

OpenChrom 软件使用介绍 7_其它功能用法

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, Process 处理过程使用。本篇介绍一些其它功能用法。

1 色谱图上面鼠标右键菜单部分功能用法

这部分的功能较多, 一些部分功能用法前面已经讲过了。现在了解一下其它一些功能用法。

1.1 色谱图显示范围设置

在色谱图显示不正常的情况, Set Chart Range。

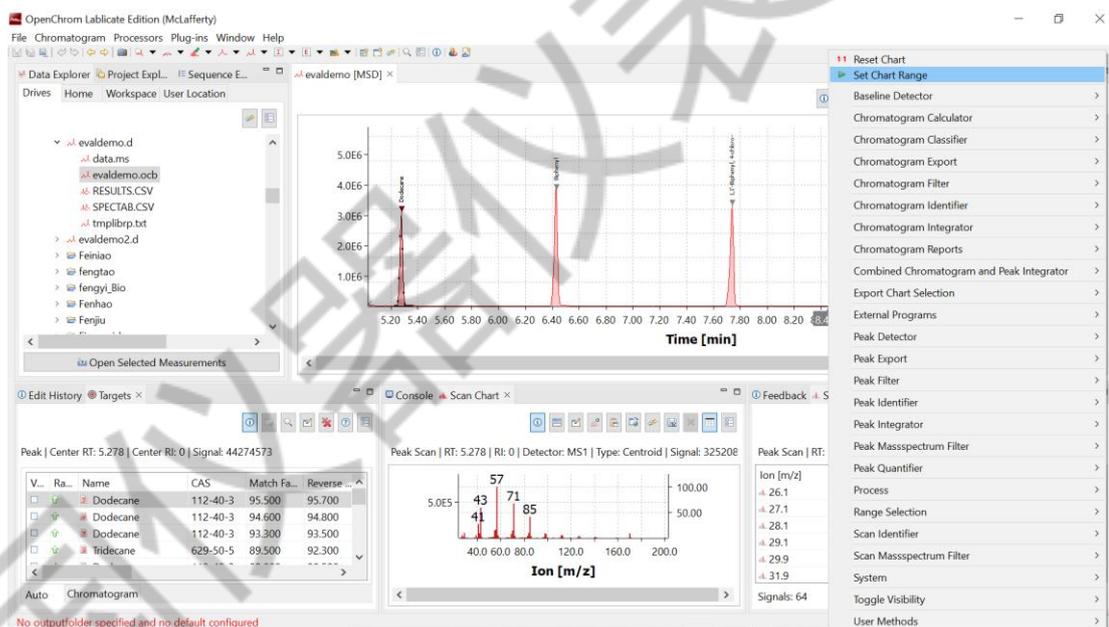


图 1 色谱图显示范围设置

选择合适的纵坐标和横坐标, OK 即可。

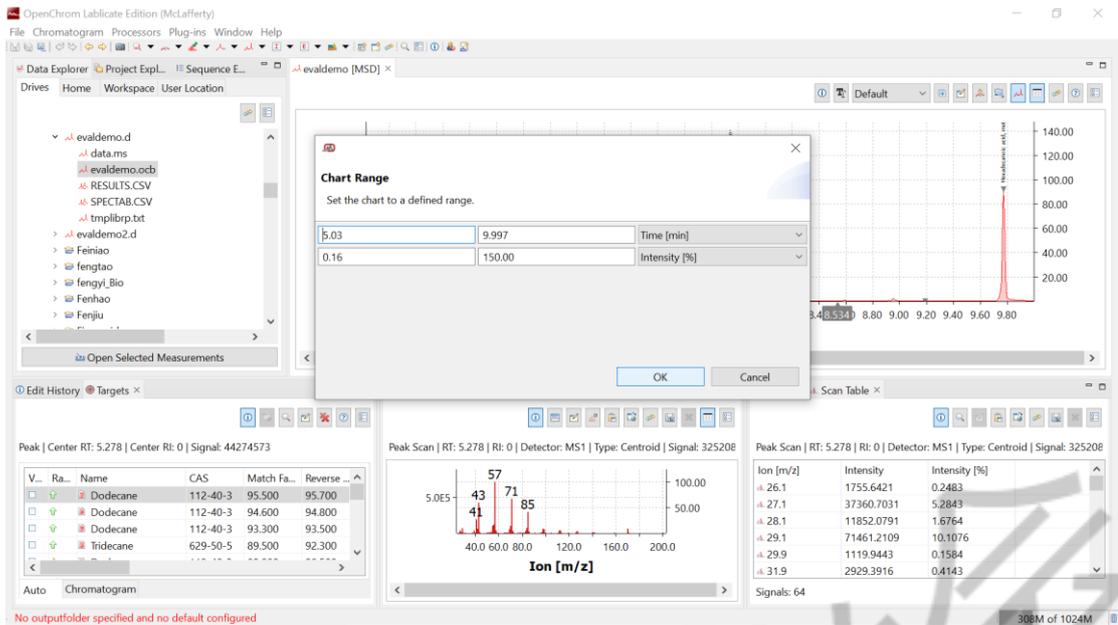


图 2 色谱图显示范围设置 2

1.2 导出色谱图

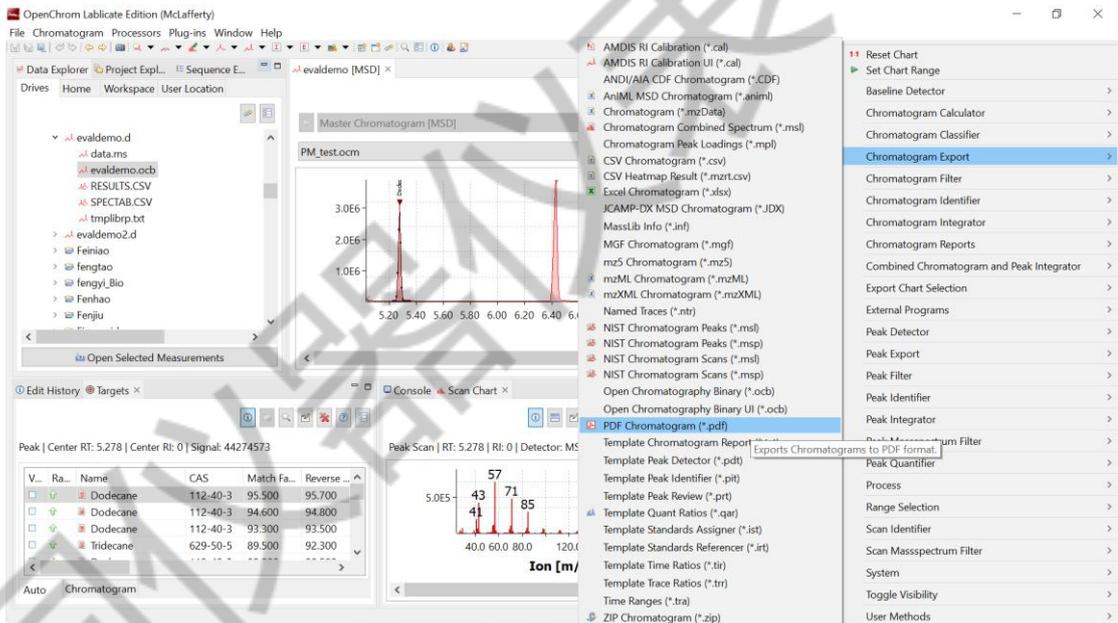


图 3 导出色谱图

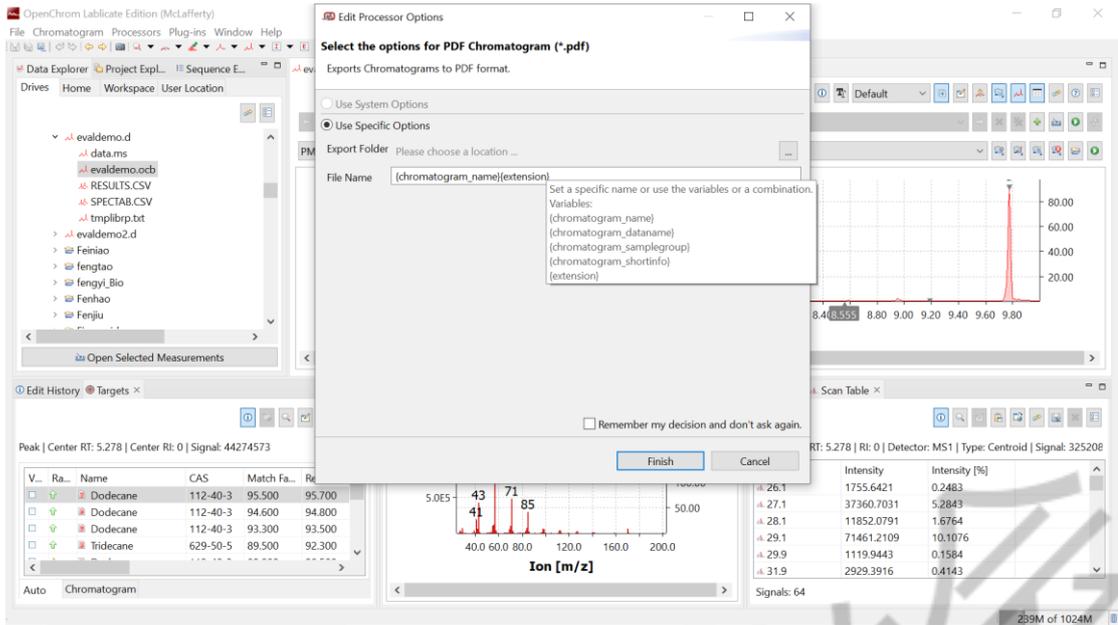


图 4 导出色谱图文件设置

选择或创建存储文件夹路径，例如 evaldemo.d/chart。OK

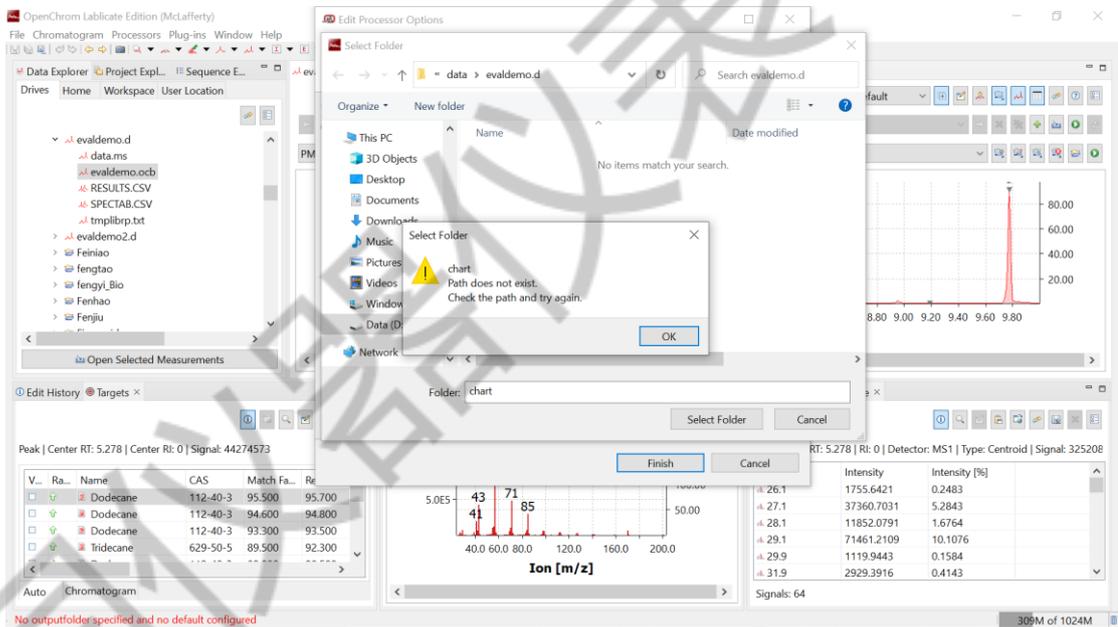


图 5 建立文件夹位置

输入名称，例如 demo，Finish。

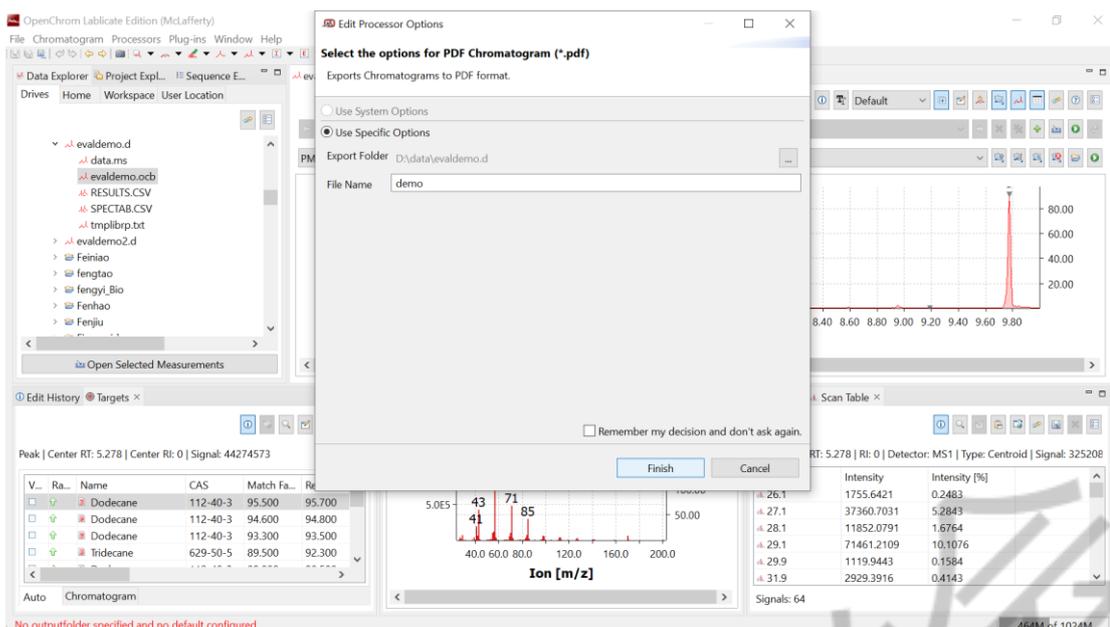


图 6 选择文件

这样就可以在选定的文件夹看到文件了。

evaldemo

Min Abundance: 6382.0

Max Abundance: 3995854.0

Min Retention Time: 5.03 Minutes = 301801 Milliseconds

Max Retention Time: 10.00 Minutes = 599820 Milliseconds

Scans: 621

Ions: 7638

Scan Delay: 5.03 Minutes = 301801 Milliseconds

Scan Interval: 0.02 Minutes = 965 Milliseconds

This chromatogram has been brought to you by OpenChrom (<http://www.openchrom.net>).

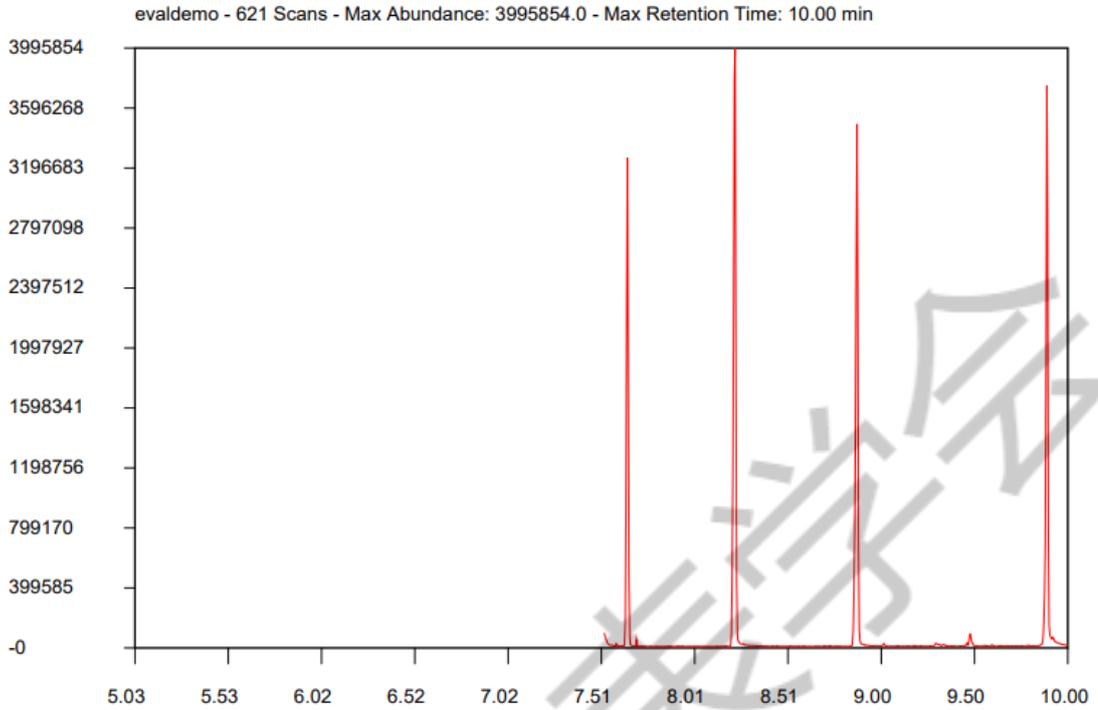


图 7 导出文件

同理，如果要输出出色谱图 excel 格式数据，请选择 excel。

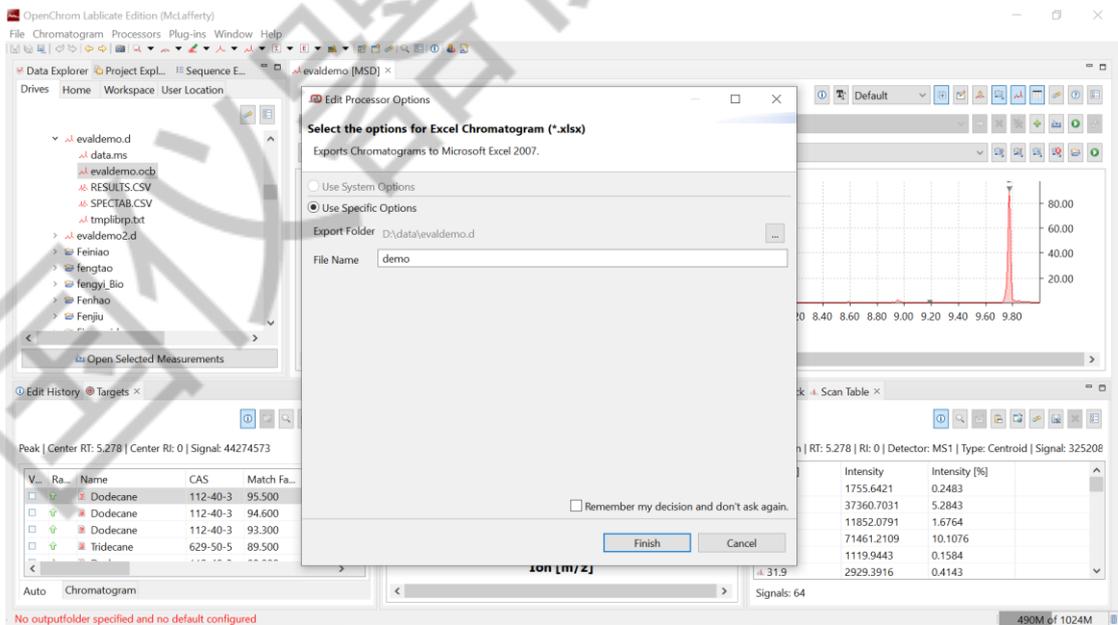


图 8 选择 Excel 格式

就会得到色谱图 excel 格式的数据。

27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
0.000	3495.000	857.000	0.000	595.000	2576.000	0.000	0.000	0.000	0.000
584.000	3015.000	0.000	0.000	0.000	3315.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	3315.000	731.000	0.000	0.000	1876.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	3584.000	801.000	0.000	0.000	2381.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	4425.000	0.000	0.000	0.000	2998.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	3224.000	0.000	0.000	0.000	3126.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	3505.000	656.000	0.000	0.000	2569.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	3994.000	0.000	0.000	0.000	2061.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	4005.000	0.000	0.000	0.000	2354.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	3505.000	0.000	0.000	0.000	2219.000	0.000	0.000	0.000	0.000

图 9 Excel 图谱数据格式

可以导出图 1 上面的其它各种格式的色谱图。

1.3 导出图片选择 Export Chart Section

The screenshot displays the OpenChrom software interface. The main window shows a chromatogram with a peak at 5.278 minutes. A context menu is open over the chromatogram, listing export options: Comma Separated Values (*.csv), Copy Image to Clipboard, Image (*.bmp), Image (*.jpg), Image (*.png), Image R-Script (*.R), LaTeX Table (*.tex), Print, Scalable Vector Graphic [Template] (*.svg), and Tab Separated Values (*.tsv). The 'Export Chart Selection' option is highlighted. Below the chromatogram, a mass spectrum is shown with peaks at m/z 41, 43, 57, 71, and 85. The mass spectrum plot shows relative intensity versus m/z, with the base peak at m/z 57.

图 10 导出图片选择

Copy image to Clipboard 复制图到剪切板，可以在 word 软件等使用。

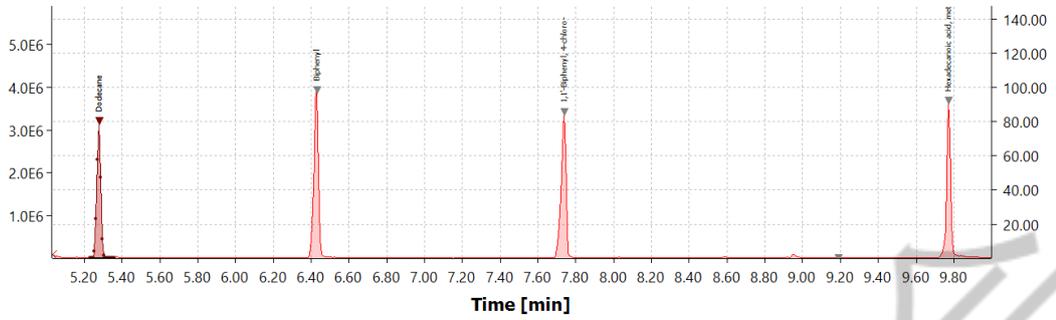


图 11 剪切板内容

导出图片格式

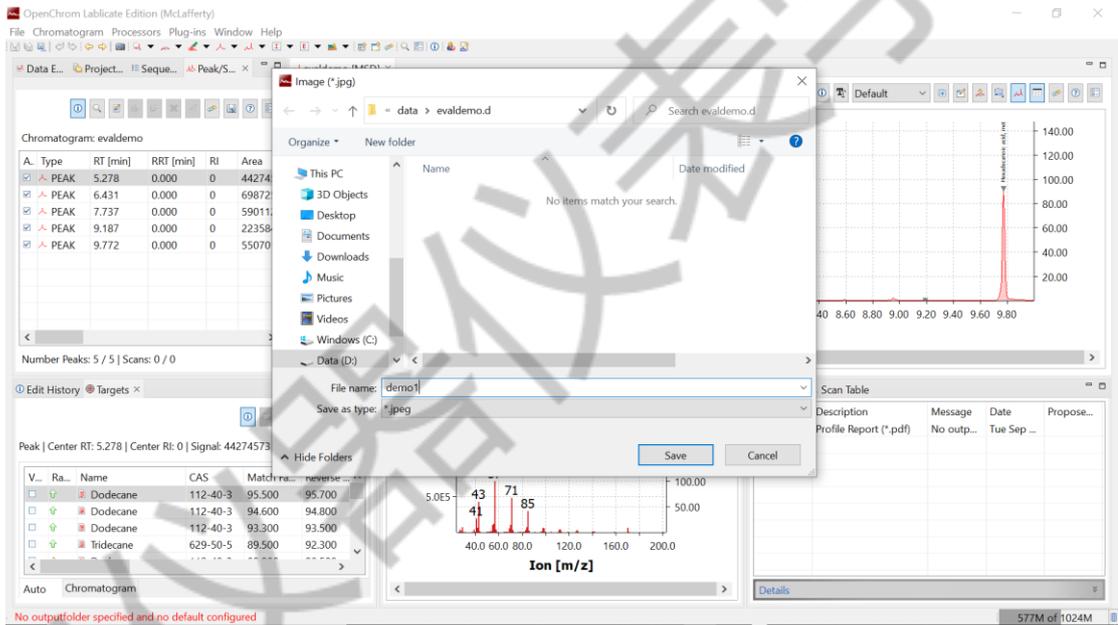


图 12 导出图片格式

图片设置

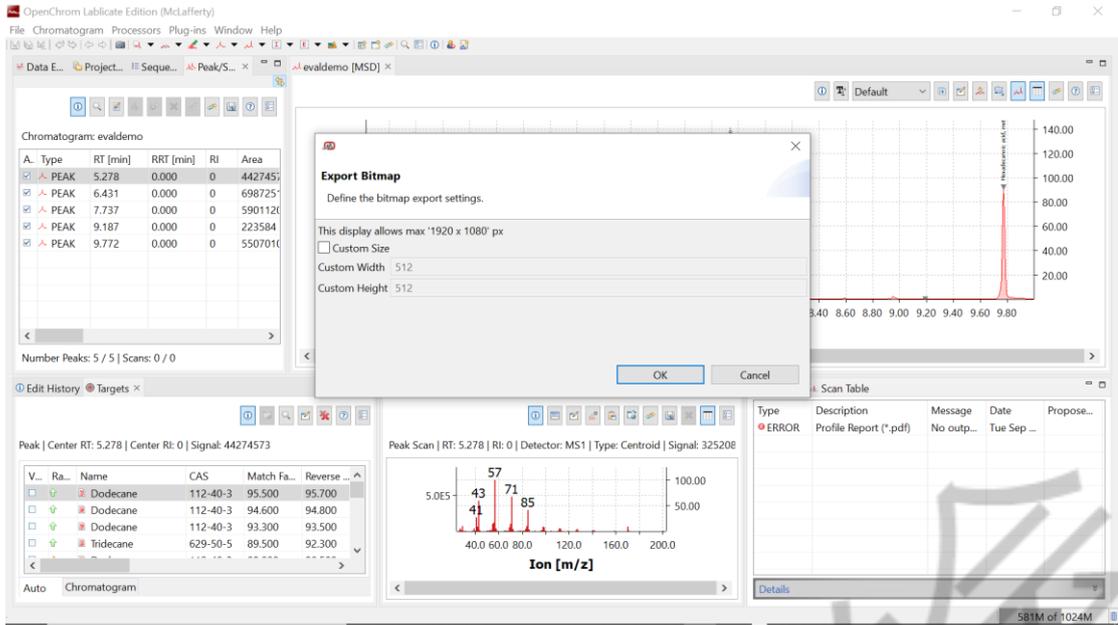


图 13 图片设置

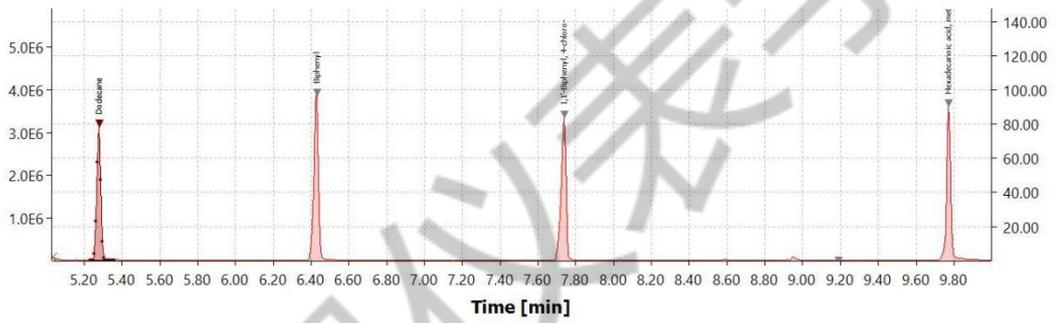


图 14 图片例子

或者打印 print 图片，也可以设置打印为 pdf 格式。

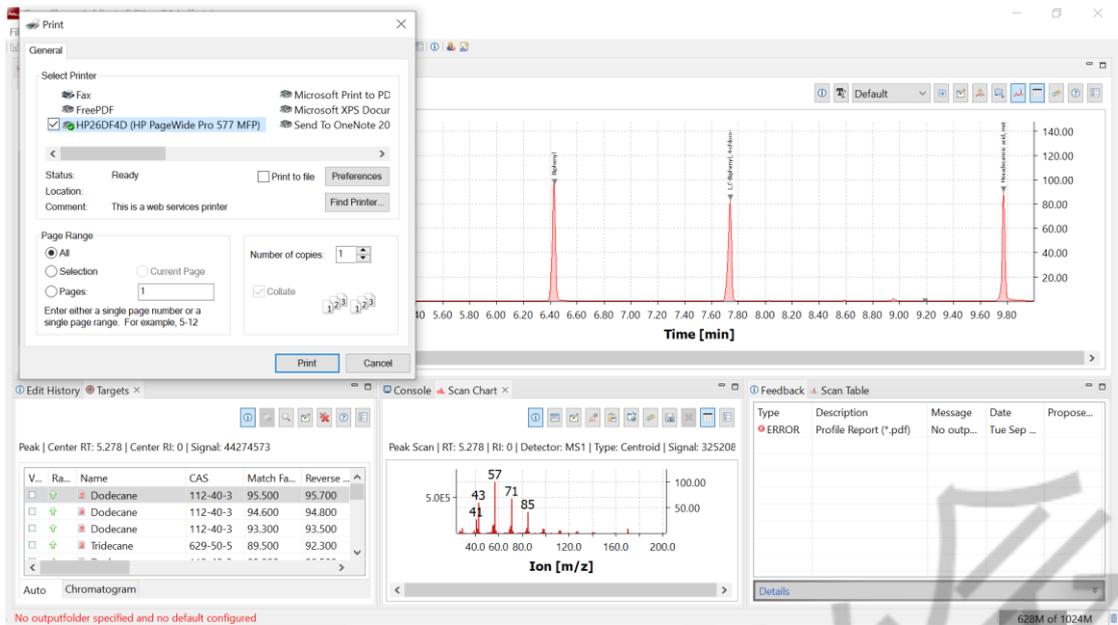


图 15 打印设置

2 色谱峰比较

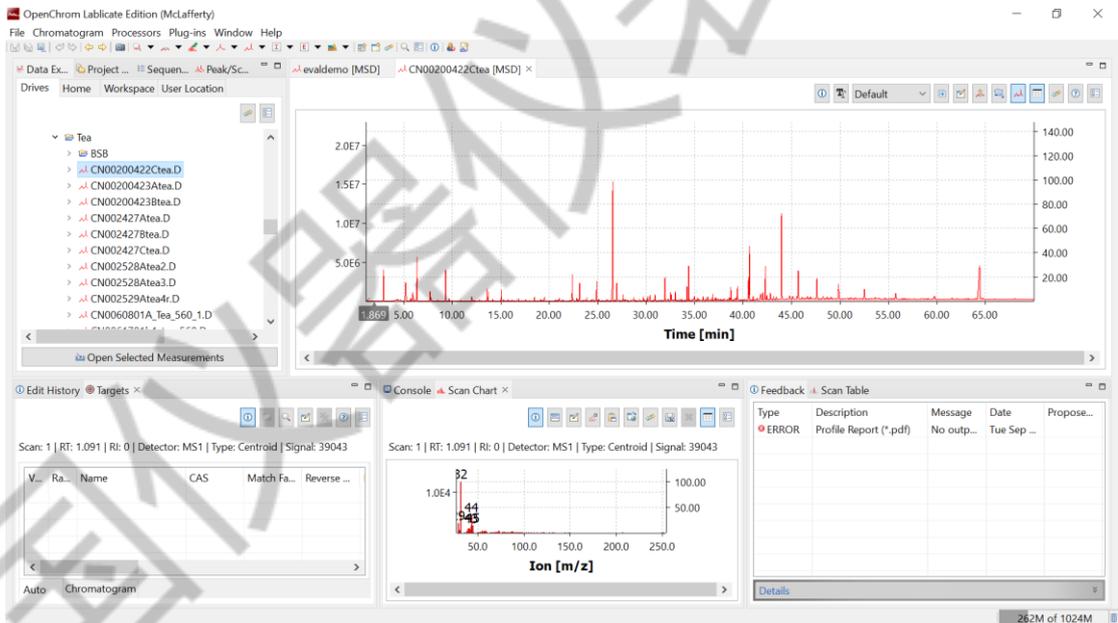


图 16 色谱峰调用

调用数据

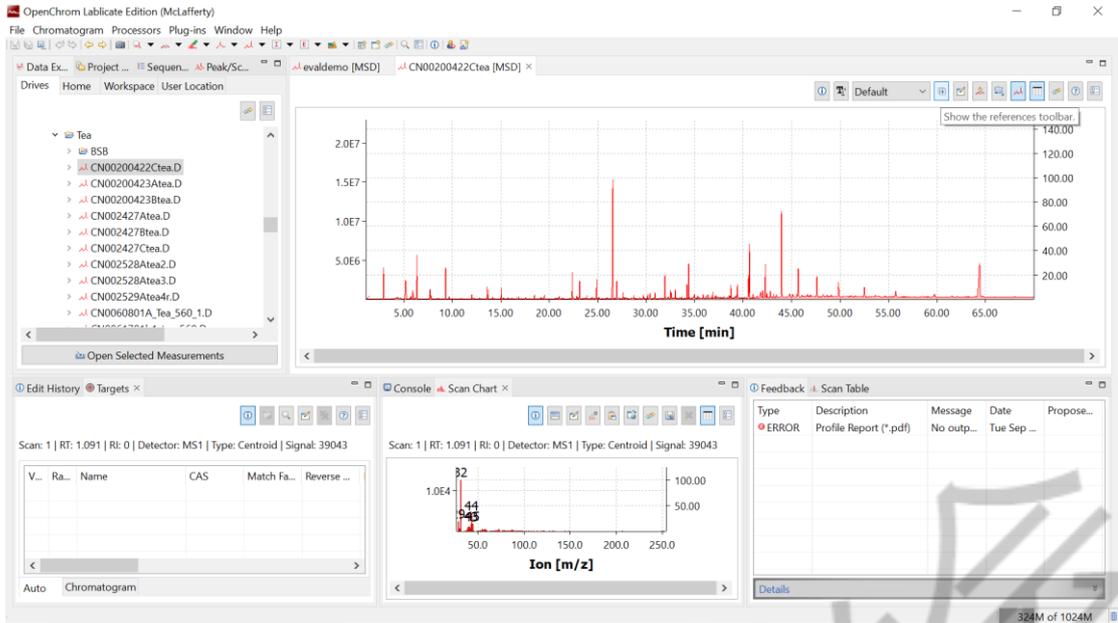


图 17 调用数据

在调用一个或多个 GCMS 数据

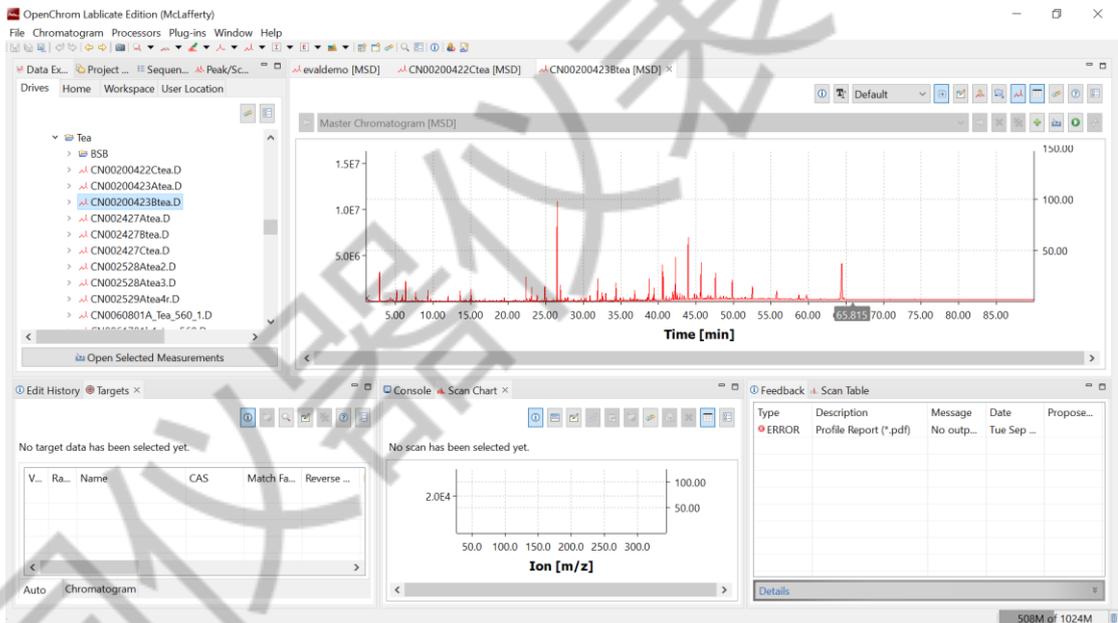


图 18 调用数据

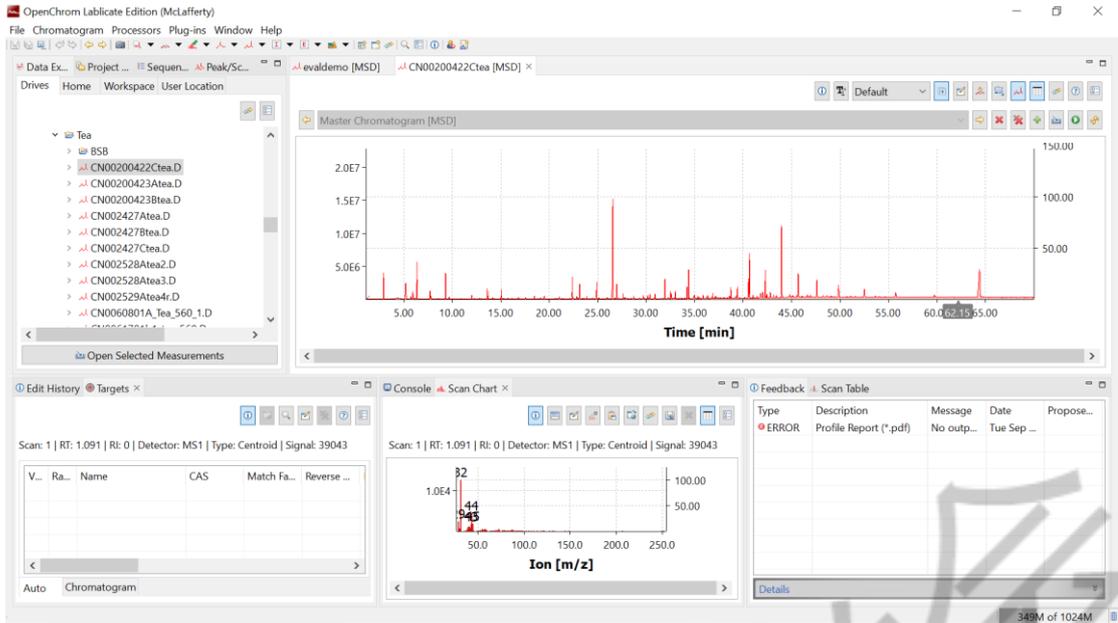


图 19 调用数据

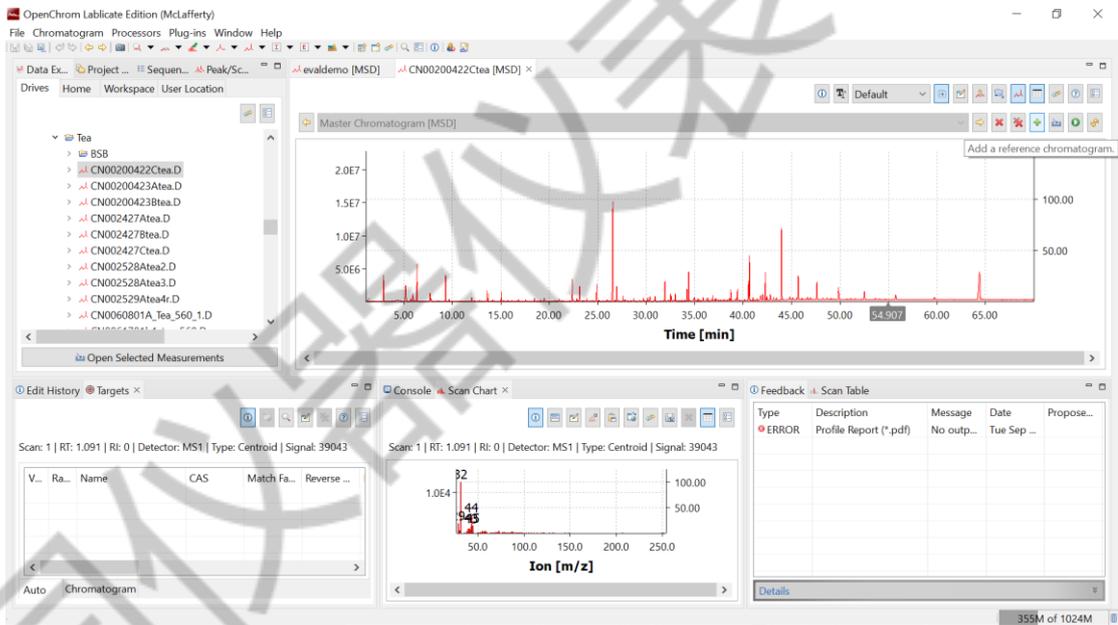


图 20 调用数据

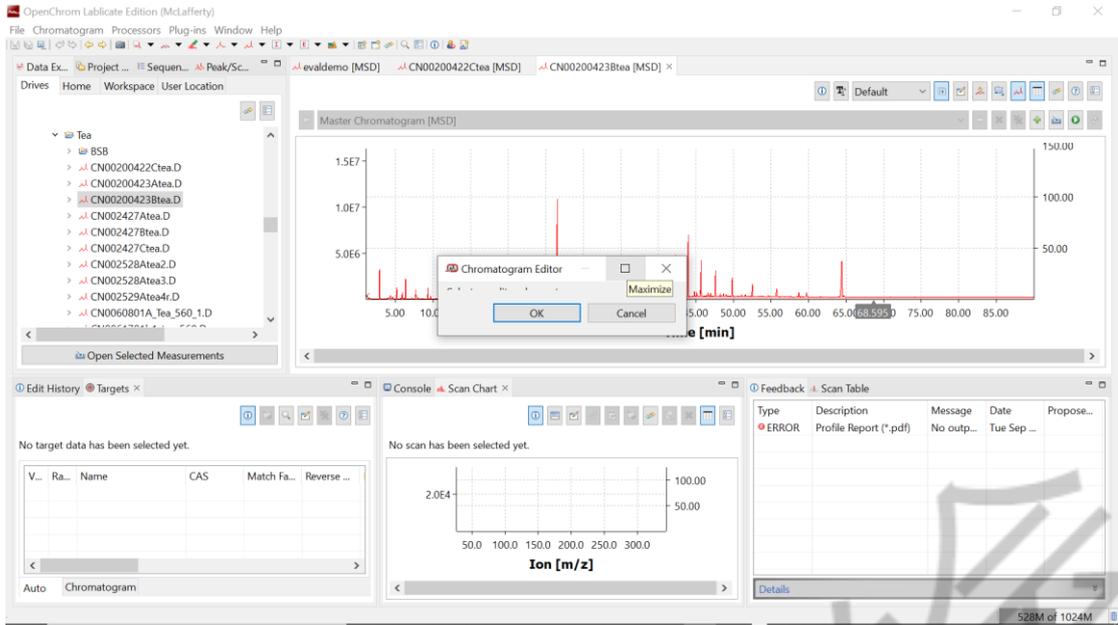


图 21 调用数据

放大

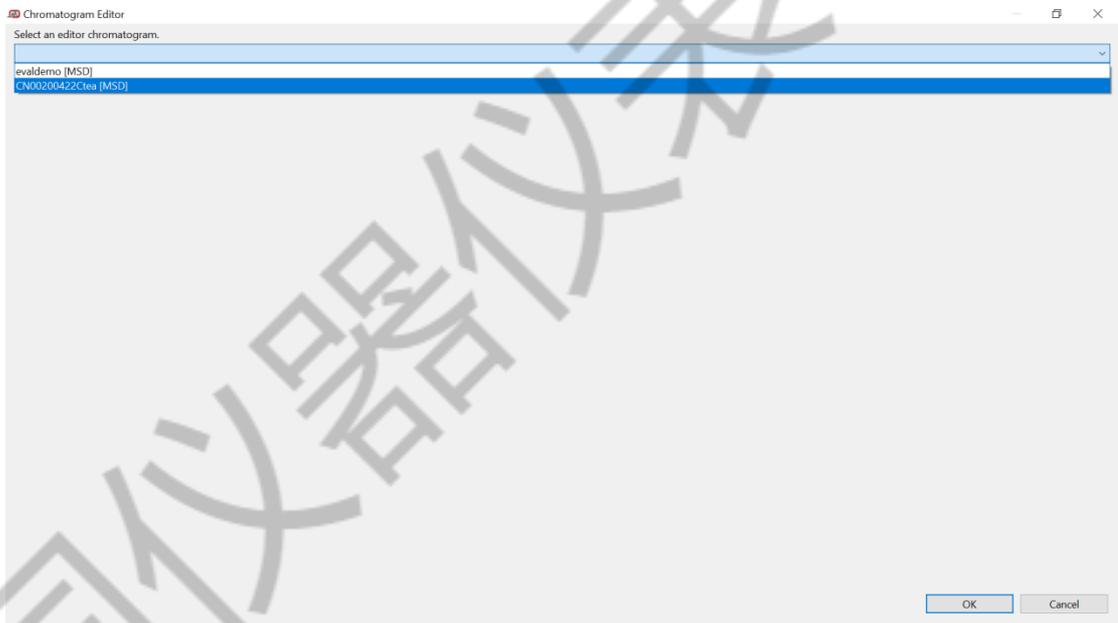


图 22 放大

选择一个已经调入的数据文件

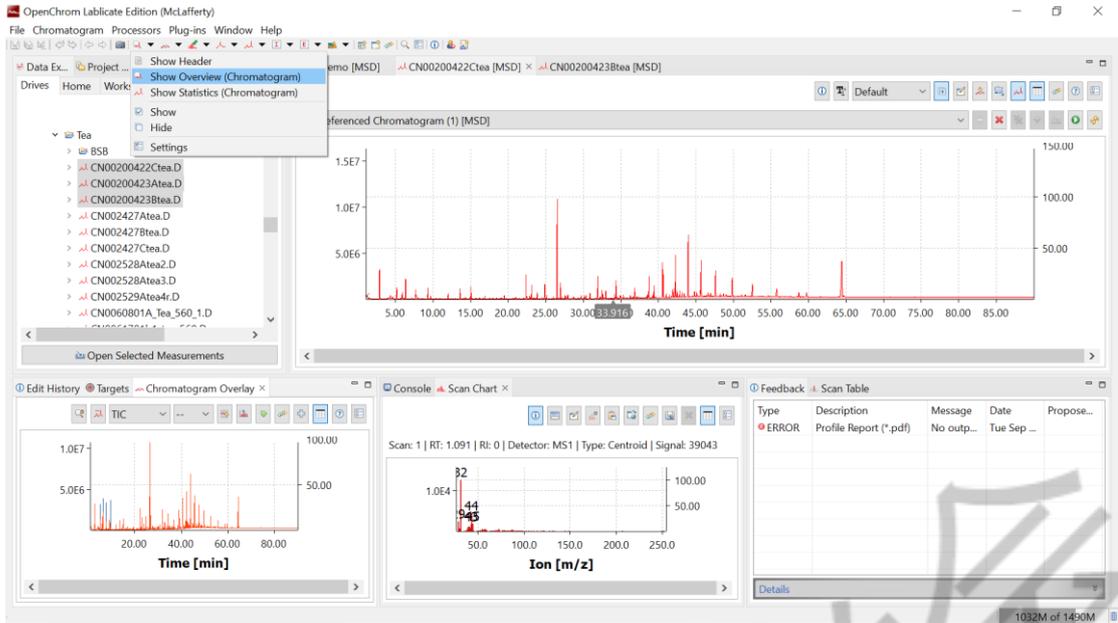


图 23 重叠色谱图

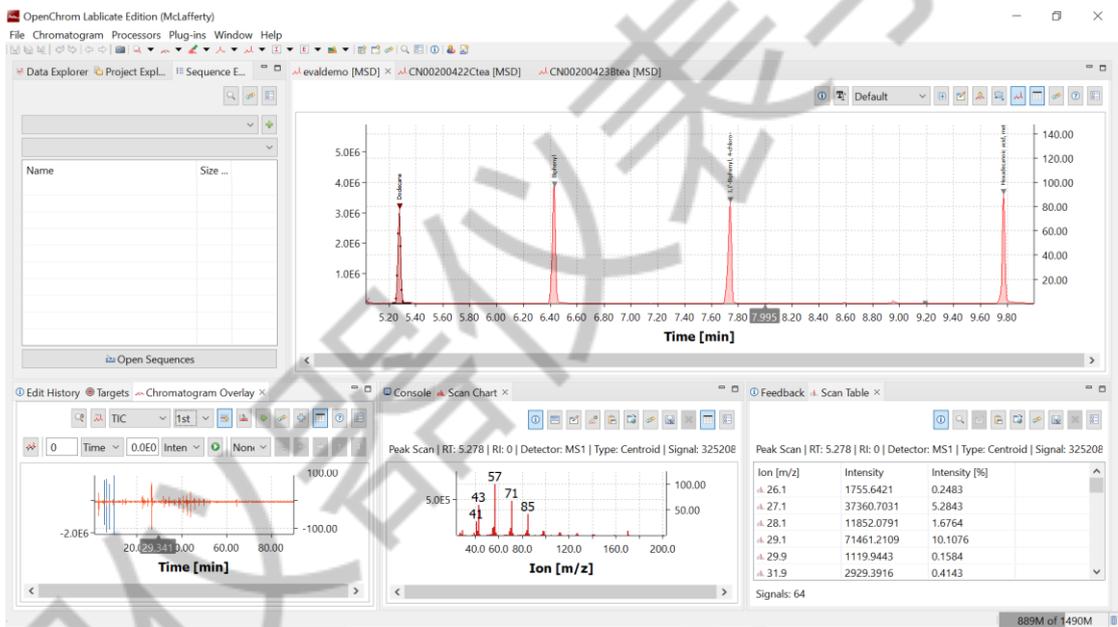


图 24 对比色谱图

放大后

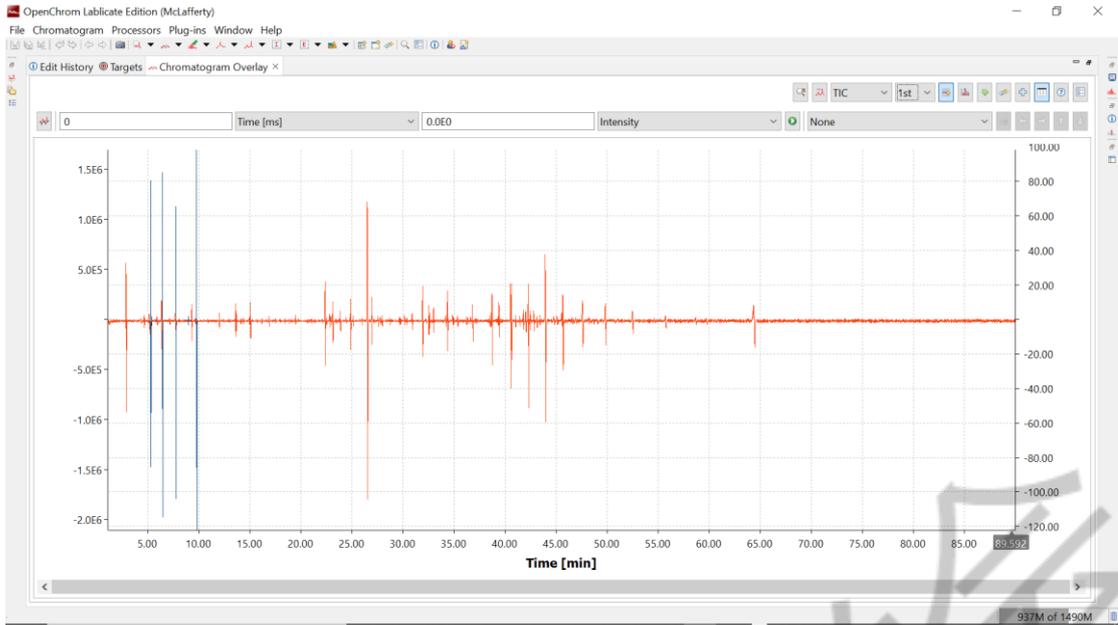


图 25 对比色谱图放大

第七部分完。