

Быстрая разработка методики анализа образцов почвы, экстрагированных ДТПА, с помощью скрининга IntelliQuant Screening

Интеллектуальные функции ИСП-ОЭС спектрометра Agilent 5800 VDV помогают снизить количество повторных анализов

Автор

Михаэль Маврогенис
(Michael Mavrogenis)
Agilent Technologies, Inc.

Обнаружение всех элементов за один анализ

Образцы почвы готовились для анализа по китайской методике HJ-804. Образцы экстрагировались раствором ДТПА и в них, с помощью ИСП-ОЭС Agilent 5800 VDV, оборудованного усовершенствованной системой быстрого переключения потоков AVS 6 и автосамплером SPS 4, измерялась концентрация восьми биодоступных элементов.

Для помощи в разработке методики применялись функции программы Agilent ICP Expert, такие как IntelliQuant Screening. Этот подход позволил получить результаты высокого качества и снизить количество повторных анализов. Таблица расчета концентраций функции IntelliQuant приводит результаты приблизительного количественного анализа и другую информацию об образце, дополняющую данные количественного анализа.

Простая разработка методики за три шага с помощью функции IntelliQuant Screening

Разработка методики может быть кропотливым и долгим процессом. Плохая методика может привести к попаданию в отчет ошибочных данных и к необходимости тратить деньги на повторение анализов. Функция скрининга IntelliQuant Screening помогает создать методику анализа за три простых шага.

Шаг 1. Выполнить анализ образца с включенной функцией IntelliQuant Screening.

Использовать эту функцию очень просто. Не надо выбирать никаких элементов или длин волн. Функция IntelliQuant Screening позволяет записать полный спектр всего за 15 секунд. Затем автоматические алгоритмы поиска находят присутствующие в пробе элементы и их длины волн.

Шаг 2. Выбрать одну или несколько доступных длин волн для количественной методики.

Для каждого обнаруженного в образце элемента функция IntelliQuant Screening предложит список рекомендованных длин волн.

В этой работе все длины волн, выбранные функцией IntelliQuant Screening, также предлагались нормативной методикой HJ-804. Это указывает на высокую надежность алгоритма IntelliQuant.

Возьмем для примера марганец. Функция IntelliQuant Screening присвоила нескольким длинам волн пятизвездную степень надежности. Это указывает на то, что эти длины волн скорее всего будут пригодны для количественного определения (см. рис. 1).

Element Used	Flag	Wavelength	Rating	Concentration	Intensity	Background
Mn	✓	257.610	★★★★★	6.56	3531212.2	9240.0
Mn	?	259.372	★	7.23	2642148.1	6717.9
Mn	✓	293.305	★★★★★	6.99	767084.1	6023.2
Mn	✓	293.305	★★★★★	6.99	299379.6	4272.6
Mn	✓	279.827	★★★★★	6.79	108063.1	8186.8
Mn	✓	191.446	★★★★★	6.43	14796.5	714.4

Analyte: Mn(259.372)
 Confidence: very weak
 Interference: Fe(259.372)
 Confidence: very strong

Рис. 1. Таблица степеней надежности IntelliQuant для длин волн марганца. Нажатие на красный вопросительный знак откроет окно с информацией о том, почему данной длине волны присвоена такая низкая степень надежности. В данном случае для основной линии марганца была обнаружена потенциальная помеха со стороны железа.

Функция IntelliQuant Screening присвоила пятизвездную степень надежности длинам волн Mn 257,610 нм и Mn 293,305 нм, основываясь на их интенсивности, структуре фона и отсутствии помех. Методика HJ-804 также рекомендует эти две длины волн.

Красный вопросительный знак рядом с флажками длин волн с низкой степенью надежности указывает на то, что с этой длиной волны что-то не так. Всплывающая подсказка говорит о том, что для этой линии обнаружена сильная помеха со стороны железа, поэтому ей присвоена только одна звездочка. На основе полученной информации эта длина волны была исключена из методики.

Шаг 3. Провести анализ образцов и получить приближенные количественные данные.

Количественный анализ выполнялся на длинах волн, предложенных функцией IntelliQuant Screening. В ходе анализа другая функция программы, IntelliQuant, собирала для каждого образца данные приблизительного количественного анализа. Этот подход позволяет выполнять нормативные методики, в то же время собирая приблизительные количественные данные для 70 элементов, которые могут присутствовать в образце (см. рис. 2).

Функция IntelliQuant использует те же самые алгоритмы автоматического поиска элементов, которыми пользуется функция IntelliQuant Screening для обработки приблизительных количественных данных для каждой длины волны каждого элемента. Программа рассчитывает приблизительную концентрацию всех элементов в образце и автоматически ищет спектральные помехи.

www.agilent.com/chem

Информация может быть изменена без уведомления.

© Agilent Technologies, Inc., 2019
 Напечатано в США 14 ноября 2019 г.
 5994-1480RU



Рис. 2. Тепловая карта IntelliQuant показывает относительную концентрацию всех элементов в образце.

Для дополнительной уверенности в результатах количественного анализа их можно проверить с помощью данных IntelliQuant. Как показано в табл. 1, приблизительные концентрации, рассчитанные функцией IntelliQuant, отличались от точных концентраций не более чем на ±25%. Это дает дополнительную уверенность в результатах анализа.

Таблица 1. Сравнение результатов количественного анализа и данных IntelliQuant.

Элемент	Концентрация (мг/л)		Элемент	Концентрация (мг/л)	
	Количественное определение	IntelliQuant		Количественное определение	IntelliQuant
Cd	0,15	0,17	Mn	8,57	9,12
Co	0,07	0,05	Ni	0,54	0,54
Cu	3,30	3,46	Pb	4,38	4,63
Fe	29,3	28,4	Zn	43,9	43,9

Получите больше информации о ваших образцах

ИСП-ОЭС Agilent 5800 с вертикальным двойным обзором подходит для рутинного определения восьми биодоступных элементов в почве. Функции IntelliQuant Screening и IntelliQuant повышают уверенность в аналитической методике и в полученных результатах. Обладая расширенной информацией об образце до начала анализа, вы можете снизить количество повторных анализов и сэкономить тем самым время и деньги.

 **Agilent**
 Trusted Answers