安捷伦 Chemstation 工作站下峰面积加和高阶用法之化合物组

黄河,杨李

(1.四川省化工质量安全检测研究院,四川 610031)

摘要: 使用安捷伦 Chemstation 工作站的化合物组功能来实现峰面积加和,以此来实现对 有同分异构体化合物的计算。

关键词: Chemstation 工作站,峰面积加和,化合物组

在分析检测中,常常会有需要对多个化合物做汇总计算的情况。通常可以使用峰面积 加和的方式计算。但对于多个化合物,化合物之间有其他峰的情况下,不能使用加和方 式。此时可以使用化合物组来实现。下面就以除虫菊素为例,该产品包含6个化合物,分 别是除虫菊素 I,除虫菊素 II,瓜叶菊素 I,瓜叶菊素 II,茉酮菊素 I,茉酮菊素 II,标品上 只标注了6个化合物浓度总和,最终产品检测结果也只需要计算总浓度。 1.新建校正表,输入化合物浓度,这里输入总浓度 20,并输入各个化合物名称



图 1 建立校正表,输入浓度

 2. 在校正表的"组"里输入组编号,本例中6个化合物编号都为1,然后在弹出的对 话框里输入组名称"除虫菊素",并勾选"组含量计算",如图



图 2 设置组编号及组名

3. 继续添加新的级别,添加完成后,点击菜单栏校正/化合物组



4. 在化合物组细节中,在"组校正设置"中输入另外4个级别的浓度

物组细节:LC_1260_	VWD	善	类型	行 /	进样	样品赢
		2	2	7	1	P1-D1
345: 1		1	2	8	1	P1-D2
8名:		10	2	9	1	P1-D3
除虫菊素			20	10	1	P1-D4
目成员:			-	11	1	P1-D5
1: 瓜叶菊素田	*					
2:除虫菊素II 2:辛酮霉素II						
1:瓜叶菊素1	+					
		6	9 校正	₩ 信号	An S	电化 💩 🤊
		a. 17	5 III. 1	/ 据供	- 28120	(dictable)
2 组含量计算		8 G		8 JIKH	. 197.2	
组校正设置		用的	言号			5 🗞
级别 含量	📃 该组是内标					
1 20.000	内标嶂晶号:1		VWD1A, V	Vavelength	*222 nm	(Demo))所具3
		nau -				
2 50	样品默认值					
 ✓ 2 50 ✓ 3 80 	样品默认值 内标含量:	250				
✓ 2 50 ✓ 3 80 ✓ 4 100	样品默认值 内标含量: 20.000	250-				
2 50 3 80 4 100 5 150	样品默认值 内标含里: 20.000	260				
2 50 3 80 4 100 5 150	样品默认值 内标含量: 20.000	250 200 150				
✓ 2 50 ✓ 3 80 ✓ 4 100 ✓ 5 150	群品数认值 内标合里: 20.000	250 200 150				
 ✓ 2 50 ✓ 3 80 ✓ 4 100 ✓ 5 150 	 样品默认值 内标会里: 20.000 20.000	260 200 150 100				
 ✓ 2 50 ✓ 3 80 ✓ 4 100 ✓ 5 150 	样品級以值 内持会型: 20.000	250 200 150 100 50				
	 杵品数以値 ○月香金量: 20.000 航空 取消 秋田 秋田 秋田 秋田	250 200 150 100 50			~	
2 501 3 80 4 100 5 150 3 5	件品設认值 7所会型: 20.000 設満 幕助	250 200 150 50 0 0			5	
 2 501 3 80 2 4 100 2 5 150 i i i i i i i i 		250 200 150 100 50 0		~~~~~	5	

图 4 输入各个级别的浓度

5. 输入浓度后点确定,此时可以看到各个化合物按照面积百分比方式计算得到各自的浓度,并绘制标准曲线。



图 5 校正曲线(部分)

6. 再设置报告格式为外标法,预览报告,即可得到样品各个化合物的浓度以及最后浓

度加和



图 6 最终报告

总结:此方法类似于 MassHunter 中的面积加和,只知道化合物总浓度,然后将面积加和后,根据峰面积百分比来计算各个化合物浓度,最后计算得总浓度。是面积加和的变种。