

IntelliQuant Screening de Agilent

Análisis ICP-OES semicuantitativo más inteligente y más rápido



Introducción

La herramienta estándar de análisis semicuantitativo IntelliQuant de Agilent que se incluye en el software ICP Expert aporta a los usuarios información adicional de sus muestras adquiriendo e interpretando medidas de todo el espectro con una mínima introducción de datos por parte del usuario (1). IntelliQuant Screening, que forma parte del paquete Pro para ICP Expert, amplía aún más las funciones de IntelliQuant (2). IntelliQuant Screening permite al usuario comenzar a adquirir datos en cuestión de segundos, sin tener que elegir qué elementos o longitudes de onda analizar.

Modo Instantánea

IntelliQuant Screening adquiere datos de todo el espectro incluso más rápido que la versión estándar de IntelliQuant con el modo "Instantánea". El nuevo modo de medida usa la velocidad y la potencia del detector CCD Agilent VistaChip II para producir un barrido de espectro completo de cada muestra en menos de cinco segundos de tiempo de medida total.

Una vez finalizada la medida de espectro completo para cada muestra, IntelliQuant verifica los datos y determina automáticamente qué longitud de onda proporciona el mejor resultado para cada elemento. El algoritmo IntelliQuant evalúa la intensidad del pico del analito, la uniformidad del ruido de fondo local del pico y la probabilidad de interferencia espectral procedente de otros elementos que se encuentren en la muestra. IntelliQuant comunica resultados de alta calidad y fiables sin necesidad que el usuario tenga conocimientos espectroscópicos. Los analistas podrán estar seguros de que los datos se basan en medidas libres de interferencias, que están dentro del rango válido de intensidades que se pueden medir en el modo Instantánea.

Análisis de tendencias y cribado de muestras

ICP-OES suele emplearse para estudios semicuantitativos de análisis de tendencias en numerosos sectores. El análisis de tendencias se usa para evaluar los resultados relativos entre lotes de muestras o los cambios en las disoluciones con el tiempo. IntelliQuant Screening mejora la capacidad de análisis de tendencias de la técnica ICP-OES de varias formas.

Los usuarios de IntelliQuant Screening pueden acceder a todas las funciones estándar Smart Views de IntelliQuant además de a gráficas adicionales para el análisis de tendencias. Las nuevas opciones de visualización incluyen gráficos de sectores y de barras. El analista puede cambiar fácilmente entre ver los resultados como concentraciones y verlos como porcentajes del contenido de muestra medido total. La Figura 1 muestra como porcentajes los resultados semicuantitativos para los elementos seleccionados en los materiales de referencia y patrones de lodos industriales 2782 del NIST. Al presentar los resultados de forma visual, los usuarios podrán evaluar rápidamente los posibles valores atípicos e investigar la causa que los provoca. La concentración elevada de un elemento puede deberse a un error de preparación de muestras o a una muestra atípica.

Cribado rápido de muestras

Con el sistema de válvula Agilent AVS 6/7, IntelliQuant Screening en modo Instantánea permite a los usuarios realizar medidas de espectro completo a una velocidad de 15 segundos por muestra. Esta técnica proporciona información rápida sobre la muestra, lo que resulta útil a la hora de evaluar muestras para ver si son adecuadas para su análisis con una técnica diferente, como ICP-MS. El cribado de muestras puede ahorrar tiempo potencialmente evitando los problemas que pudieran surgir de otro modo debido al contenido o a la concentración de la muestra.

Smart Views

La función Smart Views de IntelliQuant proporciona un modo sencillo para que los usuarios puedan filtrar sus datos de cribado de modo que solo se muestren los resultados de interés, para 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.

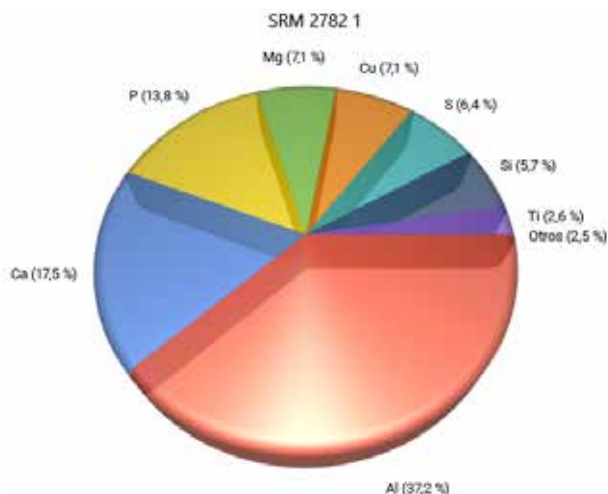


Figura 1. Gráfico de composición porcentual de la muestra para los elementos seleccionados por el usuario, generado en tiempo real con la interfaz IntelliQuant Screening.

Desarrollo de métodos

IntelliQuant Screening resulta útil para aquellos casos en los que el desarrollo de métodos es complicado técnicamente y laborioso, pues no precisa la selección de elementos ni tampoco conocimientos previos sobre el contenido de las muestras. El desarrollo de métodos ha sido tradicionalmente el campo de los analistas más experimentados, y precisa un elevado nivel conocimiento de la técnica ICP-OES. Esto ya no es necesario, pues IntelliQuant Screening proporciona todas las herramientas necesarias para que usuarios con menos experiencia puedan desarrollar métodos cuantitativos.

IntelliQuant Screening utiliza un sistema de clasificación por estrellas, fácil de interpretar, para indicar qué longitud de onda de los analitos están sometidas probablemente a interferencias espectrales, desplazamientos del fondo o una mala sensibilidad para las muestras que se están midiendo (se muestran en las Figuras 2 y 3). Las longitudes de onda de los analitos que no tienen interferencias o que probablemente vayan a proporcionar una mejor sensibilidad con relación a otras longitudes de onda recibirán una clasificación por estrellas superior. Las longitudes de onda con interferencias o aquellas con una mala sensibilidad recibirán una clasificación por estrellas inferior. Conocer esta información para cada muestra individual medida por IntelliQuant Screening ayuda a los usuarios a decidir qué longitudes de onda de los analitos incluir en los métodos cuantitativos.



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.

Cribado rápido de muestras

El flujo de trabajo de desarrollo de métodos de IntelliQuant Screening puede representarse en tres sencillos pasos:

1. Analice sus muestras con IntelliQuant Screening

La configuración de un análisis IntelliQuant Screening para sus muestras desconocidas es sencillo e intuitivo. No se precisa la personalización del método, sino tan solo añadir las muestras y comenzar a medir.

2. Añada las longitudes de onda recomendadas al método cuantitativo

Después de la medida de cada muestra, la interfaz de usuario de IntelliQuant muestra la lista de longitudes de onda recomendadas para cada elemento detectado en la muestra. El sistema de clasificación por estrellas de IntelliQuant es un modo sencillo de determinar qué longitudes de onda es probable que proporcione el mejor resultado para cualquier elemento de una muestra. IntelliQuant asigna una "marca de verificación verde" a la mejor longitud de onda.

Pudiera ser que varias longitudes de onda reciban la misma clasificación por estrellas como las preferidas por IntelliQuant (con la marca de verificación verde). Cuando esto suceda, todas las longitudes de onda de alta clasificación por estrellas deberán incluirse en el método cuantitativo.

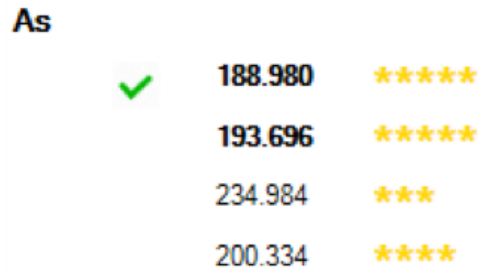


Figura 3. IntelliQuant asigna una clasificación de cinco estrellas al resultado para dos longitudes de onda de arsénico, lo que indica que ambas son adecuadas para el método cuantitativo.

3. Ejecute el método cuantitativo con IntelliQuant activado

Ahora puede fabricar una hoja de trabajo cuantitativa con las longitudes de onda recomendadas por IntelliQuant para sus muestras. Se recomienda añadir varias longitudes de onda para cada elemento (si hay disponibles) con el fin de asegurar la obtención de resultados sin interferencias para todas las muestras que desea medir con el nuevo método.

Cuando analice muestras desconocidas con el nuevo método cuantitativo, puede continuar realizando medidas con IntelliQuant. Los datos de IntelliQuant le permitirán investigar las posibles interferencias que surjan, que no estaban presentes en las muestras usadas durante el proceso de desarrollo de métodos. Esta información le permite afinar el método seleccionando más longitudes de onda o corregir las interferencias identificadas mediante la técnica de deconvolución automática de curvas (FACT) o la corrección interelemental (IEC).

Referencias

1. Software IntelliQuant de Agilent: Para aumentar el conocimiento de las muestras y simplificar el desarrollo de métodos, publicación de Agilent 5994-1516ES
2. Agilent ICP Expert Software: Powerful software with smart tools for ICP-OES, publicación de Agilent, 5994-1517EN

www.agilent.com/chem

Esta información está sujeta a cambios sin previo aviso.