

Software Agilent ICP Expert

Un software potente con herramientas inteligentes para ICP-OES



Introducción

Los sistemas de ICP-OES 5800 de Agilent y 5900 de Agilent están controlados por el software Agilent ICP Expert. ICP Expert utiliza una conocida interfaz de hoja de cálculo y facilita el desarrollo de métodos y el análisis de las muestras. Incluye la función IntelliQuant, que permite al analista reunir los datos de concentración de hasta 70 elementos de una muestra. ICP Expert también incluye funciones de control de calidad, características de mantenimiento inteligente y un conjunto de plantillas predesarrolladas para los métodos analíticos más frecuentes.

Un software sencillo de usar

El software ICP Expert incluye funciones inteligentes que reducen la curva de aprendizaje para los usuarios noveles, al tiempo que permiten que los analistas más experimentados ejecuten con facilidad los métodos más complejos. El diseño del software refleja los flujos de trabajo más frecuentes de las aplicaciones reales. Para configurar y llevar a cabo un análisis, el analista solo tiene que seguir la secuencia de páginas en el orden mostrado. La página actual siempre aparece resaltada para ofrecer una completa visibilidad del progreso en el flujo de trabajo (figura 1).



Figura 1. El software Agilent ICP Expert proporciona un flujo de trabajo claro y lógico para guiar a los usuarios durante la configuración del método y el análisis.

El software incluye un conjunto de plantillas predesarrolladas que abarcan un abanico de métodos analíticos y tipos de muestra frecuentes, como análisis de muestras alimentarias, medioambientales y de agua. Estas plantillas son un excelente punto de partida para cualquier usuario que desee realizar un análisis con el que no esté familiarizado. Las plantillas pueden reducir notablemente el tiempo necesario para desarrollar nuevos métodos.

Modo applet

El software ICP Expert utiliza applets de software específicos para cada aplicación que permiten a los usuarios con todos los niveles de destrezas ejecutar con confianza los análisis ICP-OES.

El administrador puede elegir qué métodos de aplicaciones están disponibles para cada usuario. A continuación, el usuario puede seleccionar entre los applets para ICP que tiene disponibles (figura 2, paso 1). El applet cargará automáticamente el método (figura 2, paso 2).

A continuación, el usuario puede introducir la información de la muestra y comenzar el análisis encendiendo el plasma y haciendo clic en el botón Run (figura 2, paso 3).

Gracias a este abordaje paso a paso, todos los usuarios pueden conseguir resultados precisos y reproducibles con una necesidad de formación mínima. Los applets se pueden importar e intercambiar con otros usuarios fácilmente mediante el uso de la herramienta integrada Applet Management.

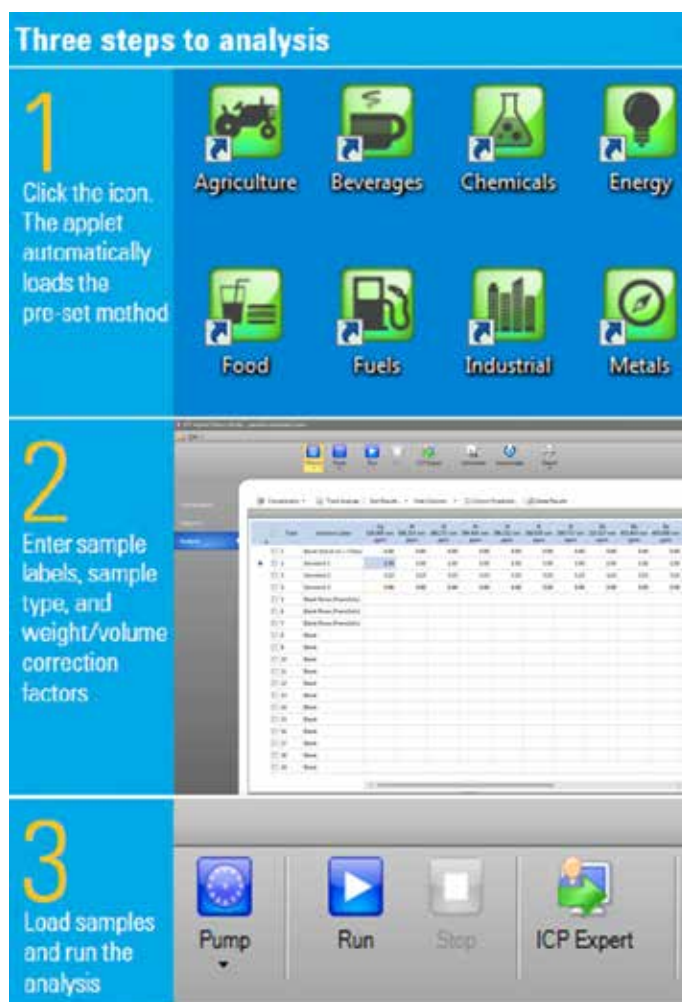


Figura 2. El software ICP Expert incluye diversos applets para las aplicaciones más frecuentes. El analista puede comenzar un análisis en tan solo tres pasos.

Desarrollo de métodos más sencillo

El software ICP Expert contiene diversas herramientas inteligentes que permiten simplificar el desarrollo de métodos. Con estas herramientas, el analista tendrá que dedicar menos tiempo a la configuración de métodos y podrá dedicar más tiempo al análisis de muestras (1, 2).

La calculadora de parámetros de AVS es una útil herramienta que proporciona los tiempos recomendados para los parámetros del método, incluidos tiempos y flujos, a partir del tipo y la longitud de los tubos definidos por el analista.

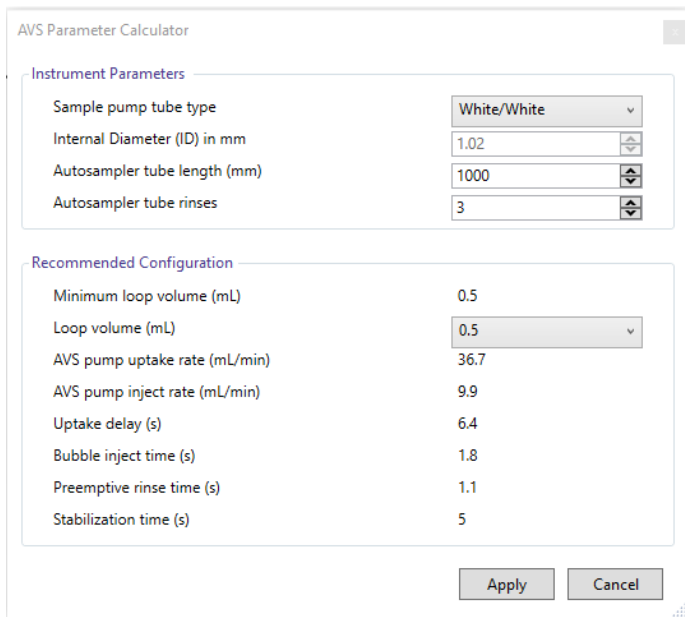


Figura 3. Calculadora de parámetros de AVS del software ICP Expert.

La función Monitor de tiempo del software permite a los usuarios optimizar los tiempos y las condiciones de medida mediante una lectura clara de señales asociadas al procesamiento de cada muestra.

IntelliQuant Screening (disponible en el módulo de software Pro-pack) permite a los usuarios realizar un cribado de muestras semicuantitativo rápido. IntelliQuant Screening recopila datos de todo el rango espectral de 167 a 785 nm en tan solo 15 segundos por muestra, como se indica en la figura 4.

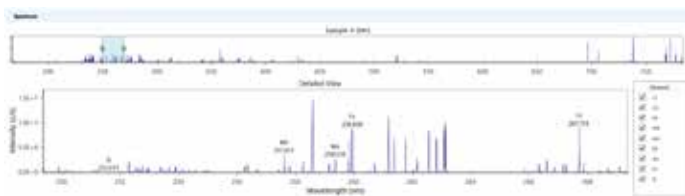


Figura 4. Se puede recopilar un barrido completo de longitudes de onda en tan solo 15 segundos.

Con estos datos, IntelliQuant Screening muestra las concentraciones relativas de hasta 70 elementos de una muestra en una presentación de tabla periódica (consulte la figura 5). Las posibles interferencias se identifican y presentan al usuario de modo sencillo y claro. Las longitudes de onda óptimas para el análisis se determinan sobre la base de las potenciales interferencias y de otros factores.

Toda esta información se proporciona automáticamente, sin que se requiera conocer con anterioridad el contenido de las muestras que se están midiendo ni tener experiencia en espectroscopia.

Con la información que proporciona IntelliQuant Screening, el operador puede crear fácilmente un método cuantitativo personalizado para el análisis de muestras mediante la importación de las longitudes de onda recomendadas en una hoja de cálculo nueva.



Figura 5. IntelliQuant genera un mapa de calor para presentar visualmente las concentraciones relativas de los elementos existentes en una muestra. La información proporciona útiles conocimientos analíticos sobre la muestra, lo que ayuda para el desarrollo de métodos.

Gestión de datos

ICP Expert incorpora herramientas que permiten agilizar el flujo de trabajo de análisis de datos. La fila de resumen selecciona automáticamente los mejores resultados para cada longitud de onda de entre todas las medidas disponibles de una muestra y los recopila en una fila. Todos los datos asociados a la repetición de medidas, como las diluciones reactivas, se conservan y organizan por muestra y se pueden contraer para mostrar únicamente un resumen de una línea.

	Rack/Tube	Solution Label	Timestamp	Air 188.980 nm ppm	Ba 455.403 nm ppm	Cd 214.429 nm ppm	Co 238.892 nm ppm	Cr 257.716 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"/>	S12	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	5.00	5.00
<input checked="" type="checkbox"/>	S12	Summary	22/11/2023 1:33:51 PM	5.01	5.01	5.01	5.00	5.00
<input type="checkbox"/>	S12	Original	22/11/2023 1:32:48 PM	3.01	3.01	3.01	3.00	3.00
<input type="checkbox"/>	S12	Dilution - 10	22/11/2023 1:33:51 PM	3.42	3.60	3.58	3.43	3.51
<input type="checkbox"/>	S12	Sample 2	22/11/2023 1:35:23 PM	4.98	4.99	4.99	4.98	4.99
<input checked="" type="checkbox"/>	S12	Summary	22/11/2023 1:35:23 PM	4.98	4.99	4.99	4.98	4.99
<input type="checkbox"/>	S12	Original	22/11/2023 1:33:28 PM	4.88	4.88	4.89	4.88	4.88
<input type="checkbox"/>	S12	Dilution - 10	22/11/2023 1:35:23 PM	4.95	5.22	5.16	5.02	5.09

Figura 6. Fila de resumen, que permite ver en una línea un resumen de los resultados mejores u óptimos; y vista ampliada, en la que aparecen todas las medidas para cada vial de muestra.



Figura 9. Neb Alert envía una notificación instantánea al usuario si se detecta una potencial obstrucción o bloqueo del nebulizador.

Control de accesorios

El muestreador automático Agilent SPS 4 se controla por completo a través del software ICP Expert. El usuario puede seleccionar el tipo de gradilla de muestras y la velocidad de la bomba de lavado, además de controlar la sonda de muestras desde el software.

El funcionamiento de la cámara de nebulización con temperatura controlada programable IsoMist también se encuentra totalmente integrado en el software ICP Expert.

El control de la válvula de conmutación de 6 o 7 puertos del sistema avanzado de válvula (AVS) de Agilent y el sistema de dilución avanzado 2 (ADS 2) de Agilent está totalmente integrado y se realiza a través del software ICP Expert mediante el módulo de software opcional Pro-pack. (La versión de 4 puertos del sistema avanzado de válvula es compatible con el software básico). La completa integración de los sistemas AVS y ADS 2 garantiza una sincronización óptima, a diferencia de los accesorios de válvula de conmutación de otros fabricantes, que utilizan un complicado software de control independiente. ICP Expert incorpora la calculadora de parámetros de AVS, que facilita la configuración y el desarrollo de métodos del sistema AVS 6/7. Además, ahora también incluye la función Monitor de tiempo AVS/ADS para optimizar los tiempos y parámetros.

El enfriador recirculante de Agilent permite a los analistas monitorizar y configurar parámetros de refrigeración de agua directamente desde el PC del instrumento.



Figura 10. Enfriador recirculante de Agilent.

Las notificaciones en pantalla permiten que los laboratorios respondan inmediatamente a los fallos y eviten averías más graves.

Control perfecto del sistema de dilución avanzado 2 de Agilent

El sistema de dilución avanzado 2 (ADS 2) de Agilent está integrado en ICP Expert de manera nativa para conseguir una experiencia perfecta de dilución automática.

El sistema ADS 2 automatiza las tareas manuales y está optimizado para maximizar la productividad mediante las siguientes funciones:

- Calibración multipunto a partir de una sola solución madre; no es necesario preparar manualmente patrones, lo que ahorra tiempo y evita errores.
- Asistente de calibración automática (Fig. 11), que puede recomendar patrones de calibración dentro de un intervalo definido de concentraciones usando las listas integradas de soluciones madre de uso habitual. Calcula automáticamente los factores de dilución necesarios para crear con exactitud cada patrón con la concentración requerida.



Figura 11. El Asistente de calibración automática puede preparar patrones a partir de una solución madre especificada.

- Dilución reactiva automática si se produce un resultado inesperado, como una medida de una muestra que esté fuera del intervalo de calibración, o si las relaciones de patrones internos están fuera de los umbrales personalizables definidos. A continuación, la función de fila de resumen elige automáticamente el resultado óptimo para cada elemento de entre las medidas disponibles.
- Listas de dilución, que permiten personalizar para cada muestra qué elementos y longitudes de onda pueden activar las diluciones reactivas, asegurando que solo se realice la dilución cuando sea necesario.

- Dilución prescriptiva; durante la configuración de métodos, los analistas pueden introducir un factor de dilución definido (prescriptivo), y el sistema ADS 2 aplicará automáticamente la dilución definida, eliminando un paso manual del flujo de trabajo, mejorando la exactitud y reduciendo la contaminación y el consumo de material de laboratorio de plástico de un solo uso.
- Diagramas de ruta de flujo en tiempo real, combinados con contenido de ayuda detallado, para ayudar a los usuarios a conocer y solucionar los problemas de sus sistemas ADS 2.

Compatibilidad con las soluciones ESI prepFAST y SampleSense

Los sistemas de ICP-OES 5800 y 5900 también se pueden acoplar al sistema de dilución automática ESI prepFAST y a la válvula de conmutación SampleSense. Tenga en cuenta que el software ESI SC debe ejecutarse en segundo plano para la integración con ICP Expert.

Monitor de tiempo AVS/ADS

Los analistas pueden solucionar problemas de sus sistemas AVS y ADS 2 utilizando el Monitor de tiempo. El gráfico del Monitor de tiempo permite detectar diversos problemas asociados al sistema de introducción de muestras. Esto, en combinación con el completo Centro de ayuda y aprendizaje, ayuda tanto a diagnosticar el problema como a comprender los siguientes pasos una vez que se ha encontrado el problema.

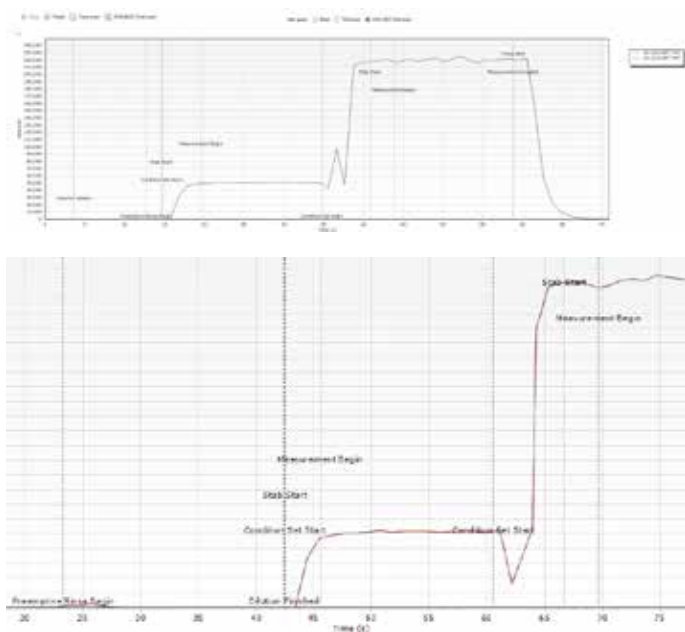


Figura 12. Monitor de tiempo AVS/ADS completo (arriba) y ampliado (abajo), que muestra la señal del analito durante cada paso del método.

Completo centro de ayuda y aprendizaje

ICP Expert contiene un Centro de ayuda y aprendizaje (figura 13) completo e interactivo. Este recurso incluye un amplio conjunto de vídeos de instrucciones sobre cómo llevar a cabo tareas frecuentes relacionadas con el hardware y con el software, junto con contenido detallado sobre los instrumentos de ICP-OES y los sistemas AVS 6/7 y ADS 2 que permite conocer mejor diversas funciones y facilita la resolución de problemas. Los vídeos mejoran la confianza y el conocimiento de los operadores con menos experiencia, ayudándoles a configurar y mantener sus instrumentos del mejor modo. Funciones tales como Neb Alert están integradas con el Centro de ayuda y aprendizaje. Esto significa que se mostrarán la información y los vídeos correspondientes cuando un sensor detecte un problema.

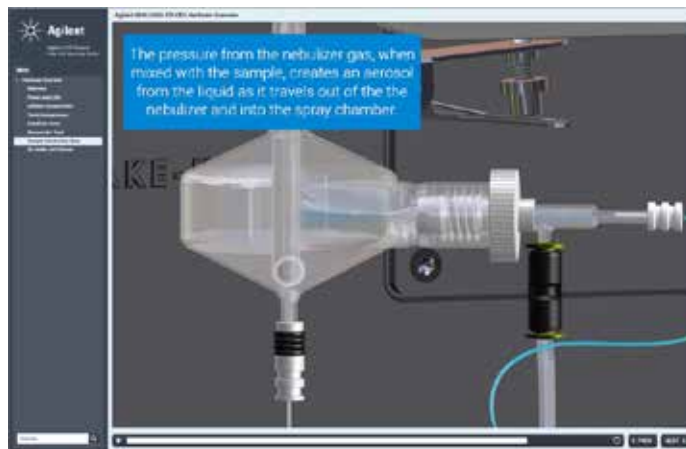


Figura 13. El centro de ayuda y aprendizaje de ICP Expert proporciona instrucciones completas en vídeo sobre cómo llevar a cabo tareas habituales de configuración y mantenimiento de los instrumentos.

Opciones de corrección para adaptarse a cualquier situación

El software ICP Expert ofrece diversas opciones para corregir el fondo o las interferencias espectrales:

- La corrección de fondos ajustada (FBC) utiliza un algoritmo avanzado para modelar la señal de fondo debajo del pico del analito. La corrección de fondos ajustada se aplica simultáneamente tras la medida del pico del analito (3), lo que proporciona una corrección del ruido de fondo rápida, sencilla y precisa. Sin necesidad de desarrollo de métodos, la corrección de fondos ajustada proporciona una corrección precisa y automática de las estructuras de ruido de fondo tanto simples como complejas.
- La corrección fuera del pico es una técnica tradicional de corrección empleada en ICP-OES que permite al analista seleccionar manualmente los puntos de corrección (de la izquierda, de la derecha o de ambos lados del pico analítico).

- Corrección con la técnica de deconvolución automática de curvas (FACT). La técnica FACT, patentada por Agilent, aplica el modelado espectral para analizar con precisión espectros analíticos complejos (4). La FACT es una potente alternativa respecto de la corrección interelemental (IEC), y también se puede usar para la corrección precisa del ruido. Resulta útil cuando se observan estructuras de ruido de fondo extremadamente complejas y no son adecuadas otras técnicas de corrección del ruido como corrección de fondos ajustada o la corrección fuera de pico.

La FACT proporciona una corrección espectral en tiempo real mediante el uso de una técnica de modelado espectral para realizar una deconvolución matemática (una separación) de la señal del analito en el espectro sin procesar.

Se crean modelos midiendo los componentes esperados de manera independiente. El método normalmente incluye la medida de una solución en blanco, una de analito puro y soluciones interferentes puras. En la figura 14 se muestra un modelo FACT aplicado a la línea de emisión del Cd a 228,802 nm, que sufre interferencia del As. La FACT separa matemáticamente los dos picos, con lo que permite la medida exacta de la señal del analito. Para aquellas interferencias superpuestas que no se puedan resolver mediante corrección de fondos ajustada o FACT, está disponible la corrección interelemental (IEC).

Se puede aplicar la corrección del ruido para cada analito después del análisis mediante la presentación del espectro.

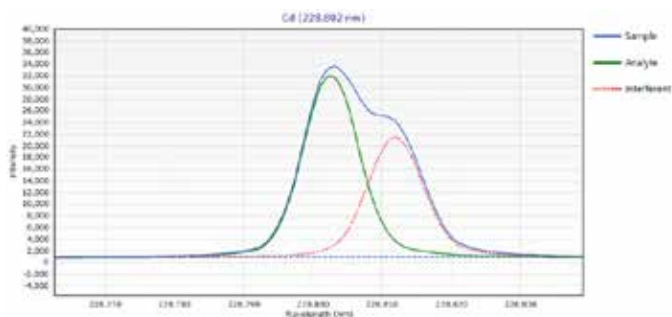


Figura 14. Ejemplo de la aplicación de un modelo de FACT al pico de Cd a 228,802 nm con interferencia de As. Se analizó una disolución que contenía ~1000 µg/l de Cd en 20 mg/l de As en un sistema de ICP-OES 5900 de Agilent.

Intervalo dinámico extendido

Utilizando el amplio rango de longitud de onda del detector de dispositivo de carga acoplada Vista Chip III, la función MultiCal del software ICP Expert puede crear varios intervalos de calibración para el análisis de muestras. Esta capacidad aumenta el rango dinámico lineal.

Se pueden medir numerosos elementos utilizando más de una longitud de onda. Las diferentes longitudes de onda con frecuencia presentan sensibilidades diferentes, por lo que el uso de una combinación de longitudes de onda para el mismo elemento amplía el intervalo dinámico de la determinación. La selección de la línea más sensible proporcionará los mejores límites de detección y una medida exacta de los analitos de bajo nivel. Las líneas menos sensibles permiten la medida de los analitos con mayor concentración en la misma medida.

La función MultiCal solo requiere algunos patrones para definir el rango de calibración para cada longitud de onda. En la figura 15 se muestran dos gráficos de calibración para el Zn. La primera calibración empleó una línea sensible para el Zn, con un rango de concentración de 0 a 5 ppm. Una línea menos sensible amplió el rango de calibración hasta 55 ppm.

Basándose en las concentraciones medidas para cada longitud de onda, MultiCal informa de un resultado adecuado basándose en los rangos de calibración definidos para estas longitudes de onda. Esto amplía el intervalo dinámico del análisis desde partes por billón hasta niveles de porcentaje. Los rangos de concentración se pueden superponer, lo que ofrece un modo sencillo de verificar los resultados de la muestra.

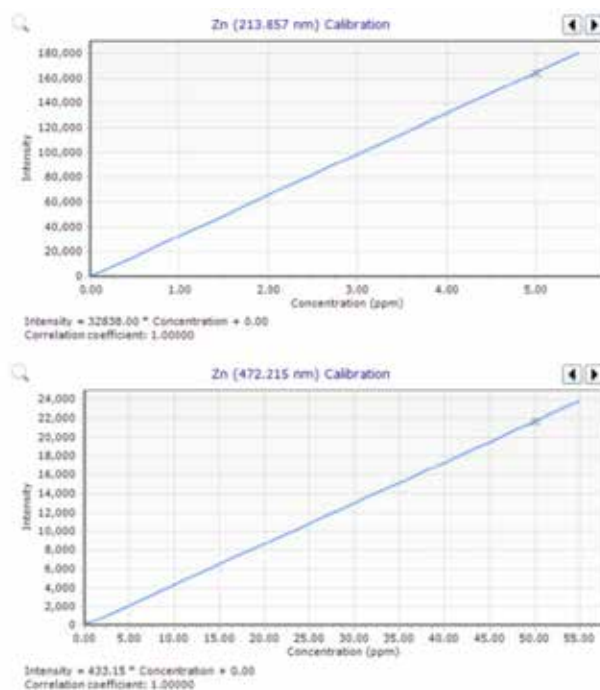


Figura 15. En este ejemplo, MultiCal utiliza la línea de emisión de Zn de 213,857 nm para medir concentraciones en el intervalo de 0 a 5 ppm, y la línea de 472,215 nm para concentraciones superiores, de hasta 55 ppm.

Opciones de elaboración de informes

El software ICP Expert incluye la plataforma de informes inteligentes OpenLab. Esta plataforma permite al analista configurar informes que solo incluyan los datos requeridos y personalizar el diseño del informe, como incluir un logotipo de empresa. Una vez configurado, el diseño del informe se puede guardar como plantilla para su uso futuro; consulte la figura 16.

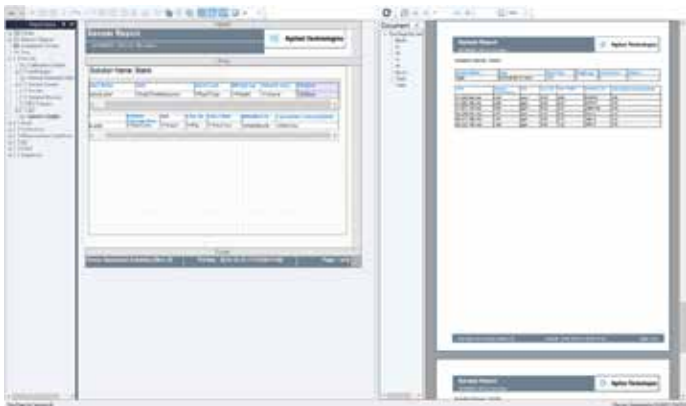


Figura 16. La plataforma de informes inteligentes OpenLab puede crear informes personalizados.

Soporte de control de calidad ampliado para los métodos USP <232>/<233> e ICH Q3D

El software ICP Expert facilita la conformidad con los requisitos de la USP y la ICH para medir impurezas elementales en productos farmacéuticos y en sus componentes. Entre las características del software se cuentan las siguientes:

- Calculadora de picos del valor J
- Marcado de los límites de los criterios de aceptación de tipo pasa/falla para los análisis de validación y el análisis de composición del producto o de los componentes
- Compatibilidad con el paquete de extensión Agilent 21 CFR 11
- Facilitación de la configuración, la ejecución y la validación de un método conforme con USP <232>/<233> y con ICH Q3D
- Plantilla de métodos para acelerar el desarrollo de métodos

Transferencia y exportación de datos

Los resultados se transfieren con facilidad a un sistema de gestión de información de laboratorio (LIMS) o a otras aplicaciones mediante las opciones de exportación de datos que ofrece el software ICP Expert.

Los datos se pueden exportar en formato CSV para su transferencia directa a una hoja de cálculo o a otro programa para la manipulación de datos, el análisis de tendencias o la monitorización de procesos. El software ICP Expert permite la multitarea: los datos obtenidos se pueden revisar, procesar y comunicar al mismo tiempo que el sistema ICP-OES recopila datos para el lote de muestras actual.

Versiones base-pack y Pro-pack del software ICP Expert

El software ICP Expert está disponible en dos versiones: base-pack y Pro-pack. El software ICP Expert base-pack se utiliza para la configuración sencilla del instrumento de ICP-OES y la operación rutinaria. El software Pro-pack ofrece otras características para mejorar la productividad y el rendimiento del instrumento, como:

- Control de calidad con frecuencia definida: analice automáticamente soluciones de control de calidad después de un número de muestras definido
- IntelliQuant Screening, incluido el modo Instantánea para obtener información rápida sobre la muestra
- Exportar a Microsoft Excel (no se proporciona Excel)
- Compatibilidad con muestreadores automáticos de terceros, como Cetac Oil 7400, 7600, ASX520, 560, 1400 y 1600; EXR8, ESI SC-2, 4, 8, 14 y Micro; y AIM 1250 y 3600
- Monitorización de tendencia de la retropresión de argón al nebulizador y las emisiones de argón por disolución
- Adición de oxígeno y purga de nitrógeno
- Control integrado del accesorio de válvula de conmutación del sistema avanzado de válvula (AVS 6 o 7)
- Control integrado del sistema de dilución avanzado 2 (ADS 2)
- Control del sistema de dilución automática ESI prepFAST y de la válvula de conmutación SampleSense
- Lavado inteligente
- Capacidad de personalizar el número de réplicas para distintos tipos de disoluciones

Control remoto con el paquete de software de automatización

El paquete de software de automatización es un kit de herramientas de programación (SDK) que permite el control del software de cliente de terceros del instrumento ICP-OES, enviando comandos y recibiendo datos en tiempo real y actualizaciones del estado del instrumento a través de una conexión de Internet. Se trata de un auténtico control remoto, y ofrece la máxima flexibilidad.

Software ICP Expert para la conformidad con la parte 11 del título 21 del CFR de EE. UU.

Está disponible un paquete de extensión opcional 21 CFR 11 para ayudar con los requisitos de la parte 11 del título 21 del Código de Reglamentos Federales (CFR) de la FDA de EE. UU. El paquete permite la asignación de privilegios de acceso de los usuarios y la creación de seguimientos de auditoría, registros electrónicos y firmas electrónicas. Estas funciones también capturan las configuraciones y acciones del diluidor automático. El paquete de extensión es compatible con la versión Pro-pack de ICP Expert.

Sencilla resolución de problemas

Como se muestra en la figura 17, la página de estado del instrumento proporciona una visión general inmediata sobre el estado del sistema. La monitorización continua y automática del fondo permite verificar rápidamente el estado del instrumento o solucionar problemas en caso de que surja alguno.



Figura 17. Consulte la página interactiva de estado del instrumento para verificar el estado actual del instrumento e identificar causas de problemas.

www.agilent.com/chem/icp-oes

DE.8138078704

Esta información está sujeta a cambios sin previo aviso.

© Agilent Technologies, Inc. 2024
Impreso en EE. UU., 1 de mayo de 2024
5994-1517ES

El diagrama interactivo del instrumento ofrece una visión general del estado del instrumento, incluidos los sistemas AVS 6/7 y ADS 2 (si están instalados), y sugiere la posible causa de los errores que surjan. Para ofrecer información más detallada, el panel del instrumento proporciona información en directo sobre diversos parámetros, con lo que se facilitan la localización y la corrección de los problemas. El estado se actualiza automáticamente si se producen cambios en el sistema.

Comprobación del rendimiento de los instrumentos

Para las pruebas de rendimiento periódicas del instrumento, está disponible un conjunto de pruebas para verificar automáticamente el rendimiento del instrumento. Una mala configuración de los servicios y los instrumentos, en especial de los sistemas de agua, de gas, de escape y de introducción de muestras, es a menudo la causa de problemas de rendimiento o de fallos del instrumento. Las pruebas verifican las funciones básicas del instrumento con el fin de confirmar que el sistema funciona según las especificaciones, lo que puede constituir una importante herramienta para la resolución de problemas. También hay disponibles pruebas para verificar la instalación y el correcto funcionamiento de los sistemas AVS 6/7 y ADS 2.

Al finalizar el ciclo de prueba, se puede exportar un informe en formato PDF a cualquier ubicación de la red local.

Referencias

1. Software IntelliQuant de Agilent: Para saber más de las muestras y simplificar el desarrollo de métodos, publicación de Agilent [5994-1516ES](#)
2. IntelliQuant Screening de Agilent: Análisis ICP-OES semicuantitativo más inteligente y más rápido, publicación de Agilent [5994-1518ES](#)
3. Corrección de fondos ajustada (FBC): corrección de fondos rápida, precisa y totalmente automatizada, publicación de Agilent [5991-4836ES](#)
4. Corrección espectral en tiempo real de muestras complejas usando el software de deconvolución espectral FACT, publicación de Agilent [5991-4837ES](#)