

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，茛菊素 I，茛菊素 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

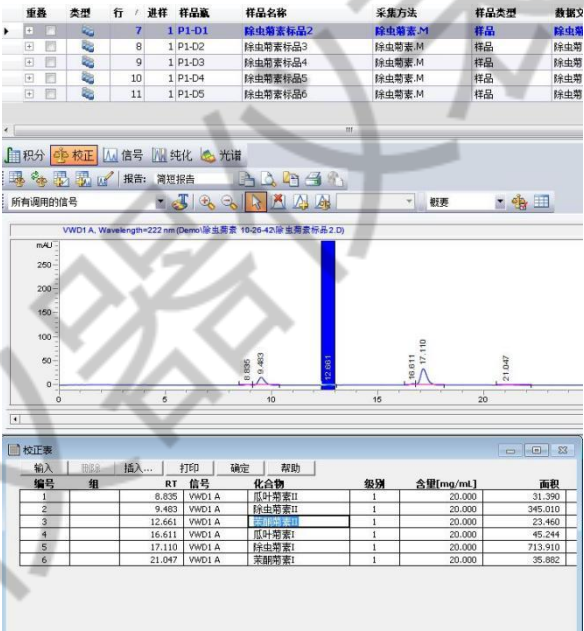


图 1 建立校正表，输入浓度

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

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。

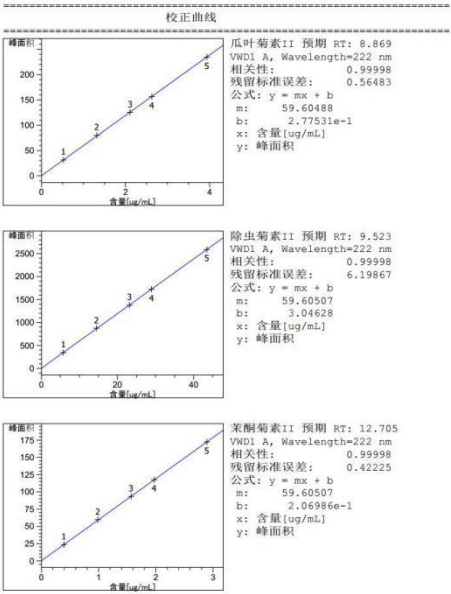


图 5 校正曲线（部分）

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

保留时间 [min]	类型	峰面积 [mAU*s]	含量/峰面积	含量 [ug/mL]	组	名称
8.807	BV	93.89981	1.67276e-2	1.57071	1	瓜叶菊素II
9.455	VBA	2087.75806	1.67526e-2	34.97541	1	除虫菊素II
12.659	BH	191.69243	1.67590e-2	3.21257	1	苯酚菊素II
16.595	HH	101.07394	1.67119e-2	1.68914	1	瓜叶菊素I
17.102	HB	4501.76611	1.67537e-2	75.42126	1	除虫菊素I
21.059	HBA	197.21567	1.67485e-2	3.30306	1	苯酚菊素I
总量:				120.17215		

组摘要

组	使用	峰面积	含量	分类名称
ID		[mAU*s]	[ug/mL]	
1	G	7173.40602	120.17215	除虫菊素

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。