

# ICP Expert 软件

## 技术概述



### 前言

Agilent 5110 ICP-OES 可快速分析样品，气体消耗量更低，其完美的分析性能让您轻松应对复杂样品。其专为简便易用而设计，这一理念也推动了硬件及控制仪器的 ICP Expert 软件的设计。

借助熟悉的工作表界面、基于 IntelliQuant 模式的简易方法开发、仪器状态概览视图以及自动加载预设方法模板的软件小程序，ICP Expert 软件大大简化了分析过程。

## 简便易用

Agilent ICP Expert 软件使用面向具体应用的软件小程序，使不同技术水平的用户均能自如地运行 ICP-OES 分析。

管理员可设置不同用户可用的应用方法，新手用户只需单击 ICP 小程序图标（图 1，第 1 步）。该小程序将自动加载方法（图 1，第 2 步），通过点燃等离子体并单击“运行”按钮，用户可立即开始分析（图 1，第 3 步）。

界面会显示提示信息，根据序列引导用户何时引入各种标准品以及何时引入适当的测量样品。该逐步引导式方法可确保所有用户均可获得准确且可重现的结果，基本不需要培训。利用小程序管理工具可轻松导入小程序并与其他用户进行交换。

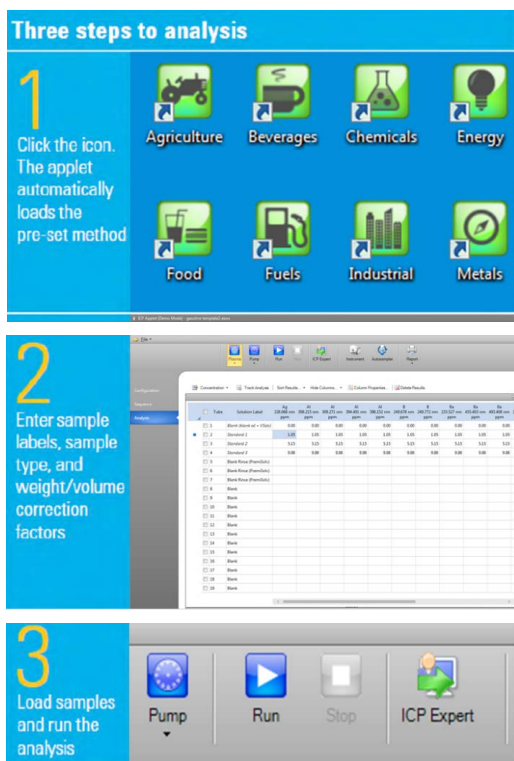


图 1. 面向具体应用的软件小程序可引导用户完成分析过程，确保采用合适的技术并获得准确的结果

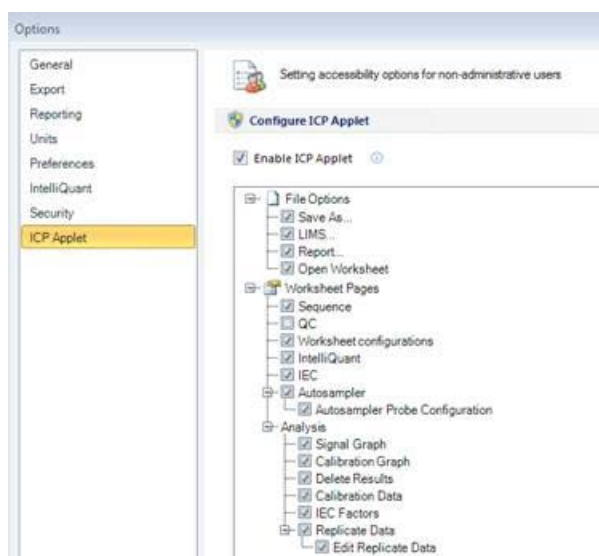


图 2. 可定制界面使每个用户仅看到他们需要的功能，降低了操作复杂性

## 简化方法开发

Agilent ICP Expert 软件简化了方法开发，让用户可以花费更少的时间设置方法，并投入更多的时间运行样品。

选择待测元素后，软件将显示发射谱线并按优先次序排列。从列表中选择发射谱线波长，潜在的干扰会以图形显示，其他要分析的已选定元素则以红色突出显示。如此，用户可以直观地评估受其他分析物干扰的可能性。如果存在过于接近的谱线，可将其放大以便更仔细地观察。然后选择可避免光谱干扰并涵盖您的样品类型所需浓度范围的波长。

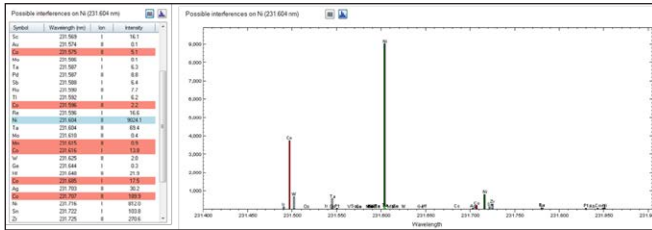


图 3. 在方法开发过程中快速查看潜在的干扰。干扰以彩色图形显示

## 合理的工作流程

ICP Expert 软件采用清晰的合理工作流程，简化了分析，即便对于经验丰富的用户也非常有帮助。在设置和进行分析时，只需按照页面依次显示的提示信息执行操作即可。当前页面将被突出显示以使工作进度完全可见。

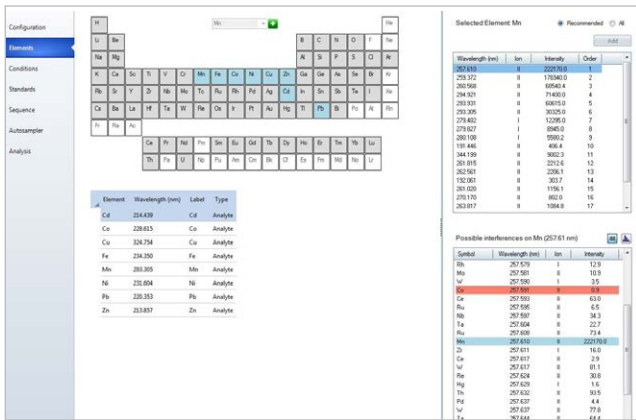


图 4. Agilent ICP Expert 软件提供了清晰的工作流程，可引导用户完成方法开发和分析过程

## 帮助视频

ICP Expert 软件带有完整的帮助视频，用户可以根据需要获取帮助。帮助视频中包含如何在不同应用中更改和使用进样组件以及如何完成常规维护任务等信息。

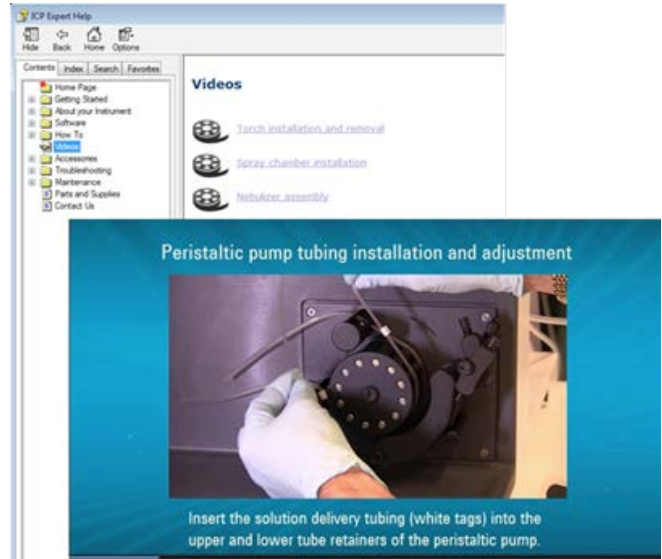


图 5. 有关进样系统组件和常规维护任务的自选帮助视频

## 附件控制

Agilent SPS 4 自动进样器可由 ICP Expert 软件控制。用户可通过 ICP Expert 中的自动进样器窗口或自动进样器选项卡选择样品架类型、清洗泵控制速度并控制探针。

全面集成的高级阀系统 (AVS) 4 通、6 通或 7 通切换阀控制，可通过 ICP Expert 软件的可选 Pro Pack 模块进行控制。这一特性可确保最佳的时序控制，不同于采用复杂独立控制软件的第三方切换阀组件。集成到 ICP Expert 软件中的 AVS 6/7 参数设置如图 6 所示，图 7 为 AVS 4 的参数设置。该软件集成了 AVS 参数计算器，有助于 AVS 6/7 的设置和方法开发 (图 6)。

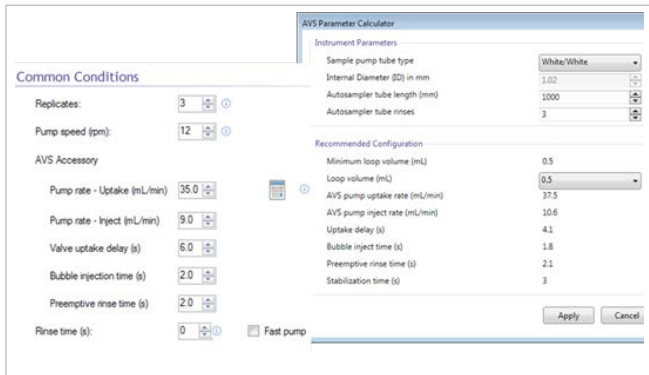


图 6. 高级阀系统 (AVS 6/7) 的参数计算器和设置条件简化了仪器设置和方法开发

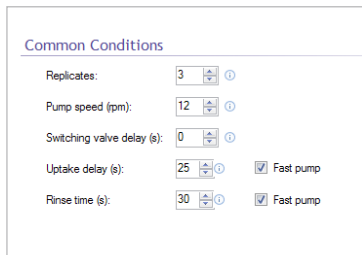


图 7. AVS 4 的切换阀条件

## 使用 IntelliQuant 实现快速样品筛选并简化方法开发

Agilent IntelliQuant 是 ICP Expert 软件的一项功能，能够鉴定并计算样品中多达 70 种元素的近似浓度（半定量）。这使得用户能够快速检查样品中多种元素的近似浓度，无需进行任何方法修改或制备额外的多元素标准品。每次分析中均可执行 IntelliQuant 测量。在运行分析之前只需激活 IntelliQuant 并选择保存的 IQ 校准文件即可。

除用于定量分析中所选元素的读数以外，IntelliQuant 还能在 167-785 nm 的范围内进行全波长扫描。最终结果不仅包括方法中所设定元素的定量分析结果，还包括多达 70 种其他元素的鉴定和半定量分析结果，且每个样品的测量时间仅延长了 15 秒。

用户可以选择默认的 IntelliQuant 标准（工厂校准，无需分析其他标准品），或为了获得更准确的结果，可使用 Agilent IntelliQuant 标准试剂盒中的一组多元素标准品对默认 IntelliQuant 校准进行更新。为获得充分的灵活性，可针对特定的样品基质（如有机溶剂）对自定义 IntelliQuant 校准标样进行测定并保存。任何更新或全新的 IntelliQuant 校准标样均可在标准定量分析序列中进行测量，意味着无需单独进行分析或使用额外的工作表。

IntelliQuant 界面采用元素周期表热图显示样品中已测元素及其近似浓度（图 8）。

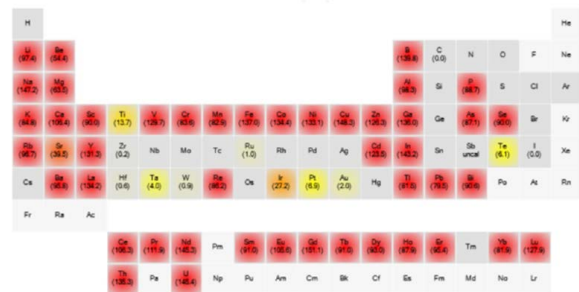


图 8. IntelliQuant 生成的热图直观地显示了样品中所含元素的相对浓度

除扫描谱图外，IntelliQuant 还给出全波长谱图（图 9），提供有关所含元素及任何潜在干扰物的更多信息。可以放大谱图以便更详细地查看。在方法开发或分析过程中，可以对 IntelliQuant 设置进行修改，以对结果进行实时重处理，从而节省宝贵的时间。

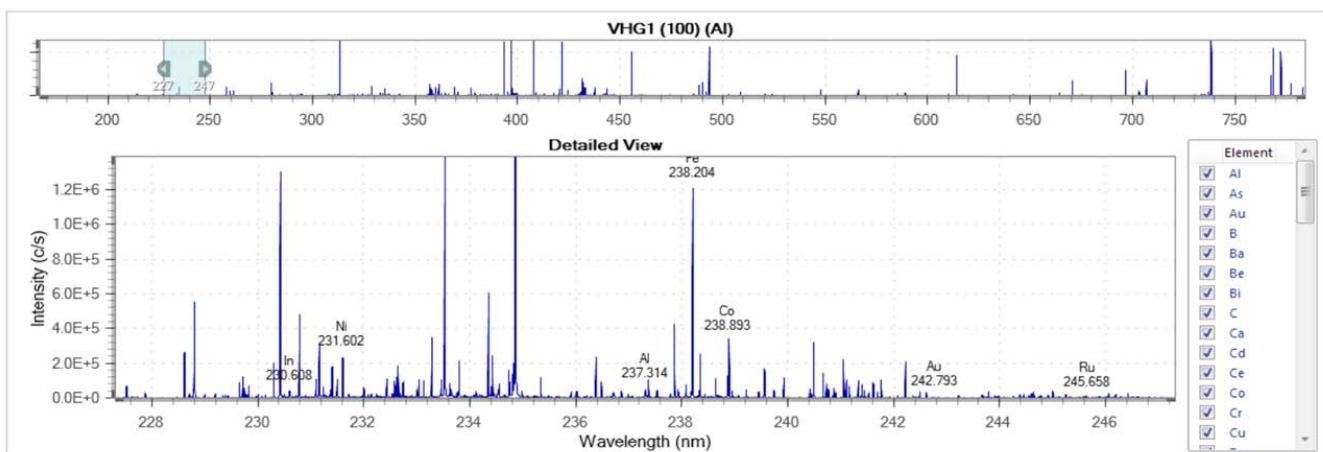


图 9. IntelliQuant 界面显示了样品的全波长扫描结果（上图），以及全扫描结果中任意选定波长范围的详细谱图，其中包括标记的元素峰（下图）

## 可适用任何情况的校正选项

Agilent ICP Expert 软件针对背景或光谱干扰提供了多个校正选项：

**拟合背景校正：**采用复杂的数学算法对分析物谱峰下的背景信号建模，并同时应用于分析物峰的测定，确保快速、简单且准确的背景校正。“拟合”不仅能够准确校正简单及复杂的背景结构，而且无需进行方法开发。

**离峰校正：**一种传统的校正技术，允许用户从分析物峰的左侧、右侧或两侧手动选择校正点。

**FACT 校正：**安捷伦专有的快速自动曲线拟合技术 (FACT)，采用一种高度复杂却又易于使用的光谱建模技术对 ICP-OES 分析棘手样品时经常遇到的复杂分析光谱进行准确建模。

**FACT 是元素间干扰校正 (IEC) 的一种替代技术，功能更强大。它还可准确校正背景，尤其适用于处理极为复杂的背景结构（传统的背景校正技术对此往往束手无策）。**

FACT 通过使用高级光谱建模技术提供实时光谱校正，以数学方式从原始光谱中解析（即分离）分析物信号，并通过分别测定预期组分以及各自的响应来建模。该过程通常包括测定空白溶液、纯分析物溶液和纯干扰物溶液。图 10 示出应用于受 Fe 干扰的 Cd 214.439 nm 的 FACT 模型，其中 FACT 能够通过数学方式分开这两个峰以准确测定分析物信号。对于采用拟合背景校正或 FACT 无法分离的重叠干扰物质，可以使用元素间干扰校正 (IEC)。

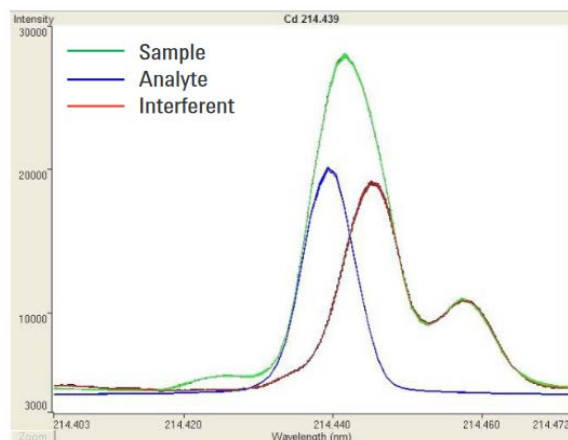


图 10. 应用于受 Fe 干扰的 Cd 214.439 nm 的 FACT 模型示例。使用 Agilent 5110 ICP-OES 分析含约 100 µg/L Cd 的 10000 mg/L Fe 溶液

进行分析后通过光谱图可显示并编辑各种背景校正类型（图 11）。

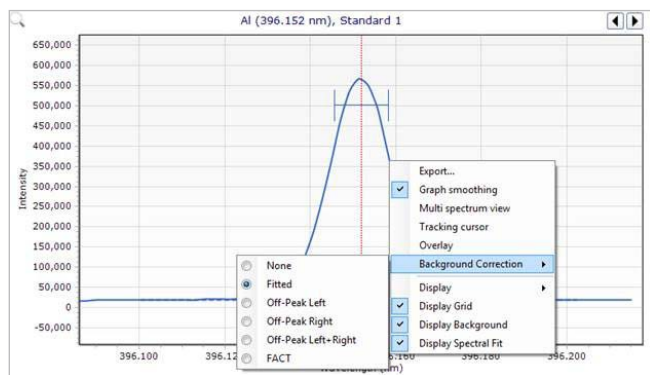


图 11. 在分析之后可灵活、简便地编辑背景校正选项并进行实时重新计算

## 扩展的动态范围

该软件的 MultiCal 功能使用户能够在分析过程中设置并测定多个校准范围，扩展了线性动态范围。

元素的可测量波长通常不止一个，这些波长具有不同的灵敏度，并且通过使用这些波长的组合，用户可以扩展测定的动态范围。在分析中仅进行一次校准可能会限制准确测定的样品批次中所含元素的含量范围，因此需要进行更宽范围的校准。在同一测定中，选择最为灵敏的谱线将获得最佳检测限并能准确测定低浓度分析物，而选择灵敏度较低的谱线可以测定浓度较高的分析物。MultiCal 功能仅需几种标准品即可确定各个波长处的校准范围。图 12 显示了两幅校准图。第一幅校准图为浓度范围在 0–5 ppm 的高灵敏度谱线，第二幅校准图为浓度范围在 0–55 ppm 的低灵敏度谱线，在更宽的浓度范围内对 Zn 进行了测定。

基于测定的信号强度，MultiCal 将根据该波长的校准结果自动报告结果。这使您能够将测定的动态范

围由 ppb 级扩展至百分级。如果需要，可以叠加浓度范围，使样品结果的验证更加简便。

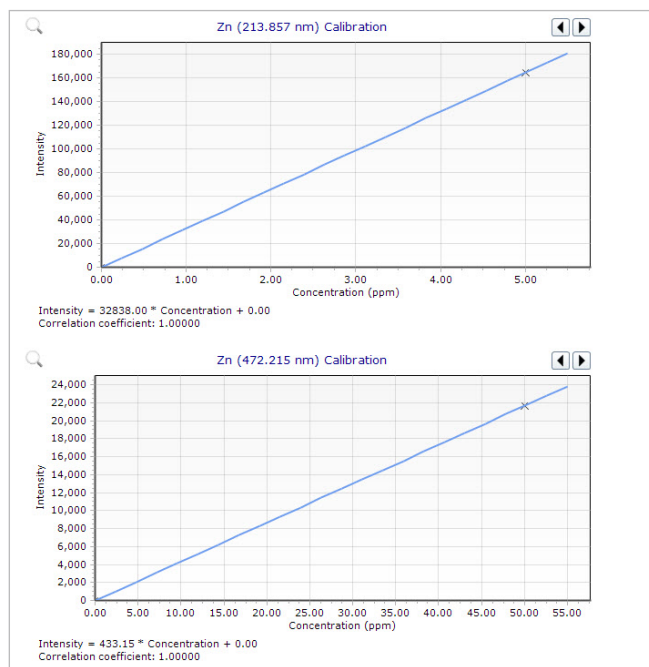


图 12. 使用 MultiCal 扩展动态范围，并从单次样品测定中获得准确的分析结果。在本例中，测定了 0-5 ppm 范围内的 Zn 213.857 nm 以及浓度范围高达 55 ppm 的 Zn 472.215 nm

## 报告功能多样

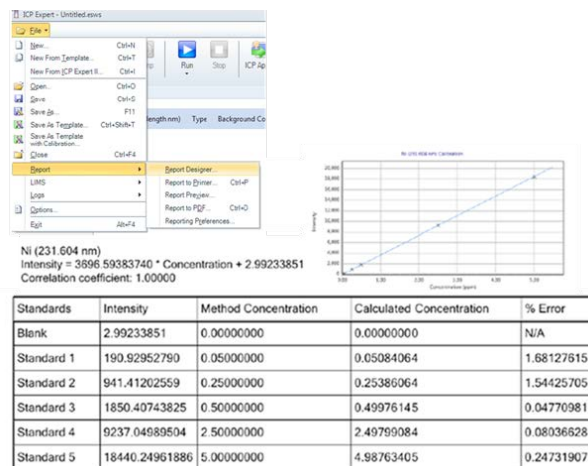


图 13. Agilent ICP Expert 包含各种报告选项以满足您的需求，这些报告采用报告设计工具 (Report Designer) 进行创建

Agilent ICP Expert 软件为您提供了所需的全部报告功能。

报告设计工具使您能够配置报告使其仅包括所需的数据，并可自定义带有公司徽标的报告布局。一旦设计完成，报告还可另存为模板，方便日后重复使用。

## 数据转移和导出

使用 ICP Expert 软件提供的数据导出选项可轻松将报告转移至 LIMS 或其它应用。

数据可以导出为 CSV 格式，以直接转移至电子表格或用于数据操作、趋势分析或过程监测的其他程序中。ICP Expert 软件的多任务功能能够同时审核、处理和生成刚刚完成分析的报告，还可使用 Agilent 5110 ICP-OES 采集当前批次样品的数据。

## 基础版 ICP Expert 和 Pro 版 ICP Expert 软件

ICP Expert 软件拥有两种版本可供选择：基础版和 Pro 版。

基础版软件提供所有必需的功能，支持常规实验室的日常操作。

Pro 软件包提供了额外的功能以改善分析效率并强化该软件的功能，其中包括：

- 简便易用的 QC 功能
- 导出至 MS Excel
- 控制第三方自动进样器
- 根据各解决方案对雾化器的氩气反压以及氩气发射强度进行趋势监测
- 氧气添加和氮气吹扫
- 控制高级阀系统切换阀附件（AVS 4、6 或 7）

## ICP Expert 软件用于 21 CFR 11 法规认证

可选的 21 CFR 11 扩展包与 ICP Expert 的 Pro 版本兼容，可用于光谱配置管理器 (SCM) 软件，使其符合 US FDA 21 CFR Part 11 法规要求。支持用户访问权限的分配以及创建审计追踪、电子记录和电子签名。

## 便于排除故障

如图 14 所示，“仪器状态”页面上显示的虚拟 LED 提供了系统当前状态的即时概况，使您能够在遇到仪器问题时快速检查仪器状态或对系统进行故障排除。

Agilent 5110 ICP-OES 系统的交互式图提供了有关仪器实时参数详细信息并给出可能的错误原因，便于查找和修正问题。面板显示参数随仪器状态实时更新。（图 15）。



图 14. 查看交互式“仪器状态”页面以检查仪器的当前状态并识别引起问题的原因

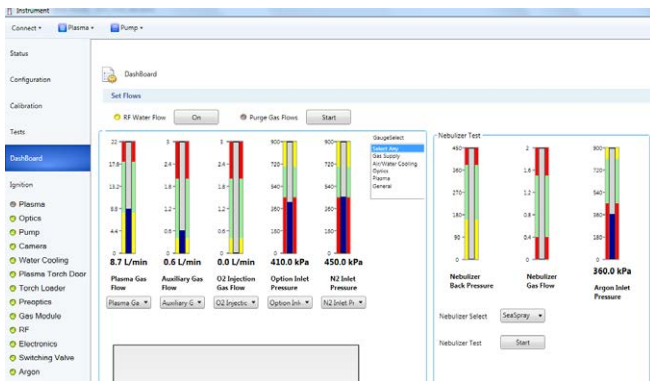


图 15. 仪器状态概览视图仪器参数的状态监测

## 检查仪器性能

为定期检测仪器性能，该软件自动验证仪器性能的功能。仪器测试过程将检查仪器的基本功能，以确认系统运行正常。这是一个重要的故障排除工具。仪器设置不当（特别是水、气、排气和进样系统）通常是导致仪器性能不佳或仪器故障的原因。完成测试进程后，可以导出 PDF 格式的报告。

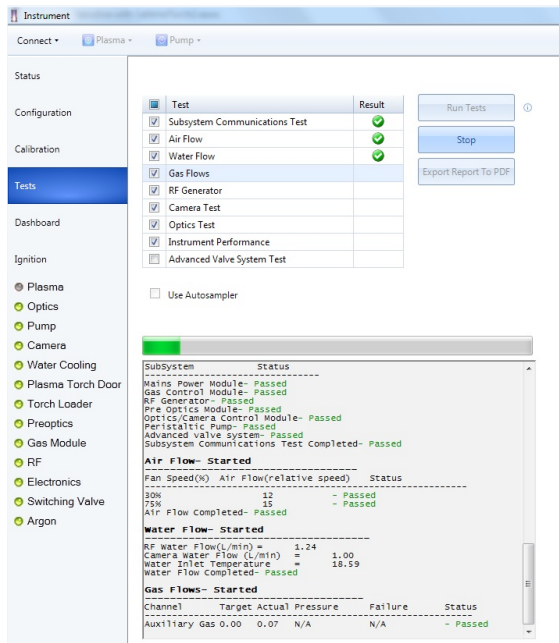


图 16. 定期运行仪器测试以确认仪器运行正常。可以导出 PDF 格式的报告

## 参考文献

拟合背景校正 (FBC) — 快速、准确的全自动背景校正，技术概述，出版号 5991-4836CHCN

使用 FACT 光谱谱图解析软件对复杂样品进行实时光谱校正，技术概述，出版号 5991-4837CHCN

使用 IntelliQuant 实现快速样品筛选并简化方法开发，技术概述，安捷伦出版物，5991-6876CHCN

查找当地的安捷伦客户中心：

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

免费专线：

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们：

[LSCA-China\\_800@agilent.com](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)

在线询价：

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

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

安捷伦对本资料可能存在的错误或由于提供、展示或使用本资料所造成的间接损失不承担任何责任。

本资料中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2017

2017 年 5 月 2 日，中国出版  
出版号：5991-7720CHCN