

# Agilent IntelliQuant 软件

更深入地了解样品并简化方法开发

|               |               |    |             |             |              |             |    |              |    |              |             |               |              |              |             |              |    |  |
|---------------|---------------|----|-------------|-------------|--------------|-------------|----|--------------|----|--------------|-------------|---------------|--------------|--------------|-------------|--------------|----|--|
| H             |               |    |             |             |              |             |    |              |    |              |             |               |              |              |             |              | He |  |
| Li            | Be<br>(0.6)   |    |             |             |              |             |    |              |    |              |             | B             | C            | N            | O           | F            | Ne |  |
| Na<br>(102.8) | Mg<br>(112.6) |    |             |             |              |             |    |              |    |              |             | Al<br>(258.8) | Si<br>(61.4) | P<br>(60.5)  | S           | Cl<br>(14.4) | Ar |  |
| K<br>(131.6)  | Ca<br>(117.6) | Sc | Ti<br>(2.5) | V<br>(12.0) | Cr<br>(11.5) | Mn<br>(5.9) | Fe | Co<br>(24.0) | Ni | Cu<br>(12.9) | Zn<br>(2.4) | Ga            | Ge           | As<br>(6.0)  | Se<br>(2.3) | Br           | Kr |  |
| Rb            | Sr            | Y  | Zr          | Nb          | Mo           | Tc          | Ru | Rh           | Pd | Ag           | Cd<br>(2.3) | In            | Sn<br>(10.9) | Sb<br>(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           |    |  |

## 前言

虽然元素定量分析仍然是 ICP-OES 仪器的主要用途，但半定量分析能够提供额外信息，使分析人员了解有关样品的更多信息。然而，在许多 ICP-OES 仪器上采集和解析半定量数据可能与采集定量数据一样耗时。此类 ICP-OES 仪器的用户可能没有充分意识到半定量数据采集的潜力。

Agilent 5800 和 5900 ICP-OES 仪器包括 IntelliQuant — 一款强大的专用半定量分析工具，能够让您更好地了解样品的元素组成。IntelliQuant 可用于改善传统定量方法或以极少设置快速提供独立的半定量结果。

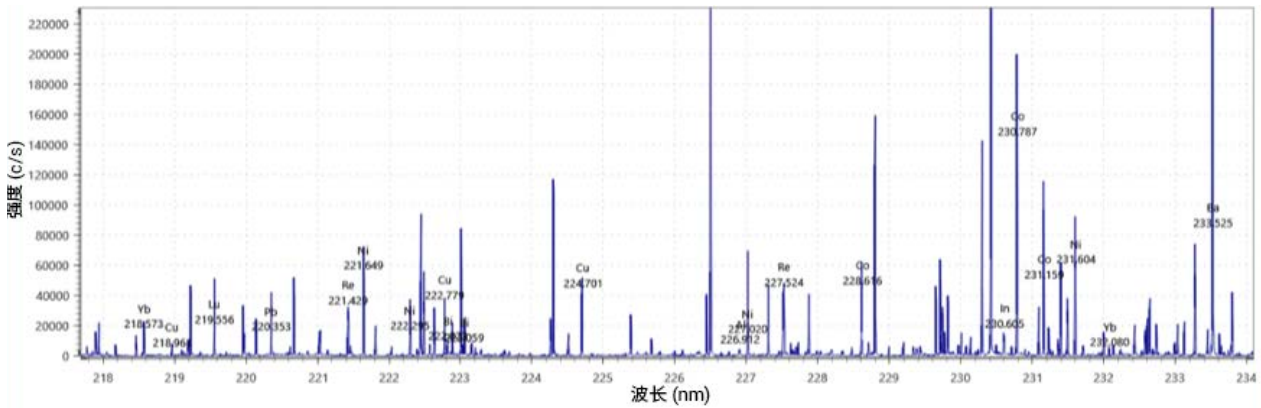


图 1. IntelliQuant 采集的全谱扫描数据部分。该信息提供了针对样品的有用的分析见解，有助于方法开发

## IntelliQuant 简介

作为 Agilent ICP Expert 软件的一部分，IntelliQuant 是一种用于 ICP-OES 的快速半定量数据采集程序<sup>[1]</sup>。IntelliQuant 在 167–785 nm 的整个光谱范围内采集每个样品的数据，从而提供所有其他 ICP-OES 仪器均无法提供的全面数据。作为定量方法的一部分执行时，IntelliQuant 扫描可快速提供样品信息。

图 1 中的全谱扫描部分显示了使用 IntelliQuant 获得的样品中元素的相对丰度。这些信息可用于开发避免光谱干扰的方法，确定可能的稀释倍数，帮助确定各种元素的校准范围以及使用哪种等离子体观测模式。

### 自动元素鉴定

采集全谱扫描结果后，高级 IntelliQuant 算法能够鉴定每个样品中存在的元素。该过程全自动完成，无需用户输入。该算法使用原子和离子发射谱线的数据库，将分析物峰与噪声和干扰分开。

### 选择最佳波长

利用 IntelliQuant 测量样品后，星级排序功能可提供最佳波长列表，用于分析样品中存在的各种元素。该功能还可以对每个波长进行星级排序，有助于鉴定干扰物质，如图 2 所示。通过确定样品中是否存在潜在的干扰元素，IntelliQuant 使用于报告或调整定量方法的波长选择更加轻松。此外，用户能够避免报告受到干扰影响的结果。

| Cd |         |       |   |
|----|---------|-------|---|
| ✓  | 214.439 | ★★★★★ |   |
|    | 226.502 | ★★★★  |   |
|    | 228.802 | ★★★ ? | <div style="border: 1px solid gray; padding: 5px;"> <p>Analyte: Cd(228.802)</p> <p>Confidence: moderate</p> <p>Interference: As(228.812)</p> <p>Confidence: strong</p> </div> |
|    | 361.051 | ★     |   |
|    | 326.105 | ★★    |   |
|    | 508.582 | ★     |   |

图 2. IntelliQuant 以高星级排序和绿色对勾表示最佳分析物波长。它还用低星级排序来突出显示对分析物波长的可疑干扰。将鼠标悬停在红色问号上，即可显示潜在的光谱重叠

### 半定量浓度结果

IntelliQuant 包括预测量的校准，可用于计算样品中检出的每种元素的半定量结果。针对所有可用的观测模式（轴向、径向、垂直双向观测和同步垂直双向观测）提供了校准，确保所有用户都可以使用适应其仪器的默认校准。为提高准确度，可通过重新测量单个标准品或在初始采集后添加并测量更多的校准标样，来更新默认或任何现有的校准。对于希望仅定期更新一部分元素而非所有元素校准的用户来说，这种灵活性至关重要。

此外，用户可轻松创建和测量自己的 IntelliQuant 校准。用户自定义的校准可完全定制，并可包括测量用户所需浓度范围内的任何一组元素。

## 智能视图

智能视图功能为用户提供了一种简单的方法，可以筛选 IntelliQuant 数据以仅显示感兴趣的结果，避免忽略重要的数据见解。可以在智能视图中定义基于浓度的颜色阈值，以可视化方式提醒用户异常偏高或偏低的结果。用户还可以精确选择希望查看的元素结果，甚至可以定义基于浓度的规则，以选择结果网格中显示的溶液。例如，如果分析人员使用 IntelliQuant 分析 500 种溶液，他们就可以使用智能视图即时筛选结果列表，仅显示那些关键元素高于指定浓度的溶液。

用户可以随时更改应用于结果的智能视图，即使正在采集数据，也可以创建并保存新的智能视图。

## 利用 IntelliQuant 进行样品研究

IntelliQuant 可提供重要样品信息，可根据分析目的和范围以不同方式使用。

### 样品筛选

IntelliQuant 能够在几秒钟内鉴定并计算未知和未表征样品中多达 70 个元素的半定量结果，是理想的样品筛选工具。通过用不同颜色标记将结果显示在元素周期表中，用户可以一目了然地看到样品中存在的元素及其浓度水平（图 3）。使用默认设置时，低浓度元素显示为黄色，中等浓度显示为橙色，高浓度则显示为红色。这些浓度阈值可以在智能视图中进行定制。

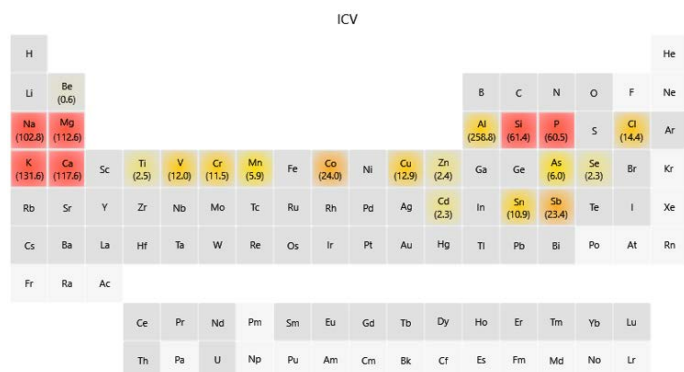


图 3. IntelliQuant 使用户能够直观查看样品组成，并根据用户自定义的浓度阈值对检出的元素应用颜色标记

## 有助于找出样品前处理问题

IntelliQuant 可用于找出样品前处理问题。例如，在样品消解过程中添加的酸量不正确，会导致潜在的不充分样品消解并产生错误结果。这种错误可能难以发现。但是，可以更改 IntelliQuant 设置以标记样品中的低氯含量结果。通过快速检查 IntelliQuant 结果，分析人员可以确定是否存在 Cl，从而在结果报告之前确认消解已经正确完成。相同的方法适用于大多数用于样品消解的酸。

虽然 IntelliQuant 是一种 ICP-OES 技术，但没有理由将其应用限制在仅适合采用 ICP-OES 进行分析的样品。IntelliQuant 有助于深入了解准备通过 ICP-MS、AAS、色谱法甚至滴定法进行分析的样品。

### 试剂的质量控制

不同批次试剂之间的制备差异是分析结果产生变化的常见原因之一。借助 IntelliQuant，用户可以在制得两个或更多个批次的试剂后轻松比较它们的组成。将立即突出显示任何差异，从而避免潜在问题影响最终结果质量。IntelliQuant 是一种用于确认 ICP-OES 或其他分析技术的分析试剂质量的简单方法。

### 简化方法开发，助力结果验证

IntelliQuant 避免干扰算法为用户提供了每种检出元素可能产生的干扰、它们影响的波长以及哪些波长可能不受干扰的详细信息。

这些信息在方法开发过程中很有用，但也可以用作已建立方法结果验证的强大工具。如果用户不确定其定量方法的结果是否受到干扰的影响，IntelliQuant 可提供额外的信息。通过找出定量方法中所用元素波长下的可能干扰，IntelliQuant 可识别出引起干扰的元素。

然后，用户可以选择多种不同方式解决干扰问题。他们可以通过选择不同的波长来避免干扰，或使用快速自动曲线拟合技术 (FACT) 或元素间干扰校正 (IEC) 对其进行校正。

| 标记   | 日期                  | Al<br>mg/L | As<br>mg/L | Ca<br>mg/L | Cu<br>mg/L | Fe<br>mg/L | K<br>mg/L | Mg<br>mg/L | Mn<br>mg/L | Na<br>mg/L | P<br>mg/L | Pb<br>mg/L | S<br>mg/L | Sb<br>mg/L | Si<br>mg/L | Ti<br>mg/L | Zn<br>mg/L | Cl<br>Unadj | N<br>% |
|------|---------------------|------------|------------|------------|------------|------------|-----------|------------|------------|------------|-----------|------------|-----------|------------|------------|------------|------------|-------------|--------|
| 土壤 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   |
| 土壤 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   |
| 土壤 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   |
| 土壤 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   |
| 土壤 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   |

图 4. IntelliQuant 分析中的软件界面，突出显示了“Soil 4”（土壤 4）的一些问题。请注意该样品中不含 Sb 和 Cl

## 有助于识别样品中的化学不相容性

当样品分析结果低于预期时，造成这种错误的原因可能有很多，其中包括样品中元素之间的化学不相容性。IntelliQuant 可用于识别元素之间的化学不相容性是否为潜在问题。例如，钡的定量分析结果可能偏低。在执行测量之前，样品中的高浓度硫酸盐可能导致钡沉淀。硫可能不是定量方法的一部分，但可以通过 IntelliQuant 分析进行识别和半定量。IntelliQuant 结果将提供识别问题所需的所有信息，避免最终样品分析报告中包含错误的信息。

## 示例分析

在以下示例中，使用王水对五个重复土壤样品进行消解，并使用 Agilent 5900 SVDV ICP-OES 和 IntelliQuant 进行分析。除土壤 4 中的某些元素以外，所有重复样品中所有检出元素的半定量浓度结果在所有情况下均表现出良好的重现性。

利用智能视图程序对结果进行筛选。绘制图 4 以报告土壤中最重要目标元素的结果。结果网格标记土壤 4 中的 Sb 和 Cl 存在问题。不存在 Cl，表明样品前处理方法错误，其中仅使用了硝酸，而不是王水（缺少盐酸）。

使用 IntelliQuant，仅需单击一次鼠标或单击两次鼠标即可获得此类样品信息。带有智能视图的 IntelliQuant 使用户能够快速轻松地识别异常结果，并及时对其进行调查以避免报告任何错误数据。

## 参考文献

1. Agilent ICP Expert Software: Powerful software with smart tools for ICP-OES (Agilent ICP Expert 软件：用于 ICP-OES 的强大软件和智能工具)，安捷伦出版物，5994-1517EN

查找当地的安捷伦客户中心：

[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://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](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)

在线询价：

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

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

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。