# OpenChrom 软件使用介绍 2\_核对检索结果

#### 朱建设

(哲斯泰(上海)贸易有限公司,上海 201206)

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

本次介绍核对检索结果。

### 1. 设置 NIST 数据库

要使用质谱图对比功能,需要一些相应的设置。点击工具栏的 Preference 或 Window 菜 单下面 Preference,进入个性化设置。先把使用 NIST search 检索设置好,需要事先安装 NIST Search 软件。在电脑上面找到 MSSEARCH Folder 文件夹的位置放入。质谱图对比还需要 把 NIST 数据库文件放入(参考上篇)。

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。



图 1 设置 NIST 数据库

### 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,则在右上面的质谱图对比出现,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 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/z43, 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。



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。





Yes,执行操作。

Chromatogram: evaldemo Id D Idexademo Idex Idexademo Idexademo Idex Idexademo Id	n ×
Data E_ @Projec_ I Seque & Peak/ ×       I evaldemo [MSD] × <td>n × =</td>	n × =
O       Image: Chromatogram.ter veldemo         Der.       Trapezoid         Der.       Der.         Der.       Trapezoid         Der.       Der.         Der.       Tr	0         0         0         0         0           AS = RT: 9.187   Rt: 0         0         0         0         0         0         0           n 2 ● Library Search         ● [U,R] ○ [U-R]         ●         ●         ●         ●           57         100.00         0         100.00         0         0         0
Chromatogram: evaldemo del D. Integrator Suggest Best Target Der Trapezoid 0 Biphenyl Der Trapezoid 0 1,11-Biphenyl, 4-chlo Der Trapezoid 0 Hexadecanoic acid, n Der Trapezoid 0 Hexa	n 2      Library Search
Iel D.     Integrator Suggest     Best Target     6.0E5       Der Trapezoid     Undecane     0       Der Trapezoid     Bijhenyl       Der Trapezoid     1,1-Bijhenyl,4-chlo       Der Trapezoid     +Hexadecanoic acid, n       2.0E5	n 2 🖲 Library Search 💿 [U,R] 🔿 [U-R]
Der_, Trapezoid 0 Bijbenyl Der_, Trapezoid 0 Bijbenyl Der_, Trapezoid 0 1,1 <sup>-</sup> Bijbenyl,4-chlo Der_, Trapezoid 0 1,1 <sup>-</sup> Bijbenyl,4-chlo Der_, Trapezoid 0 Hexadecanoic acid, n Der_, Trapezoid 0 Hexadecanoic acid, n Delete Peaks/Scan Identifications ×	57
Der_ Trapezoid 0 1,1'-Biphenyl,4-chlo Der_ Trapezoid 0 +txi5x252426191 Der_ Trapezoid 0 Hexadecanoic acid, n Delete Peaks/Scan Identifications ×	57 - 100.00
-	44 71 50.00 40.0 60.0 80.0 100.0 120.0 140.0 160.0
Would you like to delete the selected peaks/scan identifications?	Ion [m/z]
Number Peaks: 5 / 5   Scans: 0 / 0	
Edit History @ Tarnets x = -	ack 4 Scan Table X
eak   Center RT: 9.187   Center RI: 0   Signal: 223584 Peak Scan   RT: 9.187   RI: 0   Detector: MS1   Type: Centroid   Signal: 1 Peak Sca	in   RT: 9.187   RI: 0   Detector: MS1   Type: Centroid   Signal: 1
v ♦ x ≥ 92 57 100.00 27.0	2] Intensity Intensity [%] ^
V. Ra. Name CAS Match F. Reverse, Match F. 1.083-44 71 429.1	467.3361 29.6176
2 ② ※ 未知院	1495.9309 94.8052 437.167 27.7056
40.0 60.0 80.0 100.0 120.0 140.0 160.0	920.4415 58.3333
< > Ion [m/z]	1102.0253 69.8413
	4-53 PM
心1下4//4/11开1亿111个。	$\langle \cdot \rangle$
OpenChrom Lablicate Edition (McLafferty)	
chromatogram Processors Plug-ins window help	- 5 X
Linemaugiani Frocessors Frageins window help 単分のなりの意味でなった。またでは、AFA レイモンドロンド語である。 Data 5 Backer Frager Carlotter 2011 (1997)	- 0 ×
Chromatogram Processors Program Window Perp ME(からく) 副 Q マーム マ 成 マ 人 マ ム マ 記 マ 記 マ 記 マ 記 で 聞 口 参 Q 記 ① 参 Q Data E_ & Projec. II: Seque & Peak/ × 『 □ A "evaldemo (MSD) × 『 □ A "evaldemo (MSD) × 『 □ A "evaldemo (MSD) × [ 0 ]	- 0 ×
Cultinalogiani Processos Pageins window Help Sel oblock a la v a v z v v v v v v v v v v v v v v v	- 0 ×
Unionalogiani Processis Projetta Window Reip Ballo Ballo Ba	-  ×
Chromatogram: evaldemo       Ministry and Project       If Seque:       A Project       If Seque:	-
Chromatogram: evaldemo       Ministration         Idel = 0       Idel = 0         Idel = 0       Idel = 0 <t< td=""><td>-</td></t<>	-
Chromatogram: evaldemo lel D_, Integrator Suggest. Best Target Der., Trapezoid 0 Der.,	-
Chromatogram: evaldemo lel D. Integrator Suggest. Best Target Der. Trapezoid 0 Lindecane Der. Trapezoi	- C × n ×
Contractional optimin Processors Programs with experiments         Data E	- C × n ×
Chromatogram: evaldemo       Window Height         Der Trapezoid 0       Biphenyl         Der Trapezoid 0       Biphenyl         Der Trapezoid 0       Herkadecanoic acid, n         2.0E5-       5.00	- C × n ×
Chromatogram: evaldemo       Image: Seque: A peak/_ X I meak       Image: Seque: A peak	- C × n ×
Comparison Processors Programs window representation of the project in the proje	- C × n × • • • • • • • • • • • • • • • • • •
Comparison Strategy and Processons Programs of Processons Programs of Processons Programs of Programs	- C × n × C C C C C C C C C C C C C C C C C C
Current outgains       Project       II Seque       A Peak/ <ul> <li>tevaledemo (MSD) ×</li>             &lt;</ul>	- C × n × • • • • • • • • • • • • • • • • • •
Comparisons rules in window reported in the second	- C × n × • • • • • • • • • • • • • • • • • •
Comparison Strategy         Data E       Projec       Seque       Peak/ × <ul> <li>• evaldemo (MSD) ×</li> <li>• Evaldemo (MSD) ×</li> <li>• Comparison Sca</li> <li>• evaldemo (MSD) ×</li> <li>• evalue × ev</li></ul>	- C × n × • • • • • • • • • • • • • • • • • •
Chromatogram: evaldemo   Ide D_ integrator Suggest.   Best Trapezoid 0   Undecane   Derr.   Trapezoid 0   Undecane   Derr.   Trapezoid 0   Undecane   Comparison Sca   Comparison Sca   Chromatogram: evaldemo   Ide D_ integrator Suggest.   Best Trapezoid 0   Undecane   Comparison Sca   Comparison Sca   Chromatogram: evaldemo   Ide D_ integrator Suggest.   Best Trapezoid 0   Undecane   Comparison Sca   Comparison Sca <t< td=""><td>n × • • • • • • • • • • • • • • • • • •</td></t<>	n × • • • • • • • • • • • • • • • • • •
Chromatogram: evaldemo   Ide D_ Integrator Suggest.   Best Target   Derr.   Trapezoid   Dipremy   Derr.   Trapezoid   Diphenyl   Chromatogram: evaldemo   Ide D_ Integrator Suggest.   Best Target   Derr.   Trapezoid   Diphenyl   Derr.   Trapezoid   Diphenyl   Chromatogram: evaldemo   Ide D_ Integrator Suggest.   Best Target   Derr.   Trapezoid   Diphenyl   Chromatogram: evaldemo   Ide D_ Integrator Suggest.   Best Target   Derr.   Trapezoid   Diphenyl   Chromatogram:   Voltaget data has been selected yet.	n ×       •       •       •         n ×       •       •       •       •         n ×       •       •       •       •         n ×       •       •       •       •         n ×       •       •       •       •       •         n ×       •       •       •       •       •         n ≥       •       •       •       •       •       •         0       •       •       •       •       •       •       •         ck + Scan Table ×       •       •       •       •       •       •       •       •         n   RI: 9:187   Ri: 0   Detector: MS1   Type: Centroid   Signal 1       •       •       •       •       •
Chromatogram: evaldemo         Ied Do for a low of the evaluation of the evaluati	n ×       •         AS = RT: 9.187   RŁ 0         n 2 • Library Search       • [U,R] [U-R]         • 44       •         • 71       •         • 40.0       60.0       80.0       100.00         • 60.0       80.0       100.0       100.0         • 40.0       60.0       80.0       100.0       100.0         • 60.0       80.0       100.0       12.0       140.0       160.0         • 100       Intensity       intensity       intensity       intensity       intensity         • 11475.9301       29.6176       1495.9309       94.8052       1495.9309       94.8052         • 127.7365       920.4415       58.3333       •       •       •

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。