

# 决明子不同炮制程度的终点量化指标\*

江玲玲<sup>1</sup>, 梁瑞滢<sup>2</sup>, 郭子瑜<sup>1</sup>, 李哲纯<sup>1</sup>,  
梁雪<sup>1</sup>, 王冰<sup>1</sup>, 王淑红<sup>1</sup>, 姚新生<sup>2</sup>, 苏畅<sup>1</sup>

1. 国家药品监督管理局中药质量研究与评价重点实验室 / 深圳市药品检验研究院, 广东 深圳 518057
2. 广东省中药药效物质基础与创新药物研究重点实验室 / 暨南大学中药及天然药物研究所, 广东 广州 510632

**摘要:** 探讨岭南地区常用中药决明子饮片不同炮制规格的化学成分转化规律, 建立决明子饮片科学评价标准。基于 UPLC-Q-TOF-MS<sup>2</sup> 结合特征分子网络 (FBMN) 分析生决明子、炒决明子、焦决明子的成分差异, 构建不同炮制规格饮片的 HPLC 指纹图谱。FBMN 鉴定 90 个成分, 3 类饮片分别检出 40、42、36 个成分 (共有 35 个)。炮制程度加深导致苷类成分 (如决明子苷 B<sub>2</sub>、红链霉素龙胆二糖苷等) 糖苷键断裂, 苷元含量增加且部分降解。通过 6 个转化相关特征峰的峰面积比值 (RPA) 建立判别标准: RPA ≤ 0.100 为生决明子; 0.200 ≤ RPA ≤ 0.500 为炒决明子; RPA > 0.500 为焦决明子。UPLC-Q-TOF-MS<sup>2</sup>/FBMN 阐明炮制动态转化规律, HPLC 指纹图谱的 RPA 指标为客观区分炮制规格及终点判定提供科学依据。

**关键词:** 决明子; 炮制; 化学成分; 超高效液相色谱串联四级杆飞行时间质谱; 特征分子网络  
**中图分类号:** R285 **文献标志码:** A **文章编号:** 2097-0137(2025)06-0024-07

## Quantitative endpoint indicators for different processing degrees of Cassiae Semen

JIANG Lingling<sup>1</sup>, LIANG Ruiying<sup>2</sup>, GUO Ziyu<sup>1</sup>, Li Zhechun<sup>1</sup>,  
LIANG Xue<sup>1</sup>, WANG Bing<sup>1</sup>, WANG Shuhong<sup>1</sup>, YAO Xinsheng<sup>2</sup>, SU Chang<sup>1</sup>

1. NMPA Key Laboratory for Quality Research and Evaluation of Traditional Chinese Medicine / Shenzhen Institute for Drug Control, Shenzhen 518057, China
2. Institute of Traditional Chinese Medicine and Natural Products, Guangdong Province Key Laboratory of Pharmacodynamic Constituents of TCM and New Drugs Research / Jinan University, Guangzhou 510632, China

**Abstract:** The study aims to investigate the chemical composition transformation patterns of differently processed Cassiae Semen decoction pieces and to establish a scientific evaluation standard for this Lingnan-region herbal medicine. Based on UPLC-Q-TOF-MS<sup>2</sup> combined with Feature-Based Molecular Networking (FBMN), the composition differences of raw Cassiae Semen, stir-fried

\* 收稿日期: 2025-06-13

录用日期: 2025-07-07

网络首发日期: 2025-09-24

**基金项目:** 国家重点研发计划项目(2023YFC3504101); 国家药品监督管理局中国药品监管科学行动计划重点项目(NMPAJGKX-2023-017); 国家药品监督管理局中药质量研究与评价重点实验室监管科学课题(NMPAKLZ202202)

**作者简介:** 江玲玲(1988年生), 女; 研究方向: 中药质量控制与评价;  
E-mail: 366108576@qq.com

**通信作者:** 苏畅(1983年生), 男; 研究方向: 中药质量控制方法及质量标准;  
E-mail: suchang@szidc.org.cn

增强出版



ZR20250107

全文阅读



ZR20250107

Cassiae Semen and carbonized Cassiae Semen were analyzed, and the HPLC fingerprints of different processing specifications of decoction pieces were constructed. FBMN identified 90 compounds, with 40, 42 and 36 compounds (35 shared compounds) were detected in the three types of decoction pieces respectively. The deepening of processing resulted in the breakage of glycosidic bonds of glycosides (e.g. cassiaside B<sub>2</sub>, rubrofusarin gentiobioside, etc.) and the increase of aglycone content and partial degradation. The discrimination standard was established by the ratio of peak area (RPA) of six transformation-related characteristic peaks;  $RPA \leq 0.100$  for raw Cassiae Semen;  $0.200 \leq RPA \leq 0.500$  for stir-fried Cassiae Semen;  $RPA > 0.500$  for carbonized Cassiae Semen. UPLC-Q-TOF-MS<sup>2</sup>/FBMN could be used to elucidatedynamic transformations patterns of processing, and the RPA index of HPLC fingerprint could provide a scientific basis for objective differentiation of processing specifications and determination of endpoint.

**Key words:** Cassiae Semen; processing; chemical compositions; UPLC-Q-TOF-MS; feature-based molecular networking

岭南地区具有湿润土壤和高温气候特征,易形成湿热蕴结的病理环境,临床常见目赤肿痛、头痛眩晕等综合征(郭强,2012;郭柳霞等,2024;刘亚群等,2025;沈创鹏等,2025)。历代本草典籍如《千金翼方》《岭南卫生方》中均明确记载决明子在岭南地区治疗“瘴毒目赤”的临床应用史[孙思邈(唐),1983;李璆(宋)等,1983],其清肝明目、通腑泄热的独特功效使其成为历代医家治疗眼疾的首选要药。现代医学研究与实践证实,决明子的临床应用范围已从传统眼疾治疗扩展至高血压、糖尿病等代谢性疾病的综合防治(郭强,2012;郭柳霞等,2024;刘亚群等,2025;沈创鹏等,2025),现已成为岭南和潮汕地区的成熟且独具特色的药材代表。

中医药“生熟异治”理论强调生品与炮制品在性味归经及临床功效上的差异性,这种基于炮制工艺的辨证施治原则是中医药临床特色的重要体现。《中华人民共和国药典》2025年版规定决明子为豆科植物钝叶决明(*Cassia obtusifolia* L.)或决明(*Cassia tora* L.)的干燥成熟种子(国家药典委员会,2025),收录了决明子饮片与炒决明子饮片两种炮制规格,《上海市中药饮片炮制规范》2018年版同时收录了焦决明子饮片的炮制规格。然而现有质量标准仍存在显著缺陷,不仅采用的质控指标(大黄酚和橙黄决明素)无法有效区分不同的炮制规格饮片,炮制终点判定也完全依赖传统经验的主观判断(饮片色泽、形态特征及气味变化),导致炒制饮片的质量均一性难以保证。本研究采用UPLC-Q-TOF-MS<sup>2</sup>分析不同炮制程度的决明子饮片的成分差异与成分转化规律(范倩等,2021;张琪等,

2021),构建不同炮制规格饮片的HPLC指纹图谱,选取6个萘并吡喃酮(昔)类特征成分计算峰面积比值(RPA, ratio of peak area),据此拟定决明子饮片、炒决明子饮片及焦决明子饮片的判定标准,旨在为决明子炮制工艺终点的科学判定及其质量标准提升提供科学依据。

## 1 仪器与材料

### 1.1 仪器

X500R型超高效液相色谱串联四级杆飞行时间高分辨质谱联用仪(美国AB SCIEX公司);岛津LC-20A高效液相色谱仪(日本SHIMADZU公司);CPA225D型电子天平(万分之一天平,德国Sartorius公司);CPX2800H-C型超声波清洗仪(美国BRANSON公司);SYNERGY型纯水机(美国Millipore公司)。

### 1.2 材料

乙腈、甲酸均为质谱纯(德国Merck公司);水为超纯水。决明子昔B2(批号9672)、决明子昔C(批号9673)购于上海诗丹德生物技术有限公司;决明子昔(批号J26GB156024)、红链霉素龙胆二糖昔(批号P06S11F123825)、红链霉素(批号S15GT159462)购于上海源叶生物科技有限公司;决明子内酯(批号21092703)购于成都格利普生物科技有限公司;橙黄决明素(批号111900-202006)、大黄素甲醚(批号110758-202017)、大黄素(批号110756-201913、大黄酚(批号110796-201922)购于中国食品药品检定研究院。

### 1.3 药材

本试验收集了来自全国 31 个省、自治区、直辖市的市市场抽样以及各地口岸所样品,并按时间、温度收集规模化生产工艺中各阶段的炮制品。共收集市售不同企业生产的 114 批决明子饮片和 63 批炒决明子饮片,以及 63 批 TRT 企业规模化车间取样的不同炮制程度样品(其中 60 批是由师傅平行炮制的 6 锅决明子,每间隔 4 °C 取样 1 次,炮制终点以师傅经验判断,最终每锅取样 10 份,共 60 份;并继续炮制获得 3 批不同程度的焦决明子饮片样品)([增强出版:附表 1](#))。上述样品均经过深圳市药品检验研究院王淑红主任中药师鉴定,为豆科植物决明 *Cassia obtusifolia* L. 的干燥成熟种子及其炒制品。

## 2 方法与结果

### 2.1 UPLC-Q-TOF-MS/MS 色谱及质谱条件

**色谱条件。**色谱柱: Waters Acquity UPLC CSH C18(2.1 mm×100 mm, 1.7 μm); 柱温为 35 °C; 流速为 0.4 mL/min; 进样量: 2 μL; 流动相: A 为乙腈, B 为水(含 φ=0.1% 甲酸); 梯度洗脱程序: 0~10 min, 16%→25% A; 10~16 min, 25%→50% A; 16~20 min, 50%→75% A; 20~23 min, 75%→95% A; 23~28 min, 95%; 28~30 min, 96%→16% A; 30~35 min, 16% A。

**质谱条件。**电喷雾离子化源(ESI), 正负离子源电压分别为 5 500 V/-5 500 V, 离子源温度为 550 °C, 裂解电压(DP)分别为 80 V/-80 V, 碰撞能量(CE)分别为 10 eV/-10 eV。雾化气体为氮气, 辅助气 Gas1 为 55 psi(1 psi=6 894.76 Pa), 辅助气 Gas2 为 60 psi, 气帘气 Curtain Gas 为 40 psi。一级质谱母离子扫描范围为 100~1 000, IDA 模式下设置响应值超过 100 s<sup>-1</sup> 的 10 个最高峰进行二级质谱扫描, 子离子扫描范围为 50~1 000, 开启动态背景扣除。

### 2.2 特征分子网络数据处理

在 GNPS 平台上, 利用基于特征的分子网络(FBMN)工作流程创建了分子网络(Nothias et al, 2020)。质谱数据经 MS-DIAL 预处理后导入 GNPS。通过设定前体离子与碎片离子质量容差、窗口过滤、余弦相似度阈值(>0.7)及最小匹配峰数(>6)等参数构建分子网络。网络中的光谱与 GNPS 光谱库进行比对匹配(Wang et al, 2016)。最终网络通过 Cytoscape 进行可视化(Shannon et al, 2003)。

### 2.3 HPLC 色谱条件

色谱条件 色谱柱: Agilent 5 TC-C18(250 mm ×

4.6 mm, 5 μm); 以甲醇-乙腈(2:1, 体积比)为流动相 A, 以 w=0.1% 磷酸-水溶液为流动相 B, 梯度洗脱程序: 0~20 min, 27%→30% A; 20~42 min, 30%→33% A; 42~52 min, 33% A; 52~60 min, 33%→57% A; 60~65 min, 57% A; 65~85 min, 57%→72% A; 检测波长为 280 nm; 柱温为 30 °C; 流速为 1.0 mL/min; 进样量为 10 μL。

### 2.4 对照品溶液的制备

取决明子苷 B2、决明子苷、红链霉素龙胆二糖苷、决明子苷 C、红链霉素、决明子内酯对照品适量, 精密称定, 加甲醇制成每 1 mL 含决明子苷 B2 50 μg、决明子苷 100 μg、红链霉素龙胆二糖苷 80 μg、决明子苷 C 100 μg、红链霉素 50 μg、决明子内酯 30 μg 的混合溶液, 即得。

### 2.5 供试品溶液的制备

取不同炮制规格决明子干燥粉末(过 3 号筛)约 0.5 g, 精密称定, 置于 150 mL 具塞锥形瓶中, 加入甲醇 50 mL, 密塞, 称定质量, 超声处理 30 min, 放冷后再次称定质量, 用甲醇补足减失质量, 摇匀, 用 0.22 μm 有机滤膜过滤, 取续滤液, 即得。

## 3 结果与讨论

### 3.1 基于 UPLC-Q-TOF-MS 结合特征分子网络技术分析不同炮制规格决明子的化学成分差异及变化规律

通过检索 SciFinder Scholar、Web of science、Google Scholar 以及 CNKI 等大数据平台, 收集整理决明子化学成分的名称、CAS 号、分子式、相对分子质量、结构式等信息, 建立化学成分数据库。各炮制规格决明子样品(决明子、炒决明子、焦决明子)经 UPLC-Q-TOF-MS 分析, 获得液质图谱(图 1)。成功构建 3 种炮制决明子饮片的特征分子网络, 包括 881 个节点(≥5)以及 2 270 条边([增强出版: 附图 1](#)), 通过 GNPS 平台构建分子网络, 并通过和数据库匹配共有 90 个节点被注释, 最终在决明子中共鉴定 40 个成分, 蒽醌类 30 个; 炒决明子中鉴定 42 个化合物([增强出版: 附表 2](#)), 包括蒽醌类 32 个; 焦决明子中鉴定 36 个成分, 其中共有成分 35 个。比较决明子和炒决明子样品中的成分, 发现大极性成分的响应有所降低[如 4 号峰(决明子苷 B2), 12 号峰(红链霉素龙胆二糖苷), 15 号峰(决明子苷 C)和 18 号峰(决明子苷)], 而小极性成分响应增大[如 38 号峰(红链霉素), 40 号峰(决明子内酯)], 33、41 号峰

(大黄素甲醚、1,2-二甲氧基-8-羟基-3-甲基-9,10-蒽醌)在炒制后出现。比较炒决明子和焦决明子样品中的成分,发现大极性成分的响应明显降低,3、8、11、13、20、28、41号峰(决明酮四葡萄糖苷、决明苷C2、决明酮龙胆二糖苷、异红链霉素龙胆二糖苷、大

豆苷、决明酮、1,2-二甲氧基-8-羟基-3-甲基-9,10-蒽醌)在炒焦后消失,部分小极性成分响应增大。由此推测,随着炮制程度的加深,苷类成分的糖苷键断裂转化为相应的苷元类,同时部分不稳定的苷元类成分降解。

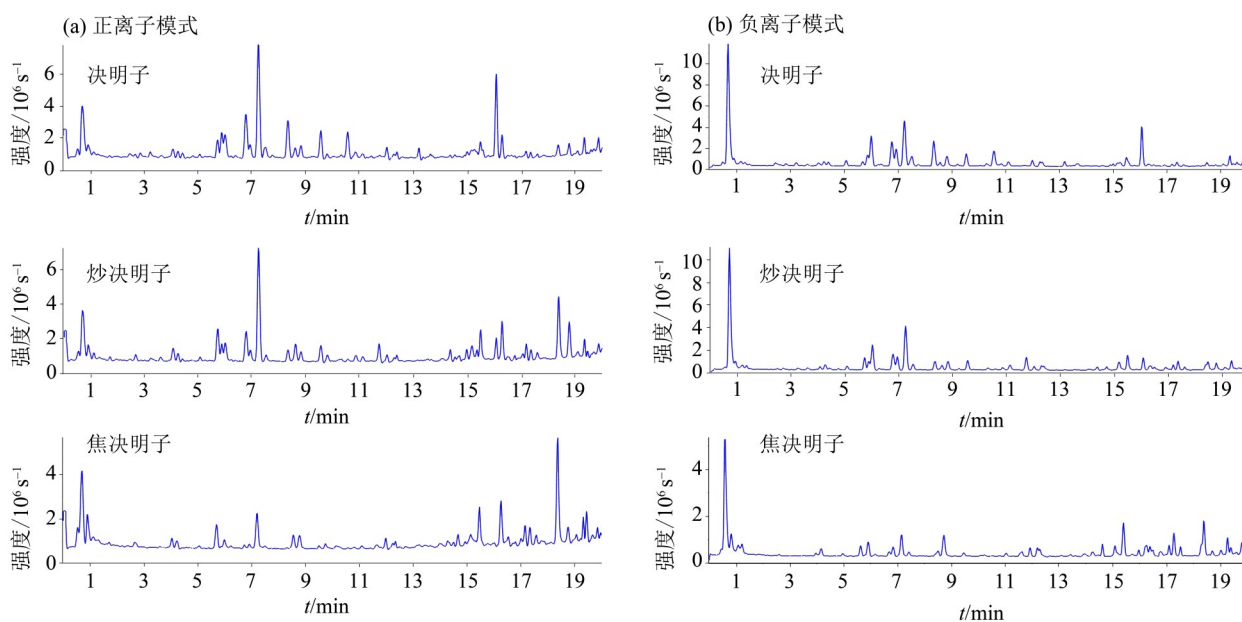


图1 正、负离子模式的TIC图

Fig. 1 TIC chromatogram in positive mode and in negative mode

### 3.2 不同炮制规格饮片HPLC特征图谱中9个特征峰的变化规律

采集63批企业炮制大生产样品的HPLC特征指纹图谱,并基于液质结果提示的不同炮制规格决明子饮片化学成分差异,从主峰中选出了9个差异性成分作为特征峰,用以探究决明子在炮制过程中化学成分的变化规律,如图2~3可见保留时间61 min前的稍大极性成分峰面积逐渐减小,而61 min后的小极性成分峰面积逐渐增大,到达炒焦的阶段后,多数大极性化合物的峰面积明显减小甚至消失。其中1<sup>#</sup>~5<sup>#</sup>和7<sup>#</sup>号峰随着炮制程度的增强,其峰面积明显减小甚至消失;6<sup>#</sup>和8<sup>#</sup>~9<sup>#</sup>号峰的峰面积明显增大,这些色谱峰均为萘骈吡喃酮类成分,且它们之间存在着转化关系。

### 3.3 HPLC特征指纹图谱的限度

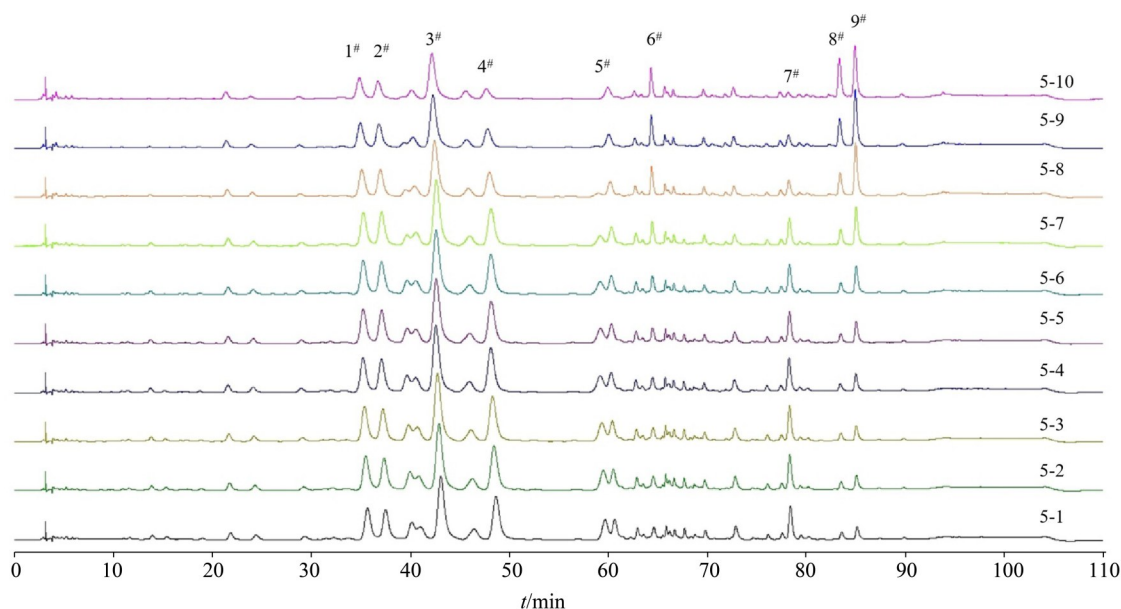
决明子、炒决明子共有特征峰之间存在着转化关系,它们的峰面积之比可用于体现不同炮制规格饮片特征图谱的差异性。现拟定苷元与苷类成分的RPA计算公式为

$$RPA = \frac{A_{\text{决明子内酯}} + A_{\text{红链霉素}}}{A_{\text{决明子苷C}} + A_{\text{决明子苷B}} + A_{\text{决明子苷}} + A_{\text{红链霉素龙胆二糖苷}}}$$

式中 $A$ 为色谱峰的峰面积。

**3.3.1 RPA值分析** 采集所有样品的色谱图,按照上述公式计算其RPA值,结果见增强出版:附表3。以RPA作为指标分析6锅炮制大生产样品的变化趋势。由图4a可见,随着炮制时间的延长,比值呈上升趋势。当炮制到第6份样品之后,RPA值出现明显变化,推测是决明子到炒决明子的一个转折点。随后RPA值不断上升,直到达到炮制终点(第10份取样)。继续炮制,在炒制程度最强的2批焦决明子特征图谱中,苷类成分几乎全部转化为苷元,RPA值接近无限大。随后分别作直方图(见图4)观察各规格市售样品的RPA值分布情况。

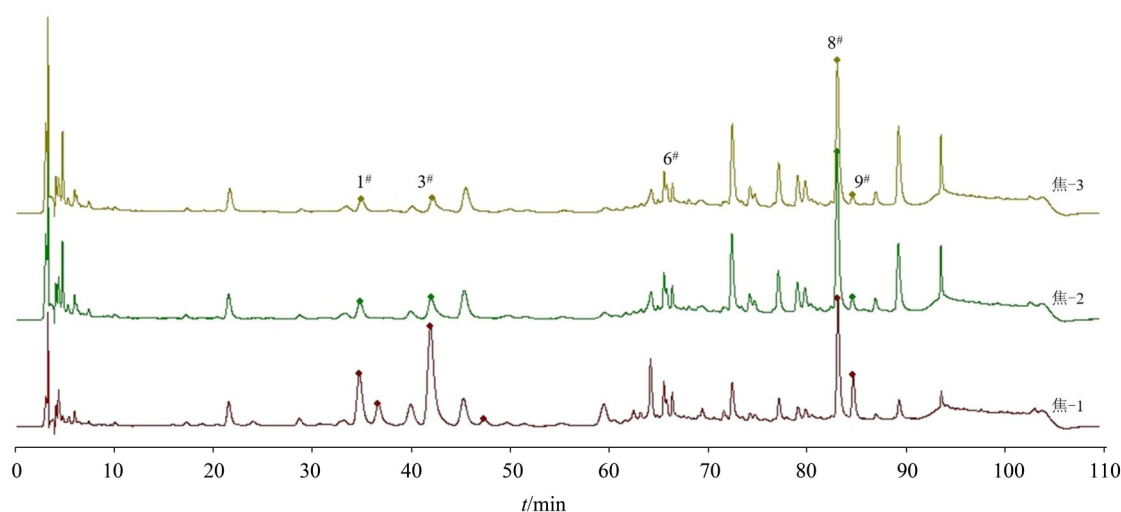
**3.3.2 决明子饮片HPLC特征图谱的RPA值限度** 为拟定决明子饮片RPA标准限度,比较炮制大生产样品和市售决明子饮片RPA值情况(见图5),提示大部分市售决明子饮片的RPA值都集中在第1~6份大生产取样的标准。综合考虑大生产6锅炮制样品的比值突变趋势、市售样品统计学数据所反映的数据离散程度,以及决明子饮片需经过炮制等其他影响因素,以箱体上边界作为上限的参考。拟定以0.100作为决明子饮片HPLC特征图谱项目拟



1<sup>#</sup>: 决明子苷 B2; 2<sup>#</sup>: 决明子苷; 3<sup>#</sup>: 红链霉素龙胆二糖苷; 4<sup>#</sup>: 决明子苷 C; 5<sup>#</sup>, 6<sup>#</sup>: 决明子未知特征峰 1 和 2; 7<sup>#</sup>: 炒决明子未知特征峰 1; 8<sup>#</sup>: 红链霉素; 9<sup>#</sup>: 决明子内酯。5-1 ~ 5-10: TRT 企业规模化车间师傅平行炮制同一批决明子 6 锅炒决明子, 其中“5”代表炮制第 5 锅, “1~10”表示不同时间点取样的样品。

图 2 第 5 锅不同炮制程度决明子样品 HPLC 色谱图

Fig. 2 HPLC Chromatograms of Cassiae Semen samples with different processing degrees



1<sup>#</sup>: 决明子苷 B2; 3<sup>#</sup>: 红链霉素龙胆二糖苷; 6<sup>#</sup>: 决明子未知特征峰 2; 8<sup>#</sup>: 红链霉素; 9<sup>#</sup>: 决明子内酯。焦-1 ~ 焦-3: TRT 企业规模化车间师傅炮制焦决明子, 其中“1~3”表示不同时间点取样的样品。

图 3 焦决明子样品 HPLC 色谱图

Fig. 3 HPLC Chromatograms of charred Cassiae Semen samples with different processing degrees

定上限, 即规定决明子饮片 HPLC 特征图谱中所选定苷元与苷的 RPA 值不得超过 0.100。在该规定值下 114 批市售决明子样品的合格率为 90.4%。共有 11 批样品 (A72、A74、A76、A80、A81、A84、A86、A91、A96、A98、A100) 超过决明子饮片 RPA 规定值, 被判定为不合格。

**3.3.3 炒决明子饮片 HPLC 特征图谱的 RPA 值限度** 为防止炒决明子炮制不到位或炮制过度的情况, 剔除表现为决明子饮片的 12 批样品 (RPA ≤ 0.100; B32、B35、B36、B43、B45、B49、B50、B51、B55、B56、B57、B63), 以及极端离群样品共 6 批 (B34、B39、B48、B52、B53、B60)。将上述 18 批不合

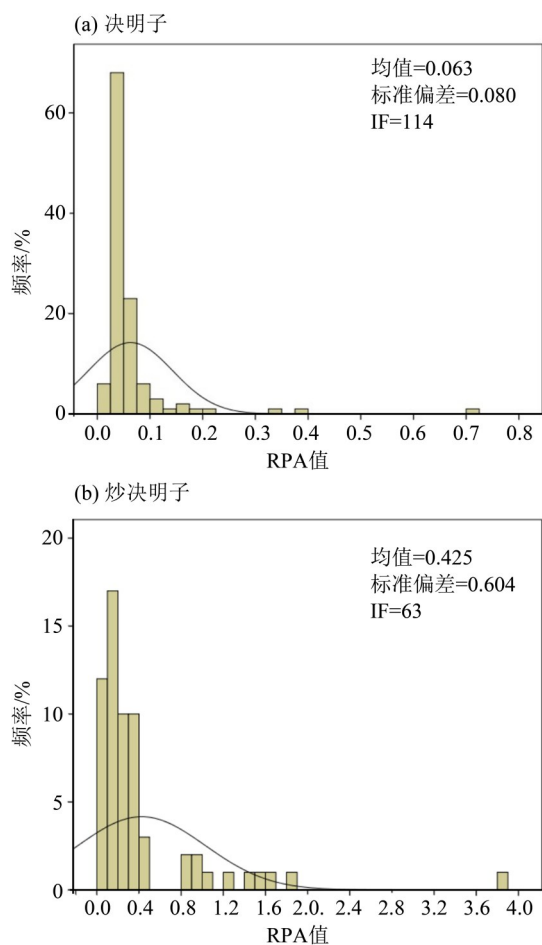


图4 114批市售决明子(a)与63批炒决明子(b)的RPA值分布直方图

Fig. 4 The distribution histogram of Relative Peak Area (RPA) for 114 batches of commercially available Cassiae Semen (a) and 63 batches of fried Cassiae Semen (b)

格样品的数据剔除后,对剩余45批炒决明子的数据重新进行箱式图分析(图6)。图6a提示大部分市售炒决明子饮片的RPA值都集中在第7~11份大生产取样的标准。结合大生产炮制炒决明子饮片和焦决明子饮片比值突变趋势情况,并综合考虑不同炮制设备、工艺的差异,以市售样品的箱体中位数作为下限,以上边界和企业炮制终点作为上限的参考,拟定 $0.200 \leq RPA \leq 0.500$ 的可判断为炒决明子饮片。在该规定下63批市售炒决明子样品的合格率为36.5%,22批样品(B1、B2、B3、B13、B14、B24、B27、B28、B31、B33、B37、B38、B40、B41、B44、B46、B47、B54、B58、B59、B61、B62)超过该规定值被判定为不合格。

## 4 结论

现代研究表明,决明子主要含蒽醌类、萘并吡喃

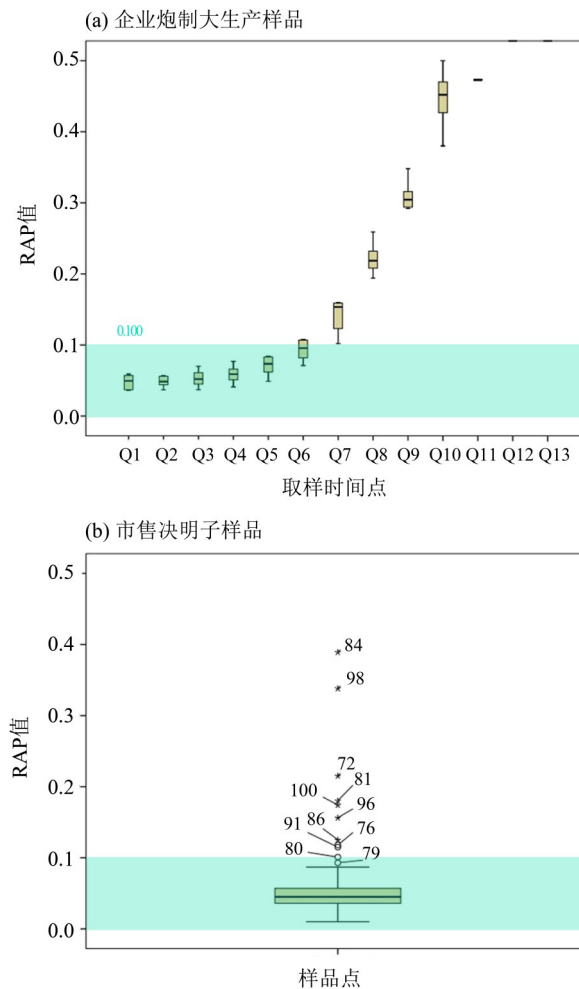


图5 63批企业炮制大生产样品(a)与114批市售决明子(b)的RPA值分布箱式图对比

Fig. 5 The box plot comparison of the distribution of Relative Peak Area (RPA) ratios between 63 batches of industrially processed large-scale production samples (a) and 114 batches of commercially available Cassiae Semen (b)

酮类、黄酮类、萜类、脂肪酸等成分,本研究采用UPLC-Q-TOF-MS结合特征分子网络分析了不同炮制规格决明子化学成分差异及变化规律,在此基础上,构建了240批不同炮制程度决明子样品(包括114批不同产地决明子、63批炒决明子和63批企业大生产车间的取样)的HPLC特征指纹图谱。选取特征图谱中6个存在转化关系的成分:4个萘并吡喃酮苷(决明子苷B2、决明子苷、红链霉素龙胆二糖苷、决明子苷C)和2个萘并吡喃酮(红链霉素、决明子内酯)为特征峰,计算其RPA值,拟定 $RPA \leq 0.100$ 为决明子饮片; $0.200 \leq RPA \leq 0.500$ 为炒决明子饮片; $RPA > 0.500$ 为焦决明子饮片。以上研究为决明子炮制终点的确定及其质量标准的提升提供理论依据和数据支撑,可消除全国范围内不同生产企业、不同

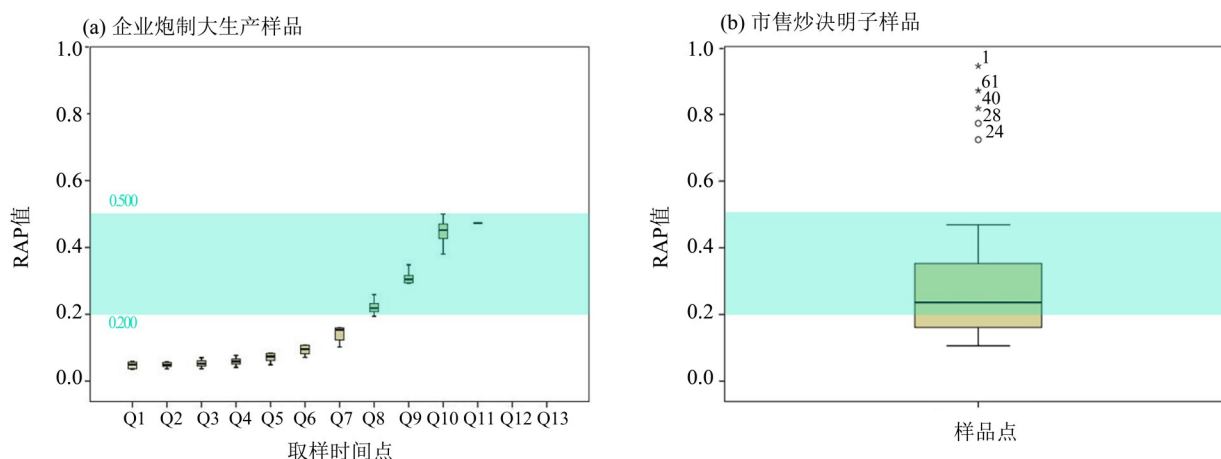


图6 63批企业炮制大生产样品(a)与45批市售炒决明子样品(b)的RPA值分布箱式图对比

Fig. 6 The box plot comparison of the distribution of Relative Peak Area (RPA) ratios between 63 batches of industrially processed large-scale production samples (a) and 45 batches of commercially available fried Cassiae Semen (Exclude outlier data) (b)

炮制器具、不同炮制师傅带来的炒决明子饮片质量差异情况,也为其他炒制药材的终点判定提供了研究参考。后期实验室将针对决明子及其炮制品气

味及颜色差异性成分,采用HS-GC-MS及UV-Vis技术进行深入研究,为进一步阐明岭南中药决明子炮制的科学内涵提供数据支撑和研究基础。

#### 参考文献:

- 范倩,陈雪冰,汪玉梅,等,2021.基于UPLC-Q-TOF-MS/MS及GNPS技术的炮附片二萜类生物碱成分[J].中山大学学报(自然科学版),60(3):30-44.
- 郭柳霞,廖祥洲,程万春,2024.养血清脑中药颗粒治疗偏头痛临床观察[J].中国中医药现代远程教育,22(23):93-95.
- 郭强,2012.1949年以前岭南中医喉科眼科文献整理研究[D].广州:广州中医药大学.
- 国家药典委员会,2025.中华人民共和国药典:一部[M].北京:中国医药科技出版社:155.
- 李璆(宋),张致远(宋),辑,1983.岭南卫生方:三卷[M].影印本.北京:中医古籍出版社.
- 刘亚群,梁宏轩,张振霞,等,2025.潮药:潮汕地区与潮籍华侨中药文化的研究[J].文化创新比较研究,9(3):78-83.
- 沈创鹏,刘树林,刘敏,2025.缓解糖胖病的中西医结合诊疗专家共识[J].中国中医药信息杂志,32(1):2-11.

- 孙思邈(唐),1955.千金翼方[M].影印本.北京:人民卫生出版社.
- 张琪,胡安琪,范倩,等,2021.基于UPLC-Q-TOF-MS的柑普茶外果皮、鲜陈皮和鲜砂糖橘皮的全成分对比分析[J].中山大学学报(自然科学版),60(6):128-141.
- NOTHIAS L F, PETRAS D, SCHMID R, et al, 2020. Feature-based molecular networking in the GNPS analysis environment[J]. Nat Methods, 17(9): 905-908.
- SHANNON P, MARKIEL A, OZIER O, et al, 2003. Cytoscape: A software environment for integrated models of biomolecular interaction networks[J]. Genome Res, 13(11): 2498-2504.
- WANG M, CARVER J J, PHELAN V V, et al, 2016. Sharing and community curation of mass spectrometry data with Global Natural Products Social Molecular Networking[J]. Nat Biotechnol, 34(8): 828-837.

(责任编辑 张冰)