

OpenChrom 软件使用介绍 4-保留指数计算和对比

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, 谱库文件检索。

<https://bbs.instrument.com.cn/topic/8254675>

本篇介绍保留指数文件创建和计算, 以及保留指数对比。

1 创建保留指数校正文件

在 Processors 菜单下面的 Create Retention Index File。

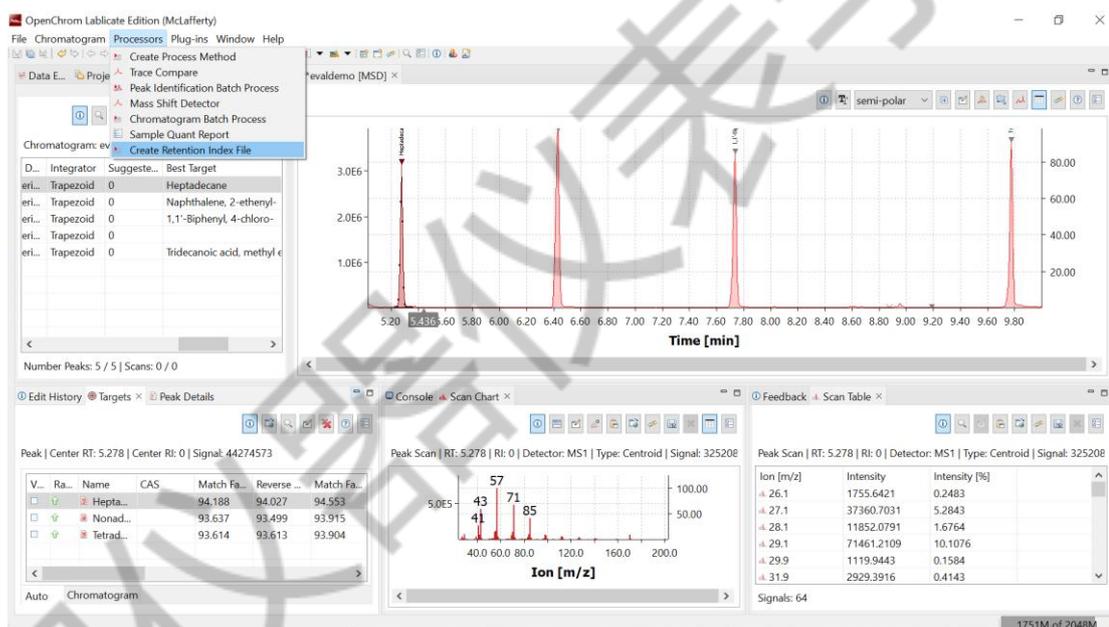
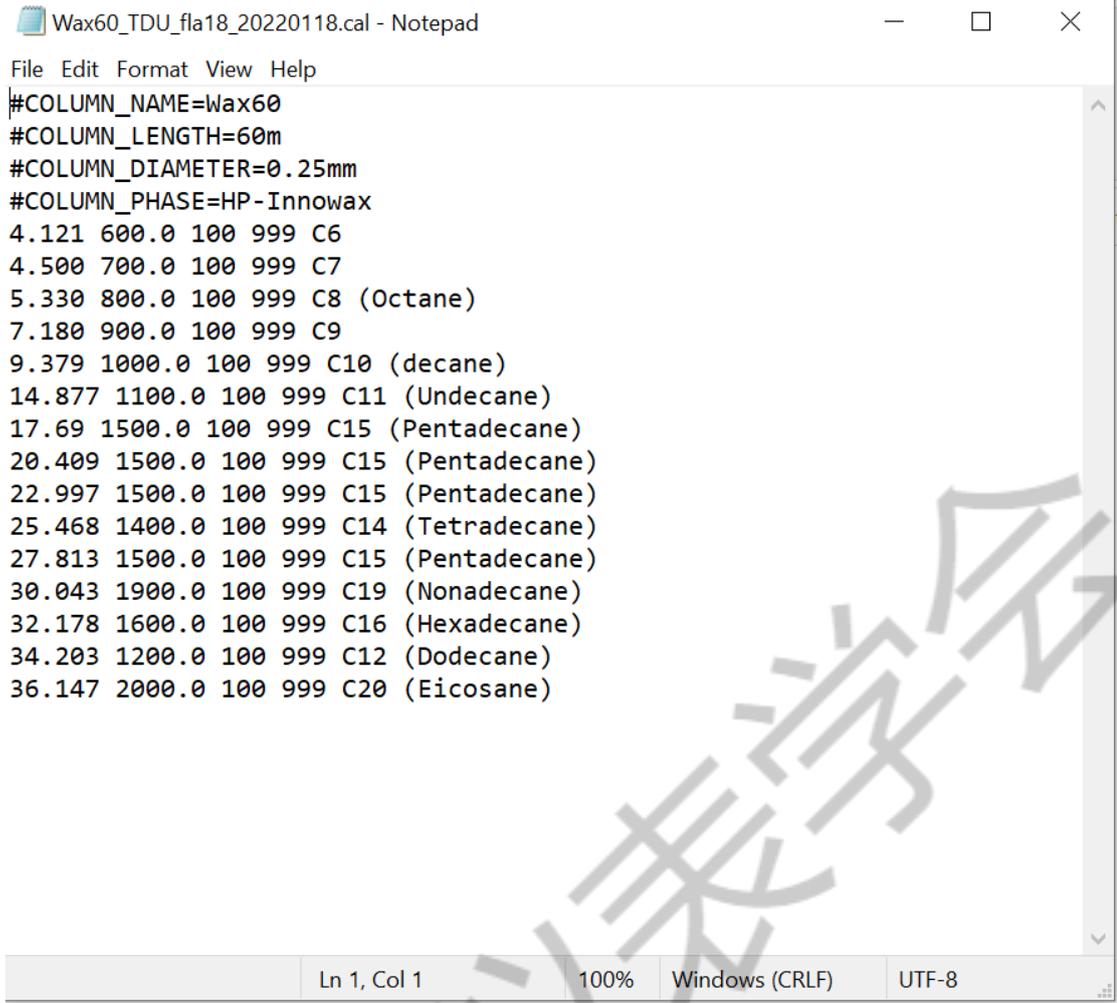


图 1 创建保留指数校正文件

但这种创建保留指数校正文件需要许多步骤, 需要 Calibration Settings, Open Chromatogram (MSD) Files, Peak Selection, Peak Assignment, 需要校验正构烷烃化合物等, 比较麻烦繁琐。本篇介绍一张非常简单的创建保留指数校正文件方法。

保留指数校正文件的格式为 XXX.cal。里面内容如下例子:



```
Wax60_TDU_fla18_20220118.cal - Notepad
File Edit Format View Help
#COLUMN_NAME=Wax60
#COLUMN_LENGTH=60m
#COLUMN_DIAMETER=0.25mm
#COLUMN_PHASE=HP-Innowax
4.121 600.0 100 999 C6
4.500 700.0 100 999 C7
5.330 800.0 100 999 C8 (Octane)
7.180 900.0 100 999 C9
9.379 1000.0 100 999 C10 (decane)
14.877 1100.0 100 999 C11 (Undecane)
17.69 1500.0 100 999 C15 (Pentadecane)
20.409 1500.0 100 999 C15 (Pentadecane)
22.997 1500.0 100 999 C15 (Pentadecane)
25.468 1400.0 100 999 C14 (Tetradecane)
27.813 1500.0 100 999 C15 (Pentadecane)
30.043 1900.0 100 999 C19 (Nonadecane)
32.178 1600.0 100 999 C16 (Hexadecane)
34.203 1200.0 100 999 C12 (Dodecane)
36.147 2000.0 100 999 C20 (Eicosane)
Ln 1, Col 1 100% Windows (CRLF) UTF-8
```

图2 保留指数校正文件

可以按照图2的格式来建立一个写字板模板。可以增加或删除的正构烷碳数数据。另存为XXX.CAL文件。注意存文件时候，文件类型请选择“所有文件类型”，不可以选择“文本类型”。其实这个保留指数校正文件格式和Amdis的保留指数校正文件格式一样的，如果您有Amdis的RI校正文件，也可以直接使用。当然也可以使用Amdis的RI校正文件的建立方法来建立保留指数校正文件。

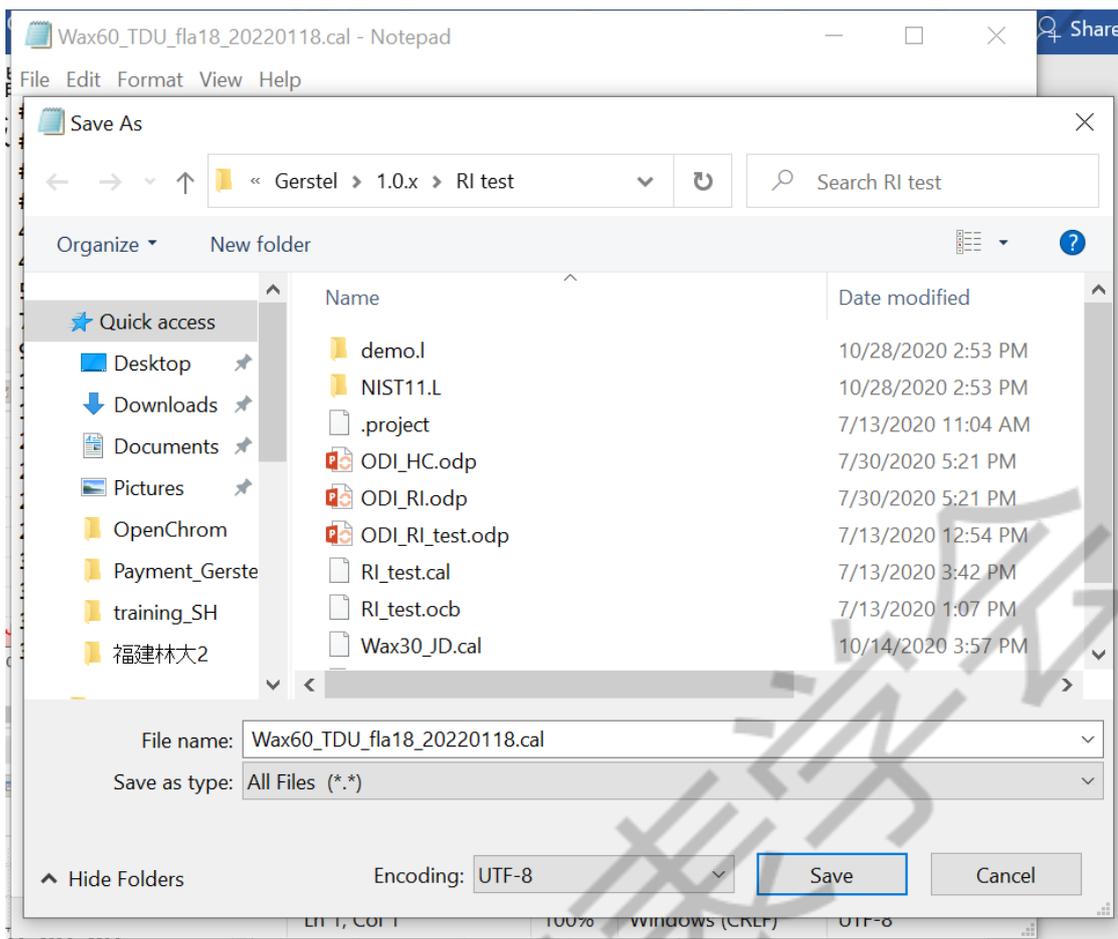


图 3 保存保留指数校正文件

2 保留指数校正文件设置

要使用保留指数校正功能，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----Calculators>Retention Index>Calculator，点击，打开 Calculator。点击右上角的 Add

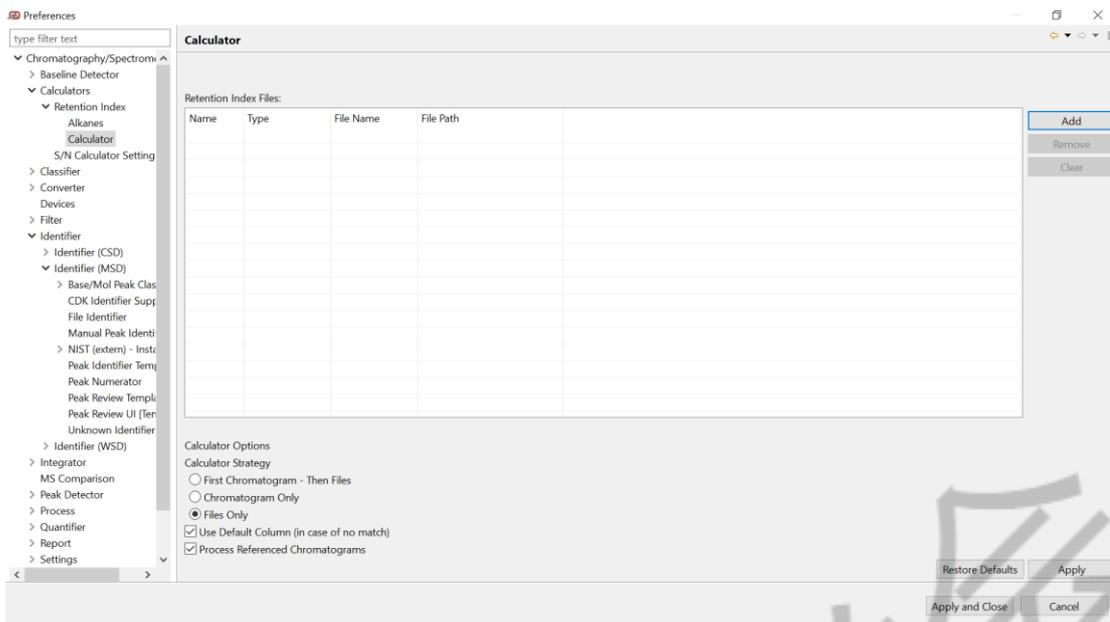


图 4 保留指数校正设置

找到需要添加的保留指数校正文件，Open，添加即可。

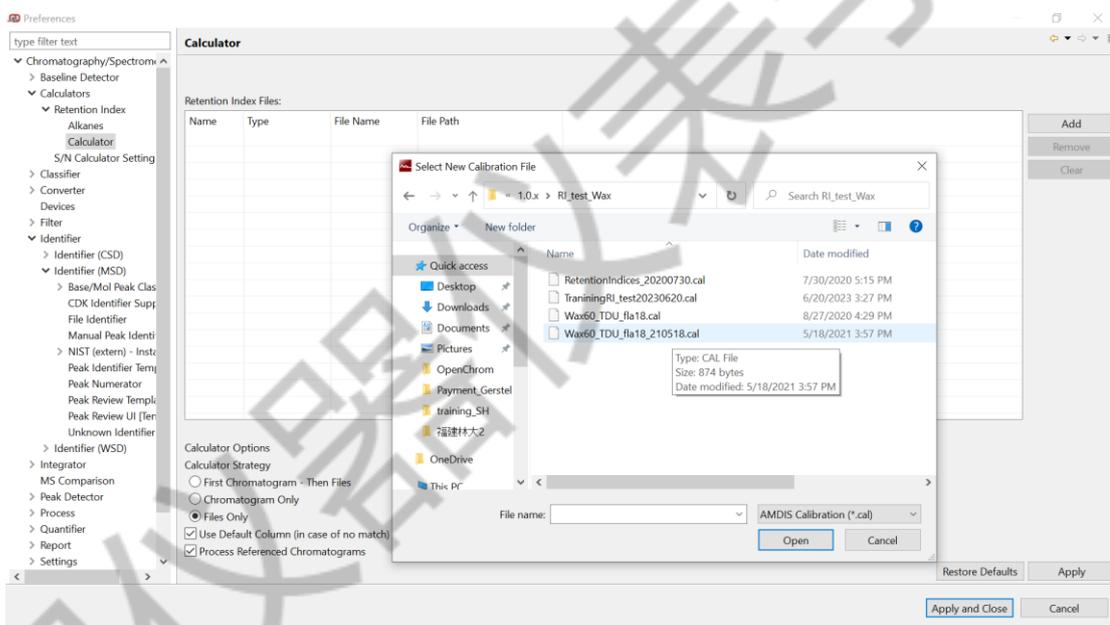


图 5 添加保留指数校正

点击 Apply and Close。这样就添加了保留指数校正文件。

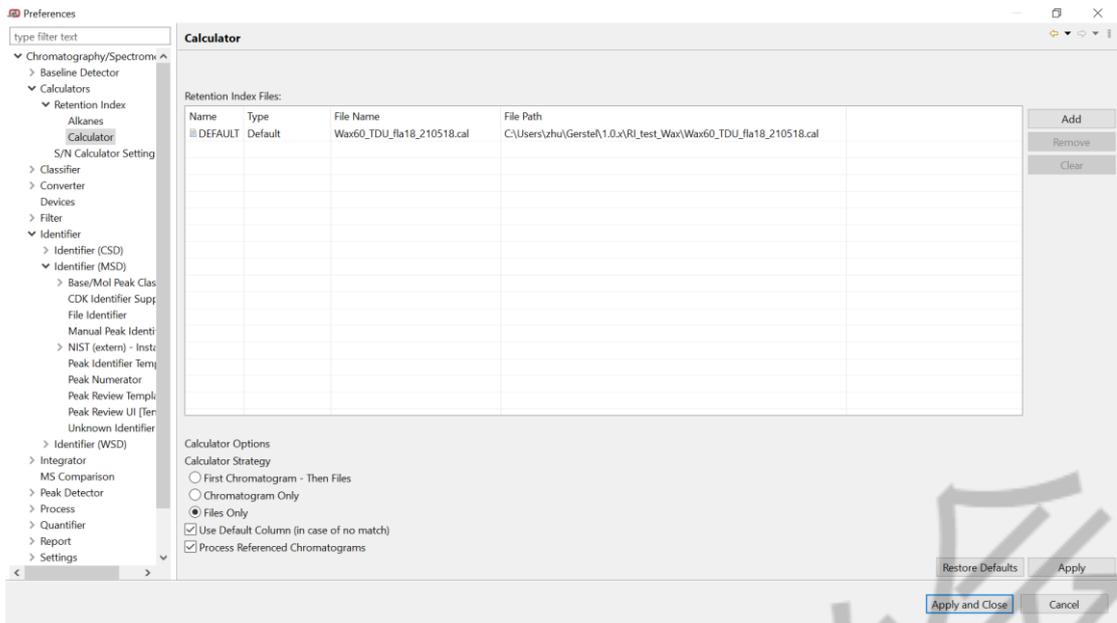


图 6 添加保留指数校正文件

3 数据文件计算保留指数

流程如下：

调用 GCMS 数据文件，参见前面第一篇文章。

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

峰积分，在色谱图上面右键点击，选 Peak integrator>Peak Integrator Trapezoid。

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

参见前面第一或第三篇文章。

保留指数计算：在色谱图上面右键点击，选 Chromatogram Calculator，选择 Retention Index Calculator (Scan and Peaks)

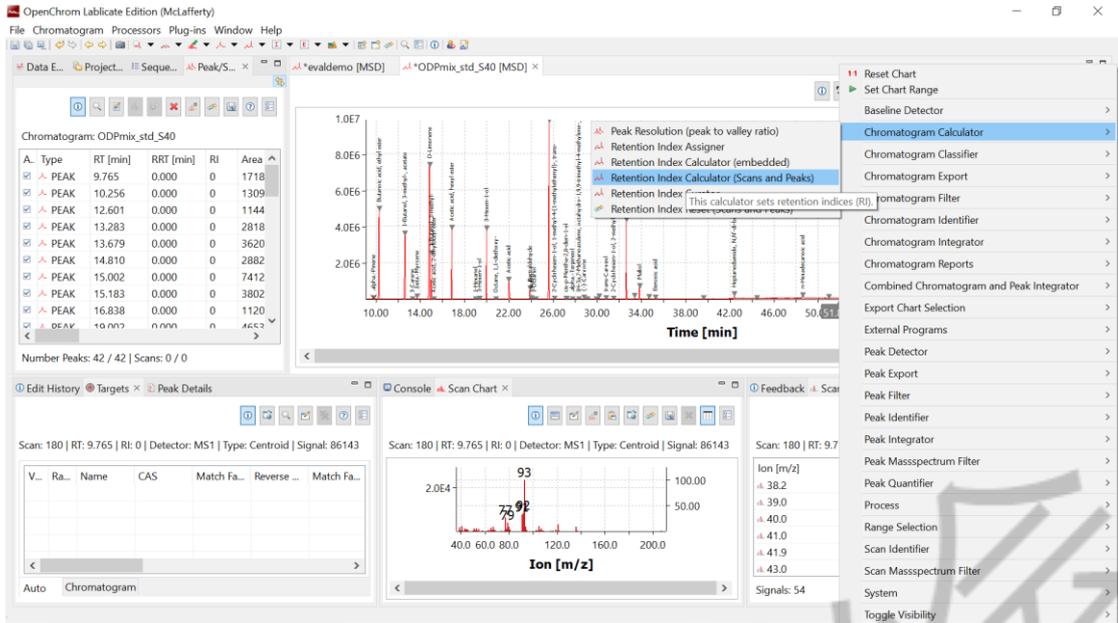


图 7 保留指数校正计算

这样在左上角的 Peak/Scan List 里面就有已经计算的 RI 值了,例如保留时间为 10.256min 的峰的 RI 为 1049。



图 8 保留指数校正计算结果

4 化合物保留指数校对

在左下角的 targets 里面可以看到前面选中的化合物谱库里面的保留指数为 1036, 这个极性 WAX 柱子, 可以认为此化合物的保留指数符合要求, 正反质谱匹配度为 94.9, 可以确

认这个检索结果。

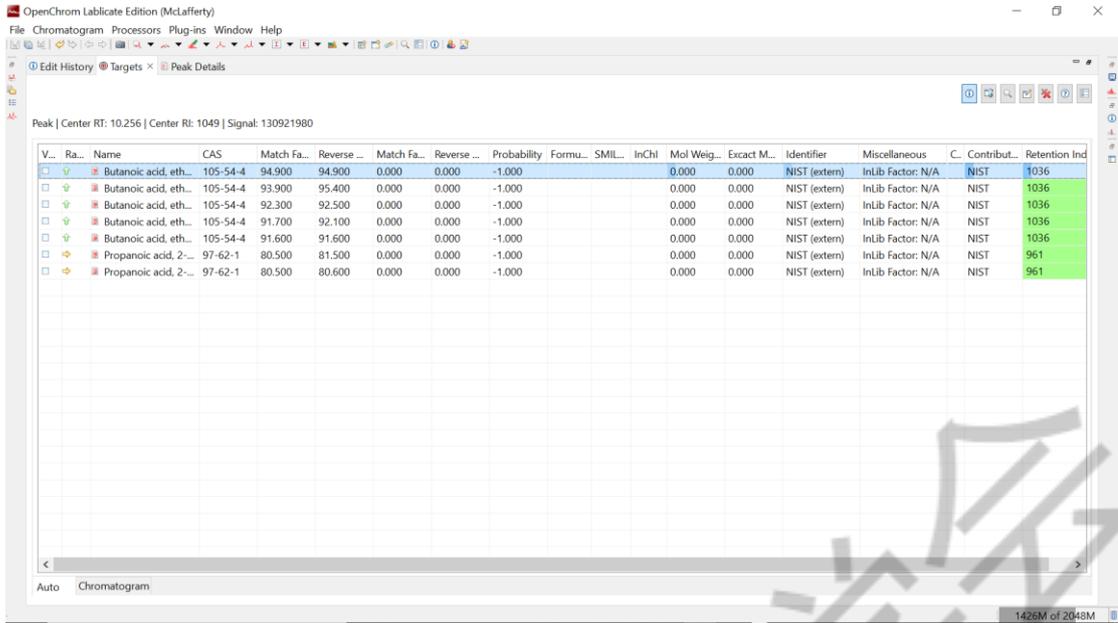


图 9 保留指数校正计算结果和谱库保留指数对比

5 关于检索结果里面的化合物保留指数使用柱子极性的选择

对于 NIST Search 检索，在 Options 菜单选择 Library Search Options。

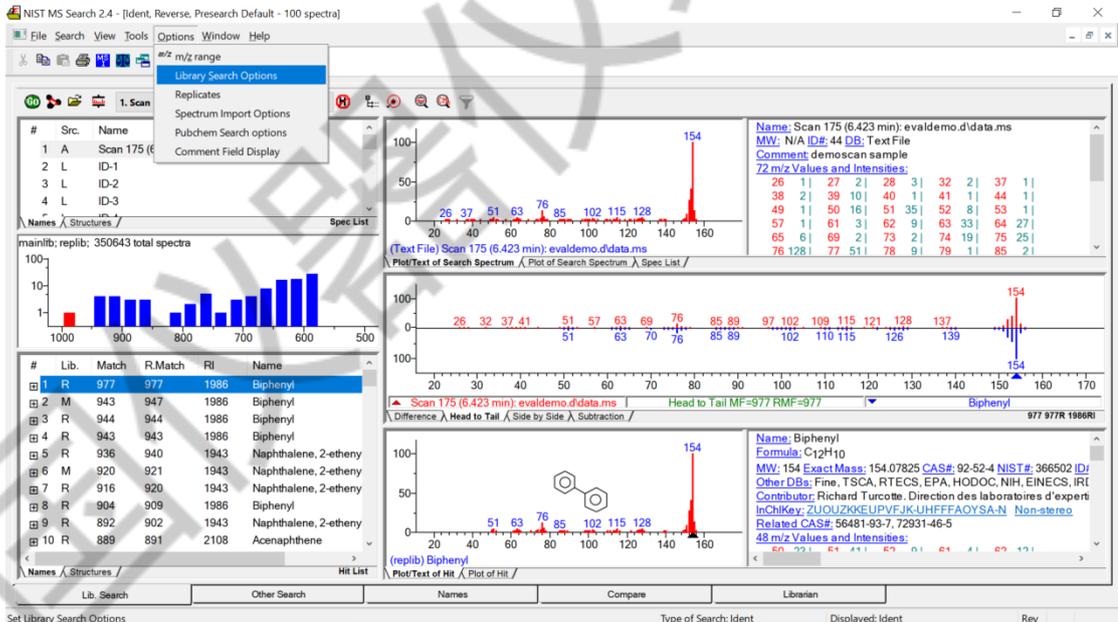


图 10 NIST Search 结果的柱子极性选择

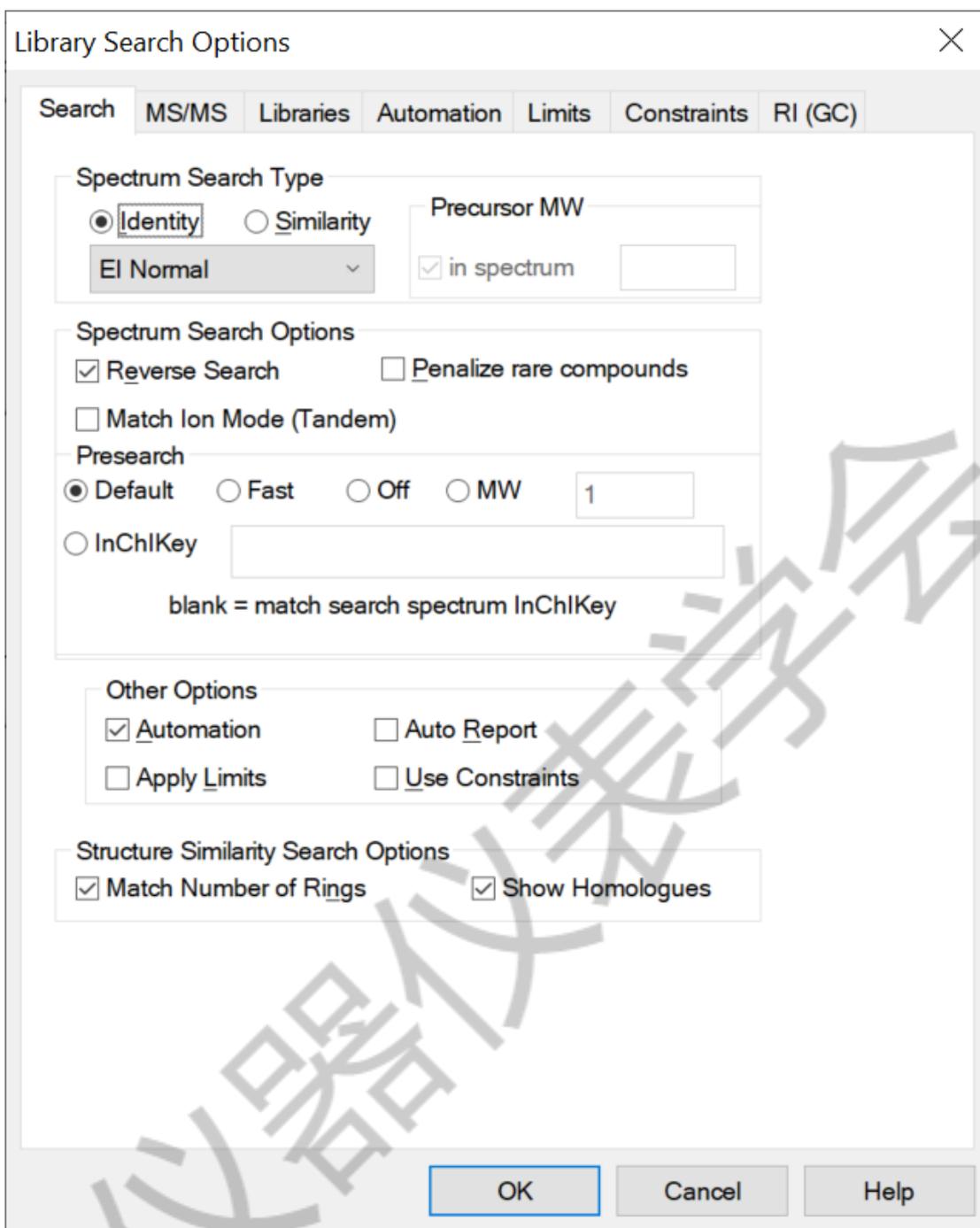


图 11 NIST Search 结果的柱子极性选择

在 RI (GC) 下面打勾，根据实际使用的柱子，选择柱子极性，非极性（例如 DB-1），弱极性（例如 DB-5）或极性（例如 DB-Wax）。

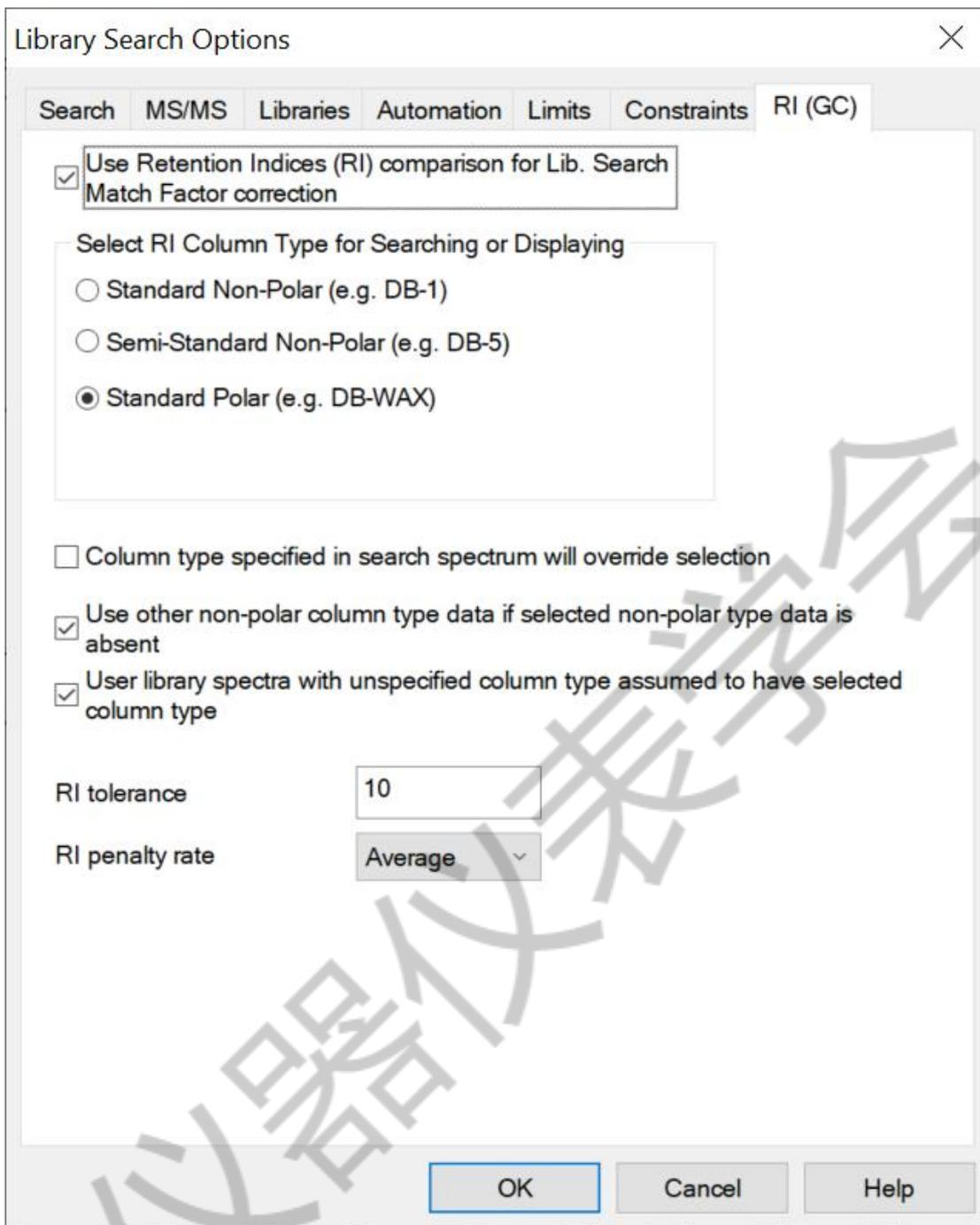


图 11 NIST Search 结果的柱子极性选择

这样才能在检索结果里面看到检索到的化合物的谱库保留指数了，就可以用于结果对比。

6 其它

可以在文件检索下面的 penalty calculation 选择 Retention Index。

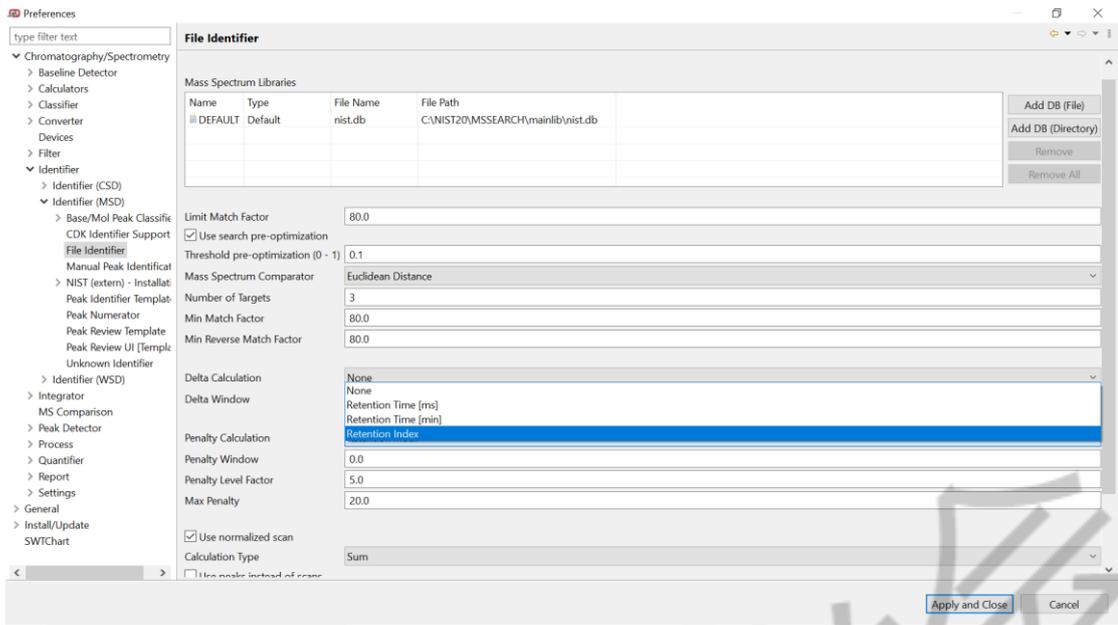


图 12 文件检索使用 RI 校验

第四部分完。