

光谱学与光谱分析

一种基于近红外光谱的天然产物抗氧化活性预测评价方法

王毅,俞凌燕,范晓辉,瞿海斌*

浙江大学中药科学与工程学系, 浙江 杭州 310058

收稿日期 2008-11-12 修回日期 2009-2-16 网络版发布日期 2009-9-1

摘要 提出了一种基于近红外(NIR)光谱的黄酮类提取物抗氧化活性计算预测新方法。采用1,1-二苯-2-苦肟基(DPPH)法测定28种黄酮类中药材提取物的抗氧化活性,并在4 000~10 000 cm^{-1} 范围扫描样品的红外光谱,采用偏最小二乘(PLS)算法建立了黄酮类组分近红外光谱与抗氧化活性之间的校正模型。建模过程中,以交叉验证相关系数(R^2),交叉验证误差均方根(RMSECV)为指标,确定了用于建模的最优近红外波段和光谱预处理方法。校正模型的RSECV为9.50%, R^2 为 0.901 7,预测误差均方根(RMSEP)为14.8%。该方法快速无损、操作简便,可用于中药及天然产物提取物抗氧化活性的快速评价。

关键词 [近红外漫反射光谱](#) [偏最小二乘](#) [中药](#)

分类号 [O657.3](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2009\)09-2401-04](#)

通讯作者:
瞿海斌 quhb@zju.edu.cn

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(700KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)
- ▶ [参考文献\[PDF\]](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [引用本文](#)
- ▶ [Email Alert](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“近红外漫反射光谱”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [王毅](#)
- [俞凌燕](#)
- [范晓辉](#)
- [瞿海斌](#)