

# Инструмент IntelliQuant Screening от Agilent

Интеллектуальный и быстрый  
полуколичественный анализ ИСП-ОЭС



## Введение

Стандартный инструмент полуколичественного анализа IntelliQuant от компании Agilent, входящий в пакет ПО ICP Expert, предоставляет пользователям дополнительную информацию о пробах посредством сбора и интерпретации данных исследований полного спектра с минимальным участием пользователя <sup>1</sup>. Инструмент IntelliQuant Screening, входящий в состав пакета ПО ICP Expert Pro, еще больше расширяет функциональные возможности системы IntelliQuant <sup>2</sup>. С его помощью пользователи могут начать сбор данных в считанные секунды без необходимости выбирать элементы и длины волн для анализа.

## Режим «Снимок»

С помощью режима «Снимок» инструмент IntelliQuant Screening собирает данные всего спектра быстрее, чем стандартная версия системы IntelliQuant. Этот новый режим измерений использует скорость и мощность CCD-детектора Agilent VistaChip II и выполняет сканирование полного спектра каждой пробы менее чем за пять секунд общего времени измерения.

После завершения исследования полного спектра каждой пробы инструмент IntelliQuant проверяет данные и автоматически определяет длину волны, которая обеспечила лучший результат для каждого элемента. Алгоритм IntelliQuant определяет интенсивность пика аналита, стабильность локального фона пика и вероятность спектральных помех от других элементов, обнаруженных в пробе. Инструмент IntelliQuant обеспечивает высококачественные достоверные результаты и не требует от пользователя каких-либо спектроскопических знаний. Операторы могут быть уверены в том, что данные получены на основе измерений без влияния помех и находятся в допустимом диапазоне интенсивности, который можно измерить в режиме «Снимок».

## Предварительный полуколичественный анализ тенденций и скрининг проб

Метод ИСП-ОЭС часто используется во многих отраслях для предварительного полуколичественного анализа. Предварительный полуколичественный анализ применяется для сравнения относительных значений между партиями проб или оценки изменений в растворах, происходящих с течением времени. Инструмент IntelliQuant Screening расширяет возможности предварительного полуколичественного анализа ИСП-ОЭС несколькими способами.

Пользователям IntelliQuant Screening доступны все стандартные функции IntelliQuant Smart Views, а также дополнительные графики для анализа тенденций. Новые возможности визуализации включают гистограмму и круговую диаграмму. Оператор может быстро переключаться между представлением результатов в виде кривой изменения концентрации и представлением в виде процентов от общего проанализированного содержимого проб. На рисунке 1 показаны результаты полуколичественного анализа некоторых элементов в стандартном эталонном материале промышленного осадка NIST 2782 в виде процентов. Визуализация результатов позволяет пользователям быстро определять аномальные значения и их причину. Высокие значения концентрации элемента могут быть связаны с ошибкой при пробоподготовке или с тем, что проба является нестандартной.

### Быстрый скрининг проб

С помощью системы быстрого переключения потоков Agilent AVS 6/7 инструмент IntelliQuant Screening в режиме «Снимок» позволяет пользователям выполнять анализ всего спектра со скоростью 15 секунд на пробу. Этот метод обеспечивает быстрый анализ пробы, который позволяет определить пригодность пробы для анализа другим методом, например ИСП-МС. Скрининг проб потенциально экономит время за счет исключения проблем, которые могут возникать в связи с составом пробы или ее концентрацией.

### Функция Smart Views

Функция IntelliQuant Smart Views предоставляет пользователям простой способ фильтрации данных скрининга. 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.

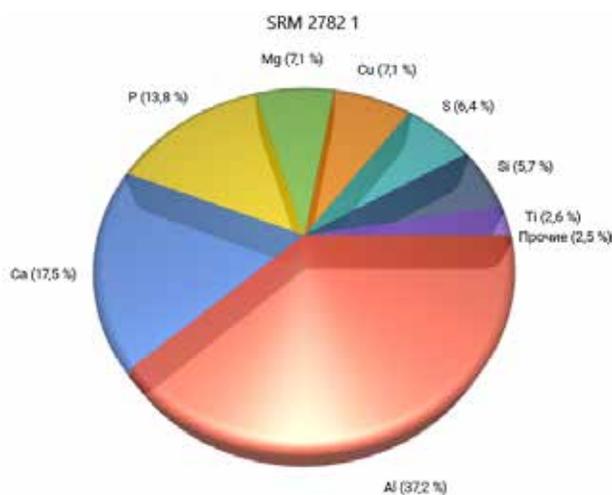


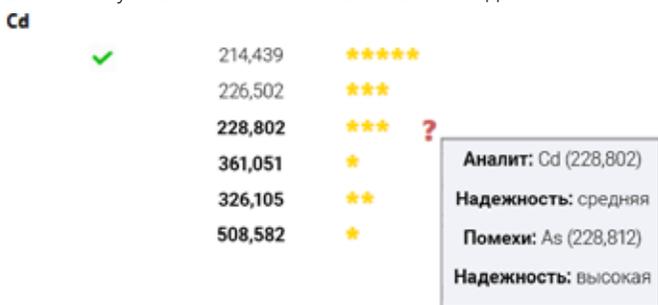
Рис. 1. Диаграмма, демонстрирующая процентный состав пробы для выбранных пользователем элементов, созданная в реальном времени с помощью интерфейса IntelliQuant Screening.

## Разработка методов

Инструмент IntelliQuant Screening подходит для разработки технически сложных и трудоемких методов, поскольку не требует отбора элементов и знания содержимого проб. Традиционно разработкой методов занимались в основном опытные операторы, имеющие обширные знания о методе ИСП-ОЭС. Сейчас дело обстоит иначе, поскольку IntelliQuant Screening предоставляет все инструменты, необходимые менее опытным операторам для разработки количественных методов.

IntelliQuant Screening использует простую систему оценки в звездах, позволяющую определять длины волн аналита, которые наиболее подвержены спектральным помехам или

фоновым сдвигам или обладают низкой чувствительностью в отношении исследуемых проб (см. рисунки 2 и 3). Длины волн аналита, на которые не действуют помехи или которые могут обеспечить более высокую чувствительность по сравнению с другими длинами волн, получают более высокую оценку — большее количество звезд. Длины волн, на которые действуют помехи или которые имеют более низкую чувствительность, получают более низкую оценку — меньшее количество звезд. Данная информация по каждой отдельной пробе, проанализированной с помощью IntelliQuant Screening, помогает пользователям принимать решение о том, какие длины волн аналитов включать в используемые ими количественные методы.



**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.

## Быстрый скрининг проб

Рабочий процесс разработки метода IntelliQuant Screening можно представить в виде трех простых шагов.

### 1. Запуск исследования проб с помощью IntelliQuant Screening.

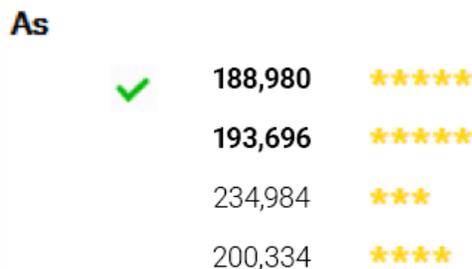
Настройка исследования неизученных проб в IntelliQuant Screening проста и интуитивно понятна. Настройка параметров по собственному усмотрению не требуется — просто добавьте пробы и запустите анализ.

### 2. Добавьте рекомендуемые длины волн в количественный метод.

По завершении анализа каждой пробы на экране пользовательского интерфейса IntelliQuant отображается список рекомендуемых длин волн для каждого элемента, обнаруженного в пробе. Система оценки IntelliQuant — это простой способ определить наиболее оптимальные длины волн для получения лучших результатов по каждому

элементу пробы. Наиболее оптимальная длина волны отмечается в IntelliQuant зеленой «галочкой».

Несколько длин волн могут иметь одинаковое количество звезд как наиболее предпочтительные по результатам анализа IntelliQuant (отмечены зеленой «галочкой»). В таком случае необходимо включить в количественный метод все длины волн, имеющие высокую оценку.



**Рис. 3.** Система IntelliQuant отметила пятью звездами результаты двух волн мышьяка. Это значит, что обе длины волны подходят для количественного метода.

### 3. Запуск количественного метода параллельно с IntelliQuant.

Теперь можно создать количественную таблицу с помощью длин волн, рекомендованных IntelliQuant для исследованных проб. Рекомендуется добавлять несколько длин волн для каждого элемента (по возможности), чтобы обеспечить результаты, исключающие воздействие помех, для всех проб, анализируемых с помощью данного нового метода.

При анализе неизученных проб с помощью нового количественного метода можно параллельно продолжать их анализ в IntelliQuant. Данные IntelliQuant позволяют изучить возникающие помехи, которые отсутствовали в пробах в момент разработки метода. Эти аналитические данные помогают совершенствовать метод за счет выбора дополнительных длин волн или устранять обнаруженные помехи с помощью метода скоростной автоматической аппроксимации кривых (FACT) или метода поправки на межэлементное влияние (IEC).

## Литература

1. Agilent IntelliQuant Software: For greater sample insight and simplified method development, Agilent publication, 5994-1516EN
2. Agilent ICP Expert Software: Powerful software with smart tools for ICP-OES, Agilent publication, 5994-1517EN

[www.agilent.com/chem](http://www.agilent.com/chem)

Информация может быть изменена без уведомления.