

OpenChrom 软件使用介绍 6_Process 处理过程使用

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, Amdis 解卷积应用。本篇介绍 Process 处理过程使用。

在第一篇介绍了 GCMS 数据处理的基本流程, 即下面的三部曲。

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>First Derivative。

峰积分, 在色谱图上面右键点击, 选 Peak integrator>Peak Integrator Trapezoid。

峰鉴定, 在色谱图上面右键点击, 选 Peak Identifier>NIST(extern)或 Library File (MS)。

参见前面第一或第三篇文章。

这样的方式处理数据, 需要至少 3 步的操作来完成。如果加上峰过滤, 就还需增加一个操作步骤。本篇介绍处理过程方法, 把几个处理操作整合在一起, 一次完成。

1 创建 process method 处理过程方法

使用前也要对 Preference, 个性化设置进行相应的设置。

1.1 在 Processors 菜单打开 Create Process Method

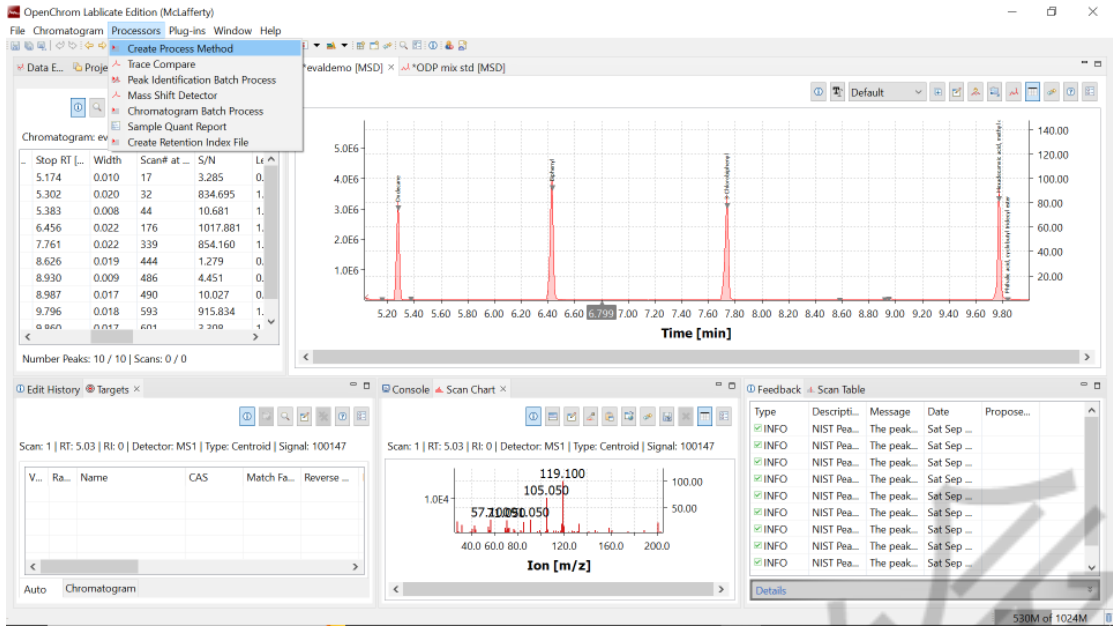


图 1 打开 Create Process Method

1.2 选择要处理的数据类别

选择数据类别，例如光谱，不同色谱检测器的数据。对于 GCMS 数据，选择 MSD (quadrupole, IonTrap, ...), Finish。

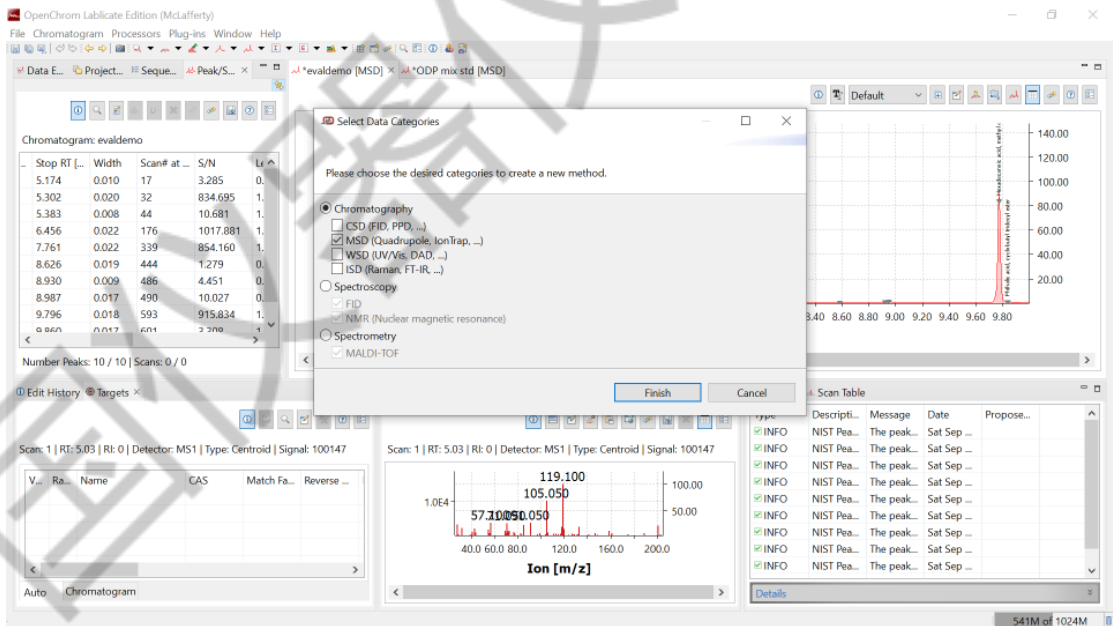


图 2 选择要处理数据类别