



从抽象到具体
从未知到悉知

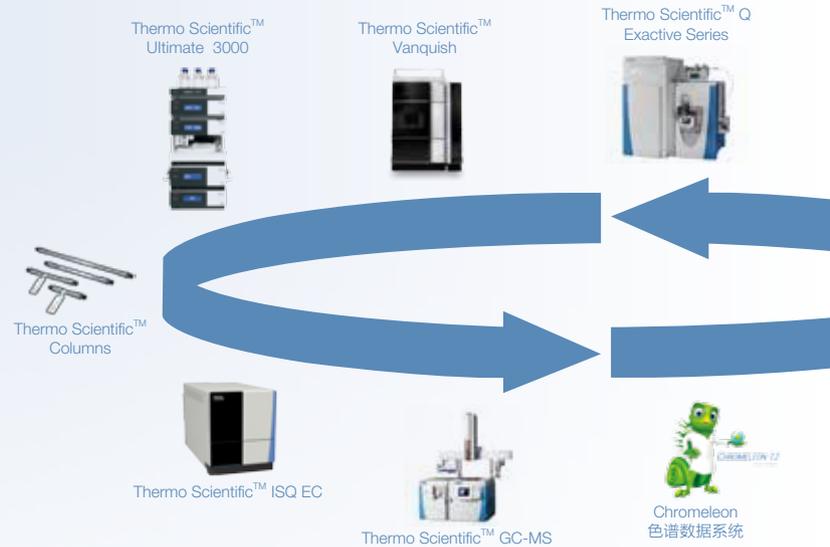
中药分析完整解决方案

ThermoFisher
SCIENTIFIC

The world leader in serving science

经典焕发新生

中医药是“中国古代科学的瑰宝”，历史悠远，为人类的健康事业做出了不可磨灭的贡献。2017年，中医药“一带一路”发展规划及《中医药法》的正式实施，明确了中医药的法律地位、国家扶持及向外发展的方针政策。发掘中医药深厚的科学内涵，推动中医药的传承与创新，提升国际交流与合作，是中医药发扬光大的关键。如何利用现代化的分析技术手段来进行药材、工艺的质量控制、提升中药品质、阐明中医“治未病”和实现中药复方精准用药已成为目前中药安全性、有效性评价的重要议题。



中药有毒有害成分检测

- 农残、真菌毒素
- SO₂、重金属
- 非法添加

- ASE: 快速、高效萃取中药
- LCMS/GCMS 一步验证数十至上百种成分
- ppt 级别的重金属元素分析

中药高级质量控制方案

- 含量测定、指纹图谱
- 成分表征，产地溯源
- 毒性成分、非法添加
- 辅料检测
- 数据合规

- 双三元 LC，在线二维中心切割同时测
- CAD 通用型检测器，无对照品情况
- 离子色谱，中药活性成分单糖和多糖
- Chromeleon 软件：管理色谱仪器，确保数据合规

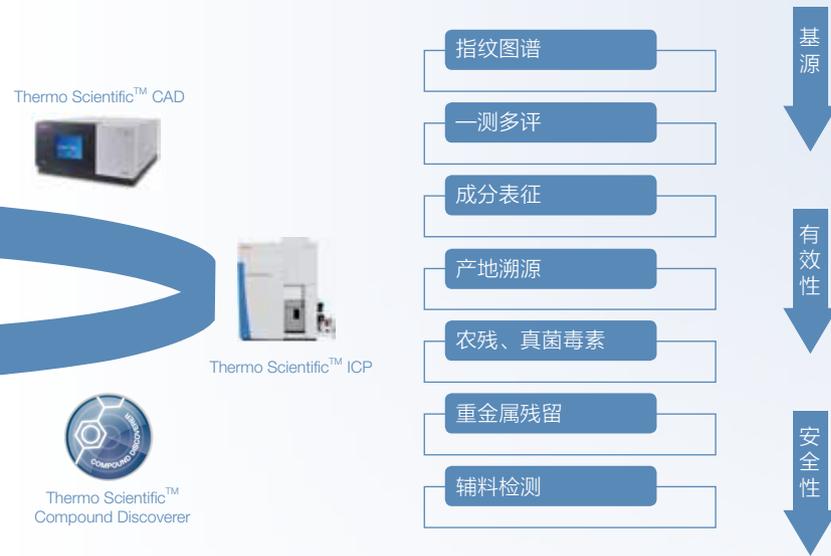
从物质基础到作用机理的高端研究方案

- 中药物质基础研究
- 中药复方体内代谢研究
- 中药代谢组学研究

- 高分辨质谱：高精度目标和非目标物
- 灵活多样的中药分析软件和数据库，

科技引领超越

赛默飞拥有业内最完整的色谱、质谱、微量元素分析产品线，卓越的仪器性能能够有效的满足中药企业和科研机构对于指纹图谱、含量测定、成分表征，中药产地溯源、农药残留、真菌毒素、重金属残留、辅料检测和物质基础及代谢组学研究的全部需求，帮助复杂的中药研究从抽象到具体，从未知到熟知。



- 材有效成分
- 百种有害残留物质
- 和形态分析
- 测复方基质中多种成分
- 况下“一测多评”
- 多糖便捷检测方案
- 数据完整可追溯，
- 示成分筛选、鉴定
- 帮助从未知到熟知

助力中药配方颗粒 & 中药经典名方热点问题研究



目录

中药（材）常规有毒有害成分检测

样品前处理解决方案

真菌毒素、农残、SO₂、重金属等有毒有害成分检测解决方案

中药高级质量控制方案

含量测定和指纹图谱

通用型检测器 CAD，一测多评

中药毒性成分、非法添加

中药制剂辅料检测

高分辨质谱技术在中药的成分表征、产地溯源的应用

中药企业 / 实验室数据合规管理

从物质基础到作用机理的高端研究方案

中药物质基础研究

中药相关代谢组学研究

中药有毒有害成分检测

全自动高通量样品制备：ASE加速溶剂萃取

赛默飞为高通量实验室提供了自动化样品制备解决方案，帮助简化和提高农药残留分析的能力。

《中国药典（2010版）》中提供了有机氯等农残的分析检测方法。采用的前处理方法为浸泡加超声波提取的方法，但该方法消耗溶剂量大、时间长、效率低、不能全自动进行，并且对实验员身体有损伤、污染环境。

赛默飞开发出一种新型的前处理方法-加速溶剂萃取法（Accelerated Solvent Extraction，ASE）。是在较高的温度（40℃-200℃）和高压（1500 psi）下用溶剂萃取固体或半固体样品的样品前处理方法。ASE 具有萃取效率高，速度快、溶剂用量少等优点，适合中药材及复方固体制剂的提取。



ASE 150



ASE 350



火箭蒸发器 Rocket

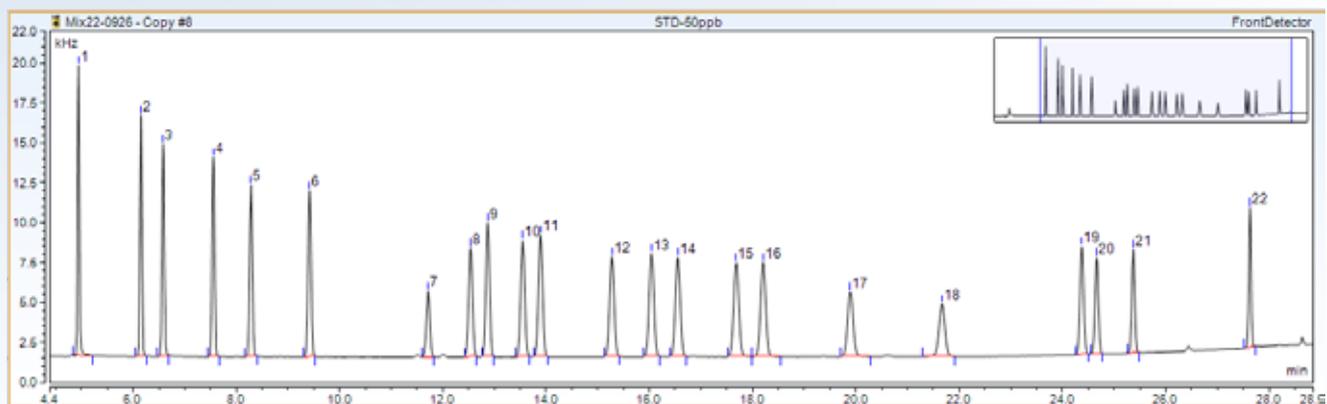
ASE 萃取条件

条件	参数
溶剂	丙酮：正乙烷 =1:1
温度	80℃
加热时间	5 min
静态萃取时间	5 min
循环次数	2
吹扫体积	60%
吹扫时间	60 s
总萃取时间	2 min
总萃取液体积	30 mL

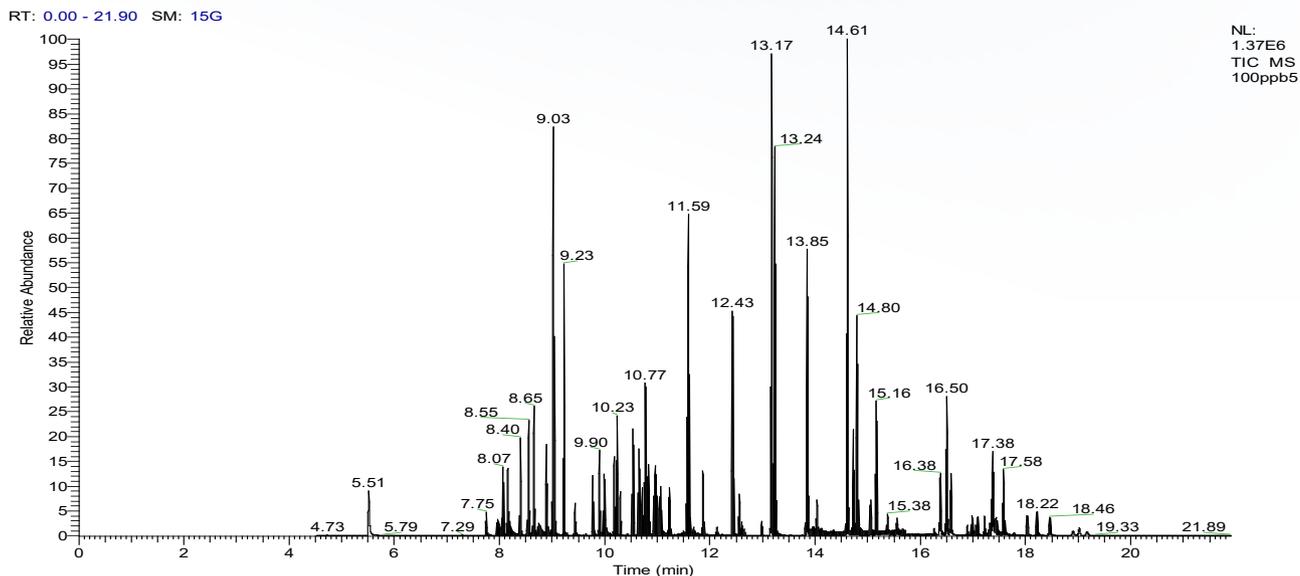
农残检测：GC和GCMS方法

赛默飞TRACE™GC产品可提供药典要求的有机氯、有机磷、拟除虫菊酯类农药常规检测的成熟方案，如不分流进样监测22种有机氯类和14种有机磷类农药。线性范围、线性相关系数和检测限均完全优于《中国药典》2015版第一、二法规定的限值要求，是QA/QC 实验室及研究机构的理想选择。

ISQ 7000 GC-MS 和TSQ 9000 GC/MS/MS 产品，具备稳健耐用的ExtractaBrite™离子源和双灯丝组件设计，无需卸真空可更换整个离子源及更换色谱柱，智能的软件采集模式充分满足不同层次的高通量筛查和定量的测定需求。结合赛默飞QuEChERS分散固相萃取和/或加速溶剂萃取方法，可对中药中的农残进行更高效环保的提取和更高灵敏度的分析，结果优于现行参考方案！



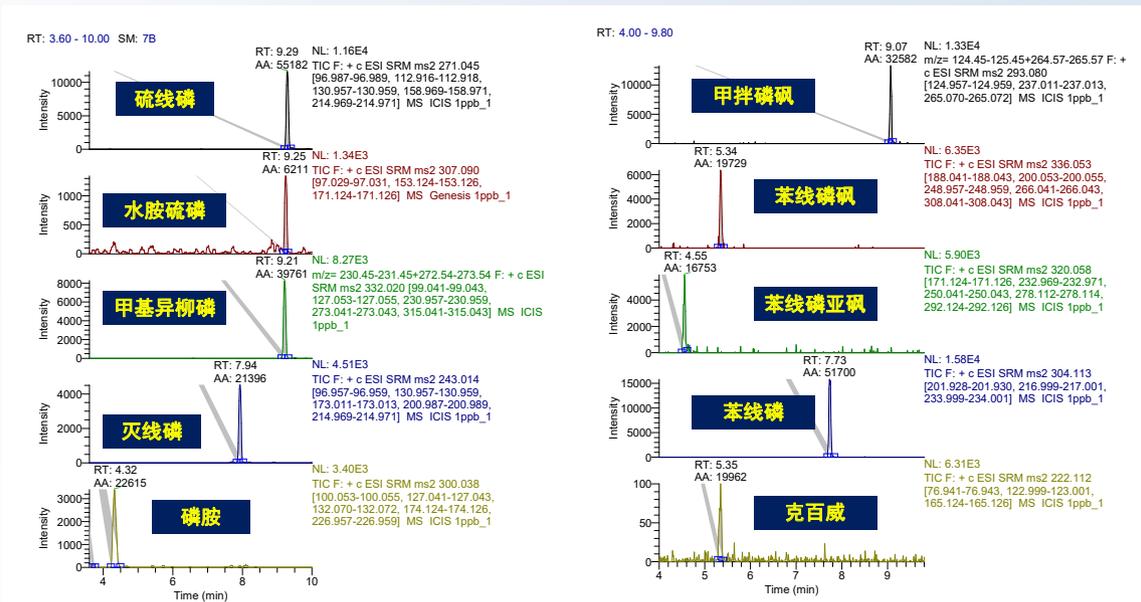
22种有机氯农药的分离度都在1.5以上， α -六六六的塔板数大于 1×10^5 ，完全满足《中国药典》2015版操作要求。具有线性好，重复性好，结果可靠等优点。



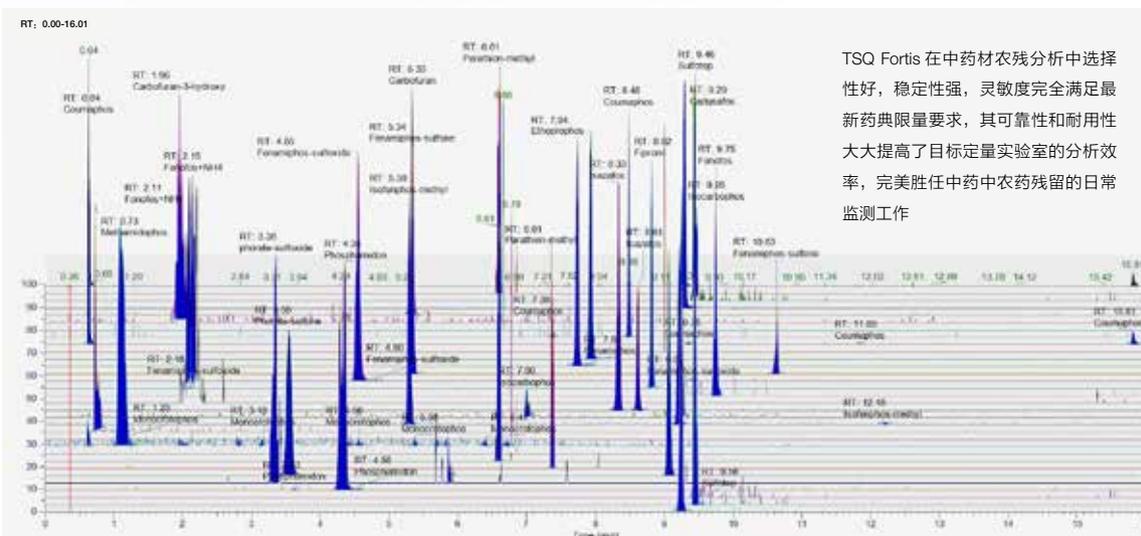
气相串联质谱法（GC-MS/MS）测定药材中的74项农残，在25 min内完成分离和检测。以快速的前处理结合赛默飞的TSQ 9000高通量、高灵敏度的三重四极杆仪器，为药材的农残分析带来高效、准确、方便易用的解决方案。

农残检测：LC-MS/MS方法

LC-MS/MS是分析农药残留的主要方法，有很高的灵敏度和选择性。TSQ Fortis LC MS/MS应用改进的主动离子管控 (AIMTM) 技术、分段四极杆、增强型双模式电子倍增器和高通量离子传输管，可为复杂基质中所有分子类型的分析实现高的灵敏度和完美的稳定性。其可靠性和耐用性大大提高了目标定量实验室的分析效率，完美胜任中药中农药残留的日常监测工作。



中药中 1ppb 典型农残化合物色谱图：LC-MS/MS

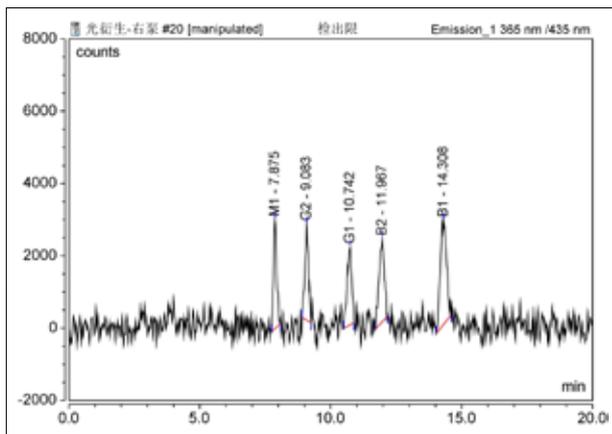


TSQ Fortis 在中药材农残分析中选择性好，稳定性强，灵敏度完全满足最新药典限量要求，其可靠性和耐用性大大提高了目标定量实验室的分析效率，完美胜任中药中农药残留的日常监测工作

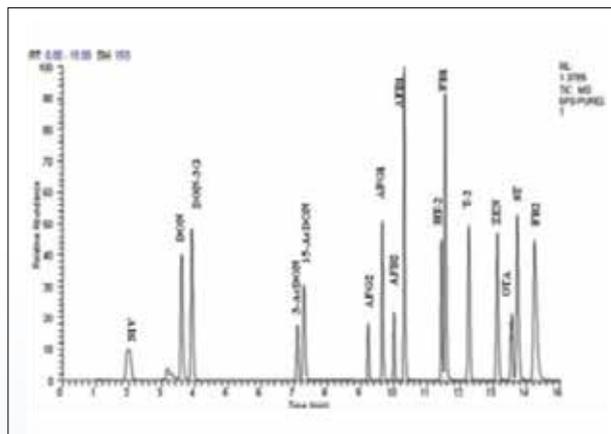
中药中 30 种农药残留及其代谢物提取离子流色谱图：10.0 ng/mL

真菌毒素检测：多种真菌毒素液相和三重四极杆液质分析方法包

针对中药在种植、储存等过程中易产生的一些真菌毒素，如黄曲霉毒素、赭曲霉毒素、呕吐毒素、玉米赤霉烯酮和展青霉毒素等，赛默飞根据药典指导原则，开发了11种真菌毒素的液相方法供常规检测，同时还能提供16种真菌毒素三重四极杆液质的定量确证方法包和51种真菌毒素的高分辨液质筛查方法包，以满足客户不同层次的测定需求。



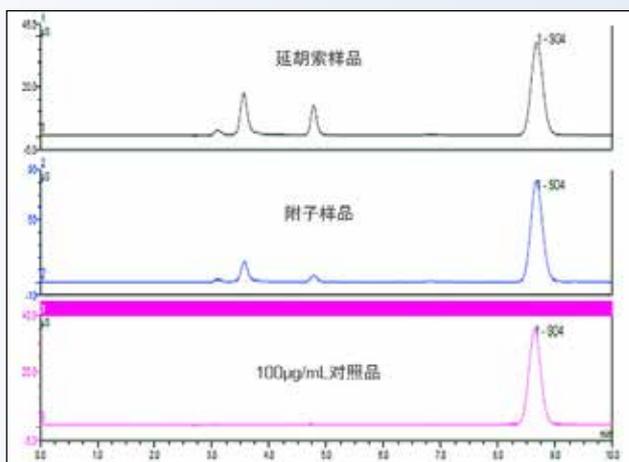
液相色谱法同时测定五种黄曲霉毒素 B1、B2、G1 和 G2, M1
(方法完全满足药典要求)



三重四极杆液质联用同时测定 16 种真菌毒素

二氧化硫残留检测：第三法离子色谱法

2015版药典对于二氧化硫残留量测定法进行修订，增加了离子色谱法和气相色谱法。其中离子色谱法为最准确的定量检测方法。采用TRACE1310GC结合Triplus-RSH三合一自动进样器，可依照2015版药典新增第二法气相色谱法检测SO₂。



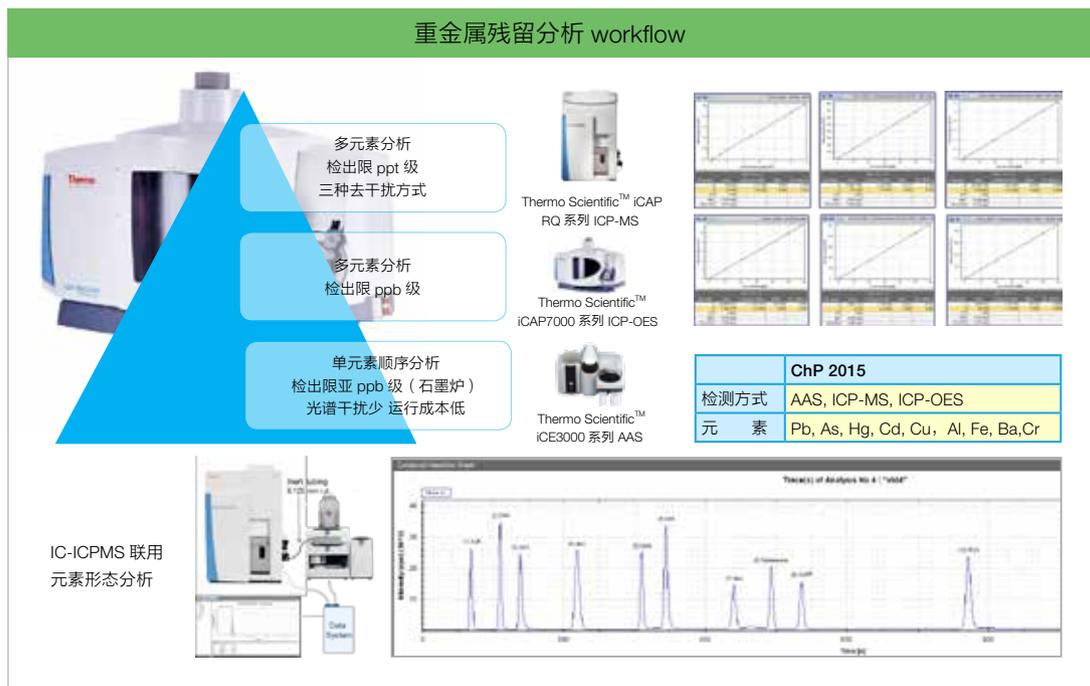
离子色谱法测定中药材中的二氧化硫



Dionex™ Aquion™
离子色谱系统

重金属检测：中药重金属检测方法包及中药中元素形态分析方法包

赛默飞提供从单元素ppb级的AAS到多元素ppt级的ICP-MS多种微量重金属元素分析仪器，可满足中药材及注射液中重金属残留检测的不同需求。为了正确评价药物中砷汞的形态价态和毒性，赛默飞除了提供2015版药典新增的HPLC-ICP-MS联用方法外，还推荐使用IC-ICP-MS联用的新方案，紧跟国际元素形态分析的发展趋势，如IC-ICP-MS 联用可在800 秒内完成10种As 形态的分离。



中药高级质量控制方案

含量测定和指纹图谱

中药质量标志物测定，结合中药指纹图谱分析仍然是目前中药及其制剂质量评价的重要策略。赛默飞除了提供常规HPLC和UHPLC的技术手段外，还能提供独家的双三元液相技术（DGLC）和通用型检测器-电雾式检测器（CAD），以及高压离子色谱系统，可以为中药中多组分定量的“一法多用，一测多评”等新颖的分析策略提供强有力支撑。

常规型质控方案：HPLC和UHPLC

《中药配方颗粒质量控制与标准制定技术要求（征求意见稿）》中提到“中药配方颗粒特征图谱/指纹图谱一般采用色谱法，如高效液相色谱法，根据中药配方颗粒品种多批次多检验量大的特点，亦可考虑采用超高效液相色谱法。”

赛默飞提供从经典Ultimate 3000 液相到高端Vanquish 液相的全套色谱平台，结合性能优越的色谱柱和HPLC到UHPLC的色谱方法无缝转换工具，帮助客户轻松解决从常规含量测定，到指纹图谱相似度分析等应用问题。

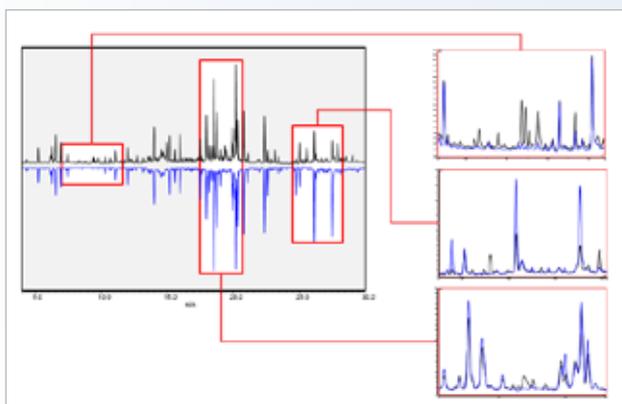
获得Pittcon2015“科学家选择奖”的超佳分离产品 Vanquish UHPLC，配备了超高检测灵敏度及超宽动态范围的DAD长光程流通池和零死体积Viper接头，能获取更高的峰容量，并更有效捕捉中药里的微量组分，可帮助客户获得更精细的中药指纹图谱和更准确的相似度比较结果。



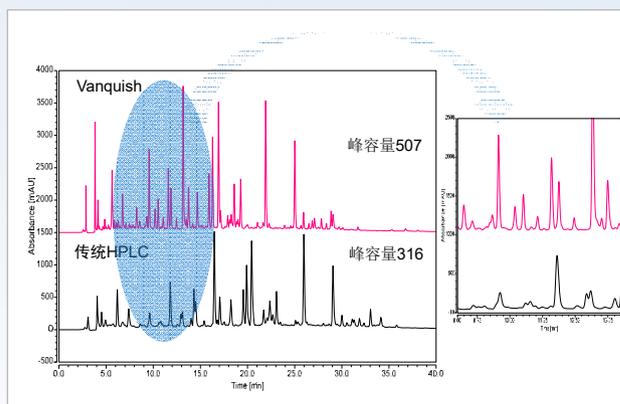
Ultimate 3000 HPLC/UHPLC 系统



Vanquish UHPLC 液相系统



指纹峰保留时间良好的重现性 (Vanquish UHPLC)

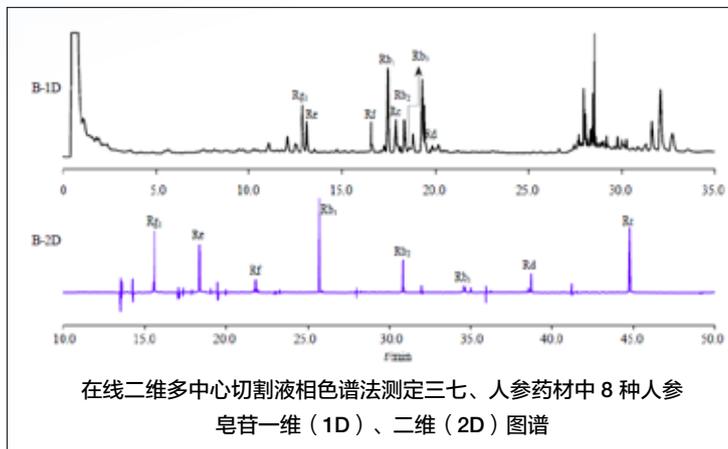


Vanquish 和普通 HPLC 银杏提取物分析对比

通用型质控方案：双三元液相

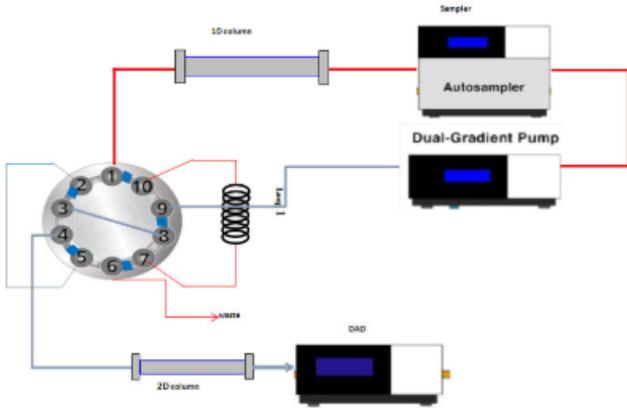
中药基质成分复杂异常，化合物性质千差万别，一种分离模式难以全面表征多类组分；加之中药复方配伍的多样性都给中药质控分析带来极大挑战，对于不同复方基质中相同有效成分定量，用单一方法来难以解决所有问题。基于柱切换技术的并联、串联、在线固相萃取、在线多维分离等方法可为化学成分表征和多组分定量等提供了更多选择。

赛默飞双三元液相色谱将两个独立的三元梯度泵整合于一个模块中，结合柱温箱两侧切换阀和Kit方法包，可轻松开发各种高级应用，实现样品的高通量分析，简化样品制备流程，深度成分剖析，以及“一法多用”等质控方法的拓展。



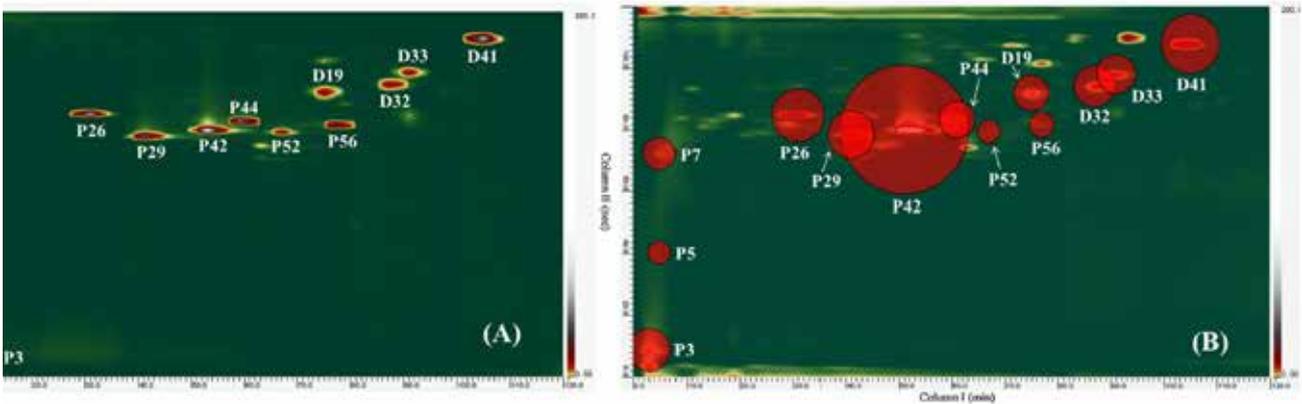
在线二维多中心切割液相色谱法测定三七、人参药材中 8 种人参皂苷一维 (1D)、二维 (2D) 图谱

双三元技术优势一：一法多用（复杂多成分精确量的中心切割二维技术）



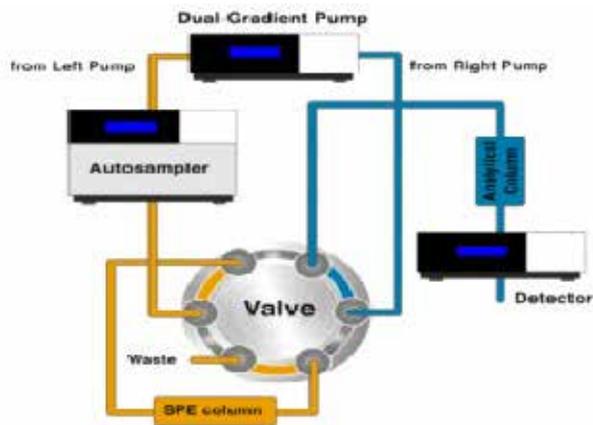
二维多中心切割

双三元技术优势二：深度剖析（中药物物质基础的全二维液相色谱分离技术）

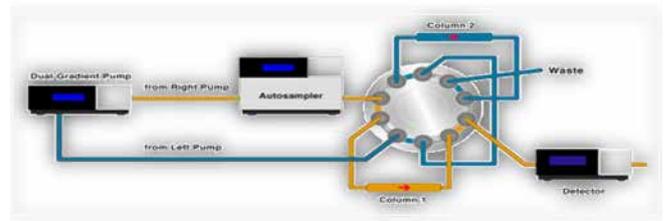


281 mm 全二维分析丹参样品成分 (B) 和 14 个标准品 (A) 的轮廓图

双三元技术优势三：简化处理、提高通量



净化复杂基质、富基微量成分的在线固相萃取技术



串联与柱切换快速分析技术

单糖和多糖活性成分的便捷质控方案：离子色谱

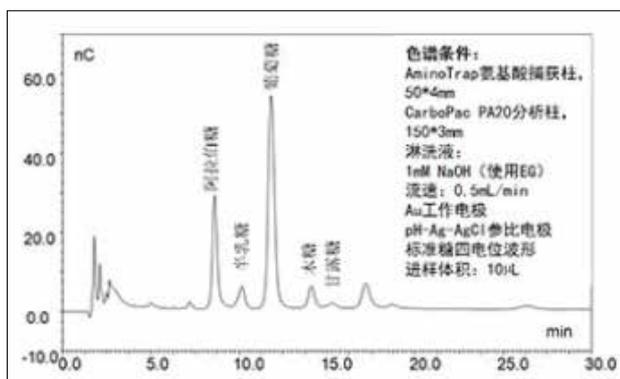
中药里的单糖和多糖作为活性成分，日益成为人们关注的焦点。然而传统检测糖的气相色谱法、液相色谱法和毛细管电泳法大多需要经过复杂的衍生化处理，且灵敏度和分离效果不理想。赛默飞的离子色谱法无需衍生即可分离测定样品中的糖类化合物，且分离度好，检测灵敏度高。无需配制淋洗液的“只加水”技术为客户提供最便捷的单糖质控方案。离子色谱除了分析单糖，还可以分析多达80个糖链构成的多糖，对于保健性中药多糖提取物的定性有重要意义。



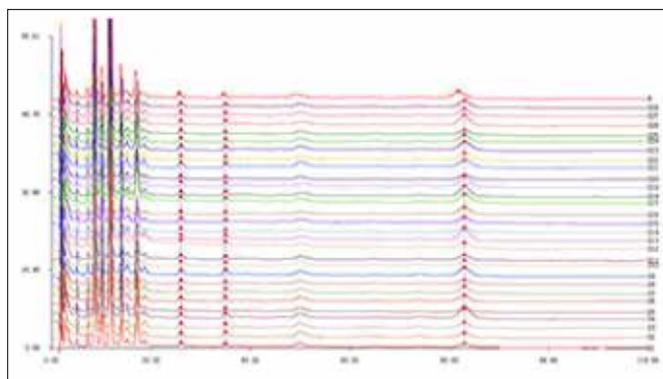
Integriion 高压离子
色谱系统



Dionex™ ICS-6000+HPIC
高压离子色谱系统



槐耳颗粒的单糖指纹图谱



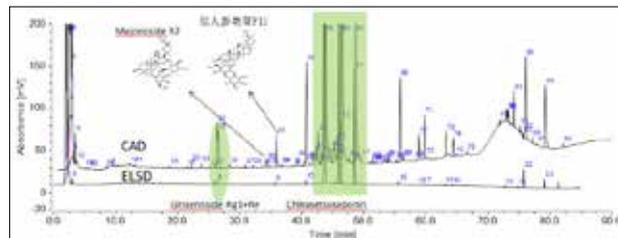
28批次的中药单糖指纹图谱的相似度比较

通用型检测器CAD，一测多评

紫外检测器是中药指纹图谱中最常用的检测手段，但是因其特异性，无法检测到所有中药成分，如皂苷类、糖类、甾体类、二萜类、有机酸类等呈现弱紫外吸收甚至无紫外吸收的情况，对中药质量的有效控制形成了挑战。

《中国药典》2020年版编制大纲（征求意见稿）指出“为加强有效性的质量控制，将积极采用现代科研成果，重点引入一测多评等新的分析方法和检测技术”。一测多评是以中药中某一成分为内参物，建立该成分与其他成分间的相对响应因子，通过相对响应因子计算其他成分含量。以解决多指标质量控制面临的对照品短缺和检测成本高昂等问题，实现了多成分同步测定。

CAD 是一种新型的、质量型通用检测器，不需要发色团，也不需要离子化，适用于非挥发性物质和许多半挥发性中药成分的检测，具有灵敏度高（低至ng 级），重现性好（重复进样响应值RSD一般低于2%），响应一致性（同浓度不同化合物响应值的RSD仅为10.7%）的优势，因CAD响应值仅与物质的质量相关，而与物质化学结构和分子大小无关，非常适合无中药对照品时“一测多评”的研究。



竹节参 CAD 与 ELSD 指纹图谱的对比

中药毒性成分、非法添加

中药中的有害物质除了农药和真菌毒素外，还可能涉及植物毒素，甚至是西药类非法添加等成分，Q Exactive™ 四极杆Orbitrap质谱仪集“高扫描速度，高分辨率，高质量精度和高灵敏度”于一体，具备实时极性切换且持久稳定的卓越性能，结合TraceFinder软件可为用户提供“一站式”全方位高通量筛查与高分辨定量分析的终极方案。

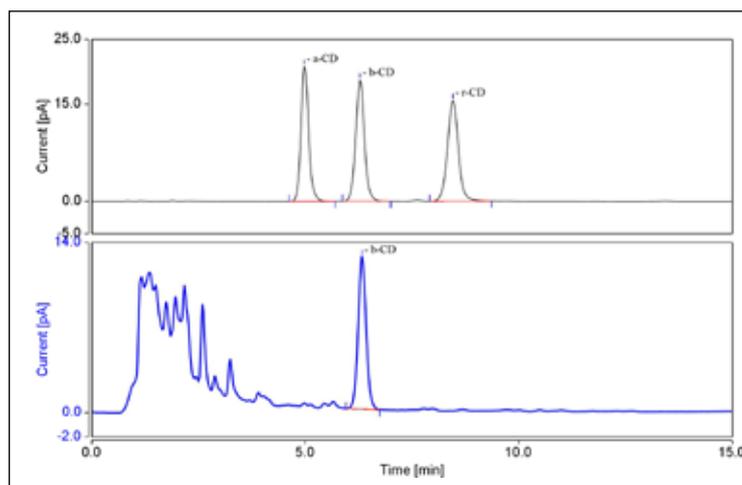


中药制剂辅料检测

药用辅料是药物制剂的基础材料和重要组成部分。它不仅赋予药物一定剂型，而且与提高药物的疗效、降低不良反应有很大的关系。药用辅料的质量，如中药注射剂中聚山梨醇 80 和脂质体中卵磷脂的质量对制剂的安全性和有效性有着重要的影响。

2015版中国药典中，一些用于中药炮制的辅料如白酒、黄酒、炼蜜、食盐和醋等被收录。此外，还有一些常见的，但以前关注程度较少的辅料，如吐温、SPAN和PEG，也将被收录。在收录的约 300 种辅料中，有相当大一部分辅料的紫外吸收较弱，它们的定性和定量需要使用通用型检测器，如糖类、吐温和 PEG 的检测。

赛默飞独有的电雾式检测器（Charged Aerosol Detector, CAD）具有与 UV-Vis 相当的灵敏度，比 ELSD 更宽的线性范围。此外，CAD 还具有较高的响应一致性，在半定量和定量分析中具有显著优势。



中药辅料环糊精测定

高分辨质谱技术在中药的成分表征、产地溯源的应用

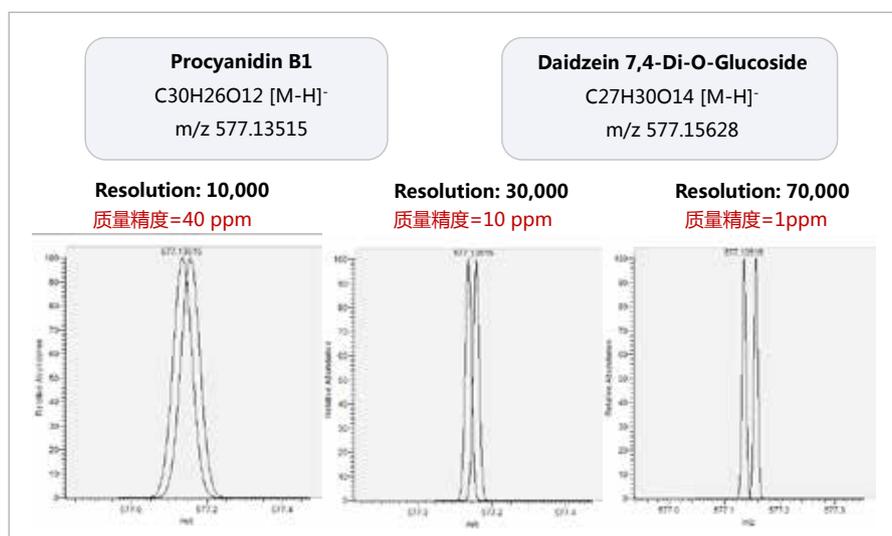
成分表征

中药复方制剂成分复杂，结构相似的化合物多，一些低含量成分难以检测，为分析工作带来诸多挑战。

Thermo Scientific™ Orbitrap 静电场轨道阱技术作为近 30 年来全新的一种质谱技术，其超高的分辨率、卓越的质量精度、优异的灵敏度、极佳的稳定性及与 QQQ 媲美的定量能力，使其可以全面地迎接中药成分复杂基质的挑战，成为中药成分鉴定强大的分析平台。



赛默飞基于离子阱与高分辨质谱技术的配方颗粒成分表征 workflow

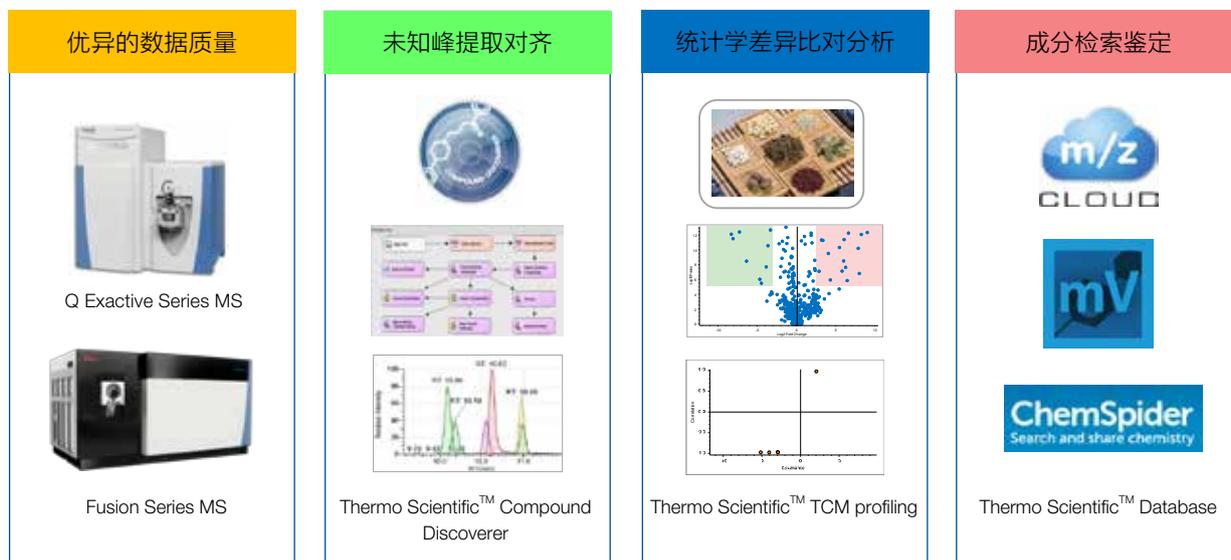


高分辨率有效分辨中药同质异素体

产地溯源

现行的中药质量控制模式针对主要成分进行量的控制，及通过指纹图谱中的共有峰进行相似度评价，该种方式是关注中药材之间的相似性，而无法对未知组分进行比对，进而分析不同产地药材间的差异。

赛默飞中药代谢组学技术结合了Orbitrap 高分辨质谱的优质数据和Compound Discoverer 先进的代谢组学数据处理系统，通过对中药组分的轮廓分析，利用多元统计学的手段，准确的找到不同组间的差异成分，进而利用高分辨多级质谱数据对差异成分进行鉴定。赛默飞中药代谢组学作为指纹图谱的良好互补，在道地药材质量评估、非药用部位非法添加等应用中发挥着重要作用。



赛默飞基于 Orbitrap 高分辨质谱的中药材产地溯源 workflow

中药企业/实验室数据合规管理

无论是在GMP检查及飞行检查，或是药品申报中，实验室数据合规对药企来说都是至关重要，甚至关系着企业的生存和发展。色谱数据处理系统（CDS）结合实验室信息管理系统（LIMS），为中药用户提供合规性、自动智能的可扩展性实验室信息化系统方案。

Chromeleon CDS 色谱数据系统

Chromeleon 色谱数据系统从安全合规的常规分析到十分灵活的研究流程，为整个实验室分析系统提供卓越用户体验，既能确保色谱分析的现有工作流程，又可快速获得良好的结果。

Chromeleon XTR 变色龙软件增强版实验室管理系统

超越了CDS-赛默飞世尔
Chromeleon XTR 实验室管理系统全面管理整个实验室，确保遵守流程，保持数据完整性，最终帮助用户实现完全的合规。



从物质基础到作用机理的高端研究方案

中药组成成分复杂、作用环节多样，中药药效物质基础以及临床疗效机理的阐明，已成为中医药现代化研究的重要内容。如何快速地从海量的色谱质谱数据中获取有价值的信息，减轻繁重的数据处理工作量，成为广大中医药科研工作者的心声。

Orbitrap平台助力中药深度研究

赛默飞的Orbitrap超高分辨质谱系列可以为中药物质基础研究提供最准确的化学式测定，最可靠的结构式解析（多级碎裂模式），媲美高端三重四极杆的定量性能，优良的稳定重现性为组学研究的首选，Orbitrap系列质谱将为中医药研究提供顶尖的平台。



LTQ Orbitrap 系列



Q Exactive 系列



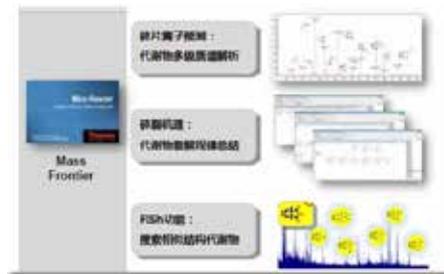
Orbitrap Fusion 系列

灵活多样的中药分析应用软件

赛默飞的Compound Discoverer软件针对中药成分鉴定、体内代谢转化和代谢组学的研究提供特别定制的数据处理工作流程，可在线或离线进行未知成分的搜库鉴定，并行查找多个母药代谢物，可视化的统计差异分析及pathway分析。

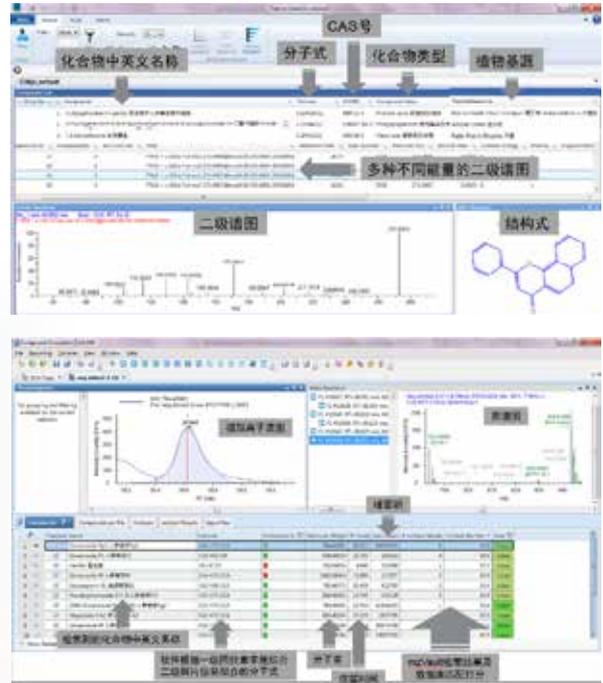


Mass Frontier是专业的结构解析软件。其含有小分子碎裂机理的Fragmentation Library™ 碎裂谱图库，从而可对中药同类化合物的质谱裂解规律进行研究。



LipidSearch™软件可对脂质代谢进行可视化轮廓分析和差异比较。结合赛默飞强大的蛋白组学研究策略，和“一站式”生物功能信息学阐释的“iOmics”平台，可实现中医药多组学的全方位深度研究。

TCM数据库是为了解决质谱结构推导问题，帮助研究人员快速准确鉴定中药成分，赛默飞以《中国药典》2015年版（一部）收录的中药材为参考，使用Thermo Scientific静电场轨道阱（Orbitrap）高分辨质谱平台采集，数据库包含1200余种中药化合物对照品的一级和碎片质谱图，7124张目前市面上最高质量的二级质谱图。可实现中药及天然产物成分的快速准确表征。



TCM 数据库

中药物质基础研究

数据采集

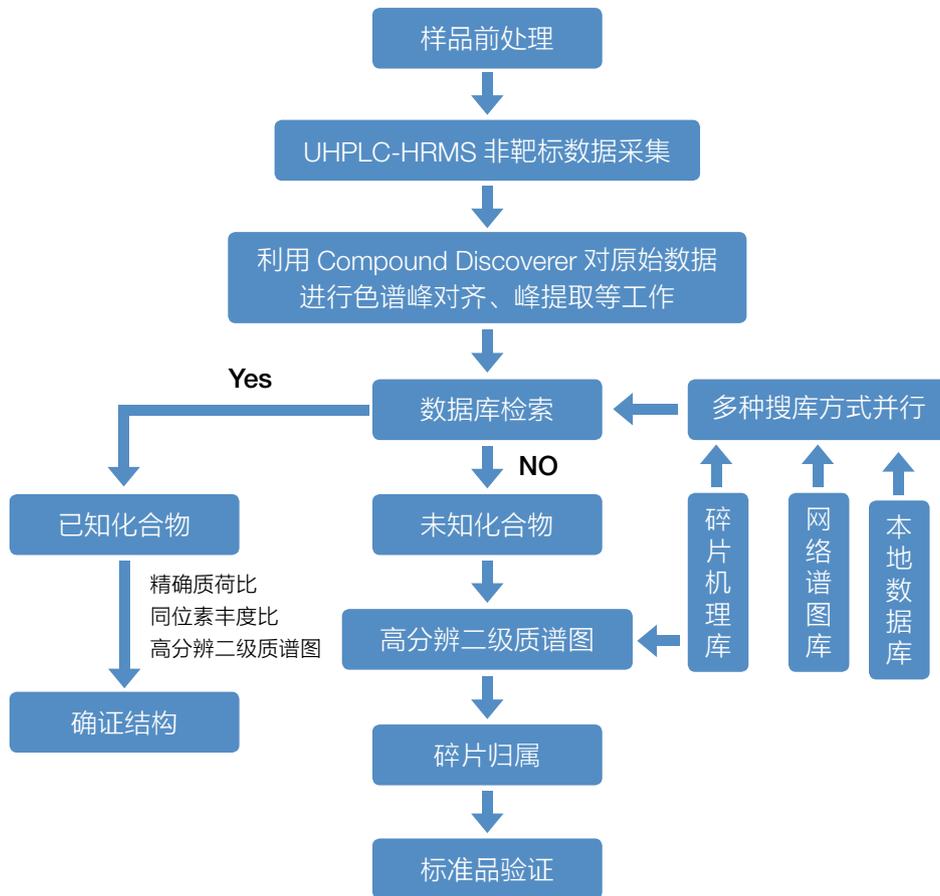


成分寻找

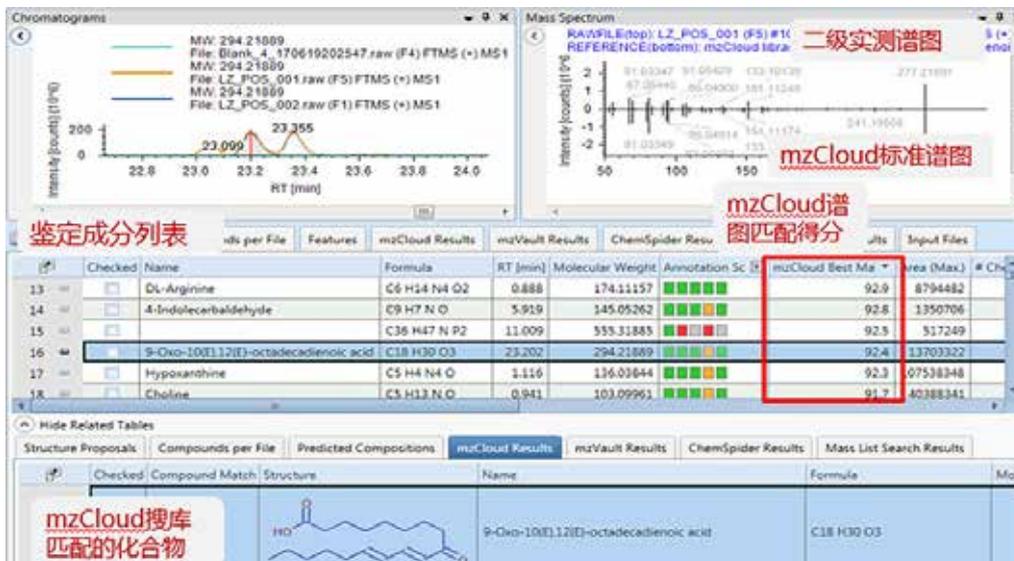


成分鉴定



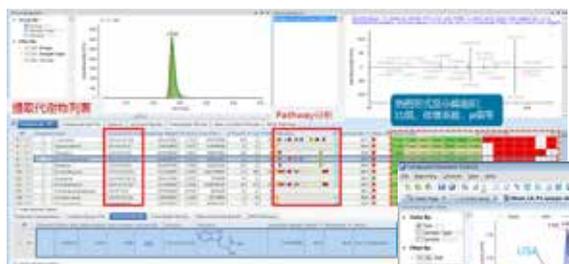
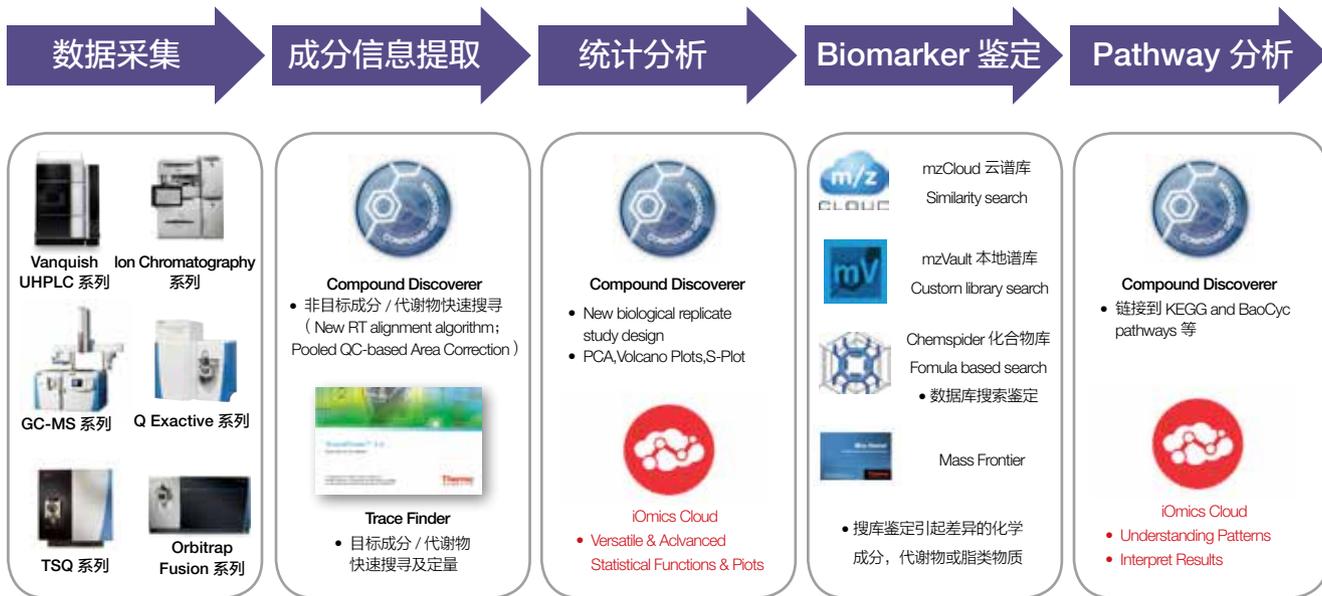


中药及天然产物成分鉴定流程

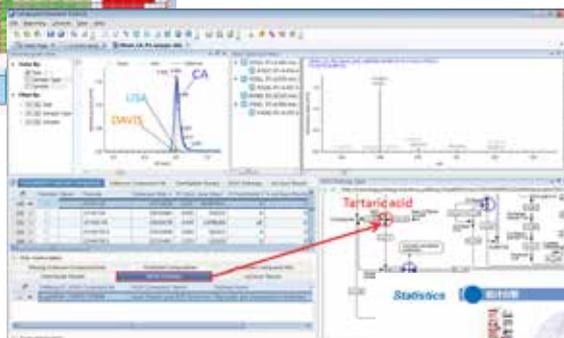


Compound Discoverer 通过 mzCloud 在线谱库检索确证未知成分和结构式

中药相关代谢组学研究



Compound Discoverer 鉴定内源性代谢物及相关代谢通路分析



Compound Discoverer 将差异成分链接到 KEGG 相关通路



iOmics Cloud 提供强大的统计分析、可视化工具和生物功能分析

赛默飞世尔科技

上海

上海市浦东新区新金桥路27号3,6,7号楼
邮编 201206
电话 021-68654588*2570

生命科学产品和服务业务

上海市长宁区仙霞路99号21-22楼
邮编 200051
电话 021-61453628 / 021-61453637

北京

北京市东城区北三环东路36号环球贸易
中心C座7层/8层
邮编 100013
电话 +86 10 8794 6888

广州

广州国际生物岛寰宇三路36、38号合景
星辉广场北塔204-206 单元
邮编 510000
电话 020-82401600

成都

成都市临江西路1号锦江国际大厦1406 室
邮编 610041
电话 028-65545388*5300

沈阳

沈阳市沈河区惠工街10号卓越大厦3109 室
邮编 110013
电话 024-31096388*3901

武汉

武汉市东湖高新技术开发区高新大道生物园路
生物医药园C8栋5楼
邮编 430075
电话 027-59744988*5401

南京

南京市中央路201号南京国际广场南楼1103室
邮编 210000
电话 021-68654588*2901

西安

西安市高新区科技路38号林凯国际大厦
1006-08单元
邮编 710075
电话 029-84500588*3801

昆明

云南省昆明市五华区三市街6号柏联广场写字
楼908单元
邮编 650021
电话 0871-63118338*7001

欲了解更多信息，请扫描二维码关注我们的微信公众账号

赛默飞世尔科技在全国有共21个办事处。本资料中的信息，说明和技术指标如有变更，恕不另行通知。



赛默飞
官方微信



赛默飞色谱
与质谱中国

热线 800 810 5118
电话 400 650 5118
www.thermofisher.com

ThermoFisher
SCIENTIFIC