

替代标准品校正曲线法定量操作步骤

1. 在 Labsolutions 工作站【浏览器】中，加载需定量的数据及定量方法文件。在【定量结果视图】中，修改校准曲线数据的【样品类型】及【级别号】。

Data#	数据文件名	样品类型	级别号	面积	浓度 (ng/mL)	标准浓度	精确度%	统计
1	LCMS_DEMO_Std1.lod	标准(校准点)	1	355,062	0.467	0.5	93.5	<input checked="" type="checkbox"/>
2	LCMS_DEMO_Std2.lod	标准(校准点)	2	740,004	1.053	1	105.3	<input checked="" type="checkbox"/>
3	LCMS_DEMO_Std3.lod	标准(校准点)	3	1,759,175	2.583	2.5	103.3	<input checked="" type="checkbox"/>
4	LCMS_DEMO_Std4.lod	标准(校准点)	4	3,275,769	4.897	5	97.9	<input checked="" type="checkbox"/>
5	LCMS_DEMO_Unk1.lod	未知	0	549,239	0.733	—	—	<input checked="" type="checkbox"/>
6	LCMS_DEMO_Unk2.lod	未知	0	549,756	0.731	—	—	<input checked="" type="checkbox"/>
平均				1,204,834	1.744	—	100.0	
NRSD				93.852582	98.656618	—	5.345801	
最大				3,275,769	4.897	—	105.3	
最小				355,062	0.467	—	93.5	
标准偏差				1,130,767.7354	1.720571	—	5.345801	

2. 在【方法视图】窗口，点击【编辑】后，在【定量处理】标签中按照实际需求设置【定量方法】、校准曲线【最大级别数】、【校准曲线类型】、【零截距】、【加权】、【浓度单位】等参数。以下以内标法为例进行设置说明。



3. 在【化合物】标签项中填写替代物和目标物的化合物名、保留时间、替代物系列校准品的浓度，设置内标物类型、内标组组号。

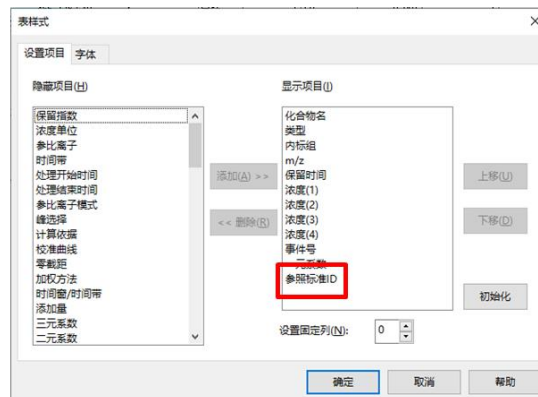
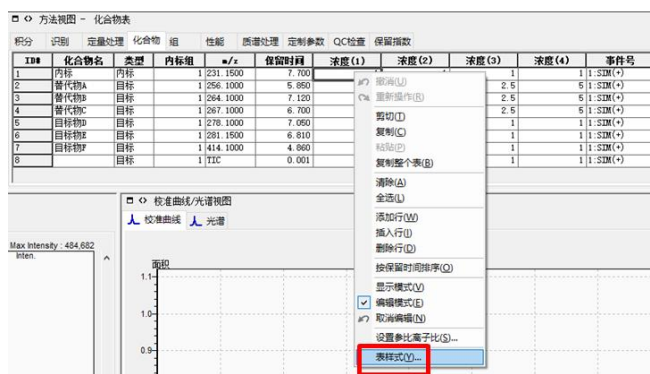
ID#	化合物名	类型	内标组	m/z	保留时间	浓度(1)	浓度(2)	浓度(3)	浓度(4)	事件号
1	内标	内标	1	231.1500	7.700	1	1	1	1	1:SDM(+)
2	替代物A	目标	1	256.1000	5.850	0.5	1	2.5	5	1:SDM(+)
3	替代物B	目标	1	264.1000	7.120	0.5	1	2.5	5	1:SDM(+)
4	替代物C	目标	1	267.1000	6.700	0.5	1	2.5	5	1:SDM(+)
5	目标物D	目标	1	278.1000	7.050	1	1	1	1	1:SDM(+)
6	目标物E	目标	1	281.1500	6.810	1	1	1	1	1:SDM(+)
7	目标物F	目标	1	414.1000	4.860	1	1	1	1	1:SDM(+)
8		目标	1	TIC	0.001	1	1	1	1	1:SDM(+)

4. 在【方法视图】窗口，鼠标右键单击，选择【表样式】，将在左侧【隐藏项目】栏中选择“参照标

岛津应用云



准ID”，将其添加至右侧【显示项目】栏，点击“确定”退出。



5. 在【化合物】表中即可显示【参照标准ID】项。在【参照标准ID】项中，输入目标物所对应的校准替代物的【ID#】，点击【视图】后保存相关设置，最后点击助手栏中【所有数据的积分】，即可建立替代物校准曲线定量目标物浓度。

ID#	化合物名	类型	内标组	m/z	保留时间	浓度(1)	浓度(2)	浓度(3)	浓度(4)	事件号	参照标准ID	一元系数
1	内标	内标	1	231.1500	7.700	1	1	1	1	1:SIM(+)		0.000000e+00
2	替代物A	目标	1	256.1000	5.860	0.5	1	2.5	5	1:SIM(+)		2.929381e-001
3	替代物B	目标	1	264.1000	7.120	0.5	1	2.5	5	1:SIM(+)		3.695268e-001
4	替代物C	目标	1	267.1000	6.700	0.5	1	2.5	5	1:SIM(+)		3.315930e-001
5	目标物D	目标	1	278.1000	7.050	1	1	1	1	1:SIM(+)	2	2.929381e-001
6	目标物E	目标	1	281.1500	6.810	1	1	1	1	1:SIM(+)	3	3.695268e-001
7	目标物F	目标	1	414.1000	4.860	1	1	1	1	1:SIM(+)	4	3.315930e-001
8	TIC	目标	1	TIC	0.001	1	1	1	1	1:SIM(+)		0.000000e+00

Data#	数据文件名	保留时间	样品类型	级别号	面积	浓度 (ng/mL)
1	LIMS_Demo_St41.le4	7.226	标准(校准点)	1	501,285	0.698
2	LIMS_Demo_St42.le4	7.215	标准(校准点)	2	1,096,224	1.605
3	LIMS_Demo_St43.le4	7.215	标准(校准点)	3	2,702,306	4.017
4	LIMS_Demo_St44.le4	7.202	标准(校准点)	4	4,972,955	7.483
5	LIMS_Demo_unk1.le4	7.226	未知	0	815,822	1.134
6	LIMS_Demo_unk2.le4	7.212	未知	0	819,712	1.138
平均		7.216			1,818,051	2.679
MSD		0.127865			95,242296	98.361230
最大		7.226			4,972,955	7.483
最小		7.202			501,285	0.698
标准偏差		0.009227			1,731,553.0473	2.634933

校准曲线/光谱视图 (Calibration Curve/Spectrum View)

$$Y = 0.292938X + 0.0273287$$

$$r^2 = 0.9978603 \quad r = 0.9989296$$
