
合肥研究院发现灵芝酸分类新方法

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/3169.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

合肥研究院发现灵芝酸分类新方法。近期，中国科学院合肥物质科学研究院技术生物与农业工程研究所研究员黄青课题组利用振动光谱和密度泛函理论计算解析灵芝酸，取得了新进展。

灵芝酸是中药灵芝的重要活性部分，具有抗癌、降血脂、消炎、抗氧化、肝保护等活性功能。通常获取方法是从灵芝中萃取或色谱方法分离灵芝酸，目前已得到灵芝酸A、灵芝酸B等一百多种灵芝酸，需通过质谱、NMR和X-Ray衍射等技术测定分离出的灵芝酸类型，但这些方法往往检测费用高、分析时间长，且灵芝酸的分子振动模式分析工作尚未见报道。

近年来，灵芝酸A因其对人骨肉瘤、淋巴瘤、脑膜瘤和乳腺癌细胞具有明显的抗肿瘤活性而倍受关注。结合红外和拉曼光谱快速、方便的测量和指纹特征，课题组引入分子振动光谱开展研究，以典型的灵芝酸A为例，密度函数(DFT)理论计算结合红外和拉曼光谱实验，首次解析了灵芝酸A的振动模式，并且此方法可快速鉴别灵芝酸类型，且费用较低。

通过DFT理论计算和光谱实验证明：通过灵芝酸A、B、C和D在1500cm⁻¹-1800cm⁻¹波数范围内的红外及拉曼谱峰可快速有效区分它们的类别。因为它们分子结构中具有不同的羟基羧基等官能团，这些官能团往往在1500cm⁻¹-1800cm⁻¹波数范围表现出极强的红外或拉曼峰。此外，灵芝烯酸作为灵芝酸的重要衍生物，与灵芝酸同时从灵芝中分离，二者的主要区别是：灵芝酸C20-C22是单键，灵芝烯酸C20=C22是双键。DFT理论结合实验表明，灵芝烯酸的红外和拉曼光谱中1608cm⁻¹附近强峰来自于C20=C22的伸缩振动，通过此强峰可有效区分灵芝烯酸和灵芝酸。

此项工作主要是利用光谱实验结合DFT量化计算方法解析灵芝酸A分子的振动模式，同时，利用红外和拉曼光谱快速区分出不同类型的灵芝酸，并找到区分灵芝酸和其衍生物灵芝烯酸的方法，对灵芝酸光谱研究和品种检验和筛选等实际应用具有重要意义。

研究工作得到国家自然科学基金和中科院战略重点研究项目等的资助与支持。相关成果已经在光谱学专业期刊Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy上发表(DOI: 10.1016/j.saa.2018.11.019)。

文章链接

图2 灵芝酸A的实验检测(蓝)和DFT(黑)模拟的红外和拉曼光谱

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发