

OpenChrom 软件使用介绍 5_Amdis 解卷积使用

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。本篇介绍 Amdis 解卷积使用。

1 Amdis 色谱质谱数据解卷积峰检出设置

要使用 Amdis 色谱质谱数据解卷积峰检出功能, 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----Peak Detector>Amdis(extern)。

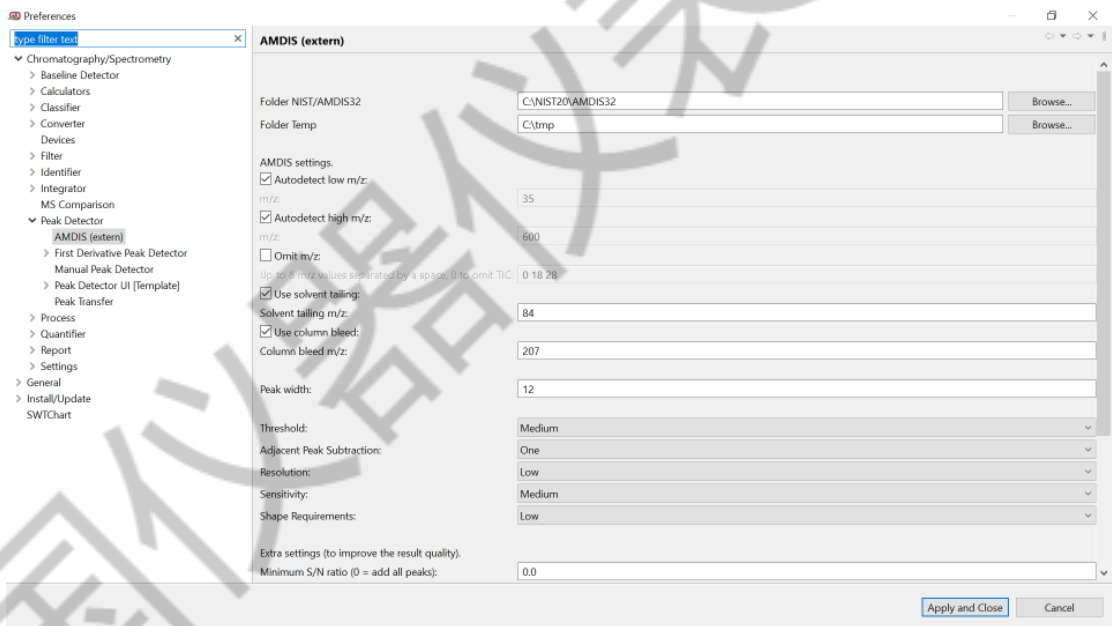


图 1 Amdis 色谱质谱数据解卷积峰检出设置

要使用 Amdis 解卷积, 需要事先安装 Amdis 软件。在电脑上面找到 Amdis32 Folder 文件夹的位置放入。Select Folder, Apply and Close。另外对质谱离子 m/z 的范围, 溶剂离子, 柱流失离子, 峰宽度, 检出灵敏度, 分辨率, 峰锐度等按需要进行相应设置。可以参考 Amdis

的手册。

C:\tmp 文件夹需要实现建立。在 Folder Temp 中输入 C:\tmp（必须）。

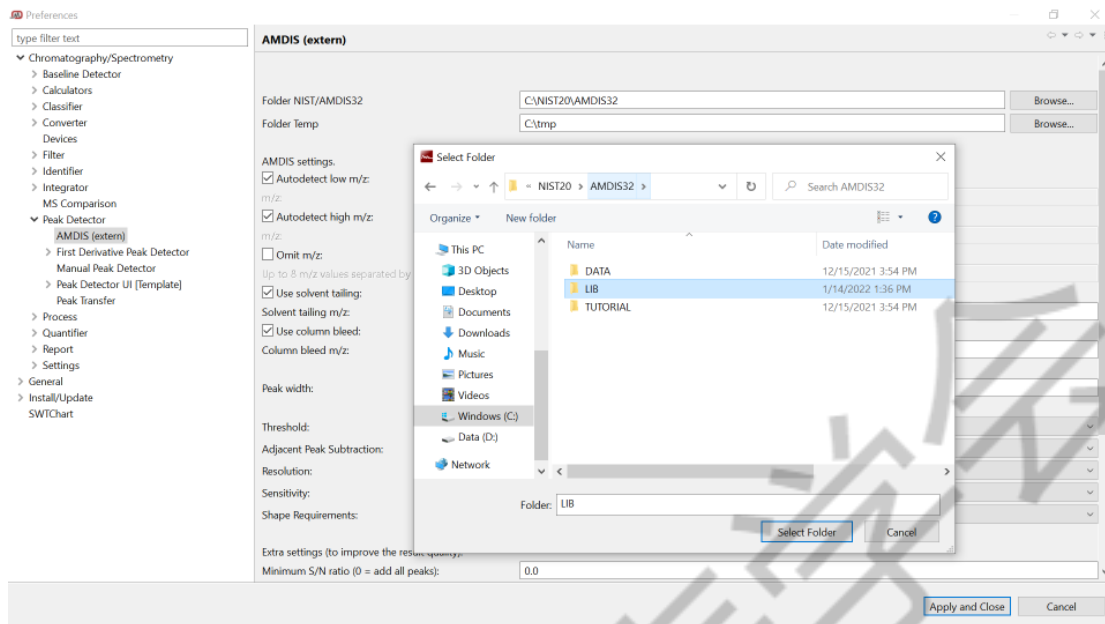


图 2 Amdis 色谱质谱数据解卷积峰检出设置

2 解卷积检出及检索

流程如下：

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>Amdis(extern)。

