

OpenChrom 软件使用介绍 3_文件检索

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。本篇介绍谱库文件检索。

1. 谱库文件检索设置

要使用文件检索功能, 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----Identifier>Identifier (MSD)>File Identifier 打开 File Identifier。

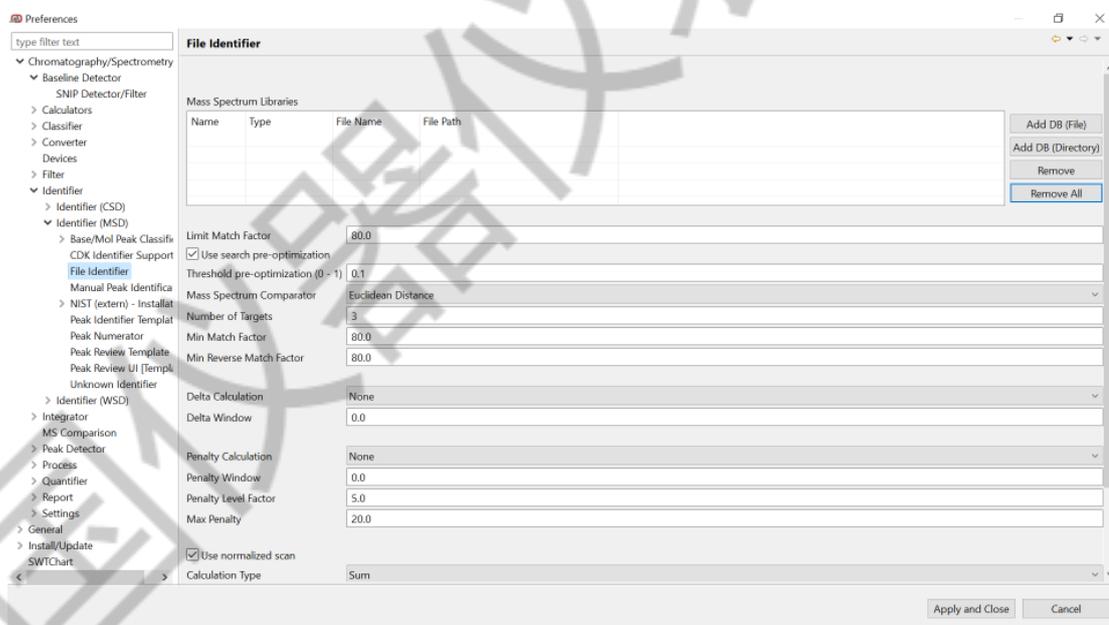


图 1 打开文件检索设置

2. 添加检索的谱库文件

点击右上角的 Add DB(file)。

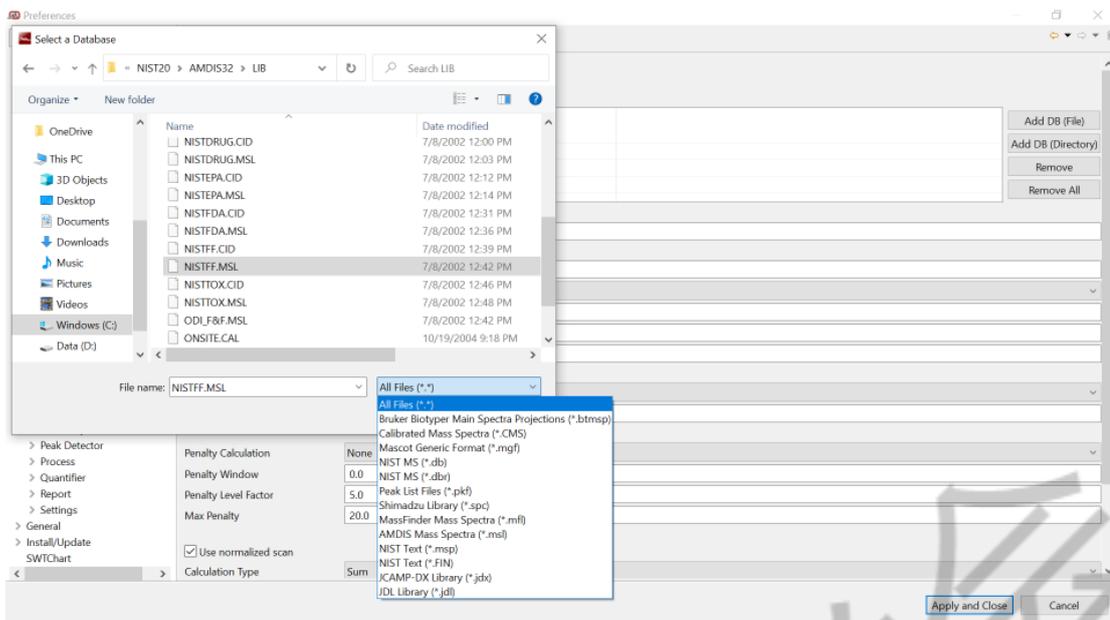


图 2 添加谱库检索文件

可以用于文件检索的库谱格式有 NIST 检索谱库的 NIST MS(*.db)，岛津谱库 (*.spc)，NIST Text(***.msp)，Amdis 谱库 (***.msl) 等 13 种格式。请参考图 2 的文件格式选择。

在相应的文件夹找到需要添加的谱库文件。例如 NISTFF.MSL，点击 open，这样就检索文件添加到系统。

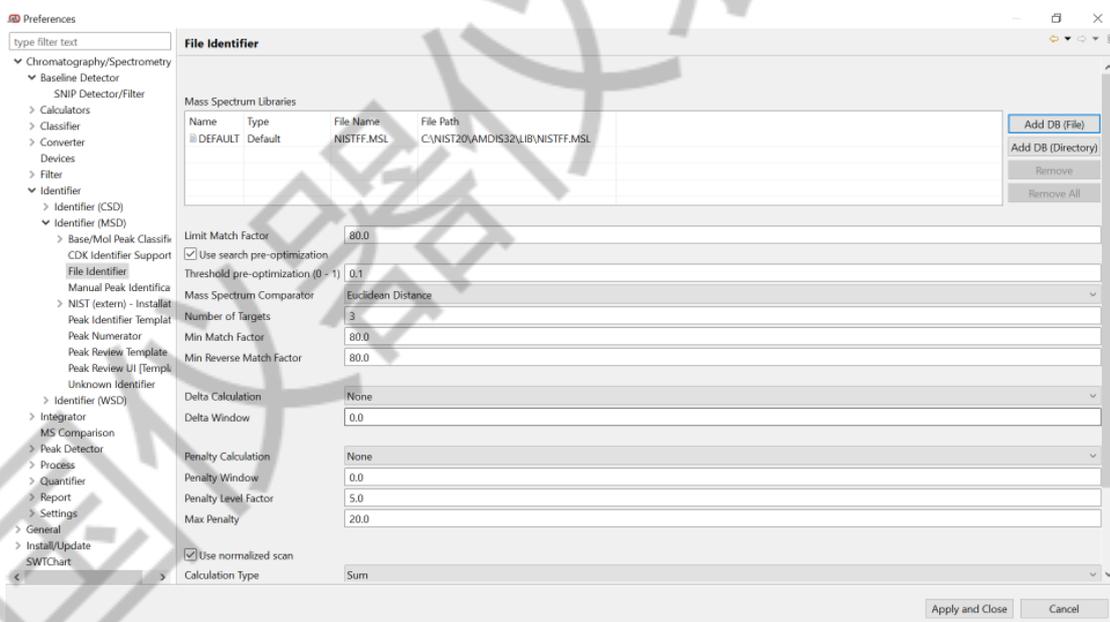


图 3 添加谱库检索文件

例如添加岛津的***.SPC，在岛津谱库文件夹找到 NIST*.SPC，Open。同理，或者添加 NIST 检索谱库 NIST.db。