

Agilent ICP Expert-Software

Leistungsfähige Software mit intelligenten Funktionen für die ICP-OES



Einleitung

Agilent 5800 ICP-OES- und Agilent 5900 ICP-OES-Geräte werden von der Agilent ICP Expert-Software gesteuert. ICP Expert besitzt eine vertraute Benutzeroberfläche im Arbeitsblattstil und bietet eine vereinfachte Methodenentwicklung und Probenanalyse. Die Software umfasst die IntelliQuant-Funktion, mit deren Hilfe Konzentrationsdaten von bis zu 70 Elementen in einer Probe erfasst werden können. ICP Expert bietet außerdem Funktionen zur Qualitätskontrolle (QK), intelligente Wartungsfunktionen und eine Sammlung bereits entwickelter Vorlagen für gängige analytische Methoden.

Benutzerfreundliche Software

Mehrere intelligente Funktionen der ICP Expert-Software verkürzen die Lernkurve für neue Anwender und erlauben erfahrenen Analytikern eine einfache Durchführung komplexer Methoden. Das Layout der Software orientiert sich an den gebräuchlichsten Arbeitsabläufen der tatsächlichen Applikationen. Um eine Analyse einzurichten und durchzuführen, arbeiten Analytiker sich einfach durch eine Reihe von Seiten in der angezeigten Reihenfolge. Dabei wird die aktuelle Seite immer hervorgehoben, damit der Fortschritt des Arbeitsablaufs deutlich sichtbar ist (Abb. 1).



Abbildung 1. Die Agilent ICP Expert-Software stellt einen klaren, logischen Arbeitsablauf bereit und führt die Anwender durch das Aufsetzen der Methode und die Analyse.

Die Software umfasst eine Reihe von bereits entwickelten Vorlagen für viele gängige analytische Methoden und Probenarten, z. B. Lebensmittel-, Umwelt- und Wasserproben. Diese Vorlagen sind ein hervorragender Ausgangspunkt für Anwender, die ungewohnte Analyseverfahren durchführen möchten. Mithilfe der Vorlagen kann die Zeit, die für die vollständige Entwicklung einer neuen Methode benötigt wird, erheblich reduziert werden.

Applet-Modus

Die ICP Expert-Software verwendet applikationsspezifische Software-Applets, die es Anwendern aller Kompetenzniveaus erlauben, ICP-OES-Analysen zuverlässig durchzuführen.

Anwender mit Administratorrechten können festlegen, welche Applikationsmethoden den jeweiligen Anwendern zur Verfügung stehen. Die Anwender können dann einfach ein Applet aus den ihnen verfügbaren ICP-Applets auswählen (Abb. 2, Schritt 1). Das Applet lädt die Methode automatisch (Abb. 2, Schritt 2). Die Anwender geben die Proben Daten ein und starten die Analyse durch Zündung des Plasmas und mit der Schaltfläche „Run“ (Ausführen) (Abb. 2, Schritt 3).

Dank dieses schrittweisen Vorgehens kann der Schulungsbedarf auf ein Minimum reduziert werden, und die Anwender erzielen genaue und reproduzierbare Ergebnisse. Mit dem integrierten Applet-Management-Tool können Applets einfach importiert und zwischen Anwendern ausgetauscht werden.

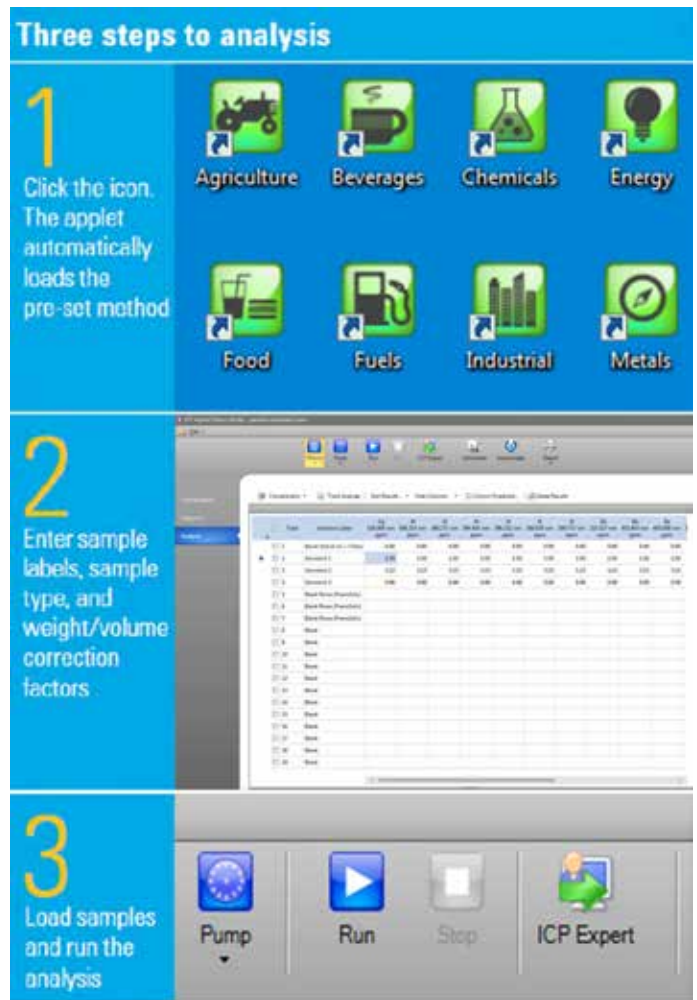


Abbildung 2. Die ICP Expert-Software bietet mehrere Applets für gängige Applikationen. Analytiker können eine Analyse in drei Schritten starten.

Vereinfachte Methodenentwicklung.

Die ICP Expert-Software bietet mehrere intelligente Tools zur Vereinfachung der Methodenentwicklung. Dank dieser Tools verbringen Analytiker weniger Zeit mit Aufsetzen der Methode und mehr Zeit mit der Analyse von Proben (1, 2).

Der AVS-Parameterrechner ist ein nützliches Tool, das empfohlene Zeitvorgaben für Methodenparameter, einschließlich Zeitintervalle und Flussraten, auf der Grundlage des vom Analytiker definierten Typs und der Länge der Leitungen liefert.

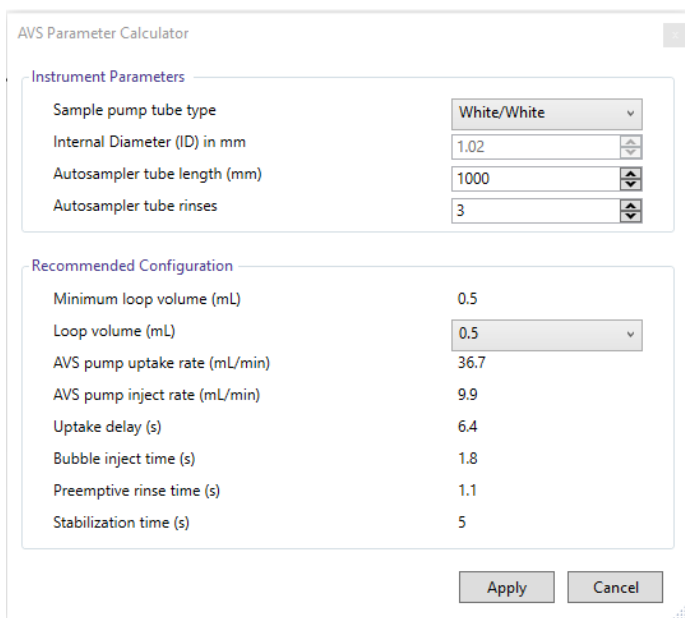


Abbildung 3. AVS-Parameterrechner in ICP Expert

Mit der Funktion „Timing Monitor“ (Zeitablaufsüberwachung) in der Software können Benutzer ihre Zeitvorgaben und Messbedingungen mit einer klaren Signalanzeige für den gesamten Prozess von Probe zu Probe optimieren.

IntelliQuant Screening (Teil des Software-Moduls Pro-pack) ermöglicht ein schnelles, semiquantitatives Screening der Proben. IntelliQuant Screening erfasst Daten aus dem gesamten Spektralbereich von 167 nm bis 785 nm in nur 15 Sekunden pro Probe (siehe Abb. 4).

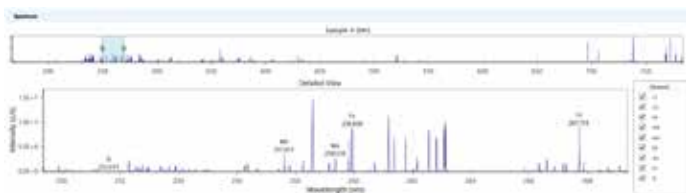


Abbildung 4. Ein vollständiger Wellenlängenscan kann in nur 15 Sekunden durchgeführt werden.

IntelliQuant Screening nutzt diese Daten, um die relativen Konzentrationen von bis zu 70 Elementen in einer Probe in einem Periodensystem anzuzeigen (siehe Abb. 5). Alle potenziellen Interferenzen werden identifiziert und auf einfache und verständliche Weise angezeigt. Auf Grundlage von möglichen Interferenzen und anderen Faktoren werden die optimalen Wellenlängen für die Analyse ermittelt. All diese Informationen werden automatisch bereitgestellt.

Vorkenntnisse der Inhaltsstoffe der gemessenen Proben oder spektroskopisches Fachwissen sind dazu nicht erforderlich.

Auf der Grundlage der Erkenntnisse des IntelliQuant Screenings kann der Bediener durch den Import der empfohlenen Wellenlängen in ein neues Arbeitsblatt mühelos eine maßgeschneiderte quantitative Methode für die Probenanalyse erstellen.



Abbildung 5. IntelliQuant erzeugt eine Heat Map zur visuellen Darstellung der relativen Konzentrationen der in einer Probe vorhandenen Elemente. Die Informationen liefern analytische Erkenntnisse über die Probe, die für die Methodenentwicklung hilfreich sind.

Datenmanagement

ICP Expert verfügt über integrierte Tools zur Optimierung Ihres Arbeitsablaufs bei der Datenanalyse. In der Zusammenfassungszeile werden automatisch die besten Ergebnisse für jede Wellenlänge aus allen verfügbaren Messungen einer Probe ausgewählt und in einer Zeile zusammengefasst. Alle Daten von Wiederholungsmessungen, wie z. B. reaktiven Verdünnungen, werden beibehalten und nach Probe angeordnet. Sie können eingeklappt werden, um nur eine einzeilige Zusammenfassung anzuzeigen.

	Rack/Tube	Solution Label	Timestamp	Au 188.980 nm ppm	Ba 455.403 nm ppm	Cd 214.429 nm ppm	Co 238.892 nm ppm	Cr 257.756 nm ppm
<input type="checkbox"/>	S11	Blank	22/11/2023 1:21:26 PM	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
<input type="checkbox"/>	G12	Standard 1	22/11/2023 1:22:00 PM	5.00	5.00	5.00	5.00	5.00
<input type="checkbox"/>	S12	Sample 1	22/11/2023 1:33:51 PM	5.01	5.01	5.01	5.01	5.01
<input checked="" type="checkbox"/>	S12	Summary	22/11/2023 1:33:51 PM	5.01	5.01	5.01	5.01	5.01
<input type="checkbox"/>	S12	Original	22/11/2023 1:32:48 PM	3.01	3.01	3.01	3.01	3.01
<input type="checkbox"/>	S12	Dilution - 10	22/11/2023 1:33:01 PM	3.42	3.60	3.58	3.43	3.51
<input type="checkbox"/>	S12	Sample 2	22/11/2023 1:35:21 PM	4.98	4.99	4.99	4.98	4.99
<input checked="" type="checkbox"/>	S12	Summary	22/11/2023 1:35:21 PM	4.98	4.99	4.99	4.98	4.99
<input type="checkbox"/>	S12	Original	22/11/2023 1:33:29 PM	4.98	4.99	4.99	4.98	4.99
<input type="checkbox"/>	S12	Dilution - 10	22/11/2023 1:35:23 PM	4.90	5.22	5.16	5.02	5.09

Abbildung 6. Zusammenfassungszeile mit einer einzeiligen Zusammenfassung der besten oder optimalen Ergebnisse und einer erweiterten Ansicht mit allen Messungen für jedes Probenfläschchen.

Ausreißerfunktion OCF (Outlier Conditional Formatting)

Die OCF-Funktion unterstützt die Anwender der ICP Expert-Software bei der Identifizierung von möglicherweise problematischen Ergebnissen. Die OCF-Funktion prüft die Ergebnisse auf dem Analysebildschirm gemäß einer oder mehreren konfigurierbaren, farbcodierten Regeln (Abb. 7). Ergebnisse werden z. B. mit einem Flag gekennzeichnet, wenn Folgendes zutrifft:

- Die Konzentration liegt über dem definierten Konzentrationsbereich.
- Die relative Standardabweichung (%RSD) ist hoch.
- Das Ergebnis liegt unter der Nachweisgrenze der Methode (MDL, Minimum Detectable Level).
- Interne Standardtests waren nicht erfolgreich.

Wenn im Arbeitsblatt mehrere Wellenlängen für ein Element angegeben sind, kann die OCF-Funktion auf Diskrepanzen zwischen den Ergebnissen bei diesen Wellenlängen hinweisen. Nicht übereinstimmende Ergebnisse für das gleiche Element können ein Hinweis auf mögliche Interferenzen oder Kalibrationsprobleme bei mindestens einer Wellenlänge sein. Mit einem Flag gekennzeichnete Ergebnisse werden auch von der Zusammenfassungszeile ausgeschlossen.

<input type="checkbox"/>	Rack: Tube	Solution Label	Outlier Summary	Sb 206.834 nm ppm	Sb 217.582 nm ppm	Sb 231.146 nm ppm
<input type="checkbox"/>	1.1	Blank		0.00	0.00	0.00
<input type="checkbox"/>	1.2	Cr				
<input type="checkbox"/>	1.3	Sb		50.00	50.00	50.00
<input checked="" type="checkbox"/>	1.8	Cr	F	0.12	0.05	0.05
<input type="checkbox"/>	1.9	Sb		4.91	4.92	4.88
<input type="checkbox"/>	1.10	Sb+Cr	F	5.65	5.14	5.11
<input type="checkbox"/>	1.11	Test3				
<input type="checkbox"/>	1.12	Test4				

Outliers for [Sb+Cr]:
Element Concentration % RSD > Pass Value: Sb

Abbildung 7. Die Ausreißerfunktion OCF (Outlier Conditional Formatting) bietet ein einfaches Verfahren zur Identifizierung von möglicherweise problematischen Ergebnissen. Die Ergebnisse, die die vorgegebenen Regeln nicht erfüllen, werden zur schnellen Erkennung mit einem farbigen Buchstaben gekennzeichnet (in diesem Bild mit einem grünen „F“). Der Buchstabe verweist dabei auf die nicht bestandene Regel.

System zur Meldung vorbeugender Wartungen

Sowohl 5800- als auch 5900-Geräte sind zur Leistungsüberwachung mit über 100 Sensoren ausgestattet. Die ICP Expert-Software bietet eine EMF-Funktion, die diese Sensoren und andere Zähler nutzt, um die Anwender auf erforderliche Wartungen aufmerksam zu machen.

Die Zähler zeigen in den Ampelfarben an, welche Wartungsmaßnahmen sofort durchgeführt werden sollten und welche warten können (Abb. 8). Die Zähler sind für die meisten allgemeinen Applikationen gut geeignet. Die Anwender können die Grenzwerte der Zähler jedoch auch an die jeweiligen spezifischen Anforderungen anpassen.

Das in das EMF-System integrierte Wartungsprotokoll zeichnet die Wartungshistorie des ICP-OES digital auf. Bei der Fehlersuche kann leicht festgestellt werden, ob das Gerät ausreichend gewartet worden ist.

Das EMF-System reduziert Ausfallzeiten und Reparaturkosten, indem es die Routinewartung der Komponenten nicht nach festgelegten Zeitintervallen plant, sondern nach der tatsächlichen Nutzung.

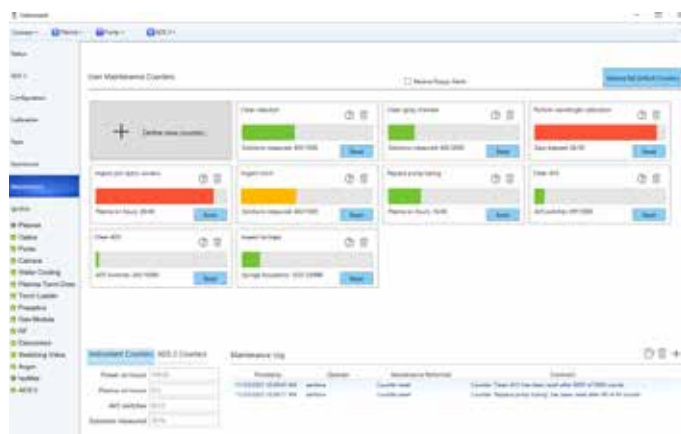


Abbildung 8. Die Funktionen des Systems zur Meldung vorbeugender Wartungen mit integriertem Wartungsprotokoll helfen, den ordnungsgemäßen Gerätezustand zu erhalten, reduzieren ungeplante Ausfallzeiten und sorgen dafür, dass Sie auch weiterhin konsistente, hochwertige Ergebnisse erzielen.

Intelligente Spülung

Die Softwarefunktion der intelligenten Spülung gehört zum optionalen Software-Modul Pro-Pack für ICP Expert. Die intelligente Spülung überwacht die Intensitäten angegebener Element-Wellenlängen während der Spülung. Sobald diese Intensitäten einen Schwellenwert erreichen, wird die Spülung automatisch beendet. Der Schwellenwert beruht auf der gewählten Spüleinrichtung: Thorough (gründlich), Moderate (mittel) oder Quick (schnell). Die Spüldauer variiert je nachdem, wie viel Zeit zum Auswaschen der einzelnen Proben bis zum Schwellenwert benötigt wird. Durch die intelligente Spülung kann der Probendurchsatz erhöht werden, ohne die Genauigkeit der Ergebnisse zu beeinträchtigen.

Zerstäuberwarnung Neb Alert

Neb Alert ist eine intelligente Funktion der ICP Expert-Software, die den Rückdruck des Zerstäubers während einer Analyse überwacht. Neb Alert warnt vor einer möglichen Verstopfung oder Undichtigkeit (Abb. 9). Dies sind häufige Probleme bei der Analyse von Proben mit hoher Salzfracht (TDS) bzw. Proben, die noch Partikel enthalten. Dank der Warnung können die Analytiker die Analyse unterbrechen und das Problem beheben, statt fortzufahren und möglicherweise falsche Daten zu erfassen.



Abbildung 9. Bei Verdacht auf eine mögliche Verstopfung am Zerstäuber oder eine Undichtigkeit unterrichtet Neb Alert die Anwender in Form einer sofortigen Benachrichtigung.

Steuerung von Zubehör

Der Agilent automatische Probengeber SPS 4 ist von der ICP Expert-Software vollständig steuerbar. Die Anwender können den Probenracktyp, die Spülpumpengeschwindigkeit und die Probensonde in der Software steuern.

Auch der Betrieb der programmierbaren, temperaturkontrollierten IsoMist-Zerstäuberkammer ist vollständig in die ICP Expert-Software integriert.

Das Agilent Advanced Valve System (AVS)-Schaltventil mit 6 oder 7 Anschlüssen und das Agilent Advanced Dilution System 2 (ADS 2) können mithilfe des optionalen Software-Moduls Pro-pack vollständig in die ICP Expert-Software integriert und über ICP Expert gesteuert werden. (Die AVS-Version mit 4 Anschlüssen wird von der Basissoftware unterstützt.) Die vollständige Integration von AVS und ADS 2 sorgt für die optimale zeitliche Koordinierung – anders als bei Schaltventilzubehör von Drittanbietern, für die eine eigenständige und komplizierte Steuerungssoftware benötigt wird. ICP Expert umfasst den AVS-Parameterrechner, der das Aufsetzen von Methoden und die Methodenentwicklung für AVS 6/7 vereinfacht. Ebenfalls enthalten ist jetzt auch die AVS/ADS-Funktion „Timing Monitor“ (Zeitablaufsüberwachung) zur Optimierung von Zeitvorgaben und Parametern.

Das Agilent Umlauf-Kühlelement ermöglicht die Überwachung und Einstellung der Wasserkühlungsparameter direkt am Geräte-PC.



Abbildung 10. Agilent Umlauf-Kühlelement.

Dank der Bildschirmmeldungen können Labore ohne Verzögerung auf Fehler reagieren und schwerwiegendere Ausfälle vermeiden.

Nahtlos integrierte Steuerung des Agilent Advanced Dilution System 2

Das Agilent Advanced Dilution System 2 (ADS 2) ist direkt in ICP Expert integriert und sorgt für eine nahtlose automatische Verdünnung.

Das ADS 2 dient zur Automatisierung manueller Aufgaben und ist mit den folgenden Funktionen für maximalen Durchsatz optimiert:

- Mehrpunkt-Kalibrierung mithilfe einer einzigen Standard-Stammlösung: Eine manuelle Herstellung von Standards entfällt, was Zeit spart und Fehler vermeidet.
- Der Autokalibrierungsassistent (Abbildung 11) kann Kalibrierungsstandards über einen festgelegten Konzentrationsbereich hinweg empfehlen, indem er auf die integrierten Listen der gängigen Stammlösungsstandards zurückgreift. Es berechnet automatisch die Verdünnungsfaktoren, die erforderlich sind, um jeden Standard genau in der geforderten Konzentration herzustellen.

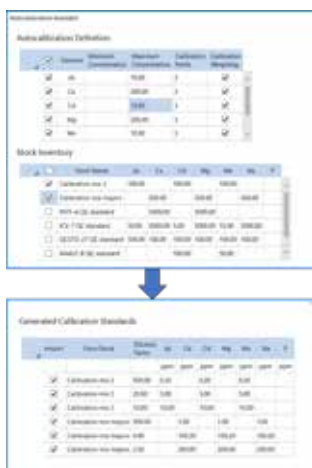


Abbildung 11. Der Autokalibrierungsassistent kann Standards aus einer vorgegebenen Stammlösung herstellen.

- Die automatische reaktive Verdünnung greift für den Fall, dass ein unerwartetes Ergebnis vorliegt, wie z. B. eine Probenmessung außerhalb des Kalibrierungsbereichs, oder wenn die Verhältnisse des Internen Standards außerhalb der festgelegten anpassbaren Schwellenwerte liegen. Die Funktion der Zusammenfassungszeile wählt dann automatisch das optimale Ergebnis für jedes Element aus den verfügbaren Messungen aus.
- Mit den Verdünnungslisten können Sie für jede Probe individuell festlegen, welche Elemente und Wellenlängen reaktive Verdünnungen auslösen können. Auf diese Weise stellen Sie sicher, dass nur dann eine Verdünnung durchgeführt wird, wenn dies wirklich erforderlich ist.
- Vorgeschriebene Verdünnung: Während des Aufsetzens der Methode kann ein festgelegter (vorgeschriebener) Verdünnungsfaktor eingegeben werden. Das ADS 2 führt die definierte Verdünnung automatisch durch; dadurch entfällt ein manueller Schritt im Arbeitsablauf, die Genauigkeit wird verbessert, Kontaminationen werden reduziert und es werden weniger Einweglaborgeräte aus Kunststoff verwendet.
- Flusswegdiagramme in Echtzeit sorgen zusammen mit detaillierten Hilfeinhalten dafür, dass Benutzer das ADS 2 besser verstehen und Fehler beheben können.

Kompatibilität mit ESI PrepFast und SampleSense

5800 und 5900 ICP-OES-Geräte können außerdem mit dem ESI prepFAST automatischen Verdünnungssystem und dem SampleSense Schaltventil gekoppelt werden. Beachten Sie, dass die ESI SC-Software für die Integration mit ICP Expert im Hintergrund ausgeführt werden muss.

AVS/ADS-Zeitablaufsüberwachung

Analytiker können mit Hilfe der Zeitablaufsüberwachung Fehlersuchen für ihre AVS- und ADS 2-Systeme durchführen. Verschiedene Probleme mit dem Probenaufgabesystem können über das Diagramm der Zeitablaufsüberwachung erkannt werden. In Kombination mit den umfangreichen Inhalten des Hilfe- und Lernzentrums hilft dies nicht nur bei der Diagnose des Problems, sondern verbessert auch das Verständnis für die nächsten Schritte, nachdem das Problem gefunden wurde.

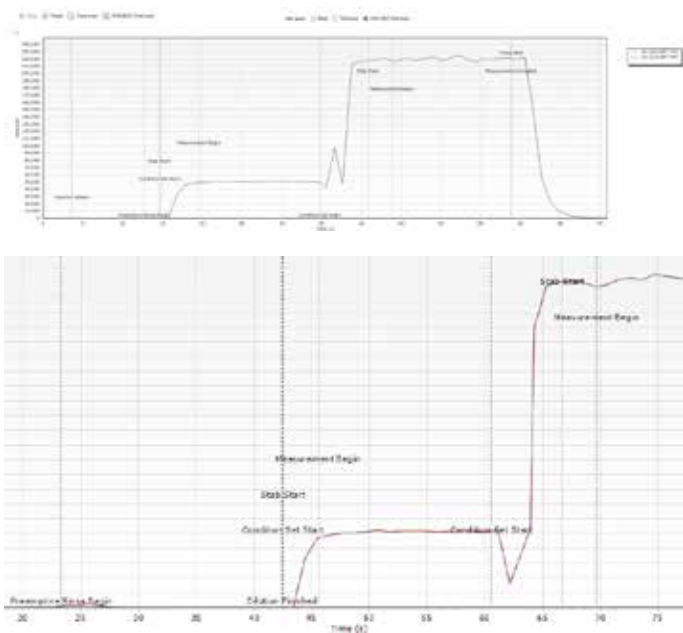


Abbildung 12. AVS/ADS-Zeitablaufsüberwachung in voller Größe (oben) und gezoomt (unten), mit Darstellung des Analytsignals während der verschiedenen Methodenschritte.

Umfangreiches Hilfe- und Lernzentrum

ICP Expert enthält ein umfangreiches Hilfe- und Lernzentrum (Abb. 13). Diese Ressource bietet eine umfassende Sammlung an Schulungsvideos zur Durchführung häufiger Hardware- und Software-Aufgaben. Darüber hinaus gibt es detaillierte Informationen zum ICP-OES, AVS 6/7 und ADS 2, damit Sie bestimmte Funktionen besser verstehen und bei der Fehlersuche Unterstützung erhalten. Die Videos vermitteln weniger erfahrenen Anwendern Selbstvertrauen und Kenntnisse, indem sie sie bei der bestmöglichen Einrichtung und Wartung der Geräte unterstützen. Funktionen wie Neb Alert sind in das Hilfe- und Lernzentrum integriert. Dies bedeutet, dass die passenden Informationen und Videos angezeigt werden, wenn ein Sensor ein Problem feststellt.

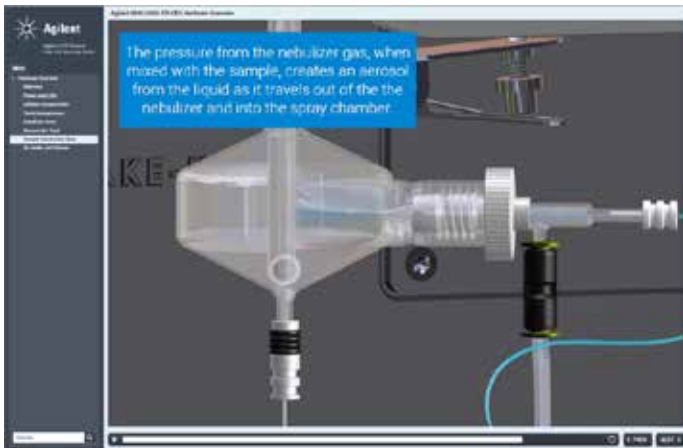


Abbildung 13. Das Hilfe- und Lernzentrum der ICP Expert-Software stellt umfassende Videoanleitungen zur Durchführung von häufigen Aufgaben zur Geräteeinrichtung und -wartung bereit.

Korrekturoptionen für jede Situation

Die ICP Expert-Software bietet mehrere Optionen zur Korrektur des Untergrunds oder von spektralen Interferenzen:

- Die automatische Untergrundkorrektur FBC (Fitted Background Correction) verwendet einen ausgefeilten Algorithmus, um das Untergrundsignal unter dem Analytpeak zu modellieren. FBC wird zeitgleich mit der Messung des Analytpeaks durchgeführt (3). Sie liefert eine schnelle und genaue Untergrundkorrektur. Für die FBC wird keine Methodenentwicklung benötigt. Sie liefert automatische und genaue Korrekturen von sowohl einfachen als auch komplexen Untergrundstrukturen.
- Die Off-Peak-Korrektur ist ein herkömmliches ICP-OES-Korrekturverfahren, bei dem die Analytiker die Korrekturpunkte selbst wählen können – links, rechts oder auf beiden Seiten des Analysepeaks.
- Spektrenentfaltung FACT (FAST Automated Curvefitting Technique). Das proprietäre Agilent FACT-Verfahren modelliert Spektren, um komplexe Analysespektren genau zu analysieren (4). FACT ist eine leistungsfähige Alternative zur Interelementkorrektur (IEC, Inter-Element Correction) und kann auch für eine genaue Untergrundkorrektur eingesetzt werden. Es eignet sich insbesondere für sehr komplexe Untergrundstrukturen und wenn sich andere Untergrundkorrekturen wie FBC oder Off-Peak-Korrektur nicht eignen.

FACT bietet eine Korrektur von Spektren in Echtzeit, indem eine hoch entwickelte Spektrenmodellierungstechnik zur mathematischen Dekonvolution (d. h. Entfaltung) des Analytsignals aus dem Rohspektrum verwendet wird.

Durch eine getrennte Messung der erwarteten Komponenten werden Modelle aufgebaut. Im Rahmen dieser Methode werden gewöhnlich eine Blindprobe, eine reine Analytlösung und reine Interferenzlösungen gemessen. In Abb. 14 ist ein FACT-Modell für die Cadmium(Cd)-Emissionslinie bei 228,802 nm dargestellt, bei der Interferenzen durch Arsen (As) beobachtet werden. FACT trennt die beiden Peaks auf mathematische Weise und ermöglicht so eine genaue Messung des Analytsignals. Für sich überlappende Interferenzen, die mit FBC bzw. FACT nicht aufgelöst werden können, gibt es die Interelementkorrektur (IEC).

Die Untergrundkorrektur für jeden Analyten kann nach der Analyse in der Spektrumanzeige angewendet werden.

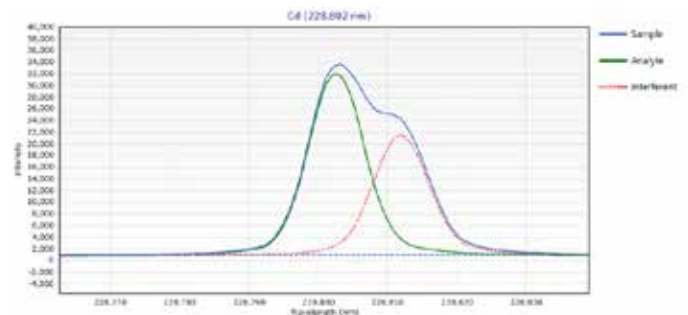


Abbildung 14. Beispiel eines FACT-Modells für eine Cd-Linie bei 228,802 nm, die von As gestört wird. Eine Lösung mit ~1000 µg/l Cd in 20 mg/l As wurde mit einem Agilent 5900 ICP-OES-System analysiert.

Erweiterter dynamischer Bereich

Mithilfe des breiten Wellenlängenbereichs des Vista Chip III CCD-Detektors kann die MultiCal Function der ICP Expert-Software mehrere Kalibrierungsbereiche für die Probenanalyse erstellen. Auf diese Weise kann der lineare dynamische Bereich erweitert werden.

Viele Elemente können bei mehreren Wellenlängen gemessen werden. Diese unterschiedlichen Wellenlängen sind oft unterschiedlich empfindlich. Durch Kombination mehrerer Wellenlängen für das gleiche Element kann der dynamische Bestimmungsbereich erweitert werden. Die Wahl der empfindlichsten Linie sorgt für die besten Nachweisgrenzen und genaue Messungen von niedrig konzentrierten Analyten. Die Wahl von weniger empfindlichen Linien erlaubt die gleichzeitige Messung höher konzentrierter Analyten.

Für die MultiCal-Funktion werden nur wenige Standards benötigt, um den Kalibrierungsbereich für jede Wellenlänge zu definieren. In Abb. 15 sind zwei Kalibrierungsdiagramme für Zink (Zn) dargestellt. Bei der ersten Kalibrierung wurde eine empfindliche Linie für Zn verwendet: Der Konzentrationsbereich liegt zwischen 0 und 5 ppm. Eine weniger empfindliche Linie erweiterte den Kalibrierungsbereich auf 55 ppm.

Abhängig von den Konzentration-Messwerten bei beiden Wellenlängen berichtet MultiCal das passende Ergebnis auf Grundlage der festgelegten Kalibrierungsbereiche für die jeweilige Wellenlänge. Auf diese Weise kann der dynamische Analysebereich von Milliardstel (ppb) in den Prozentbereich erweitert werden. Die Konzentrationsbereiche können überlappend angeordnet werden, was eine einfache Verifizierung der Probenergebnisse ermöglicht.

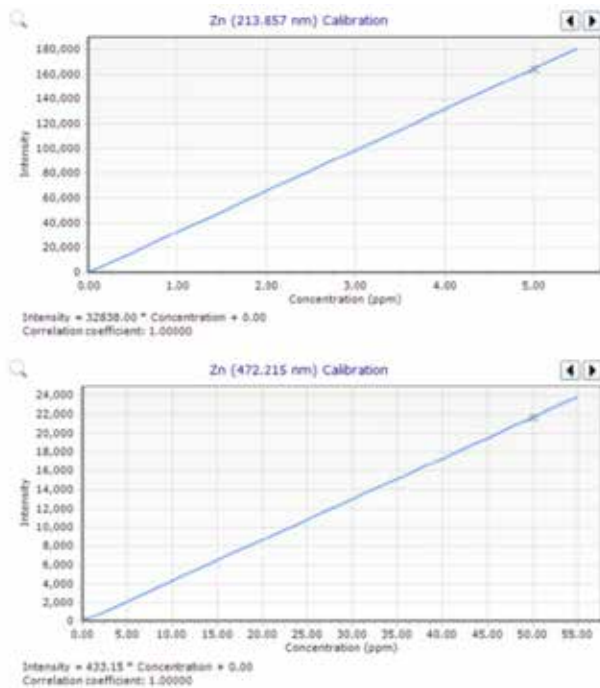


Abbildung 15. In diesem Beispiel verwendet die MultiCal-Funktion die Zn-Emissionslinie bei 213,857 nm für Messungen im Bereich 0 bis 5 ppm und die Linie bei 472,215 nm für höhere Konzentrationen bis 55 ppm.

Berichtsoptionen

Die ICP Expert-Software umfasst die OpenLab Intelligent Reporting-Plattform. Diese Plattform ermöglicht die Konfiguration von Berichten, die nur die gewünschten Daten enthalten, und eine Anpassung des Berichtlayouts einschließlich eines Firmenlogos. Nach der Einrichtung können das Berichtlayout und -design als Vorlage zur zukünftigen Verwendung gespeichert werden (siehe Abb. 16).

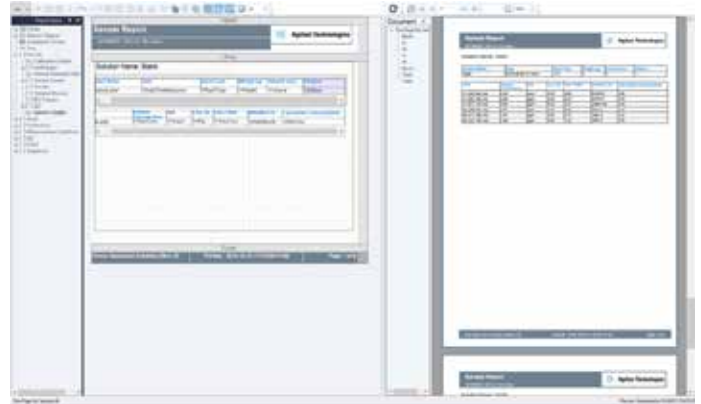


Abbildung 16. Die OpenLab Intelligent Reporting-Plattform kann individuell angepasste Berichte erstellen.

Erweiterte QK-Unterstützung für Methoden nach USP <232>/<233> und ICH-Q3D

Die ICP Expert-Software unterstützt Konformität mit den Anforderungen von USP und ICH an die Messung von Elementverunreinigungen in Arzneimitteln und Arzneimittelbestandteilen. Zu den Software-Funktionen gehören:

- Rechner für J-Spitzenwerte
- Kennzeichnung bestanden/nicht bestanden gemäß Abnahmekriterien in Validierungstests und bei Analysen von Produkten und Produktzusammensetzungen
- Kompatibilität mit dem Erweiterungspaket Agilent 21 CFR 11
- Unterstützung beim Aufsetzen, Durchführen und Validieren von Methoden in Einklang mit USP <232>/<233> und ICH Q3D
- Methodenvorlagen zur Beschleunigung der Methodenentwicklung

Datenübertragung und -export

Die Ergebnisse können mühelos an ein Laborinformatik-Managementssystem (LIMS) oder eine andere Anwendung übertragen werden. Dazu dient die Datenexport-Option der ICP Expert-Software.

Die Daten können im CSV-Format exportiert werden und ohne Umwege in ein Tabellenkalkulationsprogramm oder ein anderes Programm für die Datenbearbeitung, Trendanalyse oder Prozessüberwachung importiert werden. Die ICP Expert-Software erlaubt Multitasking: Erfasste Daten können geprüft, bearbeitet und berichtet werden, während das ICP-OES-System die Daten des aktuellen Proben-Batches erfasst.

Basis- und Pro-pack-Versionen der ICP Expert-Software

Die ICP Expert-Software ist in zwei Versionen erhältlich: Basis- und Pro-pack. Das Basispaket der ICP Expert-Software dient zur einfachen Einrichtung und zum Routinebetrieb des ICP-OES-Geräts. Das Pro-pack-Paket der Software bietet weitere Funktionen zur Erhöhung der Geräteproduktivität und -leistung insbesondere:

- Zahlenbasierte QK: analysiert QK-Lösungen nach einer definierten Anzahl von Proben automatisch
- IntelliQuant Screening einschließlich Snapshot-Modus für schnelle Erkenntnisse über die Proben
- Export zu Microsoft Excel (Excel nicht inbegriffen)
- Unterstützung für automatische Probengeber von Drittanbietern wie Cetac Oil 7400, 7600, ASX520, 560, 1400 und 1600 und EXR8, ESI SC-2, 4, 8, 14 und Micro und AIM 1250 und 3600
- Trendüberwachung des Argon-Rückdrucks zum Zerstäuber und der Argon-Emission pro Lösung
- Sauerstoffzugabe und Stickstoffspülung
- Integrierte Steuerung des Advanced Valve System Schaltventil-Zubehörs (AVS 6 oder 7)
- Integrierte Steuerung des Advanced Dilution System 2 (ADS 2)
- Steuerung des ESI prepFAST automatischen Verdünnungssystems und des SampleSense Schaltventils
- Intelligente Spülung
- Möglichkeit der spezifischen Anpassung der Replikanzahl je nach Lösungstyp

Fernsteuerung mit dem Automatisierungssoftware-Paket

Das Automatisierungssoftware-Paket ist eine Sammlung von Programmierwerkzeugen (SDK, Software Development Kit), die die Steuerung des ICP-OES-Geräts durch Drittanbieter-Software ermöglichen – durch Senden von Befehlen und Empfangen von Gerätestatus-Daten in Echtzeit über das Internet. Es handelt sich um eine echte Fernsteuerung und bietet ultimative Flexibilität.

ICP Expert-Software für Konformität mit 21 CFR Part 11

Es ist ein optionales Erweiterungspaket für 21 CFR 11 erhältlich, das die Einhaltung der Anforderungen der US-amerikanischen Behörde FDA gemäß 21 CFR Part 11 (und äquivalenten Bestimmungen in anderen Ländern) unterstützt. Das Paket unterstützt die Zuweisung von Benutzer-Zugriffsrechten, Erstellung von Audit Trails, elektronische Aufzeichnungen und elektronische Unterschriften. Auch die Konfigurationen und Aktionen des automatischen Verdünnungssystems werden mit diesen Funktionen erfasst. Das Erweiterungspaket ist mit der Pro-pack-Version der ICP Expert-Software kompatibel.

Einfache Fehlersuche

Der Gerätestatus liefert eine unmittelbare Übersicht des Systemstatus (siehe Abb. 17). Die kontinuierliche und automatische Untergrundüberwachung ermöglicht eine schnelle Prüfung des Gerätestatus und Fehlersuche im Falle von Problemen.

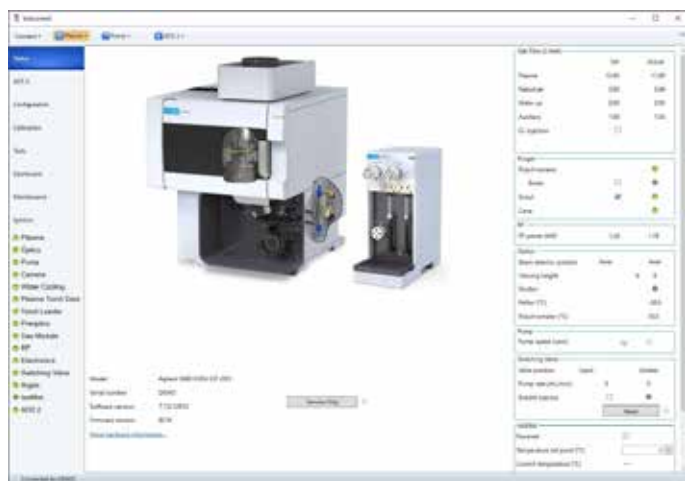


Abbildung 17. Auf der interaktiven Gerätestatus-Seite können der aktuelle Gerätestatus geprüft und die Ursachen von Problemen identifiziert werden.

Das interaktive Gerätediagramm liefert eine Übersicht über den Gerätestatus, einschließlich von integriertem AVS 6/7 oder ADS 2, und schlägt bei Fehlern mögliche Ursachen vor. Das Dashboard des Geräts dient zur weiterführenden Orientierung und liefert Live-Daten zu verschiedenen Parametern. So können Probleme leicht gefunden und korrigiert werden. Bei Systemänderungen wird der Status automatisch aktualisiert.

Prüfung der Geräteleistung

Zur regelmäßigen Prüfung der Geräteleistung steht eine Reihe von Tests zur Verfügung. Die Verifizierung der Geräteleistung erfolgt automatisch. Eine schlechte Einrichtung der Funktionen und Geräte, insbesondere hinsichtlich Wasser-, Gas-, Abgas- und Probenaufgabesystemen, ist oft eine Ursache für Leistungsprobleme oder Geräteausfall. Die Tests prüfen die grundlegende Gerätefunktion und bestätigen, dass das System spezifikationsgemäß arbeitet: Dies kann ein wichtiges Instrument für die Fehlersuche sein. Tests zur Bestätigung der Installation und Funktion von AVS 6/7 und ADS 2 sind ebenfalls verfügbar.

Nach Abschluss des Testzyklus kann ein Bericht im PDF-Format an einen beliebigen Ort im lokalen Netzwerk exportiert werden.

Referenzen

1. IntelliQuant Software von Agilent: Mehr Erkenntnisse über Proben und einfachere Methodenentwicklung, Agilent Publikation, [5994-1516DEE](#)
2. Agilent IntelliQuant-Screening: Intelligenter und schnellere semiquantitative Analytik in der ICP-OES, Agilent Publikation, [5994-1518DEE](#)
3. Automatische Untergrundkorrektur („Fitted Background Correction“, FBC) – schnelle, genaue und vollständig automatisierte Untergrundkorrektur, Agilent Publikation, [5991-4836DEE](#)
4. Korrektur von Spektren komplexer Proben in Echtzeit mit der Spektrenentfaltungsssoftware FACT, Agilent Publikation, [5991-4837DEE](#)

www.agilent.com/chem/icp-oes

DE.8138078704

Änderungen vorbehalten.

© Agilent Technologies, Inc. 2024
Gedruckt in den USA, 1. Mai 2024
5994-1517DEE