

# Agilent ICP Expert 软件

用于 ICP-OES 的强大软件和智能工具



## 前言

Agilent 5800 ICP-OES 和 Agilent 5900 ICP-OES 均由 Agilent ICP Expert 软件控制。ICP Expert 使用熟悉的工作表界面，提供简化的方法开发和样品分析。其具有 IntelliQuant 功能，使分析人员能够获得样品中多达 70 种元素的浓度数据。ICP Expert 还具有质量控制 (QC) 功能、智能维护功能和一套用于常用分析方法的预开发模板。

## 简单易用的软件

ICP Expert 软件具有智能功能，能够简化新用户的学习过程，同时使经验丰富的分析人员能够轻松运行复杂方法。软件的布局反映了实际应用中最为使用的工作流程。在设置和进行分析时，分析人员只需按照页面依次显示的提示信息执行操作即可。当前页面始终保持突出显示，以便完整查看工作流程进度（图 1）。

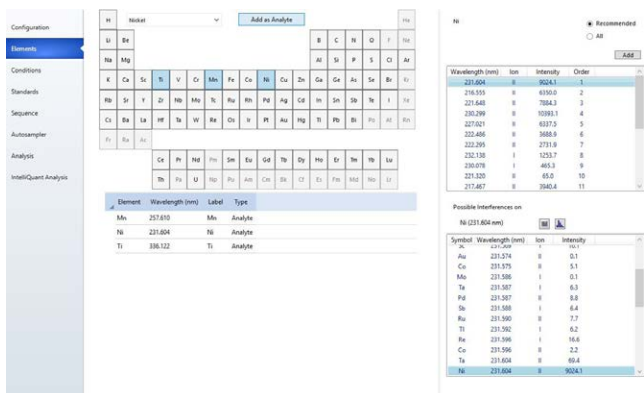


图 1. Agilent ICP Expert 软件提供了清晰、有层次的工作流程，可引导用户完成方法设置和分析过程

该软件包括一套预先开发的模板，涵盖一系列常用的分析方法和样品类型，例如食品、环境和水样分析。如果用户想要执行不熟悉的分析，这些模板将是非常好的起点。模板可以大大减少全面开发新方法所需的时间。

## 小程序模式

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可靠地运行 ICP-OES 分析。

具有管理员权限的人员可以为不同用户设置其可以使用的应用程序。然后，用户可以从可用的 ICP 小程序中进行选择（图 2，第 1 步）。该小程序将自动加载方法（图 2，第 2 步）。然后，用户可以输入样品信息，通过点燃等离子体并点击 Run（运行）按钮开始分析（图 2，第 3 步）。

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。利用内置的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。

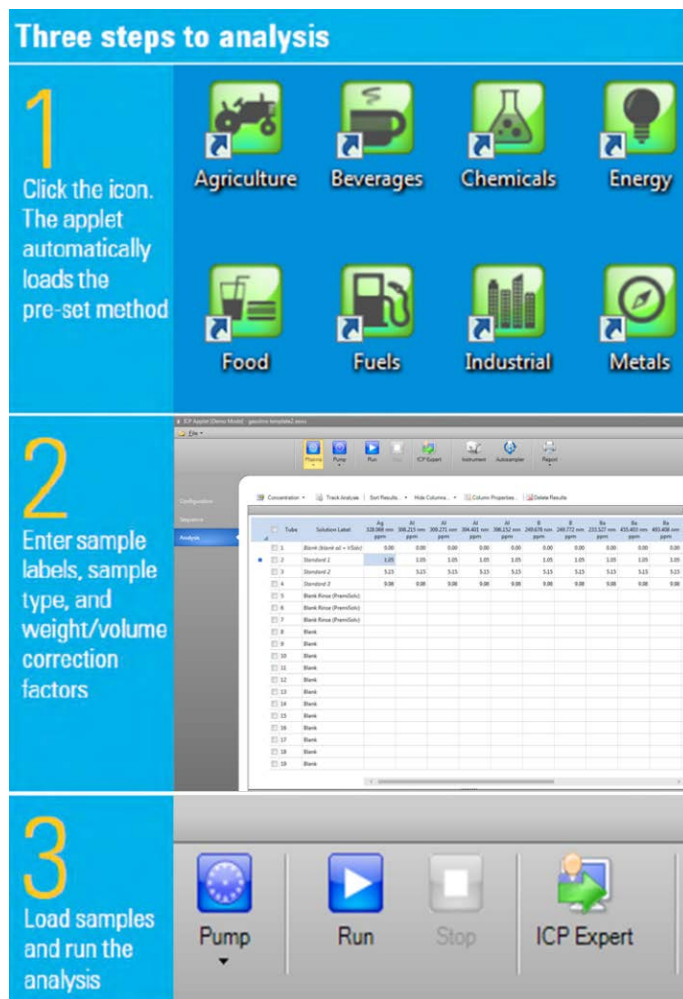


图 2. ICP Expert 软件包括多个适用于常见应用的小程序。只需三步，分析人员即可开始分析

## 简化方法开发

ICP Expert 软件包含多种用于简化方法开发的智能工具。这些工具使分析人员可以缩短方法设置时间，并将更多的时间用于运行样品(1, 2)。

AVS 参数计算器是一种实用的工具，可根据分析人员定义的管线类型和长度提供方法参数（包括时序控制和流量）的推荐时序控制。

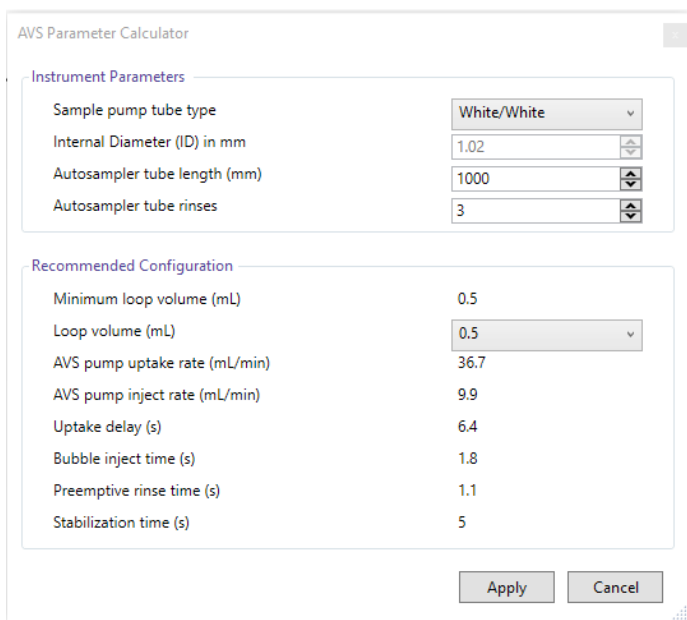


图 3. ICP Expert 中的 AVS 参数计算器

软件中的计时监测功能允许用户优化时间点和测量条件，并在整个样品到样品的过程中提供清晰的信号读数。

IntelliQuant Screening（在 Pro-pack 软件模块中提供）使用户可以对样品进行快速的半定量筛查。IntelliQuant Screening 可在 167–785 nm 的整个光谱范围内采集数据，每个样品仅需 15 秒，如图 4 所示。

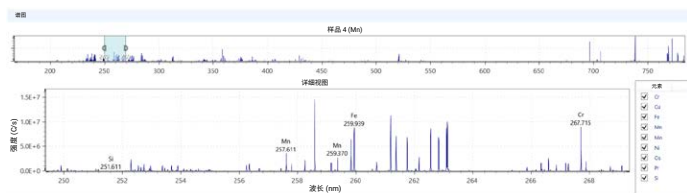


图 4. 仅需 15 秒即可完成全波长扫描的数据采集

根据此数据，IntelliQuant Screening 会以元素周期表的形式显示样品中多达 70 种元素的相对浓度（参见图 5）。可以识别任何潜在的干扰，并以简单明了的方式将其呈现给用户。根据潜在干扰和其他因素确定最佳分析波长。所有这些信息均自动提供，无需预先知晓所测样品的组成或掌握光谱方面的专业知识。

借助 IntelliQuant Screening 提供的信息，操作人员只需将推荐波长导入新的工作表中，即可轻松创建用于样品分析的定制定量方法。

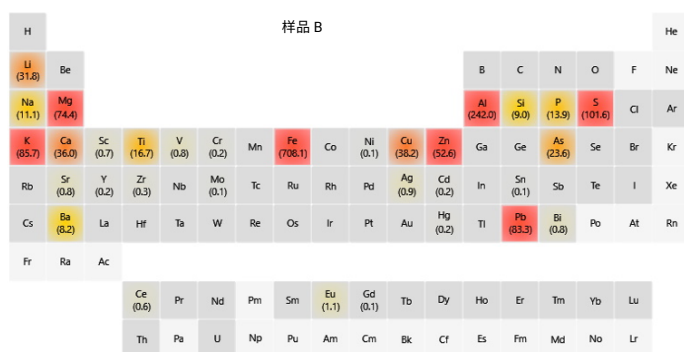


图 5. IntelliQuant 生成的热力图直观地显示了样品中所含元素的相对浓度。该信息提供了针对样品的有用的分析见解，有助于方法开发

## 数据管理

ICP Expert 内置的工具可简化数据分析工作流程。总结行功能可自动从样品的所有测量数据中选择每个波长的最佳测量结果，并将其汇总到单行中。所有重复测量数据（如二次稀释）均按样品保留和整理，并可折叠为仅显示单行总结性内容。

	Rack/Tube	Solution Label	Timestamp	As 188.980 nm ppm	Ba 455.403 nm ppm	Cd 214.439 nm ppm	Co 238.892 nm ppm	Cr 267.716 nm ppm
<input type="checkbox"/>	S1:1	Blank	22/11/2023 1:21:28 PM	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
<input type="checkbox"/>	S1:2	Standard 1	22/11/2023 1:22:08 PM	5.00	5.00	5.00	5.00	5.00
<input type="checkbox"/>	S1:2	Sample 1	22/11/2023 1:33:51 PM	5.01	5.01	5.01	5.00	5.00
<input checked="" type="checkbox"/>	S1:2	Summary	22/11/2023 1:33:51 PM	5.01	5.01	5.01	5.00	5.00
<input type="checkbox"/>	S1:2	Original	22/11/2023 1:22:49 PM	5.01	5.01	5.01	5.00	5.00
<input type="checkbox"/>	S1:2	Dilution - 10	22/11/2023 1:33:51 PM	5.42	5.65	5.59	5.43	5.51
<input type="checkbox"/>	S1:2	Sample 2	22/11/2023 1:35:23 PM	4.98	4.99	4.99	4.98	4.99
<input checked="" type="checkbox"/>	S1:2	Summary	22/11/2023 1:35:23 PM	4.98	4.99	4.99	4.98	4.99
<input type="checkbox"/>	S1:2	Original	22/11/2023 1:23:29 PM	4.98	4.99	4.99	4.98	4.99
<input type="checkbox"/>	S1:2	Dilution - 10	22/11/2023 1:35:23 PM	4.95	5.22	5.16	5.03	5.09

图 6. 总结行显示最佳或理想结果的单行总结性内容，展开视图显示每个样品瓶的所有测量结果

## 异常值条件格式

异常值条件格式 (OCF) 功能使 ICP Expert 用户能够识别可能存在问题的结果。OCF 使用一种或多种基于颜色的可配置规则来检查分析界面中的结果 (图 7)。例如, 将对以下结果进行标记:

- 高于规定的浓度范围
- %RSD 较高
- 低于方法检出限 (MDL)
- 内标测试失败

如果工作表中的某一元素具有多个波长的结果, OCF 可以突出显示不同波长下获得的结果之间的不一致性。同一元素获得不同的结果可能表明其中一个或多个波长下存在潜在干扰或校准问题。总结行中也会排除特别标记的结果。

<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

图 7. 异常值条件格式为用户提供了一种简单的方法, 用于识别可能存在问题的结果。对于不符合指定规则的结果, 将用故障模式对应的字母以及彩色标记进行标记, 以便于快速识别 (此图中的绿色“F”)

## 早期维护反馈

5800 和 5900 仪器均具有 100 多个传感器, 用于监测仪器性能。ICP Expert 软件具有早期维护反馈 (EMF) 功能, 其能够利用这些传感器以及其他计数器, 在需要进行仪器维护时提醒操作人员。

计数器的交通信号灯式颜色标记显示了哪些维护活动应当立即执行, 哪些可以等待 (图 8)。计数器适用于大多数常规应用, 但用户可以设置计数器限值以满足其特定要求。

EMF 内置的维护日志以数字形式记录 ICP-OES 的维护历史。在排除问题时, 可以轻松确定仪器是否得到充分维护。

EMF 根据实际使用状况提供反馈信息, 这种定制化的提醒服务极大地缩短了停机时间并降低了维护成本。

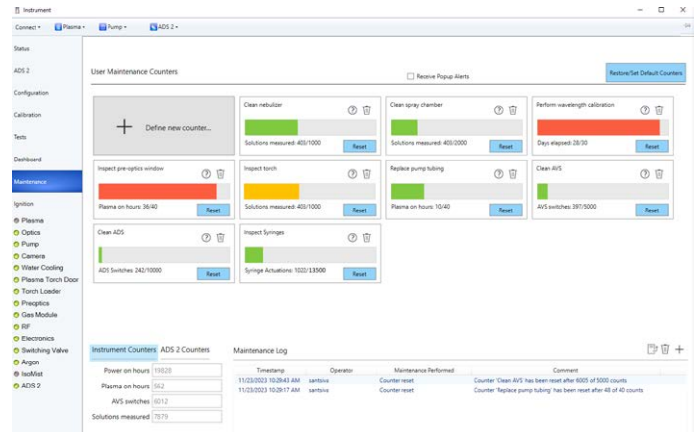


图 8. 包含集成维护日志的早期维护反馈功能有助于妥善维护仪器, 减少意外停机, 并确保持续获得始终如一的高质量结果

## 智能冲洗

ICP Expert 的可选 Pro-pack 软件模块提供了智能冲洗软件功能。智能冲洗会在冲洗期间监测指定元素波长的强度。在强度降至阈值后, 该功能将自动停止冲洗。阈值基于选择的冲洗设置: “彻底” (Thorough)、 “中等” (Moderate) 或 “快速” (Quick)。冲洗至阈值所需的时间随每个样品而变化。智能冲洗可提高样品通量并保持结果的准确度。

## Neb Alert

Neb Alert 是 ICP Expert 软件的一种智能功能, 可在分析过程中监测雾化器反压。如果检测到潜在的堵塞或泄漏 (分析总溶解固体 (TDS) 含量较高的样品或仍含有颗粒的样品时常见的问题), Neb Alert 会向用户发出警告 (图 9)。该警报使分析人员可以停止分析并解决问题, 而不是继续采集可能不准确的数据。

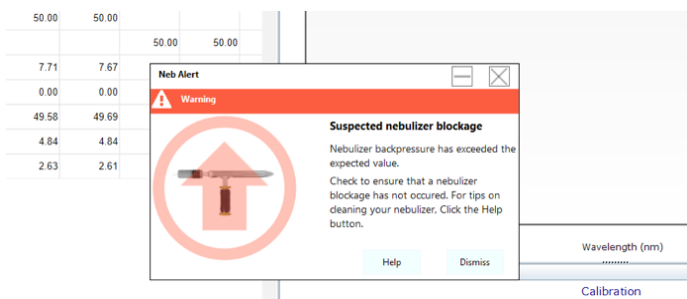


图 9. 如果检测到可疑的雾化器堵塞或泄漏，Neb Alert 会立即通知用户

## 附件控制

ICP Expert 软件可以全面控制 Agilent SPS 4 自动进样器。用户可以在软件中选择样品架类型、冲洗泵速度并控制进样针。

IsoMist 程序化温控雾化室的操作也完全集成到 ICP Expert 软件中。

全面集成了对安捷伦高级阀系统 (AVS) 6 通或 7 通切换阀和安捷伦高级稀释系统 2 (ADS 2) 的控制，可通过 ICP Expert 软件的可选 Pro-pack 软件模块进行控制。(AVS 的 4 通版本由基础软件提供支持。) AVS 和 ADS 2 的全面集成确保了理想的时序控制，不同于采用复杂独立控制软件的第三方切换阀组件。ICP Expert 集成了 AVS 参数计算器，有助于 AVS 6/7 的设置和方法开发。现在还具备 AVS/ADS 计时监测功能，以优化时序控制和参数。

安捷伦循环冷却器使分析人员能够通过仪器 PC 监测和设置水冷参数。



图 10. 安捷伦循环冷却器

屏幕通知使实验室能够即时对故障做出响应，避免发生更严重的故障。

## 安捷伦高级稀释系统 2 的无缝控制

安捷伦高级稀释系统 2 (ADS 2) 的控制集成于 ICP Expert 中，可提供无缝的自动稀释体验。

ADS 2 可自动执行手动任务，并通过以下功能进行优化，以大幅提高通量：

- 通过单标储备液实现多点校准；无需手动配制标准溶液，可节省时间并避免出错
- 自动配标助手（图 11）可使用集成的通用储备标样列表推荐规定浓度范围内的标准溶液浓度。该功能可自动计算准确创建目标浓度的各种标样所需的稀释倍数

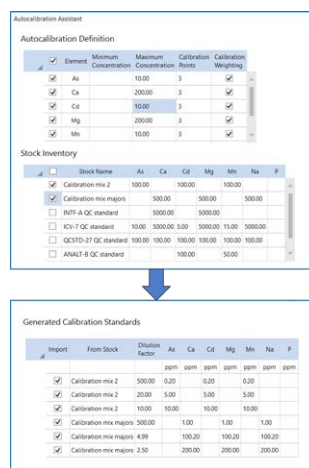


图 11. 自动配标助手可以用指定的储备液制备标样

- 自动二次稀释；如果出现意外结果，例如样品测量值超出校准范围，或内标回收率超出规定的自定义阈值。然后，总结功功能自动从可用的多次测量结果中为每种元素挑选最佳结果
- 稀释列表允许自定义可触发每个样品的二次稀释的元素和波长，确保只在需要进行稀释

- 预设稀释；在方法设置过程中，分析人员可以输入规定（预设）的稀释倍数，ADS 2 将自动执行规定的稀释，省去工作流程中的手动步骤，提高准确度，减少污染和一次性塑料实验室耗材的使用
- 实时流路图结合详细的帮助内容，可帮助用户了解 ADS 2 并排除故障

## ESI PrepFast 和 SampleSense 兼容性

5800 和 5900 ICP-OES 也可与 ESI prepFAST 自动稀释系统和 SampleSense 切换阀配合使用。注：ESI SC 软件需要在后台运行，以便与 ICP Expert 集成。

## AVS/ADS 计时监测

分析人员可以使用计时监测功能对 AVS 和 ADS 2 系统进行故障排除。通过计时监测图可以发现进样系统的各种问题。结合广泛的帮助和学习中心内容，该功能不仅有助于诊断问题，还有助于了解发现问题后的下一步操作。

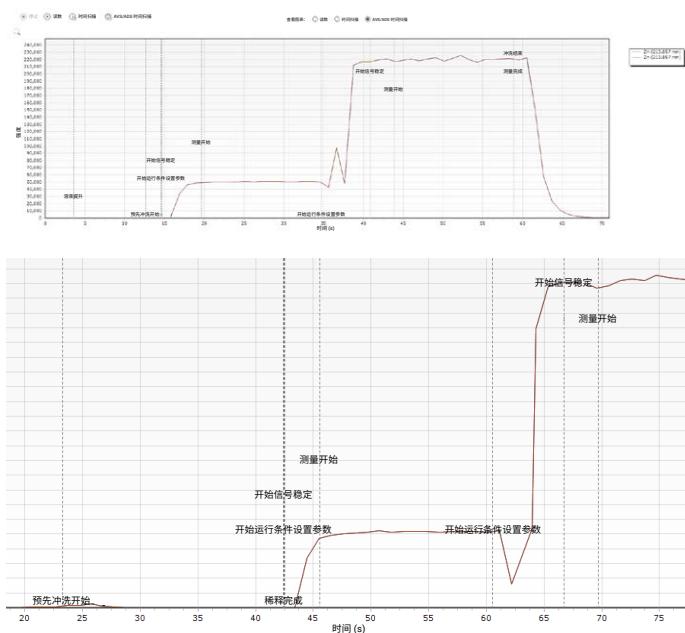


图 12. AVS/ADS 计时监测全视图（上）和放大图（下），显示方法每个步骤中的分析元素信号

## 全面的帮助和学习中心

ICP Expert 包含全面的交互式帮助和学习中心（图 13）。其中包括一套用于执行常用硬件和软件相关任务的内容全面的教学视频，以及有关 ICP-OES、AVS 6/7 和 ADS 2 的详细内容，以进一步了解某些功能并协助排除故障。这些视频能够帮助经验不足的操作人员以最合适的方式设置和维护仪器，从而提高他们的信心并增强其知识储备。Neb Alert 等功能与帮助和学习中心集成。这意味着当传感器检测到问题时，将显示适当的信息和视频。

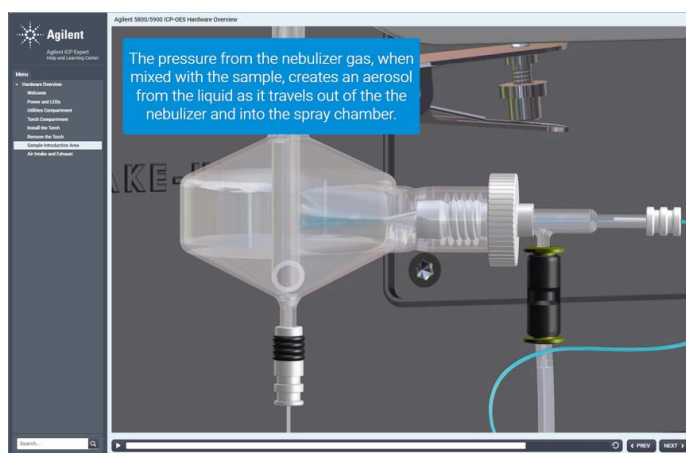


图 13. ICP Expert 帮助和学习中心提供了大量的视频指导，介绍了如何进行常见的仪器设置和维护任务

## 适用于任何情况的校正选项

ICP Expert 软件提供了多个用于校正背景或光谱干扰的选项：

- 拟合背景校正 (FBC) 采用先进的算法，可对分析元素峰下的背景信号建模。同时，FBC 也用于分析元素峰的测定 (3)，确保快速、简单、准确的背景校正。FBC 无需进行方法开发即可准确地自动校正简单和复杂的背景结构
- 离峰校正是一种传统的 ICP-OES 校正技术，允许分析人员从分析元素峰的左侧、右侧或两侧手动选择校正点

- 快速自动曲线拟合技术 (FACT) 校正。安捷伦专有的 FACT 技术采用光谱建模技术对复杂的分析光谱进行准确分析 (4)。FACT 是干扰元素校正 (IEC) 的一种强大的替代技术，也可实现准确的背景校正。其尤其适用于处理极为复杂的背景结构 (FBC 或离峰校正等其他背景校正技术此时往往不适用)

FACT 使用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 (分离) 分析元素信号。

通过分别测定预期组分来建模。该方法通常包括测定空白溶液、纯分析元素溶液和纯干扰物溶液。图 14 显示了应用于 228.802 nm 处的 Cd 发射谱线 (受到 As 的干扰) 的 FACT 模型。FACT 通过数学方式分开这两个峰，以准确测定分析元素信号。对于采用 FBC 或 FACT 无法分离的重叠干扰，可以使用干扰元素校正 (IEC)。

进行分析后，可通过光谱显示对各种分析元素进行背景校正。

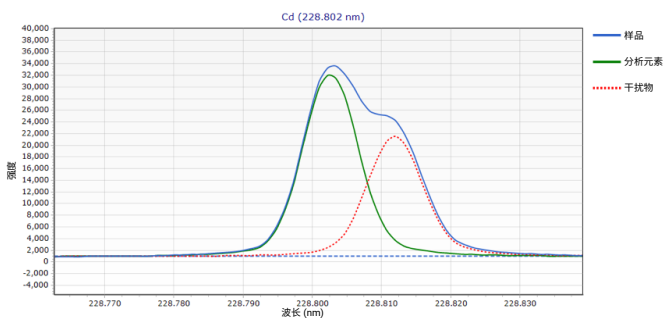


图 14. 对受 As 干扰的 Cd 228.802 nm 应用 FACT 模型的示例。使用 Agilent 5900 ICP-OES 分析含有约 1000 µg/L Cd 的 20 mg/L As 溶液

## 扩展的动态范围

利用 Vista Chip III CCD 检测器广泛的波长范围，ICP Expert 软件的 MultiCal 功能可以为样品分析创建多个校准范围。该功能可扩展线性动态范围。

许多元素可以使用一种以上的波长进行测定。不同波长下通常具有不同的灵敏度，因此对相同的元素使用多个波长的组合，可以扩展检测的动态范围。选择最为灵敏的谱线将得到非常低的检出限，从而准确测定低浓度分析元素。而选择灵敏度较低的谱线可以在同一次测定中测定浓度较高的分析元素。

MultiCal 功能仅需几种标准溶液即可确定各个波长的校准范围。图 15 显示了 Zn 的两条校准曲线。第一条校准曲线采用了 Zn 的高灵敏度谱线，浓度范围为 0–5 ppm。低灵敏度谱线将校准范围扩展至 55 ppm。

基于各波长下的实测浓度，MultiCal 将根据这些波长的定义校准范围报告相应的结果。这将分析的动态范围由 ppb 级扩展到了百分级。浓度范围可以叠加，为验证样品结果提供了一种简单的方法。

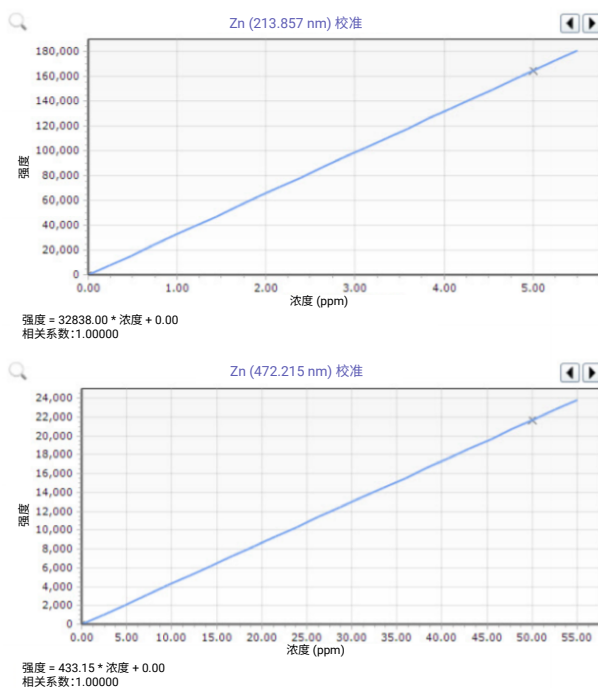


图 15. 在本例中，MultiCal 使用 213.857 nm Zn 发射谱线测定 0–5 ppm 范围内的浓度，并使用 472.215 nm 谱线测定高达 55 ppm 的浓度

## 报告选项

ICP Expert 软件包含 OpenLab 智能报告平台。该平台使分析人员能够对报告进行配置，使其仅包括所需的数据，并可自定义报告布局（包括添加公司徽标）。设置完成后，可以将报告布局和设计保存为模板以供将来使用，见图 16。

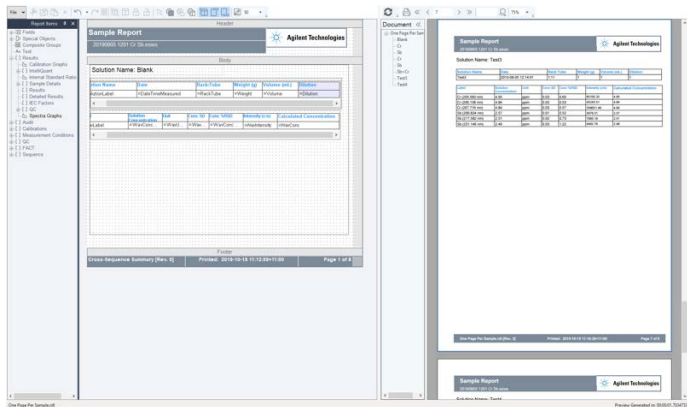


图 16. OpenLab 智能报告平台可以创建定制报告

## 针对 USP <232>/<233> 和 ICH Q3D 方法扩展 QC 支持

ICP Expert 软件提供合规性支持，确保满足 USP 和 ICH 对药品及其组分中元素杂质的测量要求。软件功能包括：

- J 值加标计算功能
- 标记验证测试和产品或组成分析中相对于可接受标准限值的合格/不合格结果
- 与 Agilent 21 CFR 11 扩展包兼容
- 有助于方法设置、运行和验证，符合 USP<232>/<233> 和 ICH QRD 的要求
- 有助于加速方法开发的方法模板

## 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结果转移至实验室信息管理系统 (LIMS) 或其他应用。

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 软件可实现多任务处理：在 ICP-OES 采集当前样品批次的数据的同时，可以审核、处理和报告已采集的数据。

## ICP Expert 软件 Base-pack 版和 Pro-pack 版

ICP Expert 软件提供了两种版本供选择：Base-pack 和 Pro-pack。ICP Expert 软件 Base-pack 版用于轻松进行 ICP-OES 仪器设置和常规操作。Pro-pack 软件提供了可提高仪器分析效率和性能的其他功能，其中包括：

- 使用率驱动的 QC：在运行完规定数量的样品后自动运行 QC 溶液
- IntelliQuant Screening 包括用于快速获得样品信息的“快照”模式
- 导出到 Microsoft Excel（不提供 Excel）
- 支持第三方自动进样器，例如 Cetac Oil 7400、7600、ASX520、560、1400 和 1600，以及 EXR8、ESI SC\_2、4、8、14、微型和 AIM 1250 与 3600
- 根据各溶液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
- 集成控制高级阀系统切换阀附件（AVS 6 或 7）
- 集成控制高级稀释系统 2 (ADS 2)
- 控制 ESI prepFAST 自动稀释系统和 SampleSense 切换阀
- 智能冲洗
- 能够对不同的溶液类型自定义重复计数

## 使用自动化软件包进行远程控制

自动化软件包是一种编程工具包 (SDK)，允许第三方客户端软件控制 ICP-OES 仪器，即通过网络连接发送命令并接收实时数据和仪器状态更新。这是一种真正的远程控制，可提供极大的灵活性。

## ICP Expert 软件支持 21 CFR Part 11 合规性

可选的 21 CFR 11 扩展包有助于满足 US FDA 21 CFR Part 11（及其他国家/地区同等法规）的要求。该扩展包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。使用这些功能还可以获取自动稀释器配置和操作信息。该扩展包与 ICP Expert 的 Pro-pack 版本兼容。

## 轻松进行排除故障

如图 17 所示，“仪器状态”页面提供了系统状态的即时概况。如果出现问题，持续的自动化后台监测使您可以快速检查仪器状态或进行排除故障。

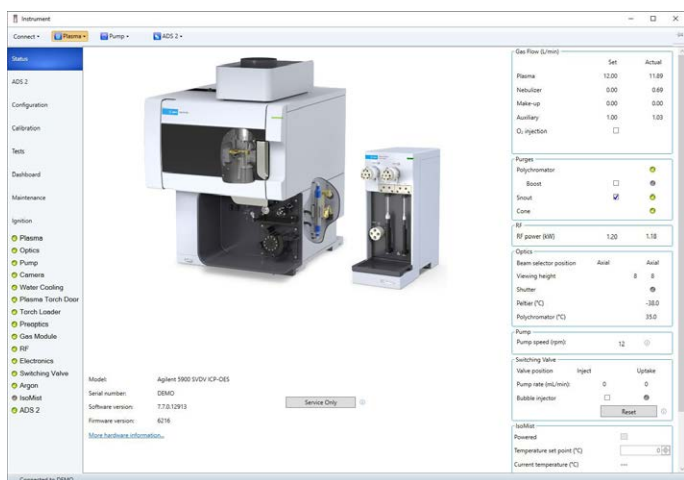


图 17. 查看交互式仪器状态页面，检查仪器当前状态并确认导致问题的原因

仪器的交互式图提供了仪器状态（包括 AVS 6/7 或 ADS 2，如配备）的概况并给出可能的出错原因。如需获取更详细的指导，仪器面板上提供了有关各种参数的实时信息，便于查找和解决问题。系统发生任何变化时将自动更新状态。

[www.agilent.com/chem/icp-oes](http://www.agilent.com/chem/icp-oes)

DE.8138078704

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 1 日，中国出版  
5994-1517ZHCN

## 检查仪器性能

为了定期检测仪器性能，该软件提供了一套测试以自动验证仪器性能。通用设施和仪器设置不当（特别是水、气、排气和进样系统）通常是导致性能问题或仪器故障的原因。这些测试将检查仪器的基本功能，确认系统运行正常，这是一个重要的故障排除工具。还提供用于确认 AVS 6/7 和 ADS 2 安装和功能的测试。

完成测试进程后，可以将 PDF 格式的报告导出到本地网络的任何位置。

## 参考文献

1. Agilent IntelliQuant 软件：更深入地了解样品并简化方法开发，安捷伦出版物，[5994-1516ZHCN](#)
2. Agilent IntelliQuant Screening：更智能、更快速的半定量 ICP-OES 分析，安捷伦出版物，[5994-1518ZHCN](#)
3. 拟合背景校正 (FBC) — 快速、准确、全自动背景校正，安捷伦出版物，[5991-4836ZHCN](#)
4. 使用 FACT 光谱谱图解析软件对复杂样品进行实时光谱校正，安捷伦出版物，[5991-4837ZHCN](#)