

ICP-MS용 Agilent IntelliQuant

빠르고 자동화된 반정량 ICP-MS 분석으로 풍부한
시료 정보를 얻고 결과에 대한 신뢰도를 높이세요

ICP-MS 작동 및 데이터 검토를 간소화하는 스마트 도구

분석 실험실, 특히 상업 부문의 분석 실험실은 데이터 품질이 저하없이 생산성을 향상하고 동시에 비용을 낮춰야 하는 지속적인 압박에 직면하고 있습니다. 그러한 수많은 실험실에서는 빠른 다원소 ICP-MS 기술을 도입해 무기(금속) 분석 요건을 충족해 왔습니다. 하지만 ICP-MS는 여전히 전문 사용자가 새로운 분석법을 개발하고 데이터를 해석해야 하는 복잡한 기술로 여겨지고 있습니다. Agilent ICP-MS 장비는 기존 설정 분석법, 자동 튜닝, 사용자에게 일반적인 워크플로를 안내하는 소프트웨어 인터페이스를 갖추고 있어 빠르게 배워서 쉽게 사용할 수 있습니다. 동중원소 간섭을 제어하기 위한 헬륨 충돌 셀, 매트릭스 내성을 향상시키기 위한 고매질 주입(UHMI), 광범위한 측정 범위의 검출기도 전반적인 분석 워크플로 간소화에 기여합니다. 사용자에게 이러한 분석법이 견고하며 결과가 정확하다는 신뢰를 얻기 위해 애질런트에서는 작동과 데이터 검토를 간소화할 수 있는 다양한 스마트 기능을 개발했습니다. 이러한 기능에는 시료 전처리, 분석법 개발, 시료 분석 및 데이터 보고를 통해 의사 결정을 위한 정보를 제공하여 심층적인 시료 지식을 제공하는 소프트웨어 기능인 IntelliQuant가 포함됩니다.

IntelliQuant는 무엇입니까?

IntelliQuant는 추가로 소요되는 시간이나 노력을 최소한으로 들여 시료에 대한 풍부한 정보를 제공하는 완전히 통합된 결과 표시 및 해석 기능입니다. IntelliQuant는 ICP-MS MassHunter 소프트웨어의 고속 스캔 기능을 이용해 획득한 전체 질량 스펙트럼 데이터를 기반으로 하며 해당 소프트웨어 4.6 이후 버전에 포함됩니다.

사용 편의성을 위해 IntelliQuant 데이터는 대부분의 정량 분석법의 일부로써 자동으로 획득됩니다. 모든 애질런트 기존 설정 분석법의 기본 설정입니다. IntelliQuant는 2초 이내에 전체 질량 고속 스캔 데이터를 자동으로 획득하며 각 시료의 최대 78개 원소에 대한 반정량 데이터를 생성합니다. 기본적으로 헬륨 셀 모드에서 IntelliQuant 데이터를 획득하므로 분석물질은 동중원소 이온 간섭을 크게 받지 않아 고품질 데이터 생성을 보장합니다. 또한 IntelliQuant는 이전 버전의 ICP-MS MassHunter를 이용해 수집한 고속 스캔 데이터도 처리합니다.

IntelliQuant 데이터는 분석가에게 다음을 제공합니다.

- 추가 표준물질을 준비하거나 측정할 필요 없이 정량 분석법에 포함되지 않은 원소를 포함해 각 시료의 최대 78개 요소에 대한 대략적인 농도
- 품질 관리 또는 안전 관점에서 관심이 있거나 우려되며 정량 분석법에 포함되지 않은 원소에 대한 식별 또는 확인
- 감도 및 회수율에 영향을 미칠 수 있는 매트릭스 영향의 원인을 식별하는 데 도움이 되는 각 시료의 TMS(총 매트릭스 고형물) 추산. TMS 데이터는 후속 분석에서 다르게 취급해야 할 수도 있는 시료를 플래그 지정(예: 혼합된 물의 한 배치에 예상치 못한 염분이 높은 시료가 포함된 경우)
- 비소(As) 및 셀레늄(Se)(1-3) 등의 중대한 원소에서 2가 전하 이온 간섭을 유발할 수 있는 특정 희토류 원소(REE) 등의 원소의 존재 여부 모니터링
- 보정하지 않을 경우 결과의 정확도에 영향을 미칠 수 있는 시료 전처리 오류 관련 정보

IntelliQuant는 어떻게 작동합니까?

자동 검량

IntelliQuant는 사용이 간편하며 작업자가 설정이나 검량하지 않아도 됩니다. IntelliQuant는 정량 측정에서 적합한 검량과 ISTD (내부 표준물질) 용액을 자동으로 선택하여 각 원소에 대한 정확한 감응 계수를 계산하므로 특정한 표준물질이 필요하지 않습니다. 검량에 포함되지 않은 원소에 대한 상대 감응 계수는 근처 원소에 대하여 측정된 감응을 토대로 계산합니다. 이러한 정확한 감응 계수는 다원자 이온 제어의 헬륨 셀 모드와 결합하여 IntelliQuant가 검량되지 않는 분석물질에 대해서도 고품질의 데이터를 제공하도록 보장합니다.

IntelliQuant 주기율표 히트맵 표시

주기율표 히트맵은 시료 내 모든 원소의 농도에 대한 명확한 시각적 개요를 제공하여 신속한 데이터 평가를 지원합니다. 내부 표준물질로 지정된 원소를 제외한 모든 측정 가능한 원소에 대한 반정량 농도가 계산되어 표시됩니다.

그림 1은 슈가 파우더 도넛(4)에 대해 획득한 주기율표 히트맵을 보여줍니다. 히트맵 표시에는 검량 표준물질에 포함된 원소뿐만 아니라, 시료에 있는 모든 원소가 포함됩니다. 히트맵은 고농도의 Ti(포장에 식품 첨가물 "TiO₂"로 라벨 표시됨)를 보여줍니다. 이 경우 Ti는 정량 측정을 위해 선택되지 않았지만, 고농도에서의 존재는 IntelliQuant 히트맵 표시에서 분명하게 표시됩니다.

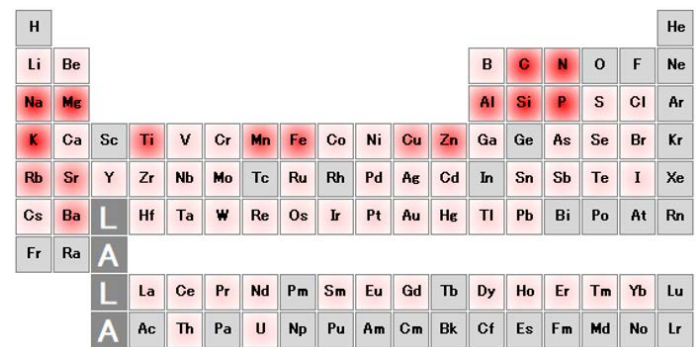


그림 1. 슈가 파우더가 뿌려진 도넛 시료에 대해 획득한 ICP-MS IntelliQuant 데이터의 주기율표 히트맵 보기. 색상 강도는 시료 내 원소 농도를 나타냅니다 (예: 암적색은 해당 원소의 농도가 높음을 나타냄).

또한 IntelliQuant 데이터는 존재해야 하는 원소와 존재하지 않는 원소 또는 그 반대를 식별하여 시료 전처리 오류를 식별하는 데 도움이 될 수도 있습니다. 시료 전처리 오류는 일부 원소의 부적절한 분해나 불충분한 원소 안정성을 야기하여 결과 품질에 영향을 미칠 수 있습니다. 예를 들어, Hg, Ag, Sn, Sb, Mo 등의 분석물질을 안정화하기 위해 시료 전처리 중에 주기적으로 시료에 HCl이 추가됩니다. IntelliQuant 히트맵 표시에 Cl이 없으면 해당 시료의 경우 HCl 추가가 누락되었을 수 있음을 바로 알 수 있습니다.

이상치 결과

Agilent ICP-MS 시스템에 사용되는 표준 헬륨 충돌 모드는 일반적인 시료의 수많은 분석물질에 영향을 미칠 수 있는 동중원소 이온 중첩 문제를 성공적으로 해결합니다. 하지만 모든 ICP-MS 분석법이 헬륨 충돌 모드 사용을 허용하는 것은 아니며 비 동중원소 중첩도 특히 신규 또는 특이한 시료 유형에서 오류를 야기할 수 있습니다. 이러한 경우, IntelliQuant 이상치 표시는 사용자의 ICP-MS 전문 지식수준이 높지 않아도 오류의 잠재적인 원인을 파악하는 데 도움이 됩니다. 그림 2에서 볼 수 있듯이, IntelliQuant 이상치 결과는 결과표 또는 주기율표 보기에 표시될 수 있습니다.

그림 2. 색상 코드 이상치 플래그는 다른 질량에서 강한 신호가 있을 때 잠재적으로 스펙트럼 중첩을 일으킬 수 있는 분석물질을 나타냅니다.

다른 시료 농도의 영향을 받을 가능성이 확인된 모든 분석물질의 질량은 데이터 표에서 색상으로 구분되며 주기율표에서 강조 표시되어 있어 빠르게 식별할 수 있습니다. 이상치 플래그는 분석물질 질량과 잠재적 간섭원의 상대 강도를 기반으로 하므로 명확한 간섭이 아닌 잠재적 중첩을 나타냅니다. IntelliQuant는 잠재적 2가 전하, 주변 질량, 동중원소 중첩을 확인하기 위해 전체 질량 스펙트럼을 스캔합니다. 이 방식으로 이상치를 사용하여 사용자는 데이터 무결성을 보장하는 데 신중한 접근 방식을 취하고 있음을 확인할 수 있습니다. 플래그는 사용자가 특이한 매트릭스 성분의 영향을 받을 수 있는 모든 결과를 검토 및 확인하도록 유도하므로 확인되지 않은 위양성(false positive) 결과 감지를 보장합니다.

그림 2의 예시에서 Al과 La의 노란색 하이라이트는 분석물질 질량보다 16u 낮은 강력한 신호가 존재함을 나타내 잔존 산화물 중첩에 대한 잠재성을 나타냅니다. 이와 유사하게, As, Se, Zr 플래그의 분홍색 음영은 분석물질 질량보다 40u 낮은 강력한 신호의 존재를 표시하여 잔존 아르곤 중첩에 대한 잠재성을 나타냅니다. 이합체 및 2가 전하 이온 등의 다른 간섭 유형도 이와 유사하게 색상 코드로 구분됩니다. 자세한 내용은 원소에 커서를 대면 액세스할 수 있는 "도구 팁"에서 확인할 수 있습니다.

시료의 고형물 수준 측정

총 매트릭스 고형물(TMS) 기능은 IntelliQuant 데이터를 이용해 각 시료의 대략적인 고형물 수준을 계산합니다. 계산에는 Ar, N, O, C, P, S, 할로겐화물 등의 가스나 용매가 포함되지 않아 더 정확한 결과를 보장합니다.

TMS는 신규 또는 특이한 시료 유형용 분석법 개발을 위한 강력한 도구로, 대표 시료의 총 매트릭스 수준을 빠르게 평가할 수 있습니다. 또한 TMS는 시료 주입 소모품과 인터페이스 콘에 대한 시료 부하를 추적하는 데도 사용될 수 있어 일상적인 유지보수를 관리하는 데 도움이 됩니다. 7850 ICP-MS 사용자는 작동 시간이나 측정된 시료 수를 기준으로 조기 유지보수 피드백(EMF) 센서 및 카운터를 사용하여 유지보수가 필요할 때를 판단할 수도 있습니다(5).

Agilent ICP-MS 시스템은 매우 양질의 플라즈마 견고성으로 주기적으로 작동되므로(낮은 CeO/Ce 비율) 대부분의 일반적인 ICP-MS 시료에 존재하는 용존 고형물 수준을 쉽게 견딜 수 있습니다. 하지만 매우 높은 매트릭스 수준은 시료 속도 차이로 인해 시료 주입과 분무 프로세스에 변화를 주어 신호 변동을 초래할 수 있습니다. 그림 3의 예시에서 내부 표준물질 신호는 시료 4와 5에서 저하되어 이러한 시료에서의 매트릭스 효과를 나타냈습니다. 내부 표준물질은 이 감도 변화를 수정해 데이터 정확도는 저하되지 않을 것입니다. 하지만, 특히 알려지지 않은 시료 배치를 분석할 경우 내부 표준물질의 변화는 유용한 진단 도구입니다. TMS 데이터는 내부 표준물질 신호 저하를 유발한 시료에 대해 자세한 정보를 제공할 수 있습니다. 이러한 두 시료에 대한 TMS 데이터(그림 4)는 두 시료의 매트릭스 수준이 약 1%(10,000ppm)로 다른 시료보다 훨씬 높음을 보여주었습니다. 이 정보를 이용해 분석자는 향후 배치를 위해 이러한 시료 형태를 희석하도록 플래그 지정할 것인지, 아니면 UHMI 시스템을 이용해 에어로졸이 증가한 희석으로 실행할 것인지 결정할 수 있습니다(6, 7).

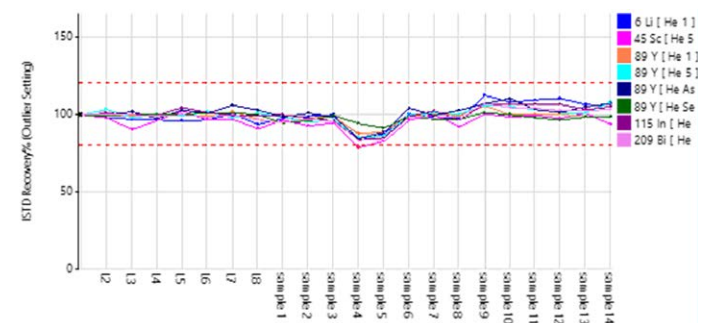


그림 3. 가변적인 매트릭스 시료 배치에 대한 내부 표준물질 회수율 플롯.










FullQuant	IntelliQuant					
	Sample					
		Rjct	Type	Level	Sample Name	TMS (ppm)
9		<input type="checkbox"/>	Sample		sample 1	1282.949
10		<input type="checkbox"/>	Sample		sample 2	1481.897
11		<input type="checkbox"/>	Sample		sample 3	2424.732
12		<input type="checkbox"/>	Sample		sample 4	13084.501
13		<input type="checkbox"/>	Sample		sample 5	9369.169
14		<input type="checkbox"/>	Sample		sample 6	2000.786
15		<input type="checkbox"/>	Sample		sample 7	1313.767
16		<input type="checkbox"/>	Sample		sample 8	3061.235

그림 4. 시료 4와 5에서 훨씬 높은 매트릭스 수준을 보여주는 시료 8개의 TMS 데이터.

반정량 결과

IntelliQuant는 전체 정량 분석법의 모든 원소와 검량 용액에 포함되지 않은 원소도 포함해 시료 내 최대 78개 원소에 대한 반정량 데이터를 제공합니다. IntelliQuant는 모든 원소에 대한 반정량 데이터를 제공하여 결과의 신뢰도를 더욱 높입니다. 이 데이터는 전혀 알려지지 않은 시료를 분석하거나 오염 문제를 조사하거나 데이터 품질 문제를 해결할 때 특히 유용합니다.

예를 들어 IntelliQuant 반정량 데이터는 As와 Se 등의 중요한 원소의 위양성(false positive) 결과가 보고되는 것을 방지하는 측면에서 유용합니다. 시료에 충분히 높은 농도의 REE가 포함된 경우 REE 질량의 절반에 단일 전하 As 및 Se 이온과 중첩되는 2가 전하 이온 간섭이 형성될 수 있습니다. 예를 들어, $^{150}\text{Nd}^{2+}$ 및 $^{150}\text{Sm}^{2+}$ 은 $^{75}\text{As}^{+}$ 를 간섭하며 $^{156}\text{Gd}^{2+}$ 및 $^{156}\text{Dy}^{2+}$ 는 $^{78}\text{Se}^{+}$ 를 간섭합니다. ICP-MS용 EAM(Elemental Analysis Method) 4.7에서, 미국 식품의약국(FDA)은 분석자들이 REE를 모니터링하여 As 및 Se 결과의 편향을 방지하기 위해 필요할 경우 적합한 간섭 보정 방정식을 사용할 것을 권장합니다(3).

보정 프로세스 간소화를 위해 ICP-MS MassHunter 소프트웨어에는 REE 2가 전하 이온 간섭 수정에 필요한, 사용이 간편한 "M²⁺ 보정" 루틴이 포함되어 있습니다(1, 2).

동위원소 지문

IntelliQuant는 2~260u 범위의 전체 질량 스펙트럼의 헬륨 모드 데이터를 획득하므로 각 원소의 모든 동위원소에 대한 데이터가 수집됩니다. 시료 결과가 특이하거나 예상치 못한 것으로 플래그 지정되면 천연 동위원소 존재비 템플릿과 고속 스캔 데이터를 비교하여 쿼리된 원소의 존재를 확인할 수 있습니다. 이 기능을 테스트하기 위해 IntelliQuant를 이용해 수돗물 시료를 측정했으며 그림 5에서 볼 수 있듯이 동위원소 존재비 템플릿 적합에 대해 피크가 확인되었습니다. 200ppm의 Na를 함유한 수돗물 시료의 스펙트럼은 ^{63}Cu 및 ^{65}Cu 를 포함하여 측정된 모든 원소의 천연 동위원소 템플릿에 대해 양호한 적합성을 보여줍니다. 결과는 ^{63}Cu 에 대한 $^{23}\text{Na}^{40}\text{Ar}$ 간섭을 제거할 수 있도록 7850에서 헬륨 모드의 효과를 확인해 줍니다.

헬륨 모드에서 측정된 질량 스펙트럼의 우수한 동위원소 템플릿 적합성은 시료를 재측정할 필요 없이 분석 결과에 대한 신뢰도를 높여줍니다. IntelliQuant는 정량 결과 검증에 도움이 되는 시료에 유용한 분석 정보를 제공합니다.

튜닝 모드 = 고속 스캔 : 012SMPLD

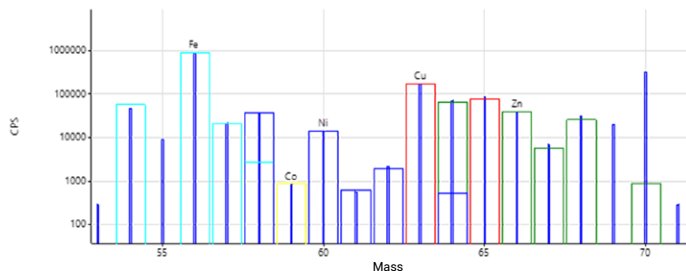


그림 5. IntelliQuant 고속 스캔 전체 질량 스펙트럼은 동위원소 템플릿 일치에서 분석물질/매트릭스 원소 확인을 지원합니다. 이 예시에서 Cu의 동위원소 템플릿은 헬륨 셀 모드에서 ^{63}Cu 에 대한 $^{23}\text{Na}^{40}\text{Ar}$ 간섭의 제거를 보여줍니다.

IntelliQuant 분석 예시

Agilent 7850 ICP-MS로 물 표준 레퍼런스 물질(SRM)의 NIST 1643e 극미량 원소를 분석하였습니다. 낮은 매트릭스 시료와 렌즈 자동 튜닝을 위한 기존 설정 분석법은 분석법 개발 간소화에 사용되었습니다. 기존 설정 분석법이 ICP-MS MassHunter 소프트웨어에 사용될 경우 헬륨 셀 모드에서 정량 측정과 함께 고속 스캔 획득이 자동으로 수집됩니다.

Agilent 혼합 표준 용액(p/n; 5183-4688)을 사용하여 정량 분석 검량 표준물질을 준비합니다. ISTD 용액은 Agilent ISTD 용액(p/n; 5188-6525)과 Ir 및 Y(Kanto Chemicals, Japan)에 대한 단일 원소 표준물질을 희석하여 1ppm으로 준비되었습니다.

반정량 결과의 정확도는 감응 계수 계산에 사용된 표준물질에 포함된 분석물질에 대해 가장 높게 나타납니다. 하지만 표준물질에 없는 원소라고 하더라도 IntelliQuant가 자동으로 계산한 보간 감응 계수는 실제 농도를 제대로 보여줍니다. 표 1을 참조하시면 수집의 일환으로 자동으로 수집된 2초 고속 스캔 데이터에서 계산된 NIST 1643e에 대한 IntelliQuant 결과를 알 수 있습니다.

표 1을 참조하시면 검량되지 않은 원소에 대한 값을 포함해 물 SRM의 모든 원소에 대한 반정량 농도 결과는 레퍼런스 값의 $\pm 40\%$ 이내로 나타납니다.

표 1. 1643e 물 SRM의 원소에 대한 IntelliQuant 반정량 회수율.

원소	측정된 농도(ppb)	인증 농도(ppb)	회수율 (%)
9 Be	13.7	13.98 \pm 0.17	98
11 B	121	157.9 \pm 3.9	77
23 Na	18100	20740 \pm 260	87
24 Mg	7050	8037 \pm 98	88
27 Al	122	141.8 \pm 8.6	86
39 K	1350	2034 \pm 29	66
43 Ca	22300	32300 \pm 1100	69
51 V	35.6	37.86 \pm 0.59	94
52 Cr	21.1	20.4 \pm 0.24	103
55 Mn	38.8	38.97 \pm 0.45	100
56 Fe	126	98.1 \pm 1.4	129
59 Co	27.8	27.06 \pm 0.32	103
60 Ni	56.9	62.41 \pm 0.69	91
63 Cu	23.3	22.76 \pm 0.31	102
66 Zn	80.6	78.5 \pm 2.2	103
75 As	57.4	60.45 \pm 0.72	95
78 Se	14.1	11.97 \pm 0.14	118
85 Rb	9.19	14.14 \pm 0.18	65
88 Sr	199	323.1 \pm 3.6	61
95 Mo	120	121.4 \pm 1.3	99
107 Ag	0.985	1.062 \pm 0.075	93
111 Cd	5.77	6.568 \pm 0.073	88
121 Sb	55.3	58.3 \pm 0.61	95
137 Ba	454	544.2 \pm 5.8	83
185 Re	106	113	94
205 Tl	7.11	7.445 \pm 0.096	95
208 Pb	18.3	19.63 \pm 0.21	93
232 Th	9.4	10*	94
238 U	10.0	10*	100

Re에 대한 정보 값. *1643e SRM에 포함되지 않으므로 10ppb에서 급증함.

참고 문헌

1. Tetsuo Kubota, Fast, Accurate Analysis of 28 Elements in Water using ISO Method 17294-2: Agilent 7850 ICP-MS controls polyatomic and doubly charged interferences to deliver long-term accuracy and reproducibility in diverse water samples, Agilent publication, [5994-2804EN](#)
2. Simplifying Correction of Doubly Charged Ion Interferences with Agilent ICP-MS MassHunter: Fast, automated M²⁺ correction routine improves data accuracy for Zn, As, and Se, Agilent publication, [5994-1435EN](#)
3. Patrick J. Gray, William R. Mindak, John Cheng, US FDA Elemental Analysis Manual, 4.7 Inductively Coupled Plasma-Mass Spectrometric Determination of Arsenic, Cadmium, Chromium, Lead, Mercury, and Other Elements in Food Using Microwave Assisted Digestion, Version 1.2 (February 2020), accessed November 2020, <https://www.fda.gov/media/87509/download>
4. Jenny Nelson, Elaine Hasty, Leanne Anderson, Macy Harris, Determination of Critical Elements in Foods in Accordance with US FDA EAM 4.7 ICP-MS Method, Extending the scope of routine food analysis using IntelliQuant data analysis, Agilent publication, [5994-2839EN](#)
5. Smart Self-Health Checks for ICP-MS Instruments, Agilent publication, [5994-2780EN](#)
6. High Matrix Introduction, Agilent publication, [5994-1170EN](#)
7. Wim Proper, Ed McCurdy, Junichi Takahashi, Performance of the Agilent 7900 ICP-MS with UHMI for High Salt Matrix Analysis: Extending the matrix tolerance of ICP-MS to percent levels of total dissolved solids, Agilent publication, [5991-4257EN](#)

www.agilent.com/chem

DE44138.9974421296

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2020
2020년 12월 1일, 한국에서 인쇄
5994-2796KO

한국애질런트테크놀로지스(주)
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,
A+ 에셋타워 9층, 06621
전화: 82-80-004-5090 (고객지원센터)
팩스: 82-2-3452-2451
이메일: korea-inquiry_lsca@agilent.com

