



Optické emisní spektrometry s indukčně buzeným plazmatem

## IntelliQuant Screening

Chytřejší a rychlejší semikvantitativní ICP-OES analýzy



### Úvod

Agilent IntelliQuant – nástroj pro semikvantitativní analýzy je součástí softwaru ICP Expert Base. Poskytuje uživatelům hlubší informace o jejich vzorcích díky shromažďování a interpretaci naměřených dat v celém rozsahu spektra a to s minimální snahou uživatele. IntelliQuant Screening, který je součástí balíčku ICP Expert Pro rozšiřuje možnosti IntelliQuant ještě více. IntelliQuant Screening umožňuje uživatelům začátek měření během několika sekund, aniž by museli volit prvky nebo vlnové délky, které chtějí analyzovat.

### Režim „Snapshot“

Technologie IntelliQuant Screening s využitím režimu režim „Snapshot“ shromažďuje data celého spektra ještě rychleji než standardní verze IntelliQuant. Tento nový režim měření naplno využívá rychlosti a výkonu Agilent VistaChip II CCD detektoru k vytvoření scanu celého spektra každého vzorku a to za méně než 5 sekund celkového času měření.

Po dokončení měření celého spektra, vyhodnotí IntelliQuant data pro každý vzorek a automaticky určí, která vlnová délka poskytuje pro každý prvek nejlepší výsledek. Algoritmus IntelliQuantu vyhodnotí intenzitu píku analytu, konzistenci lokálního pozadí píku a pravděpodobnost spektrální interference s

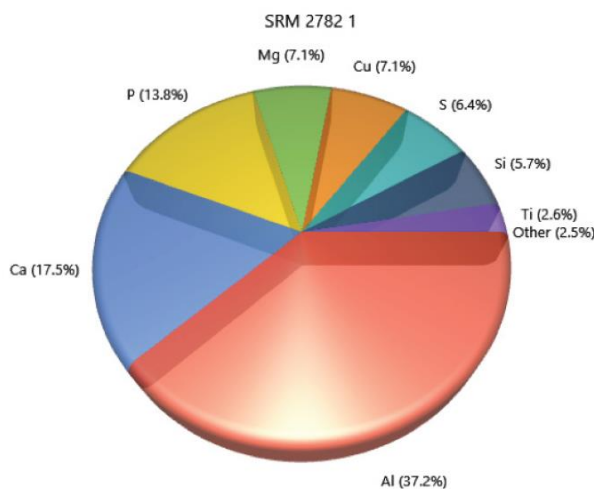


ostatními prvky nalezenými ve vzorku. IntelliQuant tak poskytuje vysoce kvalitní a spolehlivé výsledky, aniž by vyžadoval jakékoli spektroskopické znalosti od uživatele. Analytici si mohou být jisti, že získaná data jsou založena na měřeních bez interferencí, která jsou v rozsahu intenzit měřitelných v režimu „Snapshot“.

### **Analýza trendů a screening vzorků**

ICP-OES se často používá pro semikvantitativní studie analýzy trendů v mnoha průmyslových odvětvích. Analýza trendů se používá k posouzení relativních výsledků mezi šaržemi vzorků nebo posouzení změn vzorků v průběhu času. IntelliQuant Screening zlepšuje možnosti analýzy trendů ICP-OES několika způsoby.

Uživatelé programu IntelliQuant Screening mají přístup ke všem standardním funkcím IntelliQuant Smart Views plus k další grafice pro analýzu trendů. Možnosti vizualizace zahrnují výšečový a sloupcový diagram. Analytik může snadno přepínat mezi zobrazením výsledků podobě koncentrací a v podobě procent z celkového obsahu měřeného vzorku. Obrázek 1 ukazuje semikvantitativní výsledky procentuálního zastoupení vybraných prvků ve standardním referenčním materiálu průmyslového kalu NIST 2782.



Zobrazení výsledků vizualizovaným způsobem umožňuje uživatelům rychle posoudit jakékoli odlehle hodnoty a prozkoumat jejich příčinu. Zvýšená/nestandardní koncentrace prvku může být způsobena chybou přípravy vzorku nebo atypickým vzorkem.

Obrázek 1: Koláčový diagram z nástroje IntelliQuant Screening s on-line zobrazením procentuálního zastoupení uživatelem definovanými prvky ve vzorku.

### **Rychlé testování vzorků**

S ventilovým systémem Agilent AVS 6/7 umožňuje IntelliQuant Screening v režimu Snapshot svým uživatelům provádět měření celého spektra rychlostí 15 sekund na vzorek. Tato technika poskytuje rychlé posouzení užitečné např. při hodnocení vzorků, aby se zjistilo, zda jsou vhodné pro analýzu pomocí jiné techniky, například ICP-MS. Screening vzorků může potenciálně ušetřit čas tím, že se vyhneme problémům, které by jinak mohly nastat v důsledku neočekávaného složení vzorků nebo koncentrace kovů ve vzorcích.



## Smart Views

Funkce Smart Views (inteligentní zobrazení), která je součástí IntelliQuant poskytuje uživatelům jednoduchý způsob, jak filtrovat svá screeningová data tak, aby zobrazovala pouze ty výsledky, které jsou zajímavé. Minimalizuje tak riziko přehlédnutí důležitých údajů v celkovém množství zaměřených dat. Ve Smart Views lze definovat prahové hodnoty barev založených na koncentraci, které uživatele vizuálně upozorní na výsledky, jenž jsou ve srovnání s hodnotami definovanými uživatelem neobvykle vysoké nebo naopak nízké. Uživatelé si také mohou přesně vybrat, které výsledky prvků chtějí nechat zobrazit, a mohou dokonce definovat pravidla založená na hodnotě koncentrace a zvolit, které vzorky se zobrazí v tabulce výsledků. Pokud například analytik analyzuje 500 vzorků pomocí IntelliQuant, může Smart Views okamžitě vyfiltrovat tabulku výsledků a zobrazit pouze výsledky těch vzorků, které obsahují klíčový prvek nad určenou koncentrací.

## Vývoj metod

IntelliQuant Screening je přínosný pro jinak technicky i časově náročný vývoj metod, jelikož nevyžaduje žádný výběr prvků a žádnou předchozí znalost obsahu vzorků. Vývoj metod byl tradičně doménou zkušenějších analytiků, kteří disponovali řadou komplexních znalostí o technice ICP-OES. To však již neplatí, jelikož IntelliQuant Screening poskytuje všechny nástroje nezbytné k vývoji kvantitativních metod i pro méně zkušené operátory.

Technologie IntelliQuant Screening používá snadno interpretovatelný systém klasifikace hvězdičkami, který ukazuje, které vlnové délky analytu jsou pravděpodobně předmětem spektrálních interferencí, posunů pozadí nebo špatné citlivosti (zobrazeny na Obrázcích 2 a 3). Vlnové délky analytů, které nejsou ovlivněny interferencí nebo zřejmě dávají lepší citlivost v porovnání s jinými vlnovými délkami, získávají vyšší počet hvězdiček. Interferované vlnové délky nebo vlnové délky se špatnou citlivostí získají nižší hodnocení. Znalost těchto informací pro každý jednotlivý vzorek měřený pomocí IntelliQuant Screening pomáhá uživatelům rozhodnout, které vlnové délky analytu použít do jejich kvantitativních metod.

Wavelength (nm)	Confidence	Interference
214.439	★★★★★	
226.502	★★★	
228.802	★★★ ?	As(228.812)
361.051	★	
326.105	★★	
508.582	★	

Wavelength (nm)	Confidence	Interference
188.980	★★★★★	
193.696	★★★★★	
234.984	★★★	
200.334	★★★★	

Obrázek 3. IntelliQuant dává pětihvězdičkové hodnocení výsledku na dvou vlnových délkách arsenu, což naznačuje, že obě vlnové délky jsou v tomto případě vhodné pro kvantitativní metodu.

Obrázek 2. IntelliQuant označí nejvhodnější vlnovou délku analytu vysokým ohodnocení hvězdičkami a zeleným zatržením. Zdůrazňuje také podezření na interference na vlnových délkách analytu pomocí nízkého hodnocení hvězd. Potenciální spektrální interference lze identifikovat umístěním myši na červený otazník.



## Rychlé testování vzorků

Pracovní postup vývoje metody s IntelliQuant Screening lze znázornit ve třech jednoduchých krocích:

### 1. Změřte své vzorky pomocí IntelliQuant Screening

Nastavení IntelliQuant Screening pro vaše neznámé vzorky je jednoduché a intuitivní. Není nutná žádná úprava metody - stačí přidat své vzorky a začít měřit.

### 2. Přidejte doporučené vlnové délky do kvantitativní metody

Po každém změření vzorku zobrazí IntelliQuant v uživatelském rozhraní seznam doporučených vlnových délek pro každý prvek detekovaný ve vzorku. Systém hvězdičkového hodnocení IntelliQuant je jednoduchým způsobem, jakým lze určit, které vlnové délky pravděpodobně poskytnou nejlepší výsledek pro jakýkoli prvek ve vzorku. IntelliQuant také odfajfkje zeleným zatržítkem nejlepší vlnovou délku pro daný prvek.

Stejný počet hvězdiček jako preferovaná vlnová délka IntelliQuant (tedy ta se zeleným zatržením) může obdržet i několik dalších vlnových délek. Pokud k tomu dojde, měly by být do kvantitativní metody zahrnuty všechny vlnové délky s vysokým počtem hvězdiček.

### 3. Spusťte kvantitativní metodu s aktivovaným IntelliQuant

Nyní můžete sestavit kvantitativní worksheet s využitím vlnových délek doporučených IntelliQuantem pro vaše vzorky. Je vhodné vybrat více vlnových délek pro každý prvek (jsou-li k dispozici) tak, aby se zajistily výsledky bez interferencí pro všechny vzorky, které chcete pomocí nové metody měřit.

Při analýze neznámých vzorků pomocí nové kvantitativní metody můžete i nadále pokračovat v měření se zapnutým IntelliQuant. Data IntelliQuant vám umožní objevit případné interference, které nebyly přítomny ve vzorcích použitých při procesu vývoje metody. Data z IntelliQuant mohou posloužit ke zpřesnění metody výběrem vícero vhodných vlnových délek, nebo ke zvolení vhodného nástroje ke korekci dat ovlivněných interferencí a to buď pomocí techniky matematického kalibračně nezávislého rozkladu interferujících spekter FACT, nebo pomocí mezi-prvkových korekčních rovnic IEC.