

OpenChrom 软件使用介绍 6_Process 处理过程使用

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, Amdis 解卷积应用。本篇介绍 Process 处理过程使用。

在第一篇介绍了 GCMS 数据处理的基本流程, 即下面的三部曲。

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。

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。

这样的方式处理数据, 需要至少 3 步的操作来完成。如果加上峰过滤, 就还需增加一个操作步骤。本篇介绍处理过程方法, 把几个处理操作整合在一起, 一次完成。

1 创建 process method 处理过程方法

使用前也要对 Preference, 个性化设置进行相应的设置。

1.1 在 Processors 菜单打开 Create Process Method

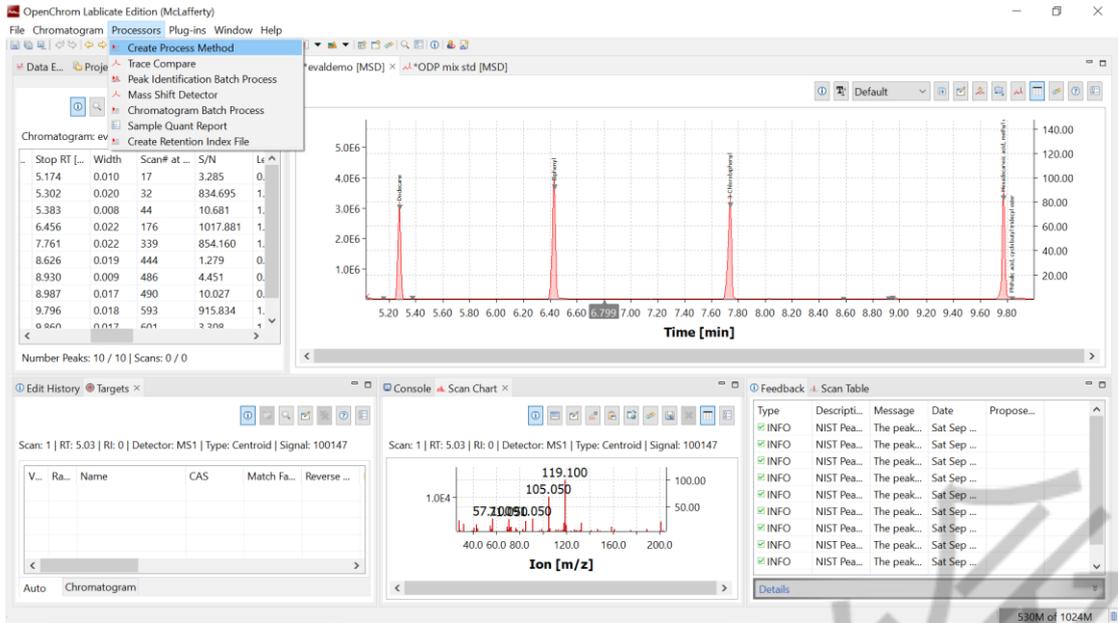


图 1 打开 Create Process Method

1.2 选择要处理的数据类别

选择数据类别，例如光谱，不同色谱检测器的数据。对于 GCMS 数据，选择 MSD (quadrupole, IonTrap, ...), Finish.

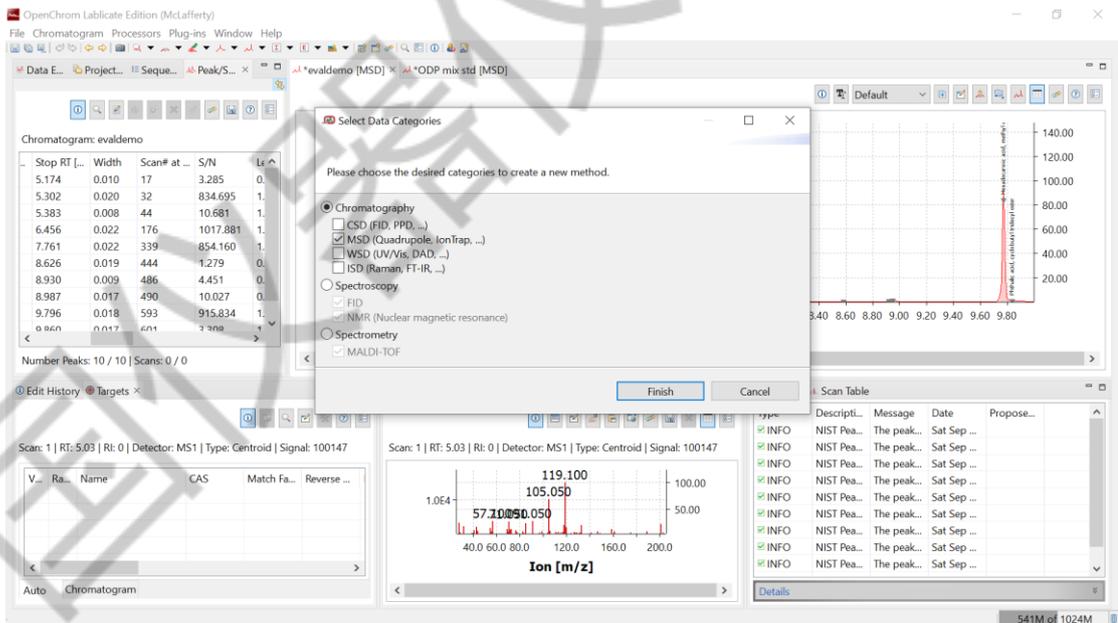


图 2 选择要处理数据类别

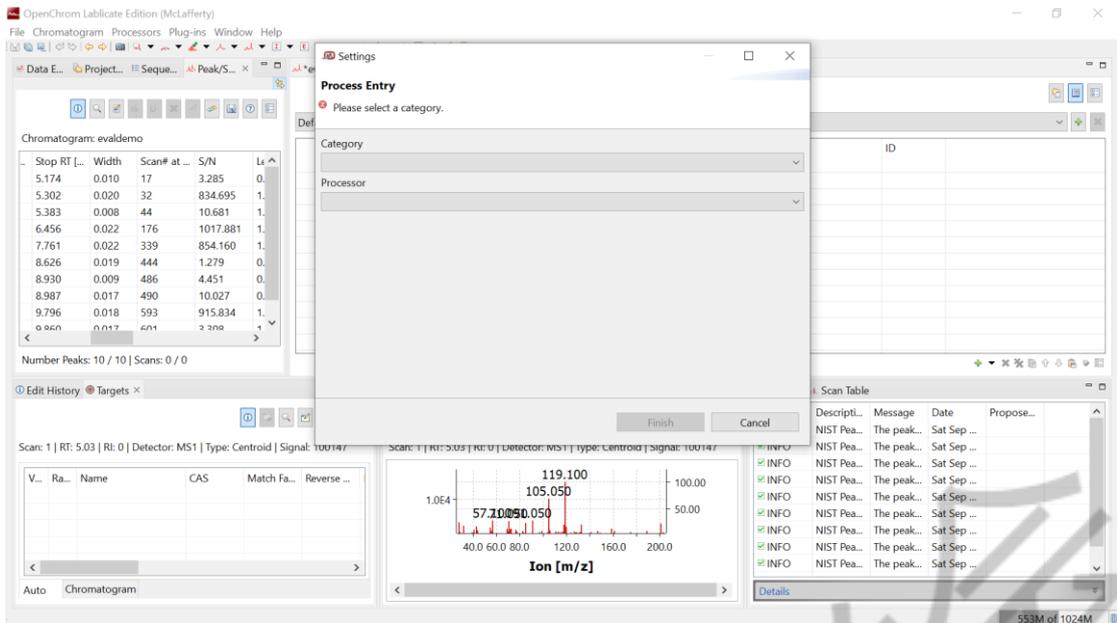


图 5 处理过程方法

首先添加峰检出方法。注意处理过程方法设置的次序必须是峰检出，峰积分，峰检索。Setting 设置，Process Entry，在 Category。选择 Peak Detector。

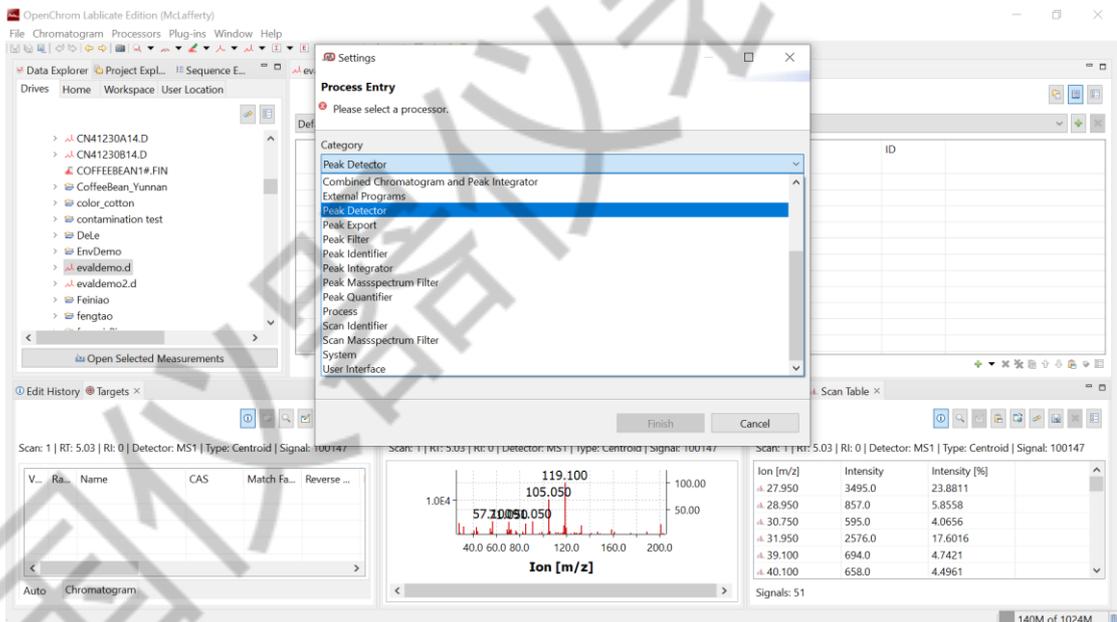


图 6 选择处理方法

在 Process 选择 First Detective

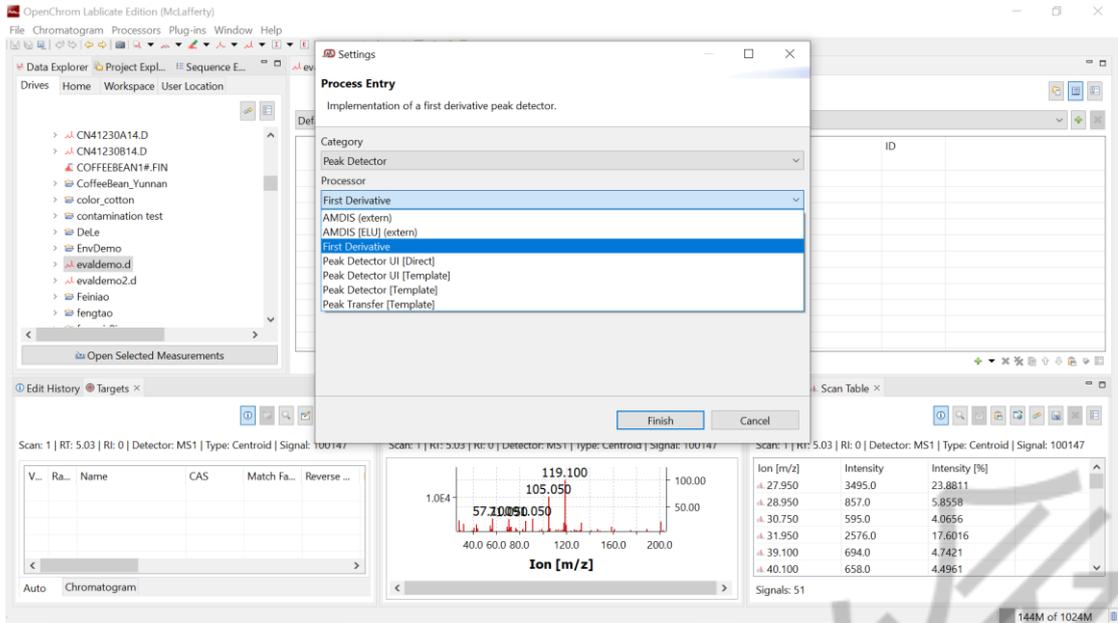


图 7 选择峰检出方式

Finish

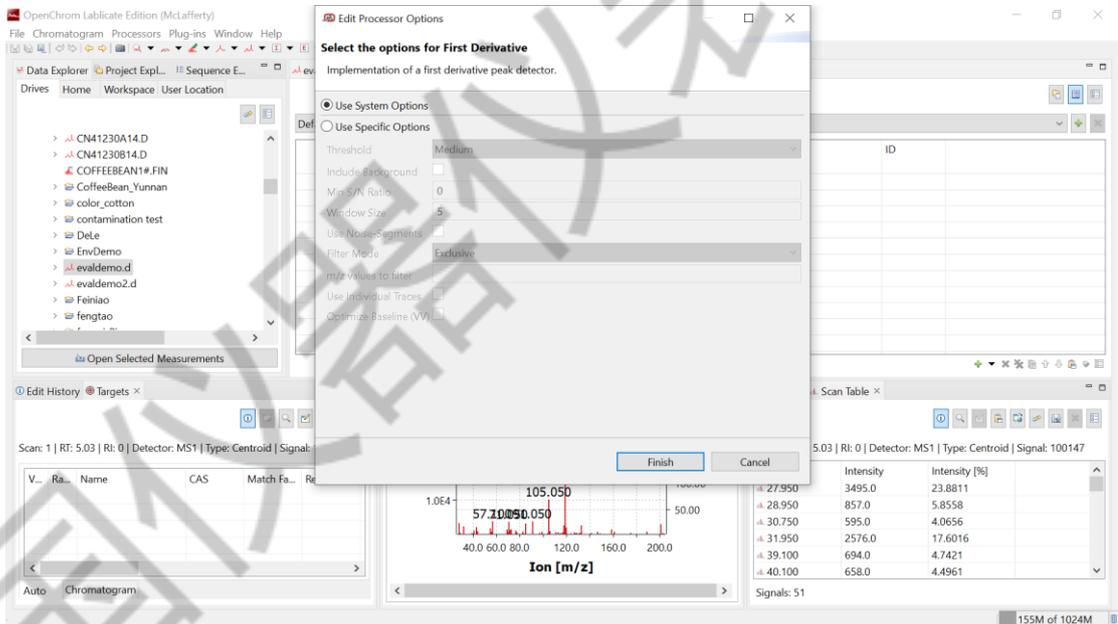


图 8 选择峰检出方式

Finish, 可以看到峰检出的方法已经加入到第一行。

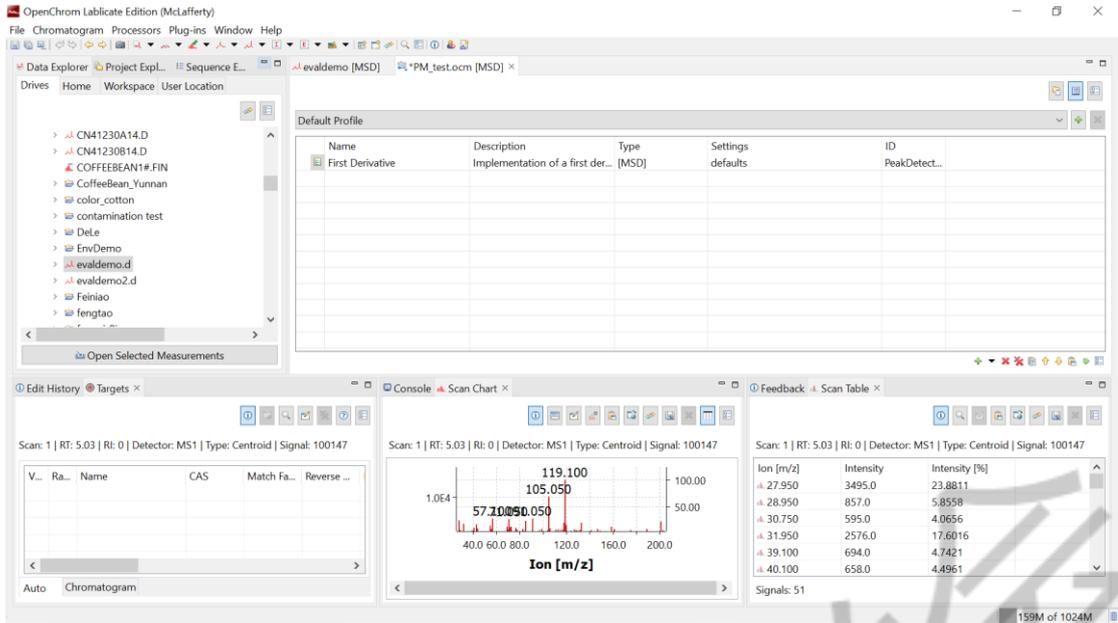


图 9 添加峰检出方式

同样方法添加积分器。

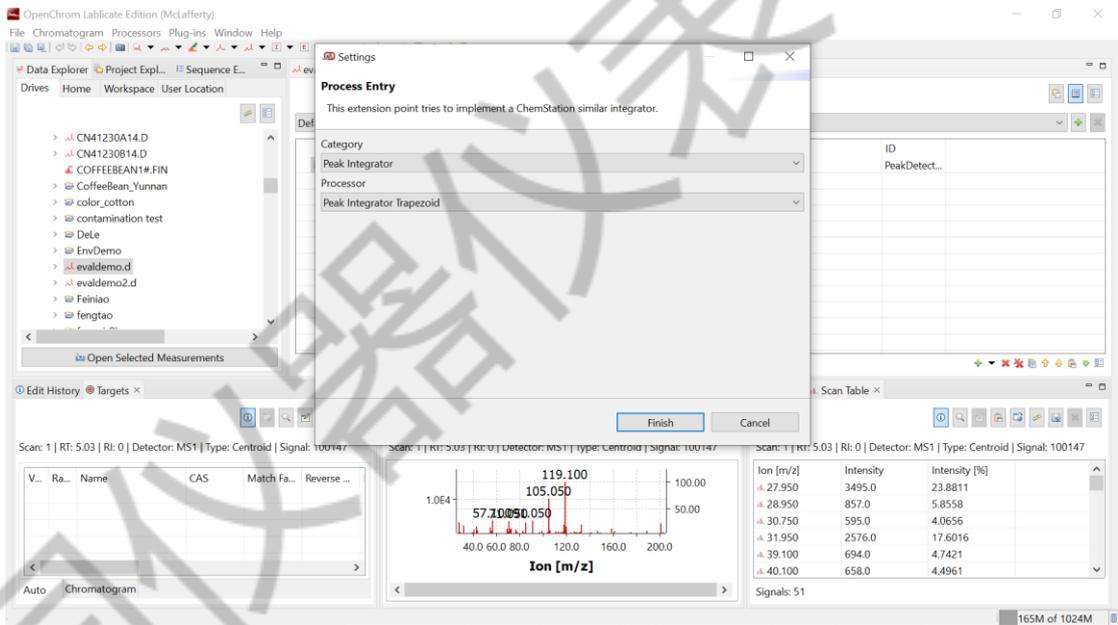


图 10 添加峰积分器

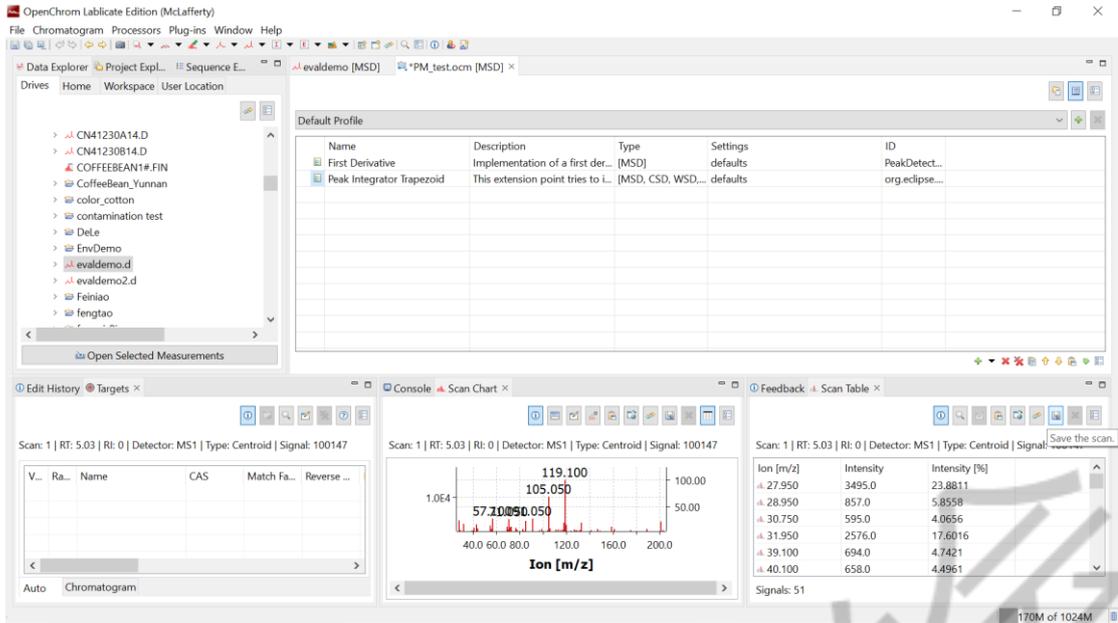


图 11 添加峰积分器

同意方法，来添加峰检索

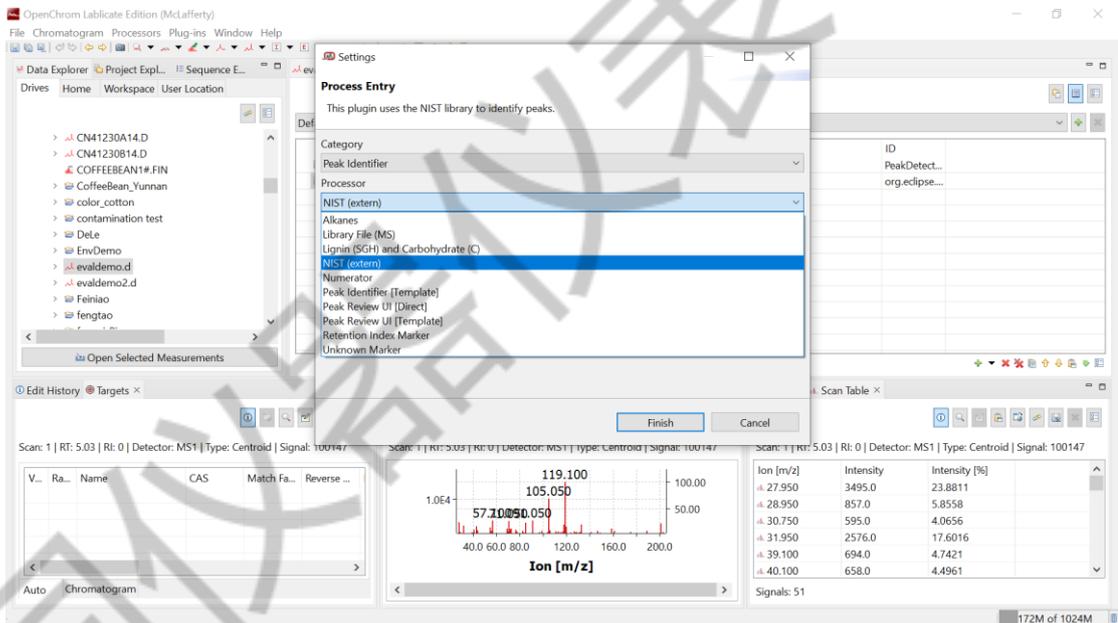


图 12 添加峰检索

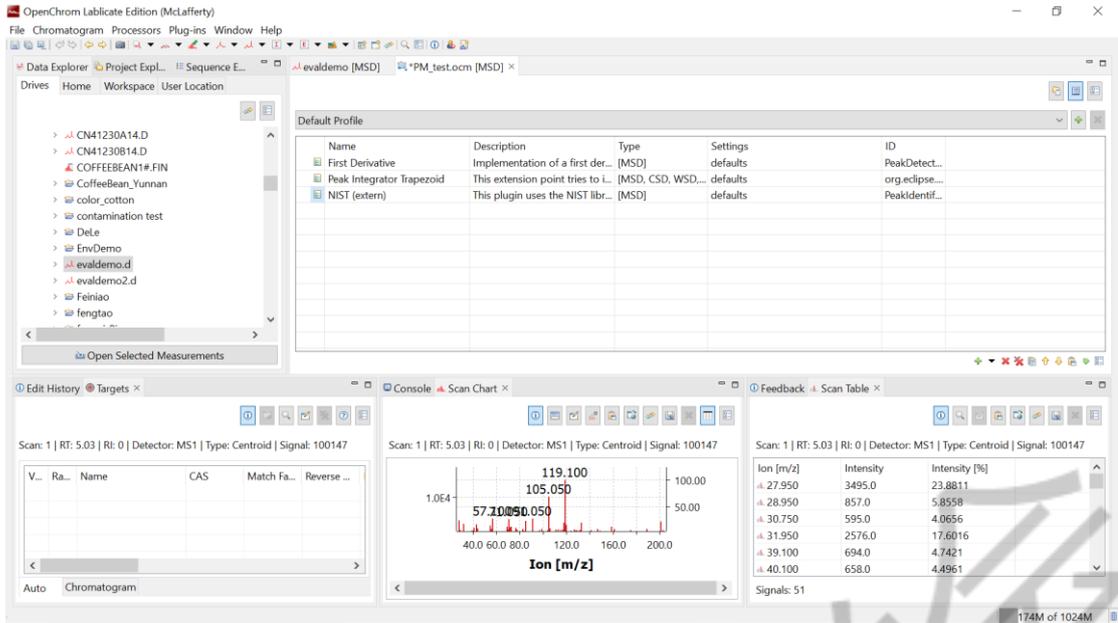


图 13 添加峰检索

同理，如果使用峰过滤 Peak Filter（按要求过滤部分不需要的峰）。

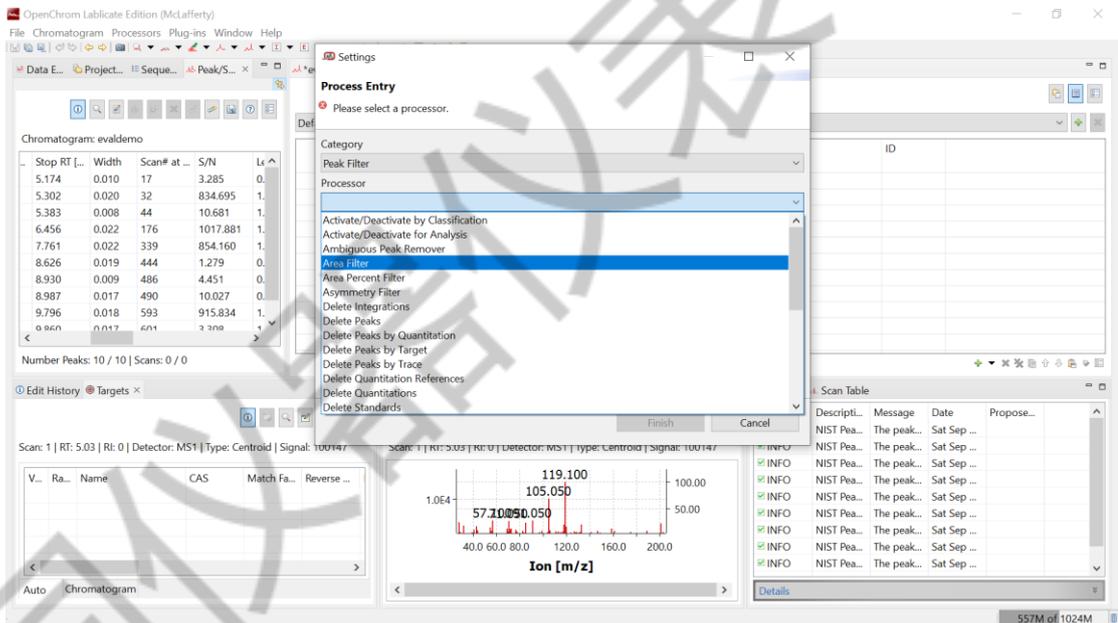


图 14 添加峰过滤

最后，点击*PM_test.ocm[MSD]，OK，保存 process method 处理过程方法。

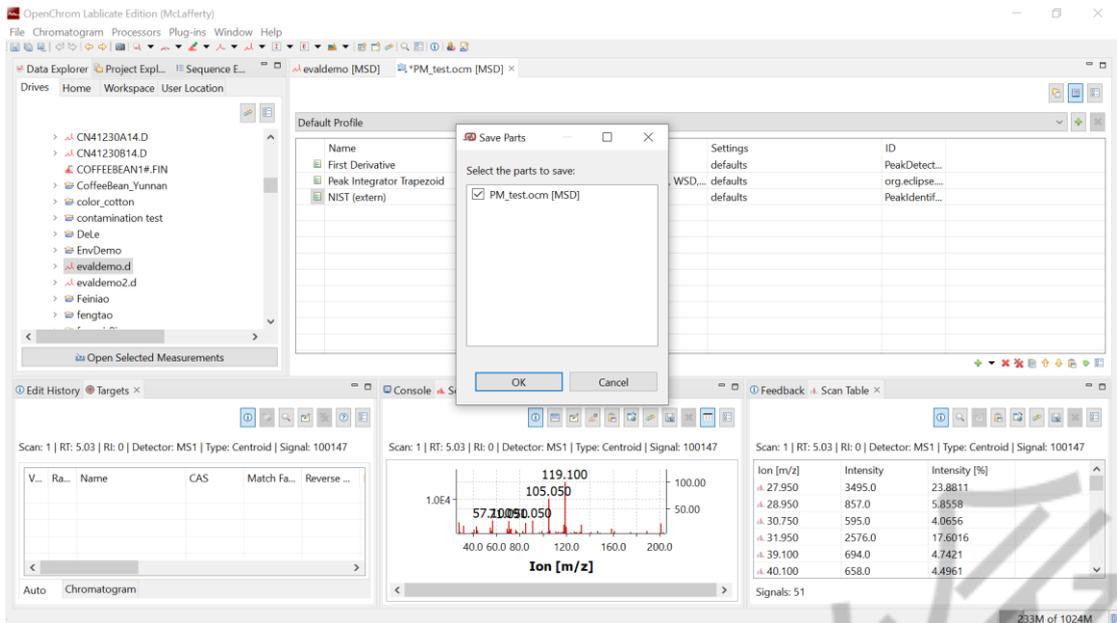


图 15 退出并保存

2 使用 process method 处理过程方法

点击右上方的 Show the method toolbar 工具按钮。

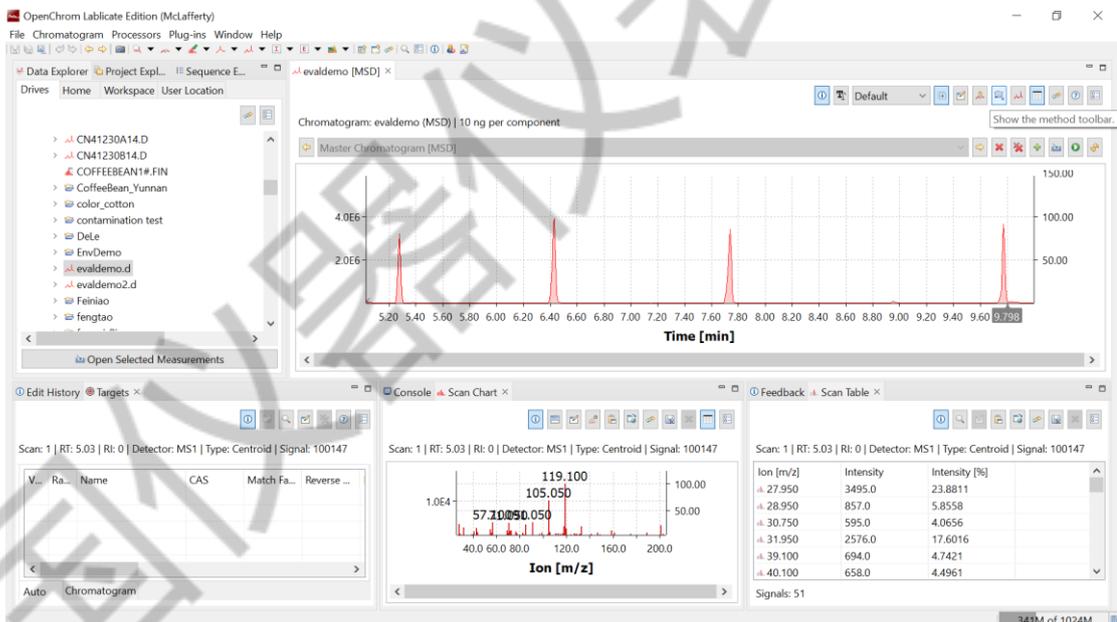


图 16 方法按钮

在第二行可以看到 method 工具栏。

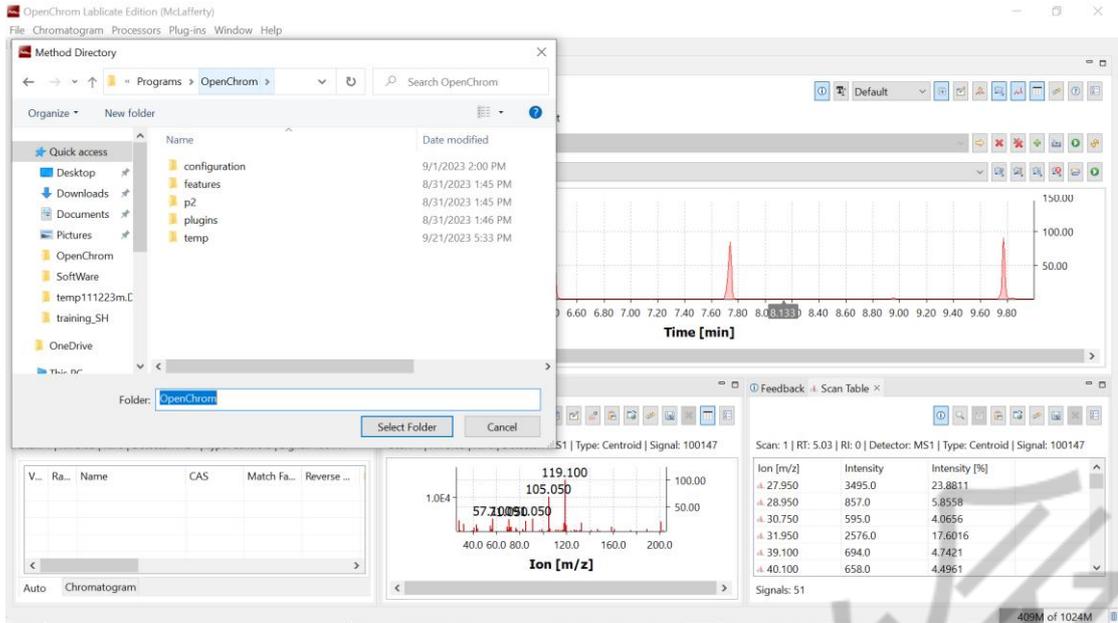


图 19 选择方法路径

Select Folder.

调用方法：在方法工具栏前面选择前面建立的处理过程方法 PM_test.ocm。

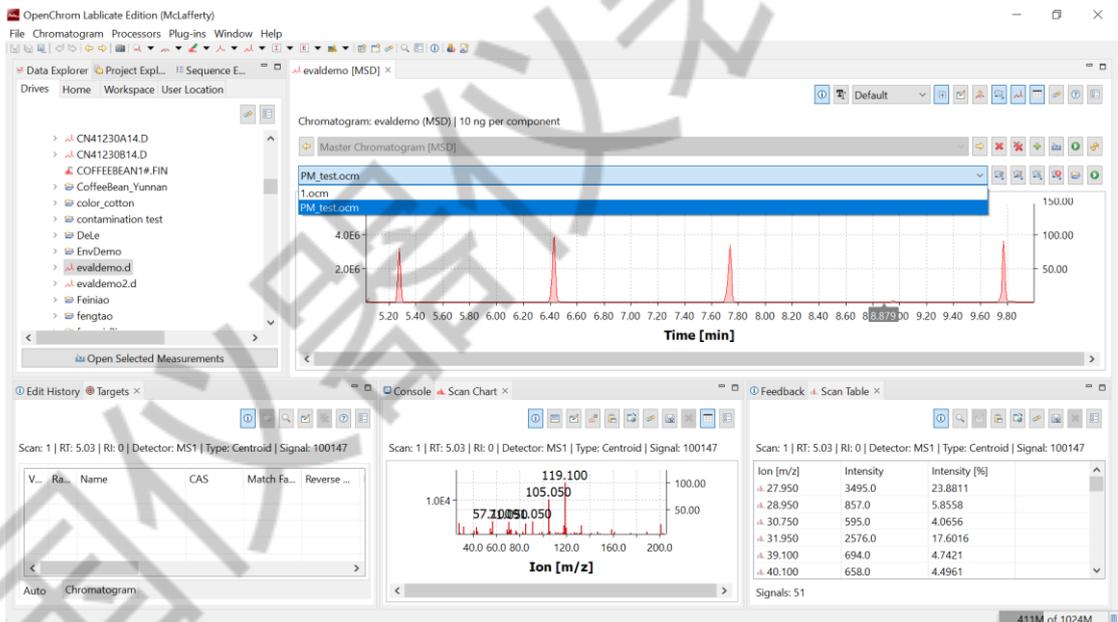


图 20 选择处理过程方法

点击绿色箭头，加载处理过程方法。

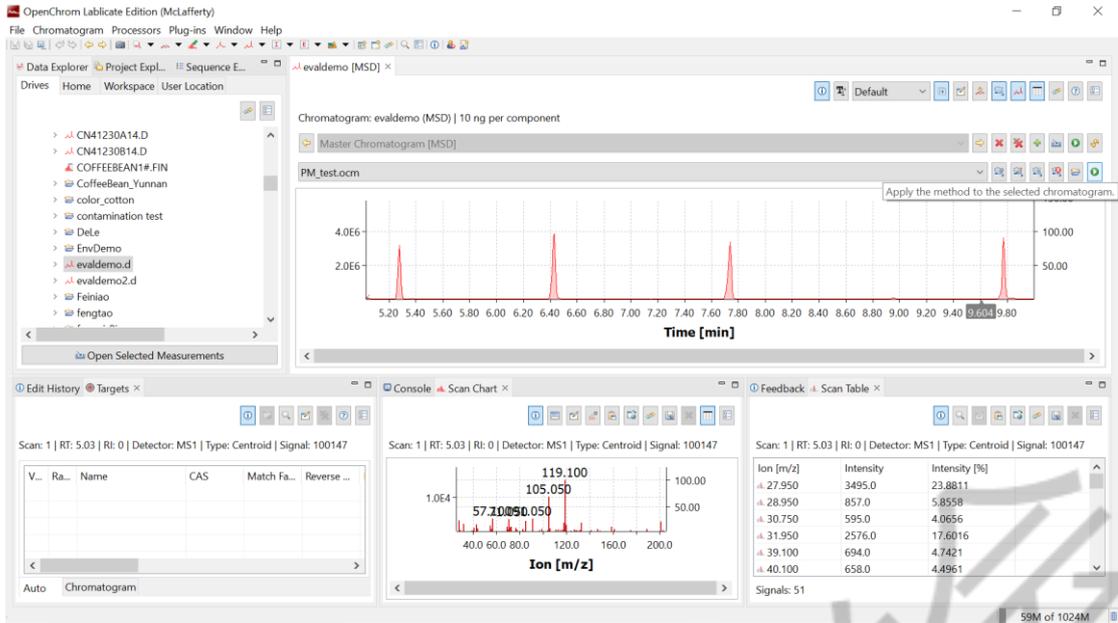


图 21 加载处理过程方法

处理过程方法在运行。

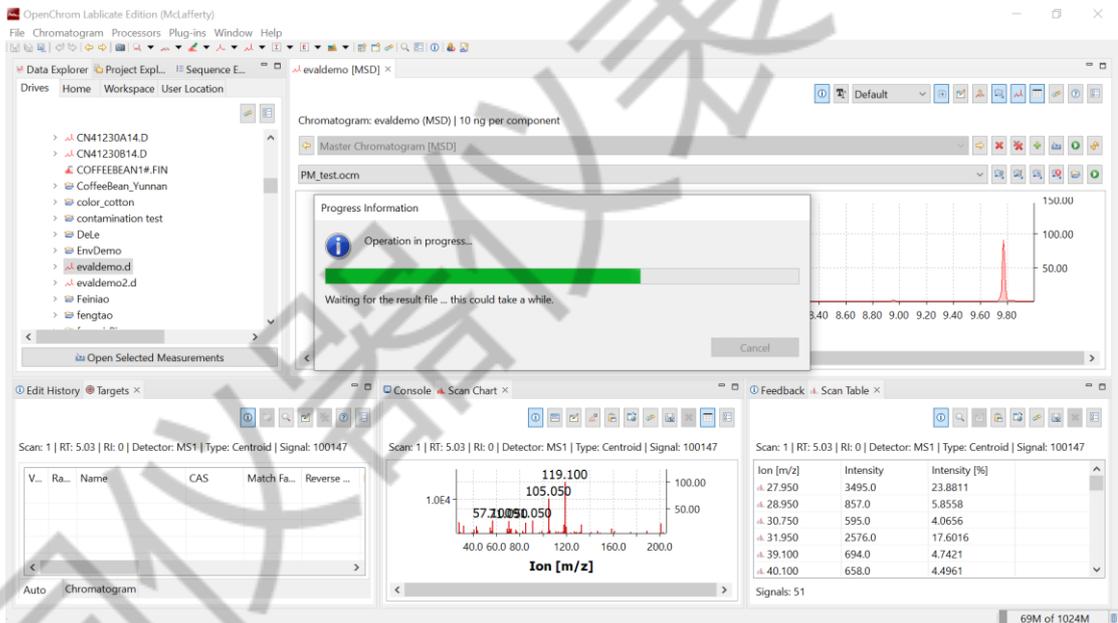


图 22 处理过程方法运行

过一会后（处理时间取决于数据大小和电脑快慢），就可以看到经过峰检出，峰积分和峰检索的结果了。

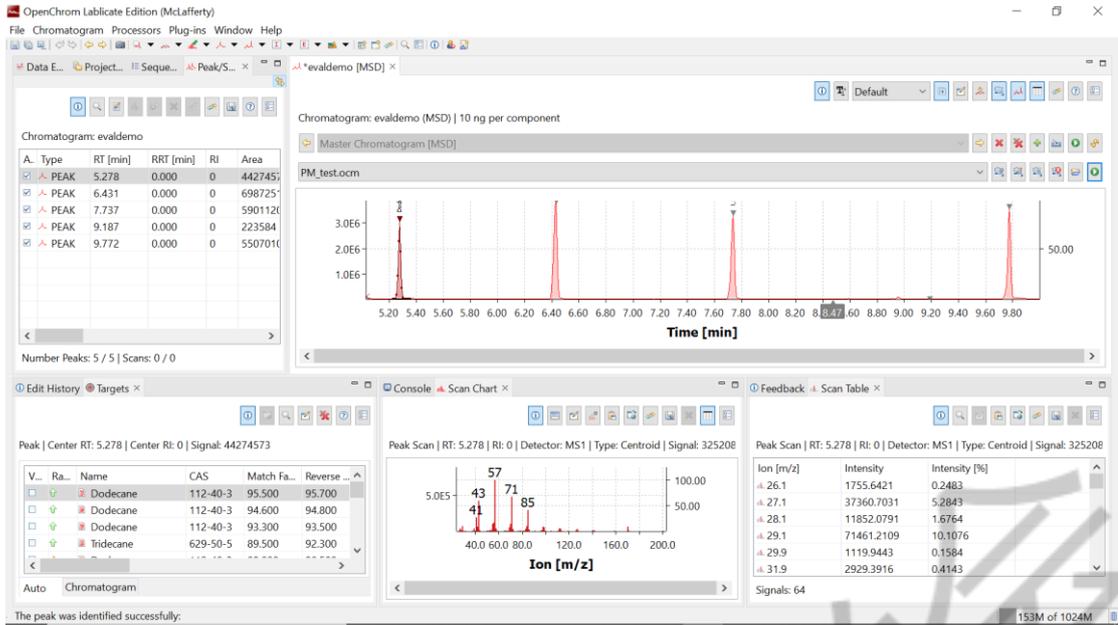


图 23 峰检出，峰积分和峰检索结果

A. Type	RT [min]	RRT [min]	RI	Area	Start RT [min]	Stop RT [min]	Width	Scan# at ...	S/N	Leading	Tailing	Model ...	Model Description	Integrator	Suggeste...	Best Target
PEAK	5.278	0.000	0	44274573	5.230	5.358	0.020	32	882.280	1.041	0.961	First Derivative	Trapezoid	0	Dodecane	
PEAK	6.431	0.000	0	69872519	6.367	6.584	0.022	176	1081.131	1.322	0.756	First Derivative	Trapezoid	0	Biphenyl	
PEAK	7.737	0.000	0	59011203	7.673	7.841	0.023	339	943.788	1.522	0.657	First Derivative	Trapezoid	0	1,1'-Biphenyl, 4-chloro-	
PEAK	9.187	0.000	0	223584	9.155	9.227	0.023	520	3.268	1.303	0.767	First Derivative	Trapezoid	0		
PEAK	9.772	0.000	0	55070101	9.683	9.965	0.018	593	1011.485	1.218	0.821	First Derivative	Trapezoid	0	Hexadecanoic acid, methyl...	

Number Peaks: 5 / 5 | Scans: 0 / 0

图 24 Peak/Scan List

这样处理 GCMS 数据更为快捷省事。

第六部分完。