

Chemstation 下计算内标法中目标物与内标物 峰面积比的 RSD

黄河

(四川省化工质量安全检测研究院, 四川 成都 610031)

摘要: 有时需要汇总统计多针样品内标法定量时的化合物与内标物的面积比, 并计算 RSD。此功能只能使用智能报告的方式来实现。而安捷伦 Chemstation 中并没直接给出计算化合物与内标物的面积比的功能, 此文以曲线回家的方式来计算这个比值。

关键词: Chemstation;峰面积比;RSD

1 做好积分, 校正工作

再点击图 1 中绿色小剪头做数据再处理。然后先选中几个数据, 再在报告版面界面, 新建报告模板。设置报告类型为单个序列总结;



图 1 选中数据



图 2 新建模板

2 删掉模板中的各个元素，我们只要统计 RSD

点击表-峰和化合物-样品统计，将此元素拖到右侧模板中，调整好列宽，此时应该能看到统计数据：

行号	位置	进样	类型	保留时	含量	单位	峰面积	峰高	样品名称
2	样品瓶...	1	BB	5.915	1.05509	ng/ul	2125.05078	759.56885	对二甲苯三明治进样
2	样品瓶...	2	BB	5.912	1.20023	ng/ul	2417.38037	831.03192	对二甲苯三明治进样
2	样品瓶...	3	BB	5.905	1.01958	ng/ul	2053.52856	743.64063	对二甲苯三明治进样
2	样品瓶...	4	BB	5.903	1.07558	ng/ul	2166.32397	776.62732	对二甲苯三明治进样
2	样品瓶...	5	BB	5.898	1.02134	ng/ul	2057.08838	755.64709	对二甲苯三明治进样
		平均值		5.907	1.07436		2163.87441	773.30316	
		标准		0.00694	0.07421		149.46405	34.36529	
		KSD		0.117	6.90724		6.90724	4.44396	

图3 添加样品统计元素

3 打开表属性，再点击列-峰-峰面积百分比，将峰面积百分比加入模板中



图4 加入峰面积百分比

4 选中峰_峰面积百分比列，点列属性

将页眉-标题名称改为“峰面积比”，将值-函数改为=峰_峰面积/(峰_峰面积/(峰_峰面积百分比/100)-峰_峰面积)。此组函数是通过化合物的峰面积和化合物的峰面积百分比来反算化合

物和内标物的总面积，然后减去化合物面积得到内标物面积，从而计算出面积比；



图 5 修改列标题名称



图 6 修改函数

5 再点汇总计算，选中计算平均值，标准偏差和 RSD



图 7 加入汇总计算

6 点击预览报告，可以看出已经计算出了面积比，但数据有效位数还不合适

再次回到列属性，点击值格式，对数据格式做设置。同理对汇总计算的数据格式做设置



图 8 设置数据格式



图 9 设置汇总数据格式

7 最后再加入数据文件名，这样看起来方便一些



图 10 加入数据文件名

8 最后保存模板，然后回到查看菜单，选中需要查看的系列数据，点预览

Agilent Technologies

化合物:	对二甲苯		信号:	FID1 A, 前部信号			
行号	进样_数据文件名	进样次数	保留时间 [分钟]	含量	峰面积	峰面积比	峰高
2	对二甲苯三明治进样_01.D	1	5.915	1.055	2125.051	1.0154	759.56885
2	对二甲苯三明治进样_02.D	2	5.912	1.200	2417.380	0.9518	831.03192
2	对二甲苯三明治进样_03.D	3	5.905	1.020	2053.529	0.9843	743.64063
2	对二甲苯三明治进样_04.D	4	5.903	1.076	2166.324	0.9687	776.62732
2	对二甲苯三明治进样_05.D	5	5.898	1.021	2057.088	0.9672	755.64709
	平均值		5.907	1.07436	2163.8744	0.9775	773.30316
	标准偏差		0.00694	0.07421	149.4640	0.0241	34.36529
	RSD		0.117	6.90724	6.9072	2.4687	4.44396

化合物:	内标		信号:	FID1 A, 前部信号			
行号	进样_数据文件名	进样次数	保留时间 [分钟]	含量	峰面积	峰面积比	峰高
2	对二甲苯三明治进样_01.D	1	6.379	1.052	2092.617	0.9848	1281.88770
2	对二甲苯三明治进样_02.D	2	6.374	1.276	2539.747	1.0506	1490.67151
2	对二甲苯三明治进样_03.D	3	6.371	1.048	2086.287	1.0160	1239.54126
2	对二甲苯三明治进样_04.D	4	6.369	1.124	2236.299	1.0323	1347.74731
2	对二甲苯三明治进样_05.D	5	6.366	1.069	2126.844	1.0339	1293.05127
	平均值		6.372	1.11385	2216.3989	1.0235	1330.57981
	标准偏差		0.00518	0.09574	190.5069	0.0249	97.45692
	RSD		0.081	8.59534	8.5953	2.4296	7.32440

图 11 最后结果

注：此方法只能计算单一目标物和内标的面积比