Q:怎样进行谱图的基线扣除?

A:基线扣除,就是一个谱图差减的运算。根据数据类型的不同,可分为 3D 数据的谱图差 减与 2D 数据的谱图差减,具体操作也有所不同。

1) 3D 数据谱图差减:

a. 修改样品标签

在通道中,选择空白进样的通道,单击鼠标右键,选择"改变样品",出现修改样品对话框。 在"标签"栏中输入任意字符或则数字,作为标签。

Ne	ы 样品 项目 Data_School_Ch 用户 System/管理员 - 修改 样品 📃 🗖 🔀										
文	文件 (E) 编辑(E) 视图(V) 帮助(H)										
12											
6	样品瓶	标签	样品类型	溶剂	样品名称	方法组 <i>1</i> 报告方法	级别	样品重量			
1	25	S1010	标准样		Std_1	Int_Std	1	1.0000			
L											
⊢											
⊢											
⊢											
⊢											
⊢											
\vdash											
					1		1	>			
帮	劷 F1										

b. 建立处理方法组

如果已经建立了适当的方法组,则需要打开方法组,如下图所示:

🖪 背景扣除 - 方法组编辑器							
 回り方法组 二、数据通道 二、数据通道 二、数 With Chi 二、論 Wwith Chi 二、論 With Chi 二、論 通道鍵 		(缺省) 缺省)	X勝方法 土理方法 REX R音方法	×	编辑		
		通道名	处理方法	报告方法			
	1	White Ch1	REX				
	ŀ						
	Ŀ						
		4	2出方法	×			
		PDA 3D 1	TARADAR S1010				
		□ 保存提率的通道					
			提取数据后删除 3D 通道				

在"3D 背景扣除"文本框中填写前一步所输入的"标签",注意前后一定要一致,并且该标签应是单一无二的。

然后保存方法组。关闭窗口。

c. 处理数据

返回通道选项卡,选中需要进行背景扣除的通道,单击鼠标右键,出现快捷菜单,单击"处

理", 然后选择"使用指定的方法组", 并在下拉菜单中选择步骤 b 中保存的方法组后, 单击 OK。

d. 查看数据

在"结果"选项卡中,单击更新键 更新 (1),随后即可在列表中看到处理完毕的数据,并

且在"通道说明"中诸如下图的具体说明。

6	📴 Data_School_Ch 用户 System/管理员 - 项目										
文	文件(27)编辑(22) 视图(2) 工具(22) 数据库(22) 帮助(24)										
E.											
筛	筛选条件: 缺省										
◀	▲▶ 祥品組 进祥 通道 方法 结果組 結果 峰 签署 曲线 视图筛选器 自定义字段										
66	样品名称	样品瓶	进样	样品类型	处理通道说明	采集日期	处理日期	3			
1	Std_2	26	1	标准样	PDA 254.0 纳米 从 Std_1, 样品瓶 25 进样 2 中扣除背景	2003-8-7 16:17:03	2004-12-20 23:23:12	F			
2	Std_1	25	1	标准样	PDA 254.0 約米	2003-8-7 16:01:36	2004-12-20 23:20:08	F			
3	Std_2	26	1	标准样	PDA 254.0 纳米	2003-8-7 16:17:03	2004-12-15 11:15:40	7			
4	Std_1	25	2	标准样	PDA 254.0 纳米	2003-8-7 16:09:17	2004-12-15 11:15:37	7			
5	Std_1	25	1	标准样	PDA 254.0 納米	2003-8-7 16:01:36	2004-12-15 11:15:35	7			
6	Std_2	26	2	标准样	PDA 254.0 纳米	2003-8-7 16:24:46	2004-12-15 11:15:33	7			
7	Std_2	26	2	标准样	PDA 254.0 纳米	2003-8-7 16:24:46	2004-12-15 11:12:14	1~			
<								>			
帮助	帮助 F1 40 选中 //										

此时如欲详细查看数据,则需另选"查看"或"打印/出版"进行下一步操作。

2) 2D 数据谱图差减:

a. 修改样品标签

在通道中,选择空白进样的通道,单击鼠标右键,选择"改变样品",出现修改样品对话框。 在"标签"栏中输入任意字符或则数字,作为标签。

Ne	样品	项目	laters 用户	System/1	管理员 - 修改 样品				X			
Ż	文件 (2)编辑(22) 视图(2) 帮助(21)											
6	样品瓶	标签	样品类型	样晶名称	方法组 / 报告方法	级别	样品重量	稀释倍数	过 作 (行			
1	2	blank1	示准样	Int_Std_A_1			1.00000	1.00000	\Box			
L									Ц			
L									Ц			
┡									Н			
⊢									Н			
⊢									Н			
⊢									Η			
F									Η			
									П			
									П			
<	ļ			1		1			>			
帮	助 F1								//.			

b. 建立处理方法组

如果已经建立了适当的方法组,则需要打开方法组,如下图所示:



- i. 首先选择采集数据时的仪器方法,因为不同的仪器方法会影响衍生的数据通道 的类型。
- ii. 然后选中画面左侧的衍生通道,单击右键,出现快捷菜单,选择"新建-衍生通道",出现"编辑衍生通道"对话框。

无标题 - 编辑新生通道	2 🛛
第一(仅有)通道 第二通道 过滤器/漂移	
常数 (C) 通道 (g) 1.000000 × 2487通道 3 ▼ 2487通道 1	
2407)通道 1	
	帮助

iii. 在"第一通道"中保持"常数"为1不变,在"通道"下拉菜单中选择相应的通道,然后进入"第二通道选项卡"。

无标题 - 编辑衍生通道	?×							
第一(仅有)通道 第二通道 过滤器/漂移								
操作员								
☞ 从标记进样 徑) blanks								
[2487通道 1] - 已标记: blanks.2487通道 1								
确定 取消 ;	帮助							

iv. 在"第二通道"中,"操作"一栏中请选择"-",常数为1不变,在"通道" 中选择与"第一通道"中一致的通道。选择从进样标记,并在后面的对话框中 写上在前面输入的标签。单击确定,出现下面的对话框。输入名字后,单击确

定,关闭"编辑衍生通道"对话框。

新衍生通道			? 🗙
	请为新衍生的通道输入一个名字:	test	
	備定	取消	

v. 在处理方法中选择适当的处理方法后,单击"文件"-"另存为"-"方法 组"。

	Int_St	d_A_1	項目	Vaters	用户	System/1	管理员 - 查	看 - 1元	标题 - 1	方法组编辑器]		
B	文件 @)编辑	e (e)	視图 🕐	捡图	(P) 处理 (B)) 浏览 00	透現 ① :	留口 ①	帮助 (8)	-	9 X
Ē	新建 打开 保存	00 (1) (3)	*	≵ ≱ ≷	1 13	1.2.1.2.12	85 26 76	98 8 8 8	<u> </u>		8 21	?
μ.	- 另有2	y (L).		处理方	法创							
l r	重置	(B)	•	方法组	യ		仪器方法	t Data Schor	ol	-	编辑	1 ⁻
	打印	(t)										·
	打印	現況の)	1			缺省处理方法	L		•		
	贝加油	গ্ৰহ টে)	-			缺省报告方法			*	编辑	1
	保存	黝度)	1	-							·
	量除的	eax of)	-	P	通道名	;	处理方符	ŧ	报告方法		
	退出	CD			1	best	lest		•			
				_	Ŀ							
					E							
							导出方法					
												-
						方法组:	无标题		处理力	「法:无标题 」		

vi. 输入名字后,单击保存即可。

保存当前的 方法组	? 🗙
名字 (A): AccQ_S_TS0 AccQ_S_TS0_1 AccQ_Shanxi AccQ_ShuangHe AccQ_ShuangHe_1 AccQ_Wuxlandong Cpg LC Demo Method Set off	
名称 (<u>N</u>): 差滅	
缺省注释 (<u>D</u>):	•
注释 (_):	
保存(5) 取消 帮助	Ш

c. 处理数据

返回"进样"选项卡,选中需要进行背景扣除的通道,单击鼠标右键,出现快捷菜单,单击"处理",然后选择"使用指定的方法组",并在下拉菜单中选择步骤 b 中保存的方法组后, 单击 OK。

d. 查看数据

在"结果"选项卡中,单击更新键 更新 (1),随后即可在列表中看到处理完毕的数据,并

且在"通道说明"中诸如下图的具体说明。

<u>)</u>	⊇ Waters 用户 System/管理员 - 项目										
文化	文件 (2) 编辑(22) 视图(2) 工具(12) 数据库(12) 帮助(24)										
筛	筛选条件: 缺省 ✓ 编辑视图 (W) 更新 (U)										
┛	▶ 样品组 〕	±样│通道	創方法	1 结果组 😓		段					
89	样品名称	样品瓶	进样	样品类型	办理通道说明	采集日期	\square	^			
1	Int_Std_A	2	2	标准样	[2487通道 1] - 已标记: blank1.2487通道 1	2003-8-8 10:01:45	2005				
2	Int_Std_A_1	2	1	标准样	[2487通道 1] - 已标记: blank1.2487通道 1	2003-8-8 9:52:43	2005	=			
3	а	10	1	未知		2003-12-29 10:26:02	2005				
4	283nm	22	2	标准样	283nm	2003-11-27 16:51:15	2005				
5	а	10	1	未知		2003-12-29 10:26:02	2005				
6	283nm	22	2	标准样	283nm	2003-11-27 16:51:15	2005				
7	283nm	22	2	标准样	283nm	2003-11-27 16:51:15	2005				
8	а	10	1	未知		2003-12-29 10:26:02	2005				
9	а	10	1	未知		2003-12-29 10:26:02	2005				
10	283nm	22	2	标准样	283nm	2003-11-27 16:51:15	2005				
11		22	2	未知	283nm	2003-11-27 16:51:15	2005				
12	а	10	1	标准样		2003-12-29 10:26:02	2005	~			
<							>				
帮助	ካ F1					32 选中		11.			