

OpenChrom 软件使用介绍 2_核对检索结果

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。介绍了初步使用的流程和方法。<https://bbs.instrument.com.cn/topic/8254675>

本次介绍核对检索结果。

1. 设置 NIST 数据库

要使用质谱图对比功能, 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。先把使用 NIST search 检索设置好, 需要事先安装 NIST Search 软件。在电脑上找到 MSSEARCH Folder 文件夹的位置放入。质谱图对比还需要把 NIST 数据库文件放入(参考上篇)。

路径:

Chromatography/Spectrometry----Identifier>Identifier (MSD)>NIST(extern)-Installation>NIST MSD Import Converter, 在 NIST 文件夹中找到 nist.db, 打开(O), apply。

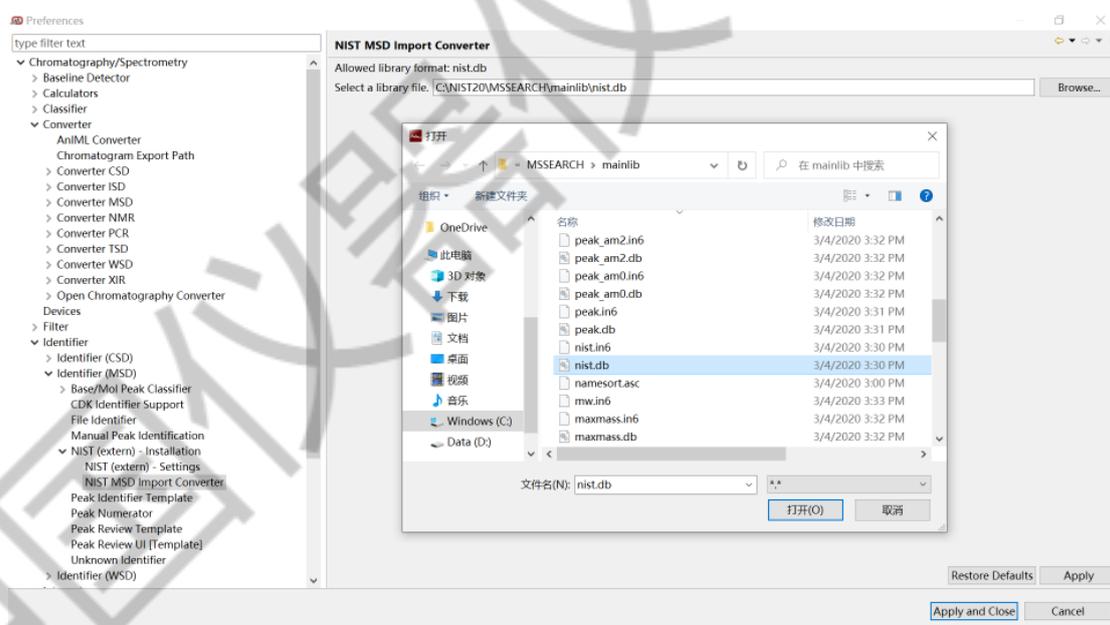


图 1 设置 NIST 数据库

2. 调用 Scan Comparison

在工具栏点击 Scan，选择 Show Scan Comparison。

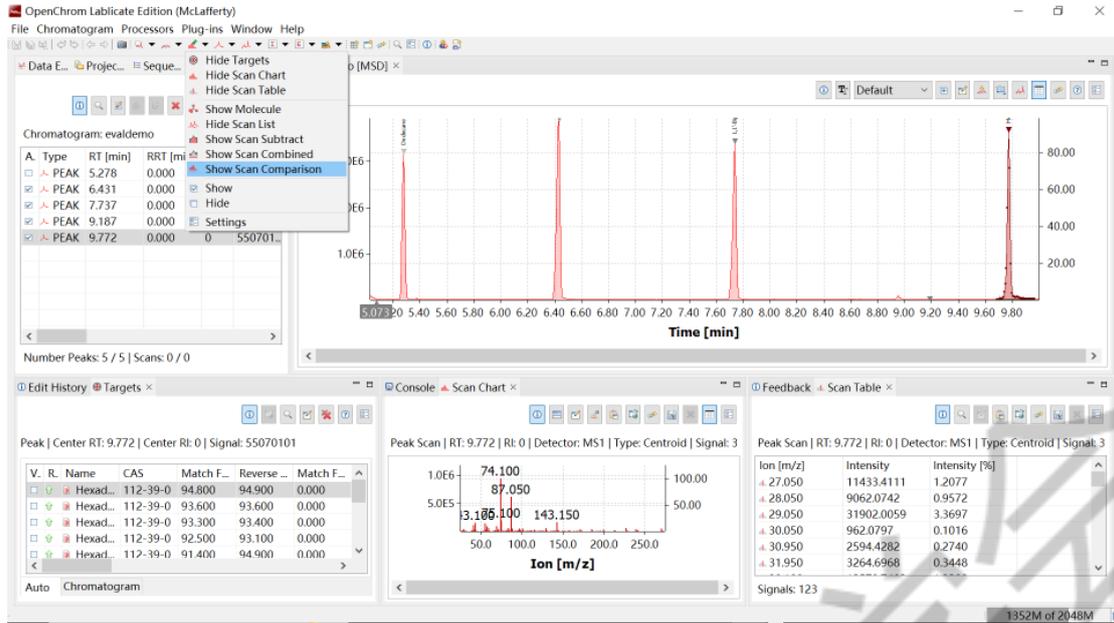


图 2 调用 Scan Comparison

或者在工具栏点击 Peaks，选择 Show Peak Scan Comparison。

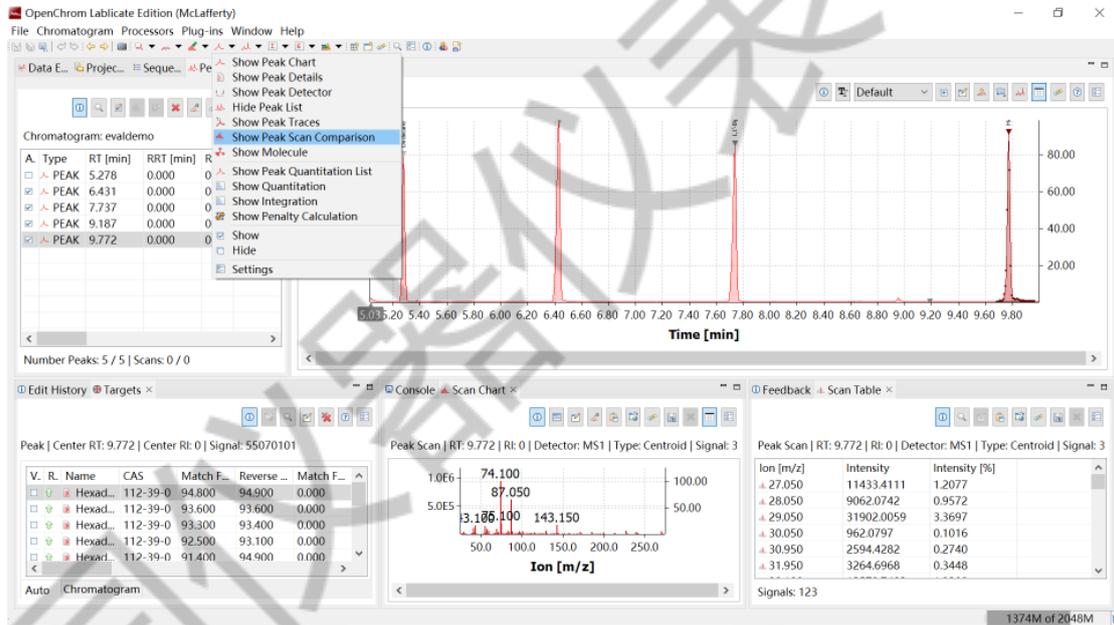


图 3 调用 Scan Comparison

这样 Comparison Scan 就在右上角显示，数据文件未知色谱峰的质谱图和库里的质谱图对比就出来了。