

红外光谱结合化学计量学快速鉴别不同环境发汗丹参

刘洁^{1,2,3}, 单晓晓^{1,2,3}, 李国转^{1,2,3}, 彭代银^{1,2,3}, 王雷^{1,2,3,4},
俞年军^{1,2,3}, 王国凯^{1,2,3}, 陈卫东^{1,2,3,4}

(1. 安徽中医药大学药学院, 安徽 合肥 230012; 2. 安徽省中医药科学院, 安徽 合肥 230012;
3. 中药复方安徽省重点实验室, 安徽 合肥 230012; 4. 中药饮片制造新技术与研发
安徽省重点实验室, 安徽 合肥 230012)

[摘要]目的 采用红外光谱法测定空旷阴凉、空旷光照及室内环境下堆积发汗丹参中水提取物及醇提取物特征, 快速鉴别其质量。**方法** 采用傅里叶红外光谱技术结合化学计量学建立主成分分析-马氏距离(principal component analysis-Mahalanobis distance, PCA-MD)判别模型鉴别分析不同环境下发汗丹参的水提取物和醇提取物。**结果** 丹参的红外光谱图中主要特征吸收峰在 3 305、2 929、1 601、1 520、1 362、1 260、1 171、1 041、869 cm^{-1} 附近; 不同环境发汗丹参的水提取物和醇提取物吸收峰基本相似, 但部分特征吸收峰存在数目、位置和吸收强度的差异, 表明丹参经不同环境发汗后化学成分和含量发生了改变。在 1 520、1 262 cm^{-1} 附近发汗后吸收峰强度增加, 推测发汗后水提取物中酚酸类含量增加, 且 3 号堆(室内环境)强度明显高于其他炮制品, 2 号堆次之; 发汗醇提取物在 1 740~1 650 cm^{-1} 处吸收峰增强, 提示发汗后酮类含量升高, 且 2 号堆(空旷光照)强度最高, 3 号堆次之; 在发汗过程中 1 041 cm^{-1} 附近吸收峰强度降低, 可能发生糖苷的水解和糖类的代谢。PCA-MD 判别分析显示, 不同环境发汗丹参可完全区分, 推测丹参经发汗后化学成分发生不同程度的改变。**结论** 红外光谱结合 PCA-MD 判别分析可用于不同发汗环境下丹参的准确、快速鉴别及质量评价, 为丹参产地不同发汗品的质量评价提供参考。

[关键词] 红外光谱; 化学计量学; 丹参; 发汗

[中图分类号] R927 [DOI]10.3969/j.issn.2095-7246.2021.02.021

丹参为唇形科植物丹参 *Salvia miltiorrhiza* Bge. 的干燥根和根茎^[1], 主要活性成分包括脂溶性丹参酮类及水溶性丹酚酸类。丹参入药, 首见于东汉《神农本草经》, 属于常用大宗中药材。丹参在临床上广泛用于治疗心脑血管系统疾病^[2-3], 还具有抗肿瘤^[4-5]、抗炎^[6]、保肝^[7]等作用。发汗是丹参的传统产地初加工方法, 通过发汗可以使丹参中化学成分发生变化^[8-9]。不同环境下发汗对丹参有效成分有影响, 通常采用色谱、质谱法进行分析, 但分析方法步骤复杂、检测效率低, 且仅反映相关分子的特性; 而红外光谱具有高度的专属性和特征性, 是鉴别物质和分析物质化学结构的有效手段, 可以反映药材聚集态的宏观特性, 并在样品峰和峰强度方面提供独特的“指纹”, 可以快速有效地对药材质量进行整体控制^[10]。主成分分析(principal component analysis, PCA)为

选用较少的几个综合指标, 能反映原来众多具相关性的指标信息, 降低原始数据的维度, 适用于中药多种化学指标的分析^[11]。PCA 结合马氏距离(Mahalanobis distance, MD)计算降维后的新变量, 既保证光谱完整性, 又不受变量间相关性和单位的影响^[12]。

本实验采取傅里叶红外光谱技术结合化学计量学方法建立 PCA-MD 判别分析模型, 拟比较不同环境下发汗丹参中醇提取物和水提取物, 通过观察比较各谱图的吸收峰特征, 为丹参发汗环境筛选提供理论依据。

1 材料

1.1 仪器 Nicolet6700 型傅里叶红外光谱仪(氘代三甘氨酸硫酸酯检测器): 美国 Thermo 公司; BJ-150 型高速多功能粉碎机: 德清拜杰电器有限公司; RE-5205 型旋转蒸发器: 上海亚荣生化仪器厂。

1.2 试剂 丹酚酸 B(纯度 $\geq 98\%$, DST190918-009)、丹参素(纯度 $\geq 98\%$, DST191201-015)、丹参酮 II A(纯度 $\geq 98\%$, DST190117-011)标准品: 成都乐美天医药科技有限公司; 溴化钾碎晶: 上海迈坤化工有限公司; 乙醇(190401): 上海苏懿化学试剂有限公司; 实验所用试剂均为分析纯。丹参原药材由安

基金项目: 国家重点研发计划项目(2017YFC17016005); 安徽省中央引导地方科技发展专项(201907d07050002); 安徽省自然科学基金项目(1908085QH351)

作者简介: 刘洁(1988-), 女, 硕士研究生

通信作者: 陈卫东(1965-), 男, 教授, Wdchen@ahctm.edu.cn

徽春之蔚农业科技有限公司提供,为种苗栽培的1年生丹参鲜品。原植物经安徽中医药大学彭华胜教授鉴定,丹参是唇形科鼠尾草属 *Salvia miltiorrhiza* Bge. 正品。

2 方法

2.1 供试品的制备

2.1.1 药材的预处理 ①发汗丹参的制备:从鲜品丹参中挑选出粗细均匀的根条,去泥,去除芦头。将其随机分成3组(每组约300 kg),分别置于空旷阴凉、空旷光照、室内环境下堆积,模拟丹参传统产地加工“发汗”方法(即堆积7 d以使内部水分溢出。在药材堆中保留松散的间隙用于通风,周边略微覆盖,并且定期打开覆盖物以进行通风。为了使整个药材堆均匀排汗,将药材堆展开一夜,然后每2 d堆放1次,每次堆放2 d并摊开一夜,重复以上操作3次。当根的内核变成紫红色时,将药材堆展开并放在干净、干燥、阴凉的地方晾干^[13])发汗,编号分别为发汗1号堆、发汗2号堆和发汗3号堆,制成发汗丹参样品。②非发汗丹参制备:将新鲜丹参根置于背阴、干燥、洁净、通风的地方晾干(过程中避免积压,防止产热)^[13]。

2.1.2 丹参水提物的制备 取丹参发汗及非发汗品适量,切成小段,加12倍量水浸泡1.5 h,于80℃提取2次,每次提取时间为1.5 h,合并提取液,滤过,滤液60℃减压浓缩成清膏。放冷,加乙醇使含醇量为70%,静置12 h,取上清液,减压回收乙醇,并浓缩至稠膏,干燥,粉碎成细粉,过0.18 mm筛,即得丹参水提物^[14]。

2.1.3 丹参醇提物的制备 取丹参发汗及非发汗品适量,切成小段,加8倍量95%乙醇加热回流提取3次,每次0.5 h,滤过,合并滤液,减压回收乙醇并浓缩成稠膏,用热水洗至洗液无色,80℃下干燥,粉碎成细粉,过0.18 mm筛,即得丹参醇提物^[15]。

2.2 红外光谱的测定 分别取发汗、非发汗水提及醇提粉末与溴化钾以1:50比例混合,置玛瑙研钵中研磨成极细粉,转移至红外光谱测定专用模具中,用10 t以下的压力压成均匀透明的薄片;光谱范围为4 000~525 cm⁻¹,每张光谱累加扫描16次,光谱分辨率为4 cm⁻¹,扫描过程中实时排除二氧化碳和水蒸气干扰。

2.3 光谱数据处理 利用傅里叶变换红外光谱仪得到相应的红外光谱图;用OMNIC 9.0软件进行自动基线校正和纵坐标归一化处理,采用Origin 8.0软件绘制红外光谱图,用The Unscrambler 11软件对光谱

图进行优化处理后建立PCA-MD判别模型。

3 结果

3.1 方法学实验

3.1.1 精密度考察 将丹参醇提物与溴化钾按比例混合后压片,重复测定其红外图谱6次,6张红外图谱共有峰波数的相对标准偏差(relative standard deviation, RSD)小于4.08%。

3.1.2 稳定性考察 分别在0、1、2、4、8、24 h对同一压片红外光谱进行测定,6张红外图谱共有峰波数的RSD小于8.08%。

3.1.3 重复性考察 将丹参醇提物制成6个压片测定红外图谱,6张红外图谱共有峰波数的RSD小于4.84%。

3.2 丹参醇提物、水提物分别与丹参酮II A及丹参素、丹酚酸B的红外光谱图分析 红外光谱图显示丹参药材的宏观指纹。由图1、图2的一维及二阶倒数红外光谱图可知,丹参酮II A在1 692、1 670、1 582、1 536、1 284、1 159 cm⁻¹等处出现特征峰,丹参醇提物基本上保留丹参酮II A的吸收峰,如1 740~1 650 cm⁻¹处为C=O独有的特征吸收峰;丹参素在1 583、1 526、1 448、1 296、1 261、1 115 cm⁻¹等处,丹酚酸B在1 719、1 611、1 520、1 447、1 362 cm⁻¹等处有特征吸收峰,丹参水提物与丹参素、丹酚酸B存在多处共有峰,如1 526 cm⁻¹附近为芳香环C=O骨架伸缩振动吸收,1 397~1 260 cm⁻¹可能是C-H弯曲振动吸收与C-O伸缩振动的叠加,对应丹参素及丹酚酸B在1 520、1 262 cm⁻¹处的吸收峰。

3.3 不同环境下发汗丹参水提物的红外光谱图分析 从图3中可知:①3种不同环境下发汗丹参的平均红外光谱图的峰形基本相似;②不同环境发汗丹参水提物平均光谱峰强度在A区域(3 700~2 800 cm⁻¹)和B区域(1 800~500 cm⁻¹)存在明显差异,发汗后1 520、1 262 cm⁻¹处吸收峰较非发汗品增强,推测酚酸类含量增加,且在发汗过程中1 041 cm⁻¹处吸收峰强度降低,可能为多糖类成分降解,发汗3号堆(室内环境)强度明显高于其他发汗品,2号堆次之;③在B区域(指纹区),少数吸收峰在位置和强度上有差异。

为了更直观地比较不同环境发汗丹参红外光谱的差异,对1 800~800 cm⁻¹区域进行二阶求导处理(见图4)。对一系列动态红外光谱进行数学分析,不仅提高红外光谱图的分辨率,而且提供基团之间相关性的详细结构信息,可用于鉴别和研究物质成分或基团之间的相互作用^[16],增强图谱特征。如

非发汗丹参在 $1\,520.85$ 、 $1\,404.02\text{ cm}^{-1}$ 处和发汗品在 $1\,521.53$ 、 $1\,405.86\text{ cm}^{-1}$ 的吸收峰对应甲基和亚甲基弯曲振动。但发汗丹参吸收峰强度略高于非发汗品,提示酚酸类含量增加;非发汗的 $1\,261.59\text{ cm}^{-1}$ 处、发汗的 $1\,260.92\text{ cm}^{-1}$ 峰对应丹参素钠在 $1\,261\text{ cm}^{-1}$ 处的吸收峰,发汗吸收峰强度高于非发

汗品,表明发汗后含酚酸类含量增加。同样,在 $1\,200\sim 600\text{ cm}^{-1}$ 范围内为糖类异构体特征吸收区,可以明显观察到发汗丹参碳水化合物的相对含量较非发汗丹参略有下降,提示在发汗过程中多糖类成分降解。

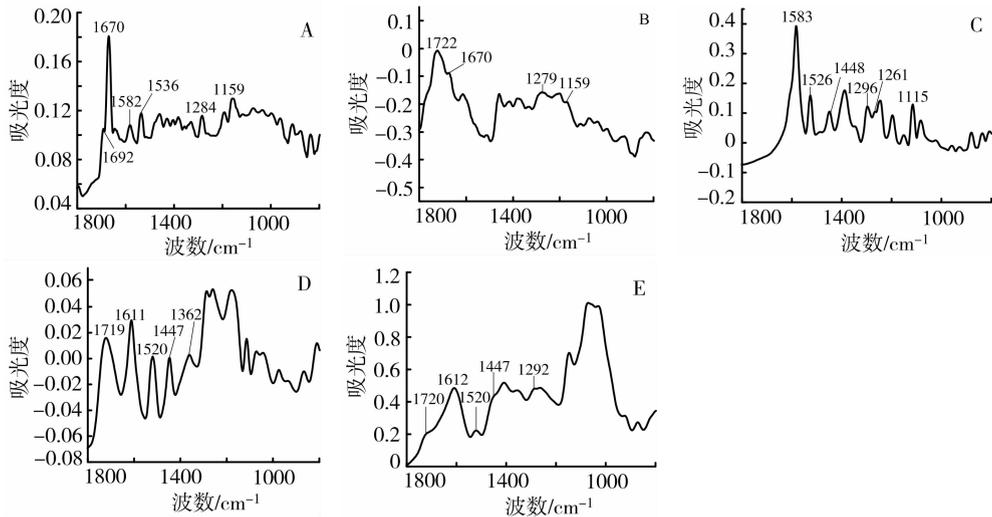


图1 丹参酮Ⅱ A(A)、丹参醇提取物(B)、丹参素(C)、丹酚酸 B(D)及丹参水提取物(E)的一维红外光谱图

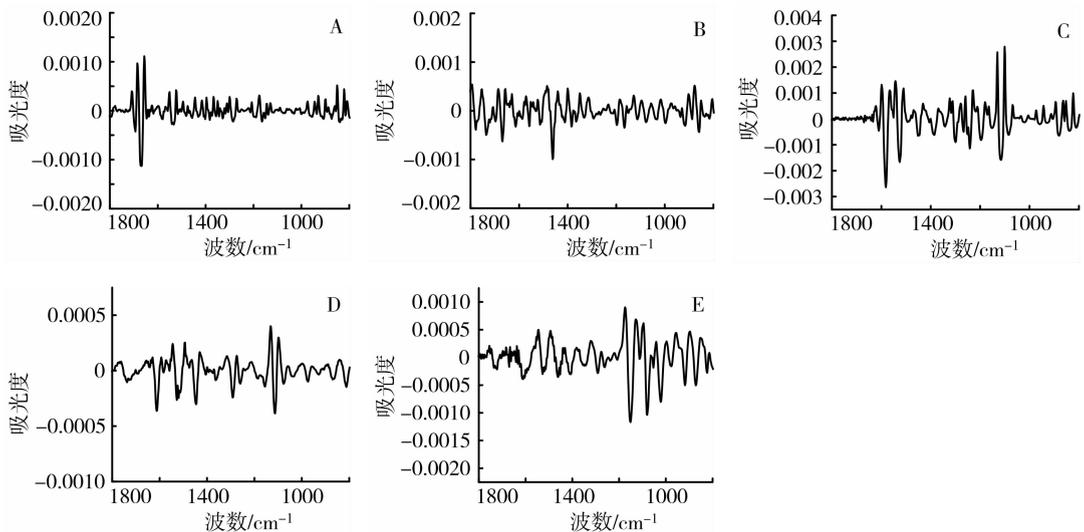


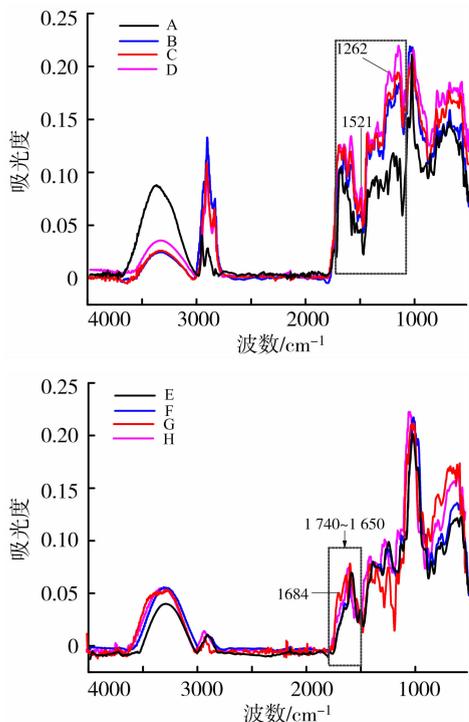
图2 丹参酮Ⅱ A(A)、丹参醇提取物(B)、丹参素(C)、丹酚酸 B(D)、丹参水提取物(E)的二阶导数红外光谱图

3.4 不同环境下发汗丹参醇提取物的红外光谱图分析 从图3可知:①不同环境发汗丹参醇提取物的平均光谱峰强度在A区域($3\,700\sim 2\,800\text{ cm}^{-1}$)和B区域($1\,800\sim 500\text{ cm}^{-1}$)存在明显差异;②发汗后醇提取物中酮类含量增加,且在发汗过程中可能发生糖苷的水解和糖类的代谢,发汗2号堆(空旷光照)强度明显高于其他炮制品,3号堆次之;③在B区域(指纹区),少数吸收峰在位置和强度上有差异。结合 $1\,800\sim 800\text{ cm}^{-1}$ 区域的二阶导数图(见图4), $1\,740\sim 1\,650\text{ cm}^{-1}$ 处为 $\text{C}=\text{O}$ 独有的特征吸收峰,发汗丹参在 $1\,715.80\text{ cm}^{-1}$ 等处有吸收峰,而非

发汗丹参此处无吸收,提示发汗后酮类含量的增加,且2号堆(空旷光照)最为显著。 $1\,066.06\text{ cm}^{-1}$ 处的波段是 $\text{O}-\text{H}$ 的变化角振动和 $\text{C}-\text{O}-\text{C}$ 的伸缩振动^[17]。发汗后, $1\,035.96\text{ cm}^{-1}$ 处的吸收峰减弱,表明在发汗过程中可能发生糖苷的水解和糖类的代谢。

3.5 丹参发汗与非发汗水提取物、醇提取物的红外光谱分析 图3中,发汗与非发汗丹参水提取物与醇提取物一维红外光谱相似,但在吸收强度和吸收带上有一定差异。如水提取物特征吸收带是 $1\,520\text{ cm}^{-1}$ 处^[18],而醇提取物在此无吸收;醇提取物特征吸收带在

1 670 cm^{-1} 处的吸收峰强于水提物,而水提物在此无吸收,由此可区分水提物和醇提物。不同环境发汗丹参绝大部分特征吸收峰一一对应,但部分特征吸收峰存在数目、位置和吸收强度的差异,表明丹参经不同环境下发汗后化学成分和含量发生了改变。



注:A.非发汗水提物;B.发汗1号堆水提物;C.发汗2号堆水提物;D.发汗3号堆水提物;E.非发汗醇提物;F.发汗1号堆醇提物;G.发汗2号堆醇提物;H.发汗3号堆醇提物

图3 非发汗与不同环境下发汗丹参水提物与醇提物的一维红外光谱图

3.6 PCA-MD 判别分析模型

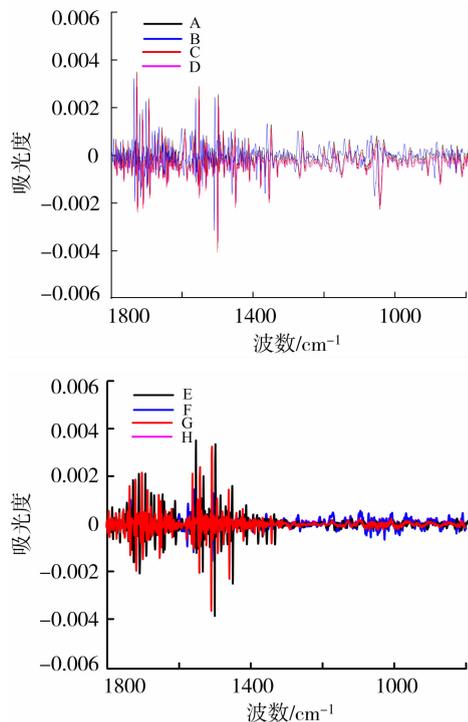
3.6.1 光谱图优化处理 对8组样品(每组3批)的红外光谱图进行一阶求导、二阶求导、一阶求导加平滑、二阶求导加平滑处理后,发现最佳预处理方案为二阶求导加平滑,提取前5个主成分时变量特征的解释能力达到81.2%,且判别正确率为100%,故选此方法建立PCA-MD判别模型。见表1。

3.6.2 建立判别模型 不同环境下发汗丹参经预处理后,提取前5个主成分进行PCA-MD判别分析(见图5),8组样品可以分开。发汗与非发汗丹参的醇提物距离较近,推测其经过发汗处理后化学成分变化相似,丹参经发汗后化学成分发生不同程度的改变,根据其差异可将丹参不同发汗品完全区分,且差异越大,空间距离越大。

4 讨论

红外光谱由分子的振动及转动能级的跃迁引起,主要用于定性鉴别和结构分析,且样品不需要进行前处理,使样品之间的微小差异能够最大限度地

保留下来,不会被人干扰、甚至破坏,因此,可以从整体上表征不同环境下发汗丹参的差异。不同环境



注:A.非发汗水提物;B.发汗1号堆水提物;C.发汗2号堆水提物;D.发汗3号堆水提物;E.非发汗醇提物;F.发汗1号堆醇提物;G.发汗2号堆醇提物;H.发汗3号堆醇提物

图4 非发汗与不同环境下发汗水提物与醇提物二阶导数红外光谱图

表1 光谱预处理对PCA-MD判别模型的影响

预处理方法	主成分数	均方根误差/%	误判数
未处理	2	91.2	3
一阶求导	3	93.7	3
二阶求导	4	54.1	3
一阶求导+平滑	2	93.7	3
二阶求导+平滑	5	81.2	3

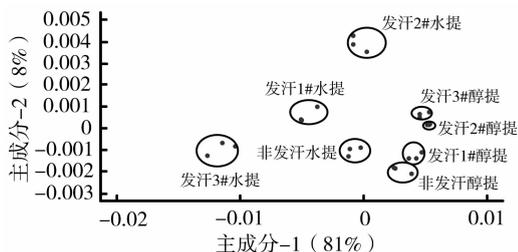


图5 PCA-MD得分图

下发汗丹参的原始图谱峰形变化极为相似,且共有峰较多,可显示出丹参特有的光谱特征,这与课题组前期用高效液相色谱指纹图谱鉴别结果一致^[19],说明发汗处理后的丹参整体化学组分并没有发生改变。经二阶求导及结合化学计量法,表明丹参经不同环境下发汗后化学成分和含量发生了改变。发汗

后水提物中酚酸类含量增加,与邓寒霜等^[20]研究的发汗后酚酸类含量均有增加相一致,且发汗3号堆(室内环境)强度明显高于其他发汗品,2号堆次之;醇提物酮类含量升高,与课题组前期研究^[21]及赵志刚等^[8]的研究结果相符,且发汗2号堆(空旷光照)强度明显高于其他炮制品,3号堆次之,与课题组前期研究^[22]结果一致;在发汗过程中可能发生糖苷的水解和糖类的代谢。红外光谱结合 PCA-MD 判别模型可准确区分发汗与非发汗丹参,丹参发汗后含量的变化可能与堆置发汗过程中生物组织内部的微生物和功能酶系促发资源性化学物质的生物转化与化学转化有关^[23],具体发汗机制有待进一步研究。

参考文献:

[1] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典:一部[M]. 北京:中国医药科技出版社,2015:76-77.

[2] LI Y H, WANG F Y, FENG C Q, et al. Studies on the active constituents in radix salviae miltiorrhizae and their protective effects on cerebral ischemia reperfusion injury and its mechanism[J]. *Pharmacogn Mag*, 2015, 11(41):69-73.

[3] LU J, SONG H P, LI P, et al. Screening of direct thrombin inhibitors from *Radix Salviae Miltiorrhizae* by a peak fractionation approach[J]. *Pharm Biomed Anal*, 2015, 109:85-90.

[4] ZHANG Y, GUO S, FANG J, et al. Tanshinone II A inhibits cell proliferation and tumor growth by downregulating STAT3 in human gastric cancer[J]. *Exp Ther Med*, 2018, 16(4):2931-2937.

[5] XIE J, LIU J, LIU H, et al. The antitumor effect of tanshinone II A on anti-proliferation and decreasing VEGF/VEGFR2 expression on the human non-small cell lung cancer A549 cell line[J]. *Acta Pharm Sin B*, 2015, 5(6):554-563.

[6] LIU Q Q, HAN J, ZUO G Y, et al. Potentiation activity of multiple antibacterial agents by Salvianolate from the Chinese medicine Danshen against methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA) [J]. *Pharmacol Sci*, 2016, 131(1):13-17.

[7] PENG H, HE Y, ZHENG G, et al. Meta-analysis of traditional herbal medicine in the treatment of nonalcoholic fatty liver disease[J]. *Cell Mol Biol (Noisy-le-grand)*, 2016, 62(4):88-95.

[8] 赵志刚, 郜舒蕊, 侯俊玲, 等. 不同产地加工方法对山东丹参药材质量的影响[J]. *中国中药杂志*, 2014, 39(8):1396-1400.

[9] 侯晓杰, 张建锋, 李玮, 等. 不同加工方法对丹参中丹酚

酸 B 和醇溶性浸出物的影响[J]. *中国现代中药*, 2019, 21(2):218-221.

[10] 雷晓晴, 李耿, 王秀丽, 等. 基于近红外光谱法快速测定丹参中 5 种成分模型的建立[J]. *中草药*, 2018, 49(11):2653-2661.

[11] 王露露, 孙倩怡, 杨慧海, 等. 模式识别及其在中药质量评价中的应用[J]. *中草药*, 2016, 47(23):4282-4288.

[12] 吴喆, 张霖, 左智天, 等. 红外光谱结合化学计量学快速鉴别云南重楼不同炮制品[J]. *光谱学与光谱分析*, 2018, 38(4):1101-1106.

[13] LI G, YU F, WANG Y, et al. Comparison of the chromatographic fingerprint, multicomponent quantitation and antioxidant activity of *Salvia miltiorrhiza* Bge. between sweating and nonsweating[J]. *Biomed Chromatogr*, 2018, 32(6):e4203.

[14] 李国转, 于凡, 陈卫东, 等. 正交试验结合 HPLC 指纹图谱优选丹参总酚酸的提取工艺[J]. *中药材*, 2017, 40(5):1159-1162.

[15] 李国转, 彭代银, 陈卫东, 等. 正交试验结合 HPLC 指纹图谱优选丹参酮类提取物的工艺[J]. *江西中医药大学学报*, 2017, 29(4):67-70.

[16] 许长华, 周群, 孙素琴, 等. 二维相关红外光谱法与阿胶的真伪鉴别[J]. *分析化学*, 2005, 33(2):221-224.

[17] XING Y, CAI L, YIN T P, et al. Improving the antioxidant activity and enriching sal-vianolic acids by the fermentation of *Salvia miltiorrhizae* with *Geomycesluteus* [J]. *J Zhejiang Univ Sci B*, 2016, 17(5):391-398.

[18] 王鹏, 郭庆梅, 赵启韬, 等. 白花丹参不同部位的红外光谱三级鉴定[J]. *中国实验方剂学杂志*, 2011, 17(9):113-117.

[19] 于凡. 发汗与非发汗丹参体内外指纹图谱与初步药效学比较研究[D]. 合肥:安徽中医药大学, 2017.

[20] 邓寒霜, 高宝云, 王新军, 等. 干燥方法对中药材丹参有效成分含量的影响[J]. *商洛学院学报*, 2007, 21(2):54-56.

[21] 王婷, 于凡, 李国转, 等. “发汗”与非“发汗”丹参中 10 种活性成分含量测定及其质量的主成分分析[J]. *安徽中医药大学学报*, 2019, 38(1):75-79.

[22] 邱镇, 于凡, 李国转, 等. 不同环境发汗对发汗丹参有效成分含量及体外抗氧化活性的影响[J]. *天然产物研究与开发*, 2017, 29(10):1712-1716, 1744.

[23] 段金廛, 宿树兰, 严辉, 等. 药材初加工“发汗”过程及其酶促反应与化学转化机制探讨[J]. *中草药*, 2013, 44(10):1219-1225.

(收稿日期:2020-05-14)

Rapid Identification of *Salvia miltiorrhiza* Under Different Sweating Environments by Infrared Spectroscopy Combined with Chemometrics

LIU Jie^{1,2,3}, SHAN Xiao-xiao^{1,2,3}, LI Guo-zhuan^{1,2,3}, PENG Dai-yin^{1,2,3}, WANG Lei^{1,2,3,4}, YU Nian-jun^{1,2,3}, WANG Guo-kai^{1,2,3}, CHEN Wei-dong^{1,2,3,4}

(1. School of Pharmacy, Anhui University of Chinese Medicine, Anhui Hefei 230012, China; 2. Anhui Academy of Chinese Medicine, Anhui Hefei 230012, China; 3. Key Laboratory of Chinese Medicinal Formula of Anhui Province, Anhui Hefei 230012, China; 4. Anhui Province Key Laboratory of Traditional Chinese Medicine Decoction Pieces of New Manufacturing Technology, Anhui Hefei 230012, China)

[Abstract] Objective To investigate the characteristics of the water and alcohol extracts of *Salvia miltiorrhiza* processed under the open shade, open light, and indoor sweating environments using infrared spectrometry, and to rapidly identify their quality. **Methods** Fourier transform infrared spectroscopy and chemometrics were used to establish a principal component analysis-Mahalanobis distance (PCA-MD) discriminant model, which was used to analyze the water and alcohol extracts of *Salvia miltiorrhiza* processed under different sweating environments. **Results** The infrared spectrogram showed that the main characteristic absorption peaks of *Salvia miltiorrhiza* were located around 3 305, 2 929, 1 601, 1 520, 1 362, 1 260, 1 171, 1 041, and 869 cm^{-1} ; similar absorption peaks were observed for the water and alcohol extracts of *Salvia miltiorrhiza* processed under different sweating environments, but there were certain differences in the number, location, and absorption intensity of some characteristic absorption peaks, suggesting that there were changes in the chemical composition and content of *Salvia miltiorrhiza* after sweating processing under different environments. The intensity of the absorption peaks around 1 520 and 1 262 cm^{-1} was enhanced after sweating, and it was speculated that there was a significant increase in the content of phenolic acids in water extract after sweating, and the reactor No. 3 (indoor environment) had the highest strength among the processed products, followed by the reactor No. 2. The intensity of the absorption peaks of the alcohol extract after sweating was enhanced around 1 740-1 650 cm^{-1} , suggesting that there was an increase in the content of ketones after sweating, and the reactor No. 2 (open light environment) had the highest strength, followed by the reactor No. 3. The intensity of the absorption peaks around 1 041 cm^{-1} was reduced during sweating, suggesting the presence of glycoside hydrolysis and carbohydrate metabolism. The PCA-MD discriminant analysis showed that *Salvia miltiorrhiza* products processed under different sweating environments could be completely distinguished, which suggested varying degrees of change in the chemical components of *Salvia miltiorrhiza* after sweating. **Conclusion** Infrared spectrometry combined with PCA-MD discriminant analysis can be used for the accurate and rapid identification and quality assessment of *Salvia miltiorrhiza* processed under different sweating environments, which provides a reference for the quality assessment of *Salvia miltiorrhiza* products processed under different sweating environments in the producing area.

[Key words] Infrared spectrometry; Chemometrics; *Salvia miltiorrhiza*; Sweating