

拟合背景校正 (FBC) — 快速、准确、 全自动背景校正

Agilent 5800 和 5900 ICP-OES



前言

在 ICP-OES 中，通常会对观测到的分析物发射谱线总信号进行背景（基线）校正。这是因为许多因素都会影响特定波长处的背景信号。有一些因素是固定的，而另外一些会使得不同样品的背景各不相同。

ICP-OES 的固定背景主要来源于氩等离子体，也称“连续本底”。连续本底是连续分布在光谱仪波长范围内的辐射。在 167–785 nm 的波长范围内（这也是 ICP-OES 通常覆盖的范围），背景信号在低紫外波长段较小，并会随着波长增长而逐渐增强。另一种背景是“暗电流”，它是来自 ICP-OES 检测器的背景信号引起的。我们可以

测定检测器未暴露于发射源（氙气等离子体）时的信号，从而在样品分析前校正暗电流相关的背景。光学系统的类型、设计以及整体质量也决定了在特定 ICP-OES 系统上观测到的相关背景。

在特定波长处观测到的背景信号的强弱受关键等离子体参数的影响，比如等离子体配置、功率和气体流量、雾化器气体流量以及等离子体观测位置等等。分析物发射谱线的信号强度也受这些关键等离子体参数的影响。由于发射谱线的强度和邻近背景会直接影响分析物的检测限，等离子体参数的优化也就变得极为重要。根据所选波长的不同，同一元素的最佳等离子体条件也可能不同。例如，为了达到最低检测限，铝 167 nm 离子发射谱线的等离子体条件与 396 nm 原子发射谱线处的条件不应相同。一旦设定好了等离子体条件，来自氙气等离子体的背景相对固定，背景校正通常也比较简单。

样品中存在的高浓度元素也会引起背景，这种背景的校正更为复杂。造成的影响包括：

- 极强的发射谱线造成的杂散光。例如，钙 393.366 nm 和 396.847 nm 发射谱线
- 电子-离子重组效应。例如，在 193–210 nm 背景中高浓度的铝
- 谱线展宽。例如，在 Al 396.152 nm 处的 Ca 396.847 nm 发射谱线，以及在 Pb 220.353 nm 处的 Al 220.467 nm 发射谱线
- 分子谱带。例如，来自解离的水分子的 OH 谱带，以及来自有机溶剂的含碳的分子谱带

不同样品的基质各不相同，因此背景信号的强度和结构也千差万别。为了应对这一应用挑战，人们亟需一种不受样品基质影响、先进却又简单、快速且准确的背景校正方法。

离峰背景校正

离峰背景校正 (OPBC) 是 ICP-OES 中历史最悠久的背景校正方法。在最简单的情况下，邻近分析物峰的背景信号是平的，只需测定一个信号背景点即可计算出净强度。另外还可轻松解释不同样品在背景水平方面的差异。通过在方法开发过程中扫描典型样品便可找出合适的背景校正点。

当分析物发射谱线邻近展宽的干扰物时，会产生线性但倾斜的背景，为了准确测定背景，需在分析物谱峰两侧各测一个点。

对于邻近分析物峰的弯曲的或更复杂的背景结构，OPBC 的误差很大，因此并不适用。由于不同样品在基质元素方面存在差异，因此很难找到适用于分析过程中观测到的所有背景变异的背景点。

“拟合”背景校正

除 OPBC 外，Agilent 5800 和 5900 ICP-OES 还提供了独特的拟合背景校正 (FBC)。FBC 是一种强大且易用的背景校正技术，该技术采用先进的数学算法，可对分析物峰下的背景信号建模。FBC 不仅能够准确校正简单及复杂的背景结构，而且无需进行方法开发。无论样品基质如何，产生的背景如何复杂，只需将校正工作交给 FBC，“一劳永逸”。

FBC 主要借助如下方法对所测谱图进行数学建模：

1. 测定偏置分量，对非结构化连续本底建模
2. 测定斜率分量，对大宽峰的侧翼建模
3. 将三个高斯峰分量应用于模型中：
 - a. 分析物峰
 - b. 位于分析物峰左侧的所有潜在干扰峰
 - c. 位于分析物峰右侧的所有潜在干扰峰
4. 使用迭代法估计峰的宽度和位置
5. 使用最小二乘法测定偏置量、斜率以及峰高

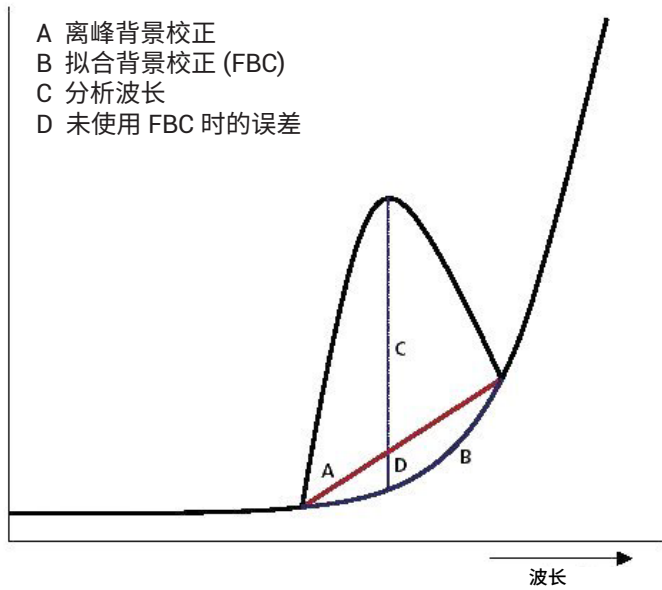


图 1. 拟合背景校正可计算真实的背景信号，提高准确度

一旦拟合好模型，将分析物峰组分移出方程式，模型中仅留下背景。同时将 FBC 应用于分析物峰的测定，确保快速、准确的背景校正。

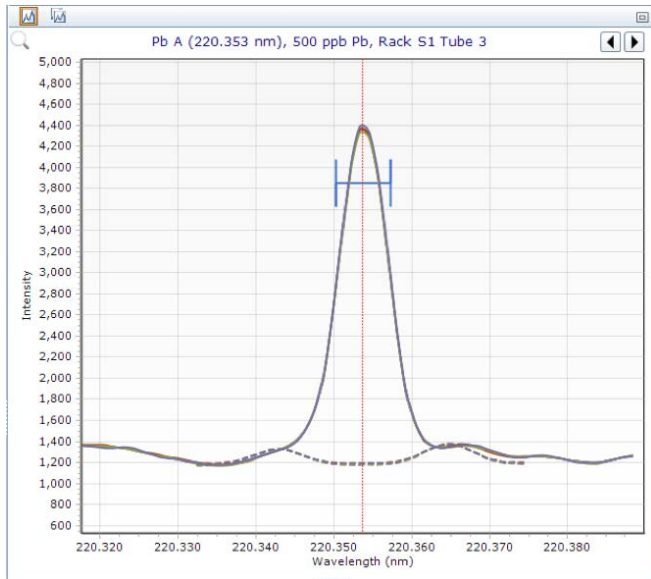


图 2a. 去离子水中 Pb 220.353 nm 的发射谱线。简单的背景谱图，OPBC 或 FBC 均适用

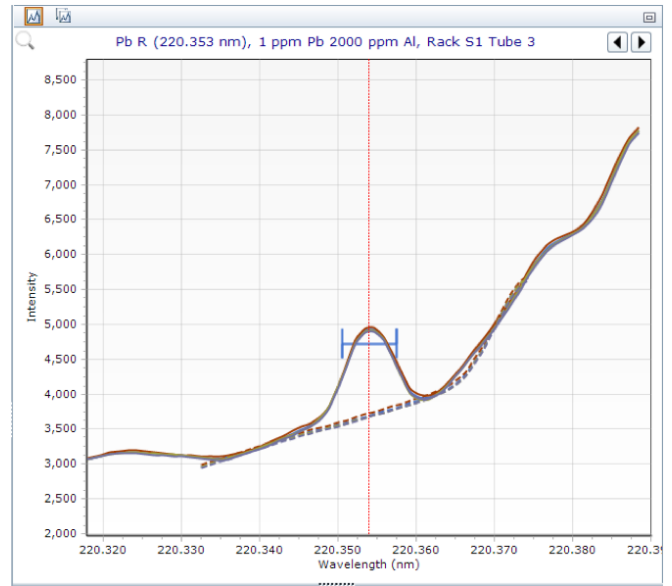


图 2b. 2000 mg/L 铝中 Pb 220.353 nm 的发射谱线。Al 220.467 nm 谱线展宽的峰翼重叠导致在 Pb 220.353 nm 处的曲线出现较高的背景信号，FBC 可成功校正此背景

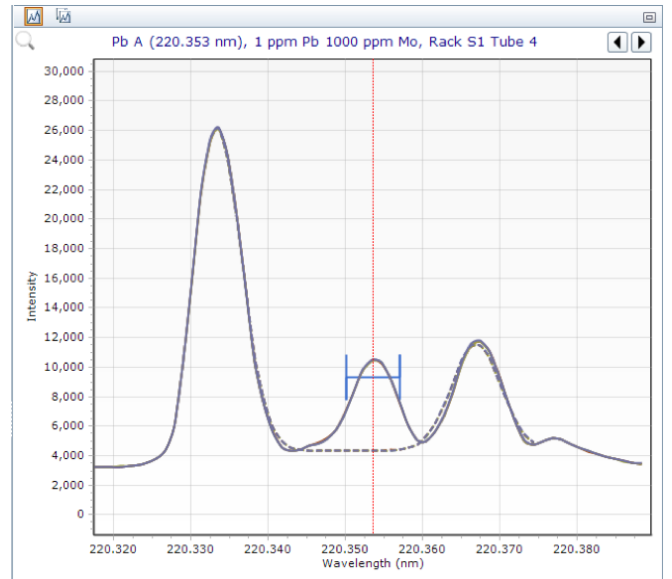


图 2c. 1000 mg/L 铝中 Pb 220.353 nm 的发射谱线。附近的 Mo 的干扰发射谱线使得采用 OPBC 校正几乎不可能。但是对于安捷伦拟合背景校正算法来说，校正此背景轻而易举

总结

拟合背景校正可轻松实现准确的背景校正。不论样品有多复杂，FBC 都可轻松应对离峰背景校正无法处理的背景结构。并且这一强大且易用的技术无需进行方法开发，也就是说，您无需耗费时间寻找全部样品均适用的合适的背景校正点。

查找当地的安捷伦客户中心：

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线：

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们：

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

www.agilent.com

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。