

新手快速入门之如何使用 CDS 软件来进行背景扣除

刘炜

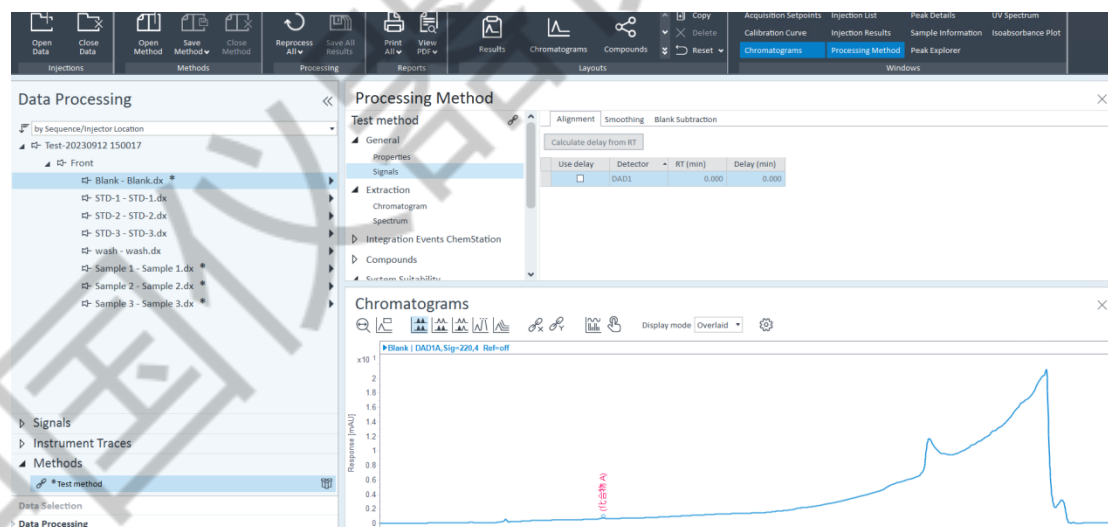
(富美实(上海)化学技术有限公司, 上海 200000)

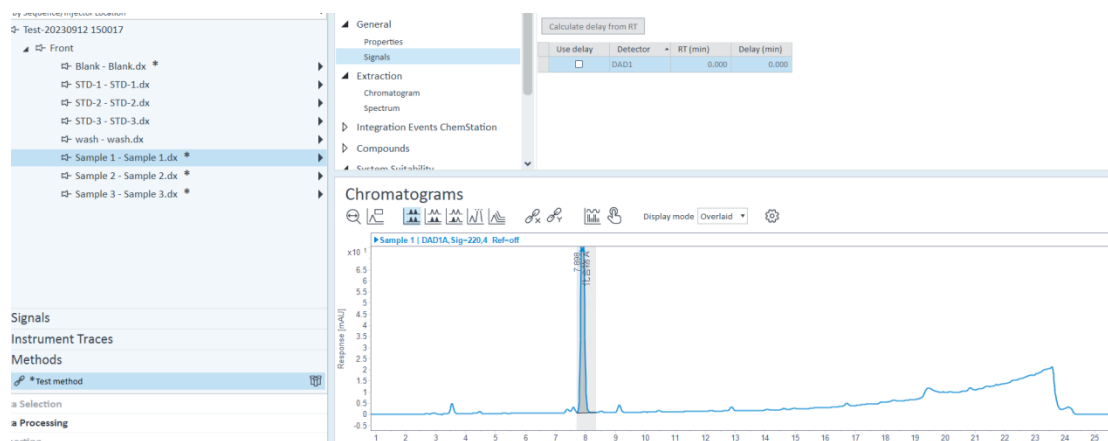
在上一节内容中, 我们学习了如何使用安捷伦 CDS 软件在数据分析界面进行报告模板添加以及如何导出分析报告。接下去在本节中, 我们将学习如何使用 CDS 软件来进行背景扣除。

背景扣除是一个比较实用的工具, 它可以用来对我们的色谱图进行美化, 也可以降低色谱柱本底流失对色谱出峰造成的影响。在环境监测领域已经有标准将背景扣除纳入其中, 作为实验分析的关键步骤。比如在做水质、土壤和沉积物中的 C10~C40 石油烃时, 由于方法采用的是半定量分析方法, 因而在对出峰进行积分时, 采用的是整段积分, 因而基线的波动就会对积分结果造成很大影响。只有在基线非常平齐的时候, 积分出来的结果才会更接近真实值。

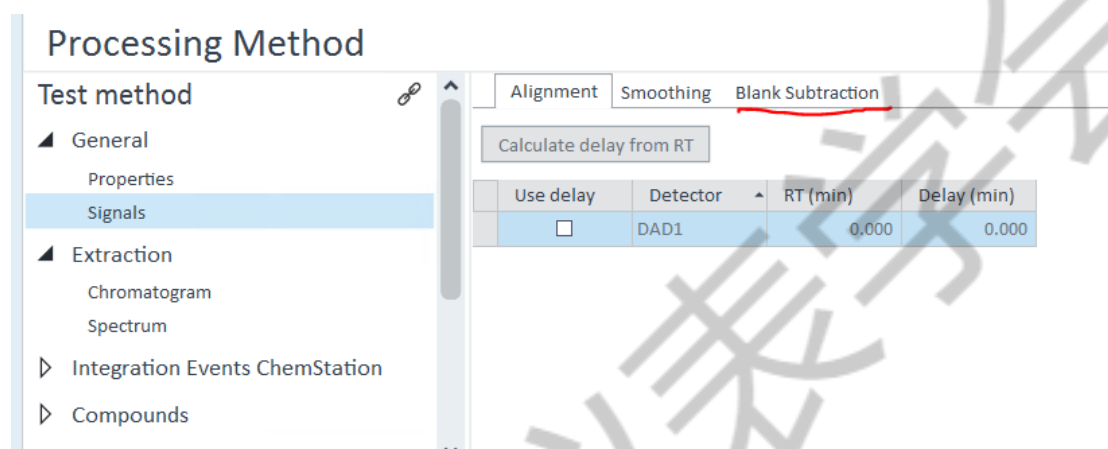
这里我们采用 CDS 软件进行背景扣除, 在执行此操作前, 我们首先需要采集背景图谱。在石油烃分析中, 升温速率快, 温度高, 对基线波动贡献最大的就是色谱柱本身的柱流失, 因而采集背景图谱时仅仅是采集不进溶剂进行程序升温时的背景噪音。在其余地方, 比如液相中, 我们可以采集进空针, 梯度洗脱造成的背景噪音。空白背景噪音采集完成后, 便可以进行样品分析。

◆数据采集完成后, 打开数据结果集, 点击 Blank 空白, 此时我们可以看到空白基线是不平的, 有起伏波动。选择的样品出峰图上后端也是有基线抬高的情况, 假如我们有目标峰出峰在起伏上, 而要进行整段积分, 那可想而知积分出来的结果是不对的。

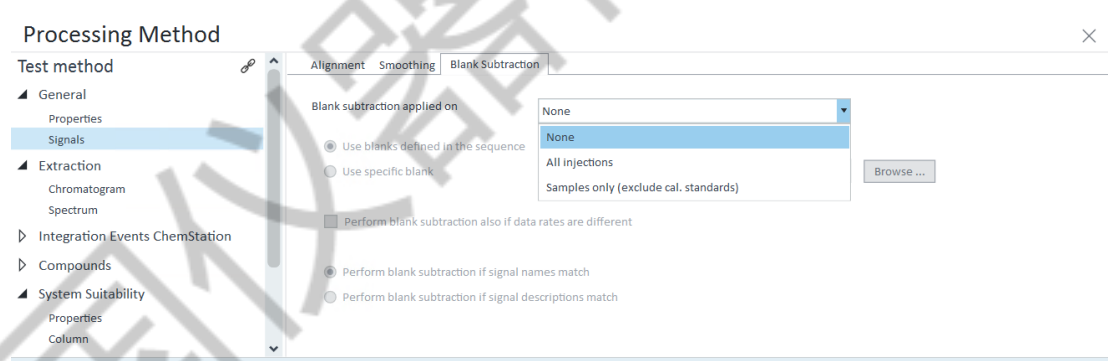




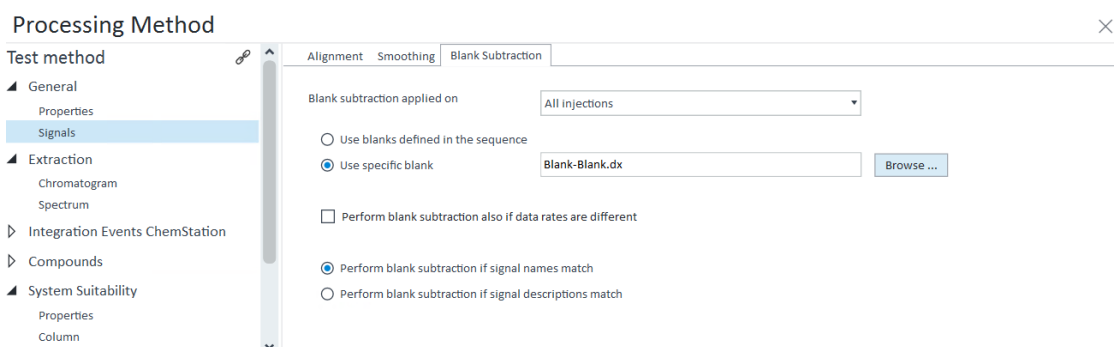
◆进入到批处理方法中，选择“General”下面的“Signals”信号，找到右边的“Blank Subtraction”空白扣除，点击进去。



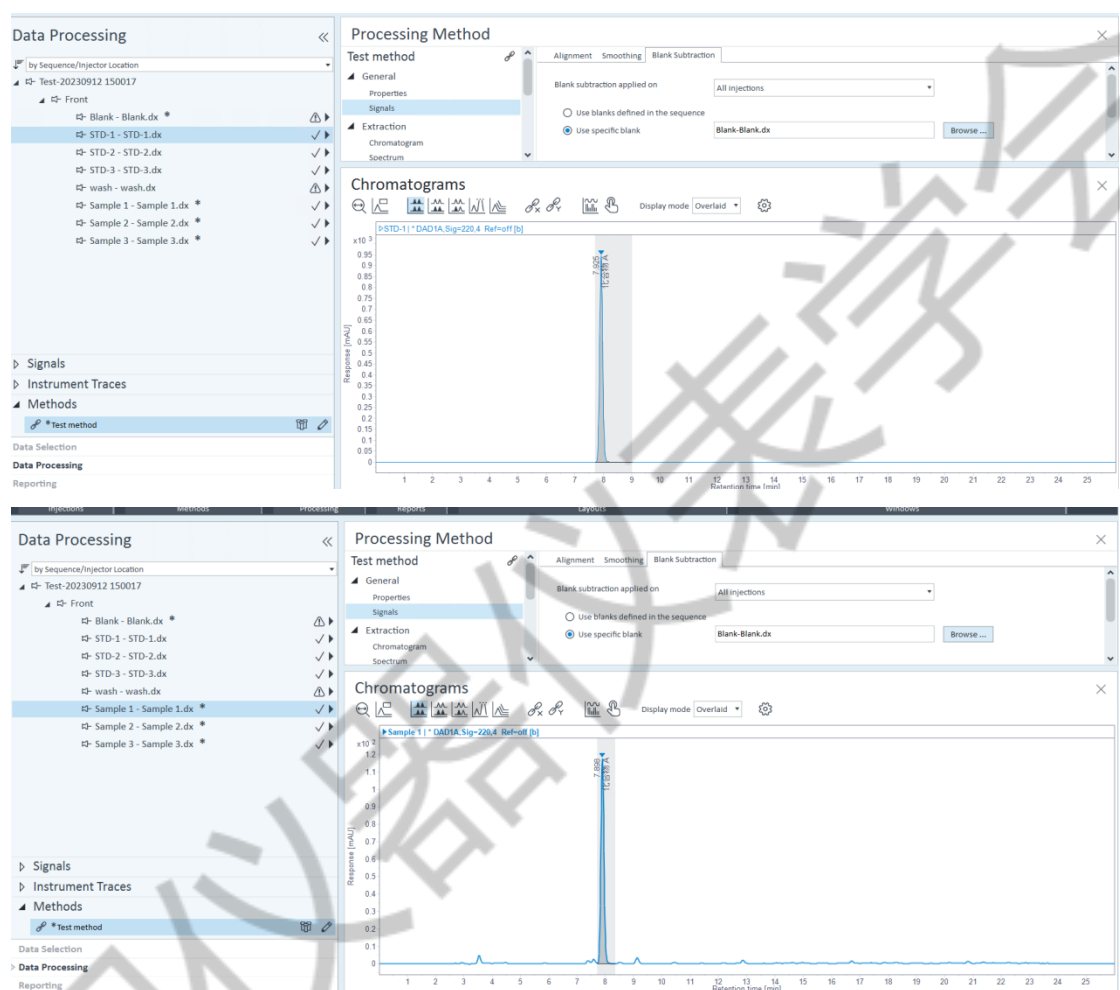
◆我们可以看到默认是“None”，剩下有两个选项，一个是“All injections”，代表将背景扣除应用到该序列所有进样中，另外一个“samples only”，代表只应用于样品中，校正曲线的几个点不扣除。这里我们选择所有“All injections”。



◆选择所有后原先灰色的地方都变亮可以进编辑选择了，“Use blanks defined in the sequence”意思是在一开始编辑序列的时候，在要作为背景扣除的那个空白栏里，样品类型就设定好，后面就默认该样作为背景扣除。如果一开始序列里没有进规定，那我们就选择下面“Use specific blank”给它指定一个样作为背景扣除，其余部分默认不变。



◆指定好要扣除的背景空白后，点击 process all，对所有样品执行这一背景扣除操作，然后保存结果。



接下来我们看一下背景扣除的效果，上面两张图分别为校正曲线扣除背景后的效果和样品扣除背景后的效果，我们可以对比一下一开始空白和样品图，注意 15~25min 一段基线，原先是抬高不平的，现在就很平齐，积分起来也不会有什么问题的，所以这个功能还是蛮实用的。本节使用 CDS 软件进行背景扣除的分享就到此结束了，下一节我们来学习如何使用 CDS 软件进行报告模板的自定义编辑。