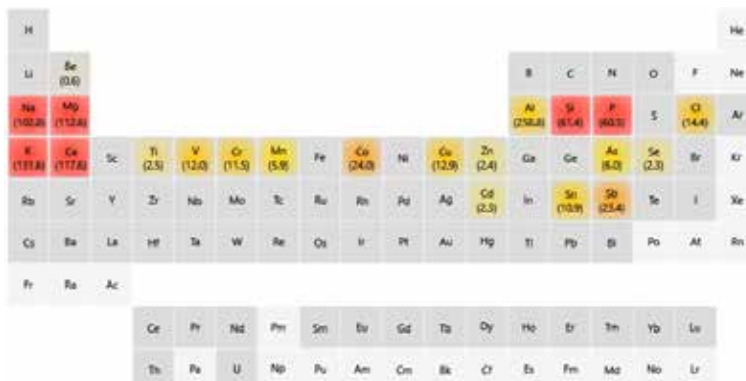


Software IntelliQuant Agilent

Informazioni più approfondite sui campioni e semplificazione dello sviluppo di metodi



H																	He	
Li	Be (9.0)											B	C	N	O	F	Ne	
Na (22.99)	Mg (24.31)											Al (26.98)	Si (28.09)	P (30.97)	S (32.07)	Cl (35.45)	Ar	
K (39.10)	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 (114.82)	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		

Introduzione

Sebbene la strumentazione ICP-OES sia essenzialmente impiegata per l'analisi elementare quantitativa, l'analisi semiquantitativa fornisce informazioni extra che offrono all'analista una conoscenza più approfondita dei campioni. Sfortunatamente, la raccolta e l'interpretazione di dati semiquantitativi con molti strumenti ICP-OES possono richiedere tempi lunghi tanto quelli necessari per la raccolta di dati completamente quantitativi. Chi impiega questi tipi di strumenti ICP-OES forse non sfrutta appieno l'intero potenziale dell'acquisizione di dati semiquantitativi.

Gli strumenti ICP-OES 5800 e 5900 Agilent includono IntelliQuant, un potente strumento dedicato per l'analisi semiquantitativa che permette una migliore comprensione del contenuto elementare del campione. IntelliQuant può essere utilizzato per migliorare i metodi quantitativi tradizionali o per generare risultati semiquantitativi indipendenti in modo rapido e con una configurazione minima.

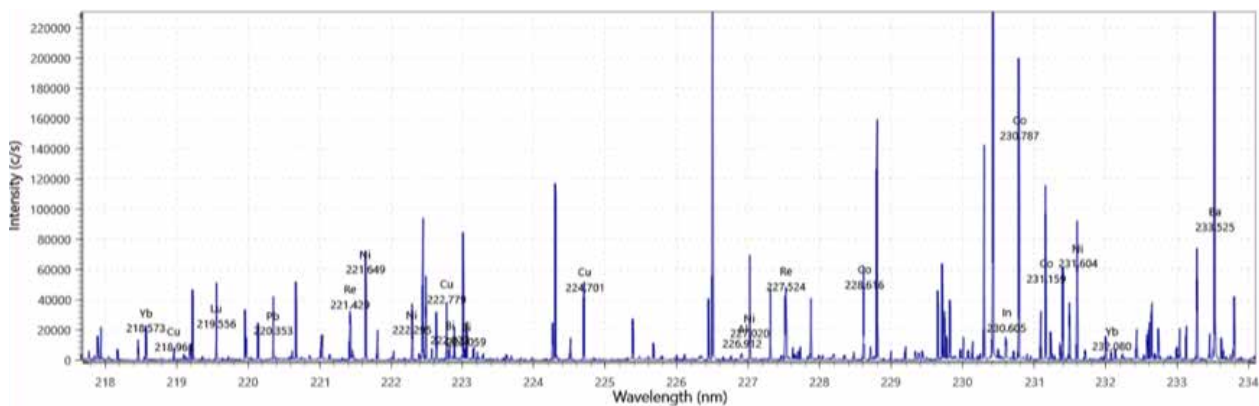


Figura 1. Sezione dei dati di scansione in full spectrum raccolti da IntelliQuant. Questi dati si traducono in preziose informazioni di natura analitica, che sono di ausilio nello sviluppo di metodi.

Cos'è IntelliQuant?

Parte integrante del software Agilent ICP Expert, IntelliQuant è una routine di acquisizione rapida di dati semiquantitativi per ICP-OES (1). IntelliQuant raccoglie dati sull'intero intervallo spettrale tra 167 e 785 nm per ogni campione, fornendo dati esaustivi che non tutti gli strumenti ICP-OES sono in grado di produrre. Se viene eseguita nell'ambito di un metodo quantitativo, una scansione IntelliQuant offre rapidamente informazioni preziose sul campione.

La sezione di una scansione in full spectrum in Figura 1 mostra l'abbondanza relativa degli elementi in un campione ottenuta tramite IntelliQuant. Queste informazioni possono essere usate per sviluppare metodi che evitano l'interferenza spettrale, determinare i possibili fattori di diluizione, agevolare la determinazione dell'intervallo di calibrazione per ogni elemento e scegliere quale visione del plasma usare.

Identificazione automatica degli elementi

Dopo l'acquisizione di una scansione in full spectrum, gli algoritmi avanzati di IntelliQuant identificano gli elementi presenti in ogni campione. Non è necessario alcun input da parte dell'utilizzatore in quanto il processo è completamente automatizzato. Gli algoritmi usano un database di linee di emissione ionica e atomica per separare i picchi degli analiti da rumore e interferenze.

Scelta delle lunghezze d'onda ottimali

Una volta che un campione è stato misurato con IntelliQuant, la funzionalità di classificazione a stelle fornisce un elenco delle migliori lunghezze d'onda da usare per l'analisi di ogni elemento presente nel campione. La classificazione a stelle assegnata a ciascuna lunghezza d'onda aiuta, inoltre, a identificare gli interferenti, come mostrato in Figura 2. Determinando se un potenziale elemento interferente è presente o meno in un campione, IntelliQuant semplifica nettamente la scelta della lunghezza d'onda da usare nei report o da impiegare per regolare un metodo quantitativo. Inoltre, gli utilizzatori possono evitare di riportare risultati che sono affetti da interferenza.



Figura 2. IntelliQuant indica la lunghezza d'onda migliore per l'analita con un alto numero di stelle e un segno di spunta verde. Inoltre, se sospetta la presenza di interferenze, le evidenzia assegnando un basso numero di stelle alle lunghezze d'onda interessate dell'analita. Per identificare le potenziali sovrapposizioni spettrali è possibile passare il mouse sul punto di domanda rosso.

Risultati semiquantitativi della concentrazione

IntelliQuant include calibrazioni pre-misurate utilizzabili per calcolare un risultato semiquantitativo per ogni elemento rilevato in un campione. Sono fornite calibrazioni per tutte le modalità di visione disponibili (assiale, radiale, dual view con torcia verticale e dual view sincrono con torcia verticale) in modo che tutti gli utilizzatori abbiano accesso ad una calibrazione predefinita adeguata per lo strumento in uso. Per migliorare l'accuratezza è possibile aggiornare le calibrazioni predefinite o esistenti ripetendo la misura su singoli standard oppure aggiungendo e misurando altri standard di calibrazione dopo la raccolta iniziale. Questa flessibilità è fondamentale per gli utilizzatori che desiderano aggiornare con regolarità la calibrazione solo per un sottoinsieme di elementi, anziché per tutti.

Gli utilizzatori, inoltre, possono creare e misurare facilmente calibrazioni IntelliQuant personalizzate. Le calibrazioni definite dall'utilizzatore possono essere completamente personalizzate e includere qualsiasi insieme di elementi misurati sull'intervallo di concentrazione desiderato dall'utilizzatore.

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. Schermata software di un'analisi IntelliQuant che mette in luce alcuni problemi che interessano il campione "Soil 4". Si noti l'assenza di Sb e Cl nel campione.

Aiuto nell'identificazione di incompatibilità chimiche in un campione

Se i risultati dell'analisi del campione sono inferiori a quelli attesi, le cause dell'errore possono essere molteplici e includere le incompatibilità chimiche tra elementi nel campione.

IntelliQuant può essere utilizzato per individuare i potenziali problemi di incompatibilità chimiche tra elementi. Per esempio, il risultato di un'analisi quantitativa del bario può sembrare basso. È possibile che alti livelli di solfato nel campione abbiano provocato la precipitazione del bario prima che fosse possibile eseguire la misura. Lo zolfo poteva non far parte del metodo quantitativo ma l'analisi IntelliQuant lo identifica e ne fornisce una valutazione semiquantitativa. I risultati IntelliQuant fornirebbero tutte le informazioni necessarie a individuare il problema, evitando così l'inserimento di dati errati nel report finale di analisi del campione.

Esempio di analisi

Nell'esempio che segue, cinque replicati di un campione di terreno sono stati digeriti con acqua regia e analizzati con un sistema ICP-OES Agilent 5900 SVDV e IntelliQuant. In tutti i casi, i risultati semiquantitativi della concentrazione per tutti gli elementi rilevati nei campioni in duplicato evidenziano una buona ripetibilità, con l'eccezione di alcuni elementi del campione Soil 4.

Per filtrare i risultati è stata usata la routine Smart Views.

La Figura 4 è stata sviluppata per riportare i risultati per gli elementi di interesse più importanti nel terreno. Nella griglia dei risultati è segnalato un problema che riguarda Sb e Cl nel campione Soil 4. L'assenza di Cl suggerisce che il campione non è stato preparato correttamente, ossia è stato impiegato solo acido nitrico anziché acqua regia.

Utilizzando IntelliQuant è possibile ottenere questo tipo di informazioni cruciali sul campione semplicemente con un paio di clic del mouse. IntelliQuant abbinato a Smart Views consente all'utilizzatore di identificare rapidamente e facilmente i risultati anomali e di cercarne le cause prima di pubblicare dati errati.

Bibliografia

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

www.agilent.com/chem

Le informazioni fornite possono variare senza preavviso.

© Agilent Technologies, Inc. 2019
Stampato negli Stati Uniti, 15 novembre 2019
5994-1516ITE