

OpenChrom 软件使用介绍 5_Amdis 解卷积使用

朱建设

(哲斯泰（上海）贸易有限公司，上海 201206)

前面说过 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，文件检索，保留指数计算及校对。本篇介绍 Amdis 解卷积使用。

1 Amdis 色谱质谱数据解卷积峰检出设置

要使用 Amdis 色谱质谱数据解卷积峰检出功能，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----Peak Detector>Amdis(extern)。

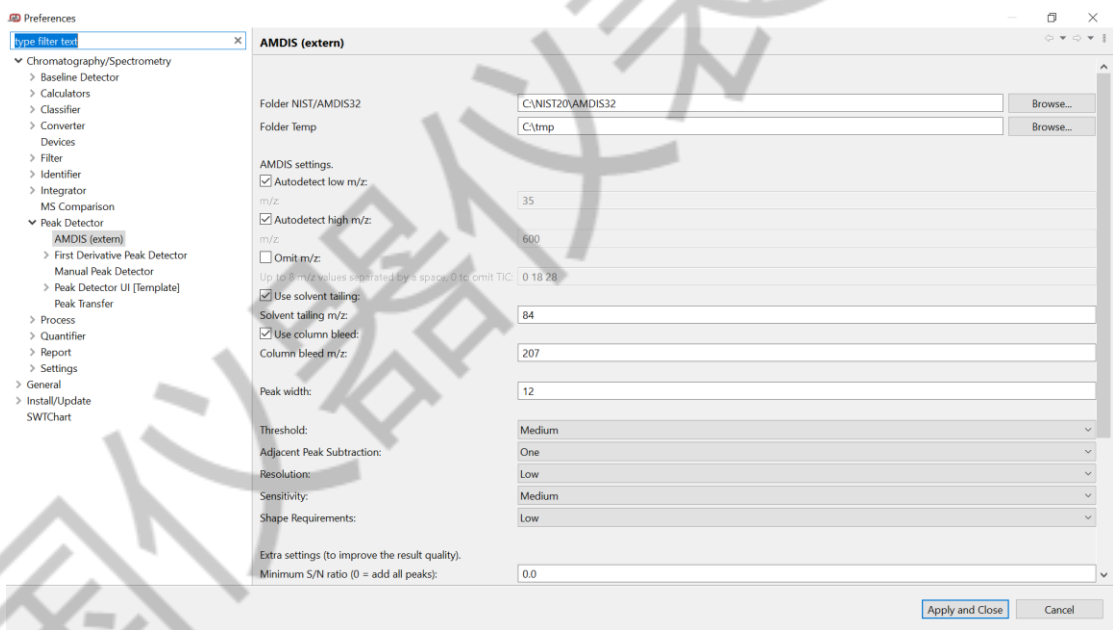


图 1 Amdis 色谱质谱数据解卷积峰检出设置

要使用 Amdis 解卷积，需要事先安装 Amdis 软件。在电脑上面找到 Amdis32 Folder 文件夹的位置放入。Select Folder，Apply and Close。另外对质谱离子 m/z 的范围，溶剂离子，柱流失离子，峰宽度，检出灵敏度，分辨率，峰锐度等按需要进行相应设置。可以参考 Amdis

的手册。

C:\tmp 文件夹需要实现建立。在 Folder Temp 中输入 C:\tmp（必须）。

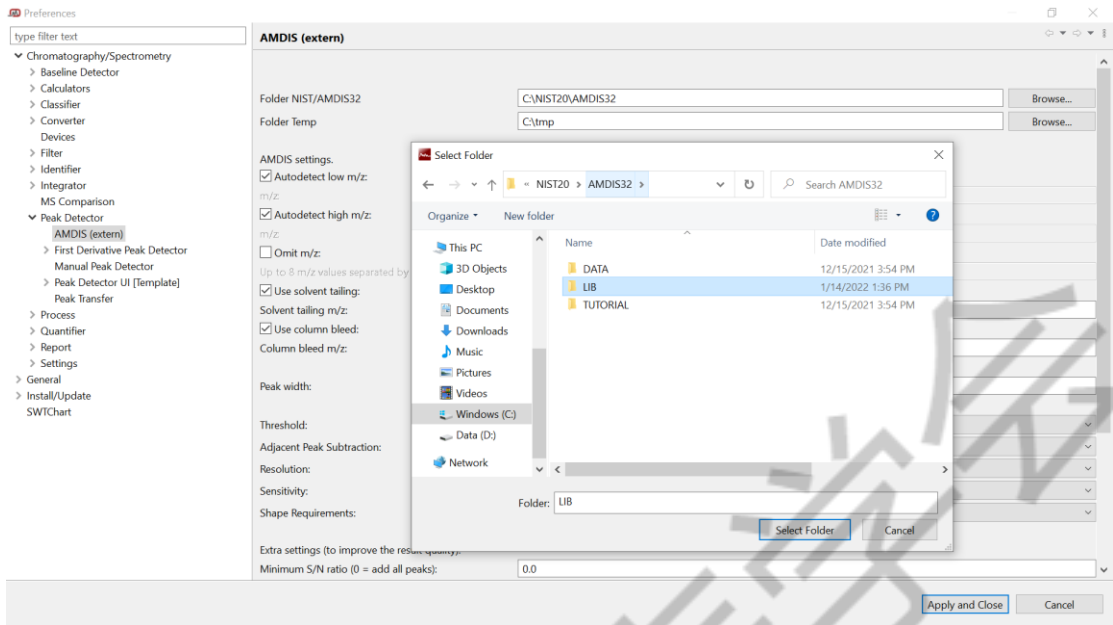


图 2 Amd is 色谱质谱数据解卷积峰检出设置

2 解卷积检出及检索

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>Amdis(extern)。

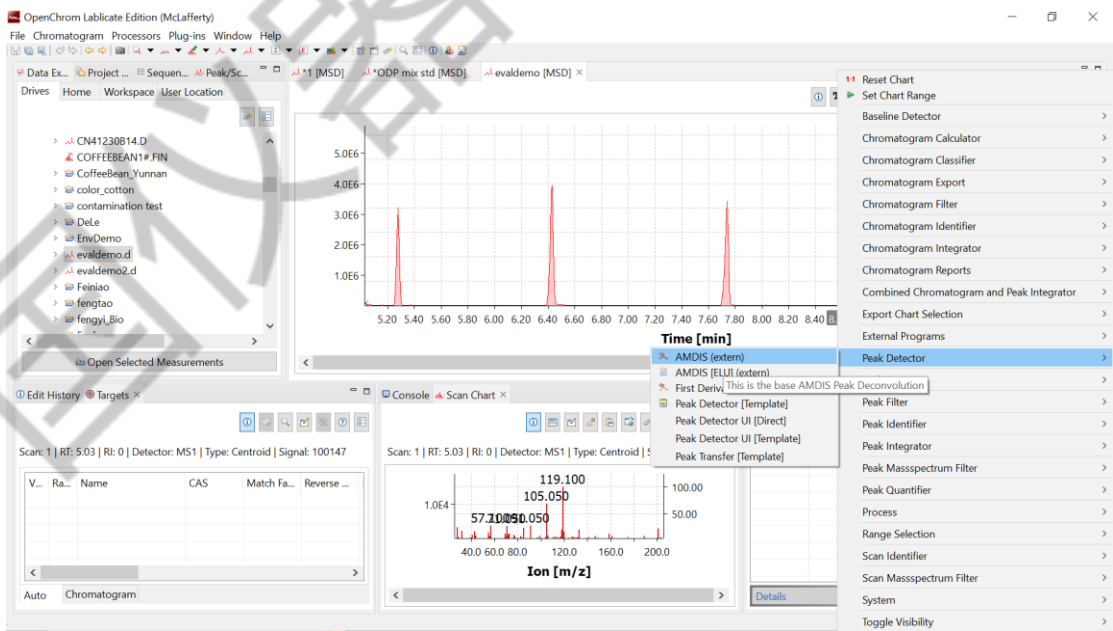


图 3 Amdis 色谱质谱数据解卷积峰检出

Edit Processor Options, use System Options, Finish:

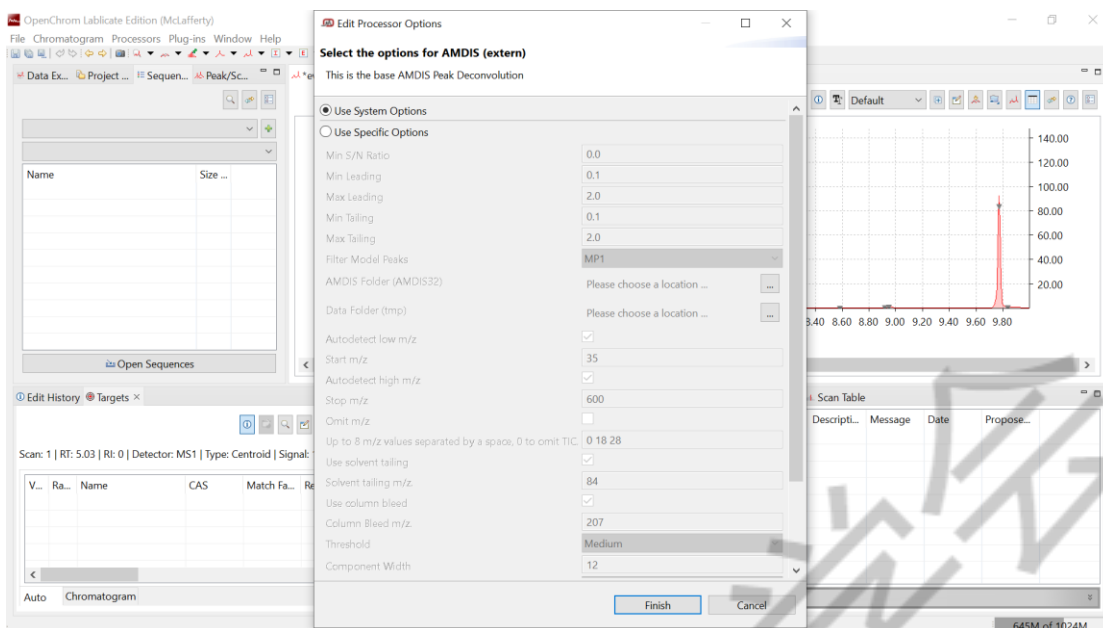


图 4 Amdis 色谱质谱数据解卷积峰检出

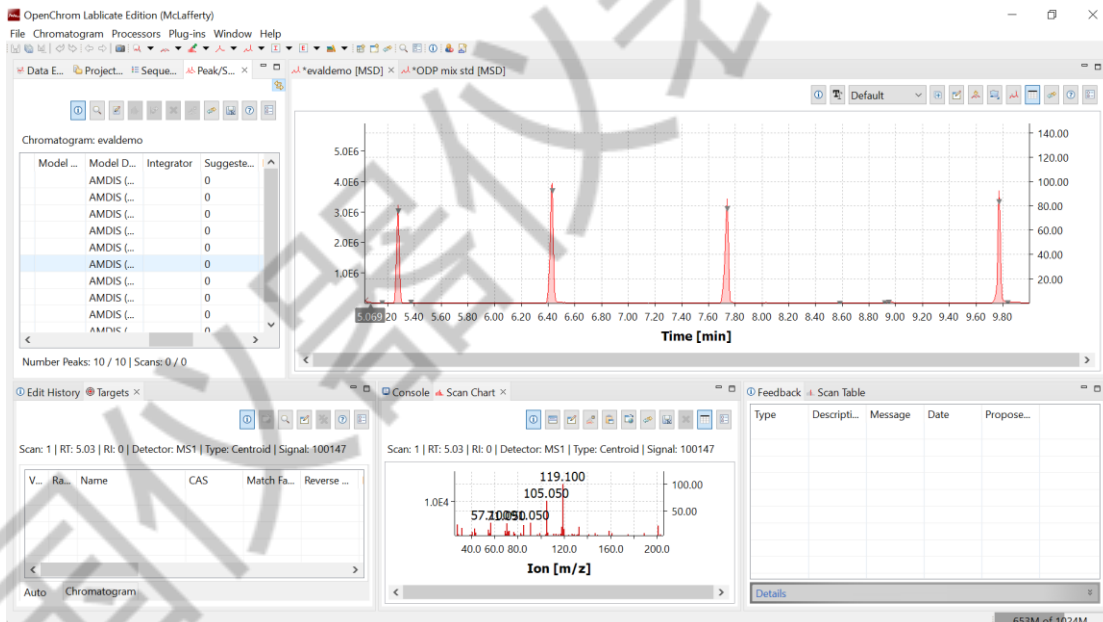


图 5 Amdis 色谱质谱数据解卷积峰检出

软件会自动通过 AMDIS 系统运行，AMDIS 窗口会自动弹出（或者在 Windows 下方的显示栏看到 Amdis 的图标），在处理完数据后会自动关闭退出。经过 Amdis 解卷积后，

在左上角的 Peaks/Scan List 就有 Model Description 列显示 Amdis(extern)。同时也会在右下方的 Feedback 有 Amdis 检出的信息。

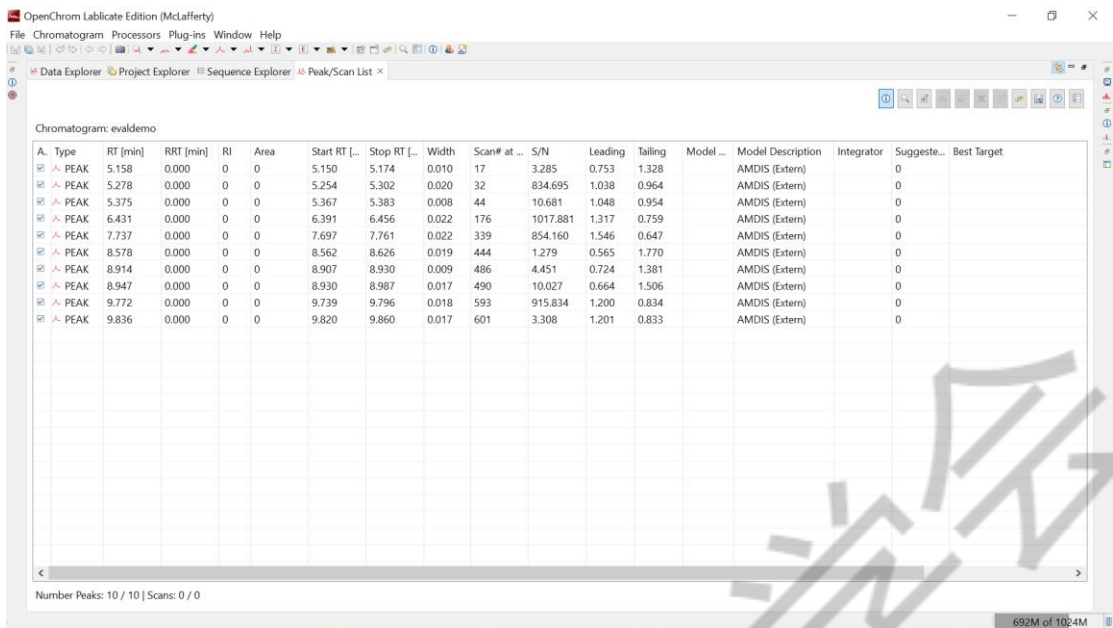


图 6 Amdis 色谱质谱数据解卷积峰检出结果

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>NIST(extern)或 Library File (MS)。参见前面第一或第三篇文章。得到最终结果。



图 6 检索结果

本文只是一个简单的例子，复杂的数据可以按照相同的方法来完成。

第五部分完。

中国仪器仪表杂志