

3.2.5. 质谱谱图数据库

服务介绍:

可获取化合物质谱谱图, 物化性质等信息。

本数据库的质谱谱图用 java applet 显示, 请用户的浏览器不要禁用 java。

检索方式与示例:

可以通过谱峰数据来检索相似谱图, 检索途径为质荷比、丰度组合。也可根据化合物的名称、CAS 号、分子式。

注: 由于谱图匹配算法还在继续开发中, 目前还不能很好的匹配谱图形状, 系统将对此功能进一步完善。

3.2.5.1 质谱谱图检索

基本原理 用户手动通过输入提问谱图中一定数目的质谱峰数据 (质荷比、丰度), 在数据库中进行匹配, 获得与提问谱相似的谱图。

第一步: 先指定待输入的谱峰的数目。输入的数字, 不得少于输入谱峰的数目, 但可以多于输入谱峰的数目。如本例中要输入 5 个谱峰, 可以输入数字 “10”, 如图 3.2.5.1 所示 (例 1)。点按钮 **峰数确认, 开始输入具体数据**, 进入第二步。

图 3.2.5.1 质谱谱图检索的第一步: 输入谱峰数目 (例 1)

第二步: 输入每个谱峰的具体数据并设置匹配条件。注意, 每个谱峰都必须输入质荷比(M/E), 但丰度(Abundance)可以为空。如某个谱峰只输入丰度(Abundance)而没有输入质荷比(M/E), 则该峰的数据无效。如图 3.2.5.2 所示, 每个谱峰质荷比前的勾选框被选择, 表示该谱峰被选中。

图 3.2.5.2 质谱谱图检索的第二步: 输入谱峰的质荷比(M/E) (例 1)

谱峰数据输入完成后, 需要在下方选择附加条件, 意为在检出的质谱图中要求:

- 1) 包含所有选中的质荷比 (默认选择), 如果去掉选择表示不要求含有所有选中的质荷比。
- 2) 最大质荷比相近: +/- 后的数据默认为 0, 并勾选此项 (默认选择), 表示检出谱图的最大质荷比必须与输入的最大质荷比完全相同 (本例中即 242)。如果输入一个非零的数字, 例如 2, 则表示检出谱图的最大质荷比与输入的最大质荷比可以相差 2, 即在 240-244 之间均可。如去掉勾选, 则表示不限制检出谱图的最大质荷比。
- 3) 检出谱图的峰总数, 可指定一个峰总数的范围。如果不勾选此项, 则表示不限制峰总数。
- 4) 显示结果数和每页记录数, 默认为仅取前面 100 条结果。用户可根据需要自行指定, 方便显示。

第三步: 检索并查看比较结果。完成第二步后, 点 **开始检索**, 即可获得结果, 列表如图 3.2.5.3。

当前位置: 质谱数据库 -> 质谱谱图与化合物结构 [返回](#)

比较	化合物名	最大质荷比	峰的总数	质谱谱图
<input type="checkbox"/>	2,2-DIDEUTERO HEPTADECANAL	242	219	详细
<input type="checkbox"/>	CYCLOPROPAN-1,2-DICARBONIC ACID, 3-ISOBUTENYL-, DIETHYLESTER	242	217	详细

共有 2条结果, 分 1页显示, 当前第 1页

[质谱谱图比较](#)

[返回检索页](#)

图 3.2.5.3 检索结果列表 (例 1)

结果列表包括比较勾选框、化合物名、最大质荷比、峰的总数和详细信息的链接。

用户点击最后一栏的[详细信息](#)的链接, 即可查看化合物的结构与质谱谱图, 如图 3.2.5.4。质谱谱图用 java applet 显示, [鼠标移到谱线上可查看该谱峰的质荷比与相对丰度](#)。

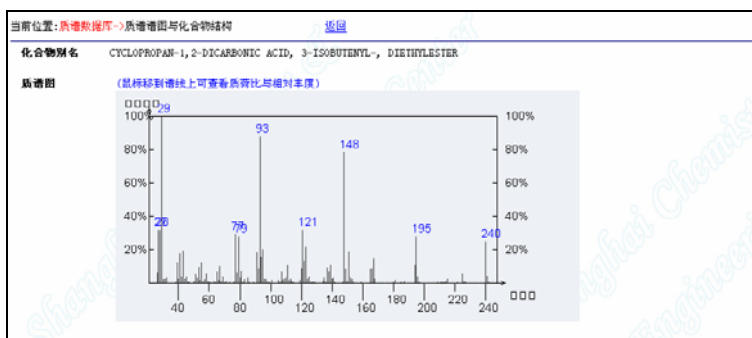


图 3.2.5.4 化合物结构与谱图 (例 1)

比较勾选框, 是为进行多个谱图之间的比较而专门设置的。如图 3.2.5.5 所示, 选择 2 个谱图之后, 点击表格下方的按钮[质谱谱图比较](#), 则可将 2 个谱图显示在同一个页面上, 方便用户查看比较。如图 3.2.5.6。

谱图比较的功能没有数目限制, 可同时显示多个谱图。

当前位置: 质谱数据库 -> 质谱谱图与化合物结构 [返回](#)

比较	化合物名	最大质荷比	峰的总数	质谱谱图
<input checked="" type="checkbox"/>	2,2-DIDEUTERO HEPTADECANAL	242	219	详细
<input checked="" type="checkbox"/>	CYCLOPROPAN-1,2-DICARBONIC ACID, 3-ISOBUTENYL-, DIETHYLESTER	242	217	详细

共有 2条结果, 分 1页显示, 当前第 1页

[质谱谱图比较](#)

图 3.2.5.5 选择 2 个谱图进行比较 (例 1)

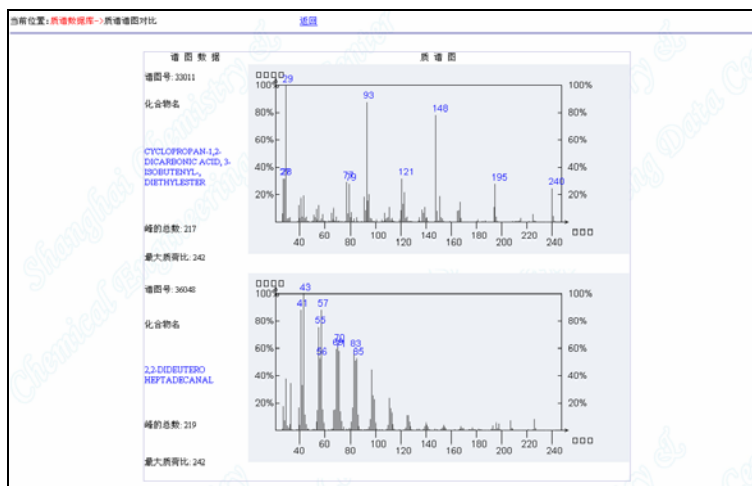


图 3.2.5.6 选择 2 个谱图进行比较 (例 1)

3.2.5.2 化合物检索

基本原理 用户输入化合物的英文名称、CAS 号或者分子式, 选择精确检索或者模糊检索。系统根据用户输入的关键词检索该化合物的质谱谱图并列表显示。

通过化合物的名称检索质谱图

当前位置: 质谱数据库->化合物名称检索

检索关键字: 化合物名称 检索式: ethanol

精确检索 模糊检索 (检索词中可包含 '*', 匹配任意字符)

图 3.2.5.7 通过名称精确检索质谱图 (例 2)

当前位置: 质谱数据库->化合物名称检索

化合物	最大质荷比	峰的总数	质谱图
ANHYDROL	48	19	详细
ANHYDROL	46	14	详细
ANHYDROL	47	14	详细
ANHYDROL	49	14	详细
ANHYDROL	46	12	详细
ANHYDROL	46	10	详细
ANHYDROL	47	12	详细
ANHYDROL	48	10	详细

图 3.2.5.8 通过名称精确检索质谱图的结果 (例 2)

用户可输入化合物的关键词, 例如英文名称的精确检索如图 3.2.5.7, 表示检索化合物名称为“ethanol”的化合物的谱图, 检索结果列表如图 3.2.5.8 (例 2)。

在表中点最后一栏详细信息的链接, 即可看到该化合物的结构与质谱图。乙醇的结构和质谱图如 3.2.5.9 所示。

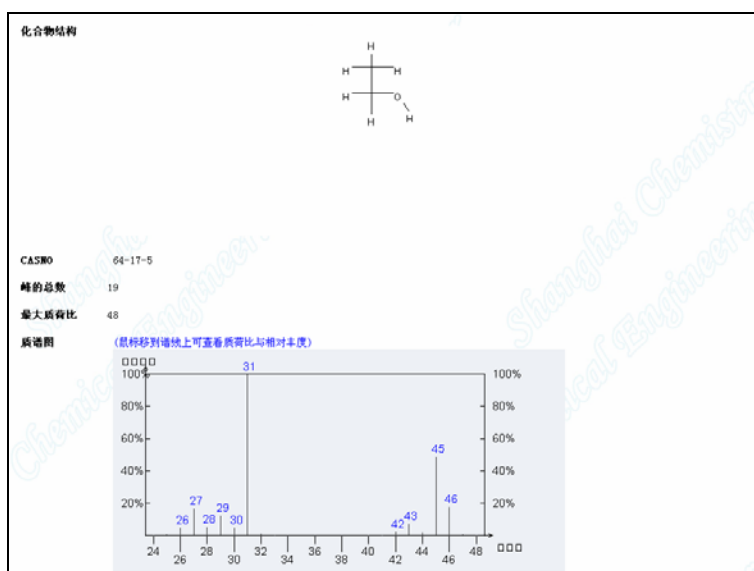


图 3.2.5.9 乙醇的结构和质谱图 (例 2)

通过化合物的 CAS 号检索质谱图

输入化合物 CAS 号时有无短划线均可, 例如“94-41-7”或者“94417”, 分别如图 3.2.5.10 和图 3.2.5.11 所示。这两种输入方法的检索结果相同, 见图 3.2.5.12 (例 3)。

检索关键字: CAS号 检索式: 94-41-7

精确检索 模糊检索 (检索词中可包含 '*', 匹配任意字符)

图 3.2.5.10 CAS 号的输入 1

检索关键字: CAS号 检索式: 94417

精确检索 模糊检索 (检索词中可包含 '*', 匹配任意字符)

图 3.2.5.11 CAS 号的输入 2

当前位置: 质谱图数据库->化合物检索 [返回](#)

化合物1	最大质荷比	峰的总数	质谱图
1-PHENYL-2-BENZOYLETHYLENE	211	171	详细
1-PHENYL-2-BENZOYLETHYLENE	210	66	详细
1-PHENYL-2-BENZOYLETHYLENE	211	42	详细
1-PHENYL-2-BENZOYLETHYLENE	211	33	详细
1-PHENYL-2-BENZOYLETHYLENE	208	21	详细
1-PHENYL-2-BENZOYLETHYLENE	211	11	详细

图 3.2.5.12 通过 CAS 号检索质谱图的结果 (例 3)

输入化合物的分子式

输入化合物的分子式 (化学元素符号按 C、H 顺序, 其他元素按字母顺序排列)。为方便查询时的输入操作, 输入元素符号不区分大小写, 数字不考虑上下标, 如图 3.2.5.13 和图 3.2.5.14, 其效果完全相同。检索结果见图 3.2.5.15 (例 4)。由于 C₂H₆O 存在 2 个同分异构体, 乙醇和甲醚。每个化合物都有自己的一个列表, 方便用户区分。

检索关键字 检索式

精确检索 模糊检索 (检索词中可包含 '*', 匹配任意字符)

图 3.2.5.13 分子式的输入 1

检索关键字 检索式

精确检索 模糊检索 (检索词中可包含 '*', 匹配任意字符)

图 3.2.5.14 分子式的输入 2

当前位置: 质谱图数据库->化合物检索 [返回](#)

化合物1	最大质荷比	峰的总数	质谱图
ANHYDROL	48	19	详细
ANHYDROL	46	14	详细
ANHYDROL	47	14	详细
ANHYDROL	48	14	详细
ANHYDROL	46	12	详细
ANHYDROL	46	10	详细
ANHYDROL	47	12	详细
ANHYDROL	48	10	详细

化合物2	最大质荷比	峰的总数	质谱图
METHANE, OXYBIS- (OC)	48	14	详细
METHANE, OXYBIS- (OC)	80	26	详细
METHANE, OXYBIS- (OC)	48	30	详细
METHANE, OXYBIS- (OC)	48	10	详细

图 3.2.5.15 通过分子式检索质谱图 (例 4)