基于组效关系的土荆芥挥发油熏蒸抑菌活性组分鉴定

陈月华[1]， 陈利军[1,2*]， 金银利[1,2]， 马宇明[1]， 智亚楠[1,2]

（1. 信阳农林学院，信阳 464000；2. 河南省豫南农作物有害生物绿色防控院士工作站，信阳 464000）

摘要 通过分析土荆芥 *Chenopodium ambrosioides* L. 挥发油对灰葡萄孢 *Botrytis cinerea* Pers. 的熏蒸抑制作用与其化学组分之间的组效关系，鉴定挥发油中与抑菌作用显著相关的活性成分。采用气相色谱-质谱联用(gas chromatograph-mass spectrometry，GC-MS)技术分析 29 个土荆芥挥发油样品的化学组分和相对含量，同时以菌丝生长速率法分别测定各样品对灰葡萄孢的熏蒸抑制效能。在此基础上，我们选取相对含量占总挥发油 91.39%～99.50%的 13 种共有化合物为特征化合物，采用正交最小偏二乘判别分析(orthogonal partial least squares discriminant analysis，OPLS-DA)法分析组效关系，同时利用双变量相关分析验证组效分析结果。结果表明，3-甲基-4-异丙基苯酚、麝香草酚、α-萜品烯、*p*-伞花烃和驱蛔萜等化合物是土荆芥挥发油对灰葡萄孢菌发挥熏蒸抑制作用的主要活性组分。

关键词 土荆芥挥发油； 组效关系； 熏蒸抑菌活性； 气相色谱-质谱联用

中图分类号： S 482.2 **文献标识码：** A **DOI：** 10.16688/j.zwbh.2018504

Identification of fumigant antifungal compounds in volatile oil from *Chenopodium ambrosioides* based on composition-activity relationship

CHEN Yuehua[1]， CHEN Lijun[1,2*]， JIN Yinli[1,2]， MA Yuming[1]， ZHI Yanan[1,2]

（1. *Xinyang Agricultural and Forestry University*，*Xinyang* 464000，*China*；2. *Henan Provincial South Henan Crop Pest Green Prevention and Control Academician Workstation*，*Xinyang* 464000，*China*）

Abstract Compounds with fumigant antifungal activities in volatile oils from *Chenopodium ambrosioides* L. were identified in this study by analyzing the composition-activity relationship between chemical compounds and their fungus-inhibiting effects against *Botrytis cinerea* Pers. under the condition of fumigation. The chemical compounds and their relative percentage content from 29 volatile oil samples of *C. ambrosioides* were analyzed by gas chromatograph-mass spectrometry (GC-MS), and their fumigant antifungal efficiency against *B. cinerea* were determined by using the mycelial growth rate method. A total of 13 characteristic compounds of volatile oils from *C. ambrosioides*, accounting for 91.39%－99.50% of the total volatile oils, were selected and analyzed in terms of the composition-activity relationship by using orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA). This composition-activity relationship was further confirmed by bivariate correlation analysis. The results showed that 3-methyl-4-isopropylphenol, thymol, α-terpene, *p*-cymene, and ascaridole were the major compounds with fumigant antifungal activity in the essential oils of *C. ambrosioides* against *B. cinerea*.

Key words volatile oil from *Chenopodium ambrosioides*； composition-activity relationship； fumigant antifungal activity； gas chromatograph-mass spectrometry

一些植物的挥发油对植物病原菌具有显著的抑制作用，这些挥发油易挥发的特性使其有望作为仓储、设施栽培和土壤等的熏蒸剂防控植物病害。由于其来源于植物，具有低毒和环保等优点，因此是理想的绿色生物熏蒸剂[1]。研究表明，土荆芥 *Chenopodium ambrosioides* L. 挥发油对植物病原真菌

收稿日期： 2018－12－07 **修订日期：** 2019－01－16
基金项目： 国家自然科学基金(31401798)；河南省科技攻关项目(122102310257)
* 通信作者 E-mail：chlijun1980@163.com

具有明显的抑制作用[2-5]，且熏蒸作用条件下的抑菌效能优于触杀方式[3]。与其他植物挥发油相似，土荆芥挥发油的组分及各组分的相对含量随其产地、生长环境、生育期、使用部位、贮藏条件和提取方法等的不同而发生变化[2-3, 6]，这导致不同来源的土荆芥挥发油的熏蒸抑菌活性存在差异[2-3, 7]，限制了其作为生物熏蒸剂来防控植物真菌病害的开发和应用。

组效关系又称谱效关系，是针对中药药效物质基础及其作用机制研究的一种新兴和有效的研究方法，在中药学研究中有十分广泛的应用[8-10]。该方法采用现代分析手段获取中药的化学组分信息，然后将中药中各组分的信息与药效结果通过线性或非线性数学分析，建立“组效”关系，从而确定出与药效相关的组分群。在明确药效成分的前提下，探讨各成分对药效贡献率，这可以更加明确地指出中药成分对药效指标的综合作用，为药效物质基础研究提供一定的依据[8, 11]。组效关系的研究方法也可用于评价植物挥发油各组分对其抑菌功效的贡献，根据各组分的贡献制定挥发油的质量控制标准，有利于植物挥发油的进一步开发研究。

本研究采用气相色谱-质谱联用(gas chromatograph-mass spectrometry, GC-MS)技术分析来自 29 个不同地区的土荆芥挥发油样本的化学组分及其相对含量，采用正交最小偏二乘判别分析(orthogonal partial least squares discriminant analysis, OPLS-DA)明确土荆芥挥发油的组分与其对番茄灰霉病的病原菌灰葡萄孢的熏蒸抑菌率之间的组效关系，并采用双变量相关分析验证组效分析结果，鉴定土荆芥挥发油熏蒸抑菌活性的组分群，揭示其活性的组分物质基础，评价各组分对熏蒸抑菌活性的贡献，以期为土荆芥挥发油质量控制和生物农药的研发提供科学依据，为其他植物挥发油熏蒸抑菌活性等的研究提供参考依据。

1　材料与方法

1.1　仪器、试剂与菌株

6850/5975 气质联用仪(美国 Agilent，NIST14 谱图库)、SW-CJ-2FD 型超净工作台(苏州净化设备有限公司)、HP250S 型生化培养箱(武汉瑞华仪器设备有限公司)。

3-甲基-4-异丙基苯酚和麝香草酚(北京百灵威)、α-萜品烯和 *p*-伞花烃(Sigma)；植物病原真菌灰葡萄孢 *Botrytis cinerea* Pers. 菌株，分离自患灰霉病的番茄，由信阳农林学院植物病理实验室提供。

1.2　土荆芥样品的采集及挥发油的提取

土荆芥材料于 2015 年 11 月到 2017 年 8 月分别采自河南、湖北、湖南等省多个县市区(表 1)。样品带至实验室，采用水蒸气蒸馏法持续提取 2 h，所得挥发油密封于冻干瓶中，4℃冰箱保存。共得到 29 个土荆芥挥发油样品。

表 1　土荆芥样品采集地及挥发油提取部位

Table 1　Sampling sites and extraction parts of of essential oils from *Chenopodium ambrosioides*

样品 Sample no.	采集地 Sampling site	提取部位 Extraction part	采集时间/年-月 Collection time
1	河南漯河召陵区	全草	2017-07
2	河南商丘睢县	全草	2017-08
3	河南桐柏月河镇	叶	2017-08
4	河南桐柏月河镇	全草	2017-08
5	河南信阳胡店乡	花序	2017-08
6	河南信阳龙井乡	全草	2017-08
7	河南信阳三桥村	种子(含果皮)	2016-11
8	河南信阳三桥村	种子(含果皮)	2015-11
9	河南信阳三桥村	叶	2017-08
10	河南信阳三桥村	花序	2017-08
11	河南信阳五里店镇	全草	2017-07
12	河南信阳五里店镇	花序	2017-07
13	河南信阳五里店镇	叶	2017-07
14	河南信阳五里店镇	茎	2017-07
15	河南信阳吴家店镇	花序	2017-08
16	河南信阳震雷山	全草	2017-07
17	河南信阳震雷山	种子(含果皮)	2016-10
18	河南信阳震雷山	种子(含果皮)	2015-11
19	河南信阳震雷山	种子(含果皮)	2016-11
20	河南信阳震雷山	花序	2017-07
21	河南信阳震雷山	全草	2016-07
22	河南驻马店正阳县	叶	2017-08
23	河南驻马店正阳县	全草	2017-08
24	河南驻马店正阳县	花序	2017-08
25	湖北广水蔡河镇	全草	2017-08
26	湖北广水三潭风景区	全草	2017-08
27	湖北广水郝店镇	全草	2017-08
28	湖北广水吴店镇	全草	2017-08
29	湖南长沙岳麓区	全草	2017-07

1.3　土荆芥挥发油的 GC-MS 分析

土荆芥挥发油的化学组分采用 GC-MS 法进行鉴定和分析。GC 分析条件如下：色谱柱为 HP-5 ms 毛细管柱(30 m×0.25 mm×0.25 μm)；进样口温度 260℃；初始柱温为 60℃，保持 2 min，以 10℃/min 速率升温至 230℃，保持 1 min；高纯氦气(纯度为 99.999%)

被作为载气，流速为 1.0 mL/min，进样量为 1.0 μL，采用不分流模式，进样前挥发油用乙醚稀释 1 000 倍。MS 条件如下：EI 离子源，电子能量 70 eV，离子阱温度 220℃，传输线温度 280℃，溶剂延迟时间为 2 min，全扫描方式，质量扫描范围 m/z 33～350。所得质谱图经 NIST14 数据库定性检索化合物，根据气相色谱峰面积采用归一法定量确定各化学组分的相对含量。

1.4 土荆芥挥发油的熏蒸抑菌活性测定

采用菌丝生长速率法测定土荆芥挥发油对灰葡萄孢的熏蒸抑菌活性[3, 12]，以抑菌率作为评价指标：在直径 90 mm 的培养皿皿底中加入 15 mL 融化的 PDA 培养基（约 60℃），摇匀制成厚薄均匀的平板，平板中央接种一块直径为 5 mm 的灰霉病菌菌饼。然后在皿盖上放置一灭菌的直径 7 mm 圆形滤纸片，滤纸片上滴加 2 μL 土荆芥挥发油。皿底皿盖对扣后，用 parafilm 封口膜密封，倒置培养于 22℃的生化培养箱中，72 h 后观察真菌的生长情况，并采用十字交叉法测量菌落直径，计算抑菌率。以仅放一滤纸片不滴加挥发油为对照。重复 5 次。

抑菌率＝（对照菌落生长直径－处理菌落生长直径）/对照菌落生长直径×100%。

1.5 统计分析

以 2 μL 土荆芥挥发油对灰葡萄孢的熏蒸抑菌率为因变量（Y），以选取的 13 个考察化合物的相对含量为自变量（X），导入 Simca-p 14.1 软件，采用正交最小偏二乘判别分析 OPLS-DA 法进行组效关系分析。采用 SPSS 18.0 软件进行双变量（bivariate）相关分析验证组效分析结果。

2 结果与分析

2.1 土荆芥挥发油的 GC-MS 分析

对 29 个土荆芥挥发油样品进行 GC-MS 分析，其总离子流图示于图 1。根据 GC-MS 分析结果，选取 29 个样品共有的 13 种化合物作为特征化合物进行组效关系分析，各特征化合物的相对含量见表 2。29 个样品中 13 种特征化合物的相对含量占其总挥发油的 91.39%～99.50%。

13 种特征化合物经 NIST14 质谱数据库检索，鉴定结果见表 3，其中特征化合物 C、D、K 和 L，即 α-萜品烯、*p*-伞花烃、麝香草酚和 3-甲基-4-异丙基苯酚经标准品复核。特征化合物 M 未鉴定，质谱图显示其分子量为 168。

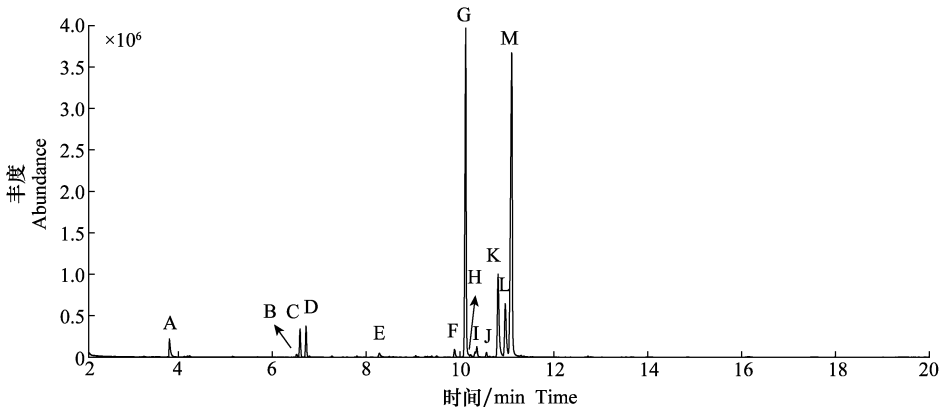

图 1 土荆芥挥发油总离子流图

Fig. 1 Total ion chromatogram of essential oils from *Chenopodium ambrosioides*

表 2 土荆芥样品挥发油特征化合物的相对含量

Table 2 Relative percentage contents of each characteristic compound of essential oils from *Chenopodium ambrosioides*

样品 Sample no.	特征化合物相对含量/% Relative content of characteristic compounds												
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	2.57	1.31	28.55	3.86	0.74	0.65	19.48	0.39	0.57	0.32	6.00	3.38	29.45
2	1.91	0.12	34.77	12.69	0.25	0.28	22.67	0.01	0.81	0.20	0.27	0.18	24.88
3	1.97	0.03	47.78	3.76	0.08	0.20	15.87	0.28	0.60	0.15	4.99	3.06	19.82
4	1.31	3.65	36.53	3.48	0.45	0.13	10.80	0.14	0.28	0.39	3.28	2.09	29.65
5	1.16	0.31	29.91	12.30	0.11	0.74	11.45	0.33	0.48	1.04	1.89	1.01	33.07
6	2.37	0.21	15.41	11.26	0.28	0.48	31.15	0.13	0.81	0.36	1.10	0.57	35.24
7	2.53	0.39	2.16	6.43	0.94	0.75	28.04	0.70	0.73	0.78	5.00	3.10	46.43

续表 2　Table 2(Continued)

样品 Sample no.	特征化合物相对含量/% Relative content of characteristic compounds												
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
8	1.98	0.29	1.37	3.05	0.49	0.66	31.60	0.68	1.13	0.39	10.45	7.12	40.28
9	2.51	0.17	34.74	5.19	0.27	0.32	20.93	0.28	0.47	0.22	5.90	3.37	24.02
10	1.21	0.28	32.68	5.12	0.12	0.45	11.60	0.30	0.35	0.32	5.65	3.26	31.87
11	2.26	0.28	25.27	2.87	0.51	0.52	19.89	0.01	1.27	0.35	6.72	4.31	34.11
12	2.51	0.30	8.40	2.27	0.60	0.59	27.55	0.12	1.24	0.43	7.83	5.16	42.41
13	1.92	0.18	38.51	5.78	0.29	0.45	17.23	0.14	0.86	0.23	5.81	3.61	23.33
14	2.69	0.01	64.06	11.68	0.71	0.29	1.83	0.32	0.93	0.01	6.84	3.29	2.66
15	1.92	2.69	41.70	3.00	0.18	0.20	17.72	0.24	0.49	0.01	4.80	2.79	18.40
16	2.14	0.17	32.81	8.54	0.69	0.41	19.49	0.40	0.75	0.31	5.50	2.90	24.27
17	1.03	0.47	4.20	3.25	0.24	0.74	19.01	0.52	0.46	0.60	6.46	4.10	53.98
18	1.39	0.41	3.11	9.80	0.27	0.73	17.39	0.67	0.87	0.82	5.28	3.21	47.44
19	2.56	0.42	0.82	11.58	0.77	1.22	26.31	0.49	0.58	1.10	3.89	2.23	46.73
20	2.03	0.15	45.83	11.13	0.14	0.42	14.55	0.31	0.56	0.17	3.17	1.72	17.82
21	2.17	0.26	3.52	2.69	0.53	0.75	30.01	0.34	1.06	0.40	10.21	6.65	40.91
22	1.84	0.13	28.65	4.84	0.27	0.37	24.33	0.37	0.71	0.26	6.26	3.83	26.80
23	2.00	0.06	34.17	6.15	0.29	0.36	17.60	0.41	0.77	0.22	7.58	4.69	23.54
24	2.18	0.22	30.00	5.86	0.32	0.36	21.19	0.44	0.87	0.22	7.97	4.88	23.84
25	1.14	0.25	34.78	7.86	0.05	0.46	11.90	0.35	0.66	0.31	2.83	1.69	31.82
26	1.18	0.23	39.20	6.65	0.05	0.41	11.19	0.30	0.39	0.28	2.79	1.64	29.35
27	1.34	0.20	37.05	3.36	0.01	0.39	10.95	0.32	0.47	0.28	4.59	2.74	31.49
28	1.09	0.33	24.00	2.49	0.20	0.57	15.08	0.42	0.64	0.40	5.80	3.76	39.64
29	2.02	0.33	5.15	5.40	0.87	0.67	27.97	0.67	1.00	0.68	6.77	4.34	42.23

表 3　特征化合物鉴定结果

Table 3　Characteristic compounds of essential oils from *Chenopodium ambrosioides*

编号 No.	保留时间/min Retention time	化合物 Compound	分子式 Formula
A	3.802	4-羟基-4-甲基-2-戊酮 2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl	$C_6H_{12}O_2$
B	6.518	1,4-环己-2-烯二酮 1,4-Cyclohex-2-enedione	$C_6H_6O_2$
C	6.590	α-萜品烯 α-Terpene	$C_{10}H_{16}$
D	6.720	*p*-伞花烃 *p*-Cymene	$C_{10}H_{14}$
E	8.284	未鉴定 Unknown	
F	9.876	未鉴定 Unknown	
G	10.121	驱蛔萜 Ascaridole	$C_{10}H_{16}O_2$
H	10.323	未鉴定 Unknown	
I	10.352	3-甲基-6-(1-甲基乙基)-7-氧杂双环[4.1.0]庚-2-酮 3-methyl-6-(1-methylethyl)-7-Oxabicyclo[4.1.0]heptan-2-one,	$C_{10}H_{16}O_2$
J	10.532	未鉴定 Unknown	
K	10.798	麝香草酚 Thymol	$C_{10}H_{14}O$
L	10.942	3-甲基-4-异丙基苯酚 3-Methyl-4-isopropylphenol	$C_{10}H_{14}O$
M	11.087	未鉴定 Unknown	

2.2　土荆芥挥发油熏蒸抑菌活性

采用菌丝生长速率法,分别测定了 29 个土荆芥挥发油样品 2 μL 剂量对灰葡萄孢的熏蒸抑制活性,结果见表 4。从表 4 中可以看出,不同土荆芥挥发油样品对灰葡萄孢菌均具有明显的熏蒸抑制活性,但不同样品间存在较大的差异,抑制率最高的为 21 号样品(94.72%),最低的为 2 号样品(12.08%),24 个样品的抑制率≥50%。

2.3　土荆芥挥发油活性成分的鉴定

分别将 29 个土荆芥挥发油样本的 13 种特征化合物的相对含量和 2 μL 挥发油对灰葡萄孢的熏蒸抑菌率作为 X 和 Y,导入 Simca-p 14.1 软件,提取 2 个主成分,采用 OPLS-DA 分析,模型参数为 $R^2Y=0.638$,$Q^2Y=0.558$。所得 S-载荷图和变异权重系数(variable importance in the projection,VIP)图分别见图 2 和图 3。一般认为 S-载荷图中距原点越远的变量

贡献越大，变异权重系数越大的变量贡献也越大。从S-载荷图(图2)和VIP图(图3)可见，对抑制率有较大贡献(VIP> 1)的化合物共7种，编号及VIP值依次为L(1.371 18)>K(1.309 64)>C(1.272 99)>D(1.072 47)>G(1.069 07)>F(1.058 39)>M(1.044 36)。这7种化合物占挥发油总量的85.95%～95.75%。

表4 土荆芥挥发油对灰葡萄孢的熏蒸抑菌率

Table 4 Fumigant antifungal rates of 29 essential oils from *Chenopodium ambrosioides* on *Botrytis cinerea*

样品 Sample no.	抑菌率/% Inhibition rate	样品 Sample no.	抑菌率/% Inhibition rate	样品 Sample no.	抑菌率/% Inhibition rate
1	69.40±2.10	11	81.90±1.33	21	94.72±0.38
2	12.08±0.64	12	83.33±0.62	22	68.94±1.01
3	57.03±1.50	13	66.24±2.07	23	79.35±2.58
4	57.34±0.89	14	42.55±2.18	24	75.78±0.90
5	55.90±2.02	15	50.00±2.52	25	47.40±2.06
6	68.01±1.73	16	66.09±1.66	26	61.77±2.48
7	78.02±1.84	17	84.91±1.34	27	49.54±1.96
8	94.11±0.86	18	76.58±0.84	28	37.00±1.72
9	67.24±1.60	19	77.87±1.60	29	79.45±1.66
10	75.47±1.73	20	48.29±1.94		

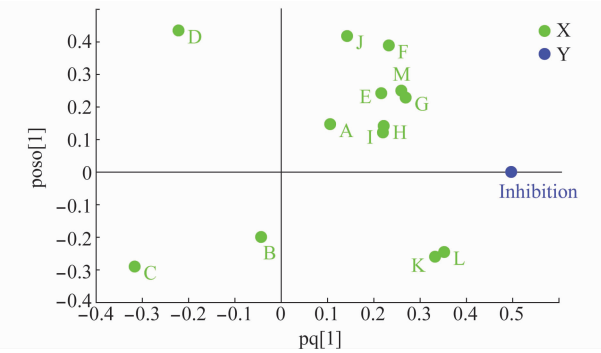

图2 土荆芥挥发油13种化合物与抑菌率的OPLS-DA分析结果：S-载荷图

Fig. 2 OPLS-DA model of 13 compounds and antifungal rates of essential oils from *Chenopodium ambrosioides*: S-lodding plot

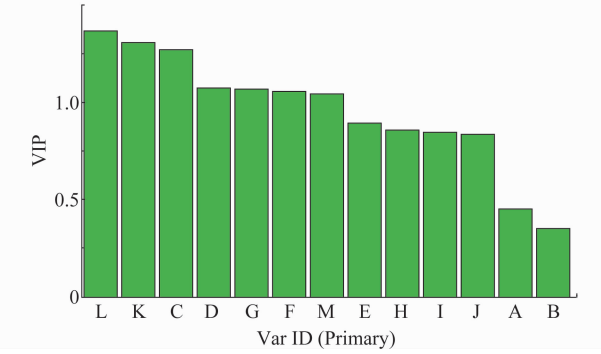

图3 土荆芥挥发油13种化合物与抑菌率的OPLS-DA分析结果：变异权重系数(VIP)

Fig. 3 OPLS-DA model of 13 compounds and antifungal rates of essential oils from *Chenopodium ambrosioides*: variable importance plot

采用双变量相关分析计算13种特征化合物相对含量与土荆芥挥发油对灰葡萄孢熏蒸抑制率的皮尔逊相关系数，结果见表5。皮尔逊相关系数显示了13种特征化合物与熏蒸抑制率的相关程度，化合物L、K、C、G、M、F均与抑制率显著相关，与OPLS-DA分析结果一致，其中化合物C为负相关。化合物D虽然也显著相关，但其相关系数相对较小，也为负相关。

表5 土荆芥挥发油13种特征化合物与对灰葡萄孢熏蒸抑制率的皮尔逊相关系数

Table 5 Pearson correlation indices between 13 characteristic compounds of essential oils from *Chenopodium ambrosioides* and fumigant inhibition rates against *Botrytis cinerea*

特征化合物 Characteristic compound	皮尔逊相关系数 Pearson correlation index	特征化合物 Characteristic compound	皮尔逊相关系数 Pearson correlation index
L	0.702 13	I	0.369 15
K	0.678 60	J	0.334 80
G	0.542 00	A	0.235 56
M	0.534 61	B	−0.103 49
F	0.501 38	D	−0.403 85
H	0.443 59	C	−0.660 76
E	0.396 27		

根据OPLS-DA和双变量相关分析结果，可认为L、K、C、G、F、M及D等7种化合物是土荆芥挥发油对灰葡萄孢熏蒸抑制作用的主要活性成分。除F号和M号化合物暂未鉴定外，其他对应的化合物依次为：3-甲基-4-异丙基苯酚、麝香草酚、α-萜品烯、驱蛔萜及*p*-伞花烃。

3　小结与讨论

化学组分是植物挥发油发挥功效的物质基础。在有关植物挥发油植保功效的研究中,多采用单一的方式获得挥发油,然后进行活性测定和组分分析,接着分别采用一种或几种主要组分的单体物质进行活性验证[13-14],由于植物挥发油组分复杂,且各组分及其相对含量因产地、生长环境等多种因素影响多变,而这种单纯的挥发油组分-植保功效评价的方式未考虑挥发油各组分间的协同或拮抗作用,确定的活性组分多为单体物质,不能真实或完全呈现挥发油的活性组分群及其关系,对挥发油功效的物质基础评价不准确,不能对不同批次或来源的挥发油出现功效不稳定的现象进行合理评价并质量控制,因此限制了挥发油的开发和应用。正交最小偏二乘判别分析(OPLS-DA)是组效关系研究中常用的一种方法,可以进行多元回归和主成分分析,能够预测有效活性组分群及其活性贡献。

本研究收集了 29 个土荆芥挥发油样品,采用 GC-MS 获取挥发油化学组分及相对含量信息,通过 OPLS-DA 分析辨识活性组分,并以双变量相关分析进行验证,结果表明,3-甲基-4-异丙基苯酚、麝香草酚、α-萜品烯、*p*-伞花烃和驱蛔萜等是土荆芥挥发油对灰葡萄孢菌发挥熏蒸抑制作用的主要活性组分。其中对土荆芥挥发油熏蒸抑菌活性贡献最大的 2 个化合物为 3-甲基-4-异丙基苯酚和麝香草酚,据文献报道,3-甲基-4-异丙基苯酚和麝香草酚有显著的抑菌作用,为在化妆品、食品等行业常用的防腐剂[15-16],这与本研究发现 3-甲基-4-异丙基苯酚和麝香草酚对土荆芥挥发油的熏蒸抑菌作用贡献大的结果一致。α-萜品烯和 *p*-伞花烃对土荆芥挥发油熏蒸抑菌活性也有较大的贡献或相关性,但 OPLS-DA 分析的 S-载荷图和双变量相关分析的皮尔逊相关系数显示均为负值,表明在土荆芥挥发油中,α-萜品烯和 *p*-伞花烃的相对含量对熏蒸抑菌活性起负贡献作用,即 C 和 D 的相对含量越高,土荆芥挥发油的熏蒸抑菌活性越低。驱蛔萜在临床上用于驱肠虫,是一种单萜衍生物,具有抗真菌活性[17],其对土荆芥挥发油熏蒸抑菌活性的贡献大。化合物 M 在样品中相对含量较高,OPLS-DA 分析和双变量相关分析显示其对土荆芥挥发油熏蒸抑菌活性也有较大贡献,但化合物 M 未鉴定,限制了对其熏蒸抑菌贡献的进一步分析,因此鉴定化合物 M 并验证其对土荆芥挥发油熏蒸活性的贡献有待进一步研究。本研究通过组效关系分析,辨识了土荆芥挥发油熏蒸抑菌活性的主要化学组分群,对土荆芥挥发油作为绿色生物熏蒸剂的质量控制具有重要意义,对其他植物挥发油植保功能物质基础及全面准确的质量控制研究具有参考价值。

参考文献

[1] 陈利军,陈月华,周巍,等. 河南鸡公山小鱼仙草挥发油的抑菌作用及组分分析[J]. 南方农业学报,2016(11):1875-1879.

[2] 陈利军,智亚楠,王国君,等. 土荆芥花序和叶挥发油的抑菌作用及组分分析[J]. 植物保护,2014,40(5):40-43.

[3] 陈利军,智亚楠,王国君,等. 土荆芥果实挥发油的抑菌活性及其组分分析[J]. 河南农业科学,2015,44(1):70-76.

[4] JARDIM C, JHAM G, FREIRE M. Composition and antifungal activity of the essential oil of the Brazilian *Chenopodium ambrosioides* L. [J]. Journal of Chemical Ecology,2008,34(9):1213-1218.

[5] KUMAR R, MISHRA A, DUBE N, et al. Evaluation of *Chenopodium ambrosioides* oil as a potential source of antifungal, antiaflatoxigenic and antioxidant activity [J]. International Journal of Food Microbiology, 2007, 115(2): 159-164.

[6] 吴帆, 倪伟超, 李彪, 等. 植物精油的提取方法及其功能特性研究进展[J]. 中国野生植物资源, 2016, 35(5): 47-51.

[7] 李元,廖颖,严伟,等. 四川土荆芥挥发油对植物病原真菌的抗菌活性[J]. 生态环境学报,2010, 19(5): 1176-1181.

[8] 蔡靓, 张倩, 杨丰庆. 中药谱效学的应用进展[J]. 中草药, 2017, 48(23): 5005-5011.

[9] WANG Yanhong, LI Yang, ZHANG Yan, et al. Multi-dimensional spectrum-effect relationship of the impact of Chinese herbal formula Lichong Shengsui Yin on ovarian cancer[J]. Molecules, 2017, 22(6): 979-995.

[10] 李震宇,崔伊凡,秦雪梅. 中药材质量评价的挑战与代谢组学应用于中药材质量评价的研究进展[J]. 中草药,2018,49(10):2221-2229.

[11] 吕邵娃,董书羽,郭玉岩,等. 数据分析技术在中药谱效关系中的应用进展[J]. 中国实验方剂学杂志,2015,21(15):226-230.

[12] 刘耀华,马新耀,程作慧,等. 香茅精油对番茄早疫病菌的抑菌作用及抑菌机制[J]. 应用生态学报,2017,28(9):3016-3022.

[13] 汤晓倩,刘霞,冯蕊. 植物精油在植物保护中的应用研究进展[J]. 安徽农业科学,2016,44(1):211-213.

[14] ISMAN M B. Plant essential oils for pest and disease management [J]. Crop Protection, 2000, 19: 603-608.

[15] 王娣, 徐晖, 钱时权, 等. 麝香草酚对食品常见污染菌的抑菌作用[J]. 食品科学, 2013, 34(3): 119-122.

[16] MARCHESE A, ORHAN I E, DAQLIA M, et al. Antibacterial and antifungal activities of thymol: A brief review of the literature [J]. Food Chemistry, 2016, 210: 402-414.

[17] PATEL D K. Ascaridole: a phytochemical of modern perspective [J]. Journal of Coastal Life Medicine,2017,5(2):88-94.

(责任编辑: 田　喆)