



助力

中药药效物质基础研究

加速

中药现代化进程

安捷伦 | 诗丹德标准天然产物
高分辨质谱标准图谱库



化繁为简
洞悉真章

中药药效物质基础研究是中医药现代化进程中关键的因素和环节，其研究目标为探究中药中可以发挥综合药理作用的化学物质集合体。而高效准确的鉴定这些药效成分则成为制约这一研究工作进程的主要因素之一，困扰广大中药研究工作者。安捷伦行业领先的标准天然产物高分辨质谱数据图谱库 (Agilent-NatureStandard Product Personal compound database and Library -PCDL) 为有效鉴定中药中有效成分提供强有力的技术支持。该谱库 (一期) 通过与上海诗丹德 (NatureStandard) 合作，包含 1300 个天然产物，大于 20000 张高分辨二级图谱。《中国药典》(2015 版) 中收录的标准物质全部收录于该图谱库。该数据库与安捷伦 MSC 软件配合使用，使天然产物的高效快速鉴定变得轻松而易行。

安捷伦 - 诗丹德质谱数据图谱库可与安捷伦差异分析软件 Mass Profiler (MP) 和功能强大的组学软件 Mass Profiler Professional (MPP)，以及代谢物鉴定软件 MetID software、定性代谢率流分析软件 VistaFlux 等配合使用，助力基于代谢组学方法的中药药效物质基础研究，成为研究人员揭开中药作用机制神秘面纱的首选研究工具。

经严格质控的高质量谱库可对安捷伦任何型号的高分辨质谱仪上采集的数据进行搜索。由于收录的图谱均经过严格的校正，大大提高了对未知成分鉴定的确信度和鉴定效率。

Agilent-NatureStandard Product PCDL 数据库可提供多种信息：

- 收录 1300 个天然产物，提供准确分子量信息。
- 收录超过 20000 张高分辨准确质量 MSMS 图谱。所有图谱中的碎片例子均经过严格的安捷伦验证流程进行质量校正。
- 收录每个化合物的 CAS 号、Chemspider 号、KEGG 号、化合物结构式、类别和植物来源等信息。
- 搜索结果可以显示化合物中文名和英文名。
- 数据库质量将不断更新。

NATURE STANDARD

诗丹德就是标准



Agilent

Trusted Answers

Agilent-NatureStandard Product PCDL 数据库界面一览图

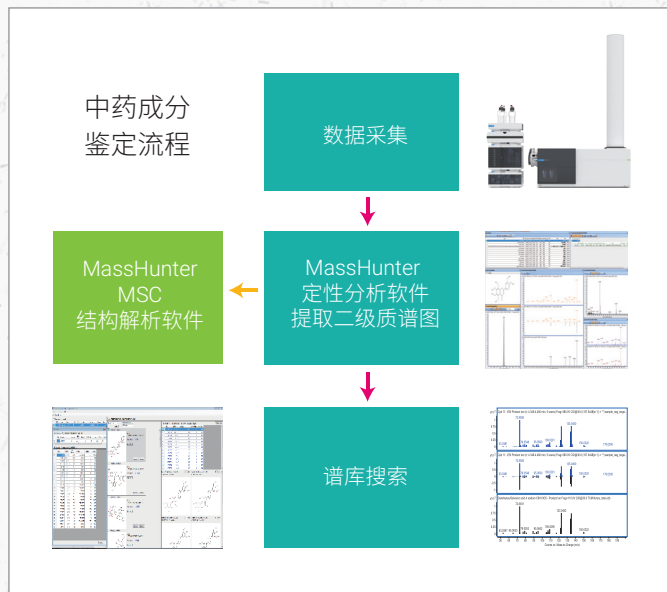
Table with columns: Name, Retention Time, CAS, OpenSolve, HSGS, IUPAC, Description. Rows include various compounds like (1)-Gallocatechin, (1)-Epigallocatechin gallate, etc.

化合物信息界面

Secondary MSMS editing interface showing a table of peaks with columns for Name, Retention Time, Date, Area, and OpenSolve. Includes a 'Scan' button and a 'Scan' dropdown menu.

二级 MSMS 图谱编辑界面

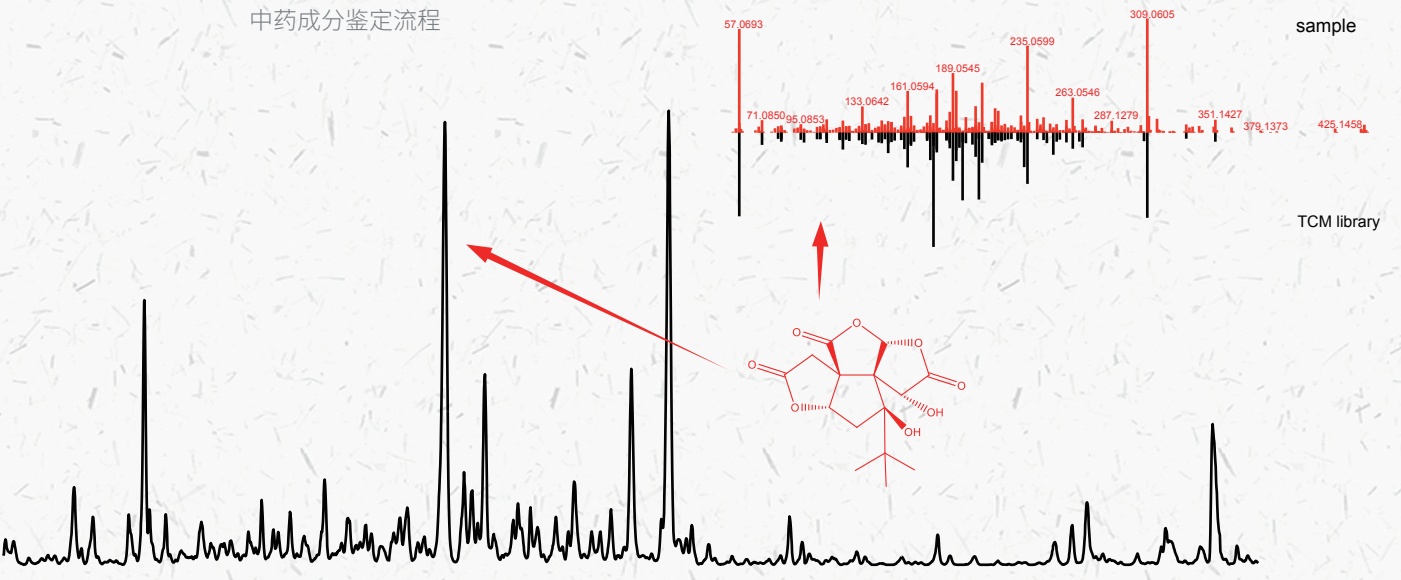
MS/MS Spectrum plot showing relative intensity versus m/z. The x-axis ranges from 50 to 1000 m/z, and the y-axis shows relative intensity from 0 to 100.



中药成分鉴定流程

Structure Analysis results showing 20 structures found for m/z 12,200. The interface includes a list of structures with their names, retention times, and scores.

MSC 软件进行结构解析界面



银杏叶中活性成分的鉴别