

新手快速入门之如何使用 CDS 软件来进行校正曲线绘制？

刘炜

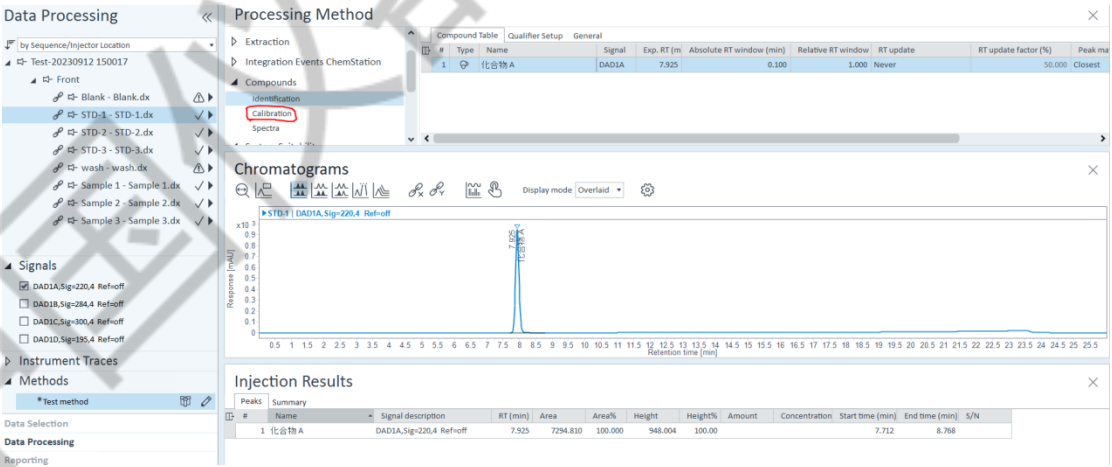
(富美实（上海）化学技术有限公司，上海 200000)

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批处理方法建立及如何优化积分参数，以及给化合物进行命名定性。接下去在本节中，我们将学习如何使用 CDS 软件进行校正曲线的绘制，来对样品进行定量分析。在绘制校正曲线之前，我们需要按照上一节内容所提到的，对样品进行一个批处理，将目标化合物都积分上，然后确定保留时间以及将所有化合物都命名好。这些步骤都做完后才好进行一个校正曲线的绘制。

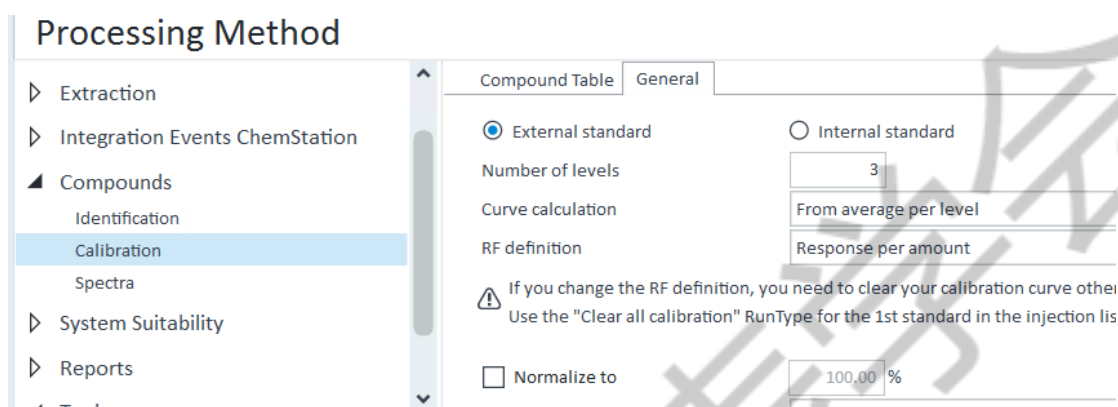
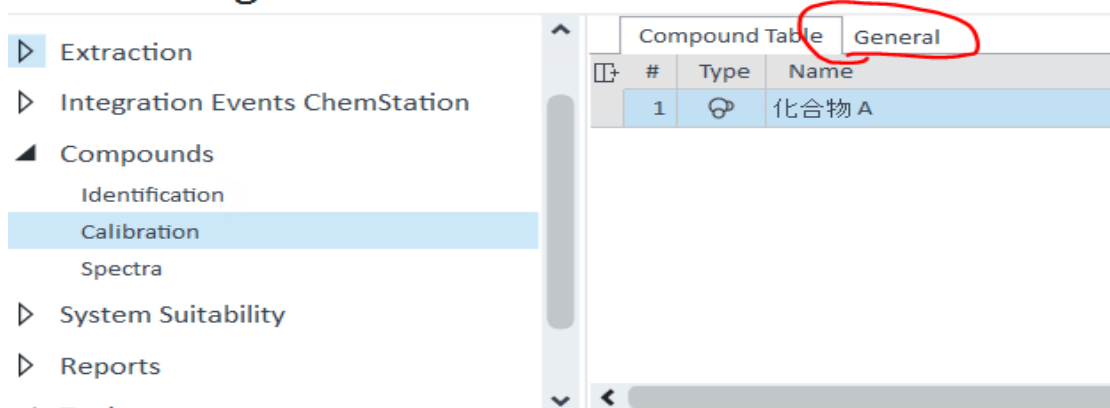
◆样品类型的确认：在初始编辑运行序列的时候，我们可以在序列表中对标样进行标注，并进行标样浓度级别设置，做这一步的好处是方便后续校正曲线的绘制。当然这一步很容易遗忘，不过遗忘了也没关系，后续也可以在绘制校正曲线的时候设置。

	☒	Vial	sample type	Level	Acq. method	Action	Inj/Vial	Volume	Injection source	Sample name	Data file
1	☒	1	Blank		Test.amx	Inject	1 Use Method	Als	Blank	<S>	
2	☒	2	Cal. Std.	1	Test.amx	Inject	1 Use Method	Als	STD-1	<S>	
3	☒	3	Cal. Std.	2	Test.amx	Inject	1 Use Method	Als	STD-2	<S>	
4	☒	4	Cal. Std.	3	Test.amx	Inject	1 Use Method	Als	STD-3	<S>	
5	☒	5	Sample		Test.amx	Inject	1 Use Method	Als	Sample 1	<S>	
6	☒	6	Sample		Test.amx	Inject	1 Use Method	Als	Sample 2	<S>	
7	☒	7	Sample		Test.amx	Inject	1 Use Method	Als	Sample 3	<S>	

◆按照上一节内容所讲，进入批处理界面，选择校正曲线标样第一个，然后可以看到化合物出峰及名称，然后点击圈出来的“Calibration 校正”按钮，继续点击“General”后我们可以看到一个外标法和内标法选择，这里我用的是外标法，然后校正曲线级别数根据你实际走的进行设置，这里走了 3 个点，那我就把数字改为 3。



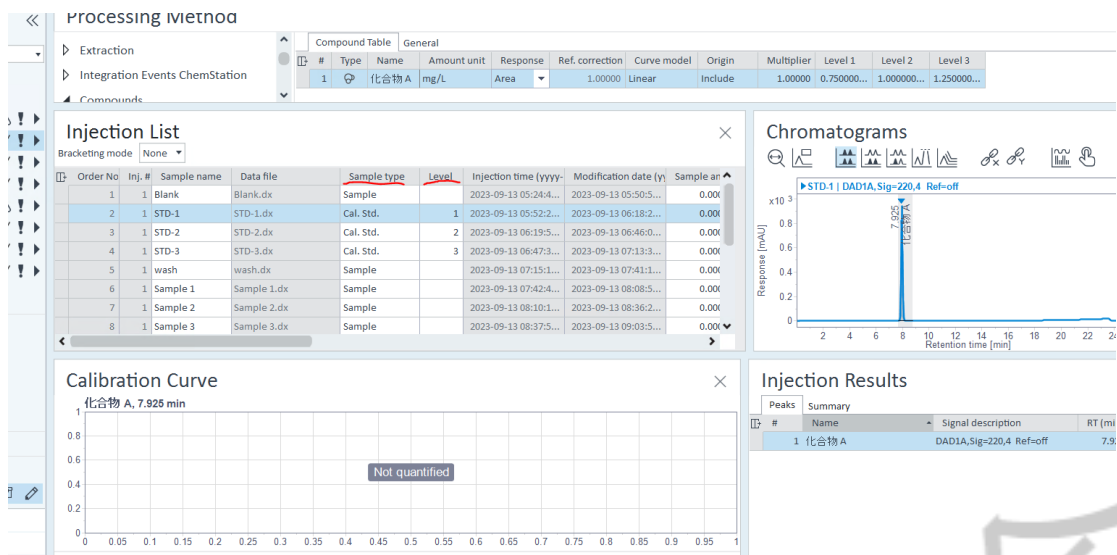
Processing Method



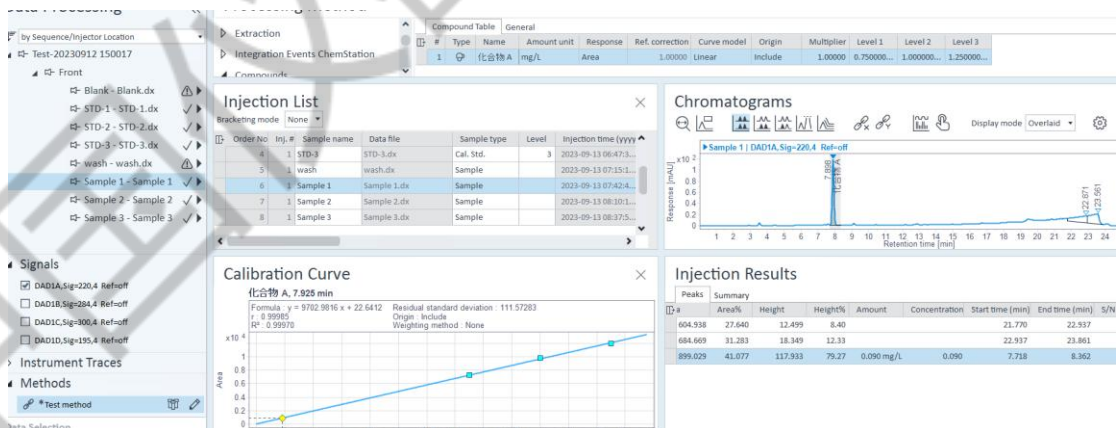
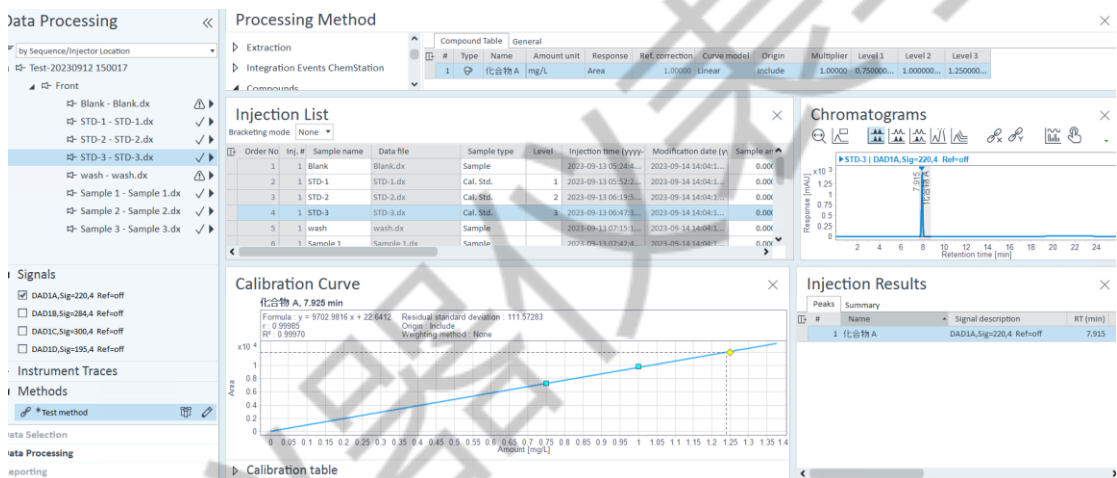
◆接下去回到““Calibration 校正”下面的“Compound Table”化合物列表界面，这里面主要有 5 个地方需要我们填写设置，分别为 1. 化合物浓度单位设置；2. 曲线纵坐标参考，可以选择以峰面积，也可以选择以峰高来绘制；3. 曲线模式，可以选择线性拟合方式，也可以选择二次拟合和对数/指数拟合方式；4. 原点设置，可以选择曲线包含原点、忽略原点以及强制过原点等；5. 校正级别浓度设置，将曲线浓度从按照高低顺序进行填写。

Compound Table		General									
#	Type	Name	Amount unit	Response	Ref. correction	Curve model	Origin	Multiplier	Level 1	Level 2	Level 3
1	☞	化合物 A	mg/L	Area	1.00000	Linear	Include	1.00000	0.750000...	1.000000...	1.250000...

◆然后下一步点击菜单栏上的“Injection List 进样列表”以及“Calibration Curve 校正曲线”两个选项，调出两个窗口。在“Injection List 进样列表”窗口，我们看到横线划出两个部分，分别为 Sample type 和 Level，如果一开始在编辑序列的时候忘记指定了，那就在这里进行设置即可。



◆ 以上这些地方都设置完成后，那我们就可以点击上方菜单栏“Reprocess all”，对曲线进行绘制，随后我们就可以看到校正曲线对话框内出行绘制好的曲线了。要看完成的曲线，得选中曲线最后一个级别，否则只显示到你选择的那个 Level1 上，这个不影响曲线和最终结果，只是软件在显示上面的一个表现。同时点击样品部分，就可以查看样品经校正曲线校正后的结果了。



◆ 上述内容讲的是外标法的绘制，对于内标法曲线绘制略有区别，首现需要在点击“Calibration 校正”按钮，继续点击“General”后我们选择内标法。

Compound Table General

☐ External standard ☒ Internal standard

Number of levels

Curve calculation

RF definition

⚠ If you change the RF definition, you need to clear your calibration curve otherwise your results will be wrong
Use the "Clear all calibration" RunType for the 1st standard in the injection list to remove the old calibration.

☐ Normalize to % ☐ Include

Concentration calculation ☐ Calculate

◆ 对于多参数，多内标内标法曲线绘制来说也不难，首先在化合物识别的时候全都命名好，化合物和内标都命名对应的名字，然后进入校正栏下的化合物列表，主要进行以下设置：1. 含量单位设置，内标和化合物都需设置；2. 内标确认，将属于内标的化合物都勾选上，告诉软件这几个是内标物；3. 内标含量设置；4. 给对应的化合物选择相应用来定量的内标，剩余操作与外标法一样。

Processing Method

#	Type	Name	Amount unit	Response	Is ISTD	ISTD amount	Associated ISTD	Ref. correction	Curve model	Origin	Multiplier	Level 1	Level 2	Level 3
1	内标 1	mg/L	Area	☒	1.000			1.00000	Linear	Include	1.00000			
2	化合物 A	mg/L	Area	☐		内标 1		1.00000	Linear	Include	1.00000	0.750000000	1.000000000	1.25000
3	化合物 B	mg/L	Area	☐		内标 1		1.00000	Linear	Include	1.00000	0.500000000	1.000000000	1.50000
4	化合物 C	mg/L	Area	☐		内标 2		1.00000	Linear	Include	1.00000	0.500000000	1.000000000	1.50000
5	内标 2	mg/L	Area	☒	1.000			1.00000	Linear	Include	1.00000			

Chromatograms

以上就是本节使用 CDS 软件绘制校正曲线的全部内容，下一节我们将介绍如何导出定量及定性报告。