

朱建设

上次说过 **OpenChrom** 是一款用于色谱，质谱，光谱等数据处理开源软件。可以处理不同仪器厂家的数据格式，支持通用格式。可以用于不同的电脑操作系统，例如 windows，macOS，Linux。介绍了初步使用的流程和方法。<https://bbs.instrument.com.cn/topic/8254675>

1. 设置 NIST 数据库

路径:

Chromatography/Spectrometry---Identifier>Identifier (MSD)>NIST(extern)-Installation>
NIST MSD Import Converter, 在 NIST 文件夹中找到 nist.db, 打开(O), apply。



2. 调用 Scan Comparison

在工具栏点击 Scan，选择 Show Scan Comparison。

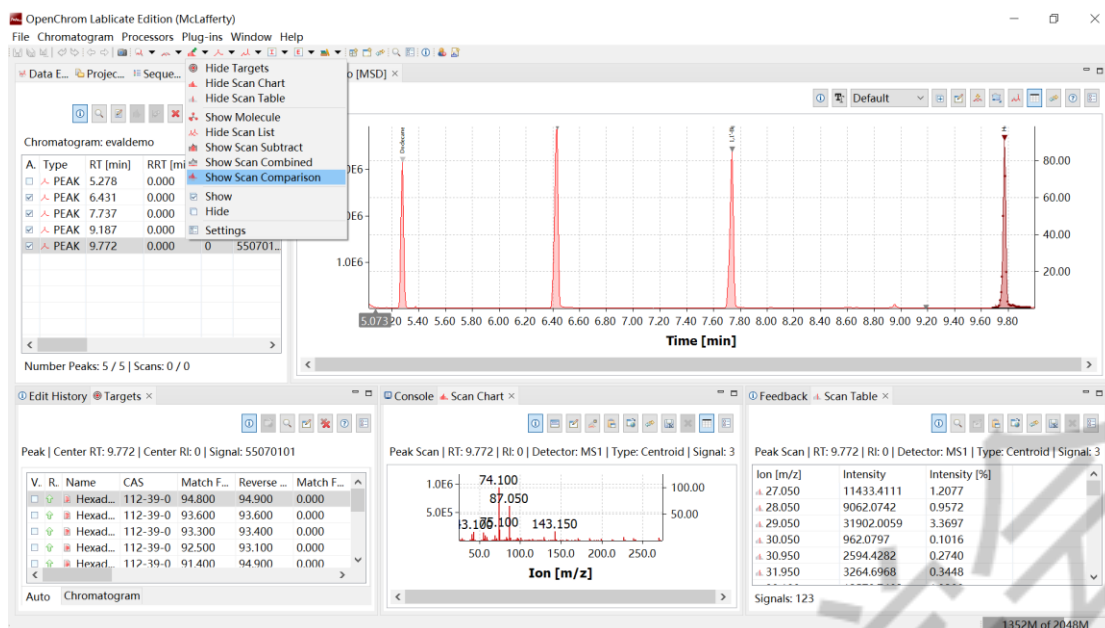


图 2 调用 Scan Comparison

或者在工具栏点击 Peaks，选择 Show Peak Scan Comparison。

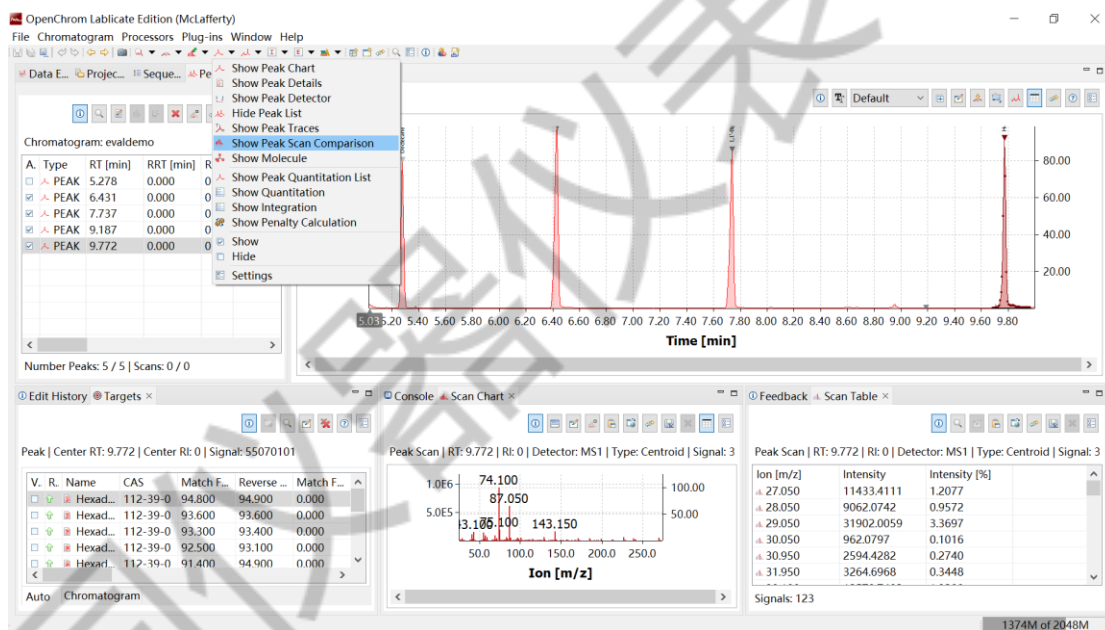


图 3 调用 Scan Comparison

这样 Comparison Scan 就在右上角显示，数据文件未知色谱峰的质谱图和库里的质谱图对比就出来了。

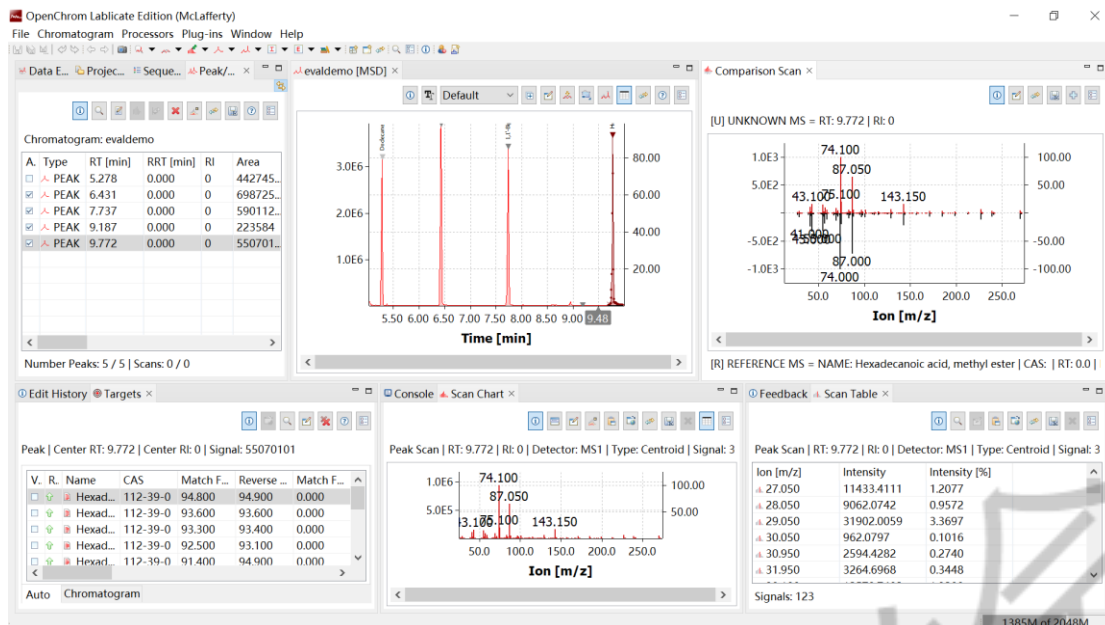


图 4 质谱对比

3. 校验检索结果

点击左上面的 peak list 的第一个 peak 峰，则在右上方的质谱图对比出现，可以观察是否匹配良好。同时在左下角可以看到检索的结果，包括化合物名称 Dodecane, CAS 号码 112-40-3, 正向匹配度 (94.8) 及反向匹配度 (94.9) 等信息。

假如通过对比质谱图，认为 dodecane 不合适，可以右键点击，选 targets>Verity targets uncheck, 则这个选项被移去。同样方法移去另外两个 dodecane, 后面的 undecane 在第一位，同时在 peaks list 的 best target 也改变为 undecane。

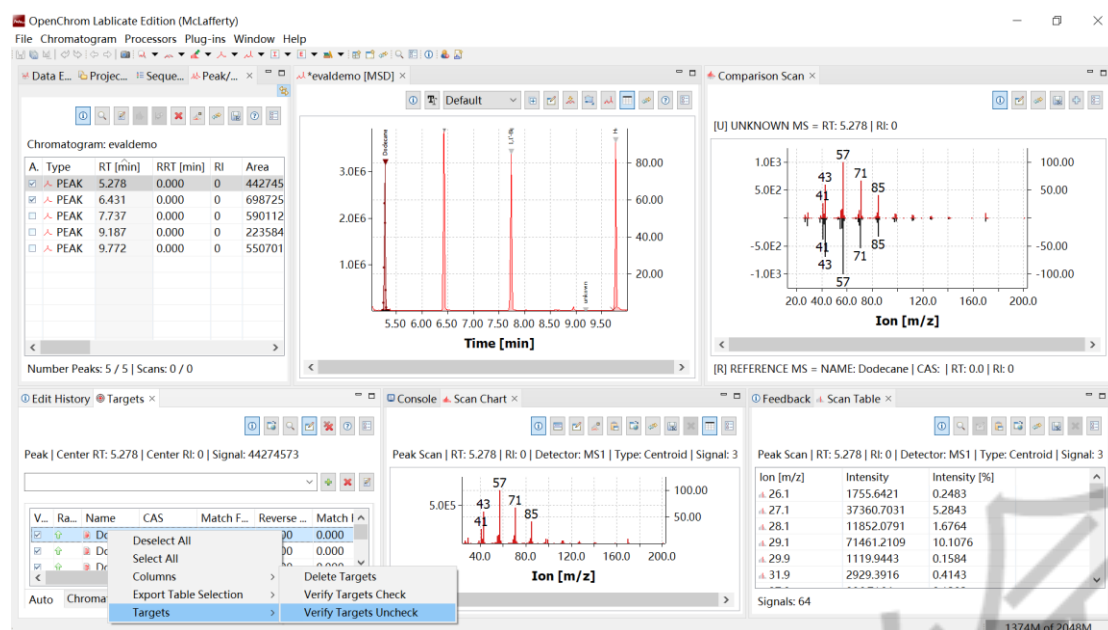


图 5 校验质谱检索结果

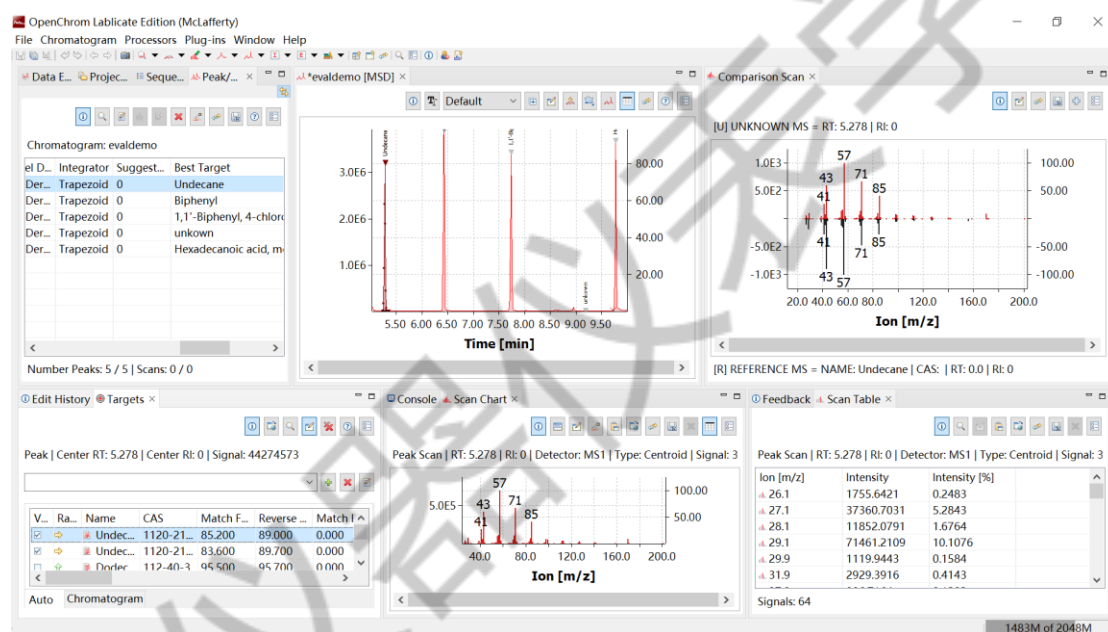


图 6 校验质谱检索结果

4. 未检索到的峰标记

第四个小峰 9.187，没有鉴定出来。可以从中下部 scan chart 看到有离子 m/z 43, 44, 57, 71, 84 等离子，可能是个烷烃类化合物。

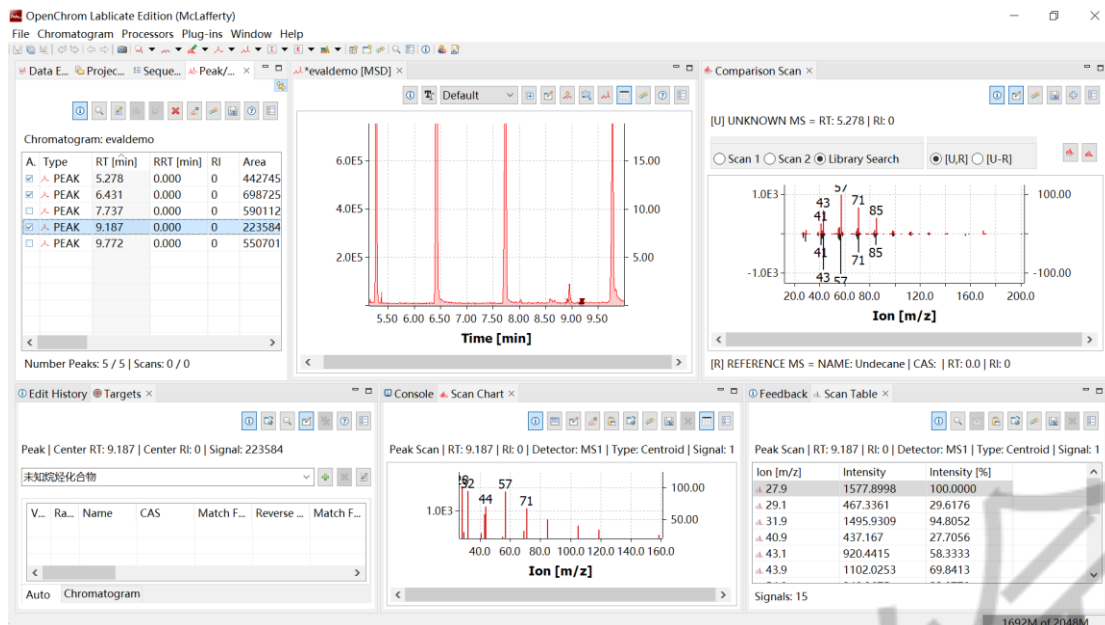


图 7 未检索到的峰标记

启动 edit，输入未知烷烃化合物来标记。

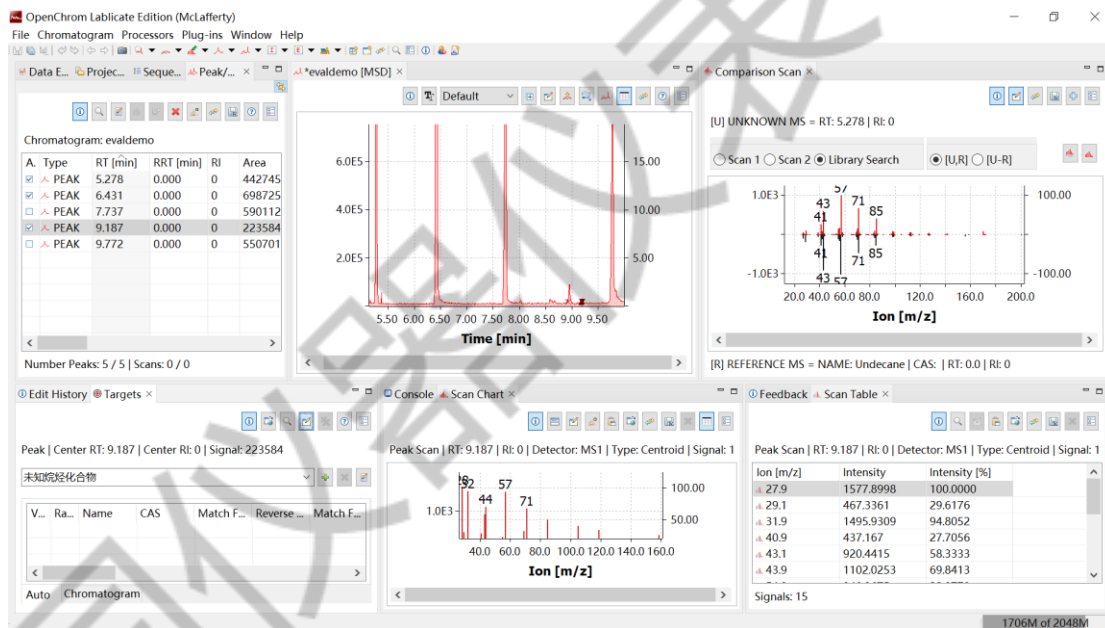


图 8 编辑化合物

按输入 (Enter 键)。在 Peaks List 和上部中间的色谱图上面都变成未知烷烃化合物了。

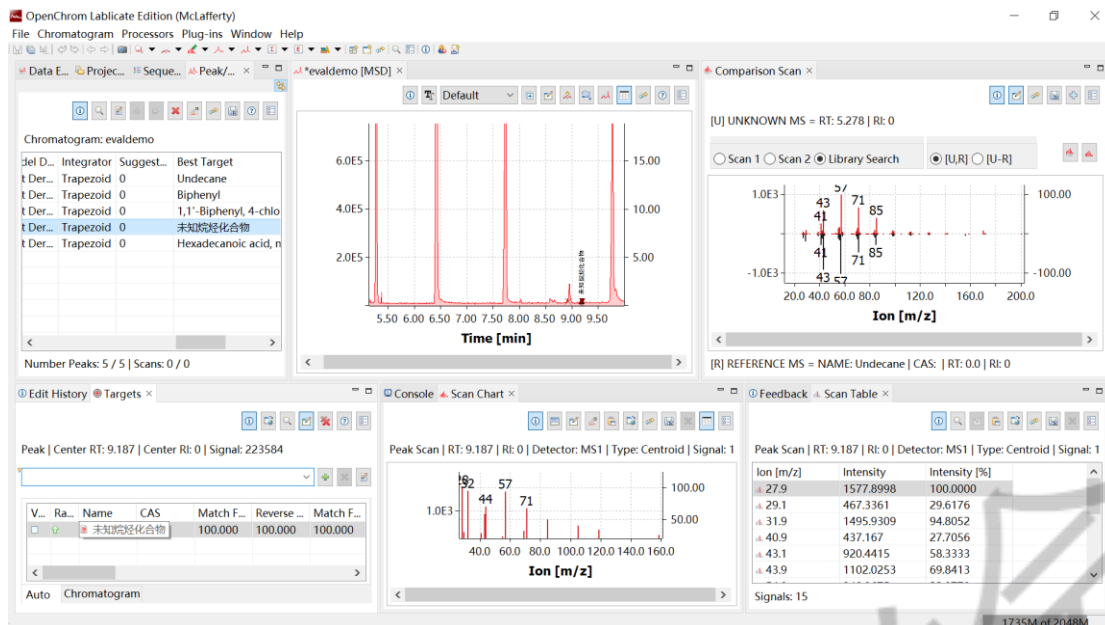


图 7 编辑化合物

5. 编辑 peaks list

如果要删去第三个小峰的结果，右键点击此小峰>选择 Peaks/Scan>Peak/scan(Delete identification)，即可删掉。

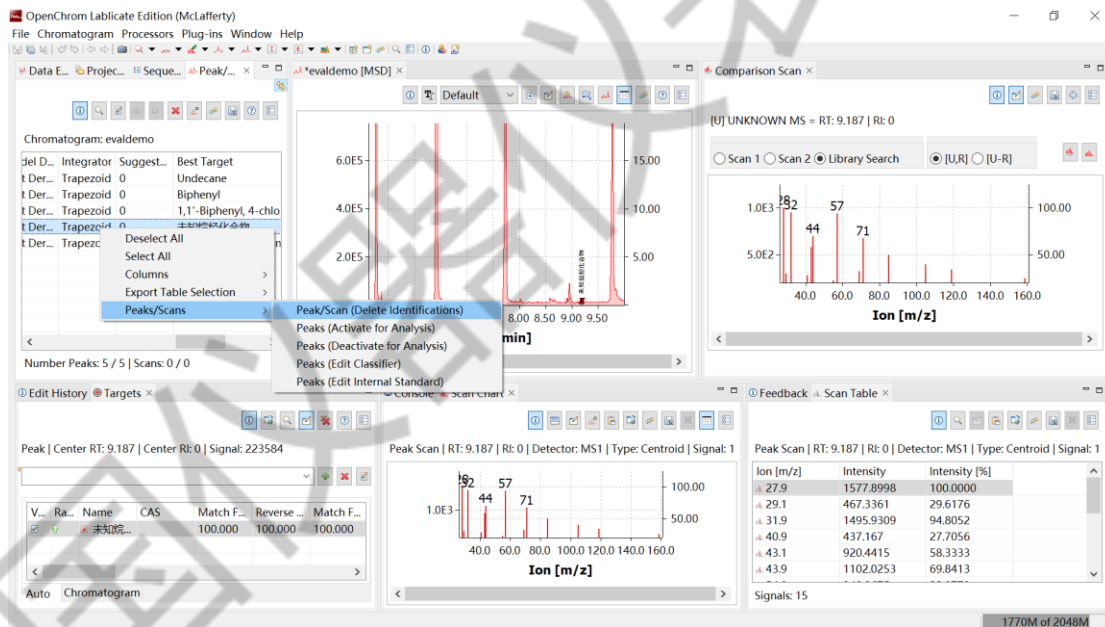


图 8 删去结果

Yes，执行操作。

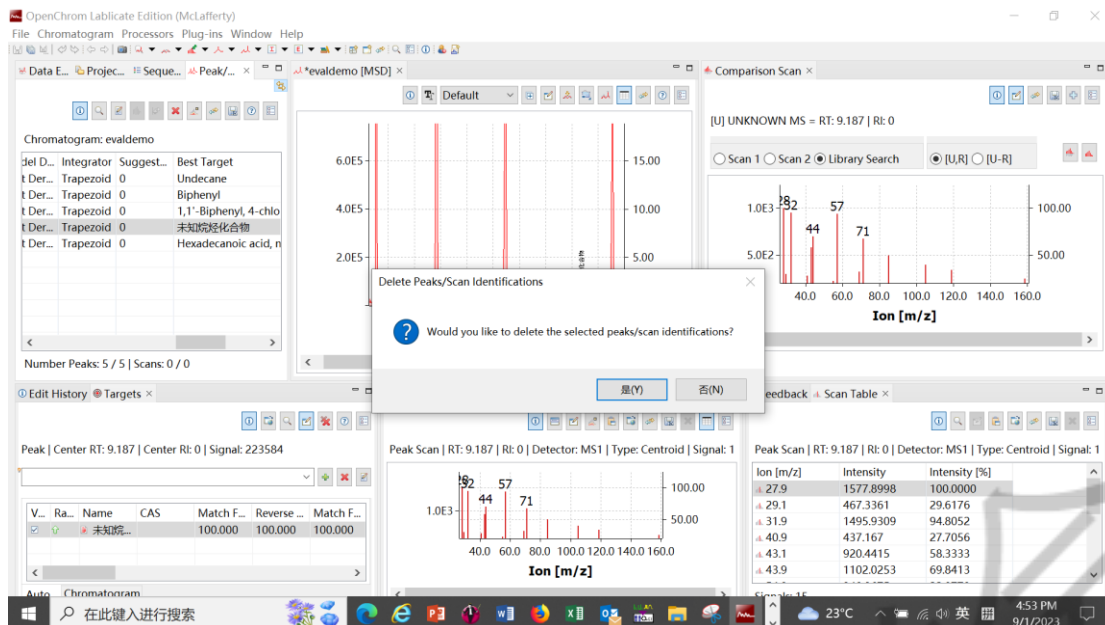


图 9 删去结果

这样就删掉了这个结果。

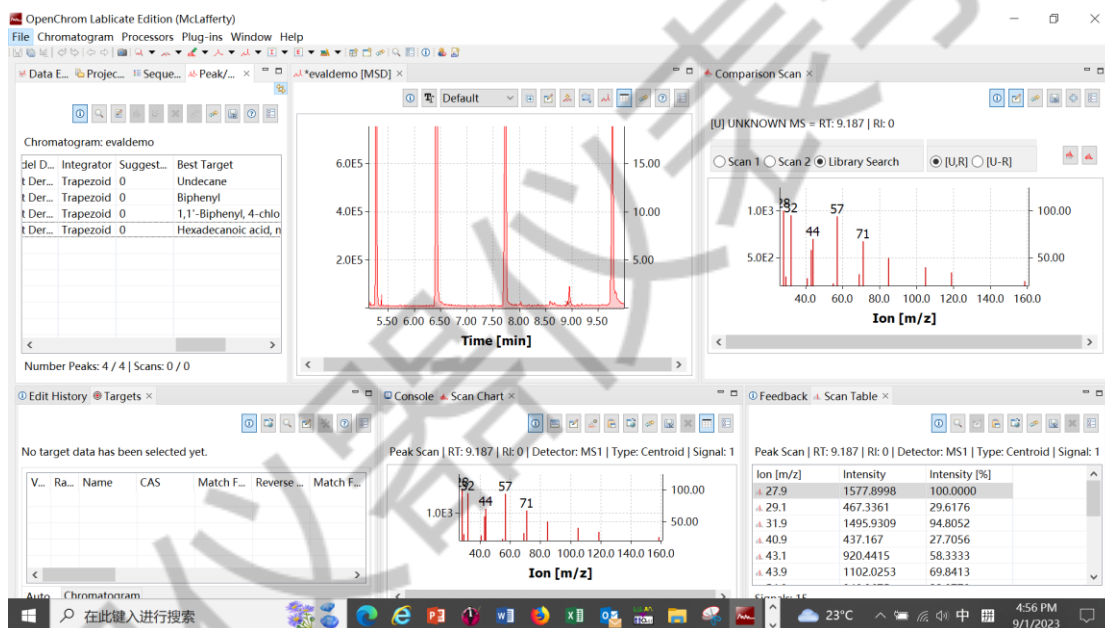


图 10 删去结果

6. 导出结果表

右键点击，选 select all

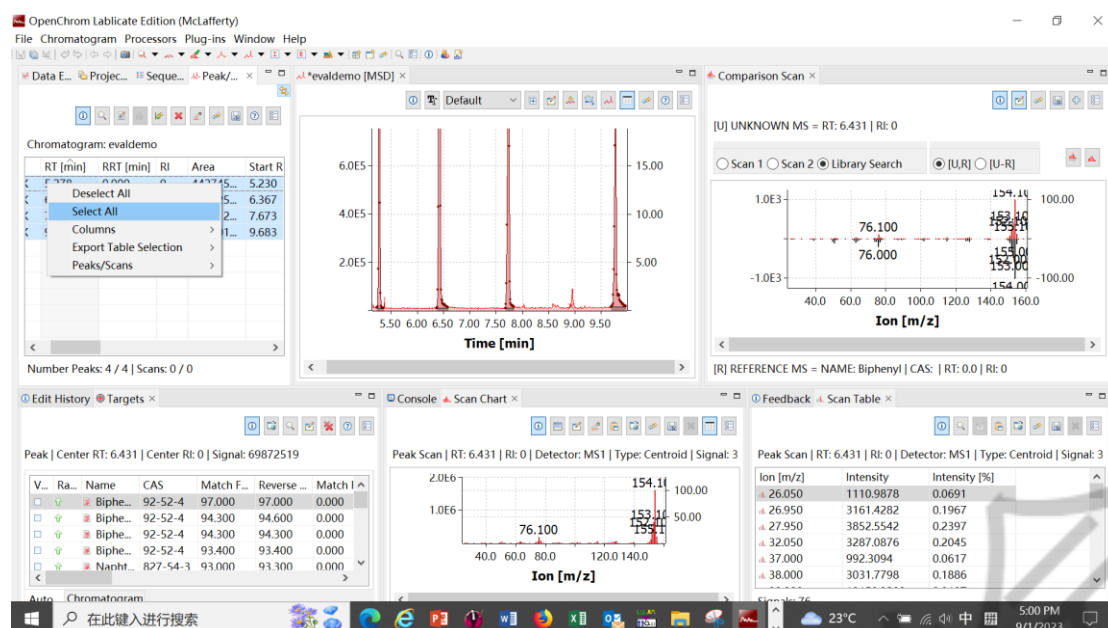


图 11 选择化合物

然后 Export Table Selection>Copy to Clipboard，就可以在 excel 等软件上面黏贴了。

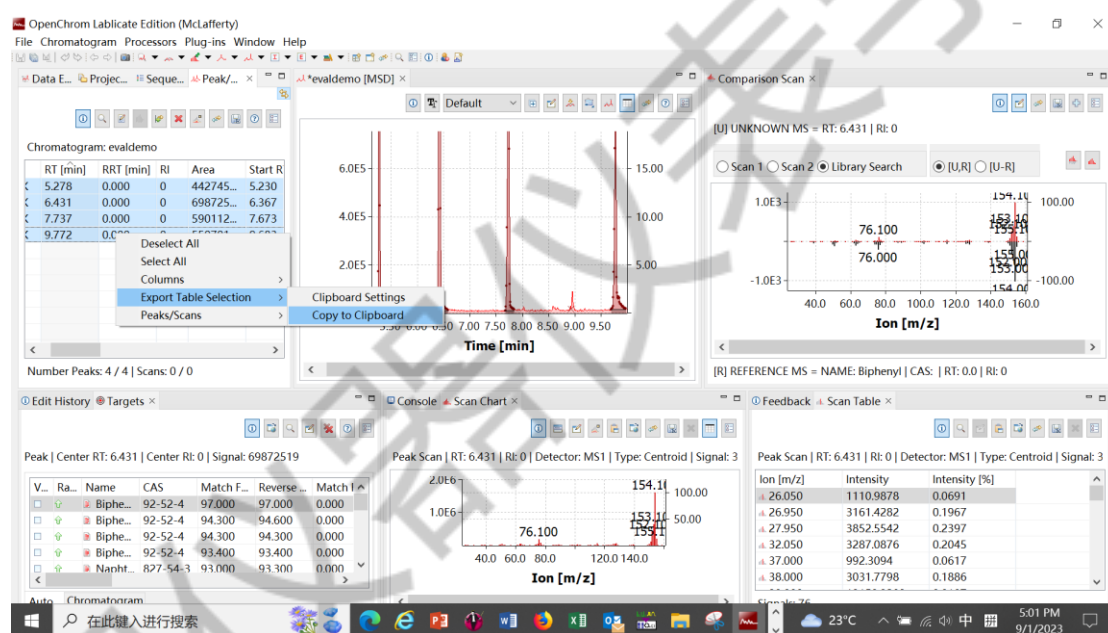


图 12 导出 peak list

第二部分完。