

出國報告(出國類別：研習)

## 藥品檢驗分析技術應用研習

服務機關：衛生福利部食品藥物管理署

姓名職稱：黃昱綺技士、黃竹珈助理研究員、陳品秀技士

派赴國家：中國

出國期間：105 年 11 月 13 日至 105 年 11 月 18 日

報告日期：105 年 12 月 9 日

## 壹、摘要

囿於中藥材之基原及炮製方法複雜，易造成中藥材鑑定困難；另，近年來食品及藥品摻偽事件頻傳，但快速確認之分析技術卻尚未成熟，為瞭解紅外光光譜儀於中藥材鑑定及摻偽檢驗應用之可行性，同時蒐集中藥材及摻偽檢驗技術與資訊，職等奉派至北京清華大學孫素琴研究員處，進行檢驗分析技術研習，進一步瞭解紅外光光譜儀於中藥材鑑定及摻偽檢驗等應用，並學習紅外光光譜儀操作技巧、實驗設計及光譜統計分析。

本次研習內容：根據孫素琴老師開發之三大方法(三級鑑別法、整體解析法及專家識別法)、九項措施(經典紅外光譜、二階導數光譜、二維相關光譜、主體成分解析、特定分析解析、相對含量比較、光譜數據庫檢索、相似度量化比較及多組分定量分析)進行地黃、茵陳蒿鑑別分析及蜂蜜鑑別等。

## 貳、目次

壹、摘要 .....	1
貳、目次 .....	2
參、本文 .....	3
一、目的.....	3
二、過程.....	4
三、課程內容.....	7
四、地黃藥材分析結果.....	20
五、茵陳蒿等藥材分析結果.....	28
六、軟體應用及問答集.....	34
七、心得及建議 .....	40
肆、附錄 .....	43

## 參、本文

### 一、目的

105年9月24日北京清華大學研究員孫素琴老師至本署進行了一場紅外光宏觀組學的演講，介紹了紅外光譜於中藥材誤用、摻偽及食品摻偽檢驗的應用，演講中孫老師直接明白的傳達了紅外光光譜於中藥材及食品檢驗上更多的可能性。因為相對於質譜分析技術，紅外光譜分析將檢體視為一個整體，基於紅外光譜的指紋性，將複雜的未知物辨識問題簡單化。近年來台灣曾發生多起食品摻偽進而影響食品消費信心的事件，前述事件發生時，本署的檢驗能力皆在關鍵時刻發揮極大的作用，但不可否認，檢驗未知物不管對檢驗方法或是儀器皆是很大的挑戰。若是能整理規劃出一簡易方便的初篩模式，將可加速未知物檢驗。

除了食品摻偽外，中藥材誤用、產地鑑別及辨別炮製產品等，也可以利用孫老師開發之三大方法(三級鑑別法、整體解析法及專家識別法)；九項措施(經典紅外光譜、二階導數光譜、二維相關光譜、主體成分解析、特定分析解析、相對含量比較、光譜數據庫檢索、相似度量比較及多組分定量分析)，提供快速便利之初步辨識。今年105年11月職等奉派至北京清華大學孫素琴老師實驗室研習，已初步掌握三級鑑別法及其他措施使用時機及背後理論，並且實際操作地黃、茵陳蒿等藥材，並取得結果(相關結果將另做說明)。希望以此次習得之紅外光檢驗方法及紅外光光譜分析技術建立快速便利之初篩方法，搭配既有之組織鏡檢、分子生物、質譜分析指標成分等，克服目前中藥材因為炮製或是產地不同，造成檢驗、分辨之困難，並持續與國際接軌。此次行程亦於北京同仁堂購入數項中藥材，擴增本署中藥材標本庫之內容，供日後中藥材檢驗所需。

## 二、過程

於 105 年 11 月 13 日赴中國北京清華大學孫素琴老師實驗室進行藥品檢驗分析技術應用研習，進行紅外線光譜分析儀實務操作訓練及學習相關基礎理論，並於 104 年 11 月 18 日返抵國門，行程及工作紀要如下表：

日期	地區及行程	研習內容
105/11/13 (日)	臺灣臺北-中國北京	去程
105/11/14 (一)	北京清華大學	紅外線光譜儀儀器操作演練及生地黃與熟地黃之實作分析
105/11/15 (二)	北京清華大學	1. 茵陳蒿、青蒿、牛至等 6 件檢體實作分析 2. 混合物紅外光譜分析方法，包括三級鑑定法(經典紅外光譜、二階導數光譜、二維相關光譜)等
105/11/16 (三)	北京清華大學	1. 紅外光譜整體解析，透過辨認成分官能基，比較檢體與標準品圖譜，解析混合物的組成 2. 成果報告與討論
105/11/17 (四)	中國醫學科學院 藥用植物研究所	1. 專家識別法-多組分定量分析等化學計量法及其軟體應用 2. 參觀藥用植物園
105/11/18 (五)	中國北京-臺灣臺北	購買中藥材 回程

## 北京清華大學

近年來，食品及藥品摻偽事件頻傳，快速確認不法成分技術尚未完整。了解紅外光光譜儀於中藥材鑑定或摻偽檢驗應用，並搜集中藥材及摻偽相關檢驗技術、資訊及實務經驗，有助於應用於本署相關研究及檢驗業務，並持續與國際接軌。

### 人員介紹

孫素琴研究員：

1978 年畢業於清華大學工物系，之後研究生涯皆在清華大學進行。目前兼任北京理化分析測試技術學會副理事長、“光譜學與光譜分析”副主編、“光散射學報”、“現代儀器”編委及美國藥典委員會（USP）脫脂乳粉顧問組專家成員。其主要研究領域：分子振動光譜學（中紅外光譜/近紅外光譜/拉曼光譜）；二維相關光譜學及其在混合物分析研究中的應用、化學計量學及其在混合物振動光譜解析中的應用、中藥和食品等複雜混合物體系的分析表徵方法學。並在國際上首次提出了針對複雜混合物的“多級紅外光譜宏觀指紋分析法”。該法是在單分子振動理論的基礎上擴展了多分子振動理論。目前已發表相關學術論文近 300 篇，其中 SCI 論文近 200 篇，獲中國發明專利 3 項，已出版中英文學術專著 4 部之多，多次獲得中國分析測試協會 CAIA 獎，亦多次在國內外舉行的國際會議上受邀演講，並於“第 4 屆二維相關光譜國際會議”擔任共同主席。

周群副教授：1991 年至清華大學化學系工作至今，於 2001 年和 2008 年分別獲得清華大學碩士和博士學位，現任清華大學化學系副教授。多年來致力紅外光光譜及拉曼光譜的研究工作。主要研究領域為二維相關光譜法、分子光譜法、文物鑑定以及中藥和食品的宏觀質量控制。現任“計算機與應用化學”雜誌常務編委、“光譜學與光譜分析”雜誌編委、京理化分析測試技術學會光譜分會理事。發表論文 60 餘篇、專著 1 本、發明專利 3 項。

## 清華大學沿革

清華大學，舊稱清華學堂、清華學校、國立清華大學，是一所位於中華人民共和國北京市海淀區清華園的公立高等院校。最初為 1911 年清政府利用部分美國退還的庚子賠款所建留美預備學校「遊美學務處」及附設「肄業館」，於 1925 年始設大學部。抗日戰爭爆發後，清華大學與北京大學、南開大學南遷至長沙，組建國立長沙臨時大學。1938 年再遷昆明，易名國立西南聯合大學。1946 年遷回清華園復校，擁有文、法、理、工、農等 5 個學院。1949 年中華人民共和國成立後，國立清華大學歸屬中央人民政府教育部，更名「清華大學」；而原國立清華大學校長梅貽琦於 1955 年在台灣新竹復校，仍沿用原名。

1952 年，中國高校進行院系調整，清華大學文、法、理、農、航天等院系外遷，吸納外校工科，轉為多科性工業大學，在土木、水利、計算機、核能等領域貢獻卓越，被譽為「工程師的搖籃」。1978 年後，逐步恢復理科、人文社科、經濟管理類學科。1999 年，原中央工藝美術學院併入，成立美術學院。2006 年，與北京協和醫學院合作辦學，培養臨床醫學專業學生。2012 年，原中國人民銀行研究生部併入，成立五道口金融學院。截至 2015 年 12 月，清華大學擁有美術館、博物館、圖書館、20 個學院，及近 200 個科研機構、5 家校辦產業以及一個科技園區。在國家和教育部的大力支持下，通過實施“211 工程”和“985 工程”，清華大學在學科建設、人才培養、師資隊伍、科學研究、社會服務、國際合作以及辦學條件等方面均躍上了一個新的台階。目前，清華大學共設 20 個學院、54 個系，已成為一所具有理學、工學、文學、藝術學、歷史學、哲學、經濟學、管理學、法學、教育學和醫學等 11 個學科門類的綜合性的研究型大學。2016 年 QS 世界大學排名、ARWU 將清華大學排在中國大學首位。

### 三、課程內容

#### (一) 紅外光光譜儀分析技術

##### A. 紅外光光譜儀

光譜研究始從牛頓，1666年牛頓證明白光可分為一系列不同顏色的可見光，若將此一系列可見光投影到一個屏幕上，便可以得到一條從紫色到紅色的光帶。這一現象，他稱之為光譜。

1800年英國科學家 W.Herschel 將來自太陽的輻射構成一幅與牛頓大致相同的光譜，將一支溫度計通過不同顏色的光，並且用另外一支不在光譜中的溫度計測量。他發現當溫度計從光譜的紫色末端紅色末端移動時，溫度計的溫度會升高，且到紅色末端之外的區域時，溫度計溫度上升到最高。這代表了兩種意義：1. 可見光區域紅色末端外有看不見的輻射區；2. 這個輻射區會產生熱。而這種射線因存在可見光區域紅色末端之外，因此稱之為紅外線。

20世紀初 W.Coblentz 使紅外光譜研究有了極大的演進，奠定了近代紅外光譜學基礎。他測定了 120 種有機化合物的紅外光譜，並建立了圖譜。從此，紅外吸收光譜與分子結構之間的關係才開始確認。

紅外光譜儀主要由光源、樣品室、單色器以及檢測器等部分構成。傳統使用色散型紅外光譜儀，最初採用的分光系統是稜鏡，但其分辨率低，已經被淘汰，之後用光柵進行分光，提高分辨能力，擴大測量範圍，但是在收集紅外光譜圖時，掃描速度太慢，現也已較少使用。隨著科技的進步發展，紅外光譜儀也不斷改善。從 70 年代後，大多改採用傅立葉轉換儀，傅立葉轉換紅外光譜儀是目前最為普遍的紅外光譜儀類型。與色散型紅外光譜儀相比，傅立葉轉換紅外光譜儀不使用狹縫或光柵分光，因此到達檢測器的輻射強度增大，提高了光譜的信號/雜訊比。它是以干涉儀取代單色發光器(稜鏡)，也就是以移動的鏡片取代光源產生的部分輻射，產生的干涉圖可利用「傅立葉轉換」方程式轉換，以便從一連串重疊頻率

中取出光譜。這個技術的優勢在於約 1 秒內可以得到所有光譜，並利用電腦來獲得並平均幾種光譜掃描。也因為傅立葉轉換紅外光譜儀具有波長精度高、分辨率高、重現性好等優點，所以，傅立葉轉換紅外光譜儀已經取代色散型紅外光譜儀，成為最常被使用的紅外光譜儀。

## B. 紅外光譜樣品分析技術

進行紅外光光譜儀分析前，須依據檢品性質，選擇不同配製方式，簡述如下：

(1) 固體樣品：對於固體樣品，可以使用壓片法、調糊法和薄膜法。

### A. 壓片法：

固體樣品製備最常使用的是壓片法。壓片法是一種傳統簡便易行的紅外光譜製備方法，現在仍然是紅外光譜實驗室常用的製樣方法。通常使用溴化鉀當作樣品的稀釋劑，有時也會使用氯化鉀。溴化鉀作為稀釋劑對絕大多數化合物，都是適用的，但是對於分子式中，含有氯離子的化合物，溴化鉀作為稀釋劑就不適用了，因為溴化鉀和樣品分子中的氯離子會發生陽離子交換，使測得的光譜發生很大的變化。對於分子式中含氯離子的化合物，應採用氯化鉀壓片法。溴化鉀和氯化鉀都是鹵化物，所以又稱為鹵化物壓片法。一般會使用 1 毫克左右樣品會和 100 毫克左右溴化鉀放在一起研磨，用 8 噸左右的壓力，將混合均勻的粉末壓成透明或半透明的薄片。但溴化鉀粉末容易吸附空氣中的水氣，溴化鉀粉末在使用之前，應經 120 °C 烘乾，置於乾燥器中備用，或將溴化鉀粉末長期保存在 40 °C 中。但採用溴化鉀壓片法，會有兩種缺點：第一個缺點，無機化合物和溴化鉀研磨時，尤其是施加壓力，可能發生離子交換；第二個缺點，用溴化鉀壓片法，在 3400  $\text{cm}^{-1}$  和 1640  $\text{cm}^{-1}$  左右會出現水( $\text{H}_2\text{O}$ )的吸收峰。這是由於溴化鉀研磨時，吸附空氣中的水蒸氣造成的。即便是在研磨之前已經烘乾的溴化鉀，也會出現這種現象。而一個簡單的消除水波峰影響的辦法，就是在同

樣的條件下，只用純溴化鉀，而不添加任何的其他樣品壓片，並測試其紅外光譜，將此光譜作為背景樣品的紅外光譜中扣除。

#### B. 調糊法：

調糊法適用於那些找不到合適的溶劑，但能粉碎的物質樣品。在瑪瑙研鉢中，將待測樣品和糊劑一起研磨，將樣品微細顆粒均勻分散在糊劑中測定光譜。最常用的糊劑有石蠟油和氟油，石蠟油研磨法可以有效的避免溴化鉀壓片法存在的兩個致命缺點：既不會發生離子交換，又不會吸附空氣中的水氣。但是，石蠟油研磨法也存在缺點，即在樣品光譜中，會出現碳氫吸收峰，而干擾樣品的真實吸收峰。

#### C. 薄膜法：

即把樣品當作厚度適當的透明薄膜，進行光譜測定。這種方法適用於能夠磨成膜的高分子物質，在定性分析時，用起來很方便。

### (2) 擴散反射(Diffuse reflectance)，也稱粉末反射法

目前有一種檢品配製方法是利用擴散反射，適用於表面粗糙、粉末性狀的樣品。擴散反射是一種易觀察之現象，當光自一物質表面反射，不管從何角度，觀察到的光強度都是相同的。擴散反射的檢品配製除了細粉末被壓縮以外，其餘都和壓片法的配製方法相同。擴散反射檢品之細粉末是裝置在一小金屬杯中，此杯放在檢品光束中。入射輻射線自杯底反射，而且在通過粉末檢品並返回時，發生輻射吸收，產生非常相似於壓片法的紅外光譜。而事實上，此產生的光譜是吸收光譜，不是透光光譜，但利用儀器，可以很容易將之轉換為透光光譜。擴散反射技術廣為應用於近紅外光光譜測定法，且若將薄膜與塗層置於反射背景中，也可用於檢測薄膜及塗層。此種技術亦為同質多晶體檢測的有用技術，因為分析用檢品之配置所需的研磨及壓縮最小，而壓縮會引起同質多晶體的互換。

### (3) 減弱總反射技術(Attenuated total reflectance, ATR)

最近較廣為發展的減弱總反射技術，常搭配硒化鋅(ZnSe)、金剛石或鍍片等反射附件。ATR 適用於溶液或水溶液、聚合物表面樣品、黑色橡膠類樣品。在此方法上，若主成分濃度相當濃，可以以相同技術操作空白基劑，即可以用檢品扣掉空白基劑，即得主成分光譜。另外，ATR 法也可提供用於描述同質多晶體特性的另一個技術。

(4) 基於中藥材有各種不同性質的藥材，以下就鮮品、硬品及黏稠品之檢體應如何粉碎均質，參考北京清華大學的實作經驗，簡要說明如下：

- A. 鮮品，如生薑等，因其粉性差，建議先切成小塊，再進行打碎，或直接用 ATR 檢測鮮品。
- B. 易黏稠品，如山茱萸、熟地、大棗、炙甘草等，可事先打好空白片，再將檢品塗抹於空白片上。或先取小量使用溴化鉀稀釋，並逐步稀釋至適量。
- C. 硬品，如三七，由於其粉性強，建議可直接粉碎。

## (二) 紅外光譜解析方法

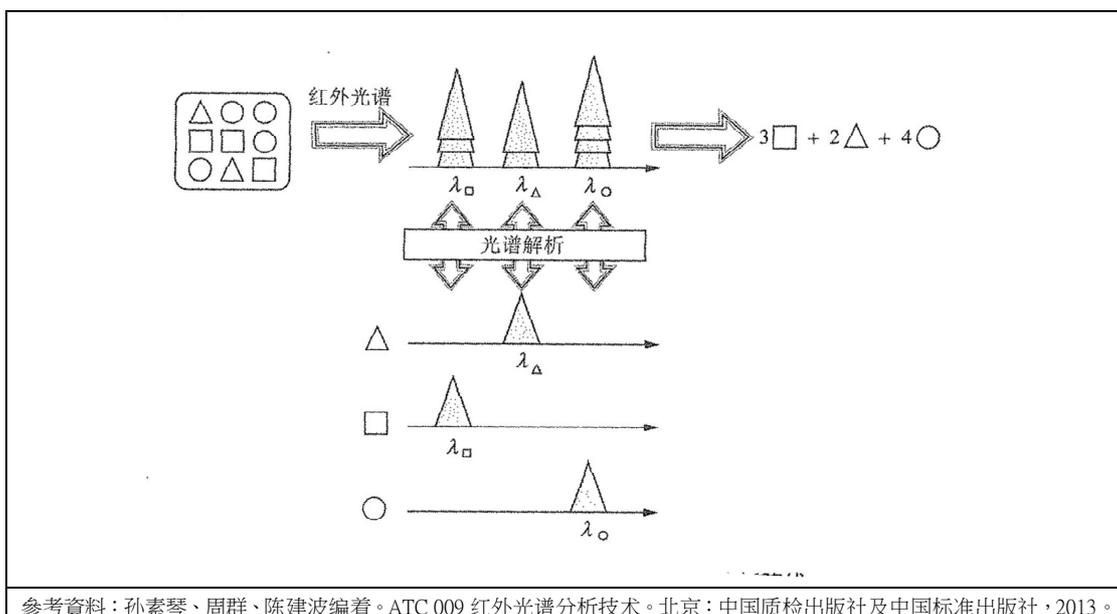
紅外光譜解析方法有三要素，分別是吸收峰的位置、強度和形狀。簡單闡述如下：

1. 位置是吸收峰最明顯的特徵，每一類吸收峰會出現在特定區域內，但是其位置又會因為化學結構的不同而有一定的差異。
2. 吸收峰的強度根據比爾定律，影響吸收峰強度的另一個因素，是待測樣品中相對應官能基的含量。
3. 峰的形狀也可用於判斷官能基的種類。

紅外光譜是一種傳統的化合物分子結構分析方法，主要用來判斷分子所含的官能基的結構特徵，或者將未知物的紅外光譜與標準物質進行比對，以確定未知物為何種分子。但上述分析方法，主要用於純物質的分析，對於混合物使用紅外光譜法對其進行分析，遠比純物質分析困難得多。而隨著紅外光譜儀器的發展，

不斷的精進其軟體和硬體的配件，加上大量的研究基礎，可以根據紅外光譜的基本理論與混合物紅外光譜指紋特徵所建立的「多級紅外光譜宏觀指紋分析法」，作為紅外光譜中對中藥食品等混合物進行更獨特分析鑑別的方法，此法又分為「整體解析法」、「三級鑑別法」、「專家識別法」。

傳統的混合物分析研究方法是對混合物進行分離，但對於混合物分離則需要藉助一定的物理和化學反應，而這些反應不可避免的，會對原始混合物的成分造成影響。也就是說，分離後所得到的物質，與原始成分是具有一定差異的。另外混合物的成分進行分離之後，很難直接反應混合物中各種成分並存時的相互作用訊息。最後一項缺點，是對混合物進行分離時，須對所有組成的成分一併進行分析，需要消耗大量的時間、人力和物力，也因此產生一系列的弊端。有鑑於此，「先分離後分析」做法的缺點，更突顯出「不分離即分析」為更理想的混合物分析方法。紅外線光譜法即是對混合物進行不分離，便進行分析的最理想方法。



根據紅外光譜的基本理論可以知道，分子官能基的紅外吸收是有規則可循的。在不同化學環境下，同一種官能基的吸收峰位置會有所差別，但會在一定的光譜區內出現；混合物中多種分子可能具有同一種官能基，雖然分子結構有所不同，但其吸收峰的位置必然會存在於某一特定光譜區域內；這說明了紅外光譜具有極強的指紋特徵，物質在結構和含量上的變化都會在紅外光譜上表現出來，因此，

可以根據紅外光譜上的差異對不同混合物進行整體鑑別。為了區分混合物與純物質紅外光譜的差異，我們將混合物紅外光譜的指紋特徵，稱為宏觀指紋特徵；而一系列混合物紅外光譜分析方法，則稱為多級紅外光譜宏觀指紋分析法。意思是指：根據混合物紅外光譜上的疊加峰，得到所含各種物質的結構訊息，再利用相對應的光譜進行鑑別，並借助特殊化學計量方法來對某些特定成分進行定性與定量分析。

### (三) 多級紅外光譜宏觀指紋分析法

鑒於混合物紅外光譜解析所面臨的種種難題，北京清華大學孫素琴教授建立了一系列方法，即「多級紅外光譜紅關指紋分析法」。具體可以概括為三大方法，九項措施，簡介如下：

整體解析法：區分為 1.主體成分析；2.特定成分析；3.相對含量比較。透過官能基指認或與標準圖譜比較，可以根據混合物紅外光譜上某種成分特徵峰對混合物的成分進行定性分析，也可以根據特徵峰相對強度的變化得知某些成分相對含量的變化。

三級鑑別法：區分為 1.經典紅外光譜；2.二階導數光譜；3.二維相關光譜。三級鑑別是指利用光譜將相似光譜間的差異放大，使更容易鑑別區分相似混合物。而傳統紅外光譜是對混合物進行鑑別的基礎，即為一級鑑別；二階導數紅外光譜能夠放大紅外光譜上的差異，為二級鑑別；二維相關紅外光譜可以利用樣品有另一參數存在時，將傳統光譜在二維上展開，即為三級鑑別。

專家識別法：區分為 1.光譜數據庫檢索；2.相似度量化評論；3.多組分定量分析。藉由光譜數據庫、模式識別和多元校正模型，透過軟體來計算分析樣品，而無須十分專業的紅外線光譜背景。



以下將針對九項措施，詳細簡介：

### 1. 主體成分析

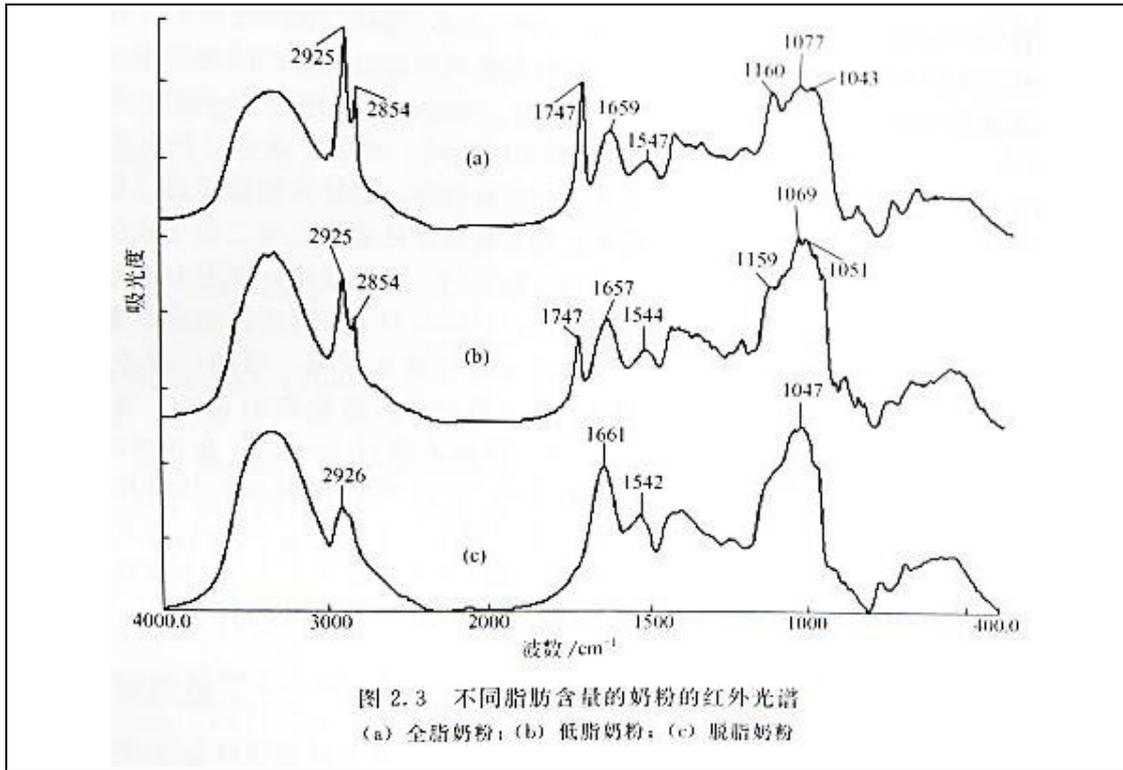
混合物中的主成分會在其紅外線光譜上表現出明顯的特徵峰，可以使用傳統的官能基指認或者與純物質圖譜比較的方法，確認混合物中的主成分，此為解析大量成分的方法。但需注意，在分析紅外線光譜吸收峰時，要考慮到峰的位置、強度和形狀三個要素。要確定一種官能基的存在時，應考慮到該官能基的多個吸收峰；在確定某一分子的存在時，應考慮到該分子所含的多個官能基的吸收峰。

### 2. 特定成分析

將混合物的紅外線光譜與純物質的紅外線光譜進行比較，可以確認混合物中某種特定成分的存在—此為定性分析。但如果某種成分含量很高，則混合物的紅外線光譜可能與該成分的紅外線光譜高度相似，隨著含量降低，混合物光譜上所呈現該成分的吸收峰強度，也會逐漸減弱，數量也會逐漸減少，以致只有該成分強度最高或最獨特的部分特徵峰，會顯現出來。

### 3. 相對含量比較

對於混合物中不同的成分，可以根據其相對峰強度的變化得知其相對含量的改變。舉例如下：



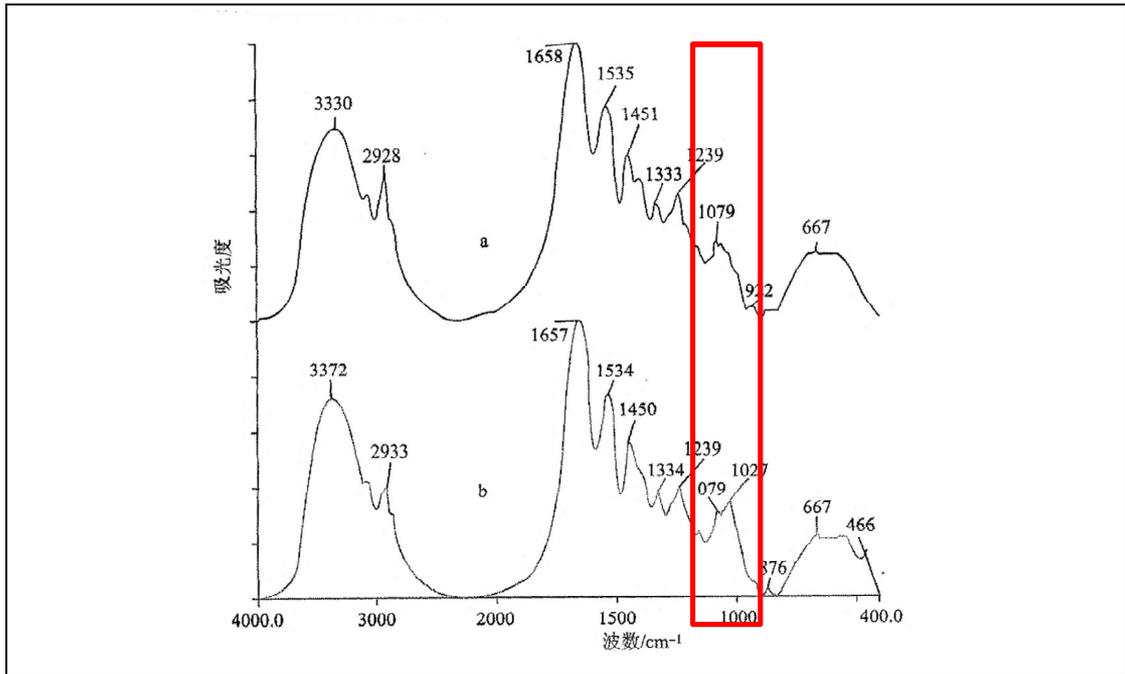
參考資料：孫素琴、周群、陳建波編著。ATC 009 紅外光譜分析技術。北京：中國質檢出版社及中國標準出版社，2013。

在  $1747\text{ cm}^{-1}$  是各奶粉中，脂肪含量的特徵峰， $1659\text{ cm}^{-1}$  是蛋白質某官能基的特徵峰，由以上圖示，可證明

- (1)  $1747\text{ cm}^{-1}$  特徵峰 >  $1659\text{ cm}^{-1}$  特徵峰—全脂
- (2)  $1747\text{ cm}^{-1}$  特徵峰 <  $1659\text{ cm}^{-1}$  特徵峰—低脂
- (3) 無  $1747\text{ cm}^{-1}$  特徵峰—脫脂

#### 4. 經典紅外光譜

能夠取得完美的紅外線光譜是所有混合物紅外線光譜分析進行的基礎。由於不同混合物間的差異可能非常微弱，因此一定要保證得到高訊號/雜訊比，才能確認得到正確的分析數據。而紅外線光譜儀器的優劣有時會直接影響樣品測試結果的準確性，進而影響分析數據的正確性。因此，常見影響紅外線光譜儀優劣的因素，包括儀器中光源、干涉儀、檢測器，以及如何處理水蒸氣和二氧化碳對光譜背景的影響，也就成為判斷一台紅外線光譜儀優劣重要指標之一。

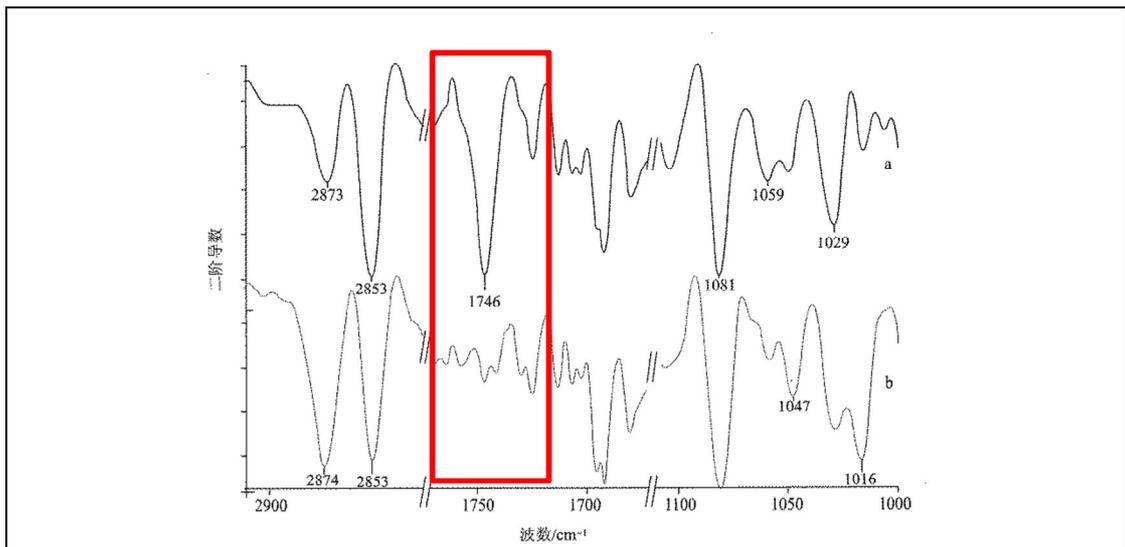


經典紅外光譜

參考資料：孫素琴、周群、陳建波編著。ATC 009 紅外光譜分析技術。北京：中國質檢出版社及中國標準出版社，2013。

### 5. 二階導數光譜

二階導數光譜能夠輕易辨別紅外線光譜中重疊的吸收峰，增強圖譜的特徵性，提高分辨率，可用於鑑別原紅外線光譜上不易區分的相似樣品。導數光譜也叫微分光譜，是對原始光譜數據進行微分處理而得到的吸光度對波長的變化率曲線。

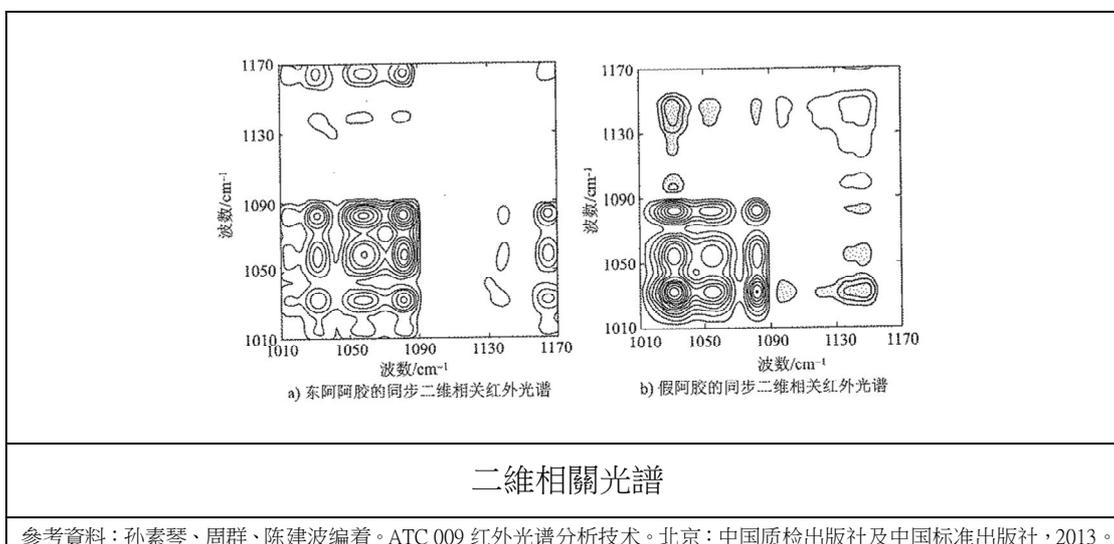


二階導數光譜

參考資料：孫素琴、周群、陳建波編著。ATC 009 紅外光譜分析技術。北京：中國質檢出版社及中國標準出版社，2013。

## 6. 二維相關光譜

與傳統的紅外線光譜方法比較，二維相關光譜導入另一變動的參數，將傳統光譜在二維上展開，來獲得更多樣品的訊息，並提高圖譜的分辨率，特別適合於鑑別相似度高的樣品。



## 7. 光譜數據庫檢索

光譜數據庫是紅外線光譜分析法的重要組成部分。對一個未知的純物質，將紅外線光譜在其對應的圖譜數據庫中進行檢索，可以確定該未知純物質的分子結構，或者找出其結構類似的物質。若混合物中，某種成分的含量較高時，該混合物的紅外線光譜就會與這種純物質的紅外線光譜非常相似。

## 8. 相似度量化的評論

客觀的判別同類或相似性高的樣品之間的異同，需要對紅外線光譜間的相似性或差異性進行量化。最簡單的做法就是計算兩種紅外線光譜間的相關係數，透過相關係數的高低來判斷樣品間的相似性。當然，儀器分析軟體必須附有計算相關係數的軟體，而對於更加複雜的情況，必須建立起另一種相對應的模式識別方法。簡單的說，模式識別方法就是分類。可分為兩種：無監督和有監督的模式識別方法。

- (1) 無監督的模式識別方法：無監督的模式識別通常使用的是聚類分析的方法，也就是物以類聚的意思。首先把所有樣品看作一類，然後再逐步細分為小類。
- (2) 有監督的模式識別方法：是指根據已得到分類的規則，再根據這些規則去判斷未知樣品的分類。

## 9. 多組分定量分析

當物質的某個參數  $X$  無法進行直接測量時，採取的做法是尋找與參數  $X$  密切相關且可以直接測量的參數  $Y$ ，然後建立  $X$  與  $Y$  之間的對應關係。之後，只要知道  $Y$ ，就可以根據已有的對應關係，知道  $X$  的值。而尋找這種對應關係的過程，就是建立校正模型的過程。例如，在滴定分析中，根據消耗滴定劑體積的量，可以直接得到被滴定物質的濃度，就是使用同樣的方法。此校正模型的目的，就是對未知樣品中無法直接測量的參數進行定量分析，而其基本依據則是該參數與另一個可以直接測量的參數之間的線性關係。

### (四) 多級紅外光譜宏觀指紋分析的應用

1. 中藥材鑑別：混合物的紅外光譜與其所含成分密切相關，其中產地、栽培方式等因素均會導致中藥材成分的變化。當中藥材的組成有所變化時，其紅外光譜必然也會隨之發生相對應的變化，由此可以對中藥材的真偽、產地進行鑑別。但由於主成分的複雜性，不同藥材在紅外光譜上的差異可能極其微弱，因此需要使用足以分辨的紅外線光譜圖解分析技術，才能將這些差異顯現出來。因此，需使用多級紅外光譜宏觀指紋分析之三種方法才可以對不同產地、不同栽培方式、部位的中藥材進行有效的鑑別分析。包括建立中藥材紅外光譜識別模式：收集足夠具有代表性樣品，然後透過軟體計算分析得到對這些檢體進行準確鑑別的合理模式，最終將這些模式應用到對未知檢體進行歸類判別分析中，以得到對該未知檢體產地的鑑別。

2. 炮製後的中藥鑑別：部分中藥在用於治療疾病之前，必須經過炮製，藉由炮製使毒性物質或有效成分發生變化，以此來改變藥性而達到抑毒增效等目的。但炮製若不到合適的程度，則不具應有的功效；若炮製太過，亦可能會發生其他的副作用，同樣無法達到應有的療效。因此，中藥炮製成品仍需要有客觀化的指標。若利用紅外線光譜、二階導數紅外光譜和二維相關紅外光譜相結合，對中藥炮製成品進行快速整體分析，可以直觀、快速的鑑別炮製品的不同。
3. 中藥顆粒劑的鑑別：中藥顆粒劑是根據中醫藥理和臨床應用的需要，對中藥材進行特殊加工形成的一種便於攜帶和服用的新劑型。因此，其已不具備原藥材的性狀特徵，無法根據顯微組織和細胞特徵進行分析鑑別。但紅外光譜法可以針對各種性狀的中藥材進行分析，避免樣品分離提取過程對分析結果造成影響。
4. 藥用植物提取物的鑑別：藥用植物提取物是以傳統藥材為原料，包括：
  - (1) 單一化合物的提取物。
  - (2) 經過一定分離過程所獲得的部分，且成分較多的混合物提取物。
  - (3) 經過水或乙醇提取，未做任何分離的單一植物。要生產出功效確切、品質穩定的中藥提取物，原料藥的品質穩定是關鍵。但目前傳統中藥品質檢測，大多是憑經驗的外觀鑑別，沒有有效的定量指標。因此運用指紋圖譜品質控制技術，來改善中藥提取物品質標準，達到產品臨床療效穩定的程度。
5. 中藥注射劑的鑑別：中藥注射劑是以中醫藥理為基礎，採用現代科學技術，從中藥或天然藥物中提取的有效物質所製成的無菌溶液。中藥注射劑使用後產生不良反應的情況屢見不鮮，而造成不良反應的因素主要分為以下：
  - (1) 有效成分和主成分問題
  - (2) 原藥材的品質問題

(3) 生產技術問題

(4) 品質標準問題

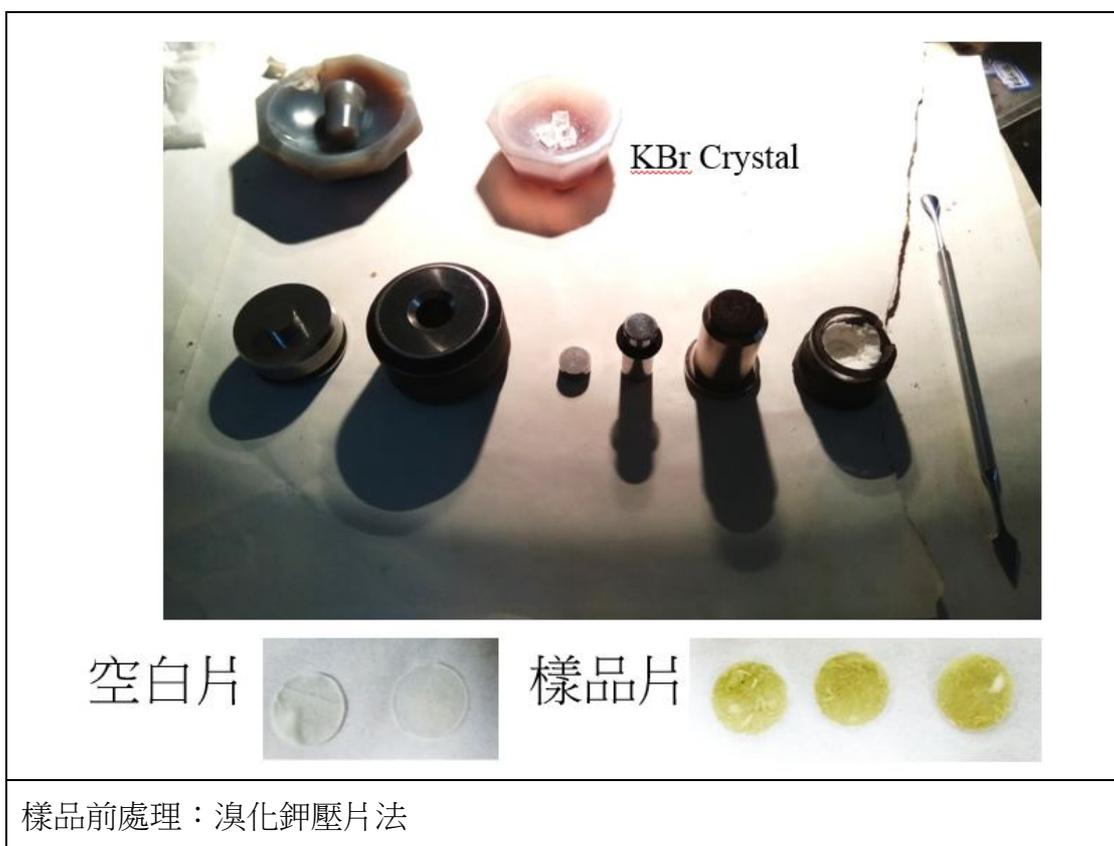
中藥注射劑雖有以上等問題，但透過紅外線光譜法可以對中藥注射劑全體成分進行整體鑑別，能夠對中藥注射劑的原藥材、生產技術及成品進行方便、快速的品質檢測。因此紅外光譜分析法用於混合物分析具有多方面的優勢：

- (1) 不會因為只關注於某些成分而忽略其他重要的成分。
- (2) 紅外線光譜能夠反應混合物中各種成分的結構與含量變化，能夠給予分子之間相互作用的訊息。
- (3) 紅外線光譜測試適合於各種尺寸、各種形式的樣本，也適合其他分析技術的運用。
- (4) 紅外線光譜測試基本上無須分離樣品或其他前處理的步驟，是最直接、快速、不影響檢體的分析方法。

#### 四、地黃藥材分析結果

“多級紅外光譜宏觀指紋分析法”，包含 3 種措施及 9 種方法。以下係根據孫老師的三級鑑定法對地黃及茵陳兩類檢體進行實測與解析。首先以地黃來看三級鑑定的內容與組成，接著再以茵陳為例，進行未知檢體的鑑別與解析。

進行三級鑑定法前，須先取得穿透度較佳的紅外光光譜圖，由於地黃及茵陳兩類檢體都是固體物質，故檢體製備是採用溴化鉀壓片法。



一般用於上打片的基本材料溴化鉀(以下以 KBr 表示)均為粉末，事前須送至烘箱，將水分烘乾，同時，在壓片之製備過程也必須小心環境中的濕度，避免打錠完後遇潮造成譜圖品質不佳，由於 KBr 一旦受潮，或是環境中水氣過多，壓片透明度變差，影響穿透度。由上圖可看到的 KBr 碎晶，根據馬老師的解釋，碎晶表面積較粉末少，比較不易受潮碎晶，不需要實驗前長時間乾燥。上圖中空白片，用於取得背景值，右邊為檢體壓片，檢體為纖維較多之青蒿的壓片。執行檢體壓片時，持續壓片失敗，因北京屬乾燥氣候，因非濕氣問題，推測可能是檢

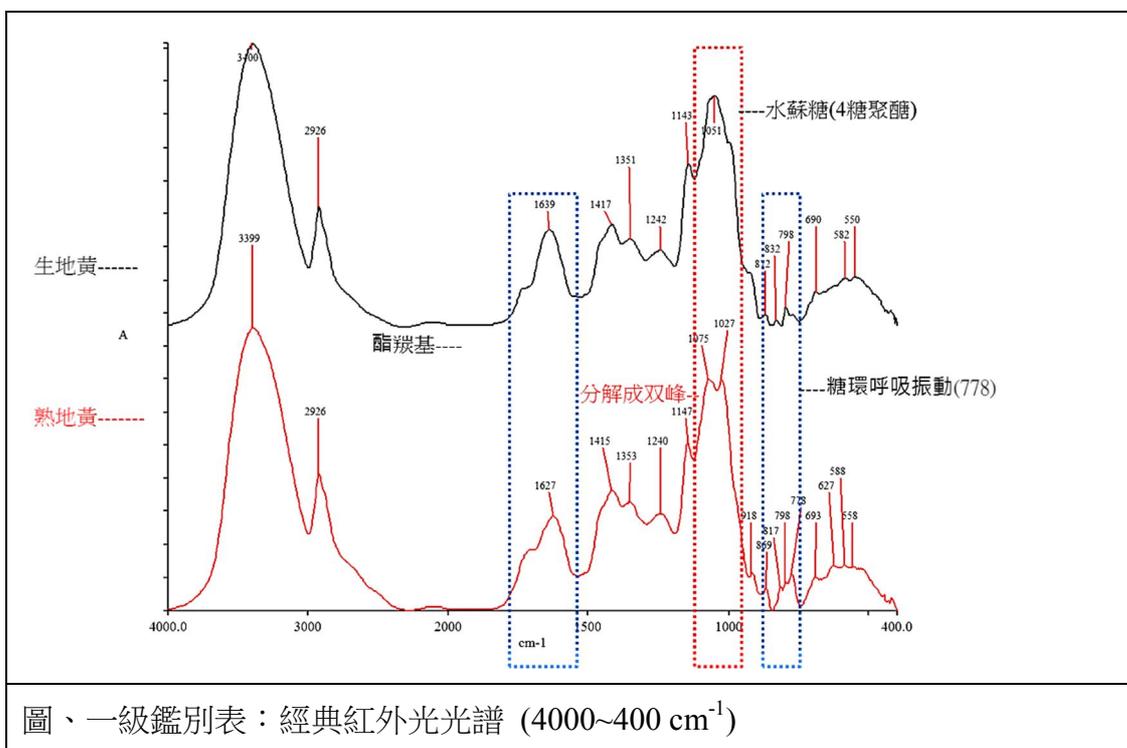
體粉末細緻度造成的干擾。由於在掃描譜圖過程，必須掌握穿透度最小值與最高值之差值，純物質檢驗時差異至少要有 70%以上，中藥或混合物則要須達差異 50%以上差距的水準。因此，除了濕度之外，壓片品質也受到檢體體粉末的性狀及研磨均勻度影響。實驗的必要條件是完成達標準的檢體壓片。

此次 2 種檢體中，地黃依照炮製方法分為生地黃及熟地黃，而鮮生地黃在台灣少見 (如下表)。此次帶去北京的地黃檢體分別有生地黃及熟地黃 2 種。

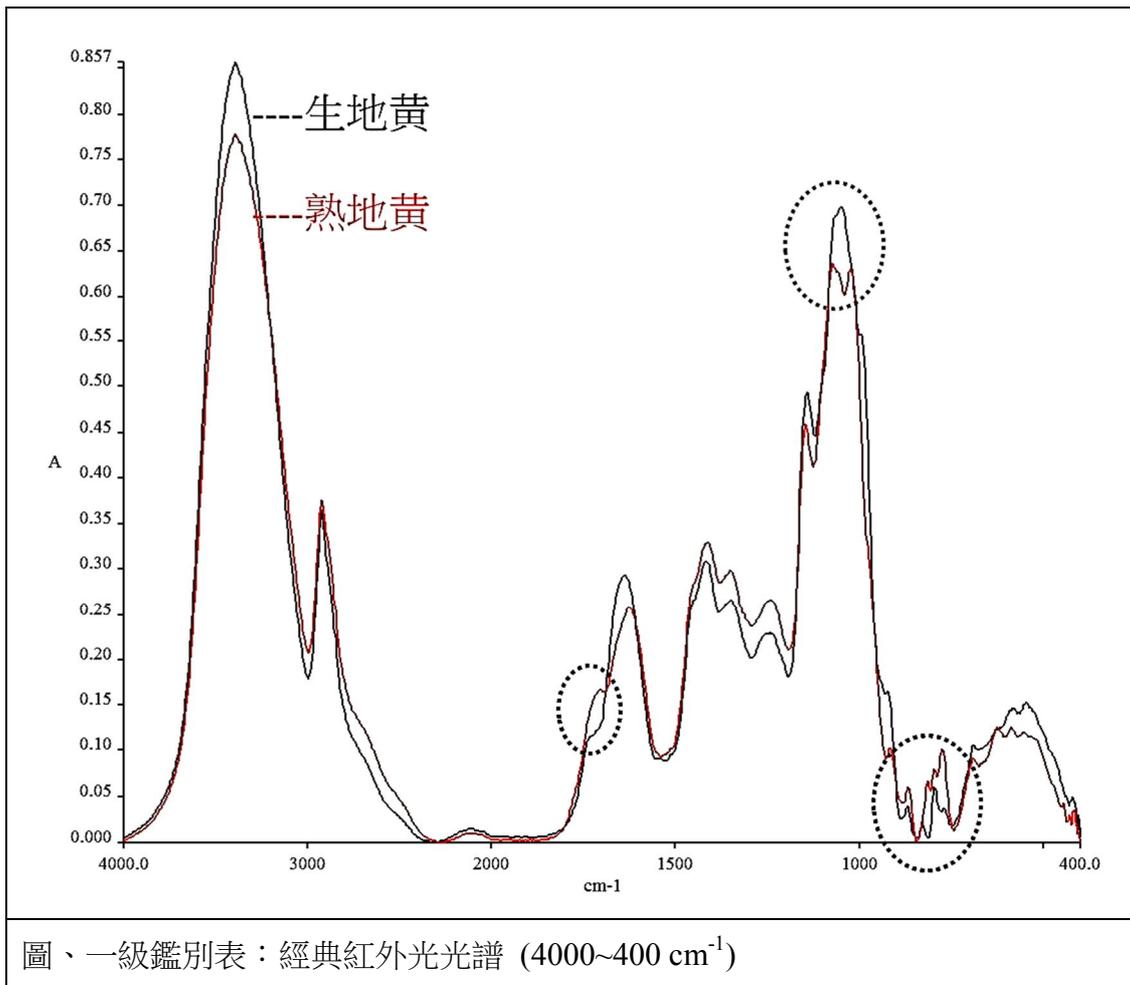
	鮮地黃	乾地黃	熟地黃
別稱	鮮生地	乾生地	熟地
炮製方法	鮮用地黃 臺灣少見	未經過炮製， 經烘培至八成乾	經過炮製 九蒸九曬
功效	清熱生津	清熱涼血	滋陰補血

表、地黃簡介

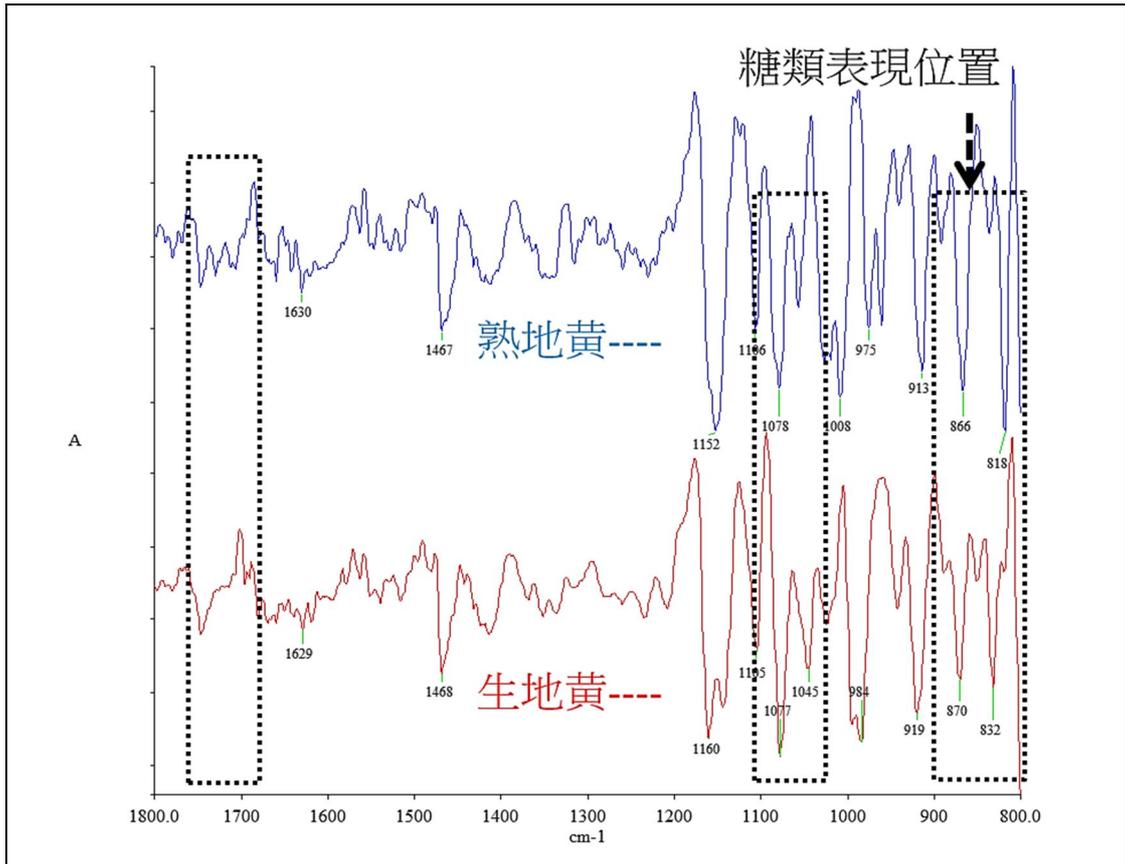
下圖黑線代表生地黃，紅線代表熟地黃。比較生地黃及熟地黃的光譜圖中  $1051\text{ cm}^{-1}$  位置的波峰形狀，生地黃的特徵峰形像是阿彌陀佛峰(孫老師對此峰型的暱稱)，熟地黃則分裂為雙峰。直接比較紅外光光譜圖即是一級鑑別法。



在譜圖上可以看到  $1639\text{ cm}^{-1}$  的地方標示酯羰基(carbonyl group)，也就是醛、酮、羧酸、羧酸衍生物； $1051\text{ cm}^{-1}$  是水蘇糖吸收位置，其為 4 糖的聚醣，為果糖、葡萄糖及 2 半乳糖的組合，是地黃重要成分之一； $778\text{ cm}^{-1}$  是糖環呼吸振動吸收位置。以生地黃及熟地黃的紅外光譜圖作疊圖，可以較明顯呈現兩者在吸收峰的位置、強度及峰型之不同，如下圖。

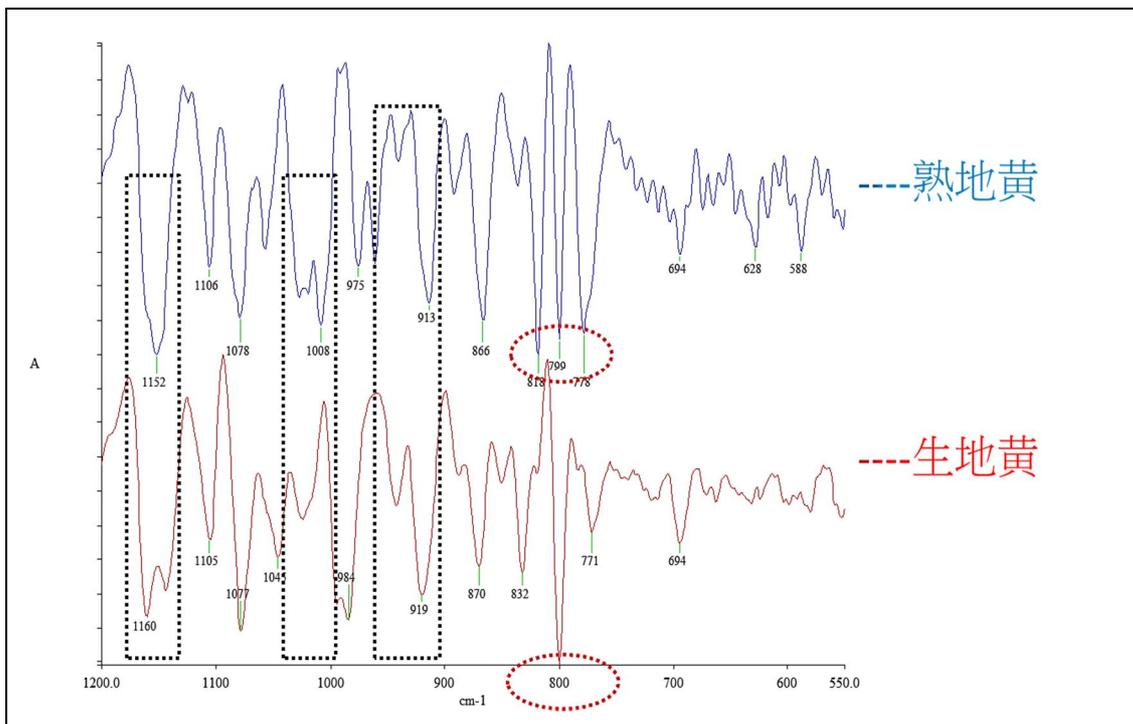


傳統上，多藉著比較紅外光圖譜比較光譜相異之處，然而當光譜間差異不明顯時，則需利用二級鑑別，放大光譜間差異後進行解析。二級鑑別法即是將一級鑑別中傳統紅外光吸收光圖譜進行二次微分，使之成為二階導數圖譜，以提高分辨率。下圖是對生地黃及熟地黃之紅外光吸收譜圖作微分後所產生之二階導數圖，下圖中的波谷相對於上圖的波峰，框起來的部分為兩者明顯差異之處，是做為比較圖譜差異的工具之一。另外要補充說明的是，最初取得紅外光穿透圖譜，需先轉換成紅外光吸收圖譜後，再求二階導數圖譜。

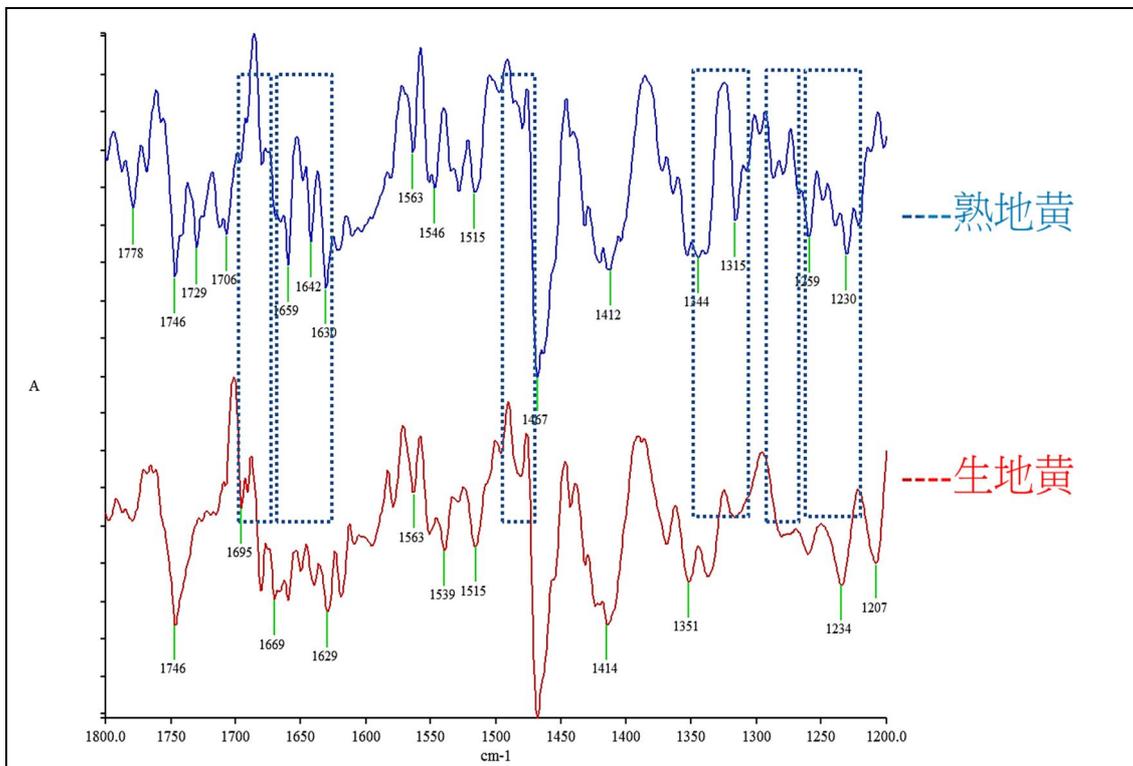


圖、二級鑑別：二階導數圖譜(1800~800  $\text{cm}^{-1}$ )

若將上圖 1800~800  $\text{cm}^{-1}$  範圍，分割為兩個範圍：波數 1200~550  $\text{cm}^{-1}$  及 1800~1200  $\text{cm}^{-1}$  進行比較，將比較容易辨別各光譜間差異，詳見下 2 圖。



圖、二級鑑別：二階導數圖譜(1200~550  $\text{cm}^{-1}$ )



圖、二級鑑別：二階導數圖譜(1800~1200  $\text{cm}^{-1}$ )

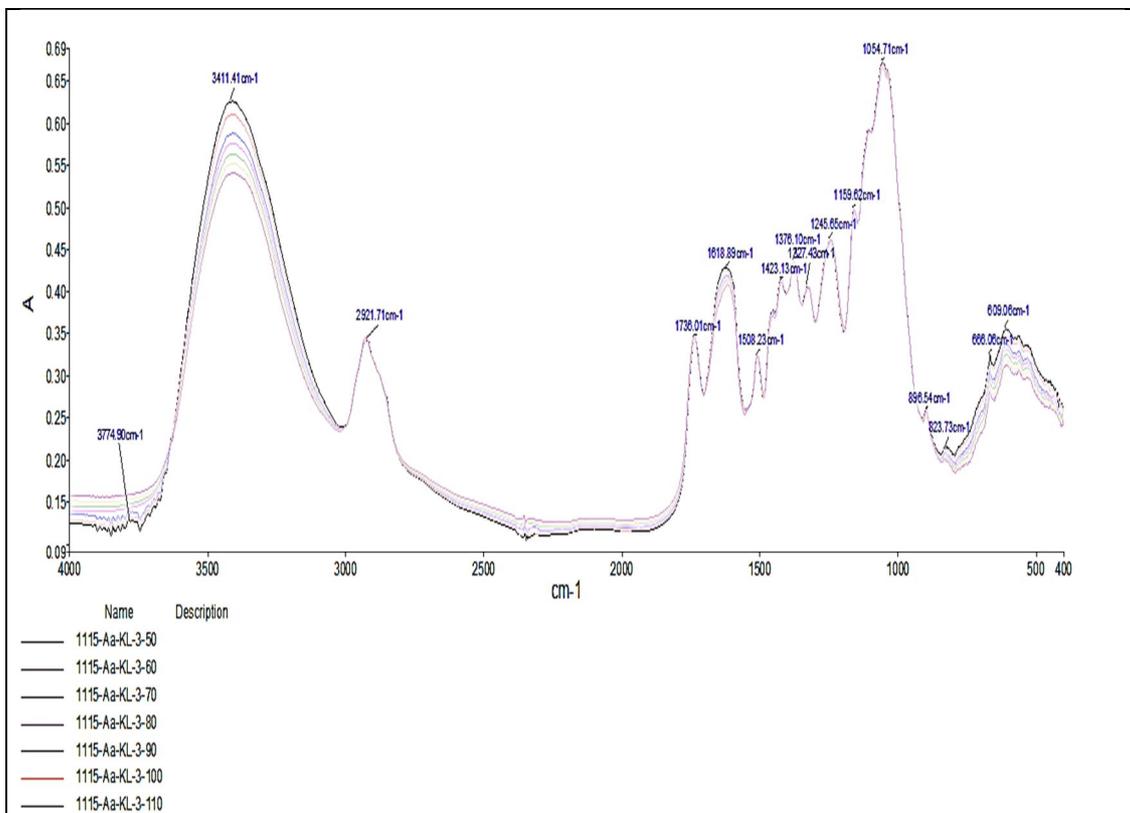
最後三級鑑定法，是基於增加一變因所產生變化之紅外光光譜，由軟體計算將光譜作自身相關而得之二維相關光譜。不同於傳統紅外光譜，外加一個微擾因素(變因如溫度、時間)，觀察檢體之紅外光光譜變化，溫度改變將反映在紅外光譜上，透過 8 種不同溫度下之檢體紅外光光譜，獲得更多檢體的訊息。本次兩種檢體係採用加熱器以及程式控制溫度變化作為實驗變因。

下圖是孫老師設計製造之第一代溫度控制附件裝置，目前已有商業化設備可供使用。將檢體的 KBr 壓片置入程式控制變溫的附件裝置中，以每分鐘  $2^{\circ}\text{C}$  的升溫速度進行加熱，每隔  $10^{\circ}\text{C}$  檢測一次，取得掃瞄範圍  $4000\sim 400\text{ cm}^{-1}$  的紅外線光譜(參數設定：光譜分辨率設定為  $4\text{ cm}^{-1}$ ，累加掃描 32 次)，即可獲得待測檢體系列紅外光光譜，亦稱作動態光譜。



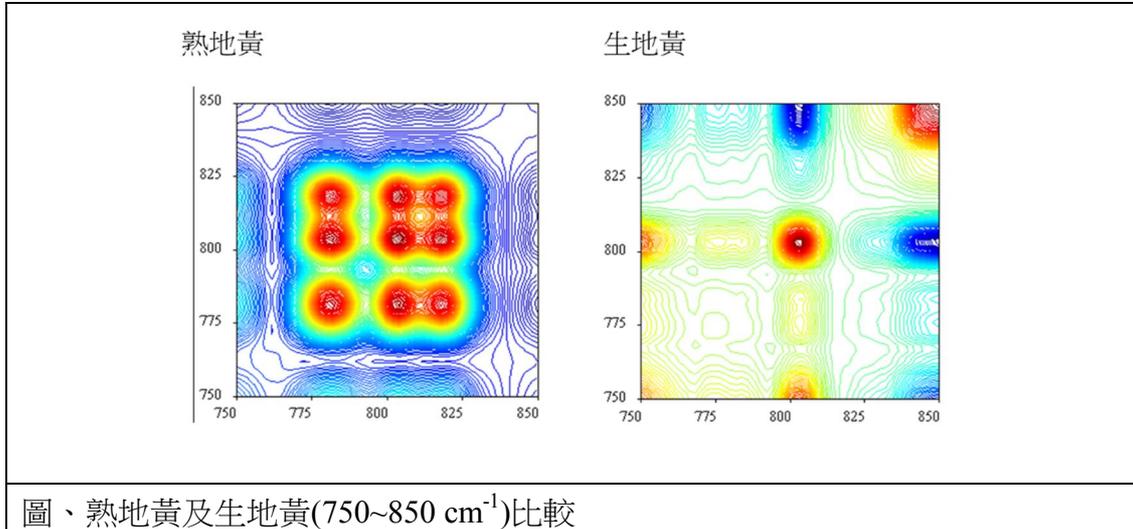
圖、第一代溫度控制附件裝置

下圖為 50~120°C各溫度下偵測之紅外光光譜圖疊圖



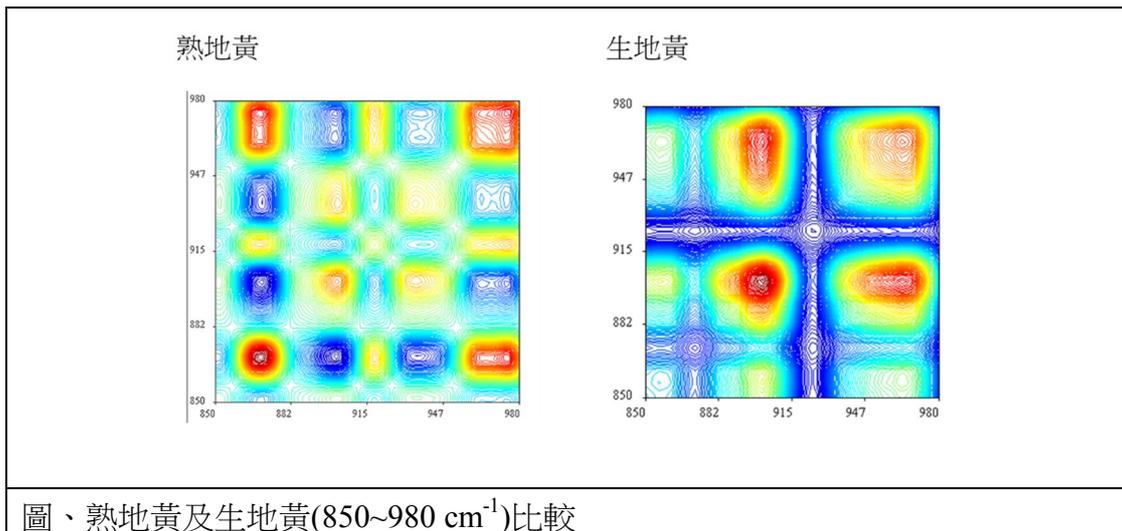
圖、三級鑑別：動態光譜

前述動態光譜利用孫老師及清華大學研發的軟體 TD，計算 8 張譜圖，即可獲得二維相關光圖，如下 6 圖(圖係依不同範圍分別作出之二維相關紅外光譜圖)。

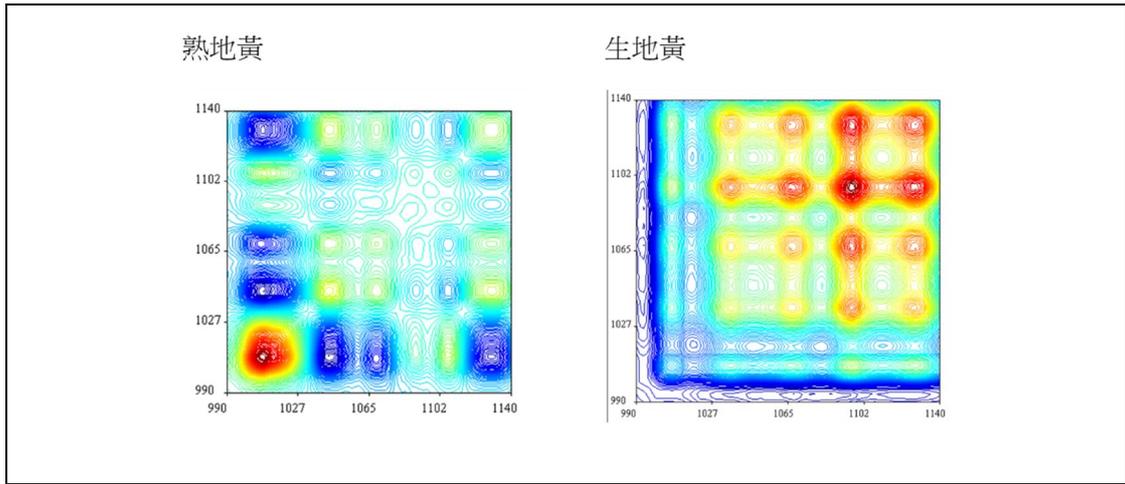


圖、熟地黃及生地黃(750~850  $\text{cm}^{-1}$ )比較

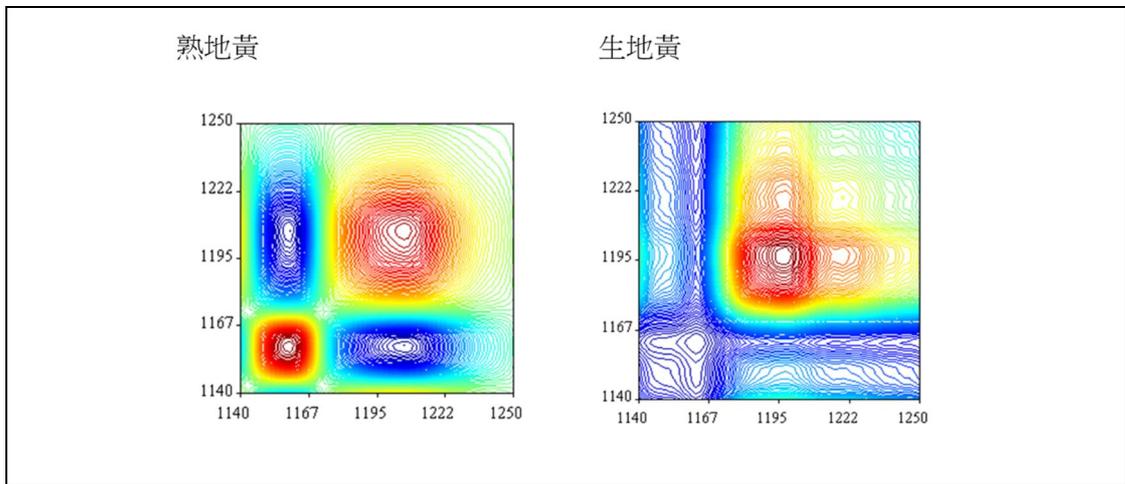
圖中顏色越紅，表示該波段對溫度的敏感度越高，於熟地黃之二維相關紅外光譜圖上畫對角線，可以看到有 3 個紅色的區塊，代表此範圍有 3 個波峰；於生地黃之二維相關紅光譜畫上對角線，則僅有 1 個波峰。二維光譜圖之對角線可呈現自動峰(Auto peak)，自動峰是呈現檢體各頻率範圍對溫度的敏感度，波峰位置表示該區段對溫度敏感度較高。



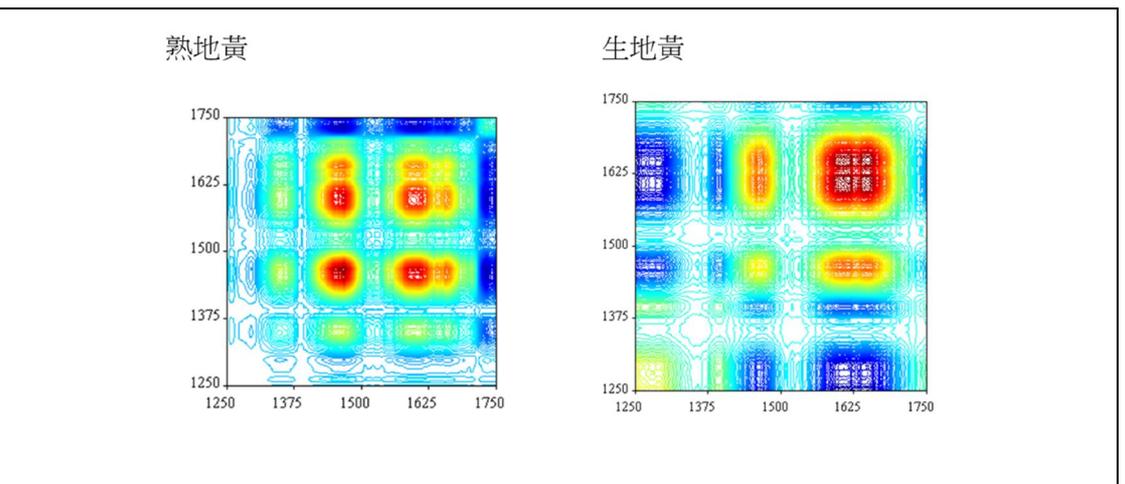
圖、熟地黃及生地黃(850~980  $\text{cm}^{-1}$ )比較



圖、熟地黃及生地黃(980~1140  $\text{cm}^{-1}$ )比較



圖、熟地黃及生地黃(1140~1250  $\text{cm}^{-1}$ )比較



圖、熟地黃及生地黃(1250~1750  $\text{cm}^{-1}$ )比較

此次的地黃藥材檢驗結果與孫老師多年前的實驗結果雷同，表示地黃檢驗不因地點或時間有改變，使用紅外光光譜檢驗地黃再現性佳。

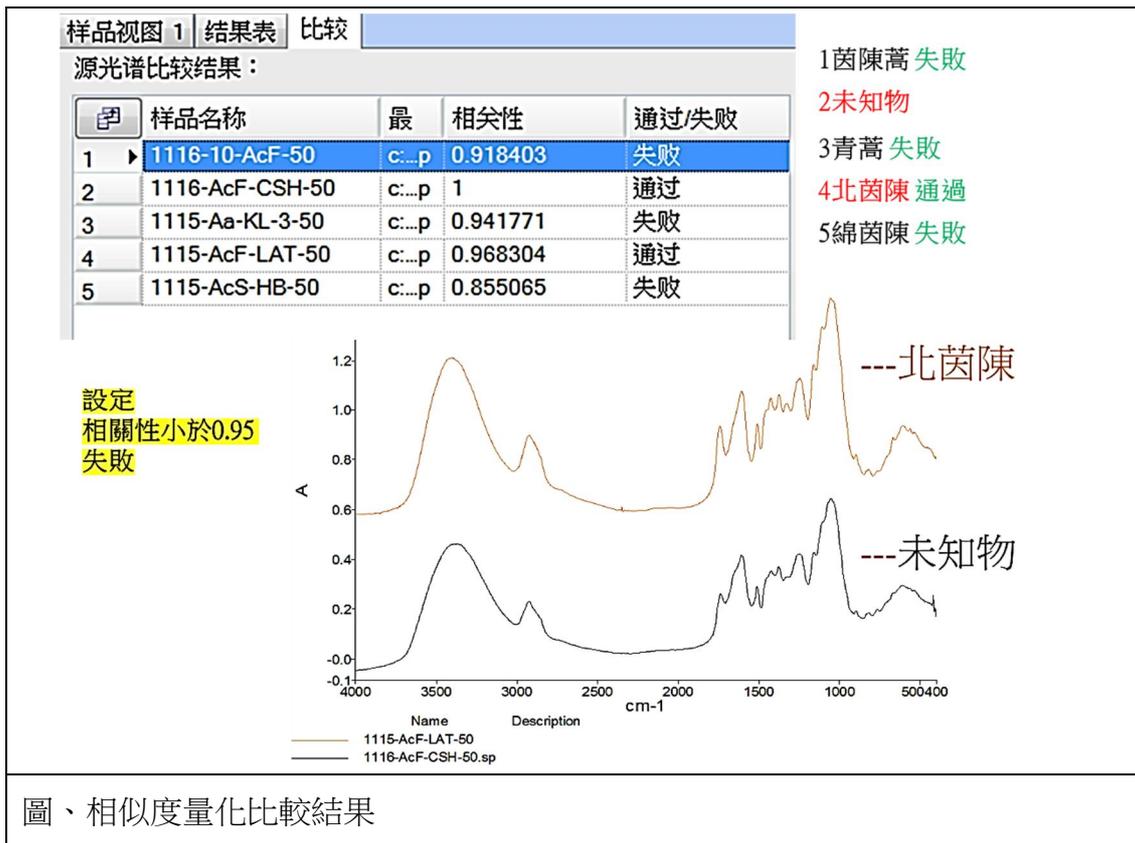
## 五、茵陳蒿等藥材分析結果

前面透過已知的 2 個樣本：比較生地黃與熟地黃的檢測結果，帶大家有次第的了解三級鑑定法的樣貌。本段落將透過茵陳等 4 種相關藥材檢體，來探索如何應用專家識別法及三級鑑定法來探索未知物檢體。首先感謝研檢組六科同仁協助準備相關 6 個樣品供演練，包含綿茵陳、北茵陳、茵陳蒿以及青蒿，與 1 份未知物檢體，如表 2。依據本署研究檢驗經驗，在台灣中藥鋪所販售的茵陳，使用北茵陳的誤用率偏高，因此，茵陳及其誤用品極具研究價值。

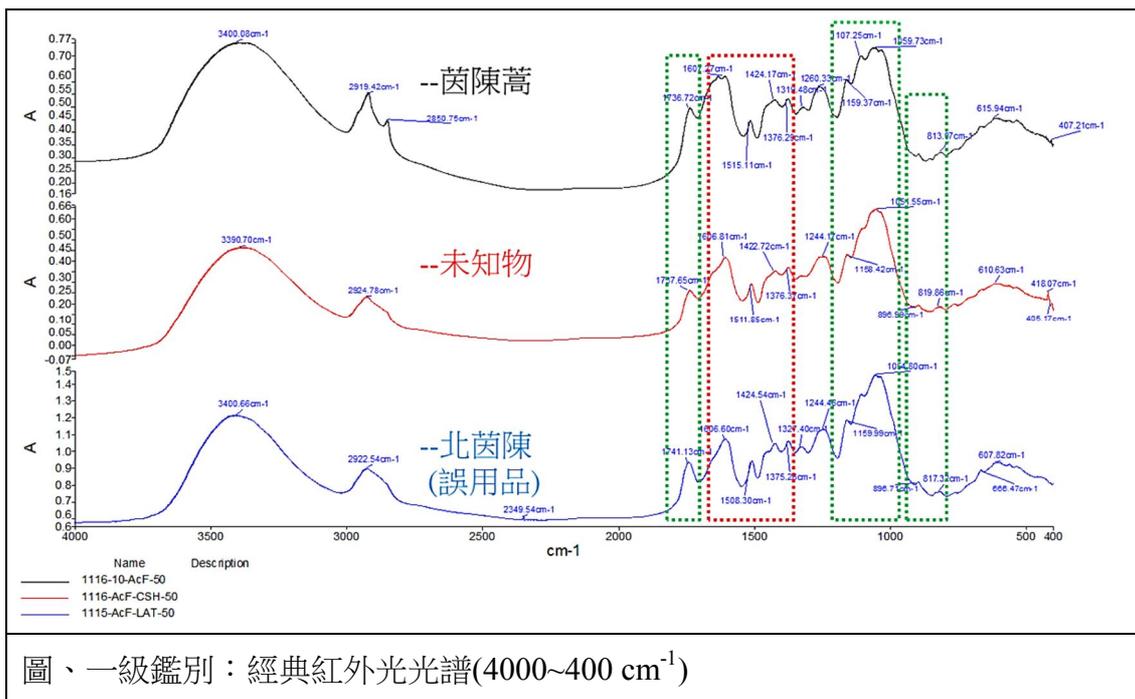
綿茵陳 (花茵陳)	北茵陳 (牛至)	茵陳蒿	青蒿 (黃花蒿)
菊科	唇形科	菊科	菊科
春採去根 幼苗	民間誤用品	秋割帶花 序地上部	地上部
黃疸	利尿、發汗	黃疸	解暑、截瘧

表、茵陳簡介

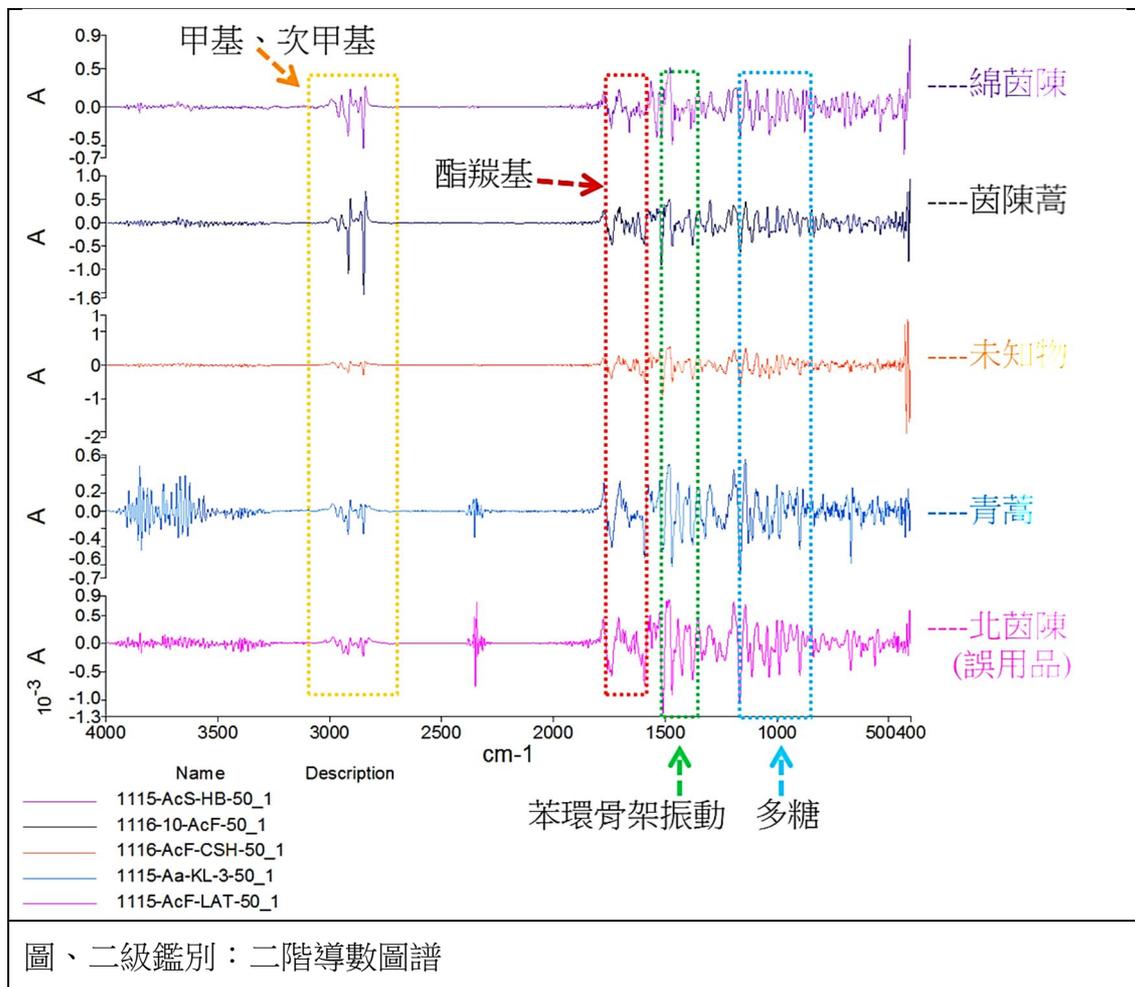
利用紅外光光譜儀進行各檢體檢測，收集各檢體之紅外光光譜及二維相關光譜等資訊，並利用紅外光光譜儀的光譜分析軟體進行相似度分析，比較未知物與茵陳等 4 件藥材(參數設定相關係數值為 0.95)，先將相關性大於 0.95 的檢體假設為目標物。下圖中，未知物與北茵陳的相關性達 0.96804，比對結果未知物檢體可能含有北茵陳。另一檢體青蒿與未知物檢體之相關係亦有 0.941771，推測該未知物檢體亦可能也含有青蒿。



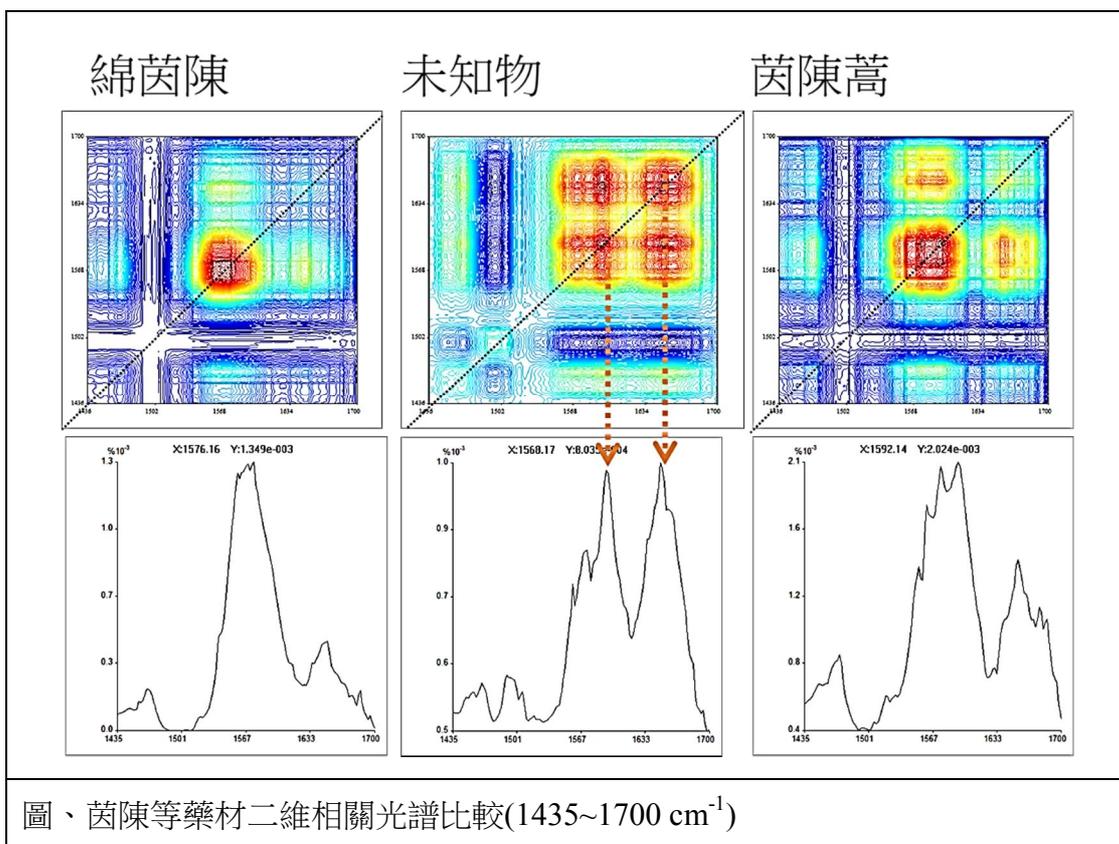
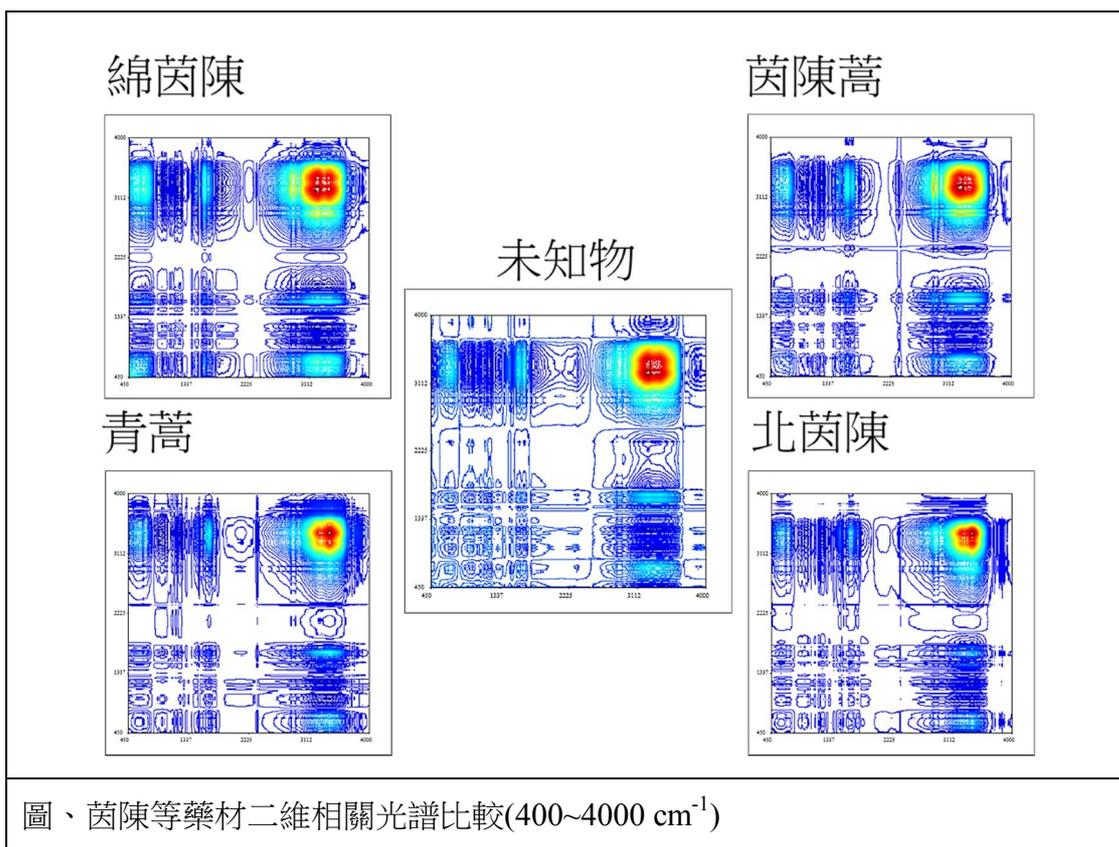
下圖為比較綿茵陳、未知物及北茵陳等 3 種物質之一級紅外光譜譜圖差異。黑色線(上)為綿茵陳，藍色線(下)為北茵陳，紅色線(中)則為未知物檢體。光譜 1741  $\text{cm}^{-1}$  位置是酯羰基；光譜 1500  $\text{cm}^{-1}$  位置是苯環骨架振動；光譜 1000  $\text{cm}^{-1}$  是糖區；波數 800  $\text{cm}^{-1}$  位置是糖環呼吸振動環。

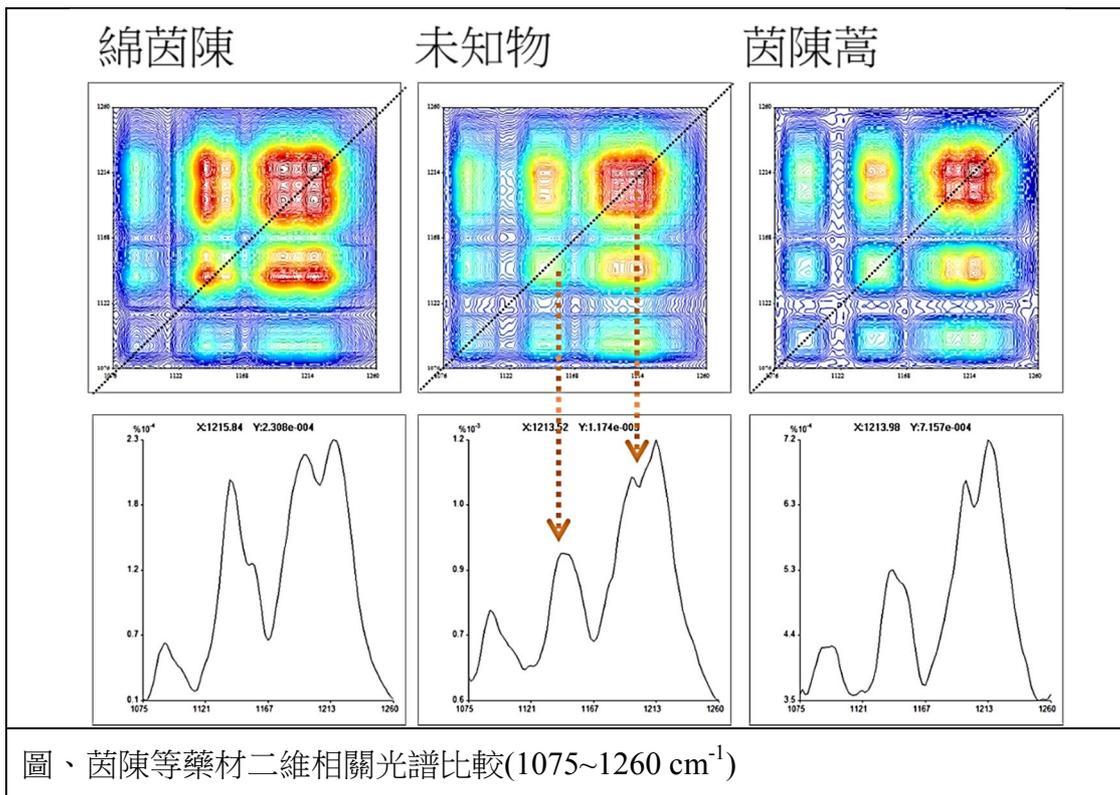
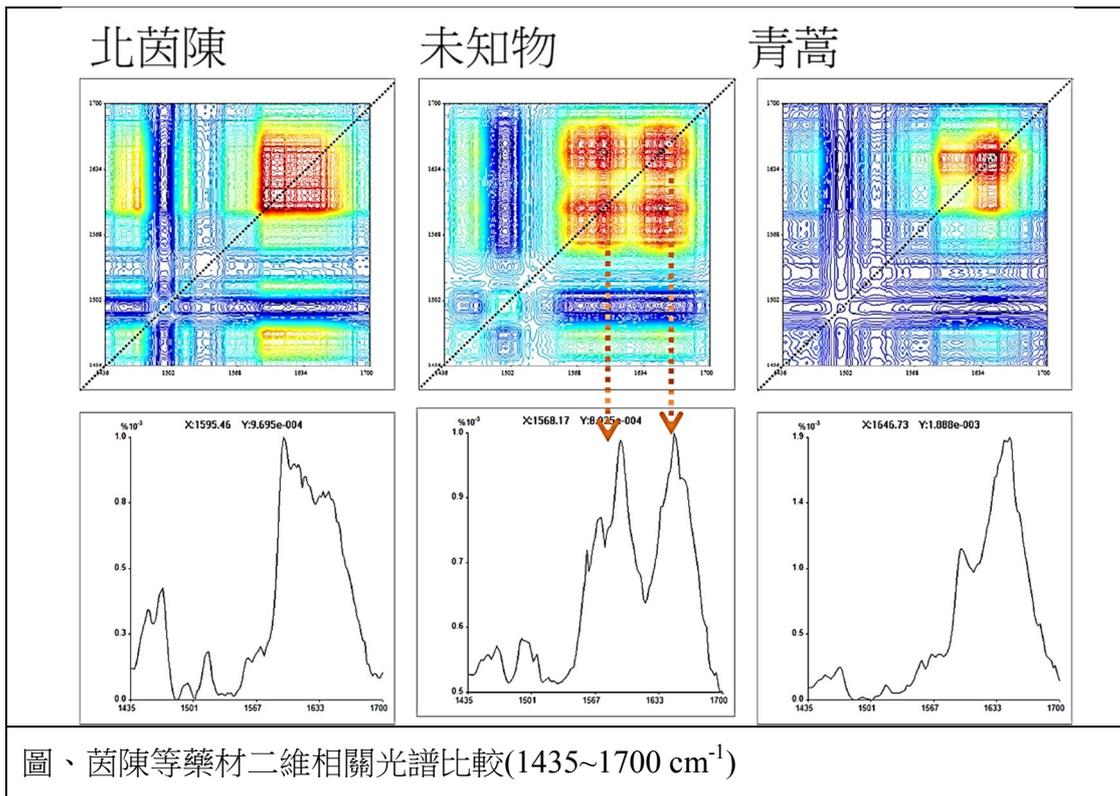


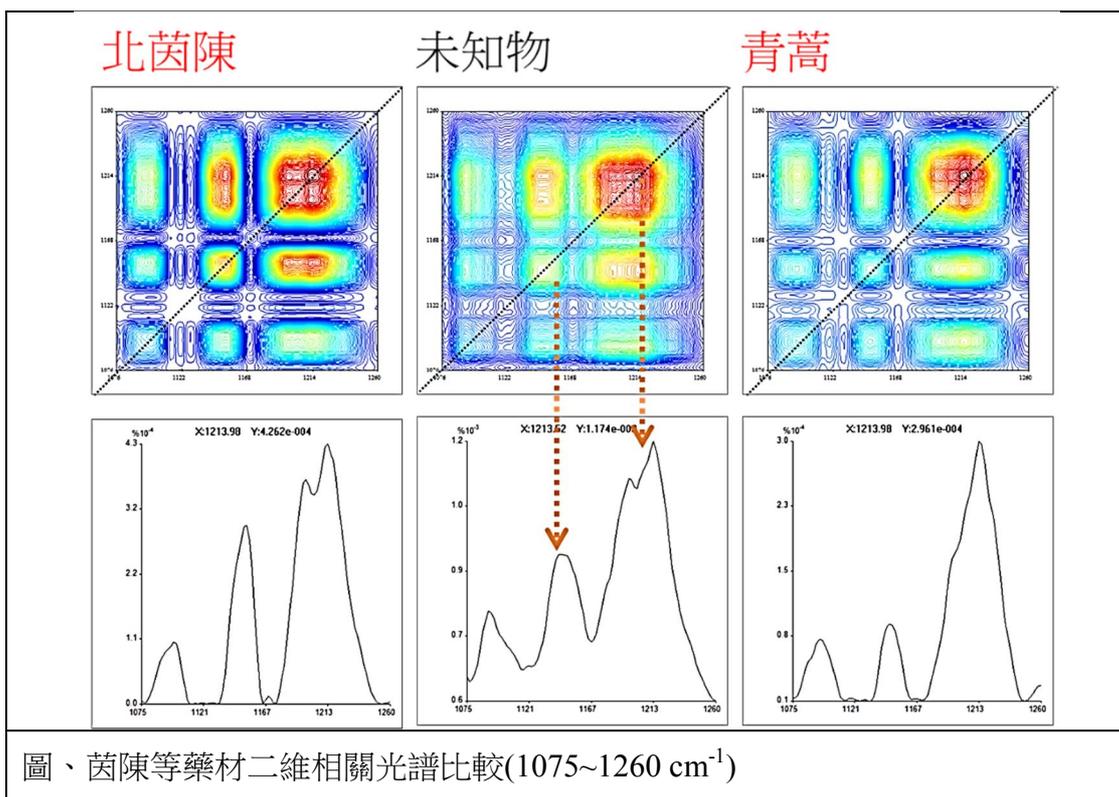
下圖依次為綿茵陳、茵陳蒿、未知物、青蒿及北茵陳之二階導數圖譜，虛線部分是藥材之結構解析以及彼此具有差異的部分。



下圖結果顯示，將範圍設定為  $4000\sim 400\text{ cm}^{-1}$  所得到的綿茵陳、茵陳蒿、未知物、青蒿及北茵陳之二維相關光譜，並列比較。於此光譜範圍的 5 種藥材的二維相關光譜中，均在相似的位置有一個紅色區間，顏色變化極為相似，似乎無法看出彼此的分別。事實上紅色該區間係屬於羥基結構，由於其對紅外線反應特別強烈，因此其他位置的顏色表示被相對弱化。將下圖所有二維相關光譜，再依不同光譜範圍作切割，即可清楚呈現未知物與綿茵陳、茵陳蒿、未知物、青蒿及北茵陳之間二維相關光譜差異。







圖、茵陳等藥材二維相關光譜比較(1075~1260  $\text{cm}^{-1}$ )

## 六、軟體應用及問答集

本次研習學習內容包含多款軟體，主要為紅外光光譜儀器軟體及紅外光光譜應用軟體。因孫素琴老師已與美商珀金埃爾默股份有限公司合作超過 20 年，並將紅外光光譜技術應用於中藥檢驗則超過 15 年，此次研習所使用軟體有孫素琴老師所開發之 TD IR 2DCOS Software (Version 4.2)軟體及美商珀金埃爾默股份有限公司開發之軟體，如：Spectrum (Application Version:10.4.3.339)、AssureID Method Explorer (Application Version:4.1.0.0195)。各軟體之功能及應用時機如下：

### (一) 軟體「Spectrum (Application Version:10.4.3.339)」

- 功能：紅外光光譜儀執行軟體，除了操作儀器外，該軟體包含基本光譜分析功能，如進行光譜標準化、光譜比較、光譜二階導數轉換等。
- 應用時機：操作儀器及分析前光譜調整。
- 介面介紹：未取得授權。

### (二) 軟體「AssureID Method Explorer (Application Version:4.1.0.0195)」

- 功能：紅外光光譜分析軟體，主要是利用光譜建立分群模型，用以區別不同樣品群體或分辨樣品所屬群體。當實驗人員收集數種光譜(大於 20 張光譜)後，可以藉由此軟體建立分群模型。模型建立前，相關分析數據(如)調整及收集。
- 應用時機：藉由檢測檢體光譜的分群，辨別檢體之可能物種或產地。
- 介面介紹：未取得授權。

### (三) 軟體「Spectrum Quant (Application Version: 10.4.3.339)」

- 功能：紅外光光譜分析軟體，主要是利用光譜建立定量模型，以化學計量學為基礎，使用光譜間相對強度進行量化分析。
- 應用時機：藉由檢測檢體各波峰強度，計算標的成分濃度。

- 介面介紹：未取得授權。

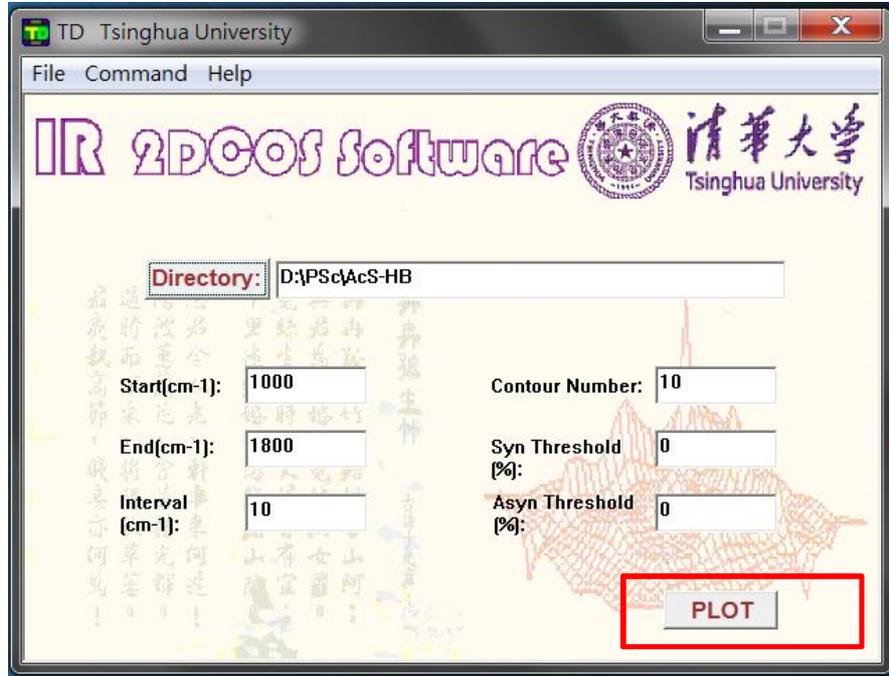
(四) 軟體「TD IR 2DCOS Software (Version 4.2)」

- 功能：本軟體是紅外光光譜三級鑑別法內容中二維相關光譜，以含一實驗變因之紅外光光譜為分析材料，單次多張光譜(約需 8 張)形式進行分析，分析結果呈現檢體之紅外光光譜隨著實驗變因改變產生之差異。此法是利用紅外光光譜鑑別結果，宏觀地表現藥材內所有成分隨著溫度改變造成的改變。完成紅外光光譜二維相關光譜分析後，若無法精確的定性，亦可以歸納出檢體的特性，提供檢驗明確的方向，或是縮小目標物的範圍。
- 應用時機：例如藥材分析時，針對溴化鉀(KBr)壓片法製作之樣品，收集各溫度(50 度到 120 度)之藥材紅外光光譜。分析結果的色層明顯的表現出不同光波位置對於溫度改變的敏感度。
- 介面介紹：

1. 選取光譜資料路徑

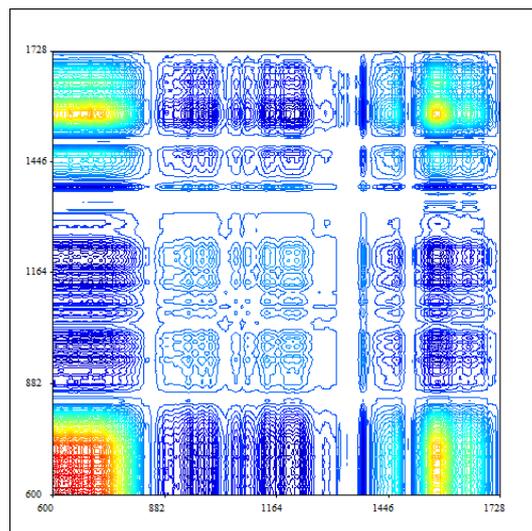
2. 調整光譜的範圍

3. 設定建立訊號之光譜區間
4. 二維光譜顏色密度
5. 3D 光譜閾值

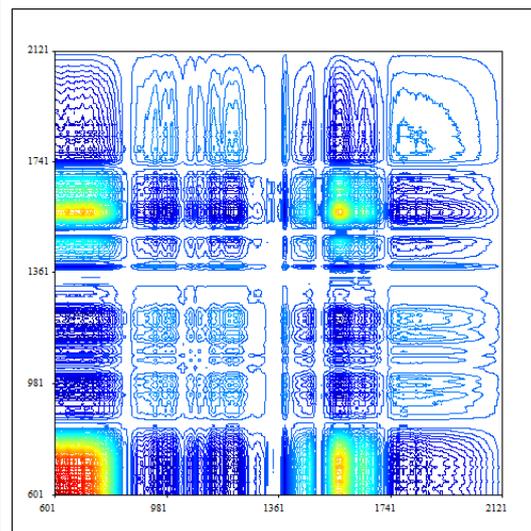


產生圖譜

不同光譜範圍

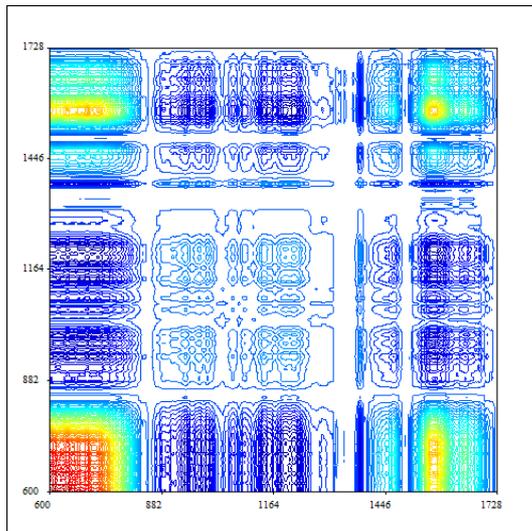


600~1728  $\text{cm}^{-1}$

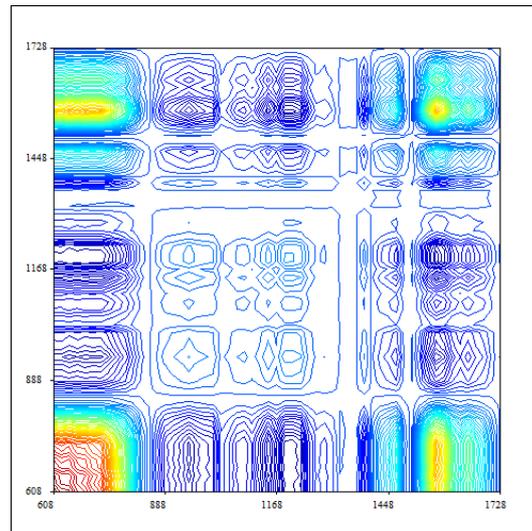


600~2121  $\text{cm}^{-1}$

不同訊號密度

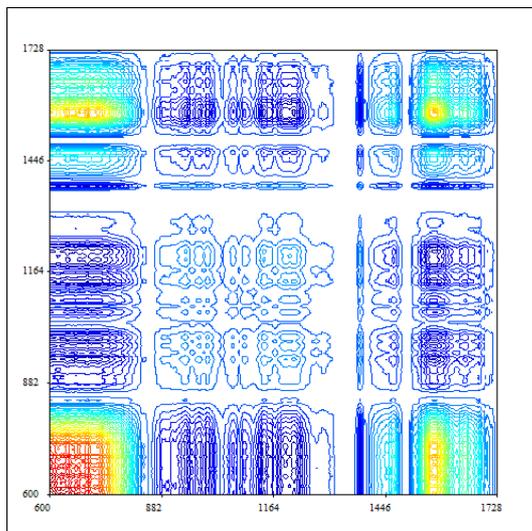


訊號區間：2 cm<sup>-1</sup>

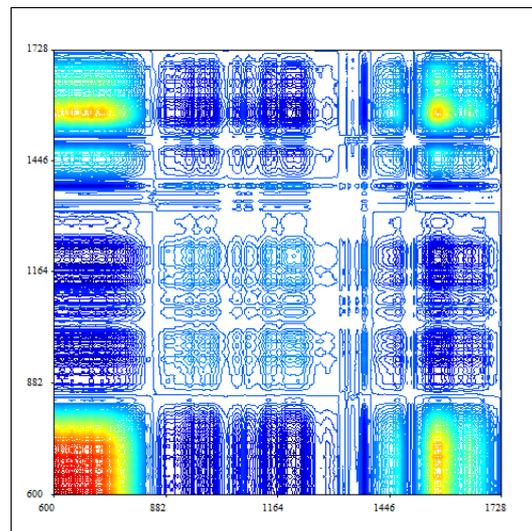


訊號區間：20 cm<sup>-1</sup>

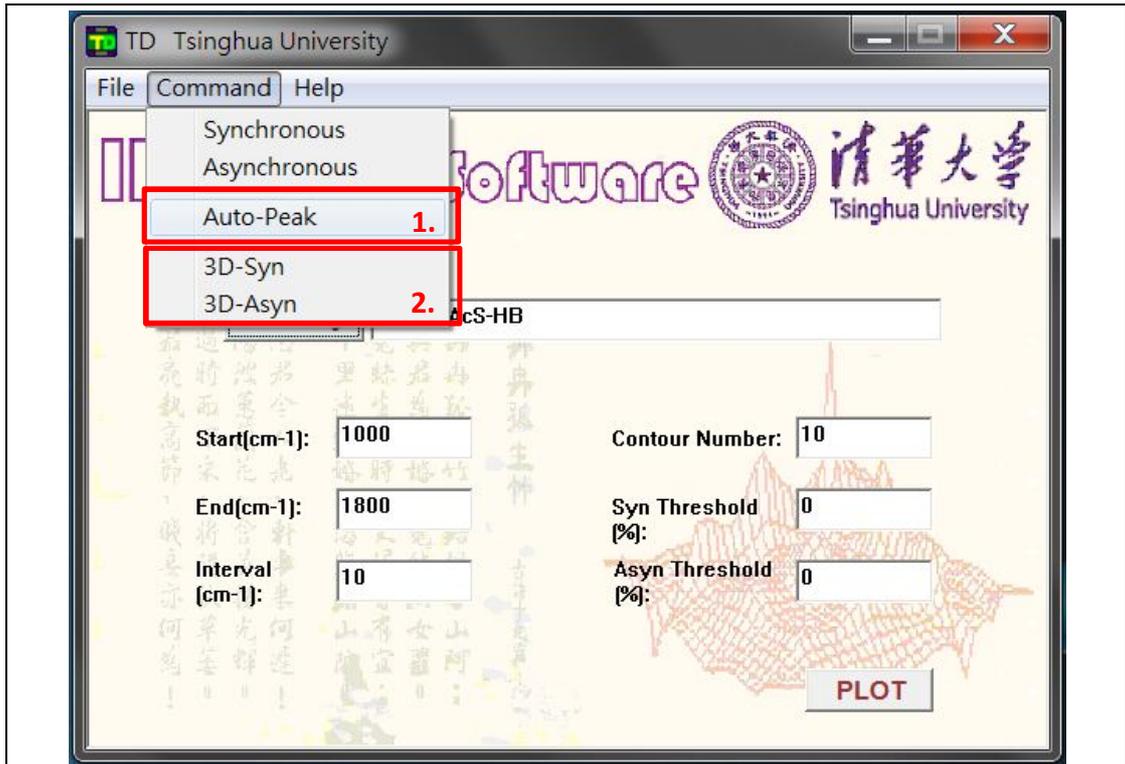
不同光譜顏色密度



顏色密度：50



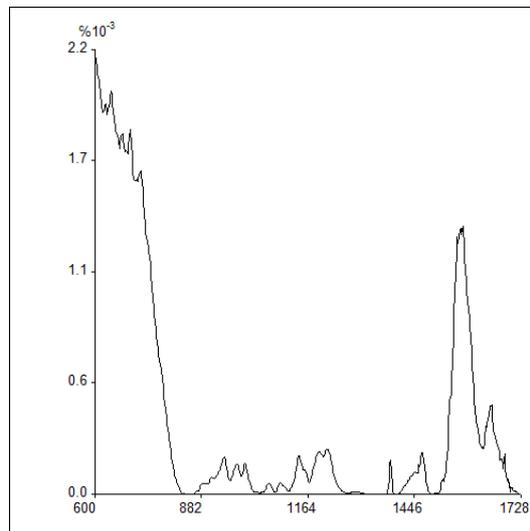
顏色密度：100



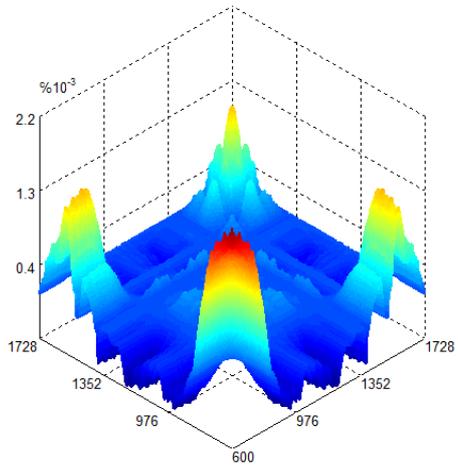
1.自動峰

2.3D 立體圖

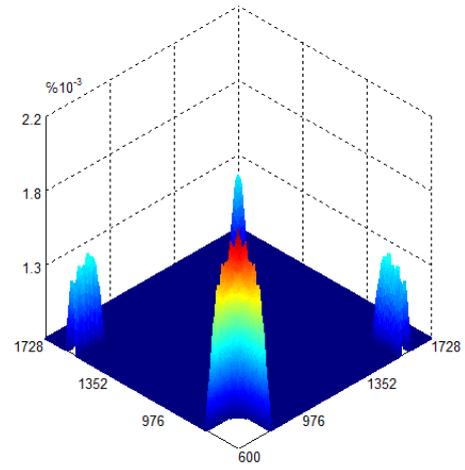
自動峰



不同 3D 光譜閾值



閾值：0



閾值：50

## 七、心得及建議

傳統上，紅外光譜最重要的應用是中紅外區有機化合物的結構鑑定，透過測定單一分子內振動與轉動能量的技術來瞭解分子的結構，特定分子的官能團會吸收特定頻率的紅外光，使分子振動或轉動。換句話說，分子所吸收的光的頻率為分子的振動頻率。因此，利用紅外光束穿過待測單一分子而獲得數種或是數十種的特徵吸收光譜，並與標準譜圖比對，可以確定化合物的結構，作為判別物種的分析方法。在各國藥典中，紅外光譜亦是應用於分析單一物質，是作為鑑別該有機化合物官能基的有力工具。然而紅外光譜應用於複雜的混合物分析，如中藥材或中藥製劑的技術，目前相對少有相關研究或論述。

2016年11月14日至18日，有幸代表本署到北京清華大學研習紅外線光譜應用於混合物分析技術與交流，在為期5天的研習交流中，由孫素琴老師帶隊，以及北京清華大學化學系的老師群包括周群，馬芳，訪問學者樊克峰及華瑞老師等協助，學習紅外線光譜應用於混合物如中藥材之分析，瞭解實際的應用狀況，頭兩天就針對署裡準備的檢體進行實際分析測試，並討論結果與交流相關經驗與資訊分享，在最後一天的交流會上，還特別邀請華瑞博士（孫老師的畢業生）分別就「定性」、「定量」的軟體，作教學與演練，讓大家了解紅外光譜宏觀指紋特徵的綜合分析方法的核心理念，即從化學計量出發，作智慧分群。

對於整體研習過程，真的非常感謝孫老師的用心，在這為期5天的研習中，課程安排是循序漸進、有條不紊，並且，讓我們可以從基礎重新學習，雖時間匆促，但孫老師穩紮穩打的教育精神，加上精闢入裡，切中要點的講解，讓我們能迅速了解孫老師所要傳承、推廣的「多級紅外光譜宏觀指紋分析法」。這套多級紅外光譜宏觀指紋分析法，是孫老師畢生心血之結晶，集經驗之大成。從實驗、分析光譜、資料庫檢索、比對都下足了功夫，每一步驟，都用經驗詳細的解釋其原委，並歸納總結成規則，進而創造一套理論，也就是我們這次學習主題「多

級紅外光譜宏觀指紋分析法」。這套「多級紅外光譜宏觀指紋分析法」是專門針對使用紅外光譜檢測混合物的分析方法。它的理論目的是為了協助分析相似混合物時，可以讓我們藉電腦軟體，直接量化彼此的差異性，或是將相似性高的兩種光譜，將彼此間微小的差異性，明顯的放大出來，讓人可以對相似性高的光譜，對其差異性，一目了然，減少模擬兩可的情形發生。這是在檢驗數據分析上很重要的一項突破。也因此，非常感謝孫老師的指導、不藏私的將此套技術原理、操作分析以及軟體，完整的推廣、傳承給我們這些檢驗工作人員。

前往北京清華大學前，已收集同仁有關紅外光譜分析的問題，並準備數種中藥的樣品。為期四天緊鑼密鼓的研習課程，主要是根據孫素琴老師的規劃與指導，學習紅外光譜應用於在混合物的分析技術，透過跟著馬芳老師實際演練，從檢體前處理至溴化鉀壓片、紅外線光譜儀等相關設備與操作軟體之熟悉、混合物的紅外光譜圖解析之概念，以及結合化學計量法的紅外線光譜技術應用於中藥及其製劑分析之初步概念，更進一步瞭解到孫老師在紅外線光譜的研究和創新技術所做的努力及成果，也透過經驗交流，拓展了紅外線光譜的思路，增進北京清華與本署的瞭解與互動，順利搭建起紅外線光譜的技術交流平臺。雖然學習交流的時間短暫，但分析技術之提升及交流仍將持續，希望此次北京清華之行學到的概念與思路，能為本署研究檢驗工作注入新力，開啟新局面，以下提出幾點建議供參：

(一) 促進國際交流與佈局：

大陸清華大學之科研規模大，是重點國家級工程科研中心，在計算科學、核物理、應用物理、生命科技等領域均不斷研創頂尖技術。建議可藉由擴大合作或往來，提高本署與該校雙方在檢驗技術、資訊之交流。

(二) 雙方持續技術合作以達即時的經驗交流與資訊分享：

本次行程緊湊，僅就紅外光譜應用於混合物之分析，有概念性的學習，主要透過中藥製劑紅外光譜套題演練，進行討論與交流，建議藉由持續與孫老師的雙邊交流與合作，逐步建立紅外光譜檢驗技術經驗值與技術品質，亦可促

進雙方對中藥材管制與檢驗的理解，有利於促進雙方認知，以期未來可能的中藥材管理現況的了解與合作。

(三) 強化檢驗儀器設備以增加檢驗效能：

現今高階分析儀器多為質譜搭配高解析度層析儀，但就未知物分析領域，得到精確分子量僅是第一步，當分子量越大，分子結構的可能就越多，若無明確的分析方向，將無法往下進行解析。紅外光光譜分析發展歷史悠久，雖然非混合物分析之首選，但若是可以建立完整的紅外光光譜資料庫，初步分析混合物亦非難事。若是方法上搭配質譜等儀器，亦可以增加分析效能。例如中藥材的分析，中藥多為植物藥，藥用部位、藥材產地、炮製方式皆會影響中藥材的化性，若僅是使用質譜針對特定成分進行檢測，又無法代表藥材所有成分。故現今多搭配使用組織切片、層析法或是 PCR 等方式辨識藥材真偽，但此些方法皆有其限制，若可蒐集藥材紅外光光譜資料，並建立資料庫，再搭配統計方法(如 PCA)，將可增加中藥材分析之檢驗效能。

(四) 建立化學計量學分析方法及資料庫：

- 1.以紅外線光譜儀與化學計量學分析特定中藥材，建立資料庫圖譜，可作為區辨中草藥之正品與誤用品。
- 2.以紅外線光譜儀與化學計量學分析特定中藥材，建立資料庫圖譜，可作為區辨不同基原的中草藥。

有別於各類質譜儀當道的分析技術，混合物紅外光譜分析是另一項技術，可以呈現中藥材的整體訊息，其所含成分不因分析或前處理而發生改變，然而，混合物紅外光譜分析方法之三：專家識別法中提及相似度量化評價及多組分定量分析等應用，均係搭配化學計量學軟體，包括相似度評價、PCA、多組分定量分析及資料庫，由北京清華大學編寫，無償提供 PE 儀器用戶使用，其與現行儀器之軟體無法接軌應用。

## 肆、附錄

### 參考資料

孫素琴、周群、陳建波編著。中藥紅外光譜分析與鑑定。北京：化學工業出版社，2010。

孫素琴、周群、秦竹編著。中藥二維相關紅外光譜鑑定圖集。北京：化學工業出版社，2003。

孫素琴、周群、陳建波編著。ATC 009 紅外光譜分析技術。北京：中國質檢出版社及中國標準出版社，2013。

劉新裕、林俊義、張成國。藥用植物專輯。行政院農業委員會農業試驗所，2002。

謝宗芳。本草綱目藥物彩色圖鑑。北京：人民衛生出版社，2008。