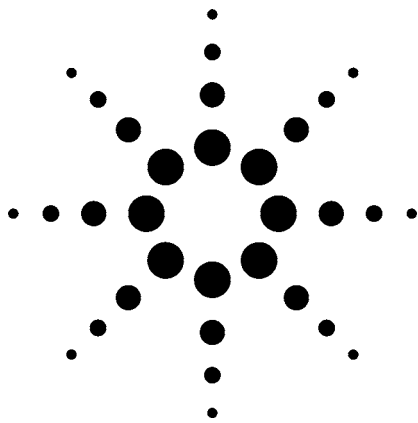


Agilent 7500系列电感耦合等离子体质谱仪 增强型化学工作站软件 技术概述



作者

Nori Koide
Agilent Technologies
9-1 Takakura-Cho, Hachioji-Shi
Tokyo, 192-0033
Japan

Steve Wilbur
Agilent Technologies, Inc.
3380 146th PI SE Suite 300
Bellevue, WA 98007
USA

摘要

Agilent 7500系列电感耦合等离子体质谱仪(ICP-MS)完全通过功能强大的配套化学工作站软件操作。所有与ICP-MS数据采集、仪器控制、数据处理和报告等相关的操作都通过软件完成。安捷伦的软件升级持续项目又推出了一款新版本，功能更加强大，是为微软Windows® 2000和XP操作系统设计的化学工作站。

引言

作为正在进行的ICP-MS软件升级项目的一部分，安捷伦推出了B.03版本的ICP-MS化学工作站。化学工作站的升级改进包括支持新的硬件，增强的用户界面，附

加纠错和支持功能，以及应安捷伦客户和内部使用者要求而设的其它许多强大的新功能。联用技术的设置，包括气相色谱(GC)、液相色谱(LC)、以及激光烧蚀LA ICP-MS，都包括在仪器工作站的配置中，并且在设置上更简单容易。通过单击鼠标就可以实现外部联机装置和ICP-MS主机之间的实时信号通讯。

在B.03版本中，工作站的各组成部分从智能序列分析模块、仪器控制和调谐，到工作曲线以及数据报告等各部分，都有了重大改进。工作站也保留了用户已经习惯的熟悉的外观和方式。工作站的功能在很多方面都有改进，以下是经过重大改进的、为用户提供强大新功能并易于使用的部分。

- 调谐
- 数据采集
- 智能序列分析模块
- 工作曲线校准
- 数据报告
- 半定量分析
- 数据管理
- 自检及维护支持功能



此外，新版本具有很好的追溯兼容性，允许现有方法以及数据文件格式和以前版本安全转换¹。

同样熟悉的结构——改进的用户界面

工作站保留了熟悉的结构，将ICP-MS的操作划分成一系列，每个模块负责相关的一组任务。用户可以根据个人喜好或需求设置显示模版的版式。所有工作站模块都可以在屏幕顶端通过单击鼠标使用。见图1。

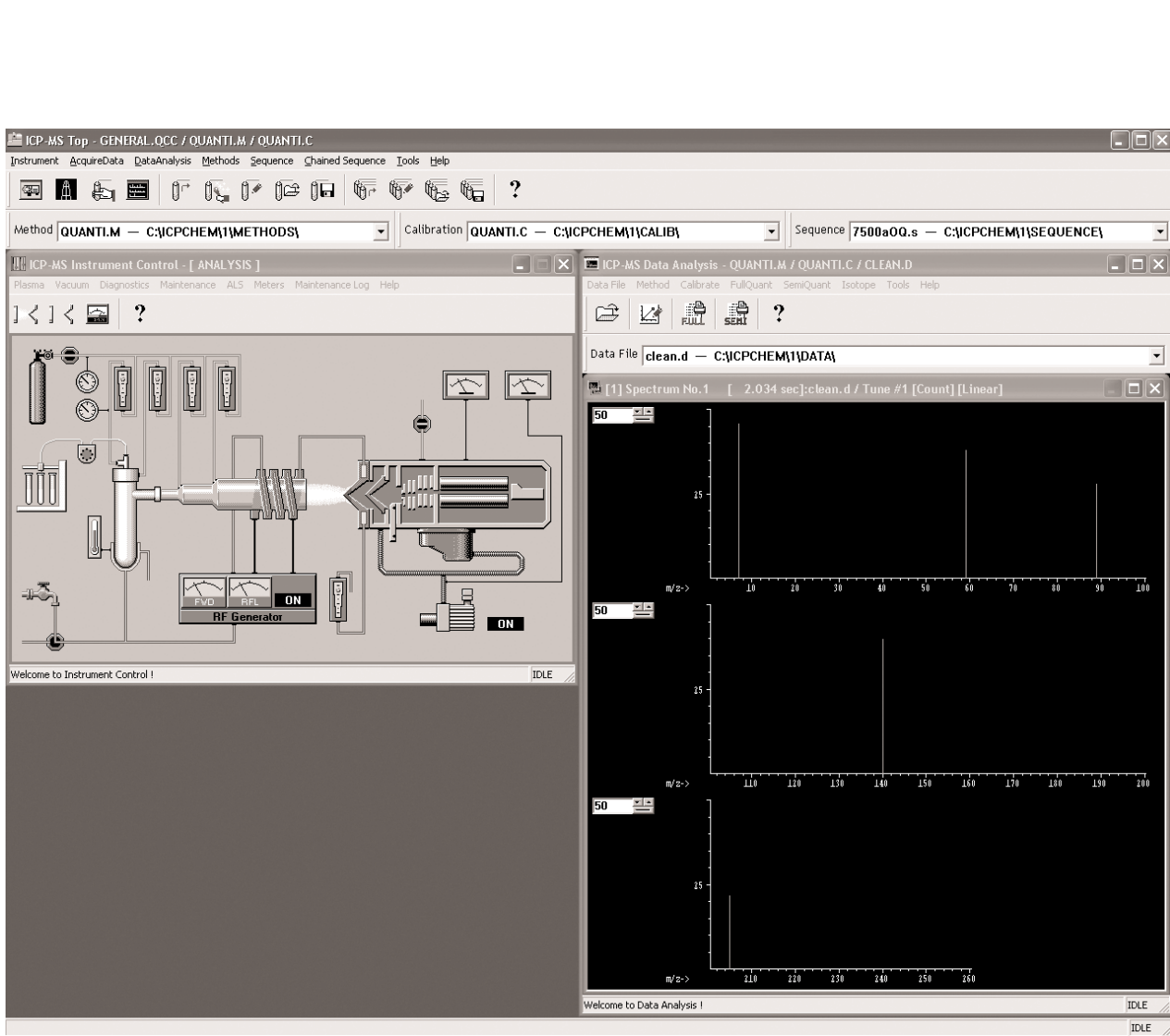


图1. 主菜单界面，显示连接其它功能的工具栏，当前方法、校准和程序以及仪器控制 and 数据分析模块的下拉菜单。

¹B.01.02之前的软件版本的报告模版与B.03不兼容，需要重安装。

调谐

可以同时显示15个用户定义的调谐质量和质量比，允许用户同时监控灵敏度、氧化物、双电荷离子、背景和干扰。显示并储存所有当前参数，点击按键可重新

设定为默认值。见图2。调谐功能列表中显示的都是用户可选择的，所以在方法建立过程中可以看到所有参数，或者可在常规操作中简单的显示。

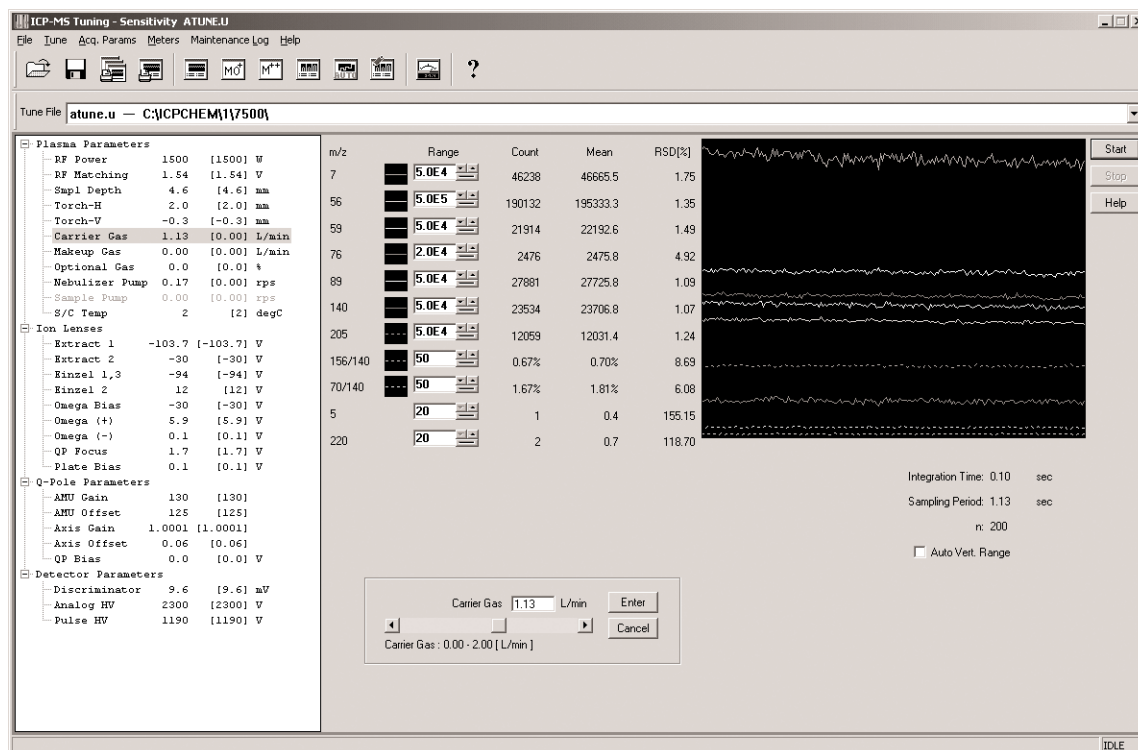


图2. 可以同时显示多达15个用户可定义信号的新调谐界面

智能清洗

增加的智能清洗功能可以改善样品分析效率并能减少异常高含量样品的记忆效应。在清洗过程中，智能清洗系统可监控最多10个用户定义的质量或质量比并与用户设定的阈值进行比较。只要满足特定的条件，系统将开始下一个样品的分析。清洗样品时允许用户选择更短的最少清洗时间而不用担心高浓度样品的残留，因此分析率和可靠性都有提高。此外，每一个清洗位置都可以指定最大清洗时间。如在最大清洗时间内没有达到预设标准的话，系统将执行用户预先设定的一种操作(如停止分析或再次清洗)。智能清洗支持所有自动进样器。见图3。

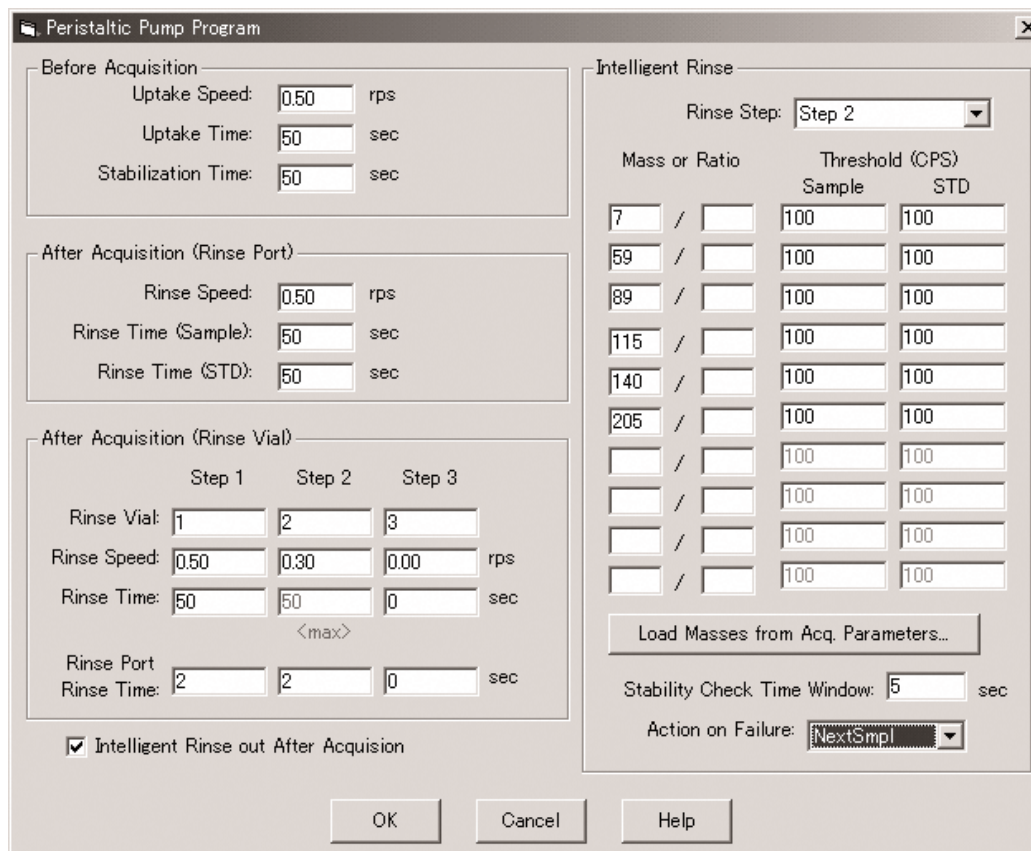


图3. 智能清洗设置界面。提供3个独立的清洗位置，可监控最多10个质量或质量比。

智能序列分析/QC 报告

结合每种方法必需的管理样类型，智能化序列和质量控制(QC)报告可以通过针对不同分析方法的质控QC标样来简化。用户可定义**多达50种不同的QC样品**。此外，现在还可以限定特定方法中对于不同样品类型可以报出的元素。这意味着对于一个特定方法而言，并非所有样品类型中的所有元素都必须报出，这再次大大改进了方法并且增强了报告的灵活性。另一个附

带的优点即是装在程序表中的**稀释倍数计算工具**。见图4。用户只要输入样品的初始和稀释后的最终质量或体积，系统将自动计算每个样品的稀释倍数或浓度并将其输入到样品表。对每个样品**单独输入内标浓度(ISTD)**也是新增功能。这对LA用户很有用，也适用于在分析前对样品手动加入ISTD的情况。当执行单一手动进样、非自动采集时，稀释倍数计算工具和各样品特定的ISTD浓度也同样有效。

The screenshot shows a software window titled "Edit Sample Log Table - is_seq.s". It features a table with columns: Type, Vial, Data File, Sample, Comment, Dil/Lvl, Final WT or Vol, Sample WT or Vol, Dil Multiplier, ISTD Conc, and Action on Failure. The table contains 11 rows of sample data. A dialog box titled "Calculate Dilution Factor" is overlaid on the table. The dialog box contains the following text and fields:

Dilution Factor
= [Final Weight or Volume / [Sample Weight or Volume]] * [Multiplier]

Final Weight or Volume : 1.000
Sample Weight or Volume : 8.500
Multiplier : 1.000
Calculated Dilution Factor : 1.176E-01 [Calculate]

Current Sample Name
Sample 8

[OK] [Cancel] [Help]

图4. 点击Sample Log Table中的稀释因子单元可以调出稀释因子计算工具。稀释因子可以手工输入并复制，自动为每个样品计算，也可将样品重量和最终体积输入到比如LIMS产生的列表中进行计算。Sample Log Table是一个简单的电子表格，包含样品自动分析程序的所有必要信息。

工作曲线校准

校准模块进行了明显的简化和改进，增加了许多实用的，使用便捷的功能。一个简单的，易理解的电子表格界面包含了所有校准信息。见图5。用户可以通过4个简单的文件标记使用不同的功能：

1. 校准表
2. 校准数据文件
3. 校准图概要
4. 校准图细节

以前工作站文本中允许最多有20个级别的校准。见图6、7。此次的对以前文本的改进包括：

1. 在校准表中将分析元素和ISTD元素分开。
2. 提供了具有与样品独立设置的ISTD浓度的简化的相同界面下的虚拟内标(VIS)校正功能。
3. 校准数据文件名显示在校准表中。
4. 可以基于每个不同元素设置回归权重。

The screenshot shows the 'Edit Calibration' window with the following data:

Analyte elements										
Step	Mass	Element	Curve Fit	Weight	Min Conc	Units	002calb.d	003cals.d	004cals.d	
							Level 1	Level 2	Level 3	
1	27	Al	$Y=a \times [blank]$	45	OFF	0.000	ppb	0.000	50.00	100.0
2	53	Cr	$Y=a \times [blank]$	45	OFF	0.000	ppb	0.000	50.00	100.0
3	55	Mn	$Y=a \times [blank]$	45	OFF			50.00	100.0	
4	60	Ni	$Y=a \times [blank]$	45	OFF			50.00	100.0	
5	65	Cu	$Y=a \times [blank]$	45	OFF			50.00	100.0	
6	66	Zn	$Y=a \times [blank]$	45	OFF			50.00	100.0	
7	75	As	$Y=a \times [blank]$	45	OFF			50.00	100.0	
8	77	(As)	Excluded	45	OFF			0.000	50.00	100.0
9	82	(As)	Excluded	45	OFF	0.000	ppb	0.000	50.00	100.0
10	111	Cd	$Y=a \times [blank]$	115	OFF	0.000	ppb	0.000	50.00	100.0
11	206	(Pb)	Excluded		OFF	0.000	ppb	0.000	50.00	100.0
12	207	(Pb)	Excluded	115	OFF	0.000	ppb	0.000	50.00	100.0

Int. Std. elements									
Step	Mass	Element	VIS	Units	Level 1	Level 2	Level 3	Level 4	Level 5
1	45	Sc		ppb	10.00	10.00	10.00	1.000	1.000
2	115	In		ppb	10.00	10.00	10.00	1.000	1.000

图5. 校正表显示所有相关校正信息。移动文件标签，使用户查看各具体校正功能。

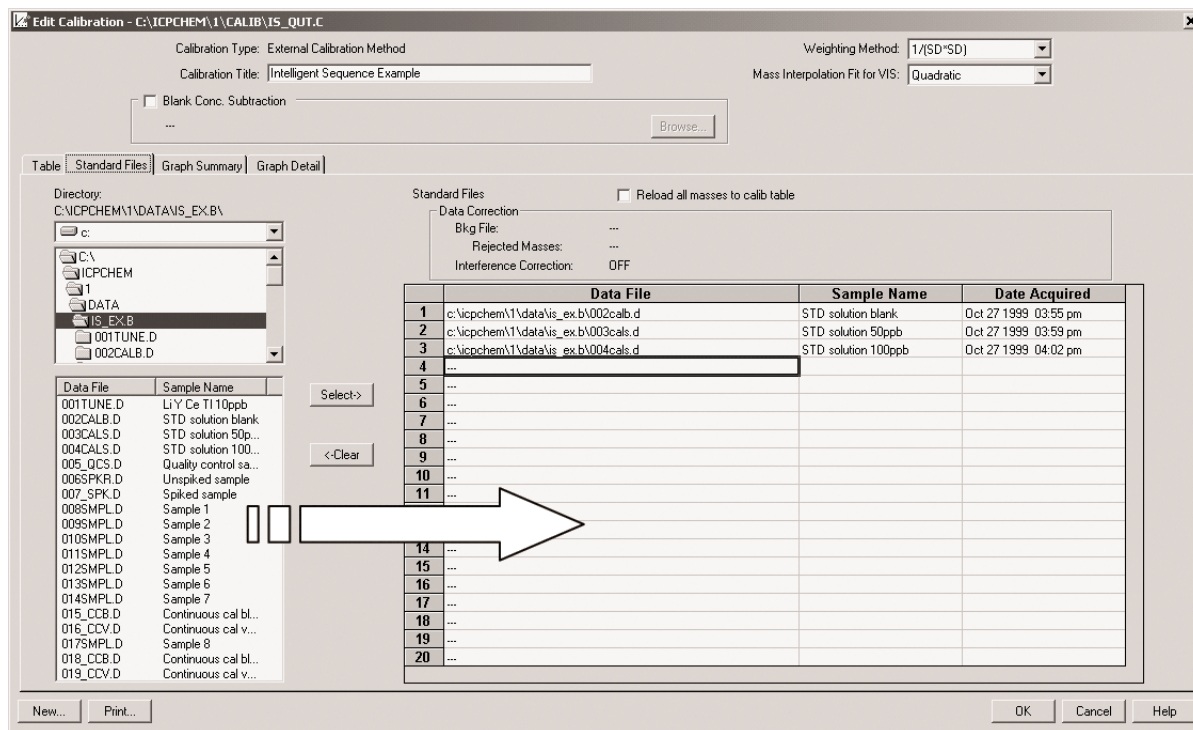


图6. 工作曲线文件表。从一个简单的文件列表框中选择标准文件，样品名称包括在列表内。

5. 校准数据文件可以直接从目录列表中快速选择或者在序列分析期间自动更新。校准文件目录中包含样品名和采集时间。
6. 用户可以选择是否从已载的数据文件自动更新校准表中的质量列表，进一步提高了仪器使用的灵活性和便捷性。

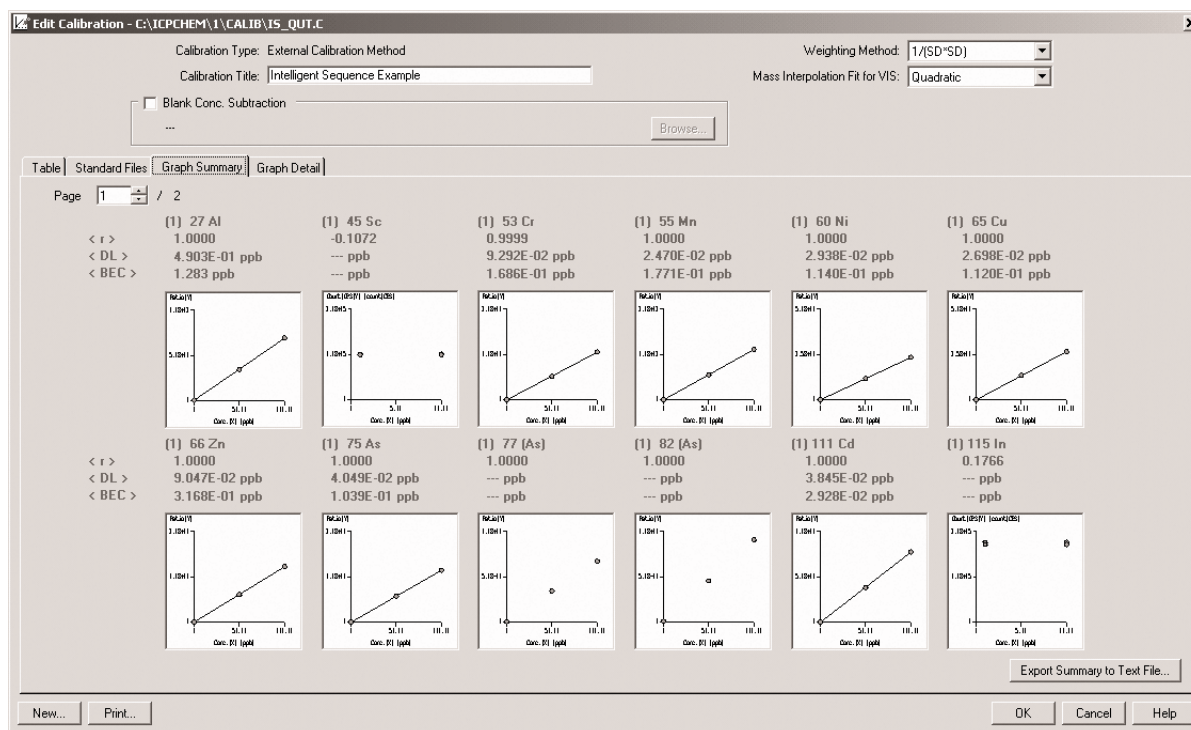


图7. 所有分析元素工作曲线的综合显示图，包括曲线拟合、估算检出限以及背景相当浓度值(BEC)。

- 工作曲线图概要能快速回顾所有校准曲线包括曲线拟合质量，以及计算检出限和背景等效浓度(BEC)。这种报告可以打印或者以文本文件形式导出以满足优良实验室管理(GLP)或者其它规范的需求。
- 校准图细节中为校准曲线增加了一个图像电子放大功能以便简化对较低校准水平时曲线拟合的评价。

强化的半定量功能

增强的半定量功能支持安捷伦独有的八极杆反应池系统(ORS)ICP-MS仪器，在无干扰的氦碰撞模式下[1]，获得精确、可靠的半定量结果。半定量包括了以前由于干扰不能半定量分析的同位素。当在He模式下用ORS系统时，这个新功能就非常有用而且效果很好。此外，对特定元素，用户可以选择其它替代同位素或者多种同位素。半定量图像用户界面也有所改进，简化了半定量方法设定。见图8。

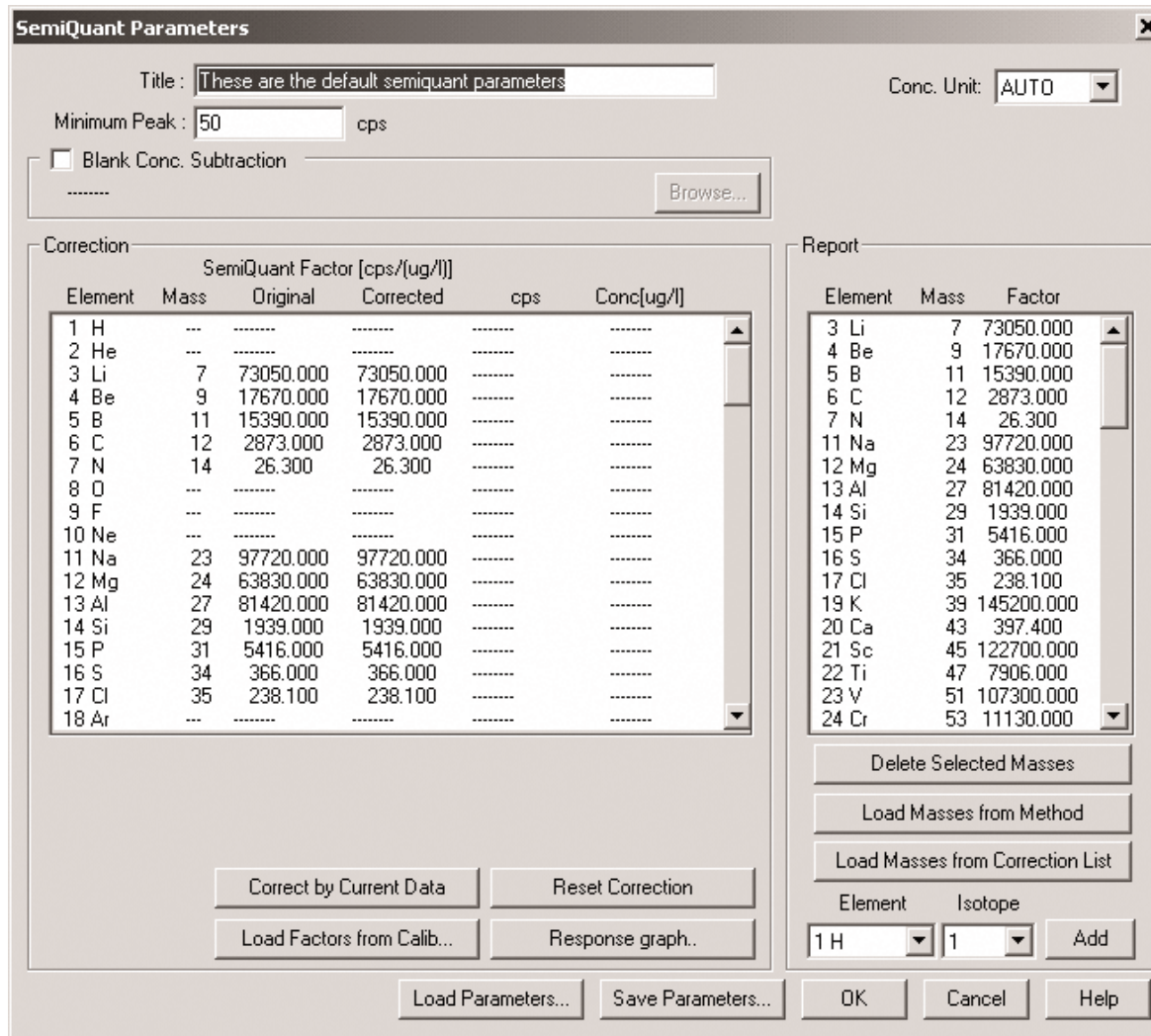


图8. 简易灵活的半定量设置新界面

新的数据处理和档案功能

在数据库中批量报告功能自动从一批样品中打包所有文本报告到一个单一文件夹中。数据库保留了所有原始数据和处理过的数据及批量特定样品的所有方法，校准以及程序的备份。此功能极大的简化了将所有相关信息转换到归档和报告的LIMS系统或者其它文件服务器。此外，方法和数据建档功能的增加使得回顾和找回关键信息更加便利。见图9。

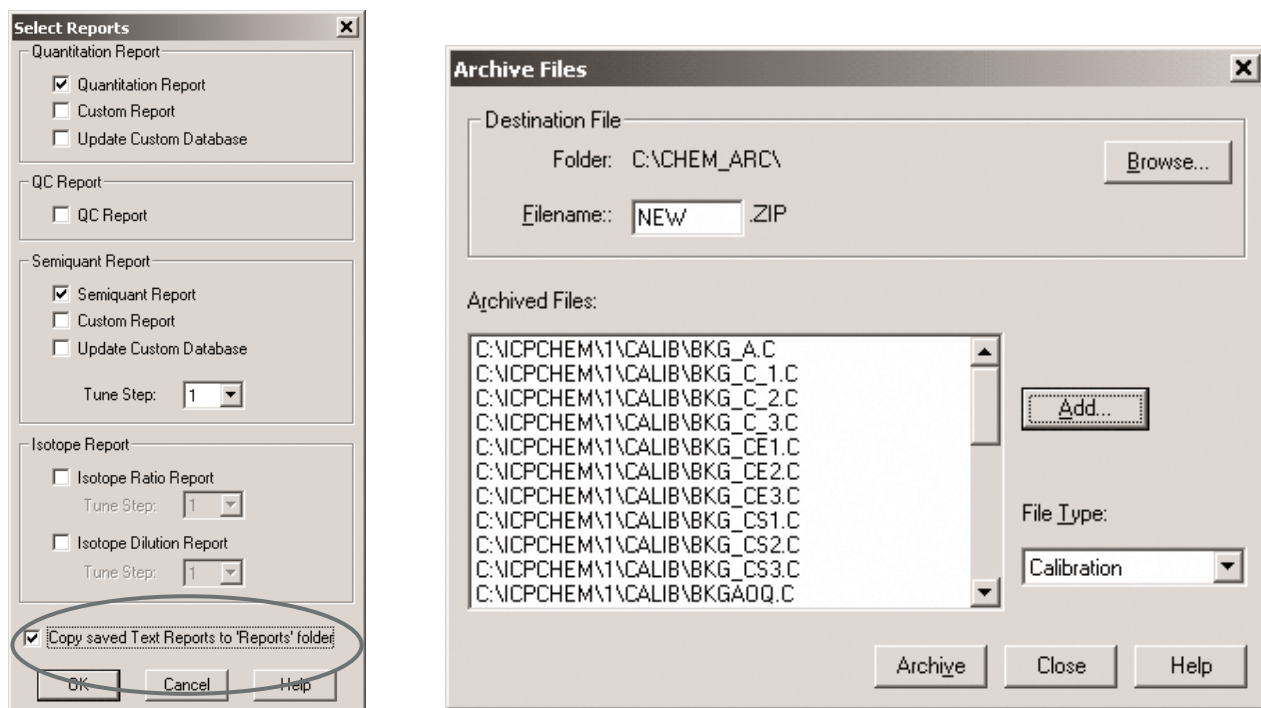


图9. 报告选择对话框(左图), 包括将批文本报告进入一个单一的文件夹中的选择。归档功能对话框(右图), 具有盘处理任务和简化数据处理选择功能。

新的诊断工具

新的诊断和支持工具能更快更可靠的发现并解决问题，即使是仪器系统以前有了更多的部件和功能。例如，雾化器检测工具检测雾化器的堵塞和渗漏，简化了普通问题的发现和处理。见图10。

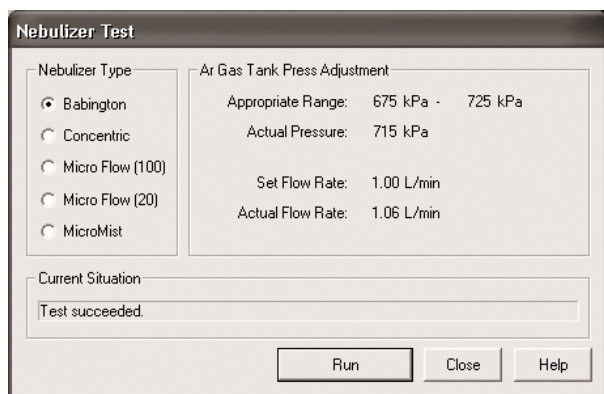


图10. 雾化器测试功能可以检测所有通用雾化器

对硬件和操作系统的最低要求和兼容性

新的工作站版本B.03是为微软视窗2000或者XP操作系统设计的。完全支持所有Agilent 7500系列ICP-MS系统和所支持的外围设备。不支持HP/Agilent 4500 ICP-MS系列仪器。如果用户要从老版本工作站升级必需满足下面最低要求。(表1)。

参考文献

1. Glenn Woods, Ed McCurdy and Steve Wilbur, “Interference-Free Semiquantitative Analysis Using the Agilent 7500ce ICP-MS”, Agilent Technologies, publication 5989-1492EN, www.agilent.com/chem.

更多信息

关于我们产品和售后服务请访问我们的网站，地址是 www.agilent.com/chem。

表1. 最低硬件和操作系统需求

PC	HP Kayak VL400 7/800 工作站系统或更高配置，必须由安捷伦工厂提供并检测
系统内存	128 MB 以上，Windows XP建议512 MB
硬盘	10.0 GB以上
操作系统	Microsoft Windows 2000+Service Pack 4或Windows XP Professional + Service Pack 1a
Internet Explorer	Internet Explorer 6 + Service Pack 1
打印机	HP LaserJet 4000, HP LaserJet 4050 – Note: Printers shipped with ChemStation PC after B.01.01 or HP LaserJet 2200's release are also supported.
I/O Libraries	ver.L.02.01.00
GPIB card	82341C, 82350A or 82350B – Note: GPIB card is not needed for 7500 mainframes with LAN interfaces.
支持仪器	Agilent 7500系列

安捷伦对本资料中出现的错误，以及由于提供或使用本资料所造成的有关损失不负任何责任。

Windows® 是微软公司的美国注册商标。
本资料中所涉及的信息、说明和规格，如有更改，恕不另行通告。

© 安捷伦科技公司，2004

中国印刷
2004年10月27日
5989-1715CHCN