

## Agilent IntelliQuant 소프트웨어

보다 우수한 시료 인사이트 및 간소화된 분석법 개발

H																	He	
Li	Be (0.6)											B	C	N	O	F	Ne	
Na (102.8)	Mg (112.6)											Al (258.8)	Si (61.4)	P (60.5)	S	Cl (14.4)	Ar	
K (131.6)	Ca (117.6)	Sc	Ti (2.5)	V (12.0)	Cr (11.5)	Mn (5.9)	Fe	Co (24.0)	Ni	Cu (12.9)	Zn (2.4)	Ga	Ge	As (6.0)	Se (2.3)	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	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		

### 서론

정량 원소 분석은 여전히 ICP-OES 기기의 주요 용도 중 하나이지만, 반정량 분석 역시 분석자들의 시료 파악에 도움이 되는 추가 정보를 제공합니다. 그러나 많은 ICP-OES 기기에서 반정량 데이터를 수집하고 해석하는 것은 전체 정량 데이터만큼이나 시간 소모적인 작업입니다. 이러한 종류의 ICP-OES 기기를 보유한 사용자들은 아마도 반정량 데이터 수집의 잠재력을 최대한 발굴해내지 못하고 있을 것입니다.

Agilent 5800 및 5900 ICP-OES 기기에는 시료의 원소 함량을 더 잘 파악할 수 있도록 하는 고유하고 강력한 성능의 반정량 분석 도구, IntelliQuant가 내장되어 있습니다. IntelliQuant는 전통적인 정량 분석법 개선에 사용되거나, 최소한의 설정으로 독립적인 반정량 결과를 빠르게 얻게 하는 도구로 사용될 수 있습니다.

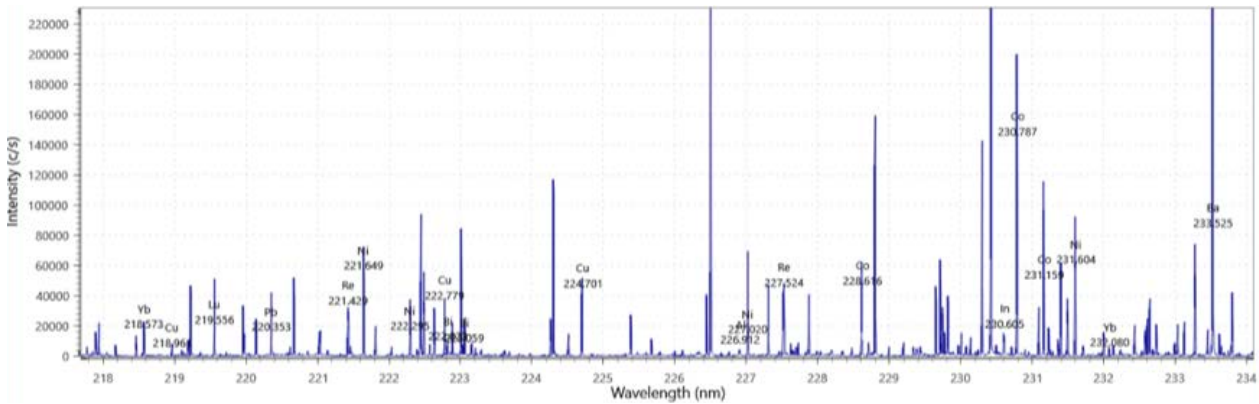


그림 1. IntelliQuant에서 수집한 전체 스펙트럼 스캔 데이터의 섹션. 해당 정보는 시료에 유용한 분석 인사이트를 제공함으로써 분석법 개발을 돕습니다.

## IntelliQuant는 무엇입니까?

Agilent ICP Expert 소프트웨어의 IntelliQuant 기능은 ICP-OES(1)를 위한 가장 빠른 반정량 데이터 수집 방식입니다. IntelliQuant는 모든 시료의 167~785nm 전체 스펙트럼 범위에서 데이터를 수집하며, ICP-OES 기기에서는 지원하지 않는 통합적인 데이터를 제공합니다. 정량 분석법의 일부로 IntelliQuant 스캔을 적용할 때 보다 신속하게 시료 인사이트를 제공합니다.

그림 1에 표시된 전체 스펙트럼 스캔의 섹션은 IntelliQuant에서 얻어진 시료 내 원소의 상대 함량비를 보여줍니다. 이 정보는 스펙트럼 간섭을 피하는 분석법을 개발하고, 가능한 희석 인자를 확정하며, 각 원소의 검량 범위 및 사용할 플라즈마 보기모드를 선택하는 데 도움을 줍니다.

### 자동 원소 식별

전체 스펙트럼 스캔이 수집된 후, 고급 IntelliQuant 알고리즘은 각 시료에 포함된 원소를 식별합니다. 절차는 자동으로 진행되므로 수동 입력이 필요하지 않습니다. 알고리즘은 원소 및 이온 방출선의 데이터베이스를 사용하여 분석물질 피크를 노이즈 및 간섭과 분리합니다.

### 최적의 파장 선택

IntelliQuant로 시료 측정을 마치면, 별표 등급 표시 기능은 시료 내 모든 원소 분석에 사용할 최적의 파장 목록을 제공합니다. 이는 또한 그림 2에 나와 있는 것처럼, 각 파장에 별표 등급을 매겨 간섭물질 식별을 지원합니다. IntelliQuant는 시료 내에 잠재적인 간섭 원소가 존재하는지를 측정함으로써, 보고를 위한 파장 선택 또는 정량 분석법 조절을 훨씬 쉽게 만들어줍니다. 또한 간섭의 영향을 받은 결과를 보고하는 것을 방지할 수 있습니다.

### Cd

✓	214.439	★★★★★
	226.502	★★★
	228.802	★★★ ?
	361.051	★
	326.105	★★
	508.582	★

Analyte: Cd(228.802)  
 Confidence: moderate  
 Interference: As(228.812)  
 Confidence: strong

그림 2. IntelliQuant는 높은 별표 등급 표시 및 녹색 체크 표시로 최적의 분석물질 파장을 나타냅니다. 또한 분석물질 파장에서 간섭물질로 의심되는 성분을 낮은 별표 등급으로 강조하여 보여줍니다. 잠재적 스펙트럼 오버레이는 빨간색 물음표로 식별할 수 있습니다.

### 반정량 농도 결과

IntelliQuant는 시료에서 검출된 모든 원소의 반정량 결과를 계산하는 데 사용될 수 있는 사전 측정된 검량을 포함하고 있습니다. 검량은 사용 가능한 모든 보기 모드(axial, radial, Vertical Dual View, Synchronous Vertical Dual View)에 적용할 수 있어 모든 사용자가 각자의 기기에 적합한 기본 검량에 액세스할 수 있도록 합니다. 정확도를 향상하기 위해, 개별 표준물질 재측정 또는 초기 수집 이후 추가로 검량 표준물질을 측정하는 것을 통해 기본 또는 기존의 검량을 업데이트할 수 있습니다. 이러한 유연성은 모든 원소가 아닌 특정 원소 subset의 검량만을 정기적으로 업데이트하길 원하는 사용자들에게 매우 중요합니다.

또한 사용자들은 보다 쉽게 맞춤형 IntelliQuant 검량을 생성하고 측정할 수 있습니다. 사용자 정의 검량은 완전 맞춤형이 가능하며, 사용자 지정 농도 범위에서 측정된 모든 원소 세트를 포함시킬 수 있습니다.

## 스마트 뷰

스마트 뷰(Smart Views) 기능은 사용자가 IntelliQuant 데이터 중 관심있는 결과만 보고하고자 할 때 사용할 수 있는 간단한 필터로, 중요한 데이터 인사이트가 간과되는 것을 방지합니다. 스마트 뷰에서는 농도 기반의 색상 임계값을 정의할 수 있어 사용자 정의 값보다 비정상적으로 높거나 낮은 값을 가진 결과를 시각화하여 사용자에게 알립니다. 사용자는 또한 보고자 하는 원소의 결과를 정확히 선택하고, 농도 기반 규칙을 정의하여 결과 그리드에 표시될 용액을 선택할 수도 있습니다. 예를 들어 분석자가 IntelliQuant를 이용해 500종 용액을 분석할 경우, 스마트 뷰를 사용해 즉시 결과 리스트를 필터링해 주요 원소가 지정 농도 이상으로 포함된 용액만 표시되게 할 수 있습니다.

사용자는 데이터가 수집되고 있는 동안에도 결과에 적용할 스마트 뷰를 언제든지 변경할 수 있으며, 새로운 스마트 뷰를 생성하거나 저장할 수 있습니다.

## IntelliQuant에서 얻은 시료 인사이트

IntelliQuant는 목표와 분석 범위에 따라 다양한 방식으로 사용될 수 있는 중요한 시료 인사이트를 제공합니다.

### 시료 스크리닝

IntelliQuant는 미지 시료 또는 특성 규명되지 않은 시료에서 최대 70가지의 원소에 대한 반정량 결과를 수 초 내에 식별 및 계산할 수 있으므로, 이상적인 시료 스크리닝 도구입니다. 색상으로 구분된 주기율표에 결과를 나타냄으로써, 사용자는 시료에 존재하는 원소와, 상응하는 원소 함량을 한눈에 확인할 수 있습니다(그림 3). 기본 설정은 저농도로 존재하는 원소는 노란색으로, 중간 농도로 존재하는 원소는 오렌지색으로, 고농도로 존재하는 원소는 빨간색으로 표시합니다. 이러한 원소의 농도 임계값은 스마트 뷰에서 사용자 정의할 수 있습니다.

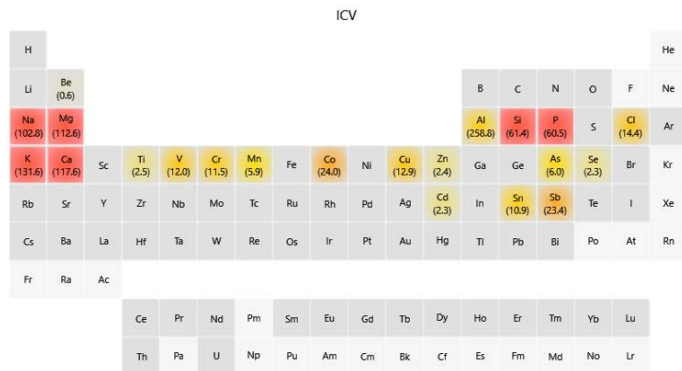


그림 3. IntelliQuant는 사용자들로 하여금 시료의 양을 시각화하고, 사용자 정의 농도 임계값에 따라 검출된 원소에 색상을 할당할 수 있게 합니다.

## 시료 전처리 문제 식별 지원

IntelliQuant는 시료 전처리 문제의 식별에 사용될 수 있습니다. 예를 들어, 시료 분해 과정에서 정확한 양의 산을 첨가하는 데 실패하면 이는 잠재적으로 부적절한 시료 분해 및 부정확한 결과를 초래할 수 있습니다. 이 오류는 검출해내기가 어려울 수 있습니다. 그러나 IntelliQuant에서 시료 내 낮은 염소 함량을 보이는 결과를 표시하도록 설정할 수 있습니다. 분석자들은 IntelliQuant에서 결과를 빠르게 확인함으로써 결과 보고 이전에 CI가 존재하는지, 분해가 올바르게 진행되었는지를 식별할 수 있습니다. 시료 분해에 사용되는 대부분의 산에 대해 동일한 접근법을 사용할 수 있습니다.

IntelliQuant는 ICP-OES 기술이지만, 그 응용을 ICP-OES 전용 시료에만 국한시킬 필요는 없습니다. IntelliQuant는 ICP-MS, AAS, 크로마토그래피, 또는 심지어 적정 분석을 위해 전처리된 시료에 대한 인사이트도 제공할 수 있습니다.

### 시약의 품질 관리

시약 배치 간 전처리의 차이는 분석 결과 변화의 가장 일반적인 원인입니다. IntelliQuant를 사용하면 사용자는 전처리 직후에 2개 이상의 시약 배치 내용물을 쉽게 비교할 수 있습니다. 모든 차이는 즉시 강조 표시되어, 최종 결과의 품질에 영향을 미치기 전에 잠재적인 문제를 해결할 수 있습니다. IntelliQuant는 ICP-OES 또는 기타 분석 기술에 사용되는 시약 품질을 확인하는 간단한 방법입니다.

### 분석법 개발 간소화 및 결과 밸리데이션 지원

IntelliQuant 간섭 방지 알고리즘은 사용자에게 각 검출 원소의 가능한 간섭물질, 간섭의 영향을 받는 파장 및 간섭의 영향을 받지 않을 것으로 예상되는 파장에 대한 상세한 정보를 제공합니다.

이 정보는 분석법 개발 과정에 유용할 뿐만 아니라 이미 수립된 분석법에서 결과의 밸리데이션을 돕는 데에도 유용합니다. 사용자가 정량 분석법 결과가 간섭에 의해 영향을 받았는지 확신하지 못한다면, IntelliQuant는 추가 정보를 제공할 수 있습니다. IntelliQuant는 정량 분석법 내에서 사용된 원소의 파장에 대한 가능한 간섭을 식별함으로써, 어떤 원소가 간섭 현상을 일으키는지 식별할 수 있습니다.

사용자는 여러 가지 방법 중 하나를 이용하여 간섭 현상을 해결할 수 있습니다. 사용자는 다른 파장을 선택하여 간섭 현상을 피하거나, Fast Automated Curve-fitting Technique(FACT) 또는 Inter Element Correction(IEC)을 사용하여 보정을 할 수도 있습니다.

표지	날짜	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 %
토양 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 ○
토양 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 ○
토양 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 ○
토양 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 ○
토양 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 ○

그림 4. IntelliQuant 분석의 소프트웨어 화면, 'Soil 4'에서 일부 문제를 강조하여 표시. 이 시료에 Sb와 Cl이 존재하는 않는다는 것을 주목하십시오.

### 시료 내 화학적으로 호환되지 않는 원소 식별

시료 분석 결과가 예상보다 낮을 경우, 이 오류의 원인은 여러 가지가 있을 수 있으며, 그 중 하나는 시료 내의 원소가 화학적으로 호환되지 않기 때문입니다. IntelliQuant는 원소 간 화학적 비호환성이 잠재적 문제일 때 이를 식별하기 위해 사용될 수 있습니다. 예를 들어, 바륨에 대한 정량 분석 결과가 낮게 나타났다고 가정합니다.

시료 내 높은 황산염 농도가 측정 수행 전에 바륨의 침전을 야기했을 가능성이 있습니다. 황은 정량 분석법의 일부가 아닐 수 있으나, IntelliQuant 분석에 의해 식별 및 반정량됩니다. IntelliQuant 결과는 문제 식별에 필요한 모든 정보를 제공함으로써, 최종 시료 분석 보고에 올바르지 않은 데이터가 포함되는 것을 방지할 수 있습니다.

### 사례 분석

다음 사례에서는 Agilent 5900 SVDV ICP-OES와 IntelliQuant를 사용하여 왕수로 분해된 토양 시료를 5회 반복 분석하였습니다. 반복 시료에서 검출된 모든 원소에 대한 반정량 농도 결과는 모든 사례에서, Soil 4 내의 일부 원소를 제외하고는 우수한 반복성을 보였습니다.

스마트 뷰 루틴은 결과 필터링에 사용되었습니다. 그림 4는 토양 내 가장 중요한 관심 대상 원소에 대한 결과 보고를 보여줍니다. 결과 창에는 Soil 4에서 Sb와 Cl 결과에 문제가 있다고 표시되어 있습니다. Cl가 존재하지 않는 것은 시료 전처리 과정에서 왕수가 아닌 질산만 추가했음을 의미합니다.

IntelliQuant를 사용하면 이런 종류의 시료 인사이트를 한 번 또는 두 번의 마우스 클릭만으로 얻을 수 있습니다. IntelliQuant와 스마트 뷰 기능은 사용자가 빠르고 쉽게 비정상적인 결과를 식별하고, 올바르지 않는 데이터가 보고되기 전에 이를 조사할 수 있도록 합니다.

### 참고 문헌

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

[www.agilent.com/chem](http://www.agilent.com/chem)

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2019  
2019년 11월 15일, 한국에서 인쇄  
5994-1516KO

한국에질런트테크놀로지스(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