

Agilent ICP-MS IntelliQuant 分析

QuickScan、IntelliQuant 和星级评定概述



前言

用于 ICP-MS 的 IntelliQuant 是 Agilent ICP-MS MassHunter 4.6 版中引入的功能，可为每个样品提供自动化半定量分析。IntelliQuant 自动进行校准和背景校正，无需用户干预，并以易于理解的周期表热图格式和综合数据表显示数据。

IntelliQuant 之所以可行，是因为在测量每个样品时都可以执行 QuickScan。可选的两秒 QuickScan 能够采集整个可测量质量数范围的完整质谱图，从而实现每个样品的半定量和总基质固体 (TMS) 计算。

其中 TMS 含量根据 IntelliQuant 数据计算得出。与总溶解态固体 (TDS) 相似，TMS 是每个样品中关键基质元素的总和。

TMS 计算中包含通常认为会造成基质效应的元素，如造成电离抑制以及接口锥和透镜上的基质沉积。而气体元素，包括 HCl 和 HNO₃ 等酸中的元素，在 ICP-MS 中不会造成明显的基质效应，因此不在计算之列。

干扰去除

如果存在来源于基质的干扰，并使结果产生偏差，则 ICP-MS 数据无效。默认情况下，ICP-MS MassHunter 在氦动能歧视 (KED) 模式下采集 QuickScan 数据。KED 无需发生选择性化学反应即可去除多原子干扰，适用于几乎所有多原子干扰，而多原子干扰是 ICP-MS 中光谱干扰的主要来源。

氦 KED 的有效运行依靠仪器的整体设计。如需了解更多信息，请参阅出版物 [5994-1171ZHCN](#)。

IntelliQuant 数据分析

默认情况下，在氦气 KED 模式下启用 QuickScan 功能。虽然可以禁用 QuickScan，但它只会使总分析时间增加两分钟，还会产生大量的额外数据。由于 IntelliQuant 会选择最合适的标准品来校准半定量响应，因此分析人员无需具备任何专业知识，也无需进行任何干预。

IntelliQuant 会计算每个样品中每种可测量元素的半定量浓度，并将其显示在数据表和易于理解的元素周期表热图中。

选择一个样品时，热图会自动使用 TMS 和浓度数据进行更新。用户可以单击特定元素，查看该元素的详细信息。

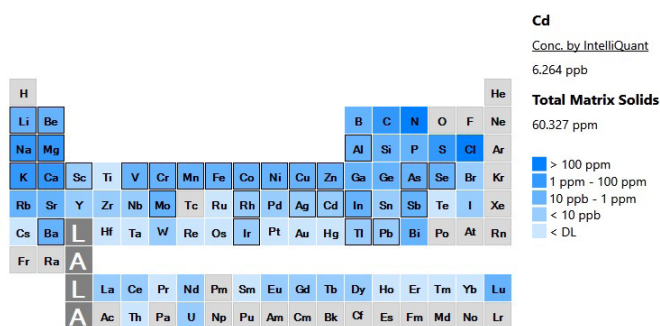


图 1. IntelliQuant 热图示例，显示样品中所有可测量元素的半定量数据

记录每个样品的半定量数据，意味着分析人员可以获得比单独定量测量更丰富的数据集。这些数据可用于研究不常见的样品或意外结果，而不会改变或干扰实验室工作流程。

例如，如果可疑样品需要进行全面的元素筛查，则可将其添加到启用 IntelliQuant 的标准常规方法中，而无需进行任何更改。

IntelliQuant 星级评定

ICP-MS MassHunter 5.3 中引入的一项新功能是创新的星级评定系统。只需按一下按钮，即可显示星级评定汇总视图。

启用该功能后，ICP-MS MassHunter 将对氦模式下测量的每种定量元素和同位素进行评估。然后，它将评估每种同位素的数据质量，并使用易于理解的星级评定系统显示数据的置信度。五颗星表示该同位素的结果具有高置信度。

让您对结果充满信心

在计算星级时，IntelliQuant 使用的多变量数据包括：

- 光谱干扰
- 测量精度
- 检出限和背景
- 校准质量



图 2. IntelliQuant 星级评定使用多变量分析计算定量样品数据的置信水平

干扰数据库

使用 QuickScan 功能采集的全扫描数据计算光谱干扰。通过全面的实际干扰数据库对光谱进行过滤。该数据库保存了无气体和氦气碰撞模式下不同预设等离子体条件（低基质、通用或 UHMI）下的干扰形成率详细信息。

然后，IntelliQuant 使用 QuickScan 数据估算任何来自未知或非预期元素的干扰。它将可能干扰的相对强度与分析物信号进行比较，以评估干扰是否显著。

该功能适用于原子干扰，例如双电荷元素 (M^{2+})，在这种情况下氦气碰撞模式不起作用。要形成明显的双电荷干扰，必须同时满足几个条件：初始元素必须具有高出两倍的质量、较低的第二电离能和相对较高的浓度。这在大多数样品中并不常见，因此在分析中常常被忽视。

双电荷稀土元素 (REEs) 对关键元素砷 (As) 和硒 (Se) 表现信号的影响就是一个很好的例子。许多样品中 REEs 的浓度并不高，大多数法规方法也不要求分析 REEs。

这意味着，如果样品中含有任何 REEs，鉴于它们的分析数据缺失，很容易被忽视。但是，IntelliQuant 和 QuickScan 会自动评估每个样品的完整质谱图，并突出显示任何问题。

总体数据评估

IntelliQuant 星级评定不仅仅是一个干扰查找工具，它还能评估分析的所有重要因素，例如测量精度和校准质量。它还会考虑每种分析物的定量限 (LOQ) 和背景等效浓度 (BEC)，乃至同位素水平。

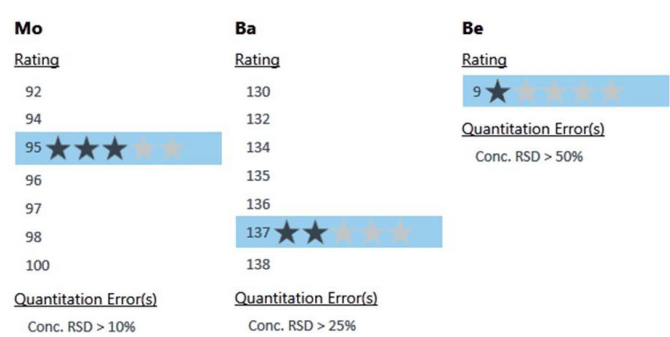


图 3. IntelliQuant 对测量精度不同程度欠佳的同位素进行星级评定的示例

例如，如果一个样品或元素没有干扰，但由于样品用完而导致测量精度较差，则其星级评定将低于精度较好的类似样品。这种简单的数据评估为分析人员省去了繁琐的工作，使他们能够专注于其他方面的工作。

测试 IntelliQuant 功能

使用多个实际样品批次对 IntelliQuant 进行测试，以验证所使用算法的稳定性和可靠性。此处详细介绍了一个干扰鉴别示例。

为了评估准确性，使用标准参比物质 (SRM) NIST 1643f（水中的痕量元素）。然后向样品中加标浓度不断增加的 REEs (0.1、1.0 和 10.0 ppm)，并对每种溶液重复测定两次。

在认证元素中，As 和 Se 都会受到双电荷钕 (Nd) 和钐 (Sm) 的干扰。表 1 显示了不同 REE 加标浓度下 As 和 Se 的分析效果和回收率。

表 1. Nd²⁺ 和 Sm²⁺ 干扰对加标 NIST 1643f SRM 的 As 和 Se 回收率的影响。浓度以 ppb 表示，回收率以标准值的百分比 (%) 表示

	75 As		78 Se	
标准值	57.42	回收率 %	11.70	回收率 %
NIST 1643f	58.93	103	11.99	102
NIST 1643f	58.11	101	11.82	101
NIST 1643f + 0.1 ppm	61.07	106	55.31	473
NIST 1643f + 0.1 ppm	61.86	108	56.15	480
NIST 1643f + 1 ppm	93.41	163	447.94	3829
NIST 1643f + 1 ppm	93.59	163	447.79	3802
NIST 1643f + 10 ppm	518.86	904	6170.19	52737
NIST 1643f + 10 ppm	548.79	956	5994.33	51234

干扰效应（特别是较低浓度的 REE 样品）对分析人员来说可能并不明显。然而，IntelliQuant 使用 QuickScan 数据成功鉴别了干扰。图 5a-d 显示了 IntelliQuant 如何鉴别对 As 的干扰。

未加标的 NIST 1643f 没有显示任何问题，IntelliQuant 对 As 和 Se 的结果均给出了五星评级。表 1 中的分析数据证实，氦气碰撞模式成功消除了所有多原子干扰。

将 REE 浓度提高至 0.1 ppm 对 As 几乎没有影响，不过 IntelliQuant 还是检测到了可能的干扰，并将结果评级降为四星。硒在所测试的每个加标浓度下都会受到干扰，显示为一星评级（图 4）。

后续加标增加了对 As（和 Se）的干扰，每个严重程度都会降低该测量的星级置信度。

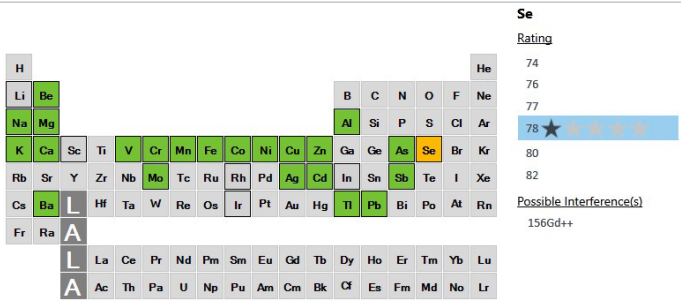


图 4. NIST1643f SRM，加标 0.1 ppm REE。硒显示一星评级，表明受到 Nd²⁺ 和 Sm²⁺ 的严重干扰

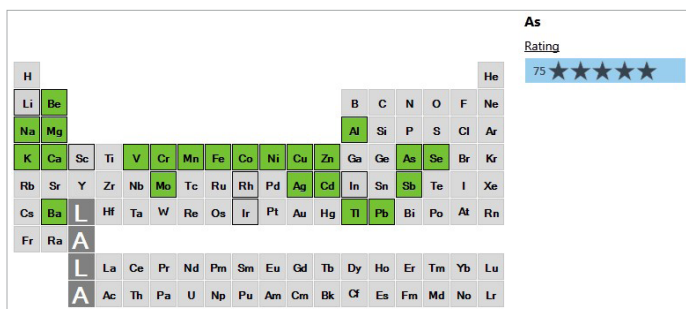


图 5a. 未加标的 NIST NIST1643f SRM。IntelliQuant 星级评定热图中的所有元素均为绿色，表明没有问题。砷显示五星评级，表明没有已知问题

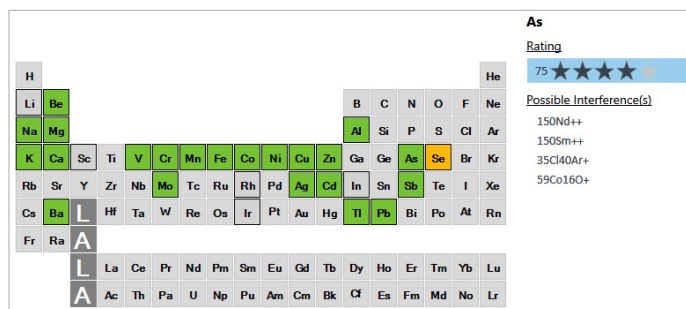


图 5b. NIST1643f SRM，加标 0.1 ppm REE。硒显示存在问题（橙色单元格），As 的星级评分降低，表明可能受到 Nd^{2+} 和 Sm^{2+} 的低水平干扰

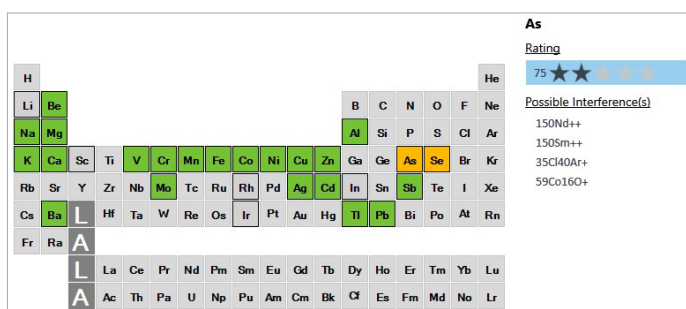


图 5c. NIST1643f SRM，加标 1 ppm REE。As 结果的置信度降至两颗星，显示为橙色，表明受到 Nd^{2+} 和 Sm^{2+} 的强烈干扰

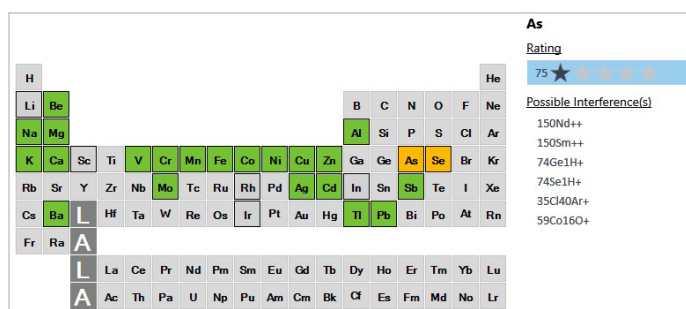


图 5d. NIST1643f SRM，加标 10 ppm REE。As 结果的置信度较低，星级评分为一颗星，表明受到 Nd^{2+} 和 Sm^{2+} 的严重干扰

表 2 显示了未加标 SRM 的结果和回收率。所有回收率均可接受，IntelliQuant 没有发现未加标样品存在任何测量问题。

表 2. NIST1643f SRM 的回收率数据。标准浓度 (Cert) 和实测浓度 (Conc) 均以 $\mu\text{g/L}$ 显示

元素	标准浓度	实测浓度	%回收率
9 Be	13.67	13.67	100
23 Na	18.83	20.21	107
24 Mg	7.454	8.169	110
27 Al	133.8	140.4	105
39 K	1.932	2.113	109
44 Ca	29.43	30.36	103
51 V	36.07	35.17	98
52 Cr	18.50	18.42	100
55 Mn	37.14	37.18	100
56 Fe	0.09	0.097	104
59 Co	25.30	25.40	100
60 Ni	59.8	60.1	101

元素	标准浓度	实测浓度	%回收率
63 Cu	21.66	21.78	101
66 Zn	74.4	76.3	103
75 As	57.42	58.93	103
78 Se	11.700	11.990	102
95 Mo	115.3	125.3	109
107 Ag	0.9703	0.977	101
111 Cd	5.89	5.88	100
121 Sb	55.45	55.35	100
137 Ba	518.2	527.1	102
205 Tl	6.892	6.812	99
208 Pb	18.488	18.569	100

IntelliQuant 干扰模拟器

ICP-MS MassHunter 5.3 及更高版本中的干扰模拟器使分析人员无需运行样品，甚至无需开启等离子体，即可测试各种基质中的模拟干扰。

IntelliQuant 模拟器使用为星级评定创建的干扰数据库，计算所选池模式和等离子体模式下的潜在干扰。

用户可以从示例基质中选择，进行任何所需的编辑，并将其保存为自定义样品基质。

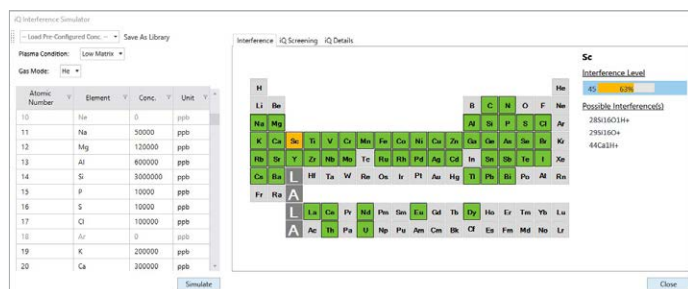


图 6. IntelliQuant 干扰模拟器使用户无需制备溶液甚至无需开启等离子体即可进行实验

数据兼容性

IntelliQuant 和星级评定与使用 ICP-MS MassHunter 采集的任何 QuickScan 数据兼容。这种兼容性意味着可以使用 IntelliQuant 对所有数据进行再处理，无论仪器类型或使用年限如何¹。

这些功能与 Agilent 7700、7800、7850 和 7900 ICP-MS 以及 Agilent 8800 和 8900 ICP-MS/MS 的数据兼容。

¹ 性能取决于使用的预设等离子体条件和氦气碰撞模式。

www.agilent.com/chem/icp-ms

DE07391022

本文中的信息、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，2024
2024 年 5 月 28 日，中国出版
5994-7441ZHCN

查找当地的安捷伦客户中心：

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

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

