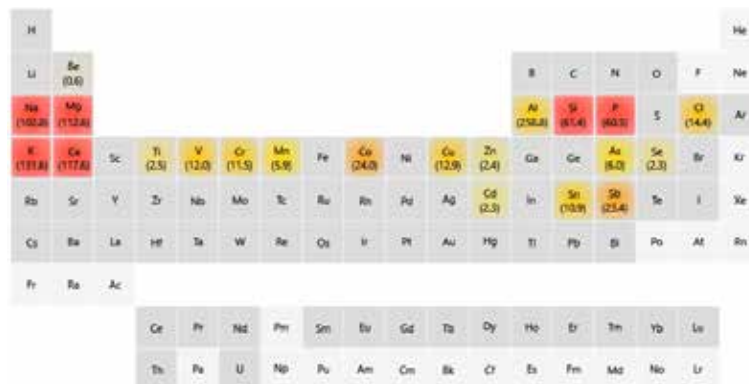


Software IntelliQuant de Agilent

Para saber más de las muestras y simplificar el desarrollo de métodos



H																	He	
Li	Be (0.6)											B	C	N	O	F	Ne	
Na (102.8)	Mg (112.4)											Al (26.98)	Si (28.08)	P (30.97)	S (32.06)	Cl (35.45)	Ar	
K (118.9)	Ca (117.8)	Sc	Ti (2.3)	V (12.0)	Cr (11.5)	Mn (5.9)	Fe (24.3)	Ni (12.9)	Zn (2.4)	Ga	Ge (5.0)	Se (2.3)	Br	Kr				
Rb	Sr	Y	Zr (2.3)	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd (2.3)	In	Sn (10.9)	Sb (23.4)	Te	I	Xe	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac																
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

Introducción

Aunque el análisis elemental cuantitativo sigue siendo la principal utilidad del instrumento ICP-OES, el análisis semicuantitativo proporciona información adicional que permite al analista obtener más información sobre sus muestras. Sin embargo, la adquisición e interpretación de datos semicuantitativos en muchos instrumentos ICP-OES puede ser tan laboriosa como la adquisición de datos totalmente cuantitativos. Los usuarios de este tipo de instrumentos ICP-OES probablemente no se dan cuenta de todo el potencial que supone la adquisición de datos semicuantitativos.

Los instrumentos ICP-OES Agilent 5800 y 5900 incluyen IntelliQuant, una potente y exclusiva herramienta de análisis semicuantitativo que permite conocer mejor el contenido elemental de la muestra. IntelliQuant se puede usar para mejorar los métodos cuantitativos tradicionales o para proporcionar resultados semicuantitativos independientes de forma rápida y con una mínima configuración.

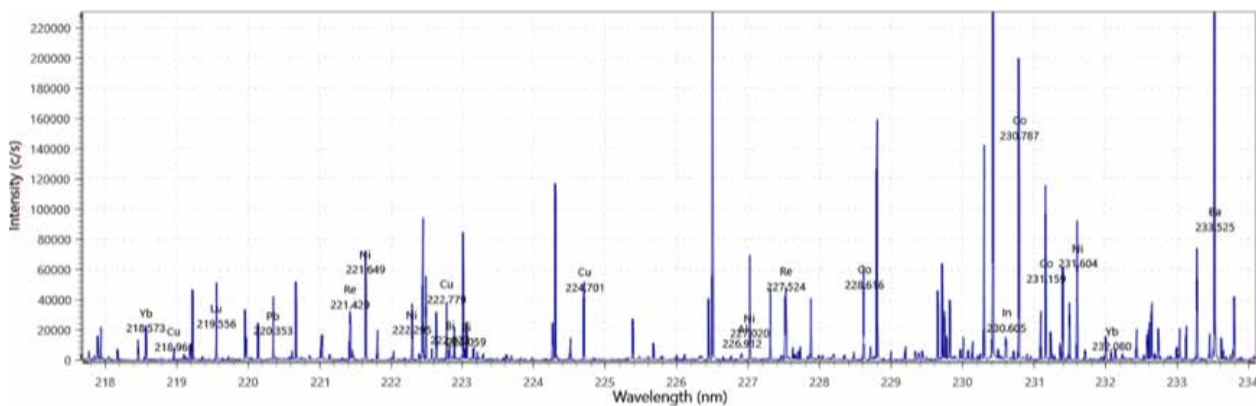


Figura 1. Sección de los datos de barrido de espectro completo adquiridos por IntelliQuant. La información proporciona útiles conocimientos analíticos sobre la muestra, lo que ayuda para el desarrollo de métodos.

¿Qué es IntelliQuant?

Como parte del software Agilent ICP Expert, IntelliQuant es una rutina rápida de adquisición de datos semicuantitativos para ICP-OES (1). IntelliQuant adquiere datos en todo el rango espectral de 167 a 785 nm para cada muestra, con lo que proporciona datos exhaustivos que no están disponibles en todos los instrumentos ICP-OES. Cuando se lleva a cabo como parte de un método cuantitativo, un barrido de IntelliQuant proporciona información rápida sobre la muestra.

La sección de un barrido de espectro completo que aparece en la Figura 1 muestra la abundancia relativa de los elementos de una muestra obtenida con IntelliQuant. Esta información se puede usar para desarrollar métodos que eviten la interferencia espectral, determinen posibles factores de dilución, ayuden en la determinación del rango de calibración para cada elemento y permitan decidir qué visión de plasma usar.

Identificación automática de elementos

Una vez obtenido un barrido de espectro completo, los avanzados algoritmos de IntelliQuant identifican los elementos que están presentes en cada muestra. No se precisa la introducción de información por parte del usuario, pues el proceso está totalmente automatizado. El algoritmo usa una base de datos de líneas de emisiones atómicas e iónicas para separar los picos de los analitos del ruido y de las interferencias.

Elección de las mejores longitudes de onda

Una vez que IntelliQuant ha medido una muestra, la función de clasificación por estrellas (Star) proporciona una lista de las mejores longitudes de onda que usar para el análisis de cada elemento presente en la muestra. También proporciona una clasificación por estrellas para cada longitud de onda con el fin de ayudar a identificar los interferentes, como se muestra en la Figura 2. Al determinar si un potencial elemento interferente está presente en una muestra, IntelliQuant facilita la selección de la longitud de onda para los informes o para ajustar un método cuantitativo. Además, los usuarios pueden evitar elaborar informes con resultados afectados por una interferencia.



Figura 2. IntelliQuant indica la mejor longitud de onda del analito con una clasificación de muchas estrellas y una marca de verificación verde. También destaca las interferencias sospechadas sobre las longitudes de onda del analito usando una clasificación de pocas estrellas. Las potenciales superposiciones espectrales se pueden identificar colocando el cursor sobre el signo de interrogación rojo.

Resultados de concentración semicuantitativos

IntelliQuant incluye calibraciones previamente medidas que se pueden usar para calcular un resultado semicuantitativo para cada elemento que se detecte en una muestra. Se proporcionan calibraciones para todos los modos de visión disponibles (axial, radial, Dual View (visión dual) vertical y Dual View (visión dual) vertical sincrónica) para asegurarse de que todos los usuarios tengan acceso a una calibración adecuada para su instrumento. Para mejorar la precisión, se pueden actualizar las calibraciones predeterminadas o existentes volviendo a medir patrones individuales o añadiendo y midiendo más patrones de calibración después de la adquisición inicial. Esta flexibilidad es esencial para aquellos usuarios que desean actualizar periódicamente la calibración solo para un subconjunto de elementos y no para todos los elementos.

Además, los usuarios pueden crear y medir con facilidad sus propias calibraciones IntelliQuant. Las calibraciones definidas por el usuario se pueden personalizar totalmente y pueden incluir cualquier conjunto de elementos medido en el rango de concentraciones deseado por el usuario.

Smart Views

La función Smart Views proporciona un modo sencillo para que los usuarios puedan filtrar sus datos de IntelliQuant de modo que solo se muestren los resultados de interés, a fin de evitar pasar por alto datos importantes. En Smart Views se pueden definir umbrales de color basados en la concentración para alertar visualmente a los usuarios sobre resultados anormalmente altos o bajos en comparación con los valores definidos por el usuario. Los usuarios también pueden elegir exactamente los resultados de qué elementos desean ver e incluso definir reglas basadas en concentraciones para seleccionar las soluciones que se muestran en la cuadrícula de resultados. Por ejemplo, si un analista analiza 500 soluciones con IntelliQuant, puede usar Smart Views para filtrar instantáneamente la lista de resultados y mostrar solo aquellas soluciones que contengan un elemento clave por encima de una concentración especificada.

Los usuarios pueden cambiar las Smart Views que se aplican a sus resultados en cualquier momento, así como crear y guardar nuevas Smart Views, incluso mientras se están adquiriendo los datos.

Información sobre la muestra con IntelliQuant

IntelliQuant aporta importante información de las muestras, que se puede usar de distintas formas, en función de los objetivos y del ámbito del análisis.

Cribado de muestras

IntelliQuant puede identificar y calcular los resultados semicuantitativos para un máximo de 70 elementos en muestras desconocidas y sin caracterizar en cuestión de segundos, por lo que resulta una herramienta ideal para el cribado de muestras. Al mostrar los resultados en una tabla periódica codificada por colores, los usuarios podrán examinar de un vistazo los elementos que están presentes en la muestra y en qué nivel de concentración (Figura 3). Al emplear la configuración predeterminada, los elementos presentes en concentraciones bajas aparecen de color amarillo, los de concentración mediana en naranja y los de alta concentración en rojo. Sin embargo, estos umbrales de concentración se pueden personalizar en Smart Views.

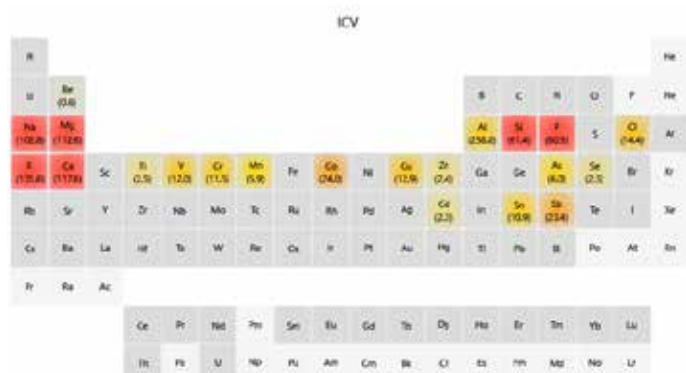


Figura 3. IntelliQuant permite a los usuarios visualizar el contenido de sus muestras y aplica la codificación por colores a los elementos detectados en función de los umbrales de concentración definidos por el usuario.

Ayuda para identificar problemas en la preparación de muestras

Se puede usar IntelliQuant para identificar problemas en la preparación de muestras. Por ejemplo, si no se añade la cantidad correcta de ácido durante la digestión de la muestra se podría realizar una digestión inadecuada, con lo que los resultados generados serían incorrectos. Este error puede resultar difícil de detectar. Sin embargo, IntelliQuant puede configurarse para que marque si los resultados de cloro son bajos en las muestras. Al realizar una comprobación rápida de los resultados de IntelliQuant, los analistas pueden identificar si hay Cl presente y saber si la digestión se ha realizado correctamente antes de que se elabore el informe de resultados. Este mismo planteamiento sirve para la mayor parte de los ácidos usados para la digestión de las muestras.

Aunque IntelliQuant es una técnica de ICP-OES, no hay ningún motivo para limitar su aplicación a muestras específicas de ICP-OES. IntelliQuant puede aportar información sobre muestras preparadas para su análisis mediante ICP-MS, AAS, cromatografía o incluso valoración.

Control de calidad de los reactivos

Una causa frecuente de variación en los resultados analíticos son las diferencias en la preparación de los reactivos de un lote a otro. Mediante el uso de IntelliQuant, los usuarios pueden comparar con facilidad el contenido de dos o más lotes de reactivos en cuanto se preparan. Las posibles diferencias se resaltarán de inmediato, de modo que los posibles problemas se puedan tratar antes de que afecten a la calidad de los resultados finales. IntelliQuant es una forma sencilla de confirmar la calidad de los reactivos usados para los análisis por ICP-OES u otras técnicas analíticas.

Simplificación en el desarrollo de métodos y ayuda para la validación de resultados

El algoritmo de IntelliQuant para evitar interferencias presenta a los usuarios información detallada sobre posibles interferencias para cada elemento detectado, a qué longitudes de onda afectan y qué longitudes de onda es probable que estén libres de interferencias.

Esta información resulta útil durante el desarrollo de métodos, pero también puede usarse como potente herramienta para ayudar con la validación de los resultados en los métodos ya establecidos. Si un usuario no está seguro sobre si un resultado de su método cuantitativo se ha visto afectado por una interferencia, IntelliQuant puede aportar información adicional. Al identificar posibles interferencias en la longitud de onda del elemento usado en el método cuantitativo, IntelliQuant permite identificar el elemento que está provocando la interferencia.

En ese caso, el usuario podrá elegir entre varios modos de tratar la interferencia. Podrá evitarla seleccionando una longitud de onda diferente o corregirla mediante la técnica de deconvolución automática de curvas (FACT) o con la corrección interelemental (IEC).

Label	Date	Al mg/L	As mg/L	Ca mg/L	Cu mg/L	Fe mg/L	K mg/L	Mg mg/L	Mn mg/L	Na mg/L	P mg/L	Pb mg/L	S mg/L	Sb mg/L	Si mg/L	Ti mg/L	Zn mg/L	Cl Unadj	N %
Soil 1	2019-08-05 12:30:30	176.23	23.44	38.35	62.19	604.17	71.31	63.13	30.82	10.52	16.73	79.87	112.95	10.52	10.50	12.29	54.48	2.44	2.36
Soil 2	2019-08-05 12:30:51	181.58	24.20	36.02	53.64	645.12	72.89	65.04	31.47	10.23	15.19	83.64	112.69	10.23	11.48	12.94	55.89	2.20	2.42
Soil 3	2019-08-05 12:31:31	187.33	24.21	38.17	53.70	657.96	73.71	66.85	33.25	10.38	14.97	83.96	114.23	10.38	10.70	15.08	54.76	2.21	2.63
Soil 4	2019-08-05 12:32:17	199.84	23.90	40.33	53.45	708.05	85.68	71.60	32.71	11.05	14.62	83.32	112.50		9.03	16.94	52.60		2.20
Soil 5	2019-08-05 12:33:23	186.25	23.49	37.04	47.33	657.96	74.23	64.89	31.31	10.49	13.55	81.71	110.29	10.49	10.92	13.98	52.00	2.49	2.51

Figura 4. Pantalla de software de un análisis de IntelliQuant, que resalta algunos problemas con la muestra "Suelo 4". Obsérvese la ausencia de Sb y Cl en esta muestra.

Ayuda para identificar incompatibilidades químicas en una muestra

Si los resultados del análisis de muestras son más bajos de lo esperado, podría haber distintas causas del error, como las incompatibilidades químicas entre los elementos de la muestra. Es posible usar IntelliQuant para identificar aquellos casos en los que las incompatibilidades químicas entre los elementos pueden suponer un problema. Por ejemplo, podría suceder que un resultado de análisis cuantitativo para el bario parezca bajo. Es posible que la muestra contenga niveles altos de sulfato, que hagan que precipite el bario antes de realizar la medida. Pudiera ser que el azufre no formara parte del método cuantitativo, pero se identifique y semicuantifique mediante un análisis de IntelliQuant. Los resultados de IntelliQuant podrían proporcionar la información necesaria para identificar el problema, evitando la inclusión de datos incorrectos en el informe final de análisis de muestras.

Ejemplo de análisis

En el ejemplo siguiente, se digirieron cinco réplicas de una muestra de suelo con agua regia y se analizaron mediante un sistema ICP-OES Agilent 5900 SVDV e IntelliQuant. Los resultados de concentración semicuantitativos para todos los elementos detectados en las muestras duplicadas muestran una buena reproducibilidad en todos los casos, salvo para algunos elementos en la muestra Soil 4.

Para filtrar los resultados, se utilizó la rutina Smart Views.

En la Figura 4 se muestran los resultados para los elementos de interés más importantes en suelos. La cuadrícula de resultados marca un problema con el Sb y el Cl en la muestra Suelo 4. La ausencia de Cl sugiere que la muestra no se preparó correctamente, pues seguramente se usó ácido nítrico solamente en lugar de agua regia.

Mediante el uso de IntelliQuant es posible obtener esta información sobre la muestra con un par de clics del ratón. IntelliQuant con Smart Views permite al usuario identificar de forma rápida y sencilla resultados anómalos e investigarlos antes de generar un informe con datos incorrectos.

Referencia

1. Agilent ICP Expert Software: Powerful software with smart tools for ICP-OES, publicación de Agilent, 5994-1517EN