

OpenChrom 软件使用介绍 3_文件检索

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。前面介绍了初步使用的流程和方法, 核对质谱结果。本篇介绍谱库文件检索。

1. 谱库文件检索设置

要使用文件检索功能, 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。

路径:

Chromatography/Spectrometry----Identifier>Identifier (MSD)>File Identifier 打开 File Identifier。

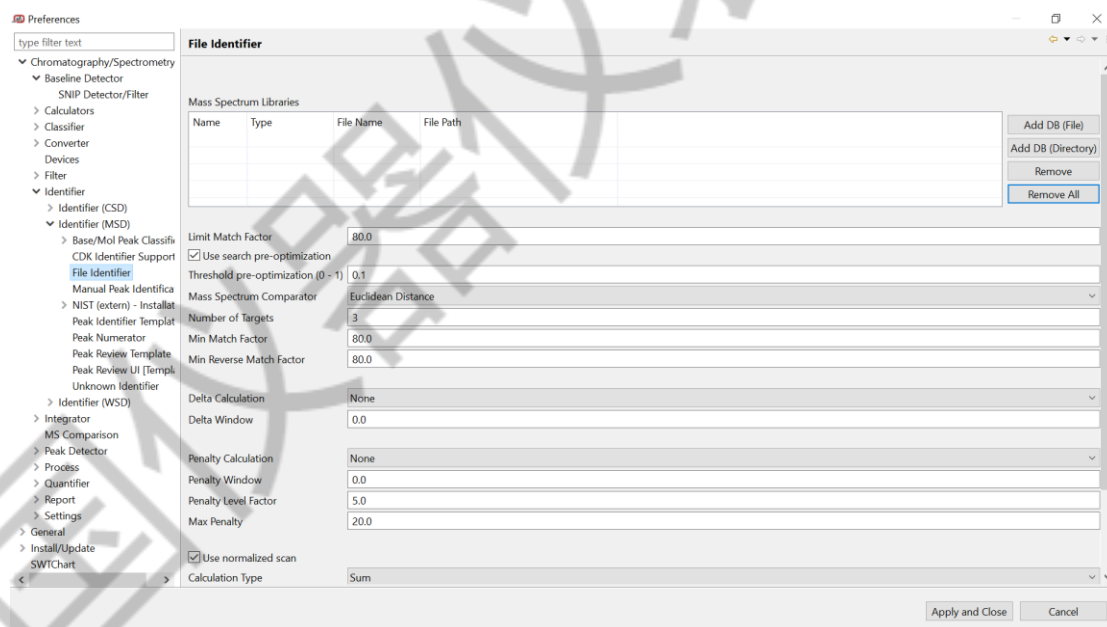
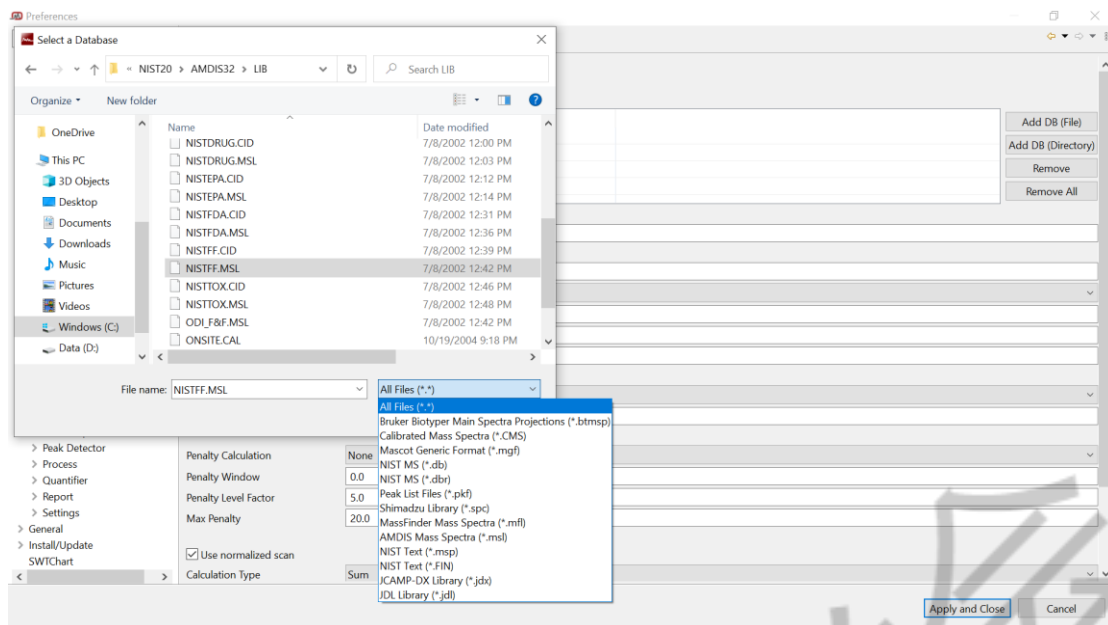


图 1 打开文件检索设置

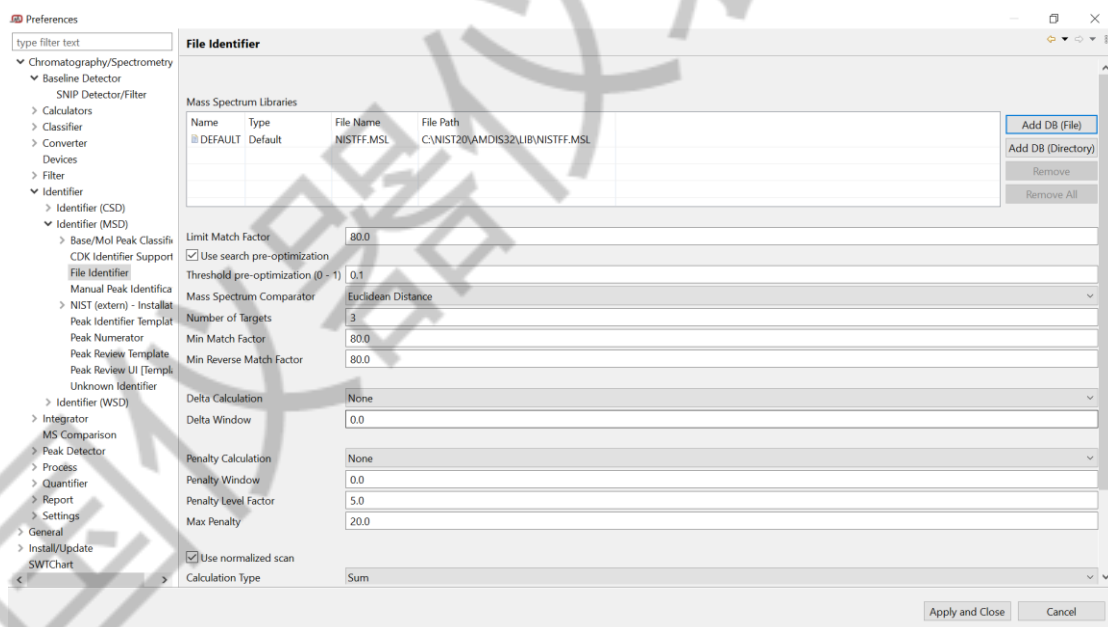
2. 添加检索的谱库文件

点击右上角的 Add DB(file)。



可以用于文件检索的库谱格式有 NIST 检索谱库的 NIST MS(*.db), 岛津谱库 (*.spc), NIST Text(***.msp), Amdis 谱库 (***.msl) 等 13 种格式。请参考图 2 的文件格式选择。

在相应的文件夹找到需要添加的谱库文件。例如 NISTFF.MSL，点击 open，这样就检索文件添加到系统。



例如添加岛津的***.SPC，在岛津谱库文件夹找到 NIST*.SPC，Open。同理，或者添加 NIST 检索谱库 NIST.db。

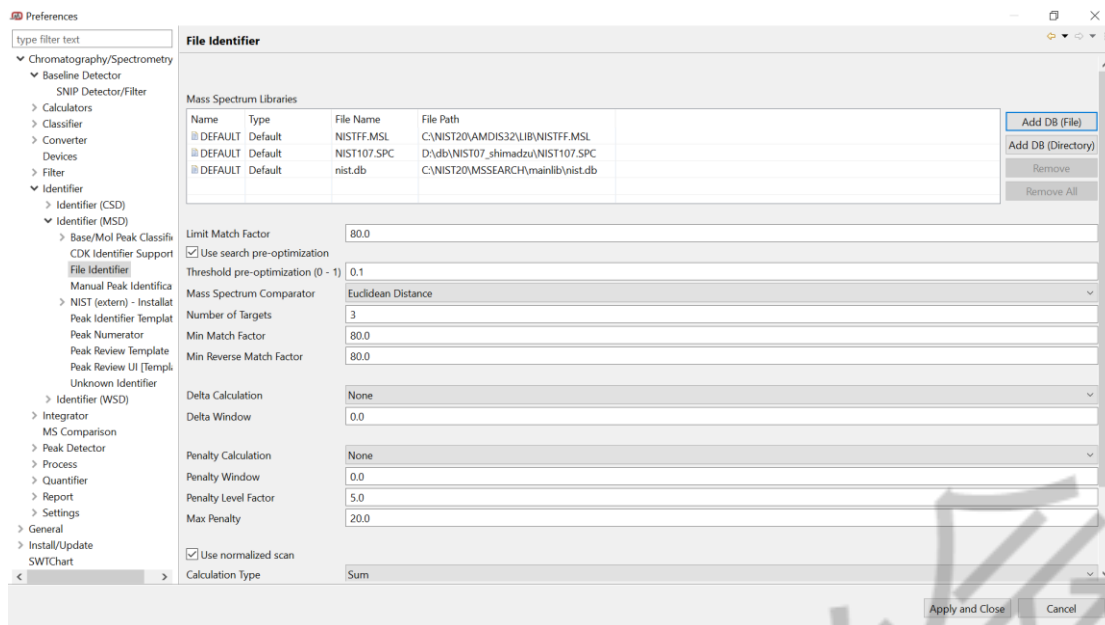


图 4 添加岛津谱库和 NIST 谱库

对最低匹配度，阈值，检索结果个数（例如 3），正向和反向匹配度等进行设置。Apply and Close。

3. GCMS 数据检索

流程如下：

调用 GCMS 数据文件，参见前面第一篇文章。

峰检出，在色谱上面右键点击，Peak Detector>First Derivative。

峰积分，在色谱图上面右键点击，选 Peak integrator>Peak Integrator Trapezoid。参见前面第一篇文章。

峰鉴定，在色谱图上面右键点击，选 Peak Identifier>Library File（MS）。

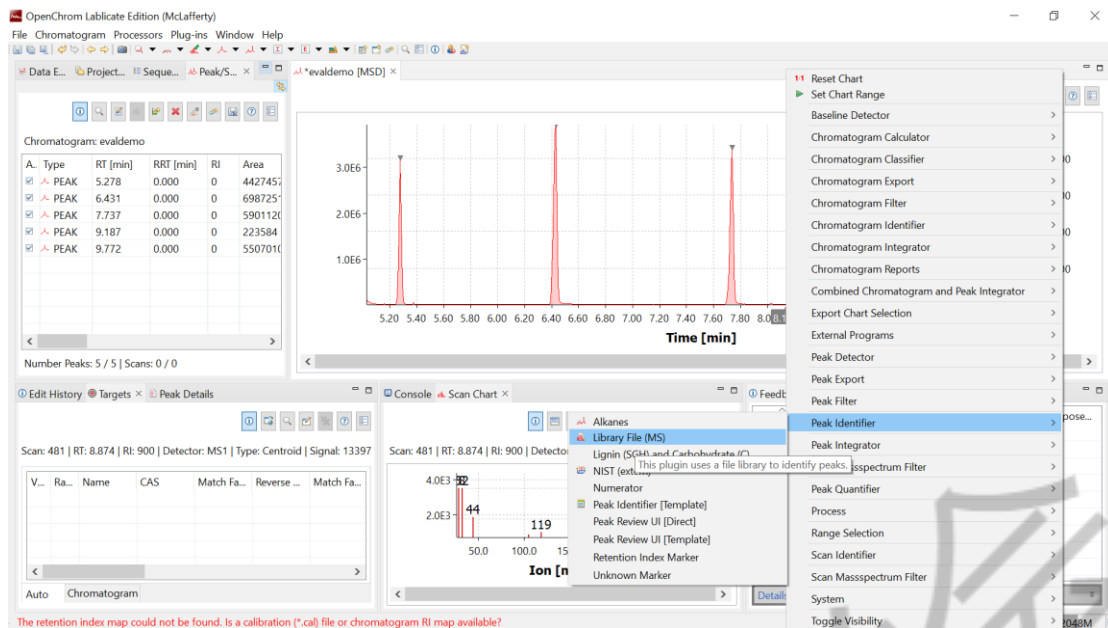


图 5 谱库文件检索 1

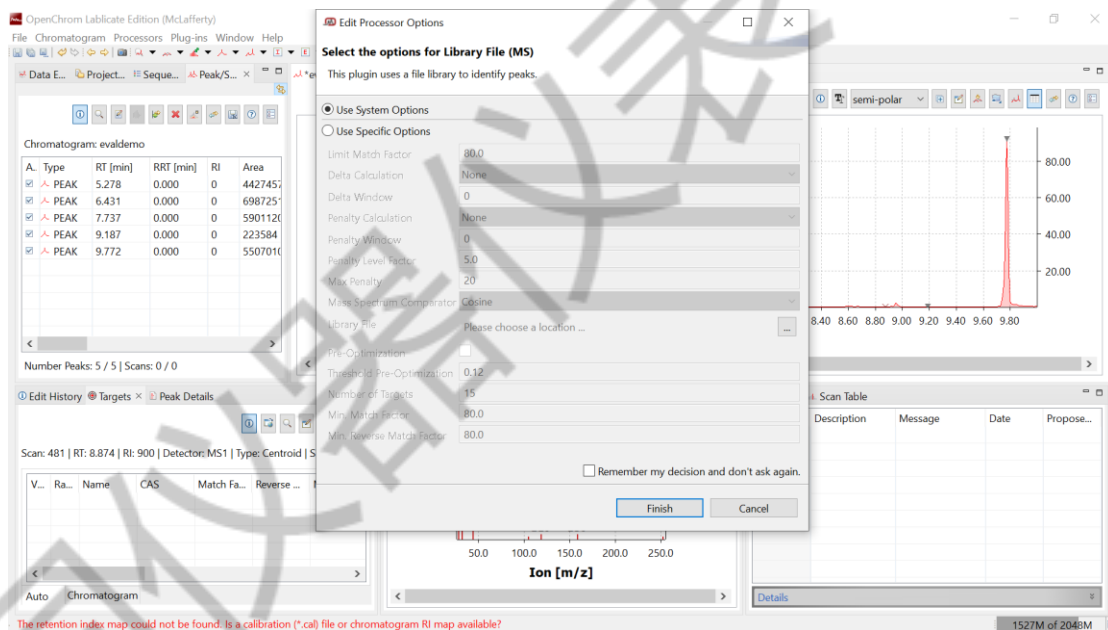


图 6 谱库文件检索 2

点击 Finish,

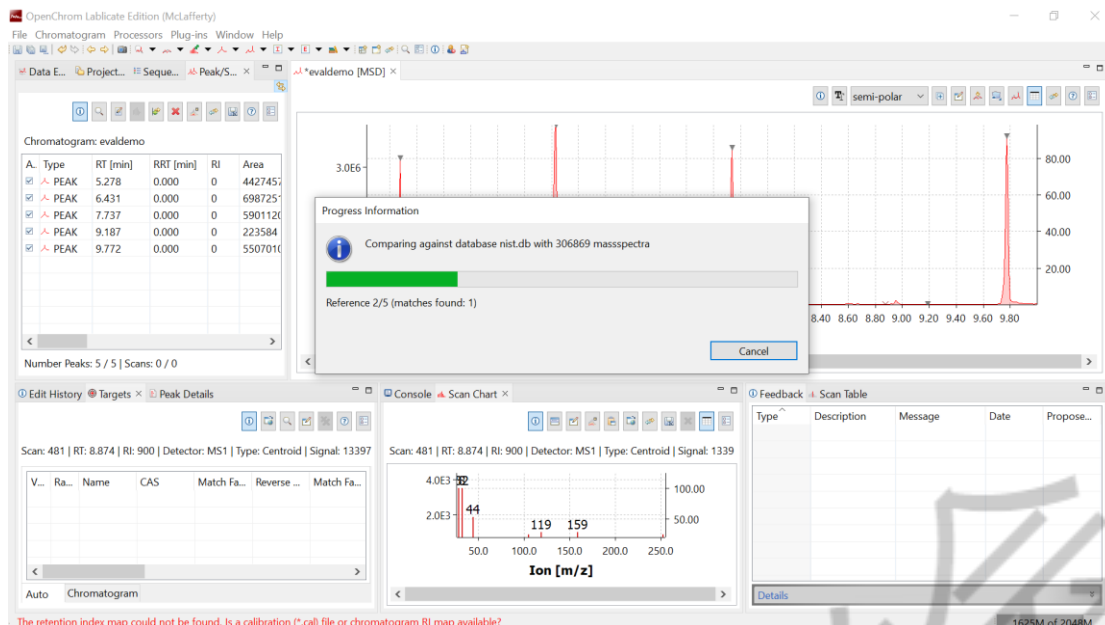


图 6 谱库文件检索运行

检索运行完毕，就可以看到在峰顶已经有化合物名称标记了，在可以在左上角看到 peak/scan list 看到鉴定的化合物名称了，在左下角的 target 看到检索到化合物的信息。

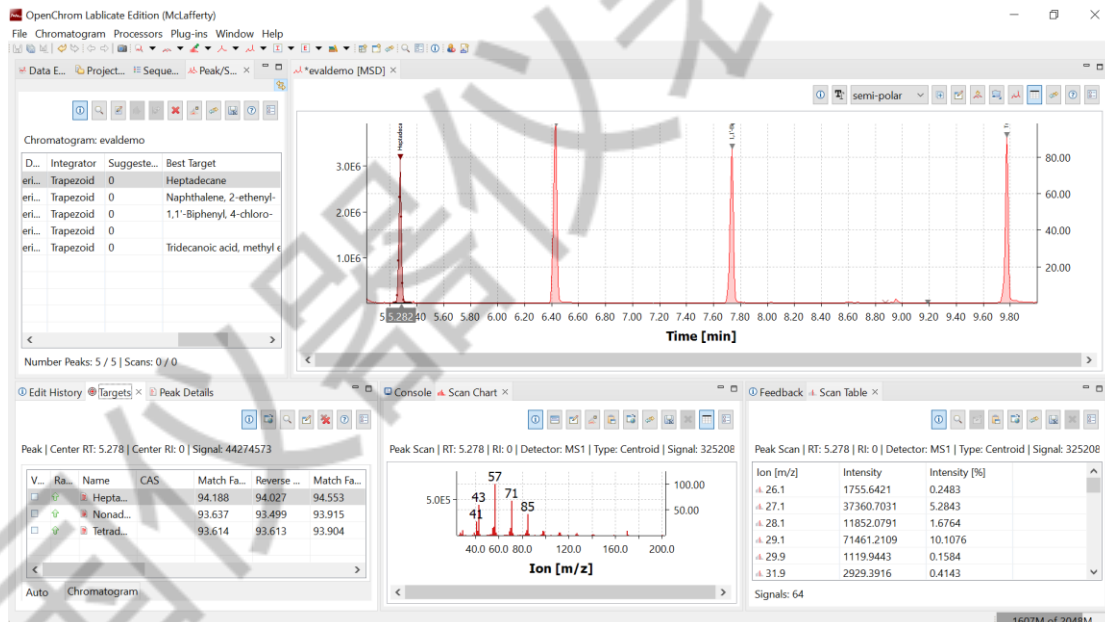


图 7 文件检索检索结果

第三部分完。