

Screening d'IntelliQuant Agilent

Analyse semi-quantitative par ICP-OES plus intelligente et plus rapide



Introduction

L'outil d'analyse semi-quantitative IntelliQuant standard d'Agilent inclus dans le logiciel ICP Expert de base fournit aux utilisateurs des informations supplémentaires sur leurs échantillons en collectant et en interprétant des mesures sur le spectre complet avec un minimum d'intervention de l'utilisateur (1). Le Screening IntelliQuant, qui fait partie du pack Pro du logiciel ICP Expert, étend encore les fonctionnalités d'IntelliQuant (2). Le Screening d'IntelliQuant permet aux utilisateurs de commencer à collecter des données en quelques secondes, sans avoir à choisir les éléments ou longueurs d'onde à analyser.

Mode snapshot

Le Screening d'IntelliQuant collecte des données sur le spectre entier encore plus rapidement que la version standard d'IntelliQuant grâce au mode « Snapshot ». Ce nouveau mode de mesure utilise la vitesse et la puissance du détecteur à transfert de charge Agilent VistaChip II pour produire un balayage du spectre complet de chaque échantillon en un temps total de mesure de moins de cinq secondes.

Une fois la mesure du spectre complet pour chaque échantillon terminée, IntelliQuant vérifie les données et détermine automatiquement quelle longueur d'onde fournit le meilleur résultat pour chaque élément. L'algorithme IntelliQuant évalue l'intensité du pic de l'analyte, la cohérence du fond environnant du pic et la probabilité d'interférences spectrales d'autres éléments présents dans l'échantillon. IntelliQuant fournit des résultats fiables et de grande qualité, sans que l'utilisateur ait besoin de connaissances en spectroscopie. Les analystes peuvent être sûrs que les données sont basées sur des mesures exemptes d'interférences, et comprises dans la gamme valide des intensités pouvant être mesurées en mode « Snapshot ».

Analyse de tendances et screening des échantillons

L'ICP-OES est souvent utilisé pour des études d'analyse de tendances semi-quantitative dans de nombreux secteurs industriels. L'analyse de tendances est utilisée pour évaluer les résultats relatifs entre les lots d'échantillons ou des changements de solutions au fil du temps. Le Screening d'IntelliQuant améliore les capacités d'analyse de tendances de l'ICP-OES de plusieurs manières.

Les utilisateurs du Screening d'IntelliQuant peuvent accéder à toutes les fonctions standards Smart Views d'IntelliQuant, ainsi qu'à des graphiques pour l'analyse de tendances. Les nouvelles options de visualisation incluent un graphique à secteurs et un histogramme. L'analyste peut facilement basculer entre un affichage des résultats sous forme de concentrations et un affichage de ces résultats en pourcentages du contenu total de l'échantillon mesuré. La Figure 1 montre les résultats semi-quantitatifs en pourcentages pour les éléments sélectionnés dans l'étalon de référence de boues industrielles NIST 2782. La présentation visuelle des résultats permet aux utilisateurs d'évaluer rapidement toute valeur aberrante et d'en rechercher la cause. Une concentration élevée d'un élément peut être due à une erreur de préparation d'échantillons ou à un échantillon atypique.

Screening rapide des échantillons

Avec le système de vanne Agilent AVS 6/7, le Screening d'IntelliQuant en mode Snapshot permet aux utilisateurs d'effectuer des mesures sur le spectre complet à une vitesse de 15 secondes par échantillon. Cette technique permet une expertise rapide des échantillons qui est utile lors de l'évaluation des échantillons pour savoir s'ils sont adaptés à une analyse utilisant une technique différente telle que l'ICP-MS. Le screening des échantillons peut éventuellement faire gagner du temps en évitant les problèmes qui pourraient survenir en raison du contenu de l'échantillon ou de sa concentration.

Smart Views

La fonction Smart Views d'IntelliQuant fournit un moyen simple aux utilisateurs de filtrer leurs données de screening afin d'afficher uniquement les résultats qui les intéressent, ce qui évite de passer à côté d'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.

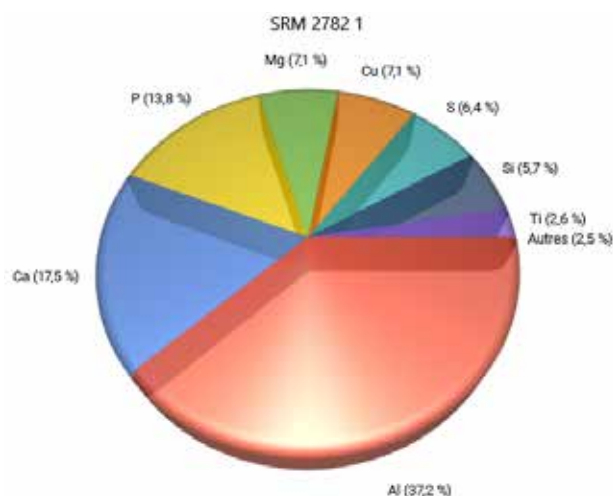


Figure 1. Diagramme de composition d'un échantillon en pourcentage des éléments sélectionnés par l'utilisateur généré en temps réel dans l'interface de Screening d'IntelliQuant.

Développement de méthodes

Le Screening d'IntelliQuant est utile pour le développement de méthodes techniquement exigeant et chronophage, car il ne nécessite aucune sélection d'éléments et aucune connaissance préalable du contenu des échantillons. Le développement de méthodes a toujours été réservé aux analystes les plus expérimentés, car il nécessite une grande connaissance de l'ICP-OES. Ce n'est plus le cas, car le Screening d'IntelliQuant fournit tous les outils nécessaires aux opérateurs moins expérimentés pour développer des méthodes quantitatives.

Le Screening d'IntelliQuant utilise un système de classement par étoiles facile à interpréter pour indiquer quelles longueurs d'onde de l'analyte sont sujettes à des interférences spectrales potentielles, à des variations du fond ou à une

sensibilité médiocre pour les échantillons mesurés (illustré sur les Figures 2 et 3). Les longueurs d'onde de l'analyte qui ne sont pas interférées ou qui sont susceptibles d'offrir une meilleure sensibilité par rapport aux autres longueurs d'onde reçoivent un classement par étoiles plus élevé. Les longueurs d'onde sujettes à des interférences ou les longueurs d'onde avec une sensibilité médiocre sont moins bien classées. La connaissance de ces informations pour chaque échantillon particulier mesuré par le Screening d'IntelliQuant aide les utilisateurs à décider des longueurs d'onde des analytes à inclure dans leurs méthodes quantitatives.

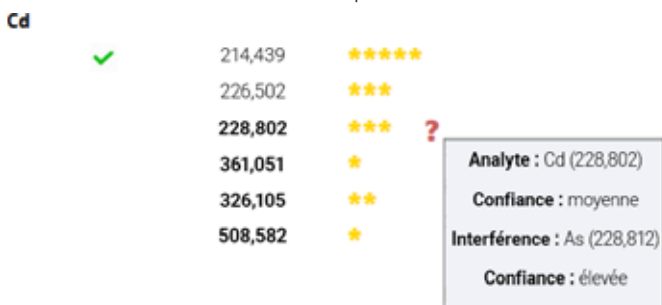


Figure 2. IntelliQuant indique la meilleure longueur d'onde pour un analyte en attribuant un classement par étoiles élevé et une coche verte. Il met également en évidence des interférences suspectes sur les longueurs d'onde des composés en attribuant à un classement par étoiles faible. D'éventuels recouvrements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

Screening rapide des échantillons

Le processus de développement de méthodes avec le Screening d'IntelliQuant peut être représenté en trois étapes simples :

1. Analysez vos échantillons en utilisant le Screening d'IntelliQuant

La mise en place du Screening d'IntelliQuant pour vos échantillons inconnus est simple et intuitive. Aucune personnalisation de la méthode n'est nécessaire. Ajoutez simplement vos échantillons et commencez les mesures.

2. Ajoutez les longueurs d'onde recommandées à la méthode quantitative

Après chaque mesure d'échantillon, l'interface utilisateur d'IntelliQuant affiche une liste de longueurs d'onde recommandées pour chaque élément détecté dans l'échantillon. Le système de classement par étoiles d'IntelliQuant est un moyen simple de déterminer les longueurs d'onde susceptibles de donner le meilleur résultat pour n'importe quel élément dans un échantillon. IntelliQuant attribue une « coche verte » à la meilleure longueur d'onde.

www.agilent.com/chem

Ces renseignements peuvent être modifiés sans préavis.

Plusieurs longueurs d'onde peuvent recevoir le même classement par étoiles que la longueur d'onde préférée d'IntelliQuant (avec la coche verte). Dans ce cas, toutes les longueurs d'onde avec un classement par étoiles élevé devraient être incluses dans la méthode quantitative.

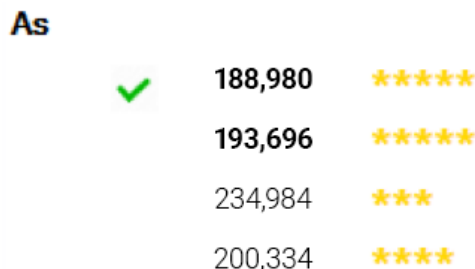


Figure 3. IntelliQuant attribue un classement de 5 étoiles au résultat provenant de deux longueurs d'onde de l'arsenic, indiquant que ces deux longueurs d'onde conviennent à la méthode quantitative.

3. Exécutez la méthode quantitative en ayant activé IntelliQuant.

Vous pouvez maintenant construire une feuille de travail en utilisant les longueurs d'onde recommandées par IntelliQuant pour vos échantillons. Il est conseillé d'ajouter plusieurs longueurs d'onde pour chaque élément (si disponibles) pour être sûr d'avoir des résultats sans interférences pour tous les échantillons que vous avez l'intention de mesurer avec la nouvelle méthode.

Lorsque vous analysez des échantillons inconnus en utilisant la nouvelle méthode quantitative, vous pouvez continuer à effectuer des mesures IntelliQuant. Les données IntelliQuant vous permettront d'examiner toute interférence qui pourrait survenir et qui n'était pas présente dans les échantillons pendant le processus du développement de méthodes. Ces informations vous permettent d'affiner la méthode en sélectionnant plus de longueurs d'onde ou de corriger les interférences identifiées en utilisant la technique de déconvolution spectrale automatisée (FACT) ou la correction inter éléments (CIE).

Références

1. Logiciel IntelliQuant Agilent: For greater sample insight and simplified method development, Agilent publication, 5994-1516EN
2. Logiciel ICP Expert Agilent : Powerful software with smart tools for ICP-OES, Agilent publication, 5994-1517EN