

## Agilent IntelliQuant ソフトウェア

サンプルの組成を知り、メソッド作成を簡素化

H																	He	
Li	Be (0.6)											B	C	N	O	F	Ne	
Na (102.8)	Mg (112.6)											Al (26.98)	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 (24.0)	Ni	Cu (12.9)	Zn (2.4)	Ga	Ge (6.0)	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		

### はじめに

ICP-OES は主に定量分析に使用されていますが、半定量分析によってさらなる情報が得られ、サンプルをより詳細に知ることができます。しかし、多くの ICP-OES では半定量データの取得と解析に、定量データを取得するのと同程度の時間がかかることがあります。このような ICP-OES では、半定量データ分析の潜在的な効果を存分に引き出すことは困難です。

Agilent 5800 および 5900 ICP-OES は、IntelliQuant という優れた半定量分析用の専用ツールを搭載しているため、サンプルの組成をより詳細に理解することができます。IntelliQuant を使用することで、従来の定量メソッドを改善できるほか、スタンダード半定量測定結果を最小限の手順で迅速に得ることができます。

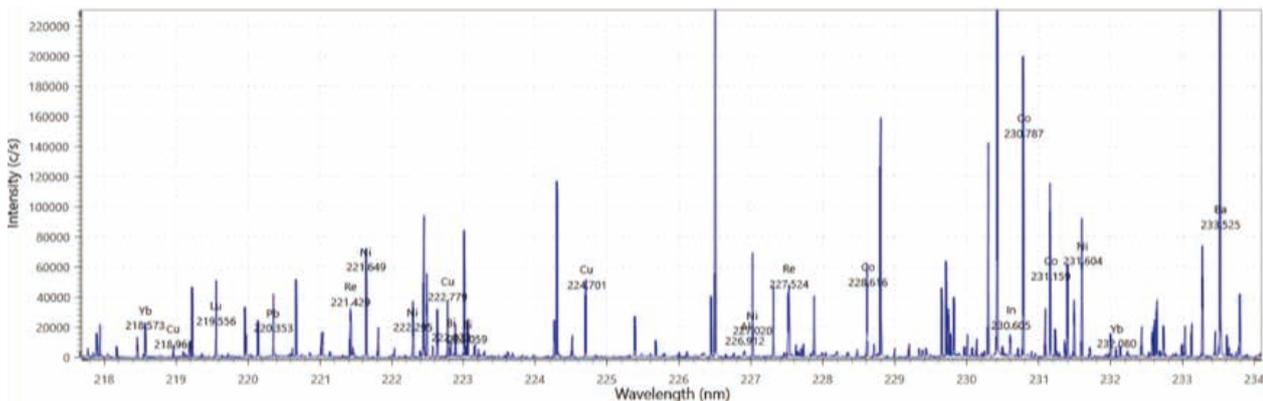


図 1. IntelliQuant で取得されたフルスペクトルスキャンデータの一部分。これらの情報から、サンプルに関する有用な分析データが得られ、メソッド作成に活用できます。

## IntelliQuant とは

IntelliQuant は、Agilent ICP Expert ソフトウェアの一部であり、ICP-OES で高速半定量データ取り込みを実現します (1)。IntelliQuant は、すべてのサンプルについて 167 ~ 785 nm の測定全波長範囲でデータを取得し、一般的な ICP-OES では得られない包括的なデータを提供します。IntelliQuant スキャンを、定量メソッドの一部として実行すると、迅速にサンプルを分析できます。

図 1 のフルスペクトルスキャンの一部分は、IntelliQuant を用いて得られたサンプル中の元素を示しています。この情報を使用して、スペクトル干渉を防ぐメソッドを作成したり、可能性のある希釈倍率を決定したりすることができます。また、各元素の検量線範囲や、使用するプラズマビュー方向の決定にも役立ちます。

### 自動元素同定

高度な IntelliQuant アルゴリズムは、全波長範囲スキャンを取得した後、各サンプルに存在する元素を同定します。プロセスは完全に自動化されているため、ユーザーによる入力是不要です。このアルゴリズムではノイズや干渉から分析対象ピークを分離するために、原子およびイオンの発光線のデータベースを使用します。

### 最適な波長の選択

IntelliQuant でサンプルが測定されると、ランキング機能によって、サンプル中に存在する各元素の分析に最適な波長のリストが表示されます。また、図 2 に示すように、各波長を星の個数でランク付けて干渉を特定できるようにします。IntelliQuant は、可能性のある干渉元素がサンプル中に存在するかどうかを判断して、報告対象の波長を選択したり、定量メソッドをより容易に調整するための波長を選択したりすることができます。また、干渉の影響を受けた分析結果を報告しないようにすることができます。

### Cd

✓	<b>214.439</b>	*****	
	<b>226.502</b>	***	
	<b>228.802</b>	*	?
	361.051	*	
	326.105	**	
	508.582	*	

元素: Cd(228.802)  
信頼性: 中  
干渉: As(228.812)  
信頼性: 高

図 2. IntelliQuant では、最適な分析対象波長に、多くの星と緑のチェックマークが表示されます。一方、分析対象波長に対して干渉が予想される場合は、星の数を少なくすることでハイライトされます。赤色の？にカーソルを当てると、干渉の可能性のあるスペクトルが表示されます。

### 半定量濃度の結果

IntelliQuant では事前に測定された検量線が設定されており、これを用いて、サンプル中で検出される各元素の半定量結果を計算できます。検量線は、すべてのビューモード（アキシカル、ラディアル、パーティカルデュアルビュー、シンクロナスパーティカルデュアルビュー）が提供されており、あらゆるユーザーがサンプルに適したデフォルトの検量線を使用できるようになっています。精度の向上のために、個別の標準を測定するか、検量線溶液を追加して測定することによって、デフォルトや任意の既存検量線を更新することができます。この柔軟さは、すべての元素ではなく一部の元素のみについて、定期的な検量線の更新を必要とするユーザーにとって重要です。

また、ユーザー独自の IntelliQuant 用検量線を簡単に作成して測定できます。ユーザー定義の検量線は、完全にカスタマイズでき、ユーザーが希望した元素の濃度範囲で測定することができます。

## スマートビュー

スマートビュー機能を使用すると、IntelliQuant データを簡単にフィルタリングして、分析対象の結果のみを表示し、重要なデータ分析結果の見落としを防ぐことができます。スマートビューでは、濃度毎の色表示のしきい値を設定でき、ユーザーが設定した値と比べて異常に高い結果や低い結果を、視覚的に表示します。ユーザーは、厳密にどの元素の結果を表示するかを選択することもできます。また、濃度範囲を定義して、結果一覧にどの溶液を表示するかを選択することもできます。例えば、500 個の溶液を IntelliQuant で分析する場合、スマートビューを使用して分析結果のリストをすばやくフィルタリングし、指定した濃度以上の重要な元素を含む溶液のみを表示できます。

さらに、結果に適用するスマートビューをいつでも変更でき、データ取得時であっても、新規のスマートビューを作成して保存できます。

## IntelliQuant によるサンプルの分析結果

IntelliQuant によって得られる重要なサンプル情報は、分析の目的や範囲に合わせて、さまざまな方法で利用することができます。

### サンプルスクリーニング

IntelliQuant は、未知サンプル中の最大 70 元素の半定量結果を数秒で同定して計算できる、非常に優れたサンプルスクリーニングツールです。色分けされた周期表に結果を表示することによって、サンプル中にどの元素がどの程度の濃度レベルで存在するかが一目でわかります (図 3)。デフォルト設定では、低濃度は黄色、中濃度はオレンジ色、高濃度は赤色で元素が示されます。ただし、濃度のしきい値は、スマートビューでカスタム定義することができます。

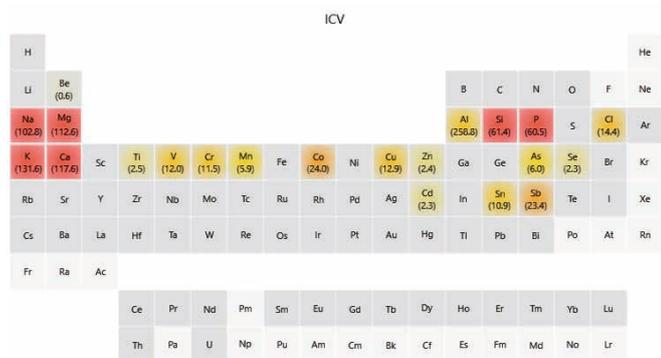


図 3. IntelliQuant により、サンプルの成分を視覚化でき、ユーザーが定義した濃度しきい値を基に、検出された元素を色分けできます。

## サンプル前処理の問題点の特定をサポート

IntelliQuant を使用してサンプル前処理の問題点を特定できます。例えば、サンプル分解中に正しい量の酸を添加できないと、サンプルが十分に分解されない可能性があり、正しい結果が得られない場合があります。このエラーの検出は困難な場合があります。しかし、サンプル中で低濃度の塩素測定値にフラグが付くように IntelliQuant を設定できます。IntelliQuant 結果を即座に確認することによって、分析者は Cl が存在するかどうかを見分けて、結果が報告される前に適切に分解されたことを知ることができます。これと同様のアプローチが、サンプル分解に使用する大半の酸に適しています。

IntelliQuant は ICP-OES 技術ですが、アプリケーションを ICP-OES 特有のサンプルに限定する理由はありません。IntelliQuant を用いることで、ICP-MS、AAS、クロマトグラフィー、滴定による分析用に前処理されたサンプルについても、価値ある情報を得られます。

### 試薬の調製の違い

試薬のロット間の調製の違いは、分析結果の変動の一般的な原因です。IntelliQuant なら、試薬の調製が完了するとすぐに、2 つ以上の試薬の成分を容易に比べることができます。どんな違いも即座に表示されるため、最終結果の品質に影響を与える前に潜在的な問題を処理できます。IntelliQuant により、ICP-OES や他の分析技術で使用される試薬の品質を簡単に確認することができます。

### メソッド作成の簡素化と結果のバリデーションでの活用

IntelliQuant の干渉回避アルゴリズムによって、検出された各元素の干渉の可能性、影響を受ける波長、干渉がないと考えられる波長についての詳細な情報を得られます。

この情報はメソッド作成時に有用ですが、確立されたメソッドの結果のバリデーションにおいても、非常に有効なツールとなります。定量メソッドの結果が干渉に影響されているかどうか不明な場合は、IntelliQuant により追加情報を得ることができます。定量メソッドで用いる元素の波長に影響しそうな干渉を特定することによって、どの元素が干渉の原因となっているかを特定できます。

その後、ユーザーは次のような方法で干渉に対処します。別の波長を使用して干渉を回避するか、高速自動カーブフィッティングテクニック (FACT) または元素間干渉補正 (IEC) を用いて干渉を補正できます。

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	2.48	2.51

図 4. Soil 4 の複数の問題をハイライトしている IntelliQuant 分析のソフトウェア画面。このサンプル中には Sb と Cl が存在していません。

## サンプル内の化学的性質の特定のサポート

サンプル分析結果が予想よりも低い場合、エラーの原因はいくつか考えられますが、その 1 つがサンプル中の元素間の化学的性質です。IntelliQuant を使用して、元素間の化学的性質がどんな場合に潜在的な問題となるかを特定できます。例えば、バリウムの定量分析結果が低くなることがあります。サンプル中の硫酸塩の濃度が高いと、測定が実行される前にバリウムが沈殿してしまう可能性があります。硫黄は定量メソッドの対象にはなっていない場合もありますが、IntelliQuant 分析を実施すると、同定され、半定量されます。IntelliQuant の結果から、問題の特定に必要な情報がすべて得られるため、分析レポートに誤ったデータが含まれる事態を回避することができます。

## 分析例

次の例では、王水を使用して土壌サンプルを 5 回繰り返して分解し、Agilent 5900 SVDV ICP-OES と IntelliQuant で分析しました。Soil 4 の一部の元素を別にすると、すべてのケースで複製サンプル中のすべての検出元素の半定量濃度の結果は良好な再現性を示しています。

スマートビューを用いて、結果をフィルタリングしました。図 4 は、土壌中の分析対象の最も重要な元素の分析結果をレポートするために開発されました。結果一覧では Soil 4 中の Sb と Cl に問題のフラグが付いています。Cl が存在しないのは、王水でなく硝酸のみを使用してサンプルが調製されたことを示しています。

IntelliQuant を使用すれば、1、2 回マウスをクリックするだけで、このようなサンプルについての有益な情報を得ることができます。さらに、IntelliQuant とスマートビューを使用すれば、異常な結果を短時間で容易に同定して、間違っただけのデータがレポートされる前に調査することが可能です。

## 参考文献

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

ホームページ

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

カスタムコンタクトセンター

0120-477-111

[email\\_japan@agilent.com](mailto:email_japan@agilent.com)

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、医薬品医療機器等法に基づく登録を行っておりません。本文書に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2019

Printed in Japan, November 15, 2019

5994-1516JAJP