



Orbitrap 静电场轨道阱高分辨质谱专辑



# 中药及天然产物研究与检测解决方案

A Roadmap for the Puzzle of Traditional Chinese Medicine and Natural Products

**Thermo**  
SCIENTIFIC

## 赛默飞生命科学质谱

源于质谱先驱 – 美国菲尼根 (Finnigan) 质谱, 拥有业内最为完整的质谱产品线。我们非常愿意与您分享长达 50 年的科学质谱仪器的制造和使用经验, 可以为您提供临床检验和研究分析的完整解决方案。

### 质谱技术的创新者与领导者

• 客户服务热线: 800 810 5118, 400 650 5118

UltiMate® 3000 高效液相色谱系统的所有模块均具有超高效液相兼容性, 让所有使用者获得最佳性能。UltiMate® 3000 系列提供各类型输液泵, 流速涵盖 20 nL/min 到 10 mL/min 范围。可根据需要选择自动进样和检测器模块, 为您的化学分析提供全方位解决方案。



LTQ Orbitrap 系列超高分辨液质联用系统使用赛默飞专利的线性离子阱及高分辨质谱技术 Orbitrap, 实现多级质谱, 超高质量精确度, 分辨率, 动态范围和灵敏度。



Q Exactive 系列超高分辨液质联用系统将共轭双曲面的四极杆质量分析器与具有超高分辨率和质量精度的 Orbitrap 检测技术相结合, 提供正负切换扫描功能, 优异定性和高分辨定量能力。



Orbitrap Fusion™ Tribrid™ 质谱仪集赛默飞独有的共轭双曲面四极杆质量分析器、线性离子阱质量分析器和超高分辨率的 Orbitrap 于一体, 具备了创新性的三合一质量分析器结构, 能够对复杂生物样品进行前所未有的深度分析。

# 灵活多样的中药分析应用软件

## Compound Discoverer 软件

Compound Discoverer 软件是智能的小分子化合物发现和鉴定软件。研究人员使用该软件，可以方便的实现以下功能：

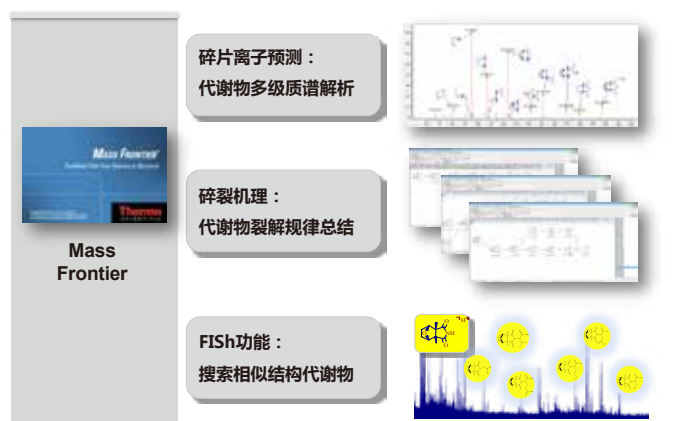
- 可根据预设的分类对不同条件下的样品进行分组和批量处理；
- 根据研究需要设定自定义的数据处理流程；
- 利用多种先进的处理技术：多重质量亏损过滤（MMDF）、同位素过滤（IPF）、碎片离子检索（FISh Scoring）等功能对预期和未知的有关物质进行提取分析；
- 在结果浏览中直观的获得不同条件下样品差异比对结果。



## Mass Frontier 软件

Mass Frontier 是专业的结构解析软件。其含有小分子碎裂机理的 Fragmentation Library™ 碎裂谱图库，该谱图库几乎涵盖了所有已发表的文獻。

- 谱图注解功能：利用 Fragmentation Library™ 碎裂谱图库，加上软件所带的预测碎裂工具以及自动谱图注解功能，可对不同碎片离子及其所对应的结构进行自动归属，从而帮助简化中药成分质谱谱图数据的结构说明。
- 碎裂机理功能：利用 Fragments and Mechanisms 功能，可以方便地得到各碎片的裂解途径，从而可对中药同类化合物的质谱裂解规律进行研究。
- FISh 功能：Fragment Ion Search (FISh) 功能可以在成分复杂的中药样品中寻找具有相似结构的成分，从而有助于在已知化合物的基础上，鉴定出更多结构相似的未知化合物。



## TraceFinder 软件

TraceFinder 是一款高通量的筛查定量软件，并集仪器控制、方法编辑、数据采集、自动数据处理和报告于一体。

- 灵活选择保留时间、一级精确质量数、碎片离子信息、同位素分布、数据库谱图比对等多重指标，进行目标成分的高通量筛查。
- 建立管理数据库，通过数据对成分进行检索鉴定。
- 目标成分的高通量定量分析。



# 目录

## 中药及制剂中的化学成分表征

1. 中药及制剂中化学成分表征工作流程 .....	6
2. 动物类中药斑蝥中斑蝥素类成分鉴定 .....	7
3. 人参皂苷提取物中的化学成分鉴定 .....	12
4. 葛根中含硫成分的快速发现鉴定 .....	16
5. 葛根中丙二酰基葡萄糖苷不稳定结合物鉴定 .....	19
6. 中药复方防己黄芪汤口服液中活性成分鉴定 .....	24

## 天然产物代谢

1. 天然产物代谢工作流程 .....	28
2. 人尿样中乌头碱及其代谢产物鉴定 .....	29

## 中药组学

1. 中药组学工作流程 .....	33
2. 绿茶和红茶提取物的代谢组学分析 .....	34
3. 中药目标类群成分发现、鉴定和中药组学研究策略：基于特征类群苯乙醇苷类成分的肉苁蓉品种区分 .....	37

## 中药及保健品中非法添加筛查

1. 中药及保健品中非法添加筛查工作流程 .....	45
2. 中药及保健品中非法添加的 5 型磷酸二酯酶抑制剂进行快速筛查、确证及定量分析 .....	47
3. 中药及保健品中非法添加的降糖药进行同时鉴定、确证及定量分析 .....	52

## 中药及天然产物定量

1. 中药及天然产物定量工作流程 .....	57
2. 中药活性成分汉黄芩苷高分辨质谱定量 .....	58

中药及天然产物分析部分发表文章列表 .....	61
-------------------------	----

附录 .....	65
----------	----



想获取完整内容吗？

请将您的信息发送至：

[mango.chen@thermofisher.com](mailto:mango.chen@thermofisher.com)

我们将尽快和您取得联系寄送文集