7. 内蒙古敖汉旗产正品黄芩; 8. 内蒙古林西县产正品黄芩; 9. 哈尔滨产正品黄芩; 10. 甘肃庆阳产正品黄芩; 11. 济南药材站提供的正品黄芩; 12. 辽宁建平县所产正品黄芩; 13. 辽宁喀左县产正品黄芩; 14. 辽宁朝阳药材站提供的正品黄芩; 15. 内蒙古扎赉特旗产正品黄芩。

用等离子体光谱法^[2]测定上述15个样本中微量元素的含量, 取其平均值作为“标准模式”微量元素的含量, 结果见表1。

二、样本的鉴别

以如下样本作为待鉴别样本: a. 山西

* 苏薇薇1987年沈阳药学院硕士研究生毕业, 现任广东医药学院药物分析教研室副主任、讲师。

表1 “标准模式”微量元素的含量(μg/g)

Fe	253.2	K	5757.0
Si	525.6	Al	466.2
P	890.3	Ba	64.4
S	778.5	Mn	15.6
Ca	5995.8	Cu	20.0
Mg	8316.4	Zn	26.5

省药品检验所提供的正品黄芩; b. 内蒙古药

品检验所提供的正品黄芩; c. 黑龙江省药品检验所提供的正品黄芩; d. 辽宁建昌产正品黄芩; e. 吉林省药品检验所提供的粘毛黄芩 *Scutellaria viscidula* Bge.; f. 四川西昌产滇黄芩 *Scutellaria amoena* C. H. Wright; g. 云南丽江产丽江黄芩 *Scutellaria likiangensis* Diels; h. 甘肃平凉产甘肃黄芩 *Scutellaria rehderiana* Diels. 上述样本的微量元素含量测定结果见表2。

表2 待鉴别样本微量元素的含量(μg/g)

样本	a	b	c	d	e	f	g	h
Fe	267.6	277.8	189.9	251.8	684.0	149.8	1180.6	576.0
Si	596.3	551.0	518.0	347.8	194.3	251.2	548.6	1298.4
P	535.2	926.0	1242.3	839.3	1202.8	1272.9	1180.6	731.8
S	510.9	717.7	1314.6	959.3	1367.9	2463.8	902.0	613.8
Ca	5644.2	7060.8	6305.1	6043.7	8066.0	12391.3	18518.5	7979.2
Mg	6933.6	8102.6	8203.6	8825.8	6250.0	4202.9	6250.0	8333.3
K	6082.1	5787.6	5789.4	5180.4	9009.4	13285.0	8379.6	7601.5
Al	608.2	578.8	468.8	455.7	1533.0	531.4	1620.4	1062.3
Ba	90.0	57.9	140.6	172.7	68.4	186.0	83.3	61.4
Mn	17.0	18.5	11.7	21.6	18.9	21.7	57.9	18.9
Cu	21.9	13.9	30.5	26.4	14.2	7.2	16.2	23.6
Zn	14.6	16.2	23.4	28.8	18.9	38.6	30.1	21.2

用微量元素数据计算待鉴别样本与“标准模式”之间的亲近度。设 $(x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im})$ 为待鉴别样本 i 的微量元素数据, $(x_{j1}, x_{j2}, \dots, x_{jm})$ 为“标准模式” j 的微量元素数据, 则 i 与 j 之间的亲近度 e_{ij} 可用如下公式求得^[3,4]:

$$e_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^m x_{ik} \cdot x_{jk}}{\sqrt{\sum_{k=1}^m x_{ik}^2 \cdot \sum_{k=1}^m x_{jk}^2}}$$

$$\sqrt{\sum_{k=1}^m x_{ik}^2 \cdot \sum_{k=1}^m x_{jk}^2}$$

e_{ij} 反映了待鉴别样本 i 与“标准模式” j 之间的相似程度, e_{ij} 越大, 则 i 与 j 就越相似。当 $e_{ij} \geq 0.99$ 时, 可以认为 i 与 j 完全相同, 此时 i 被鉴定为正品黄芩。表3列出了运算后得到的 e_{ij} 值, 运算是采用 BASIC 语言在 IBM-PC 计算机上实现的。

表3 待鉴别样本与“标准模式”间的亲近度

样本	a	b	c	d	e	f	g	h
e_{ij}	0.9944	0.9965	0.9982	0.9976	0.9480	0.8471	0.8452	0.9881

样本 a、b、c、d 与“标准模式”之间的亲近度均大于 0.99, 被归为正品黄芩; 样本 e、f、g、h 与“标准模式”之间的亲近度小

于 0.99, 被归为非正品黄芩。这一结果与实际情况相符。说明本法可靠。

讨 论

1. 本文运用数量分类理论,以微量元素作为判别指标,建立了黄芩品种鉴别的计量化方法,结果准确可靠。本课题目前尚未见有文献报道。本文方法先进,便于推广应用。对于任一黄芩样本,只要算出其与“标准模式”之间的亲近度,就能鉴别出其是否属于正品黄芩。本文还可作为其它中药鉴定的参考。

2. 在建立“标准模式”时,正品黄芩的主要产区内蒙古、河北、山西、辽宁、山东、黑龙江、甘肃等地都有样本选入,“标准模式”具有广泛的代表性。非正品黄芩与“标准模式”之间的亲近度反映了非正品黄芩与正品黄芩的亲疏远近关系。例如,文中甘肃黄芩、粘毛黄芩与“标准模式”的亲近度分别为0.9881和0.9480,而滇黄芩、丽江黄芩与“标准模式”的亲近度分别为0.8471和0.8452,说

明甘肃黄芩、粘毛黄芩与正品黄芩的差异相对较小,而滇黄芩、丽江黄芩与正品黄芩的差异相对较大。这于前文^[6]用主成分分析法处理紫外光谱数据所得结论一致。这为寻找药材代用品提供了一条途径。

3. 生药微量元素可受原植物的生态环境、分布地区、生药采集时令、加工方法的制约,栽培品更受到化肥、农药的影响。所以在应用时宜将这许多因素综合考虑在内。

致谢 本文所有黄芩样本由沈阳药学院许春泉高级工程师作生药学鉴定,谨致谢意。

参 考 文 献

- [1] 朱梅年等:微量元素1986, (3):42
- [2] 苏薇薇等:广东医药学院学报1989, 5(2):38
- [3] 董文宗等:数量化理论及其应用,吉林人民出版社, 1979
- [4] 黄秉宪等:计量医学,上海科学技术出版社, 1984
- [5] 苏薇薇:现代应用药学1990, 7(4):9

Identification of the Traditional Chinese Crude Drug Huangqin by Numerical Taxonomic Method

Su Weiwei

Guangdong Medical and Pharmaceutical College (Guangzhou 510224)

Abstract

The traditional Chinese crude drug Huangqin (*Scutellaria Baicalensis* Georgi) which is stipulated in Chinese pharmacopoeia can be accurately distinguished from other four origins of the same drug (*Scutellaria rehderiana* Diels, *Scutellaria viscidula* Bge., *Scutellaria amoena* C. H. Wright, *Scutellaria likiangensis* Diels) by numerical taxonomic method and by taking trace elements as discriminating indices. This study provides a new efficient way for identification of Huangqin.

Key words Numerical taxonomy; Trace element; *Scutellaria baicalensis*; Identification of traditional chinese drug