

# Labsolution 色谱数据工作站定量结果折算的方法介绍

谯应召

(山东化工研究院, 山东 济南 250013)

**摘要:** 采用 Labsolution 的“样品量”、“稀释因子”和“定制参数”功能, 可以将色谱数据定量结果进行折算。

**关键词:** 色谱数据工作站; 定量结果折算

## 1 背景介绍

在待测样品需要进行前处理操作 (例如样品需要溶解、萃取、溶剂提取等), 标准样品中待测组分的浓度单位与待测样品中待测组分浓度单位往往会有所不同, 色谱分析的结果经常需要进行折算。

例如化工分析中固体形态的样品需要称量和溶解; 农残分析中待测样品需要称量、粉碎、溶剂提取净化等一系列复杂的操作; 当采用内标或者外标法定量时, 标准样品的浓度一般会配制为类似 mg/l 的单位, 而原始样品中待测组分的浓度一般需要表示为类似 mg/kg 的单位。

类似上述的情况之下, 需要进行不同浓度单位之间的数据折算, 色谱工作者一般需要借助第三方的工具或者软件 (例如 Excel) 来实现。其实某些功能较强的色谱数据工作站本身可以完成这项工作, 甚至还可以实现更多其他运算功能。

下文以 Shimadzu 公司的 Labsolution Workstation 为例, 予以说明, 可以利用“稀释因子”、“样品量”和“定制参数”来实现。

## 2 稀释因子和样品量的使用

以外标法为例, 待测样品浓度  $C_i$  为:

$$C_i = \frac{A_i * C_s}{A_s}$$

引入稀释因子和样品量之后, 公式则变换为:

$$C_i = \frac{A_i * C_s * \text{样品量}}{A_s * \text{稀释因子}}$$

Labsolution 的“分析”模块下, 在进样之前的“单次分析开始”界面下, 可以根据前处理方法的具体情况, 输入合适的样品量和稀释因子。

如果数据已经采集完毕，也可以在 Labsolution 的“再解析”模块下，打开数据，编辑“样品信息”，也可以重新输入样品量和稀释因子。

样品信息

分析者 (C): System Administrator

分析日期/时间: 2021/8/17 17:08:24

样品类型 (S): 未知

级别号: 1

样品名 (N):

样品ID (I):

内标量 (M): 1  使用化合物表中的级别1浓度 (U)

样品量 (Q): 1

稀释因子 (F): 1

也可以在“分析”模块或者“再解析”模块下的“批处理”表中，设定这两个参数。

(System Administrator) - [批处理再解析 - 无标题 (LC)]

编辑 (E) 视图 (V) 批处理 (B) 工具 (T) 窗口 (W) 帮助 (H)

文件类: C:\LabSolutions\Data\Project1

再解析	样品名	样品ID	样品类型	分析类型	方法文件	数据文件	样品量	稀释因子
1			未知				1	1

### 3 定制参数的使用

色谱工作者如果需要使用更多的计算参数或者计算方法，那就可以使用“定制参数”功能。可以对数据的保留时间、浓度、峰面积、峰高和标准品浓度进行加、减、乘、除四则运算或者乘方开方等运算。

可以直接在 Labsolution 的“再解析”模块下的方法中设定定制参数，已实现此功能。

4.0 4.5 5.0 5.5 6.0 6.5 7.0 7.5

方法视图 - 定制参数

积分	识别	定量处理	化合物	组	性能	定制参数
标题	公式	常数A	常数B	常数C		
1	Conc*A*B	2	4	1		
2		1	1	1		
3		1	1	1		
4		1	1	1		
5		1	1	1		