

TCVN

TIÊU CHUẨN QUỐC GIA

TCVN xxxxx-3:2025

Xuất bản lần 1

**GỖ – XÁC ĐỊNH LOÀI BẰNG CÔNG NGHỆ
QUANG PHỔ KHỐI LƯỢNG –
PHẦN 3: PHƯƠNG PHÁP XÂY DỰNG CƠ SỞ DỮ LIỆU**

*Wood – Method of wood identification using DART TOFMS technology –
Part 3: Database development method*

Dự thảo lần 1

HÀ NỘI – 2024

Lời nói đầu

TCVN xxxxx-3:2025 do Viện Khoa học Lâm nghiệp Việt Nam biên soạn, Bộ Nông nghiệp và Phát triển Nông thôn đề nghị, Tổng cục Tiêu chuẩn Đo lường Chất lượng thẩm định, Bộ Khoa học và Công nghệ công bố.

Gỗ - Xác định loài bằng công nghệ quang phổ khối lượng – Phần 3: Phương pháp xây dựng cơ sở dữ liệu

Wood – Method of wood identification using DART TOFMS technology – Part 3: Database development method

1 Phạm vi áp dụng

Tiêu chuẩn này quy định phương pháp xây dựng cơ sở dữ liệu phục vụ công tác giám định gỗ bằng công nghệ quang phổ khối lượng (DART-TOFMS).

2 Tài liệu viện dẫn

Các tài liệu viện dẫn sau đây là cần thiết để áp dụng tiêu chuẩn này. Đối với các tài liệu viện dẫn ghi năm công bố thì áp dụng bản được nêu. Đối với các tài liệu viện dẫn không ghi năm công bố thì áp dụng phiên bản mới nhất, bao gồm cả các sửa đổi, bổ sung (nếu có).

Schmitz, N., Beeckman, H., Blanc-Jolivet, C., Boeschoten, L., Braga, J. W., Cabezas, J. A., ... & Zuidema, P. A. (2020). Tổng quan về các phương pháp sử dụng trong giám định gỗ. Hướng dẫn về các phương pháp giám định gỗ.

TCVN 14121: 2024 Gỗ - Phương pháp định loại dựa vào đặc điểm cấu tạo thô đại và hiển vi

TCVN xxxxx-2: 2025 Gỗ - Xác định loài bằng công nghệ quang phổ khối lượng – Phần 2: Phương pháp lấy mẫu.

3 Thuật ngữ và định nghĩa

Trong tiêu chuẩn này, áp dụng các thuật ngữ và định nghĩa được nêu trong TCVN xxxxx-1: 2025, và TCVN 14121: 2024.

4 Nguyên tắc chung

Cơ sở dữ liệu là một trong những yếu tố quan trọng nhất đối với việc giám định gỗ bằng công nghệ quang phổ khối lượng (DART-TOFMS). Tiêu chuẩn này mô tả quy trình xây dựng cơ sở dữ liệu để tích hợp với cơ sở dữ liệu ForeST®.

CHÚ THÍCH: ForeST® - Forensic Spectra of Trees (hay còn gọi là cơ sở dữ liệu quang phổ pháp y của cây) được xây dựng bởi Trung tâm giám định gỗ Hoa Kỳ (US-WISC) tại Ashland, OR, Hoa Kỳ. Đây là cơ sở dữ liệu lớn nhất về quang phổ khối lượng được thu thập từ các loại gỗ trên thế giới, bao gồm hơn 20.000 phổ khối từ 16.000 loài khác nhau. Phần lớn các loài có trong danh mục CITES và các loại gỗ thương mại phổ biến hiện nay để phục vụ giám định gỗ bằng công nghệ DART-TOFMS.

Trong quá trình xây dựng cơ sở dữ liệu phải tuân thủ các quy định về cách đặt tên, tạo tệp dữ liệu và thư viện NIST để đồng nhất và tích hợp được với cơ sở dữ liệu ForeST®.

US-WISC khuyến nghị ForeST® nên được sử dụng với hệ thống JEOL Accu-TOF MS. Do tính phức tạp về mặt hóa học của gỗ nên việc phân tích để phân loại gỗ thông qua quang phổ khối lượng có thể sử dụng, điều chỉnh và hiệu chuẩn nhiều thông số kỹ thuật ở thiết bị nhằm nhất quán trong việc xây dựng cơ sở dữ liệu.

5 Thiết bị, dụng cụ và hóa chất

5.1 Thiết bị JEOL Accu-TOF MS, đây là hệ thống thiết bị thu thập phổ khối (mặc dù không phải là duy nhất được sử dụng để giám định gỗ). Tuy nhiên, đây là máy quang phổ khối phát triển nhất với cơ sở dữ liệu và phần mềm đi kèm tiên tiến nhất.

5.2 Phần mềm Mass Mountaineer, đây là phần mềm chuyên dụng cho công nghệ DART TOFMS bao gồm tích hợp tất cả các công cụ xử lý thống kê tiêu chuẩn. Phần mềm này có nhiều tùy chỉnh phục vụ các nghiên cứu và phân tích khác. Khuyến nghị sử dụng trong khoa học pháp y.

5.2 Tủ sấy, đối lưu cưỡng bức có khả năng luôn duy trì nhiệt độ ở $(103 \pm 2) ^\circ\text{C}$ trong quá trình sấy mẫu đến khi đạt được khối lượng không đổi. Hơi ẩm sẽ được thoát ra ngoài qua lỗ thông.

5.3 Bình hút ẩm, kín có chứa chất hút ẩm (ví dụ: silica gel, canxi clorua, v.v...) để duy trì môi trường khô.

5.4 Dao cắt mẫu gỗ, sử dụng để trích mảnh gỗ mỏng từ mẫu gỗ.

5.5 Nhíp gấp mảnh gỗ mỏng, sử dụng để gấp mảnh gỗ mỏng khi thao tác thu thập phổ khối.

5.6 Polyetylen glycol 600 (PEG 600), một polyme có trọng lượng phân tử trung bình là 600 được sử dụng để hiệu chuẩn thiết bị trước khi thực hiện việc thu thập quang phổ khối lượng.

5.7 Methanol, đạt chuẩn HPLC (sắc ký lỏng hiệu năng cao) được sử dụng để vệ sinh thiết bị.

5.8 Khí Nitơ và Heli, độ tinh khiết 99,99%.

6 Chuẩn bị mẫu để xây dựng cơ sở dữ liệu

6.1 Lấy mẫu và chuẩn bị mẫu theo TCVN xxxxx-2: 2025.

6.2 Các mẫu gỗ phải được làm sạch bề mặt, yêu cầu không được xử lý biến tính bằng hóa chất, nhiệt độ, không được lãn vecni, sơn, dầu, hoặc các chất phủ khác.

6.3 Thực hiện giám định khẳng định các mẫu gỗ lấy trên cây đứng (bằng khoan tăng trưởng) theo phương pháp hình thái học (tức sử dụng hoa, lá hoặc quả của cây đó để xác định). Đối với mẫu gỗ được thu thập trên cây đã chặt hạ, khúc gỗ tròn hay gỗ xẻ thì thực hiện giám định khẳng định theo TCVN 14121: 2024 và có thể sử dụng hoa, lá hoặc quả để xác định, kiểm chứng kết quả nếu nghi ngờ theo phương pháp hình thái học.

6.4 Sau khi giám định khẳng định, các mẫu được ký hiệu và mã hóa dữ liệu với đầy đủ thông tin về tên loài, chi, họ, nguồn gốc xuất xứ và một số thông tin khác,...

6.5 Sau khi chuẩn bị, bảo quản mẫu thử trong các điều kiện sao cho độ ẩm không thay đổi trước khi sử dụng.

7 Cách tiến hành xây dựng cơ sở dữ liệu

7.1 Thu thập quang phổ khối lượng (phổ khối)

Thu thập phổ khối được tiến hành theo hướng dẫn sử dụng của thiết bị. Các phổ khối được hiệu chuẩn bằng dung dịch tham chiếu có khối lượng đã biết (dung dịch PEG 600).

Để lưu và chia sẻ/tích hợp được cơ sở dữ liệu phổ khối của các mẫu gỗ tham chiếu, điều quan trọng là phải cung cấp được các thông tin chi tiết và đặt tên tệp cho từng phổ khối riêng của các mẫu gỗ tham chiếu đó.

7.2 Chuẩn bị và lọc cơ sở dữ liệu

Trước khi xây dựng mô hình thống kê, cần phải loại bỏ các giá trị (ở đây là phổ khối) ngoại lệ khỏi các tập huấn luyện. Hawkins (1980) mô tả 'giá trị ngoại lệ' là một giá trị khi quan sát thấy lệch quá nhiều so với các giá trị khác (tức khác biệt và không đồng nhất với các giá trị còn lại).

Sử dụng phần mềm Mass Mountaineer để xây dựng bản đồ nhiệt, cho phép so sánh đồng thời tất cả dữ liệu quang phổ và xác định các giá trị ngoại lệ để loại bỏ.

Kiểm tra chéo các quang phổ với các quang phổ đã có trong cơ sở dữ liệu và với các quang phổ của các chất gây ô nhiễm đã biết để kiểm chứng kết quả.

CHÚ THÍCH: Những lý do có thể dẫn đến giá trị ngoại lệ là: (1) Các mẫu được dán nhãn/ký hiệu sai hoặc xác định sai; (2) Việc thu thập phổ khối không được thực hiện đúng quy trình; (3) Lấy mẫu từ phần gỗ dác hoặc có dính phần gỗ dác; (4) Mẫu đã bị xử lý/nhiễm hóa chất, biến tính.

7.3 Xây dựng mô hình

Chỉ sử dụng phổ tham chiếu có sự đồng thuận (tức cường độ tương đối của các phân tử là giống/tương đồng nhau).

Đưa ra phổ tham chiếu để kiểm tra về hiện tượng đồng nhất về cường độ của các phổ và xác thực mô hình.

Xây dựng các mô hình thống kê để phân loại loài/nguồn gốc bằng cách sử dụng cùng số lượng khối phổ của mỗi loài/nguồn gốc và lựa chọn loại phân tích thống kê phù hợp (phụ thuộc vào loài/nguồn gốc (nhóm) đang được nghiên cứu). Sử dụng các phân tích thống kê như: (i) PCA (Principal Component Analysis), (ii) KDA (Kernel Discriminant Analysis) hoặc (iii) DAPC (Discriminant Analysis of Principal Components) với phần mềm Mass Mountaineer được khuyến nghị cho giám định pháp y vì phần mềm này dễ dàng tạo ra kết quả định lượng và cung cấp ước tính xác suất, thường được sử dụng tại tòa án để mô tả mức độ chính xác của các phân tích.

CHÚ THÍCH: Việc ứng dụng DART - TOFMS để xác định loại gỗ là một kỹ thuật tương đối mới (từ năm 2012), do đó các lựa chọn thuật toán để xây dựng mô hình không giới hạn ở các loại phân tích thống kê như trên vì còn nhiều các loại công cụ toán học khác có thể sử dụng.

7.4 Thẩm định và tối ưu hóa mô hình

Trước khi hoàn thiện mô hình, dữ liệu khối phổ nên được sàng lọc và thẩm định lại để tối ưu hóa độ chính xác trong phân loại. Tùy thuộc vào thuật toán phân loại, việc tối ưu hóa mô hình có thể được thực hiện như sau:

- Giảm số lượng biến (tổ hợp ion) bằng cách lựa chọn cẩn thận các thành phần trong PCA.
- Lựa chọn ion để xây dựng mô hình bằng cách sử dụng phân tích tỷ lệ Fisher hoặc kiểm tra bằng cách quan sát trực quan cẩn thận trên các bản đồ nhiệt.
- Dung sai khối lượng cho việc phân loại và cài đặt ngưỡng tương đối (tham số tiền xử lý) và số lượng ion (tham số phân loại) có thể được sàng lọc theo cách tự động khi sử dụng thuật toán Random Forest hoặc bất kỳ thuật toán nào phụ thuộc vào khung dữ liệu và không hoạt động với các tệp văn bản riêng lẻ để xây dựng mô hình, như được mô tả trong Deklerck *et al.* (2019).

Kiểm tra mô hình về độ phù hợp và độ chính xác khi xác phân loại bằng cách loại bỏ phổ tham chiếu (loại bỏ một xác thực chéo, LOOCV) và bằng cách phân tích khối phổ tham chiếu chưa sử dụng

(không sử dụng) trong quá trình xây dựng mô hình (đôi khi được gọi là “khối phổ xác thực”). Các tham số mô hình được tối ưu hóa khi đạt được: (i) LOOCV cao nhất có thể và (ii) phân loại chính xác các khối phổ xác thực.

7.5 Đặt tên file (tệp dữ liệu)

Sử dụng excel để đặt tên cho từng tệp dữ liệu quang phổ khối lượng của các loại gỗ (xem hướng dẫn ở Phụ lục 1).

7.6 Tạo thư viện NIST

Mỗi khối phổ được tìm kiếm trong thư viện ForeST[®] bằng phần mềm Mass Mountaineer. Phần mềm này sử dụng thuật toán do Viện Khoa học và Công nghệ Quốc gia (NIST - National Institute of Science and Technology) phát triển để tìm kiếm trong cơ sở dữ liệu các khối phổ có thành phần hóa học giống nhất với khối phổ của các loại gỗ chưa biết tên.

Sử dụng phần mềm Mass Mountaineer và NIST MS Search để thực hiện các bước tạo thư viện NIST (xem hướng dẫn ở Phụ lục 2).

Thư mục tài liệu tham khảo

- [1] Deklerck, V., T. Mortier, N. Goeders, R.B. Cody, W. Waegeman, E. Espinoza, J. Van Acker, J. Van den Bulcke and H. Beeckman (2019). *A protocol for automated timber species identification using metabolome profiling*. Wood Science and Technology.
- [2] D., Hawkins (1980). *Identification of Outliers*. Chapman and Hall, London.
- [3] Schmitz, N., Beeckman, H., Blanc-Jolivet, C., Boeschoten, L., Braga, J. W., Cabezas, J. A., ...& Zuidema, P. A. (2020). *Tổng quan về các phương pháp sử dụng trong giám định gỗ*. Hướng dẫn về các phương pháp truy xuất gỗ.
- [4] US-WISC. *Hướng dẫn đặt tên tệp dữ liệu*
- [5] US-WISC. *Hướng dẫn tạo thư viện NIST*
- [6] US-WISC. *Giám định thực vật bằng công nghệ quang phổ khối lượng (DART-TOFMS)*.
- [7] US-WISC. *Hướng dẫn phân tích giám định bằng DART TOFMS và Thu thập dữ liệu*.
-

PHỤ LỤC A
(Tham khảo)
Cách đặt tên tệp dữ liệu

- Để bắt đầu, hãy truy cập cơ sở dữ liệu WD hoặc Ww trong Excel.
- Sao chép các dòng từ Excel của các mẫu đích mà bạn muốn tạo tên tệp bằng cách đánh dấu các dòng rồi nhấn phím Ctrl + C.

Binomial_Nomenclature	Ww_Num	Collection	Other_Nu	Subspecie	Sample_L	Previous	Previous	Collector	Source_Ty	Wild_Cult	Specimen	Heartwo
Abies balsamea	Ww22036	SUNYESF-8089			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block	
Abies balsamea	Ww22036	SUNYESF-8252			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block	
Abies balsamea	Ww22036	SUNYESF-8653			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block	
Abies balsamea	Ww22037	SUNYESF-8660			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block	
Abies grandis	Ww21006	Gleaves_10_483					Private	William G	Private		Block	
Abies grandis	Ww22037	SUNYESF-8105			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block	
Abies grandis	Ww22037	SUNYESF-8124			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block	
Abies grandis	Ww22037	SUNYESF-8366			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block	
Abies procera	Ww22037	SUNYESF-8237			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block	
Abies sp.	Ww21003	TimberEngCo_34					Timber Engineering		Research		Block	
Acacia auriculiformis	Ww20047	100560					Royal Botanical Gard		Research		Block	
Acacia mangium	Ww20001	PZAN256V SOLOMON1119			Tower 1 Drawer 1		World Forest ID		Research		Sliver	
Acacia mangium	Ww20001	AOPS164V SOLOMON1119			Tower 1 Drawer 1		World Forest ID		Research		Sliver	
Acacia mangium	Ww20002	BHGN301\SIK108			Tower 1 Drawer 1		World Forest ID		Research		Sliver	
Acacia mangium	Ww22037	AAGZ598			Sliver Cabinet 1 Drav		World Forest ID		Research		Sliver	

- Chuyển thông tin mẫu đã sao chép sang một trang tính Excel mới bằng cách nhấn phím Ctrl và phím V.

Binomial_Nomenclature	Ww_Num	Collection_Num	Other_Nums	Subspecie	Sample_L	Previous	Previous	Collector	Source_Ty	Wild_Cult	Specimen	Heartwo	Notes
Abies balsamea	Ww220367	SUNYESF-8089			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block		
Abies balsamea	Ww220368	SUNYESF-8252			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block		
Abies balsamea	Ww220369	SUNYESF-8653			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block		
Abies balsamea	Ww220370	SUNYESF-8660			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block		
Abies grandis	Ww210062	Gleaves_10_483					Private	William G	Private		Block		
Abies grandis	Ww220371	SUNYESF-8105			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block		
Abies grandis	Ww220372	SUNYESF-8124			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block		
Abies grandis	Ww220373	SUNYESF-8366			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block		
Abies procera	Ww220374	SUNYESF-8237			Tower 1 Drawer 1	SUNY-ESF			Research		Block		
Abies sp.	Ww210033	TimberEngCo_34					Timber Engineering		Research		Block		

- Chỉ giữ lại các cột có nhãn: **Binomial_Nomenclature**, **Ww_Num** hoặc **WD_Num**, **Collection_Num**, **Country**, và **Family**.

A	B	C	D	E	F
Binomial_Nomenclature	Ww_Num	Collection_Num	Country	Family	
Abies balsamea	Ww220367	SUNYESF-8089	New York	Pinaceae	
Abies balsamea	Ww220368	SUNYESF-8252	Minnesota	Pinaceae	
Abies balsamea	Ww220369	SUNYESF-8653	Wisconsin	Pinaceae	
Abies balsamea	Ww220370	SUNYESF-8660	Maine	Pinaceae	
Abies grandis	Ww210062	Gleaves_10_483		Pinaceae	
Abies grandis	Ww220371	SUNYESF-8105	Washington	Pinaceae	
Abies grandis	Ww220372	SUNYESF-8124	Idaho	Pinaceae	
Abies grandis	Ww220373	SUNYESF-8366	Canada	Pinaceae	
Abies procera	Ww220374	SUNYESF-8237	Washington	Pinaceae	
Abies sp.	Ww210033	TimberEngCo_34		Pinaceae	

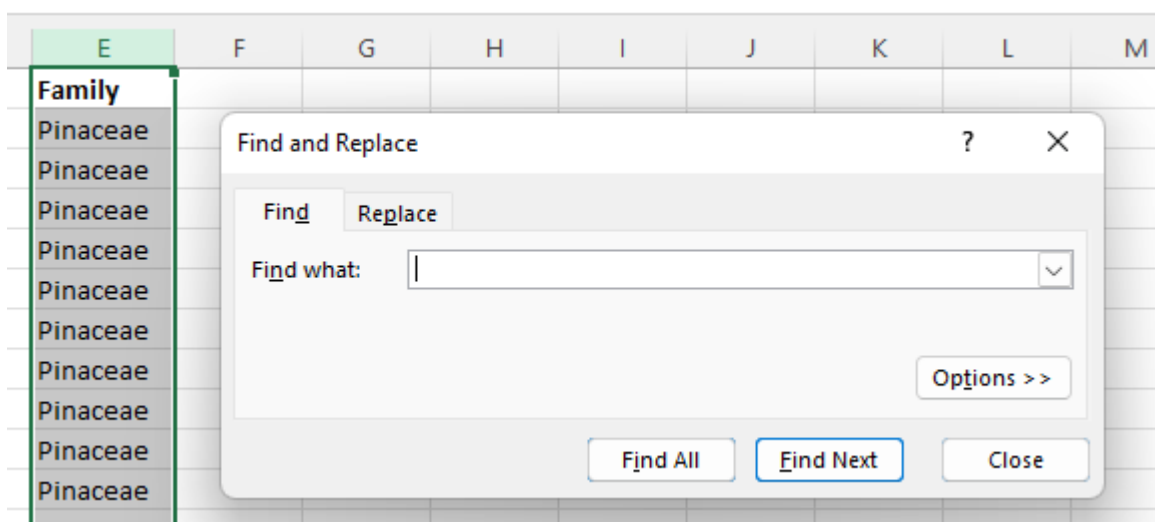
5. Thay đổi cột **Family** thành phiên bản viết tắt của họ bằng tất cả các chữ hoa. Ví dụ:

a. Pinaceae → PIN

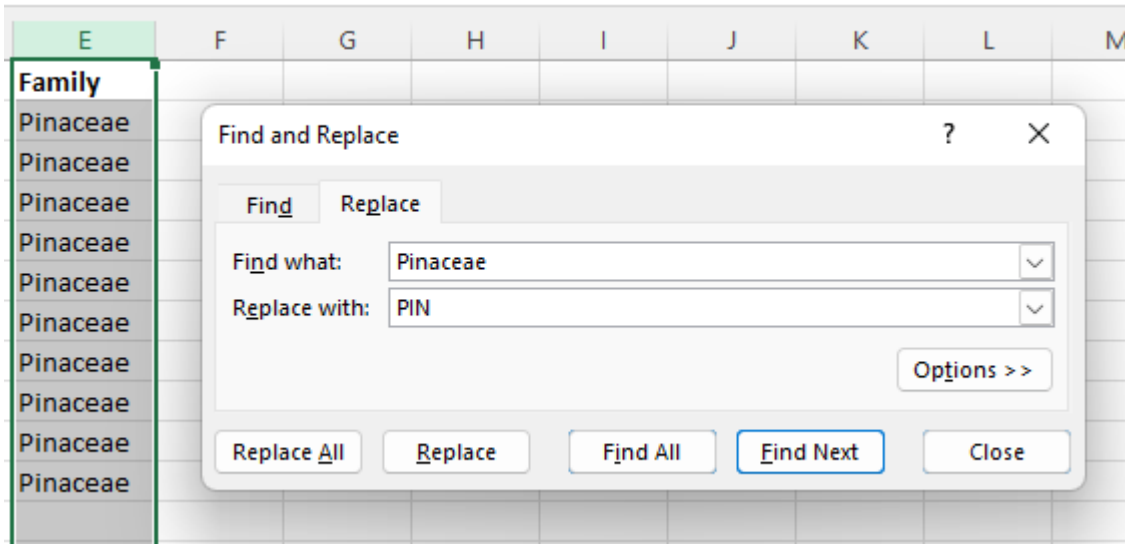
b. Fabaceae → FAB

i. **LƯU Ý: Nhiều Family (gia đình) có 3-4 chữ cái đầu giống nhau, hãy nhớ kiểm tra những chữ viết tắt nào đã được sử dụng trước khi tiếp tục.**

Điều này được thực hiện bằng cách đánh dấu cột **Family**, sau đó nhấn phím Ctrl và phím F. Thao tác này sẽ xuất hiện hộp **Find and Replace** (Tìm và Thay thế).



Nhấp vào tab **Replace** và nhập họ vào “Find what:” và tên viết tắt trong “Replace with:”, sau đó nhấp vào “Replace All”



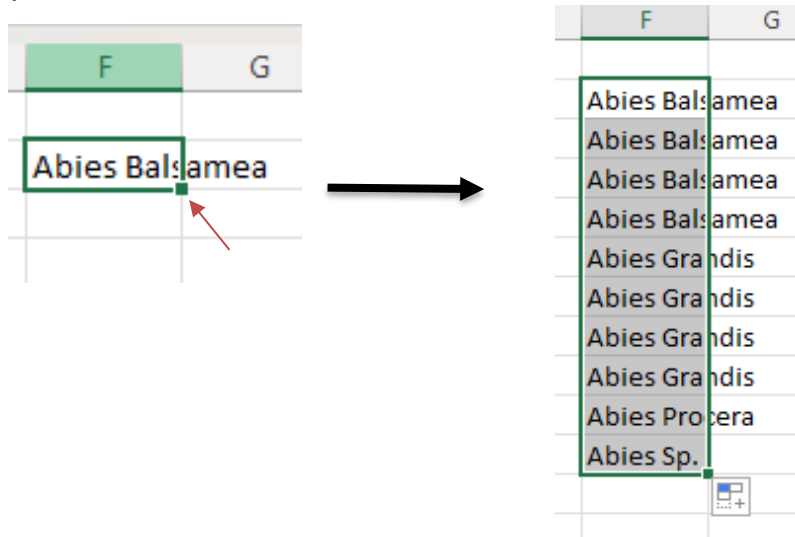
D	E	F
Country	Family	
New York	PIN	
Minnesota	PIN	
Wisconsin	PIN	
Maine	PIN	
	PIN	
Washington	PIN	
Idaho	PIN	
Canada	PIN	
Washington	PIN	
	PIN	

6. Thay đổi cột Binomial_Nomenclature để cả chi và loài đều được viết hoa: sử dụng ô liên kết trong cột F, nhập = PROPER (sau đó nhấp vào cột trống liền kề, đóng dấu ngoặc đơn và nhấn enter.)

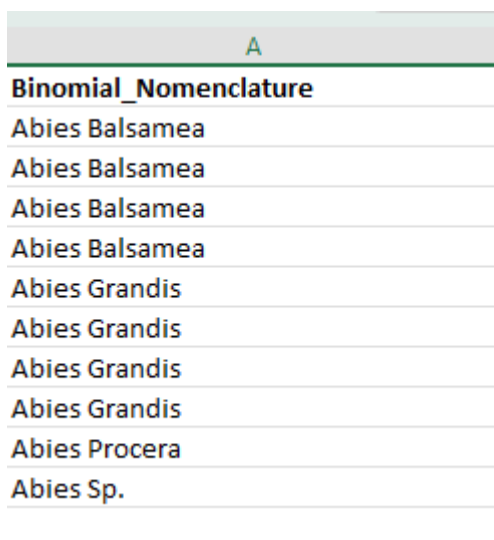
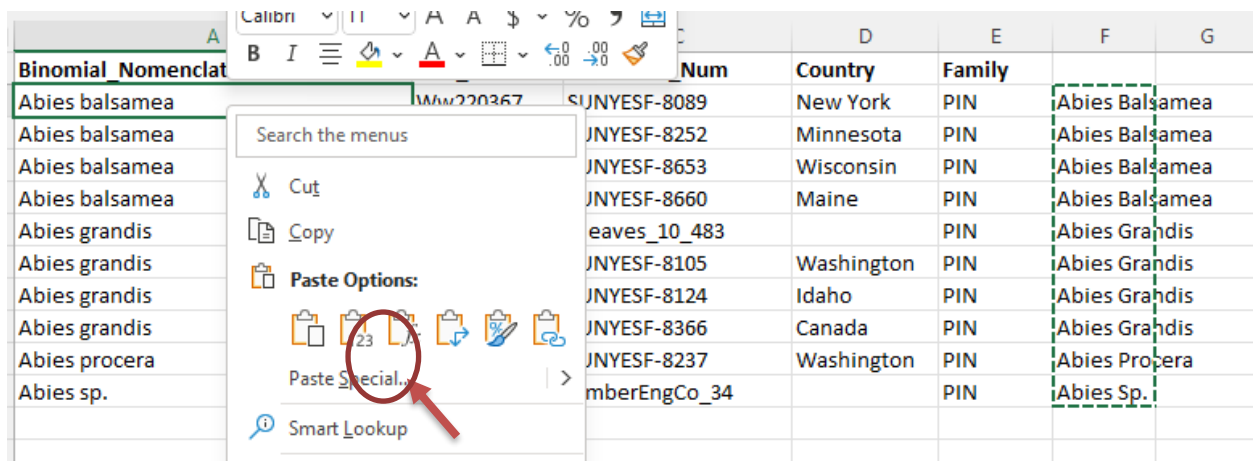
	A	B	C	D	E	F	G
	Binomial_Nomenclature	Ww_Num	Collection_Num	Country	Family		
	Abies balsamea	Ww220367	SUNYESF-8089	New York	PIN	=PROPER(A2)	
	Abies balsamea	Ww220368	SUNYESF-8252	Minnesota	PIN		
	Abies balsamea	Ww220369	SUNYESF-8653	Wisconsin	PIN		
	Abies balsamea	Ww220370	SUNYESF-8660	Maine	PIN		
	Abies grandis	Ww210062	Gleaves_10_483		PIN		
	Abies grandis	Ww220371	SUNYESF-8105	Washington	PIN		
	Abies grandis	Ww220372	SUNYESF-8124	Idaho	PIN		
	Abies grandis	Ww220373	SUNYESF-8366	Canada	PIN		
	Abies procera	Ww220374	SUNYESF-8237	Washington	PIN		
	Abies sp.	Ww210033	TimberEngCo_34		PIN		

	A	B	C	D	E	F	G
1	Binomial_Nomenclature	Ww_Num	Collection_Num	Country	Family		
2	Abies balsamea	Ww220367	SUNYESF-8089	New York	PIN	Abies Balsamea	
3	Abies balsamea	Ww220368	SUNYESF-8252	Minnesota	PIN		
4	Abies balsamea	Ww220369	SUNYESF-8653	Wisconsin	PIN		

7. Nhấp và kéo góc dưới cùng bên phải của ô mới được đánh dấu để tự động điền cho tất cả cột **Binomial_Nomenclature**

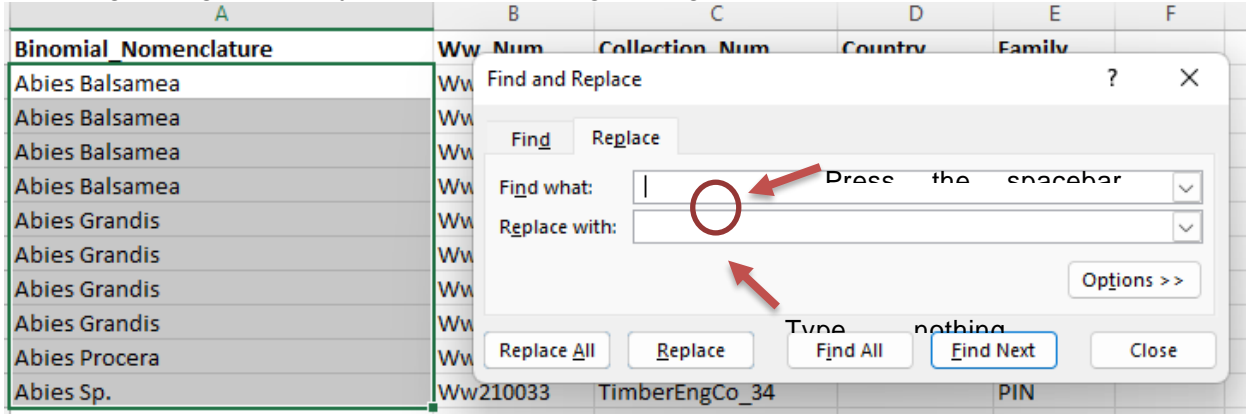


8. Nhấp Ctrl + c để sao chép các ô được đánh dấu và sau đó dán chúng dưới dạng giá trị trên các tên **Binomial_Nomenclature** ban đầu. Bằng cách dán dưới dạng giá trị, hàm không bị sao chép, chỉ là tên của loài.



Cột mới được sử dụng để tạo tên GenusSpecies hiện có thể bị xóa.

9. Thực hiện theo các quy trình tương tự như bước 5, đánh dấu các tên mới, viết hoa trong Binomial_Nomenclature, sau đó nhấn phím cách một lần để tìm khoảng trắng, "" và thay thế bằng không. Điều này sẽ loại bỏ khoảng cách giữa các tên loài.

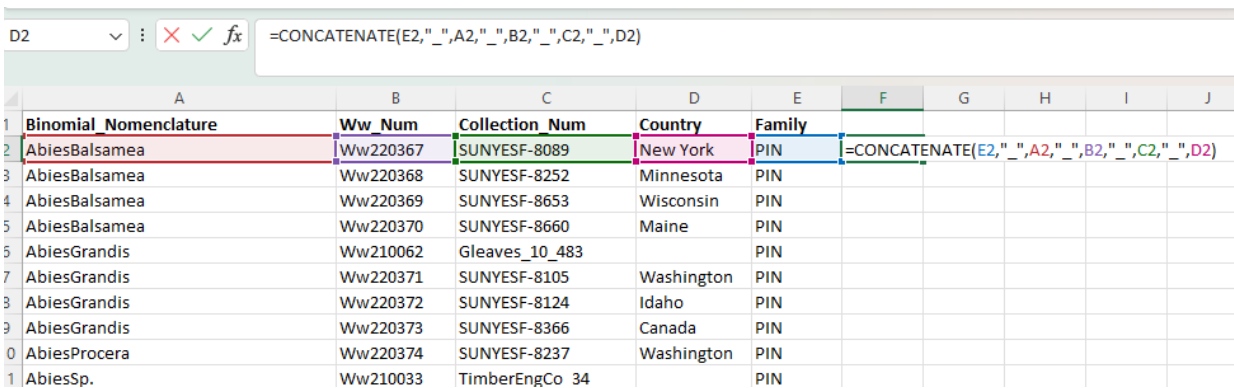


Binomial_Nomenclature
AbiesBalsamea
AbiesBalsamea
AbiesBalsamea
AbiesBalsamea
AbiesGrandis
AbiesGrandis
AbiesGrandis
AbiesGrandis
AbiesProcera
AbiesSp.

Tất cả các ô hiện đã sẵn sàng để sử dụng làm tên tệp.

10. Trong một cột không sử dụng, hãy nhập = CONCATENATE (và sau đó làm theo định dạng sau:
= CONCATENATE

(Family,"_",Binomial_Nomenclature,"_",Ww_Num,"_",Collection_Num,"_",Country)



Kết quả sẽ như sau:

File Names
PIN_AbiesBalsamea_Ww220367_SUNYESF-8089_New York
PIN_AbiesBalsamea_Ww220368_SUNYESF-8252_Minnesota
PIN_AbiesBalsamea_Ww220369_SUNYESF-8653_Wisconsin
PIN_AbiesBalsamea_Ww220370_SUNYESF-8660_Maine
PIN_AbiesGrandis_Ww210062_Gleaves_10_483
PIN_AbiesGrandis_Ww220371_SUNYESF-8105_Washington
PIN_AbiesGrandis_Ww220372_SUNYESF-8124_Idaho
PIN_AbiesGrandis_Ww220373_SUNYESF-8366_Canada
PIN_AbiesProcera_Ww220374_SUNYESF-8237_Washington
PIN_AbiesSp._Ww210033_TimberEngCo_34

Tên cuối cùng sẽ như sau:

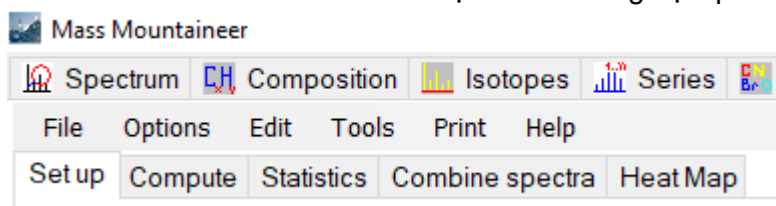
1	File Names
2	PIN_AbiesBalsamea_Ww220367_SUNYESF-8089_New York
3	PIN_AbiesBalsamea_Ww220368_SUNYESF-8252_Minnesota
4	PIN_AbiesBalsamea_Ww220369_SUNYESF-8653_Wisconsin
5	PIN_AbiesBalsamea_Ww220370_SUNYESF-8660_Maine
6	PIN_AbiesGrandis_Ww210062_Gleaves_10_483
7	PIN_AbiesGrandis_Ww220371_SUNYESF-8105_Washington
8	PIN_AbiesGrandis_Ww220372_SUNYESF-8124_Idaho
9	PIN_AbiesGrandis_Ww220373_SUNYESF-8366_Canada
10	PIN_AbiesProcera_Ww220374_SUNYESF-8237_Washington
11	PIN_AbiesSp._Ww210033_TimberEngCo_34

PHỤ LỤC B

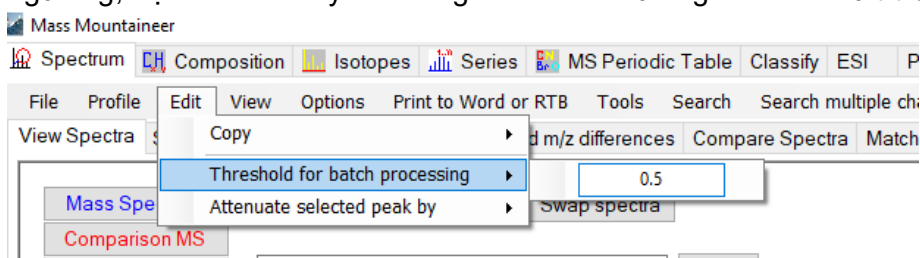
(Tham khảo)

Cách tạo thư viện NIST

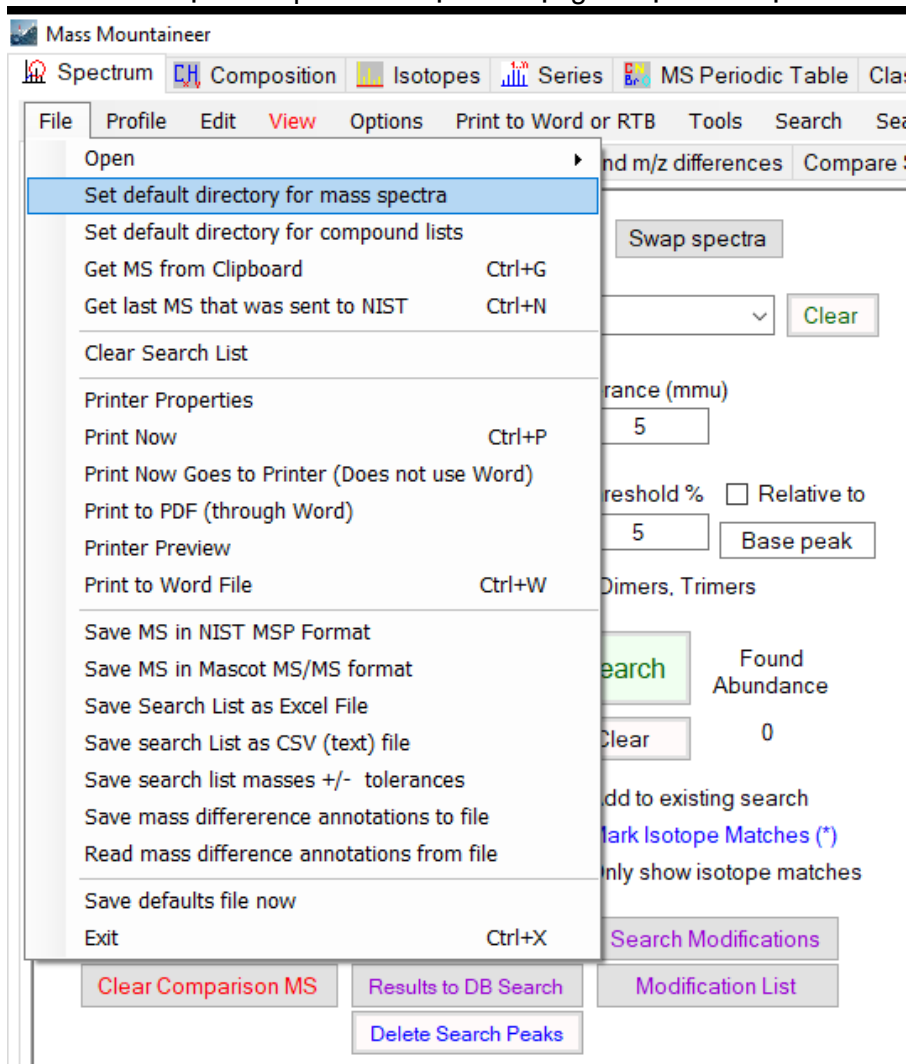
- Mở phần mềm Mass Mountaineer và chọn thanh công cụ Spectrum



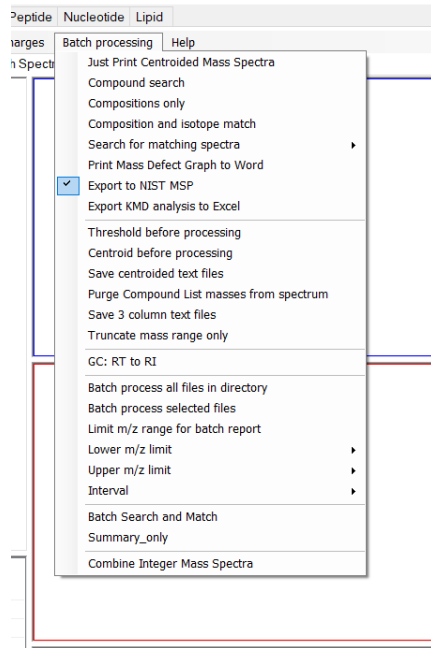
- LƯU Ý:** Ngưỡng mặc định cho quy trình này là 0,5, nếu cần phải điều chỉnh ngưỡng, bạn có thể thay đổi bằng cách điều hướng đến nút Edit trong Spectrum.



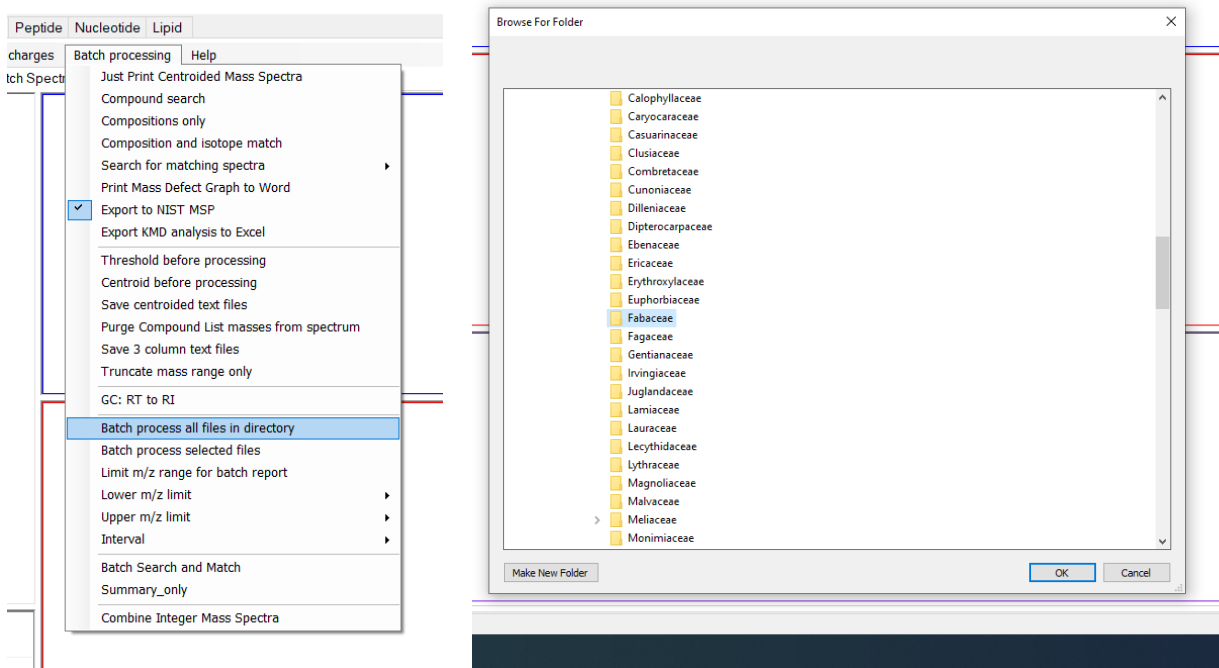
- Đặt đường dẫn đến thư mục khối phổ sẽ được sử dụng để tạo thư viện tìm kiếm NIST.



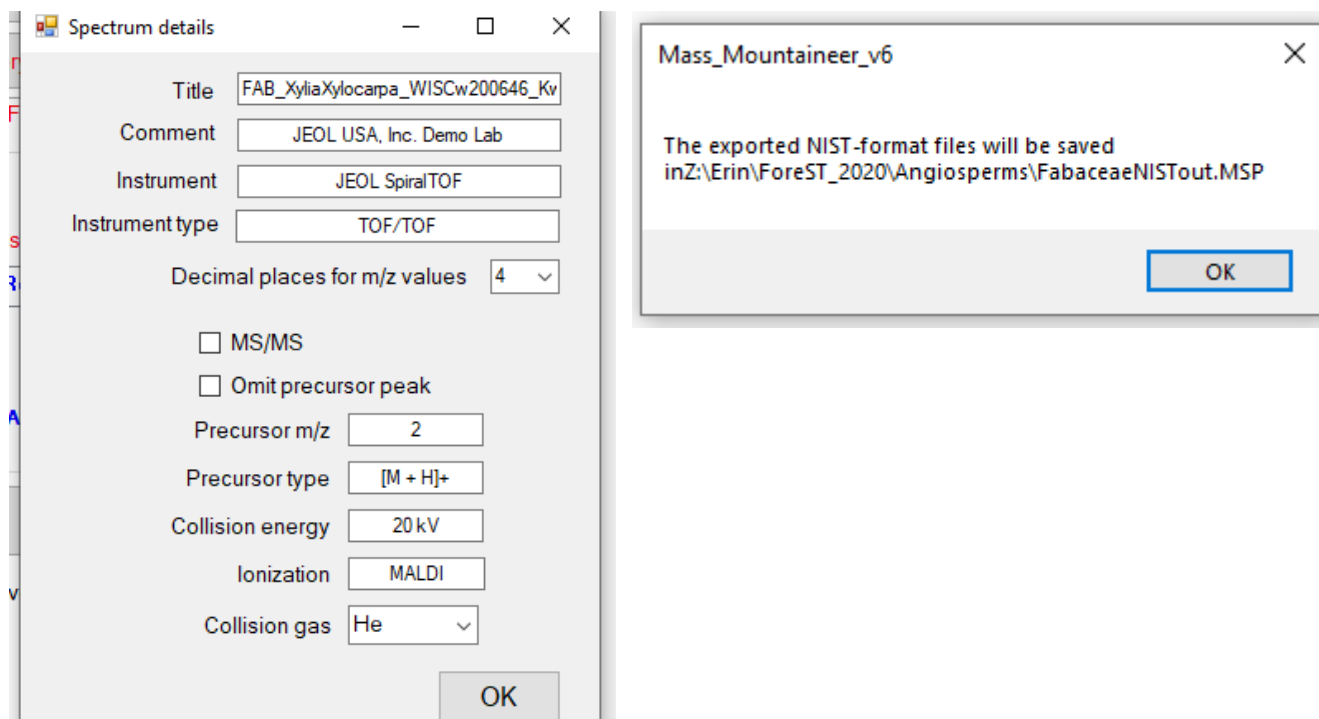
3. Chọn Batch Processing và chọn Export to NIST MSP. Sau đó bỏ chọn bất kỳ tùy chọn nào khác đã chọn .



4. Chọn Batch process để xử lý hàng loạt tất cả các tệp trong thư mục



5. Thay đổi Decimal places for m/z values thành 4. Bỏ chọn hộp MS/MS. Tất cả các thiết lập khác phải khớp với hình ảnh bên dưới. Nhấp vào OK và kiểm tra xem các tệp đã xuất của bạn sẽ được lưu trong đúng đường dẫn.



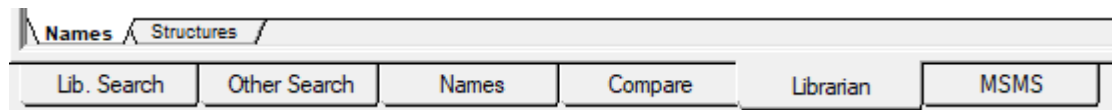
6. Có thể theo dõi quá trình xử lý ở góc dưới bên trái của màn hình Mass Mountaineer. Các tập dữ liệu lớn sẽ mất nhiều thời gian hơn.



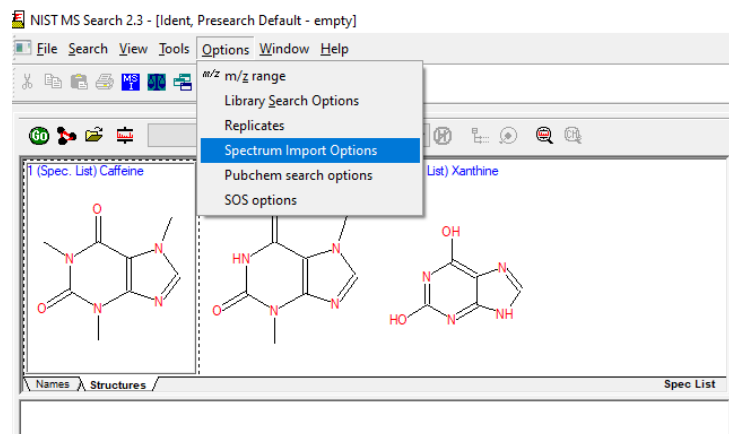
7. Kiểm tra thư mục khối phổ để tìm tệp sau:

Name	Date modified	Type	Size
NISTout	2/1/2022 2:34 PM	Windows Installer Patch	62,780 KB

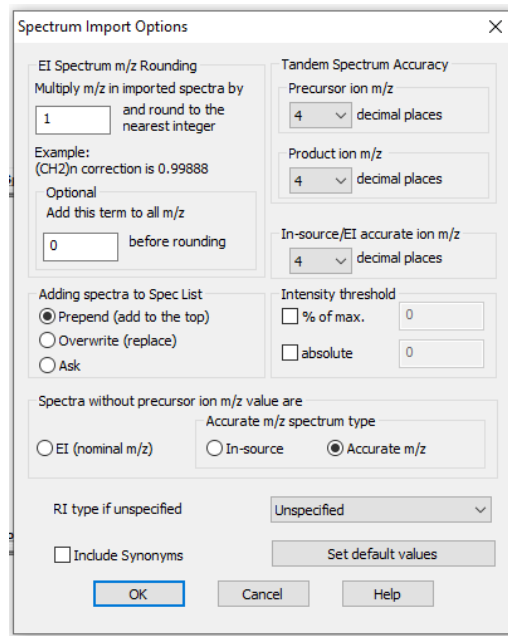
8. Mở MS Search  và chọn Librarian ở phía dưới bên trái của màn hình



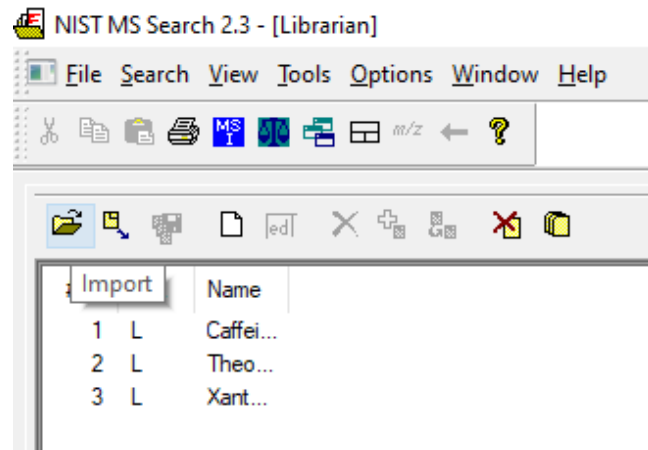
9. Chọn Options ở phía trên và chọn Spectrum Import Options



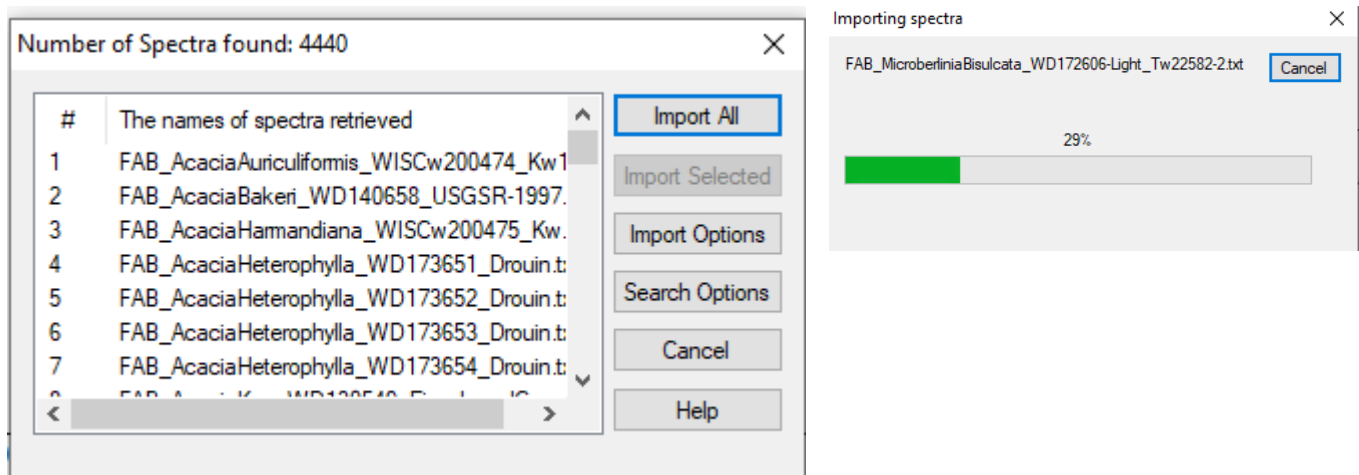
10. Chọn Accurate m/z. Tất cả các thiết lập khác phải như sau:
- LƯU Ý:** Không sử dụng cài đặt nominal m/z.



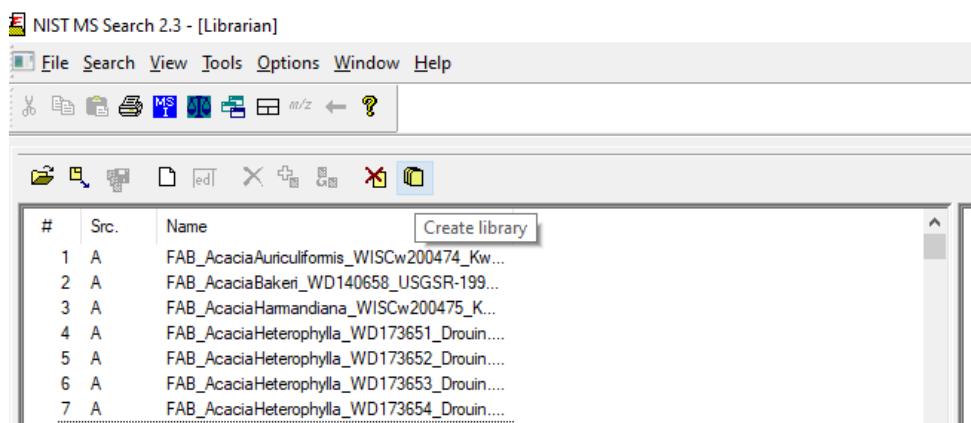
11. Chọn biểu tượng Import ở phía trên bên trái của màn hình.



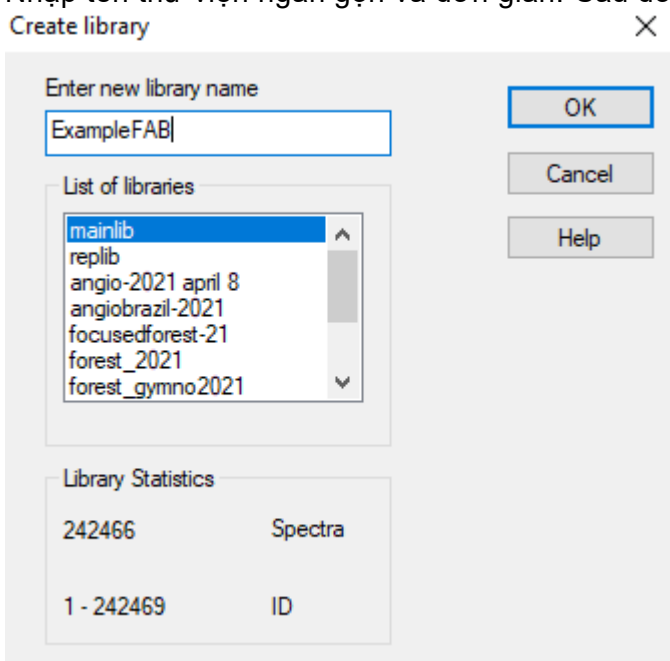
12. Tìm tệp dữ liệu NISTout được tạo từ Bước 6. Sau đó chọn Import All. Hủy tìm kiếm Background, thao tác này tự động nhưng không cần thiết và sẽ làm tăng thời gian cho quá trình xử lý.



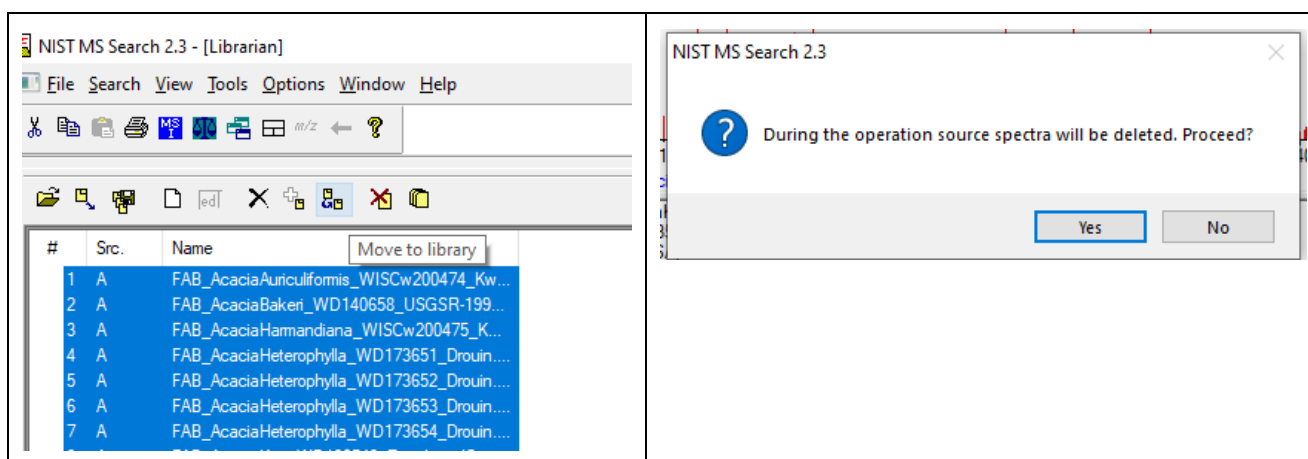
13. Bây giờ các khối phổ đã được nhập, chọn Create Library



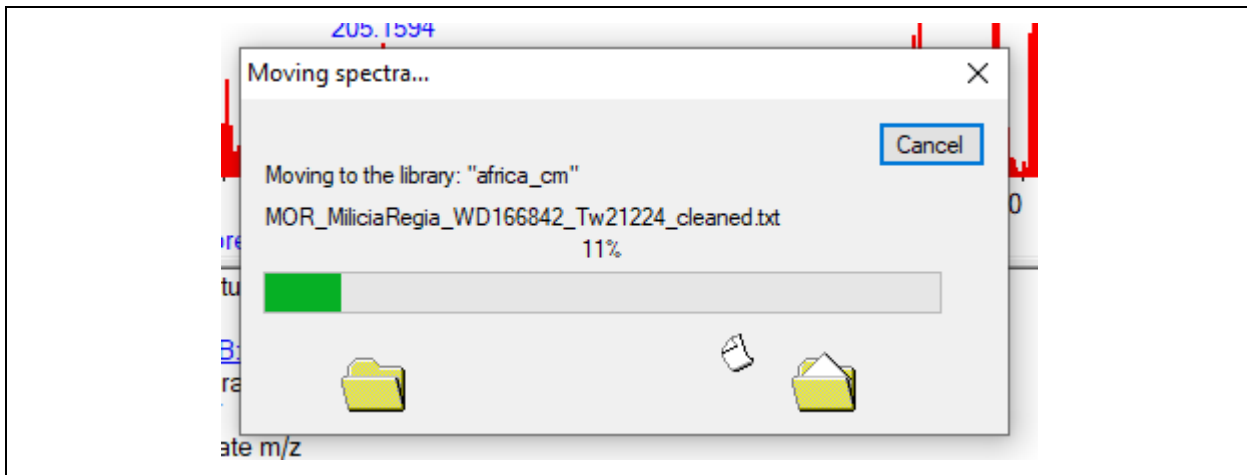
14. Nhập tên thư viện ngắn gọn và đơn giản. Sau đó nhấp vào OK



15. Nhấp vào bất kỳ tệp khối phổ nào trong ô bên trái (Tên) rồi giữ Ctrl + A để chọn tất cả. Nhấp vào biểu tượng Di chuyển đến Thư viện. Nhấp vào OK.



16. Chọn tên thư viện vừa tạo và nhấp vào OK. Thư viện sẽ bắt đầu tích hợp các quang phổ.



17. Sau bước cuối cùng này, thư viện đã sẵn sàng để sử dụng. Có thể thay đổi thư viện bằng cách điều hướng đến tab Composition, chọn NIST Search và chọn thư viện mục tiêu từ danh sách.

