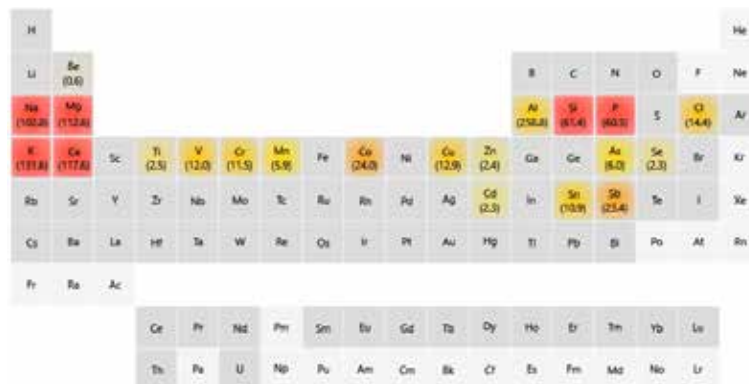


Logiciel Agilent IntelliQuant

Pour une meilleure connaissance des échantillons
et une simplification du développement de méthodes



H																	He	
Li	Be (9.0)											B	C	N	O	F	Ne	
Na (22.99)	Mg (24.3)											Al (26.98)	Si (28.08)	P (30.97)	S (32.06)	Cl (35.45)	Ar	
K (39.09)	Ca (40.08)	Sc	Ti (47.88)	V (50.94)	Cr (52.00)	Mn (54.94)	Fe (55.85)	Cu (63.55)	Ni (58.71)	Zn (65.38)	Ga	Ge (72.64)	As (74.92)	Se (78.96)	Br	Kr		
Rb	Sr	Y	Zr (91.22)	Nb (92.91)	Mo (95.94)	Tc	Ru (101.07)	Rh (102.91)	Pd (106.42)	Ag (107.87)	Cd (112.41)	In	Sn (118.71)	Sb (121.76)	Te (127.60)	I	Xe	
Cs	Ba	La	Hf (178.49)	Ta (180.95)	W (183.84)	Re	Os (190.23)	Ir (192.22)	Pt (195.08)	Au (196.97)	Hg (200.59)	Tl (204.38)	Pb (207.2)	Bi (208.98)	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		

Introduction

Alors que les instruments d'ICP-OES sont principalement utilisés pour l'analyse élémentaire quantitative, l'analyse semi-quantitative fournit des informations supplémentaires, permettant à l'analyste d'en savoir plus sur ses échantillons. Cependant, la collecte et l'interprétation de données semi-quantitatives sur de nombreux instruments d'ICP-OES peuvent être aussi chronophages que la collecte de données quantitatives. Les utilisateurs de ces types d'instruments ICP-OES ne réalisent probablement pas tout le potentiel que représente l'acquisition de données semi-quantitatives.

Les instruments ICP-OES Agilent 5800 et 5900 incluent l'IntelliQuant, un outil d'analyse semi-quantitative dédié et puissant qui vous permet de mieux comprendre le contenu élémentaire de votre échantillon. IntelliQuant peut être utilisé pour améliorer les méthodes quantitatives traditionnelles ou pour fournir rapidement des résultats semi-quantitatifs individuels avec une configuration minimale.

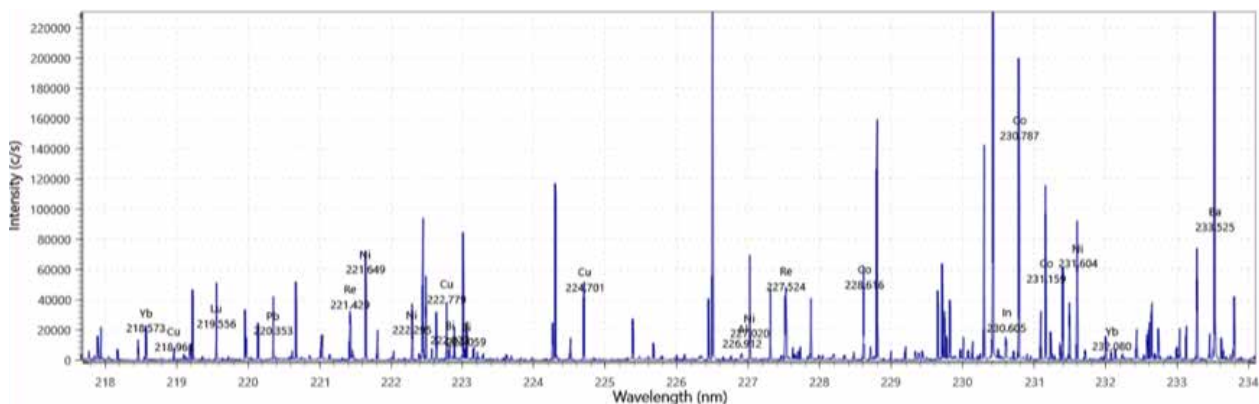


Figure 1. Section des données du scan du spectre complet collectées par IntelliQuant. Les données fournissent des informations analytiques utiles sur l'échantillon, simplifiant le développement de méthodes.

Qu'est-ce qu'IntelliQuant ?

Intégré au logiciel ICP Expert Agilent, IntelliQuant est une routine d'acquisition rapide de données semi-quantitatives pour l'ICP-OES (1). IntelliQuant collecte des données pour chaque échantillon sur l'ensemble du domaine spectral, de 167 à 785 nm, permettant ainsi de fournir des données complètes qui ne sont pas disponibles avec tous les instruments ICP-OES. Lorsqu'un balayage IntelliQuant est effectué dans le cadre d'une méthode quantitative, il fournit un aperçu rapide de l'échantillon.

La section d'un scan du spectre entier illustrée sur la Figure 1 montre l'abondance relative des éléments présents dans un échantillon obtenue à l'aide d'IntelliQuant. Ces informations peuvent être utilisées pour développer des méthodes qui évitent d'avoir des interférences spectrales, pour déterminer les facteurs possibles de dilution, pour aider à déterminer la gamme d'étalonnage pour chaque élément, et pour savoir quelle visée de plasma utiliser.

Identification automatique des éléments

Une fois qu'un scan du spectre complet est collecté, les algorithmes intelligents d'IntelliQuant identifient les éléments présents dans chaque échantillon. Aucune intervention de l'utilisateur n'est nécessaire, car le processus est entièrement automatisé. Les algorithmes utilisent une base de données de raies d'émission atomique et ionique pour séparer les pics des composés du bruit et des interférences.

Choix des meilleures longueurs d'onde

Une fois que l'échantillon a été mesuré par IntelliQuant, la fonction de classement par étoiles fournit une liste des meilleures longueurs d'onde à utiliser pour l'analyse de chaque élément présent dans l'échantillon. Elle attribue également un classement par étoiles à chaque longueur d'onde pour aider à identifier les interférents, comme le montre la Figure 2. En déterminant si un élément interférent potentiel est présent dans un échantillon, IntelliQuant facilite la sélection de la longueur d'onde pour le compte-rendu ou le réglage d'une méthode quantitative. De plus, les utilisateurs peuvent éviter de rapporter des résultats qui ont été affectés par une interférence.



Figure 2. IntelliQuant indique la meilleure longueur d'onde pour un composé en lui attribuant un classement par étoiles élevé et une coche verte. Il met également en évidence des interférences suspectes sur les longueurs d'onde des composés en attribuant à un classement par étoiles faible. D'éventuels recouvrements spectraux peuvent être identifiés en passant le curseur au-dessus du point d'interrogation rouge.

Résultats de concentration semi-quantitatifs

IntelliQuant inclut des étalonnages prémésurés pouvant être utilisés pour calculer un résultat semi-quantitatif pour chaque élément détecté dans un échantillon. Les étalonnages sont fournis pour tous les modes de visée disponibles (visée axiale, visée radiale, double visée verticale et double visée verticale simultanée) pour garantir l'accès à tous les utilisateurs à un étalonnage par défaut adapté à leur instrument. Pour améliorer l'exactitude, des étalonnages par défaut ou existants peuvent être mis à jour en mesurant à nouveau des étalons individuels ou en ajoutant et en mesurant plus de solutions étalons après la collecte initiale. Cette flexibilité est essentielle pour les utilisateurs qui veulent régulièrement mettre à jour l'étalonnage pour un groupe d'éléments uniquement, plutôt que pour tous les éléments.

De plus, les utilisateurs peuvent facilement créer et mesurer leurs propres étalonnages IntelliQuant. Les étalonnages définis par l'utilisateur peuvent être personnalisés et peuvent inclure n'importe quel ensemble d'éléments mesurés sur la gamme de concentrations souhaitée par l'utilisateur.

Smart Views

La fonction Smart Views fournit un moyen simple aux utilisateurs de filtrer leurs données IntelliQuant afin d'afficher uniquement les résultats qui les intéressent, ce qui évite de négliger des informations importantes sur les données. Les seuils de couleurs basés sur la concentration peuvent être définis dans Smart Views pour alerter visuellement les utilisateurs sur des résultats anormalement élevés ou faibles par rapport aux valeurs définies par l'utilisateur. Les utilisateurs peuvent aussi choisir exactement les résultats des éléments qu'ils souhaitent visualiser et peuvent même définir les règles basées sur la concentration pour sélectionner les solutions à afficher dans le tableau de résultats. Par exemple, si un opérateur analyse 500 solutions à l'aide d'IntelliQuant, il peut utiliser les Smart Views pour filtrer instantanément la liste des résultats pour n'afficher que les solutions qui contiennent un élément clé au-dessus d'une concentration spécifiée.

Les utilisateurs peuvent à tout moment modifier les Smart Views appliquées à leurs résultats ou créer et enregistrer une nouvelle Smart Views, même pendant la collecte des données.

Expertise des échantillons avec IntelliQuant

IntelliQuant fournit des informations importantes sur les échantillons qui peuvent être utilisées de différentes manières, selon les objectifs et la portée de l'analyse.

Screening d'échantillon

IntelliQuant peut identifier et calculer des résultats semi-quantitatifs pour un maximum de 70 éléments dans des échantillons inconnus et non caractérisés en quelques secondes, ce qui en fait un outil idéal de screening d'échantillons. En affichant les résultats dans un tableau périodique avec des codes couleur, les utilisateurs peuvent voir en un coup d'œil les éléments présents dans l'échantillon et leur concentration (Figure 3). En utilisant les paramètres par défaut, les éléments présents en faible concentration sont colorés en jaune, en concentration moyenne en orange et en concentration élevée en rouge. Toutefois, ces seuils de concentration peuvent être personnalisés dans Smart Views.

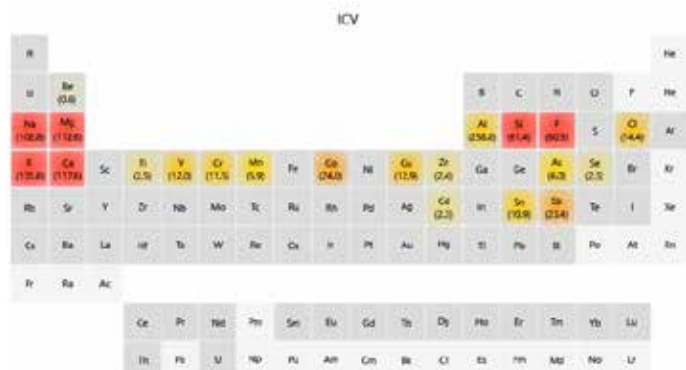


Figure 3. IntelliQuant permet aux utilisateurs de visualiser le contenu de leurs échantillons et applique un code couleur pour détecter les éléments en fonction des seuils de concentration définis par l'utilisateur.

Aide pour identifier les problèmes de préparation d'échantillons

IntelliQuant peut être utilisé pour identifier des problèmes de préparation d'échantillons. Par exemple, le fait de ne pas ajouter la bonne quantité d'un acide pendant la minéralisation de l'échantillon peut entraîner une minéralisation d'échantillon potentiellement inadéquate et générer des résultats incorrects. Cette erreur peut être difficile à détecter. Cependant, IntelliQuant peut être paramétré pour signaler des résultats de faible teneur en chlore dans des échantillons. En vérifiant rapidement les résultats d'IntelliQuant, les analystes peuvent identifier si du Cl est présent et savoir que la minéralisation a été effectuée correctement avant que les résultats soient communiqués. La même approche est adaptée pour la plupart des acides utilisés pour la minéralisation des échantillons.

Bien qu'IntelliQuant soit une technique d'ICP-OES, il n'y a pas de raison de limiter son application aux échantillons spécifiques à l'ICP-OES. IntelliQuant peut fournir des informations sur les échantillons qui ont été préparés pour une analyse par ICPMS, par spectrométrie d'absorption atomique, par chromatographie ou même par titrage.

Contrôle-qualité des réactifs

Les différences dans la préparation entre les lots d'un réactif sont une cause courante de variation des résultats analytiques. Avec IntelliQuant, les utilisateurs peuvent facilement comparer le contenu de deux lots de réactifs ou plus dès qu'ils sont préparés. Toutes les différences sont instantanément mises en évidence, ce qui permet de résoudre des problèmes éventuels avant qu'ils n'aient un effet sur la qualité des résultats finaux. IntelliQuant est un moyen simple de confirmer la qualité des réactifs utilisés pour les analyses par ICP-OES ou pour d'autres techniques analytiques.

Simplification du développement de méthodes et assistance avec la validation des résultats

L'algorithme d'IntelliQuant permettant d'éviter les interférences présente des informations détaillées aux utilisateurs sur les interférences possibles pour chaque élément détecté, sur les longueurs d'onde qu'elles affectent et les longueurs d'onde susceptibles d'être exemptes d'interférences.

Ces informations sont utiles pendant le développement de méthodes, mais elles peuvent être également utilisées comme outil puissant pour faciliter la validation des résultats dans des méthodes établies. Si un utilisateur n'est pas sûr qu'un résultat ait été affecté par une interférence dans sa méthode quantitative, IntelliQuant peut fournir des informations supplémentaires.

En identifiant les interférences probables sur la longueur d'onde de l'élément utilisé dans la méthode quantitative, IntelliQuant peut identifier l'élément qui cause l'interférence.

L'utilisateur peut alors choisir de traiter l'interférence de plusieurs manières différentes. Il peut l'éviter en sélectionnant une longueur d'onde différente ou la corriger en utilisant la technique de déconvolution spectrale automatisée (FACT) ou la correction inter éléments (CIE).

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

Figure 4. Écran du logiciel provenant d'une analyse d'IntelliQuant, mettant en évidence certains problèmes avec « Soil 4 ». Notez l'absence de Sb et de Cl dans cet échantillon.

Aide pour identifier les incompatibilités chimiques dans un échantillon

Lorsque les résultats d'analyse d'un échantillon sont moins bons qu'attendu, il peut y avoir plusieurs causes d'erreur, notamment des incompatibilités chimiques entre les éléments présents dans l'échantillon. IntelliQuant peut être utilisé pour identifier le moment où des incompatibilités chimiques entre éléments peuvent être un problème potentiel. Par exemple, un résultat d'analyse quantitative pour le baryum peut sembler faible. Il est possible que des niveaux élevés de sulfate dans l'échantillon peuvent causer la précipitation du baryum avant de commencer la mesure. Le soufre ne fait peut-être pas partie de la méthode quantitative, mais il est identifié et semi-quantifié par une analyse IntelliQuant. Les résultats IntelliQuant fournissent toutes les informations nécessaires pour identifier le problème, en évitant d'avoir des données incorrectes dans le rapport d'analyse de l'échantillon final.

Exemple d'analyse

Dans l'exemple suivant, cinq aliquots d'un échantillon de sol ont été minéralisés en utilisant de l'eau régale et analysées à l'aide de l'ICP-OES à double visée verticale simultanée Agilent 5900 et d'IntelliQuant. Les résultats de concentration semi-quantitatifs pour tous les éléments détectés dans les duplicats de l'échantillon montrent une bonne répétabilité dans tous les cas, à l'exception de certains éléments de l'échantillon « Soil 4 ».

La routine Smart Views a été utilisée pour filtrer les résultats. La Figure 4 a été élaborée pour rendre compte des résultats des éléments d'intérêt les plus importants présents dans le sol. La grille de résultats signale un problème avec Sb et Cl dans l'échantillon « Soil 4 ». L'absence de Cl suggère que l'échantillon a été mal préparé, en utilisant uniquement de l'acide nitrique au lieu de l'eau régale.

En utilisant IntelliQuant, il est possible d'obtenir ce type d'information sur l'échantillon en seulement un ou deux clics de souris. IntelliQuant avec Smart Views permet à l'utilisateur d'identifier rapidement et facilement des résultats anormaux et de les étudier avant que toute donnée incorrecte soit rapportée.

Référence

1. Logiciel ICP Expert Agilent : Powerful software with smart tools for ICP-OES, Agilent publication, 5994-1517EN

www.agilent.com/chem

Ces renseignements peuvent être modifiés sans préavis.

© Agilent Technologies, Inc. 2019
Imprimé aux États-Unis, le 15 novembre 2019
5994-1516FR