

# OpenChrom 软件使用介绍 4-保留指数计算和对比

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, 谱库文件检索。

<https://bbs.instrument.com.cn/topic/8254675>

本篇介绍保留指数文件创建和计算, 以及保留指数对比。

## 1 创建保留指数校正文件

在 Processors 菜单下面的 Create Retention Index File。

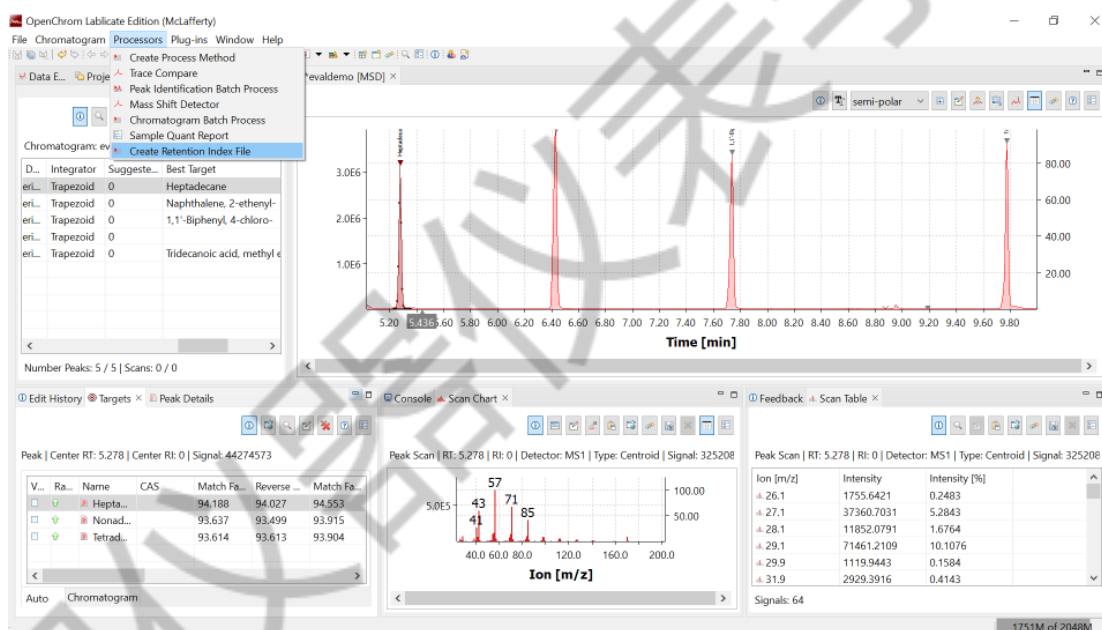
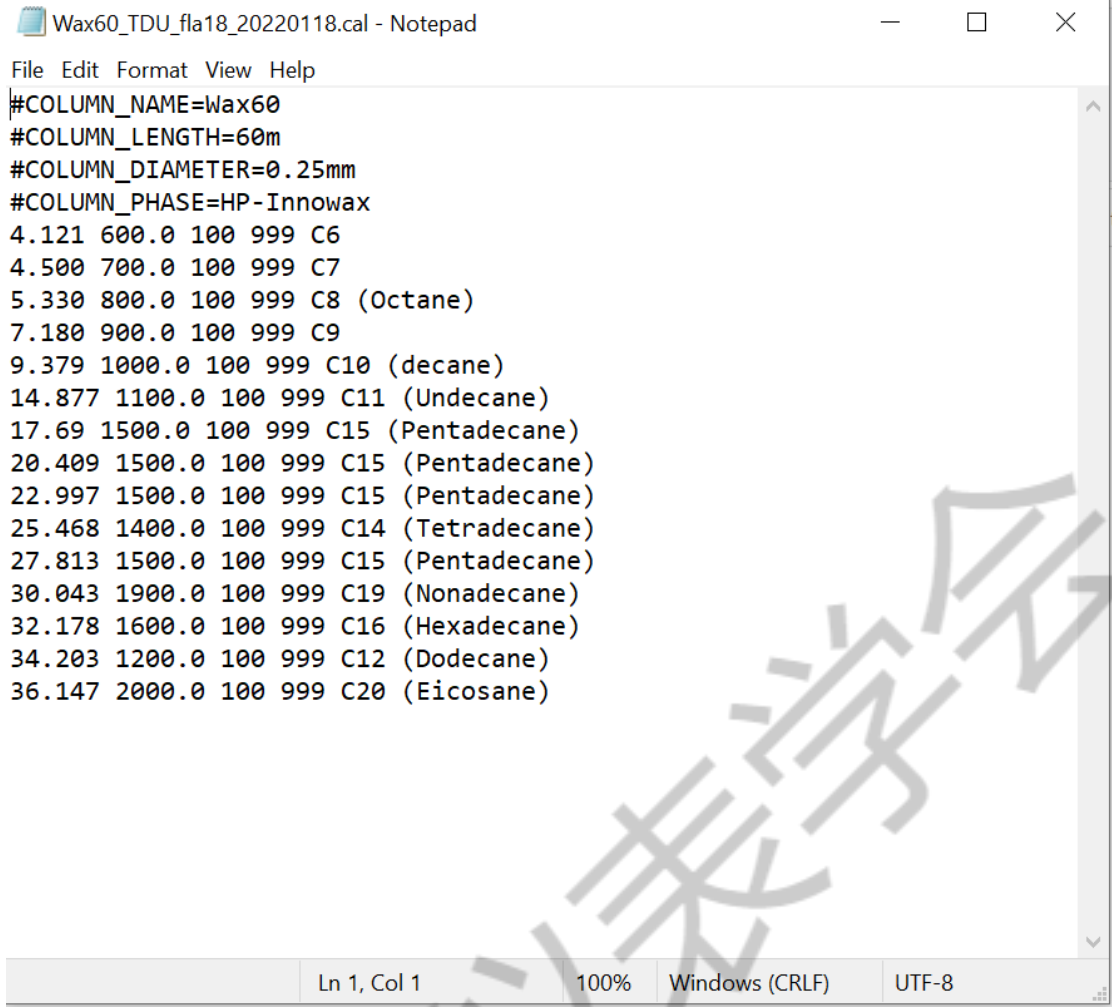


图 1 创建保留指数校正文件

但这种创建保留指数校正文件需要许多步骤, 需要 Calibration Settings, Open Chromatogram (MSD) Files, Peak Selection, Peak Assignment, 需要校验正构烷烃化合物等, 比较麻烦繁琐。本篇介绍一张非常简单的创建保留指数校正文件方法。

保留指数校正文件的格式为 XXX.cal。里面内容如下例子:



```
Wax60_TDU_fla18_20220118.cal - Notepad
File Edit Format View Help
#COLUMN_NAME=Wax60
#COLUMN_LENGTH=60m
#COLUMN_DIAMETER=0.25mm
#COLUMN_PHASE=HP-Innowax
4.121 600.0 100 999 C6
4.500 700.0 100 999 C7
5.330 800.0 100 999 C8 (Octane)
7.180 900.0 100 999 C9
9.379 1000.0 100 999 C10 (decane)
14.877 1100.0 100 999 C11 (Undecane)
17.69 1500.0 100 999 C15 (Pentadecane)
20.409 1500.0 100 999 C15 (Pentadecane)
22.997 1500.0 100 999 C15 (Pentadecane)
25.468 1400.0 100 999 C14 (Tetradecane)
27.813 1500.0 100 999 C15 (Pentadecane)
30.043 1900.0 100 999 C19 (Nonadecane)
32.178 1600.0 100 999 C16 (Hexadecane)
34.203 1200.0 100 999 C12 (Dodecane)
36.147 2000.0 100 999 C20 (Eicosane)
Ln 1, Col 1 100% Windows (CRLF) UTF-8
```

图 2 保留指数校正文件

可以按照图 2 的格式来建立一个写字板模板。可以增加或删除的正构烷碳数数据。另存为 XXX.CAL 文件。注意存文件时候，文件类型请选择“所有文件类型”，不可以选择“文本类型”。其实这个保留指数校正文件格式和 Amdis 的保留指数校正文件格式一样的，如果您有 Amdis 的 RI 校正文件，也可以直接使用。当然也可以使用 Amdis 的 RI 校正文件的建立方法来建立保留指数校正文件。