

用于 ICP-MS 的 Agilent IntelliQuant

快速的自动化半定量 ICP-MS 分析帮助您更深入地了解样品并提高结果可靠性

智能工具可简化 ICP-MS 操作和数据审查

分析实验室，特别是商业分析实验室持续面临提高效率、降低成本的压力，同时要确保数据质量不受影响。许多此类实验室已采用 ICP-MS 这一快速多元素技术来满足其无机（金属）分析要求。但通常认为 ICP-MS 技术仍较为复杂，需要专业用户来开发新方法和解析数据。安捷伦 ICP-MS 仪器易于掌握且使用简便，具有预设方法、自动调谐等功能，其引导式软件界面方便用户执行常规工作流程。重要的功能改进包括可减少多原子干扰的氦气碰撞池、可提高基质耐受性的超高基质进样系统 (UHMI)、以及有助于简化整体分析流程的宽动态范围检测器等。为了提高用户对方法可靠性及结果准确性的信心，安捷伦开发了多种智能功能以简化操作和数据审查。其中包括 IntelliQuant，该软件功能可提供更深入的样品信息，为样品前处理、方法开发、样品分析和数据报告提供决策依据。

IntelliQuant 简介

IntelliQuant 是一种完全集成的结果显示和解析功能，可提供样品的更多信息，最大程度减少额外耗费的时间或精力。IntelliQuant 以使用 ICP-MS MassHunter 软件中“快速扫描”功能采集的全质谱数据为基础，包含在该软件的 4.6 及更高版本中。

为便于使用，大多数定量方法过程将自动采集 IntelliQuant 数据，并作为所有安捷伦预设方法中的默认设置。IntelliQuant 可在 2 秒内自动采集全质谱快速扫描数据，并可对每个样品中的多达 78 种元素生成半定量数据。默认情况下，IntelliQuant 数据在氦气碰撞池模式下采集，因此分析物可大幅避免多原子离子干扰，从而确保生成高质量数据。IntelliQuant 还可以处理较早版本 ICP-MS MassHunter 采集的快速扫描数据。

IntelliQuant 数据可为分析人员提供：

- 每个样品最多 78 种元素的近似浓度，包括定量方法中未涵盖的元素，无需制备或测量任何其他标准品
- 对定量方法中未包含、但可能需要关注或从质量控制或安全角度可能存在问题的元素进行鉴定或确认
- 估计每个样品的总基质固体 (TMS) 含量，有助于确定可能影响灵敏度和回收率的基质效应成因。TMS 数据还可标记后续分析中可能需要不同处理的样品，例如某批混合水样中意外含高盐分样品的情况
- 监测是否含有某些元素，例如可能会对砷 (As) 和硒 (Se) 等关键元素产生双电荷离子干扰的某些稀土元素 (REEs)^[1-3]
- 发现可能影响结果准确性的样品前处理错误信息，并及时纠正

IntelliQuant 工作原理

自动校准

IntelliQuant 简便易用，无需操作人员进行设置或校准。IntelliQuant 会自动从定量测量中选择适当的校准和内标 (ISTD) 溶液，以计算每个元素的准确响应因子，无需特定标准品。对

于校准中未包含的元素，可根据邻近元素的实测响应计算出相对响应因子。这些准确的响应因子结合氦气碰撞池模式来控制多原子离子，确保 IntelliQuant 即使处理未校准分析物也能提供高质量数据。

IntelliQuant 元素周期表热力图展示

元素周期表热力图可提供样品中所有元素浓度清晰直观的概览，从而实现快速的数据评估。计算并显示除指定为内标的元素外所有其他可测量元素的半定量浓度。

图 1 显示从甜甜圈磨粉样品采集的 IntelliQuant 元素周期表热力图^[4]。热力图显示包括了样品中存在的所有元素，而非仅是校准标样中包含的元素。热力图显示有高浓度 Ti (包装配方中的食品添加剂“TiO₂”)。在本例中，定量测量中未选择 Ti，但从 IntelliQuant 热力图显示中可清楚看到高浓度的 Ti。

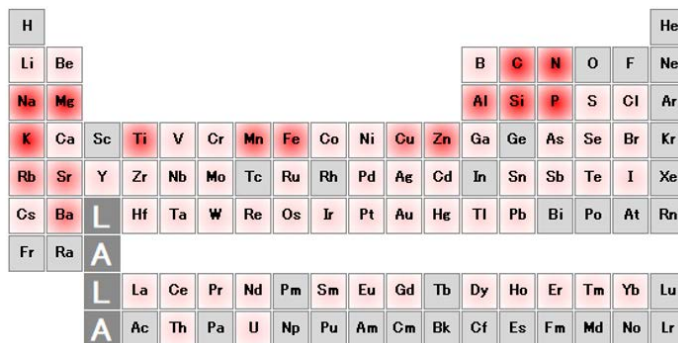


图 1. 从甜甜圈粉状样品中采集的 ICP-MS IntelliQuant 数据元素周期表热力图。颜色强度表示样品中元素的浓度，即红色越深，元素的浓度越高

IntelliQuant 数据还可通过未检出应该存在的元素（反之亦然），帮助确定样品前处理错误。样品前处理错误会导致某些元素消解不充分或稳定性降低，进而影响结果的质量。例如，在样品前处理过程中，通常会向样品中添加 HCl 稳定 Hg、Ag、Sn、Sb 和 Mo 等分析物。IntelliQuant 热力图显示中如果不存在 Cl，可快速表明样品中可能忘记添加 HCl。

异常结果

在安捷伦 ICP-MS 系统上使用的标准氦气碰撞模式成功解决了会影响常见样品中多种分析物的多原子离子重叠问题。而并非所有 ICP-MS 方法都可以采用氦气碰撞模式，并且其他非多原子重叠也会导致误差，特别是面对新型或不常见的样品类型时容易出现。在这些情况下，IntelliQuant 的异常值显示功能使用户无需高水平的 ICP-MS 专业知识，即可识别潜在的误差来源。IntelliQuant 异常结果可显示在结果表格或周期表视图中，如图 2 所示。

图 2. 彩色标记的异常值标记可指示出可能由于其他质量数的强信号导致光谱重叠的分析物

识别为可能受其他样品成分影响的任何分析物质量数会用彩色标记在数据表中，并在周期表中突出显示，方便快速识别。异常值标记基于分析物质量数和潜在干扰源的相对强度，因此可指示出潜在重叠而非确定的干扰。IntelliQuant 可扫描整个质谱范围，检查潜在的双电荷离子、相邻质量数和多原子重叠。通过利用这些异常值标记，用户可采取谨慎的方法，以保证数据可靠性。这些标记可提示用户查看并确认任何可能受异常基质成分影响的结果，从而确保不会遗漏假阳性结果。

在图 2 所示的示例中，以黄色突出显示的 Al 和 La 表示存在比分析物质量数低 16 u 的强信号，表明可能出现残留氧化物重叠。同样，As、Se 和 Zr 上的粉红色阴影表明存在比分析物质量数低 40 u 的强信号，表示可能出现残留氦化物重叠。其他干扰类型（如二聚体和双电荷离子）也采用类似的彩色标记。将鼠标悬停在元素上可获得“工具提示”提供的更多信息。

测定样品中的固体含量

总基质固体 (TMS) 功能利用 IntelliQuant 数据计算每个样品的近似固体水平。计算不包括气体或溶剂元素，例如 Ar、N、O、C、P、S 和卤化物，以确保获得更准确的结果。

TMS 是用于新型或异常样品类型方法开发的强大工具，可快速评估代表性样品的总基质含量。TMS 还可以用于追踪样品引入消耗品和接口锥上的载样量，有助于计划日常维护。7850 ICP-MS 的用户还可使用早期维护反馈 (EMF) 传感器和计数器，根据运行时间或测量的样品数量确定何时需要维护^[5]。

安捷伦 ICP-MS 系统的常规运行具有良好的等离子体稳定性 (较低 CeO/Ce 比)，因此可轻松耐受大多数常规 ICP-MS 样品的溶解态固体含量。而由于样品粘度的差异，过高的基质浓度会改变样品的吸收和雾化过程，引起信号变化。在图 3 所示的示例中，样品 4 和样品 5 中的内标信号较低，表明这些样品中存在基质效应。内标将纠正这些灵敏度变化，避免影响数据准确性。但内标的变化是实用的诊断工具，在分析未知样品批次时更是如此。对于引起较低内标信号的样品，TMS 数据可以提供更多信息。这两个样品的 TMS 数据 (图 4) 表明，两个样品的基质浓度均远高于其他样品，约为 1% (10000 ppm)。分析人员可以利用这些信息，决定是否标记这些样品类型，以便对之后的批次进行稀释，或者使用 UHMI 系统以更高的气溶胶稀释率运行样品^[6,7]。

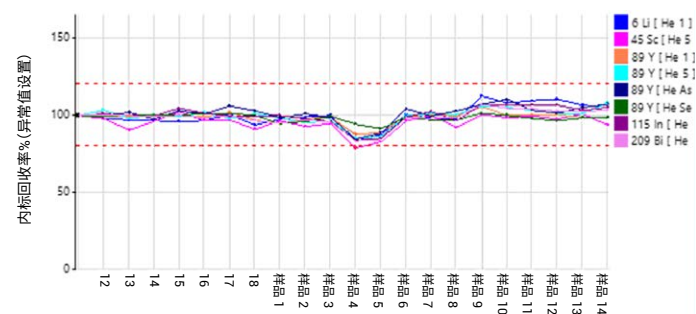


图 3. 不同基质样品批次的内标回收率图

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

图 4. 8 个样品的 TMS 数据，其中显示样品 4 和样品 5 的基质浓度较高

半定量结果

IntelliQuant 可为样品中多达 78 种元素提供半定量数据，包括完全定量方法中的所有元素以及校准溶液中未包含的元素。通过提供每种元素的半定量数据，IntelliQuant 可提高结果的可靠性。这些数据对于分析完全未知的样品、调查污染问题或解决数据质量问题均非常实用。

IntelliQuant 半定量数据实用性的一个示例是避免误报 As 和 Se 等重要元素的假阳性结果。如果样品中的 REEs 浓度足够高，可能形成双电荷离子干扰，在 REE 质量数一半处与单电荷 As 和 Se 离子重叠。例如， $^{150}\text{Nd}^{2+}$ 和 $^{150}\text{Sm}^{2+}$ 会干扰 $^{75}\text{As}^+$ ， $^{156}\text{Gd}^{2+}$ 和 $^{156}\text{Dy}^{2+}$ 则会干扰 $^{78}\text{Se}^+$ 。美国食品和药物管理局 (FDA) 在 ICP-MS 的元素分析方法 (EAM) 4.7 中建议分析人员对 REEs 进行检测，以免 As 和 Se 结果出现偏差，并在需要时使用适当的干扰校正公式^[3]。

为了简化分析人员的校正过程，ICP-MS MassHunter 软件包含实用简便的“ M^{2+} 校正”流程，可自动设置校正 REE 双电荷离子干扰所需的参数^[1, 2]。

同位素指纹

由于 IntelliQuant 得到的是氦气碰撞池模式 2–260 u 的全质谱数据，因此也包含了每个元素的所有同位素数据。如果样品结果标记了异常或意外数据，可以根据天然同位素丰度模板检查快速扫描数据，以确认目标元素是否存在。为了测试此功能，使用 IntelliQuant 测量了自来水样品，并检查了峰与同位素丰度模板的符合程度，如图 5 所示。自来水样品（含 200 ppm Na）的光谱与所有测量元素的天然同位素模板（包括 ^{63}Cu 和 ^{65}Cu ）均表现良好匹配性。结果证明 7850 上配备的氦气碰撞池模式可有效消除 ^{23}Na ^{40}Ar 对 ^{63}Cu 的干扰。

在氦气碰撞池模式下测量的质谱图与同位素模板的良好匹配，可提高分析结果的可靠性，无需重新测量样品。IntelliQuant 提供了有价值的样品分析信息，有助于验证定量结果。

调谐模式 = 快速扫描: 012SMPLd

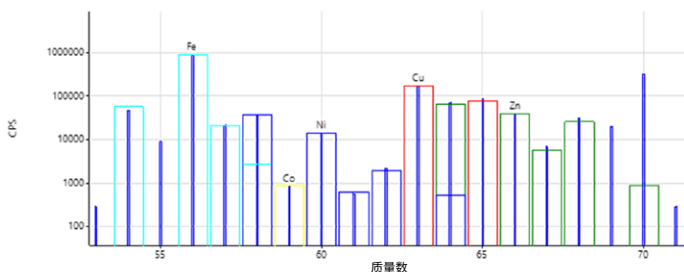


图 5. IntelliQuant 快速全扫描质谱图可通过同位素模板匹配确认分析物/基质元素的类型。在此示例中，Cu 的同位素模板表明在氦气碰撞池模式下可消除 ^{23}Na ^{40}Ar 对 ^{63}Cu 的干扰

IntelliQuant 分析示例

使用 Agilent 7850 ICP-MS 分析 NIST 1643e 水中痕量元素标准物质 (SRM)。使用低基质样品预设方法和透镜自动调谐功能以简化方法开发。在 ICP-MS MassHunter 软件中使用预设方法时，在定量测量的同时会自动采集氦气碰撞池模式下的快速扫描数据。

使用安捷伦混标溶液（部件号 5183-4688）配制定量分析校准标样。稀释安捷伦内标溶液（部件号 5188-6525）和 Ir 和 Y 的单元素标准品（购自日本 Kanto Chemicals），以配制 1 ppm 浓度的内标溶液。

用于计算响应因子的标准品中所含的分析物具有最高的半定量结果准确性。但是，即使对于标准物中不存在的元素，IntelliQuant 自动计算的内推响应因子也能恰当表明真实浓度。结果如表 1 所示，其中显示了 NIST 1643e 的 IntelliQuant 结果，根据采集过程中自动采集的 2 s 快速扫描数据计算得出。

如表 1 所示，SRM 水样中所有元素的半定量浓度结果均在参考值 $\pm 40\%$ 以内（包括未校准元素）。

表 1. 1643E SRM 水样中元素的 IntelliQuant 半定量回收率结果

元素	实测浓度 (ppb)	标准浓度 (ppb)	回收率 (%)
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

Re 的信息值。* 未包含在 1643e SRM 中，因此以 10 ppb 的浓度进行加标。

参考文献

1. Tetsuo Kubota, 使用 ISO 方法 17294-2 快速、准确地分析水中的 28 种元素：Agilent 7850 ICP-MS 可控制多原子及双电荷干扰，从而在各种水样中实现长期准确度和重现性，安捷伦出版物，[5994-2804ZHCN](#)
2. Simplifying Correction of Doubly Charged Ion Interferences with Agilent ICP-MS MassHunter: Fast, automated M^{2+} correction routine improves data accuracy for Zn, As, and Se (使用 Agilent ICP-MS MassHunter 简化双电荷离子干扰校正：使用快速自动化 M^{2+} 校正程序提高 Zn、As 和 Se 的数据准确性)，安捷伦出版物，[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 (根据 US FDA EAM 4.7 ICP-MS 方法测定食品中的关键元素，使用 IntelliQuant 数据分析扩展常规食品分析的范围)，安捷伦出版物，[5994-2839EN](#)
5. ICP-MS 仪器的智能状态检查，安捷伦出版物，[5994-2780ZHCN](#)
6. 高基质进样，安捷伦出版物，[5994-1170ZHCN](#)
7. Wim Proper, Ed McCurdy, Junichi Takahashi, 配备 UHMI 的 Agilent 7900 ICP-MS 的高盐基质分析性能：将 ICP-MS 的基质耐受性扩展至百分含量水平的总溶解态固体，安捷伦出版物，[5991-4257CHCN](#)

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

www.agilent.com

DE44138.9974421296

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，2020
2020年12月1日，中国出版
5994-2796ZHCN

