

基于中红外和拉曼光谱技术对中药饮片五味的辨识研究

宁 澄， 文有青， 颜月玲， 赵堉文， 王海霞 *

(天津中医药大学中药制药工程学院，天津 301617)

摘要：目的 研究中红外和拉曼光谱技术对中药饮片五味的辨识。方法 依据2020年版《中国药典》一部中的性味描述，采集5种药味的45种中药饮片的中红外及拉曼光谱信息，预处理后采用OPLS-DA法建立判别分析模型，K-邻近法、支持向量机、线性判别分析及集成学习K-邻近法优化模型。结果 采用归一化方法结合SNV法处理后，5种药味的OPLS-DA模型差异较大，预测精度最高为0.929；SNV处理后，不同药味拉曼光谱存在差异；基于CubicSVM模型的拉曼光谱数据对5种饮片的辨识能力最佳，预测准确率为85%。结论 中红外光谱和拉曼光谱技术均可应用于中药饮片五味的辨识研究，为中药饮片五味的智能辨识提供了新方法。

关键词：五味；辨识；中红外光谱；拉曼光谱；中药饮片

中图分类号：R282.5

文献标志码：B

文章编号：1001-1528(2025)02-0659-05

doi:10.3969/j.issn.1001-1528.2025.02.048

性味是中药的基本属性，又称“四气五味”，具有丰富的理论内涵和深刻的研究意义，综合利用多种技术对其进行科学解读是中医药现代化的重要内容^[1-2]。现代仿生技术被广泛应用于中药性味辨识研究，在分子、细胞、组织、整体等层面对其进行探索，不断丰富中药性味的科学化辨识内容^[3-4]。例如，以电子鼻、电子舌技术建立性味物质基础拆分、表征、界定的系统方法^[5]，但其依赖传感阵列和标准校准溶液，在多重中药性味的科学辨识方面存在一定缺陷，可能出现味觉信息丢失或信息重叠严重的问题，不利于中药性味数据库的建立。

紫外、红外、拉曼等光谱技术在中药辨识方面的应用已有报道。例如，魏国辉等^[6]通过多溶剂紫外图谱表征中药成分，构建了中药寒热药性的人工智能预测模型；王小鹏等^[7]基于近红外光谱技术建立中药水煎液的甘、苦、酸、咸4种味觉分类辨识模型；梁浩等^[8]基于中药拉曼谱图开展了中药寒热药性的判别分析。以上研究均证实光谱分析技术用于中药性味辨识的可行性，但目前基于光谱技术对中药饮片的五味辨识研究还未见报道。本研究采用中红外光谱和拉曼光谱技术，尝试通过药味分子的组成结构探究中药饮片的智能性味辨识方法。研究方案见图1。

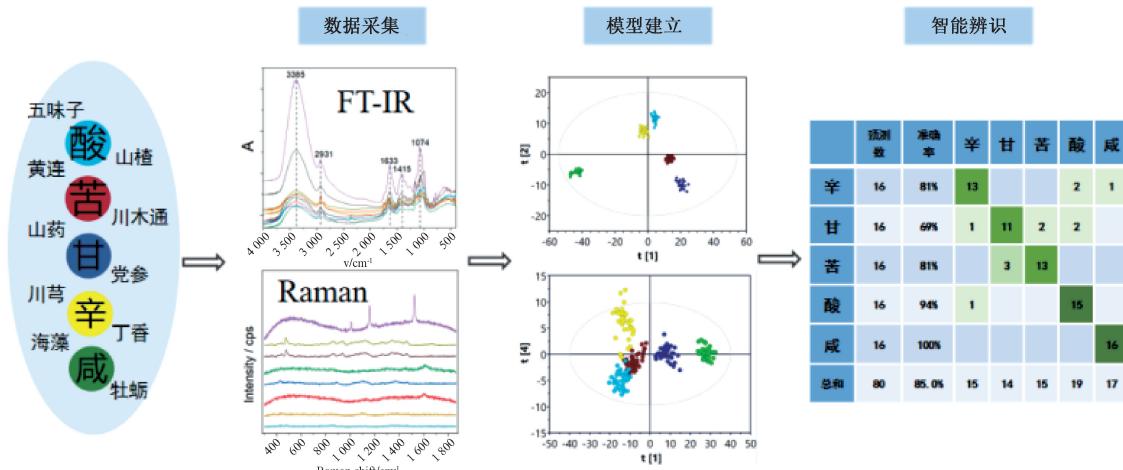


图1 研究方案路线图

1 材料

1.1 仪器 DXR2 显微拉曼光谱仪（美国赛默飞世尔科技

公司）；IR Tracer-100 傅里叶变换红外光谱仪（日本岛津公司）；FW100 高速粉碎机（天津泰斯特仪器有限公司）。

收稿日期：2023-10-15

基金项目：国家自然科学基金项目（82003944）

作者简介：宁 澄（1999—），女，硕士生，从事中药分析与质量控制研究。Tel: 15535437925, E-mail: 1975028573@qq.com

*通信作者：王海霞（1986—），女，博士，副研究员，从事中药分析与质量控制研究。Tel: (022) 59791811, E-mail: whxtem@tjutcm.edu.cn

1.2 试剂与药物 45 种中药饮片（甘味 10 种、苦味 10 种、辛味 9 种、酸味 8 种、咸味 8 种）购自河北仁心药业股份有限公司，信息见表 1，经天津中医药大学宋新波研究员鉴定为正品，均符合 2020 年版《中国药典》一部标准。溴化钾 [阿拉丁试剂（上海）有限公司，光谱级，货号 P116273-100 g]。

表 1 中药饮片信息

类别	名称	批号	类别	名称	批号
甘味	山药	—	辛味	干姜	00321007
	茯苓	21222010		荆芥	20419018
	枸杞子	66822002		砂仁	11
	甘草	05623007		川芎	02222017
	薏苡仁	344190101		紫苏叶	18070702
	人参	39021009		辛夷	20190101
	党参	—		乌梅	41622004
	黄芪	—		山楂	01822003
	大枣	20200101		木瓜	C031200901
	熟地	10221028		五味子	C104210301
	黄连	41721014		五倍子	41221005
	黄柏	28721009		石榴皮	42219001
	苦参	37319012		覆盆子	36220014
	川木通	02121007		金樱子	19419003
	大黄	01021018		牡蛎	20090401
苦味	苦杏仁	C1502200701		瓦楞子	C19072309
	梔子	C185200701		石决明	0519009
	黄芩	27921028		芒硝	26921005
	连翘	20318090		磁石	34819008
	防己	20190101		海藻	20190101
	薄荷	C292201101		昆布	20190101
	艾叶	C002220301		青黛	20190101
辛味	桂枝	25622003			

注：其中有 5 种饮片未参与拉曼光谱的数据采集，分别为大枣、熟地、连翘、防己、紫苏叶。

2 方法

2.1 样品前处理 取各中药饮片适量，粉碎，过 50 目筛，再用溴化钾晶体研磨成细粉，过筛，干燥。称取 1.5 mg 粉末与 150 mg 溴化钾干燥粉末混合，研磨，置于小型压片机上在低真空条件下 3 min 压成薄片，每种中药平行压制 3 个 KBr 薄片。

2.2 数据采集

2.2.1 中红外光谱采集 扫描次数 20 次；分辨率 4 cm^{-1} ；波长范围 $4000 \sim 400 \text{ cm}^{-1}$ 。将压制的薄片放入样品台采集

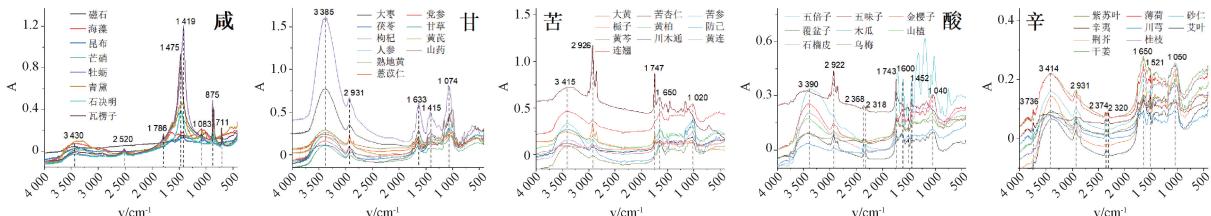


图 2 45 种中药饮片的原始中红外光谱

通过多种预处理方式结合 OPLS-DA 算法构建了 5 种类别中药饮片中红外光谱的分类判别模型，模型结果见表 2，

中红外光谱，每种中药平行收集 3 张谱图，最终得到 45 种中药饮片的 135 张中红外光谱。

2.2.2 拉曼光谱采集 激光波长 785 nm；采集曝光时间 2 s；样品曝光次数 4 次；拉曼位移 $300 \sim 1860 \text{ cm}^{-1}$ 。每种中药平行收集 5 张拉曼光谱，最终得到 40 种中药的 200 张拉曼光谱，按比例 (3 : 2) 划分训练集和预测集。

2.3 数据预处理及模型构建 采用自标度化 (UV)、pareto 标度化 (Par)、中值标度化 (Ctr) 归一化方法消除数据量纲的影响^[9]。运用标准正态变量变换 (SNV)、Savitzky-Golay (S-G) 平滑、均值中心化 (RC)、一阶导 (1stDer)、二阶导 (2ndDer) 预处理方式对光谱数据进行去噪、平滑和基线校正。采用正交偏最小二乘判别分析 (OPLS-DA) 方法建立判别分析模型^[10]。

2.4 建模方法优化 本研究分别采用 4 种建模方法 K-邻近法 (KNN)、支持向量机 (SVM)^[11-12]、线性判别分析 (LDA)^[13] 和集成学习 K-邻近法 (SubspaceKNN)^[14] 对拉曼光谱数据进行模型优化，并对 SNV 预处理前后模型效果进行对比分析，通过准确率、曲线下面积 (AUC)、混淆矩阵评价优化模型，以上处理在 Matlab20 软件中进行。

3 结果与讨论

3.1 中红外光谱分析 由图 2 可知， $2935 \sim 2920 \text{ cm}^{-1}$ 为 C-H 对称和不对称伸缩振动峰，在甘、苦、酸、辛味饮片中均有吸收峰存在。酸味和辛味饮片在 $2400 \sim 2300 \text{ cm}^{-1}$ 有 2 个弱吸收峰，可能是饮片内形成分子间氢键缔合，形成了较弱的振动峰^[15]。 $1760 \sim 1620 \text{ cm}^{-1}$ 为 C=O 伸缩振动吸收峰，5 种类别饮片的特征吸收峰在此峰位处差异较大。如苦味与酸味饮片在 1740 cm^{-1} 附近呈现出较强特征吸收，而甘味和辛味饮片在 1650 cm^{-1} 附近有更强的特征吸收峰。辛味饮片在 1521 cm^{-1} 处呈现出 C=C 伸缩振动峰，也可能是由于芳香环骨架振动吸收引起的^[16]；酸味饮片在 1450 cm^{-1} 处呈现出 C-H 的变形振动；咸味饮片在 $1500 \sim 1400 \text{ cm}^{-1}$ 处有强的特征吸收峰，可能是由于 S=O、C=O、Si=O 等化学键的对称伸缩振动和非对称伸缩振动引起的； $1100 \sim 1000 \text{ cm}^{-1}$ 处的吸收峰可能是 C-OH 的伸缩振动吸收引起，在五类饮片中均有呈现。从五类饮片的原始光谱图来看，各药味饮片的中红外吸收峰存在一些特征差异，但还有部分重叠，直接通过光谱图的峰位、峰强、峰形进行鉴别分析存在一定困难。

可知所建模型均得到了优良的判别分析结果。其中 UV+SNV 预处理方法建立的 OPLS-DA 模型的预测能力最佳， Q^2

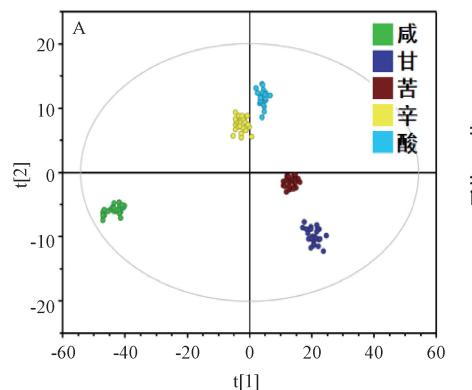
为 0.929, R^2X 为 1, R^2Y 为 0.980。1stDer 与 2ndDer 预处理后的模型预测结果相当, Q^2 为 0.910 和 0.911, 只是 2 种预处理方式的 R^2X 相较 SNV 方法都略低。S-G 和 RC 预处理

方式所建模型的 Q^2 最低, 分别为 0.840 和 0.836。为评价模型可信度, 对所有模型均进行了置换检验, 结果均未出现过拟合现象, 表明模型判别结果可信。

表 2 中红外光谱药味辨识的 OPLS-DA 模型构建结果

预处理方法	模型构建			模型验证	
	R^2X	R^2Y	Q^2	R^2	Q^2
UV+SNV	1.000	0.980	0.929	0.465	-0.973
UV+S-G	1.000	0.972	0.840	0.438	-1.730
UV+RC	1.000	0.980	0.836	0.420	-1.250
UV+1stDer	0.997	0.982	0.910	0.550	-2.010
UV+2ndDer	0.997	0.986	0.911	0.694	-1.810
SNV	1.000	0.983	0.900	0.580	-1.510

基于 UV+SNV 预处理后建立的 OPLS-DA 模型的判别分析结果见图 3A, 可知 5 种药味的饮片可被明显分离, 且同种药味饮片呈现出明显的聚集效应。其中咸味饮片与其他 4 种药味饮片明显分离, 证实了咸味饮片与其他药味饮片间分子振动的差异性; 酸味和辛味饮片相距较近, 提示两种药味饮片的相似性高, 可能给药味辨识带来困难。另外,



为探究不同波段范围的振动吸收峰对五味判别模型的贡献程度, 以平均 VIP 值为指标对其进行统计, 结果见图 3B。由此可知, 全波段范围对判别模型的贡献度均在 0.9 左右, 验证了全波段参与建模的必要性。1 600~1 800 cm⁻¹ 波段范围对模型贡献度达到了 1.4 以上, 提示该波段羧基伸缩振动吸收峰与五味辨识的强相关性, 与光谱图分析结果一致。

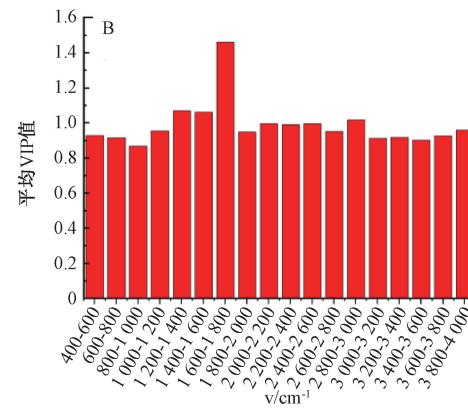


图 3 中红外光谱的 OPLS-DA 得分图 (A) 及变量贡献度分析 (B)

3.2 拉曼光谱分析 由图 4 可知, 部分中药饮片拉曼散射强度强, 具有明显的拉曼特征峰, 如枸杞子、梔子等; 部分饮片拉曼散射信号弱, 如人参、金樱子、辛夷等, 可能是受样品本身颜色或荧光干扰的影响。甘味饮片薏苡仁、山药、茯苓出现相似的拉曼特征峰形, 其峰形与淀粉类成分相近^[17]; 党参、甘草同样具有相似的拉曼峰位和峰形; 枸杞子在 1 520、1 120 cm⁻¹ 左右处显现出明显的拉曼特征峰, 分别对应苯环中 C-OH 面内弯曲振动及 C-C 伸缩振动, 与枸杞的黄酮类有效成分有关^[18]。苦味饮片黄连、梔子、川木通、黄柏呈现出相似拉曼特征峰位, 1 600 cm⁻¹ 左右的拉曼特征峰可能是由 C=N 伸缩振动引起的, 与生物碱类成

分有关^[19]。酸味饮片石榴皮、五倍子、覆盆子在 1 630 cm⁻¹ 处均呈现出拉曼特征峰, 可能是由于羧酸类成分中 C=O 伸缩振动引起的^[20]。辛味饮片薄荷、桂枝、荆芥、干姜在 1 580 cm⁻¹ 显示出相似的特征峰, 归属为 C-H 弯曲振动, 可能与挥发油类成分有关^[21]。咸味饮片芒硝、牡蛎、瓦楞子等在 710、1 090 cm⁻¹ 左右处有强特征峰, 对应的是 CO₃²⁻ 的面内弯曲振动和对称伸缩振动^[22], 为主要成分碳酸钙的拉曼特征峰。从整体特征峰情况来看, 咸味、甘味饮片更容易获得明显的拉曼特征信号, 酸味和辛味药材的拉曼信号弱, 不容易获得特征峰。

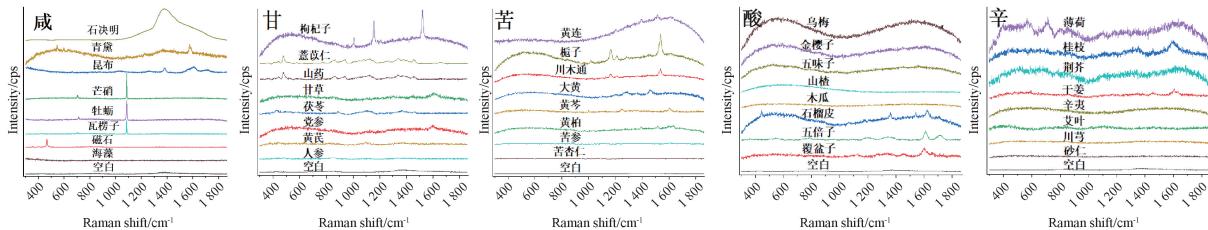


图 4 40 种中药饮片的原始拉曼光谱

通过多种预处理方式结合 OPLS-DA 算法构建了中药拉曼光谱的五味分类判别模型，模型结果见表 3。由此可知，SNV 预处理方法的数据解释能力和预测能力最佳， R^2X 为

0.867， R^2Y 为 0.911， Q^2 为 0.682。3 种归一化处理后模型的 R^2X 值有所降低，而剩余 3 种预处理后模型的 Q^2 值也较低。以上模型经过置换检验均无过拟合现象。

表 3 拉曼光谱药味辨识的 OPLS-DA 模型构建结果

预处理方法	模型构建			模型评价	
	R^2X	R^2Y	Q^2	R^2	Q^2
SNV	0.867	0.911	0.682	0.601	-0.281
Par+SNV	0.770	0.958	0.688	0.722	-0.266
UV+SNV	0.729	0.943	0.672	0.677	-0.283
Ctr+SNV	0.794	0.894	0.685	0.579	-0.250
UV+S-G	0.982	0.646	0.414	0.403	-0.407
UV+RC	0.997	0.691	0.428	0.483	-0.437

SNV 预处理后得到的最佳模型的药味判别得分图见图 5，可知 5 种药味拉曼光谱整体呈现较好的分离趋势。但其中酸、辛、苦 3 种药味存在交叉重叠，表明这其所含成分间存在一定的相似性，可能降低药味辨识的准确性。甘味和咸味饮片可以准确分离，验证了甘、咸药味的饮片成分与其他药味饮片成分间存在差异，更容易被辨识和区分。

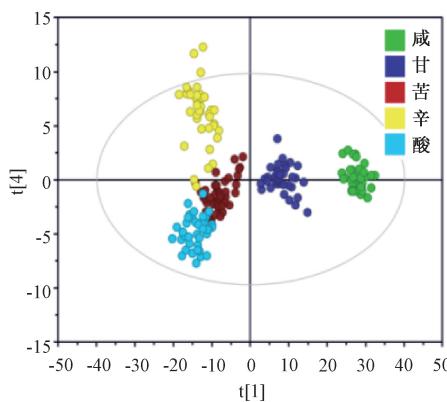


图 5 拉曼光谱的 OPLS-DA 得分图

为进一步提高拉曼光谱法对 5 种药味饮片的辨识能力，又考察了 KNN、SVM、LDA 和 SubspaceKNN 4 种建模方法的模型效果，并与 SNV 预处理前后的效果进行对比，结果见表 4。由此可知，SNV 预处理前，SubspaceKNN 辨识能力最佳，模型准确率与预测准确率均较高，分别为 85%、80%，AUC 值均在 0.80 以上。经过 SNV 预处理后，SVM、LDA 和 SubspaceKNN 三种模型均显示出较好的分类性能。其中 CubicSVM 预测准确率达到 85%，AUC 值均在 0.90 以上，故在本研究中选择 CubicSVM 模型作为最佳药味分类预测模型。SubspaceKNN 模型比 SVM 模型的预测准确率略低，为 82.5%，但对酸、苦、甘、咸 4 种药味的预测效果均优于 SVM 模型。LDA 模型相较于其他模型，预测准确率略低，为 80%。FineKNN 模型的五味辨识能力最差，预测准确率为 76.25%，主要是辛味辨识能力较低。4 种模型的辨识准确率均在 75% 以上，说明采用拉曼光谱结合机器学习的方法可以快速实现对中药饮片的药味辨识。

各模型的药味预测结果的混淆矩阵见图 6，可知 SNV 预处理前，SubspaceKNN 模型对甘、苦、酸、咸四种药味

表 4 拉曼光谱药味辨识的不同模型构建结果

序号	模型类别	预处理	模型准确率/%	AUC					预测准确率/%
				甘	苦	酸	辛	咸	
1	FineKNN	—	71.70	0.85	0.81	0.79	0.69	0.97	66.25
2	LinerSVM	—	68.30	0.95	0.76	0.88	0.90	0.93	68.75
3	LDA	—	57.50	0.79	0.65	0.74	0.62	0.87	60.00
4	SubspaceKNN	—	85.00	0.99	0.95	0.94	0.84	0.99	80.00
5	FineKNN	SNV	78.30	0.85	0.94	0.88	0.66	0.99	76.25
6	CubicSVM	SNV	79.20	0.95	0.94	0.97	0.90	0.99	85.00
7	LDA	SNV	80.00	0.84	0.83	0.90	0.80	1.00	80.00
8	SubspaceKNN	SNV	79.20	0.93	0.93	0.91	0.74	1.00	82.50

的饮片均有较强的识别能力，除对辛味的辨识能力较低外，4 种药味的预测准确率均在 80% 以上，表明 SubspaceKNN 模型对甘、苦、酸、咸 4 种药味的药味辨识能力相对更强。SNV 预处理后，四类模型的预测精度均有所提高，其中 CubicSVM 模型对辛、甘、苦、酸、咸 5 种药味的预测准确率达到 81.3%、68.8%、81.3%、93.8%、100%，均显示出较好的辨识能力。相较于 CubicSVM 模型，LDA 模型仅对辛味和甘味的预测准确率略低，均为 62.5%。SubspaceKNN 模型效果与 SNV 预处理前相似，仍对辛味的辨识能力较

低，对甘、苦、酸、咸的预测准确率为 87.5%、87.5%、100%、100%，均高于 CubicSVM 模型。FineKNN 模型相较于 SubspaceKNN 模型，对辛味和甘味的预测效果稍弱，为 18.8% 和 75%。另外，大多预测结果常将辛味饮片错判为酸味，再次证实了辛味与酸味饮片在成分上的相似性。

4 结论

本研究以 2020 年版《中国药典》一部的中药性味描述为依据，选择 45 种中药饮片进行药味的分类辨识研究，获取了 45 种中药饮片的中红外光谱和 40 种饮片的拉曼散射

(1)	预测数	准确率	辛	甘	苦	酸	咸	(5)	预测数	准确率	辛	甘	苦	酸	咸
辛	16	37.5%	6	2	6	2	0	辛	16	18.8%	3			11	2
甘	16	68.8%	1	11	3	1	0	甘	16	75.0%		12	1	2	1
苦	16	56.3%	1	1	9	4	1	苦	16	87.5%		2	14		
酸	16	68.8%	1	1	3	11	0	酸	16	100%				16	
咸	16	100%	0	0	0	0	16	咸	16	100%					16
总和	80	66.25%	9	15	21	18	17	总和	80	76.25%	3	14	15	29	19
(2)	预测数	准确率	辛	甘	苦	酸	咸	(6)	预测数	准确率	辛	甘	苦	酸	咸
辛	16	50%	8	4	1	1	2	辛	16	81.3%	13			2	1
甘	16	87.5%	1	14	1			甘	16	68.8%	1	11	2	2	
苦	16	50%	2	4	8	1	1	苦	16	81.3%		3	13		
酸	16	68.8%		3		11	2	酸	16	93.8%	1			15	
咸	16	87.5%				2	14	咸	16	100%					16
总和	80	68.75%	11	25	10	15	19	总和	80	85.00%	15	14	15	19	17
(3)	预测数	准确率	辛	甘	苦	酸	咸	(7)	预测数	准确率	辛	甘	苦	酸	咸
辛	16	31.3%	5	4	2	3	2	辛	16	62.5%	10	2	1	3	
甘	16	75.0%	1	12	2	1		甘	16	62.5%	2	10	2	2	
苦	16	50%	2	2	8	1	3	苦	16	81.3%	1		13	2	
酸	16	50%	1	2	2	8	3	酸	16	93.8%	1			15	
咸	16	93.8%				1	15	咸	16	100%					16
总和	80	60.00%	9	20	14	14	23	总和	80	80.0%	14	12	16	22	16
(4)	预测数	准确率	辛	甘	苦	酸	咸	(8)	预测数	准确率	辛	甘	苦	酸	咸
辛	16	37.5%	6		4	6		辛	16	37.5%	6			10	
甘	16	93.8%		15		1		甘	16	87.5%		14		2	
苦	16	81.3%		1	13	2		苦	16	87.5%		2	14		
酸	16	87.5%	2			14		酸	16	100%				16	
咸	16	100%					16	咸	16	100%					16
总和	80	80.00%	8	16	17	23	16	总和	80	82.5%		16	17	23	16

图6 各模型混淆矩阵(按序号依次排列)

光谱,再结合光谱优化手段建立这两类光谱的分类辨识模型,结果显示中红外光谱比拉曼光谱的OPLS-DA判别结果更优,显示出分子官能团在药味辨识中的重要作用。拉曼光谱通过模型优化结合与机器学习算法也得到了较好的五味预测效果,弥补了饮片自身颜色造成的拉曼散射信号差对药味辨识的影响。综上所述,中红外光谱和拉曼光谱均可以应用于中药饮片的五味辨识,可为中药饮片性味的辨识研究新方法提供参考。

参考文献:

- 王蒙,孙延平,王知斌,等. 中药性味理论研究评析与展望[J]. 中华中医药杂志, 2021, 36(2): 625-628.
- 宁滢,文有青,李正,等. 基于物质基础的中药味道评价技术研究进展[J]. 中成药, 2024, 46(7): 2315-2320.
- 杨露萍,倪妮,洪燕龙,等. 基于电子舌表征和化学成分的“谱味”相关性探究川芎辛味物质基础[J]. 中成药, 2021, 43(7): 1805-1811.
- Wei L H, Qiao L X, Pang G C, et al. A kinetic study of bitter taste receptor sensing using immobilized porcine taste bud tissues[J]. Biosens Bioelectron, 2017, 92: 74-80.
- 马文凤,许浚,韩彦琪,等. 仿生技术在中药五味辨识研究中的进展与实践[J]. 中草药, 2018, 49(5): 993-1001.
- 魏国辉,张丰聪,付先军,等. 中药成分相似性量化建模及寒热药性预测分析[J]. 数据分析与知识发现, 2020,

4(5): 75-83.

- 王小鹏,张璐,陈鹏举,等. 近红外光谱技术应用于中药四类味觉分类辨识的可行性分析[J]. 中草药, 2023, 54(4): 1076-1086.
- 梁浩,纪徐维晟,王献瑞,等. 基于中药拉曼谱图的寒热药性判别研究[J]. 世界中医药, 2023, 18(1): 65-69.
- 石婷. 核磁共振技术用于茶油品质快速检测方法的建立及其应用[D]. 南昌:南昌大学, 2018.
- 孙瑞,李任时,余伯阳. 基于特征图谱和OPLS-DA的茯苓产地溯源分析[J]. 海峡药学, 2021, 33(9): 18-22.
- 张钰,李杰庆,李涛,等. 17种分类算法在牛肝菌种类鉴别研究中的应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2019, 39(2): 448-453.
- 周聪,王慧,杨健,等. 基于高光谱成像技术的中药栀子产地识别[J]. 中国中药杂志, 2022, 47(22): 6027-6033.
- Gao M L, Zhang Y, Cheng F F, et al. A gradient-based discriminant analysis method for process quality control of carbonized TCM via Fourier transform near infrared spectroscopy: A case study on carbonized *Typhae Pollen*[J]. Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc, 2022, 265: 120363.
- 虞瑶,高涵,陶旸,等. 基于集成学习的高光谱遥感影像分类综述[J]. 测绘与空间地理信息, 2023, 46(4): 49-52; 60.
- Wan Y T, Chen Y, Zhang W J, et al. Application of FT-IR spectroscopy and chemometric technique for the identification of three different parts of *Camellia nitidissima* and discrimination of its authenticated product[J]. Front Pharmacol, 2022, 13: 931203.
- 冯丹,龙若兰,李佩佩,等. 不同采收月份唐古特大黄多元红外光谱判别[J]. 中成药, 2023, 45(3): 836-842.
- 文有青,李芷瑶,宁滢,等. 拉曼光谱技术在灵敏检测气味物质中的应用进展[J]. 分析试验室, 2023, 42(10): 1412-1420.
- 马欣妍. 枸杞中功效成分黄酮类似物的高效检测识别[D]. 北京:中国石油大学, 2019.
- 陈艳琼,郝勇,戚雪勇. 薄层色谱与表面增强拉曼光谱联用技术快速鉴别中药黄连[J]. 现代中药研究与实践, 2016, 30(2): 10-13.
- 曹玲,石蓓佳,吴莉,等. 常用羧酸类及其衍生物药用辅料的拉曼光谱鉴别[J]. 药物分析杂志, 2010, 30(3): 484-490.
- 司民真,李家旺,杨永安,等. 不同种类新鲜辛夷油细胞原位显微拉曼光谱研究[J]. 中华中医药杂志, 2022, 37(4): 2331-2334.
- Ge M L, Wang Y Y, Li H B, et al. Rapid identification of easily-confused mineral traditional Chinese medicine (TCM) based on low-wavenumber Raman and terahertz spectroscopy[J]. Photonics, 2022, 9(5): 313.