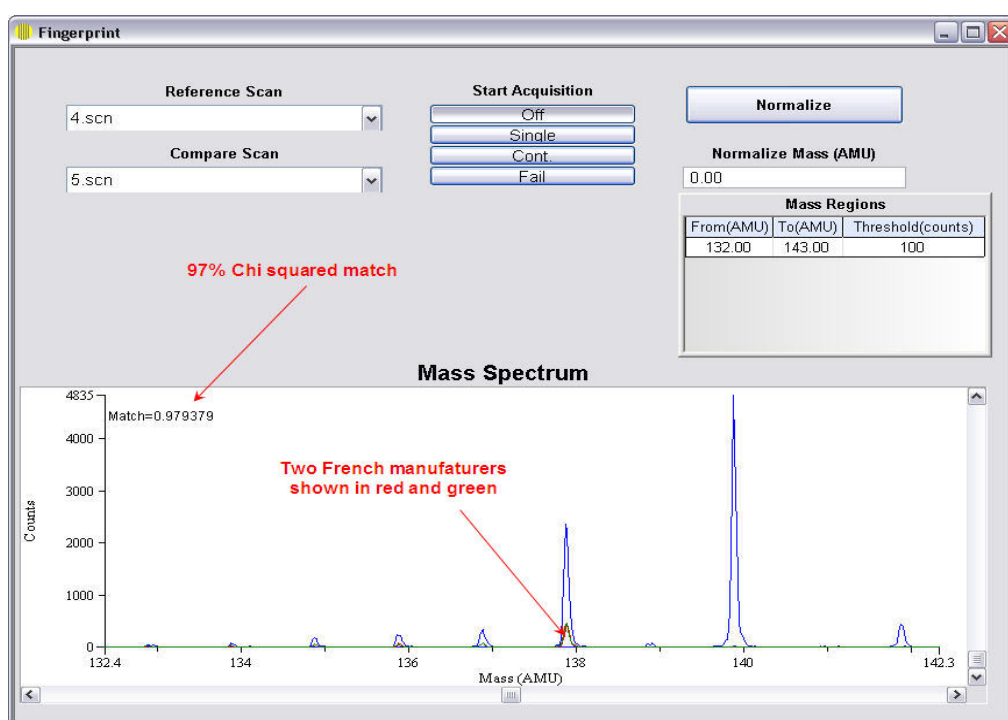


用OptiMass 9500做海水基鼻喷剂的指纹图谱

以海水为基础、将NaCl浓度减小到人体水平的鼻喷剂，被广泛使用。海水补充了很多微量元素，这对人体有很多好处。Cu、Mg、Au、Ag都可以起到杀菌、消炎和抗过敏的作用。

对鼻喷剂中微量元素差异的调查，可以促使对海水源产地和处理工艺加以改进，以达到最佳的产品效果。

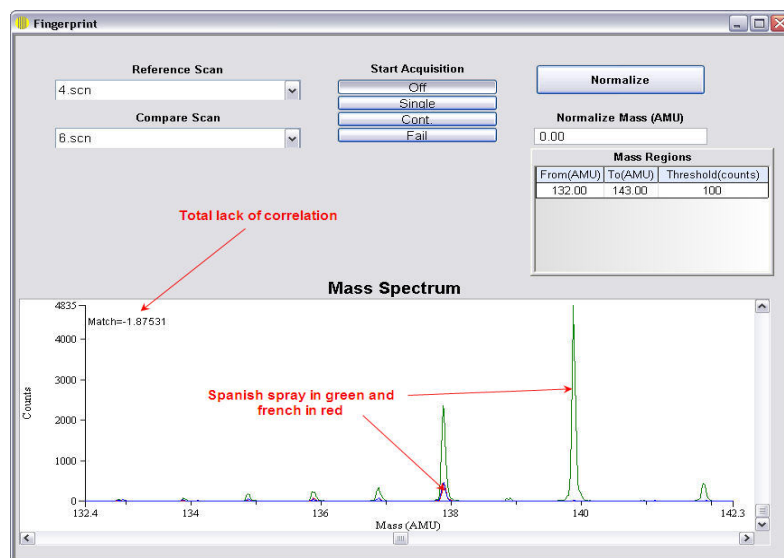
使用OptiMass 9500先进的指纹软件，我们对法国和西班牙生产的海水鼻喷剂产品进行了调查。以下结果显示，两个法国厂家的产品在Ba和Ce附近的质谱匹配具有很好的相关性（97%）。



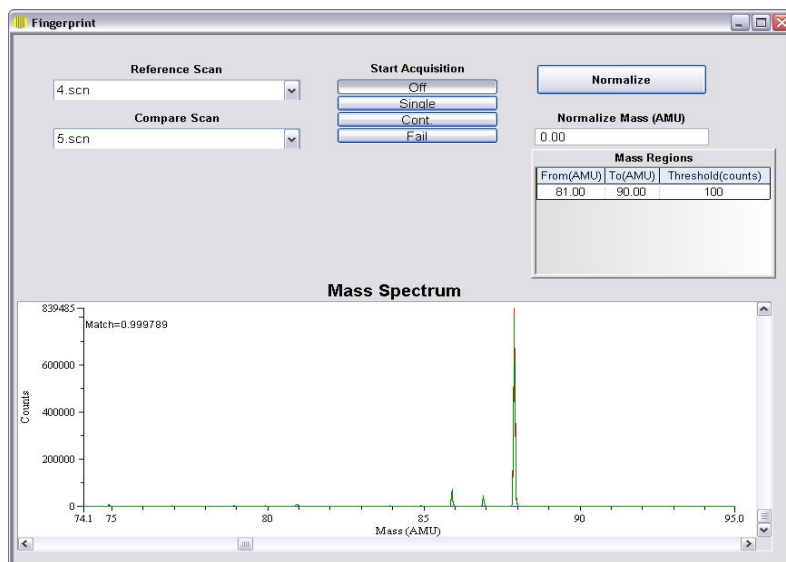
OptiMass 9500指纹软件，允许用户导入一系列谱图，然后选择一个“参考”谱图和一个“对比”谱图。接下来，对两个质谱在一个选定的区域内进行卡方拟合 (Chi-squared fit) 运算。

在本研究中，我们在质量段132-143 amu比较两个法国厂家的产品（匹配结果参见上图）。如果我们选择西班牙鼻喷剂作为对比谱图，我们发现两个谱图在这个质量段相关性很差（如下图所示）。这主要是由于西班牙产品中含有Ce，Ba的含量也显著偏高。

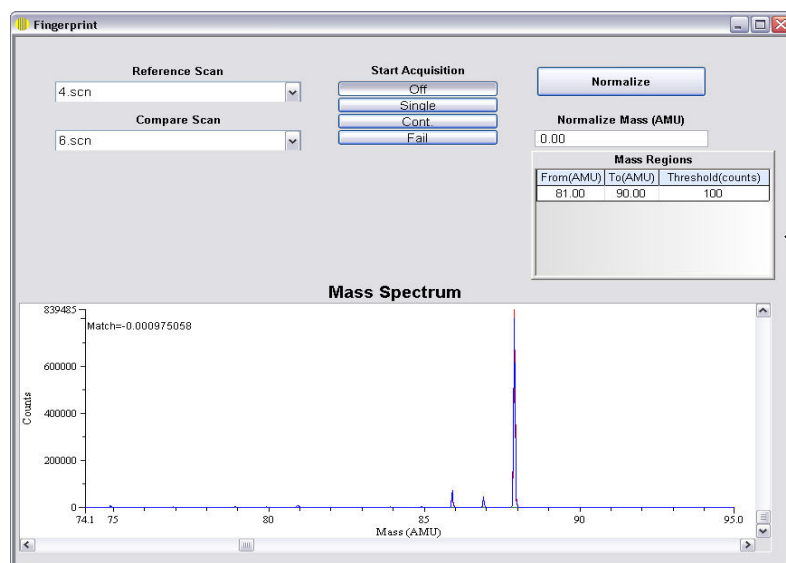




同时我们也调查了其他质量段的谱图。下图是两个法国鼻喷剂在质量段81-90 amu的对比，同样具有很好的相关性（99%）。



法国产品和西班牙产品在该质量段的对比同样缺少相关性（参加下图）。



现在，可以同时两个质量段比较，得出一个真正的卡方拟合结果，如下图所示。结果表明，两个法国产品的综合相关性达到99.97%，而和西班牙产品的综合相关性只有不到1%。

