

Agilent IntelliQuant スクリーニング

スマートで高速なICP-OES 半定量分析



はじめに

Agilent IntelliQuant 半定量分析ツールは、ベースとなる ICP Expert ソフトウェアに含まれており、ユーザーによる入力を最小限に抑えてフルスペクトル測定の取得と解析を行い、サンプルについての有益な追加情報を提供します (1)。IntelliQuant スクリーニングは、ICP Expert の Pro パッケージに含まれ、IntelliQuant 機能をさらに拡張します (2)。IntelliQuant スクリーニングでは、分析する元素または波長を選択することなく、数秒以内にデータ取得が開始されます。

スナップショットモード

IntelliQuant スクリーニングのスナップショットモードでは、標準装備の IntelliQuant よりもさらに高速にフルスペクトルデータを取得できます。この新しい測定モードにより、Agilent VistaChip II CCD 検出器の速度と性能を利用して、各サンプルについて 5 秒以内の測定時間でフルスペクトルのスキャンが可能です。

各サンプルのフルスペクトル測定が完了すると、IntelliQuant はデータを確認し、各元素について最適な結果を提供する波長を自動的に決定します。IntelliQuant アルゴリズムが、分析対象物のピークの強さ、ピークの局所的なバックグラウンドの一貫性、サンプル中の他の元素からのスペクトル干渉の可能性を評価します。ユーザーに分光分析の知識がなくても、IntelliQuant が高品質で信頼できる結果を報告します。データがスナップショットモードで測定可能な範囲内にあり、干渉のない測定に基づくものであることを分析者は確認できます。

トレンド分析とサンプルスクリーニング

ICP-OES は、多くの分野において半定量トレンド分析調査によく用いられています。トレンド分析は、サンプルの相対的な分析結果や溶液の経時変化を評価するために使用されます。IntelliQuant スクリーニングは、ICP-OES のトレンド分析の能力を複数の方法で向上させます。

IntelliQuant スクリーニングには、IntelliQuant スマートビュー機能に加えて、トレンド分析のための追加グラフィックスも用意されています。新しい視覚化オプションには、円グラフや棒グラフのグラフィックがあります。分析者は、分析結果を濃度として表示するか、測定したサンプルの全成分に対する割合として表示するかを容易に切り替えることができます。図 1 は、NIST 2782 産業スラッジ標準参照物質において選択した元素をパーセント率で示した半定量結果です。結果を視覚化して表現することで、異なる結果をすぐに評価して原因を調査できます。ある元素が高濃度を示すのは、サンプル前処理のミスまたは特殊なサンプルが原因の可能性がります。

サンプルの高速スクリーニング

Agilent AVS 6/7 パルプシステムを組み合わせると、IntelliQuant スクリーニングをスナップショットモードで使用すると、1 サンプルあたり 15 秒のペースでフルスペクトル測定を実行できます。この手法は、サンプルについての有益な情報をすばやく得ることができるため、ICP-MS などの別の手法を用いた分析に適しているサンプルかどうかを判断する際に有用です。サンプルの成分や濃度が原因で生じる可能性がある問題を防ぐことで、サンプルスクリーニングの時間を節約できます。

スマートビュー

IntelliQuant のスマートビュー機能を使用すると、スクリーニング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。

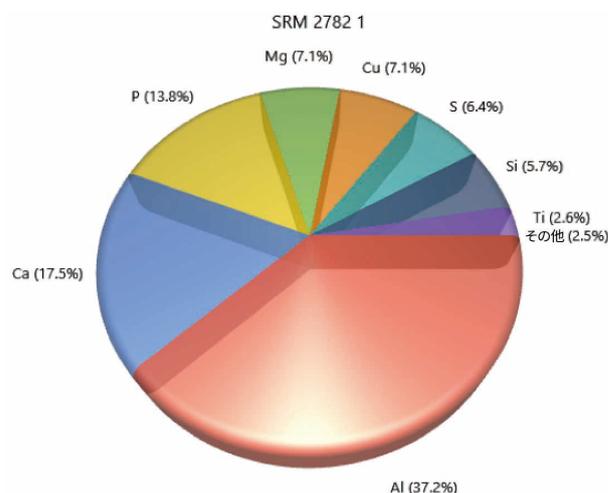


図 1. IntelliQuant スクリーニングインターフェース内でリアルタイムに生成されるユーザー選択元素のサンプル組成のグラフ（パーセント表示）

メソッド作成

IntelliQuant スクリーニングは、技術的に困難で時間のかかるメソッド作成に役立ちます。元素の選択もサンプル成分に関する事前知識も不要です。メソッド作成は従来、経験豊富な分析者が担当するものであり、ICP-OES についての豊富な知識が要求されてきました。しかし、IntelliQuant スクリーニングによって、経験の浅いオペレータでも定量メソッドを作成することができるようになります。

IntelliQuant スクリーニングはどの成分の波長がスペクトル干渉やバックグラウンドシフトの影響を受けやすいか、測定対象のサンプルに対する感度が低いかを、星の数でわかりやすく表示します（図 2 および 3）。スペクトル干渉のない、または他の波長よりも良好な感度を実現しそうな波長は、高い評価を得ます。干渉の影響を受けた波長、または感度が低い波長は、評価が下がります。IntelliQuant スクリーニングで測定する個々のサンプルについて、この情報を得ることで、定量メソッドにどの波長を含めるかを決定できます。

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

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。

サンプルの高速スクリーニング

IntelliQuant スクリーニングメソッド作成のワークフローを、次の 3 つの容易な手順で示します。

1. IntelliQuant スクリーニングによりサンプルを分析

未知のサンプルに対する IntelliQuant スクリーニング分析を、シンプルかつ直観的に設定できます。メソッドのカスタマイズは不要です。サンプルを追加して測定を開始するだけです。

2. 推奨波長を定量メソッドへ追加

各サンプル測定の後、IntelliQuant ユーザーインターフェースに、サンプル中で検出された各元素の推奨波長リストが表示されます。IntelliQuant のランキング機能により、サンプル中の元素について最良の結果を提供できると予想される波長を星の数によって簡単に判断できます。IntelliQuant では、最適な波長に緑色のチェックが付きます。

推奨される波長（緑色のチェック付きの波長）として、複数の波長が同じ評価を受ける場合があります。この場合は、評価が高いすべての波長を定量メソッドに採用する必要があります。

ホームページ

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

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

5994-1518JAJP

As		
188.980	*****	✓
193.696	*****	
234.984	***	
200.334	*****	

図 3. IntelliQuant は、ヒ素の 2 波長の結果に 5 つ星ランキングを与え、両方の波長が定量メソッドに適していることを示しています。

3. IntelliQuant を有効にした状態で定量メソッドを実行

IntelliQuant がサンプルに合わせて推奨した波長を用いて、定量ワークシートを作成できます。各元素について複数の波長がある場合は、すべて加えると、新しいメソッドで測定するすべてのサンプルで、干渉のない分析結果を得ることができます。

新しい定量メソッドで未知のサンプルを分析する場合、引き続き IntelliQuant 測定を実行できます。メソッド作成プロセスで使用したサンプル中には存在せず、新たに発生する干渉を、IntelliQuant データを使用して調査できます。この情報から、波長をより多く選択してメソッドを改良するか、確認された干渉を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) によって補正することができます。

参考文献

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