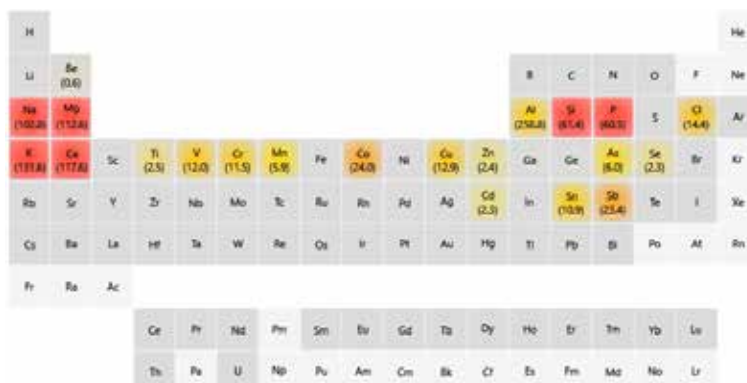


Программное обеспечение Agilent IntelliQuant

Для более глубокого анализа проб и упрощения разработки методов



The image shows a periodic table of elements. The atomic weights of several elements are highlighted in colored boxes: Na (23.0), Mg (24.3), K (39.1), Ca (40.1), Ti (47.9), V (50.9), Cr (52.0), Mn (54.9), Fe (55.8), Co (58.9), Ni (58.7), Cu (63.5), Zn (65.4), Al (26.9), Si (28.1), P (30.9), S (32.1), Cl (35.5), Ar (39.9), Ga (69.7), Ge (72.6), As (74.9), Se (78.6), Br (79.9), Kr (83.8), Rb (85.5), Sr (87.6), Y (88.9), Zr (91.2), Nb (92.9), Mo (95.9), Tc (98.0), Ru (101.1), Rh (106.4), Pd (106.4), Ag (107.9), Cd (112.4), In (114.8), Sn (118.7), Sb (121.8), Te (127.6), I (126.9), Xe (131.3), Cs (132.9), Ba (137.3), La (138.9), Hf (178.5), Ta (180.9), W (183.8), Re (186.2), Os (190.2), Ir (192.2), Pt (195.1), Au (197.0), Hg (200.6), Tl (204.4), Pb (207.2), Bi (208.98), Po (209), At (210), Rn (222), Fr (223), Ra (226), Ac (227), Ce (140.1), Pr (140.9), Nd (140.9), Pm (145), Sm (150.4), Eu (151.96), Gd (157.25), Tb (158.93), Dy (162.50), Ho (164.93), Er (167.26), Tm (168.93), Yb (173.05), Lu (174.97), Th (232.04), Pa (231.04), U (238.03), Np (237.05), Pu (244.06), Am (243.06), Cm (247.07), Bk (247.07), Cf (251.08), Es (252.08), Fm (257.10), Md (258.10), No (259.10), Lr (262.11).

Введение

В то время как количественный анализ элементов остается основным предназначением ИСП-ОЭС, полуколичественный анализ выступает в роли источника дополнительной информации о пробах. Тем не менее сбор и обработка полуколичественных данных на многих инструментах ИСП-ОЭС могут занимать не меньше времени, чем сбор полностью количественных данных. Пользователи таких типов приборов ИСП-ОЭС, возможно, не представляют весь потенциал сбора полуколичественных данных.

ИСП-ОЭС 5800 и 5900 от Agilent включают функцию IntelliQuant — мощный специализированный инструмент полуколичественного анализа, позволяющий лучше понимать элементный состав пробы. Функцию IntelliQuant можно использовать для совершенствования традиционных количественных методов или получения самостоятельных полуколичественных результатов в короткий срок с минимальными настройками.

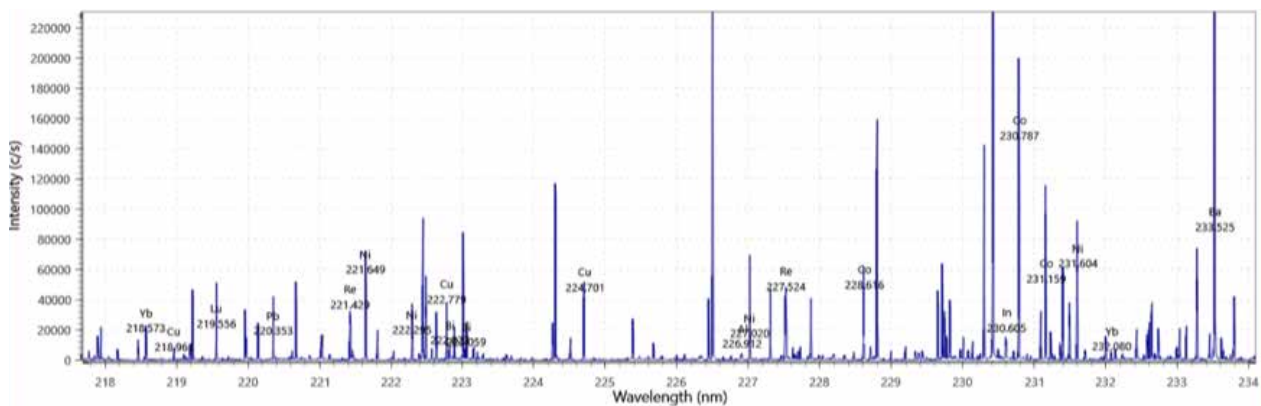


Рис. 1. Раздел данных сканирования всего спектра, собранных IntelliQuant. Данная информация содержит полезные аналитические сведения о пробе, которые облегчают разработку методов.

Что такое IntelliQuant?

Входящий в состав ПО Agilent ICP Expert инструмент IntelliQuant обеспечивает быстрый сбор полуколичественных данных для ИСП-ОЭС¹. IntelliQuant собирает данные по всему спектральному диапазону (от 167 до 785 нм) для каждой пробы и предоставляет исчерпывающие сведения, которые невозможно получить ни от одного из приборов ИСП-ОЭС. При выполнении в рамках количественного метода сканирование IntelliQuant обеспечивает быстрый анализ пробы.

На участке записи полного спектра на рисунке 1 показано относительное содержание элементов, содержащихся в пробе, данные о которой были получены с помощью IntelliQuant. Эту информацию можно использовать для разработки методов, исключающих воздействие помех, определения коэффициентов разбавления и диапазона калибровки для каждого элемента, а также выбора обзора плазмы.

Автоматическая идентификация элементов

По окончании сканирования всего спектра эффективные алгоритмы IntelliQuant определяют элементы, присутствующие в каждой пробе. Участие пользователя не требуется, поскольку процесс полностью автоматизирован. Алгоритмы используют базу данных линий излучения ионов и атомов для разделения пиков аналита, шума и помех.

Выбор наиболее оптимальных длин волн

По завершении анализа пробы система IntelliQuant с помощью функции оценки в звездах формирует список длин волн, наиболее оптимальных для использования в анализе каждого элемента, присутствующего в пробе. Данная оценка в звездах каждой длины волны также помогает определять помехи (см. рис. 2). Благодаря определению присутствия в пробе элемента, который может вызывать интерференцию, инструмент IntelliQuant существенно облегчает выбор длины волны для создания отчетов и настройки количественного метода. Также он помогает пользователям исключать из отчетов результаты, искаженные помехами.



Рис. 2. IntelliQuant отмечает наиболее оптимальную длину волны аналита наибольшим количеством звезд и зеленой «галочкой». Подозрительные помехи на длине волны аналита отмечены малым количеством звезд. Потенциальные наложения спектров можно определить путем наведения курсора на красный знак вопроса.

Результаты полуколичественного анализа концентраций

Инструмент IntelliQuant содержит предварительно измеренные калибровочные кривые, которые можно использовать для расчета полуколичественного результата для каждого элемента, обнаруженного в пробе. Калибровочные кривые предоставляются для всех доступных режимов обзора (аксиального, радиального, двойного обзора плазмы с вертикальным расположением горелки и синхронизированного вертикального двойного обзора) и обеспечивают всех пользователей доступом к функции калибровки по умолчанию, совместимой с используемым инструментом. Для повышения точности можно обновить стандартные или действующие калибровочные кривые путем повторного измерения отдельных стандартов или добавления и измерения дополнительных калибровочных стандартов после первоначального сбора данных. Такие гибкие возможности очень важны для пользователей, которые нуждаются в регулярном обновлении калибровочных кривых только для подгруппы, а не для всех элементов.

Также пользователи могут создавать собственные калибровочные кривые IntelliQuant и выполнять измерения. Заданные пользователем калибровочные кривые можно полностью изменять по своему усмотрению, в том числе включать в них группы элементов, анализ которых осуществляется в выбранном пользователем диапазоне концентрации.

Функция Smart Views

Функция Smart Views предоставляет пользователям простой способ фильтрации данных IntelliQuant. Благодаря ей отображаются только нужные результаты, что препятствует упущению важных результатов анализа. В настройках Smart Views можно задать выделение уровня цветом на основе концентрации. Это позволяет пользователям визуально определять аномально высокие или низкие результаты в сравнении с заданными значениями. Пользователи также могут выбрать для просмотра результаты конкретных элементов и установить правила выбора растворов, отображаемых в таблице результатов, на основе концентрации. Например, если оператор выполняет анализ 500 растворов с помощью инструмента IntelliQuant, он может воспользоваться функцией Smart Views, чтобы быстро отфильтровать результаты и вывести на экран только те растворы, в которых содержание ключевых элементов превышает указанное значение концентрации.

Пользователи могут в любое время менять функции Smart Views, применяемые к результатам, или создавать и сохранять новые функции Smart Views, даже во время сбора данных.

Аналитические данные о пробах, предоставляемые IntelliQuant

Инструмент IntelliQuant предоставляет важную аналитическую информацию о пробах, которую можно использовать разными способами в зависимости от целей и объема анализа.

Скрининг проб

Функция IntelliQuant способна в считанные секунды идентифицировать и рассчитать полуколичественные результаты для 70 элементов в неизученных и неописанных пробах, что делает ее идеальным инструментом скрининга проб. Результаты отображаются в виде периодической таблицы и выделяются различными цветами. Благодаря этому пользователи сразу видят, какие элементы присутствуют в пробе и в какой концентрации (рисунок 3). Согласно настройкам по умолчанию, элементы, представленные в низкой концентрации, выделяются желтым цветом, в средней — оранжевым и в высокой — красным. В то же время этим уровнем концентрации можно задать собственные параметры в разделе Smart Views.

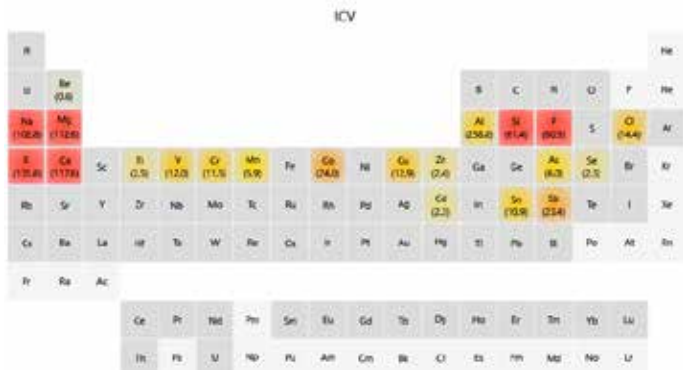


Рис. 3. IntelliQuant помогает пользователям визуализировать содержимое проб и выделяет цветом обнаруженные элементы на основе уровней концентрации, определенных пользователем.

Помощь в выявлении проблем, связанных с пробоподготовкой

Функцию IntelliQuant можно использовать для выявления проблем, связанных с пробоподготовкой. Например, если во время расщепления пробы добавлено неправильное количество кислоты, это может привести к неправильному расщеплению пробы и формированию неправильных результатов. Данную ошибку трудно обнаружить. Тем не менее в настройках IntelliQuant можно выбрать представление с пометкой результатов, указывающих на низкое содержание хлора. При быстром просмотре результатов, сформированных функцией IntelliQuant, операторы могут определить присутствие или отсутствие Cl и, соответственно, правильность выполнения расщепления до создания отчета. Такой же подход может быть использован для большинства кислот, применяемых для расщепления пробы.

Хотя инструмент IntelliQuant является методом ИСП-ОЭС, нет причин ограничивать его применение только пробам, предназначенными для ИСП-ОЭС. IntelliQuant может предоставить сведения о пробах, подготовленных для анализа методом ИСП-МС, ААС, хроматографии и даже титрования.

Контроль и обеспечение качества реактивов

Различия в подготовке партий реактивов являются одной из распространенных причин варьирования результатов анализа. С помощью IntelliQuant пользователи могут быстро сравнить содержимое двух и более партий реактивов сразу после подготовки. Все различия выделяются уже при обнаружении. Это позволяет устранять потенциальные проблемы до того, как они повлияют на качество окончательных результатов. Инструмент IntelliQuant — это простой способ проверить качество реактивов, используемых для анализа методом ИСП-ОЭС или с помощью других аналитических техник.

Простота разработки методов и помощь с валидацией результатов

Алгоритм IntelliQuant, исключающий помехи, представляет пользователям подробную информацию о возможных помехах для каждого обнаруженного элемента. Эти сведения содержат данные о длинах волн, находящихся под воздействием помех, и длинах волн, на которых, вероятнее всего, помехи отсутствуют.

Эта информация используется для разработки методов, а также как мощный инструмент валидации результатов, полученных с помощью уже используемых методик. Если пользователь не уверен в отсутствии воздействия помех на результат, полученный количественным методом, инструмент IntelliQuant может предоставить дополнительную информацию. Путем определения наиболее вероятных помех на длине волны элемента, использованной в количественном методе, IntelliQuant может установить, какой элемент создает помехи.

Затем пользователь может выбрать один из способов устранения помех. Среди них могут быть выбор другой длины волны или ее корректировка с помощью метода скоростной автоматической аппроксимации кривых (FACT) или метода поправки на межэлементное влияние (IEC).

Label	Date	Al mg/L	As mg/L	Ca mg/L	Cu mg/L	Fe mg/L	K mg/L	Mg mg/L	Mn mg/L	Na mg/L	P mg/L	Pb mg/L	S mg/L	Sb mg/L	Si mg/L	Ti mg/L	Zn mg/L	Cl Unadj	N %
Soil 1	2019-08-05 12:30:30	176.23	23.44	38.35	62.19	604.17	71.31	63.13	30.82	10.52	16.73	79.87	112.95	10.52	10.50	12.29	54.48	2.44	2.36
Soil 2	2019-08-05 12:30:51	181.58	24.20	36.02	53.64	645.12	72.89	65.04	31.47	10.23	15.19	83.64	112.69	10.23	11.48	12.94	55.89	2.20	2.42
Soil 3	2019-08-05 12:31:31	187.33	24.21	38.17	53.70	657.96	73.71	66.85	33.25	10.38	14.97	83.96	114.23	10.38	10.70	15.08	54.76	2.21	2.63
Soil 4	2019-08-05 12:32:17	199.84	23.90	40.33	53.45	708.05	85.68	71.60	32.71	11.05	14.62	83.32	112.50		9.03	16.94	52.60		2.20
Soil 5	2019-08-05 12:33:23	186.25	23.49	37.04	47.33	657.96	74.23	64.89	31.31	10.49	13.55	81.71	110.29	10.49	10.92	13.98	52.00	2.49	2.51

Рис. 4. Изображение из анализа IntelliQuant, на котором выделены некоторые проблемы с пробой Soil 4. Обратите внимание на отсутствие Sb и Cl в этой пробе.

Облегчает идентификацию химически несовместимых элементов в пробе

Если результаты анализа пробы ниже ожидаемых, это может быть вызвано несколькими причинами, в том числе химической несовместимостью элементов, содержащихся в пробе. С помощью инструмента IntelliQuant можно определить, представляет ли химическая несовместимость потенциальную проблему. Например, результат количественного анализа бария может оказаться низким. Не исключено, что высокий уровень сульфатов в пробе мог вызвать осаждение бария еще до начала измерения. Сера может не определяться в рамках количественного метода, однако ее можно обнаружить и определить полуколичественным методом с помощью IntelliQuant. Результаты анализа IntelliQuant содержат всю информацию, необходимую для выявления проблемы, и позволяют избежать включения неправильных данных в окончательный отчет о результатах анализа пробы.

Пример анализа

На представленном выше примере пять параллельных вводов образца почвы были расщеплены с помощью царской водки, и анализ был выполнен с помощью ИСП-ОЭС Agilent 5900 с синхронизированным вертикальным двойным обзором (SVDV). Результаты полуколичественного анализа концентраций для всех обнаруженных элементов в идентичных пробах демонстрируют хорошую повторяемость во всех случаях, кроме некоторых элементов, содержащихся в пробе Soil 4.

Для фильтрации результатов использовалась функция Smart Views. Рисунок 4 представляет собой отчет о результатах анализа наиболее важных исследуемых элементов почвы. В таблице результатов отмечены проблемы у пробы Soil 4 в столбцах Sb и Cl. Отсутствие Cl свидетельствует об ошибке, допущенной во время пробоподготовки: использование только азотной кислоты без добавления соляной кислоты.

С помощью инструмента IntelliQuant можно получить подобные результаты анализа одним или двумя щелчками мыши. Инструмент IntelliQuant с функцией Smart Views позволяет пользователю быстро и просто обнаруживать аномальные результаты и их причины до формирования отчета.

Литература

1. Agilent ICP Expert Software: Powerful software with smart tools for ICP-OES, Agilent publication, 5994-1517EN

www.agilent.com/chem

Информация может быть изменена без уведомления.

© Agilent Technologies, Inc., 2019
Напечатано в США 15 ноября 2019 г.
5994-1516RU