

Phần mềm Agilent ICP Expert

Phần mềm mạnh với công cụ thông minh cho ICP-OES

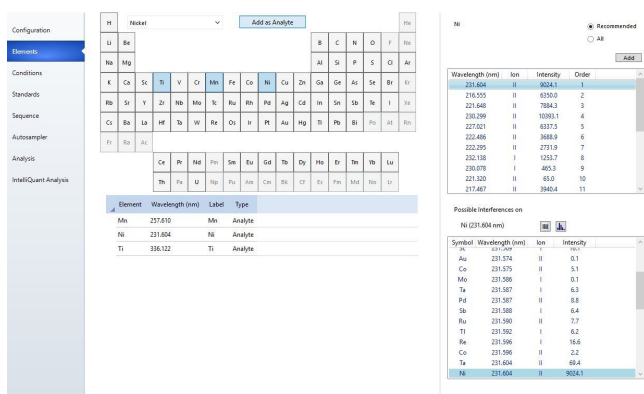


Giới thiệu

Agilent 5800 ICP-OES và Agilent 5900 ICP-OES được điều khiển bởi phần mềm Agilent ICP Expert. ICP Expert sử dụng giao diện bảng tính quen thuộc và cung cấp phương pháp phát triển và phân tích mẫu đơn giản. Nó bao gồm chức năng IntelliQuant cho phép nhà phân tích thu thập dữ liệu nồng độ trên tới đa 70 nguyên tố trong một mẫu. ICP Expert cũng bao gồm chức năng kiểm soát chất lượng (QC), các tính năng bảo trì thông minh và một bộ mẫu được phát triển sẵn cho các phương pháp phân tích phổ biến.

Phần mềm dễ sử dụng

Phần mềm ICP Expert bao gồm các tính năng thông minh giúp giảm lượng kiến thức cần học cho người dùng mới, đồng thời cho phép các nhà phân tích có kinh nghiệm dễ dàng chạy các phương pháp phức tạp. Bố cục của phần mềm phản ánh các quy trình công việc phổ biến nhất của các ứng dụng thực tế. Để thiết lập và thực hiện phân tích, nhà phân tích chỉ cần làm theo trình tự các trang theo thứ tự hiển thị. Trang hiện tại luôn được tô sáng để cung cấp khả năng hiển thị đầy đủ tiến trình trong quy trình công việc (Hình 1).



Hình 1. Phần mềm Agilent ICP Expert có quy trình làm việc rõ ràng, hợp lý để hướng dẫn người dùng thiết lập phương pháp và phân tích.

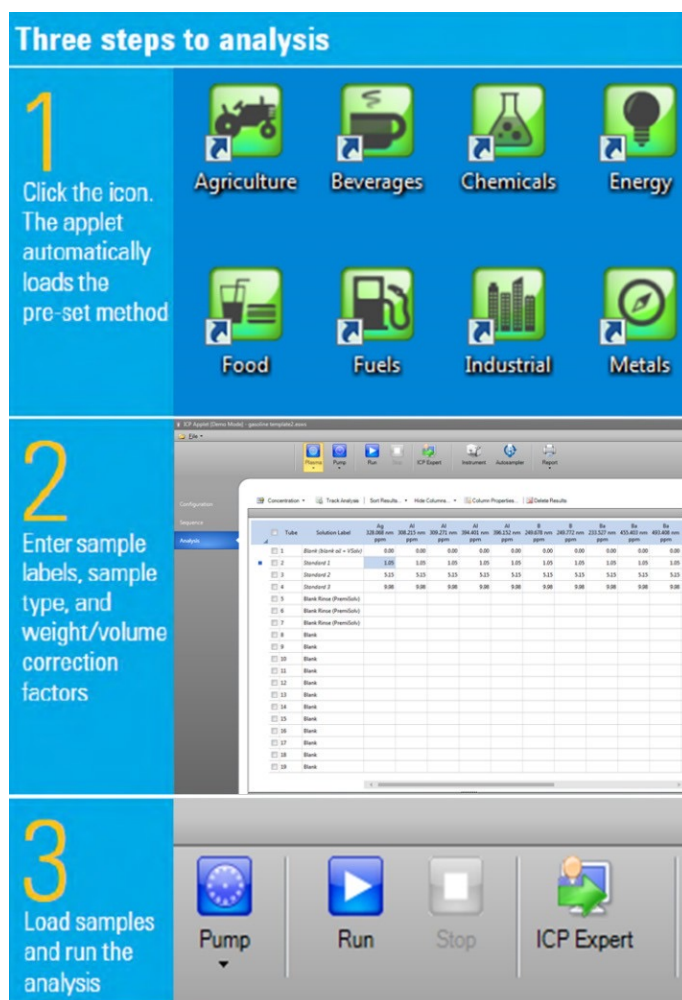
Phần mềm bao gồm một bộ các phương pháp mẫu được phát triển sẵn bao gồm nhiều phương pháp phân tích và các loại mẫu phổ biến, chẳng hạn như phân tích các mẫu thực phẩm, mẫu môi trường và mẫu nước. Các mẫu này là điểm khởi đầu tuyệt vời cho bất kỳ người dùng nào muốn thực hiện một phân tích chưa quen thuộc. Các mẫu có thể giảm đáng kể thời gian cần thiết để phát triển một phương pháp hoàn toàn mới.

Chế độ ứng dụng

Phần mềm ICP Expert sử dụng các ứng dụng phần mềm dành riêng cho ứng dụng cho phép người dùng ở mọi cấp độ kỹ năng tự tin chạy phân tích ICP-OES.

Người có quyền quản trị viên có thể chọn phương pháp ứng dụng nào khả dụng cho từng người dùng. Sau đó, người dùng có thể đi đến và chọn từ các ứng dụng ICP khả dụng cho họ (Hình 2, bước 1). Ứng dụng tự động tải phương pháp (Hình 2, bước 2). Sau đó, người dùng có thể nhập thông tin mẫu và bắt đầu phân tích bằng cách khởi động plasma và nhấp vào nút RUN (Hình 2, bước 3).

Phương pháp từng bước này đảm bảo rằng tất cả người dùng có thể đạt được kết quả chính xác và có thể tái tạo với quá trình đào tạo tối thiểu. Các ứng dụng có thể dễ dàng được nhập và trao đổi với những người dùng khác bằng cách sử dụng công cụ Applet Management (Quản lý ứng dụng) tích hợp sẵn.



Hình 2. Phần mềm ICP Expert bao gồm một số phương pháp có sẵn cho các ứng dụng phổ biến. Với ba bước, nhà phân tích có thể bắt đầu phân tích.

Phát triển phương pháp được đơn giản hóa

Phần mềm ICP Expert chứa một số công cụ thông minh để đơn giản hóa quá trình phát triển phương pháp. Các công cụ này cho phép các nhà phân tích dành ít thời gian hơn để thiết lập phương pháp và nhiều thời gian hơn để chạy mẫu (1, 2).

AVS Parameter Calculator (Bảng tính thông số cho AVS) là một công cụ hữu ích cung cấp thời gian khuyến nghị cho các thông số phương pháp, bao gồm thời gian và tốc độ dòng chảy, từ loại ống và chiều dài ống do nhà phân tích xác định.

AVS Parameter Calculator

Instrument Parameters

Sample pump tube type: White/White

Internal Diameter (ID) in mm: 1.02

Autosampler tube length (mm): 1000

Autosampler tube rinses: 3

Recommended Configuration

Minimum loop volume (mL): 0.5

Loop volume (mL): 0.5

AVS pump uptake rate (mL/min): 36.7

AVS pump inject rate (mL/min): 9.9

Uptake delay (s): 6.4

Bubble inject time (s): 1.8

Preemptive rinse time (s): 1.1

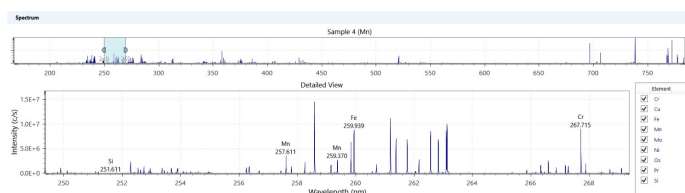
Stabilization time (s): 5

Apply Cancel

Hình 3. Bảng tính thông số AVS trong phần mềm ICP Expert

Chức năng Timing Monitor (Giám sát thời gian) trong phần mềm cho phép người dùng tối ưu hóa thời gian và điều kiện đo của họ với tín hiệu đọc rõ ràng cho toàn bộ quy trình từ mẫu này sang mẫu khác.

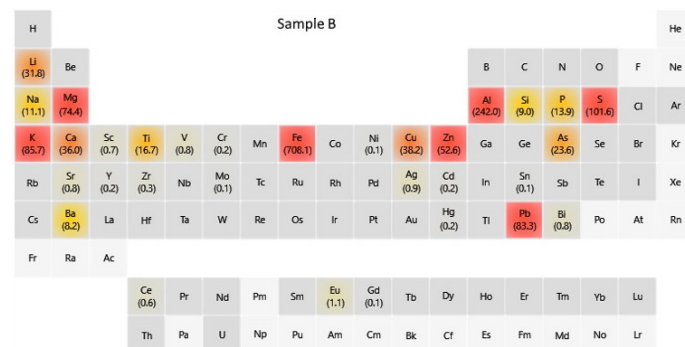
IntelliQuant Screening (có trong mô-đun phần mềm Pro-pack) cho phép người dùng chạy khảo sát bán định lượng nhanh các mẫu. IntelliQuant Screening thu thập dữ liệu từ toàn bộ dải quang phổ từ 167 đến 785 nm chỉ trong vòng 15 giây, cho mỗi mẫu, như thể hiện trong Hình 4.



Hình 4. Có thể thu thập toàn bộ bước sóng chỉ trong vòng 15 giây.

Sử dụng dữ liệu này, IntelliQuant Screening hiển thị nồng độ tương đối của tối đa 70 nguyên tố trong một mẫu trên màn hình bảng tuần hoàn (xem Hình 5). Bất kỳ nhiễu tiềm ẩn nào cũng được xác định và trình bày cho người dùng theo cách đơn giản và rõ ràng. Các bước sóng phân tích tối ưu được xác định, dựa trên các nhiễu tiềm ẩn và các yếu tố khác. Tất cả thông tin này được cung cấp tự động, không yêu cầu có thông tin trước về thành phần của các mẫu đang được đo hay chuyên môn về phổ.

Với những thông tin chi tiết do IntelliQuant Screening cung cấp, người dùng có thể dễ dàng tạo ra phương pháp định lượng tùy chỉnh để phân tích mẫu bằng cách nhập các bước sóng được khuyến nghị vào một bảng tính mới.



Hình 5. IntelliQuant tạo ra bản đồ nhiệt để trình bày trực quan nồng độ tương đối của các nguyên tố có trong mẫu. Thông tin cung cấp hiểu biết sâu sắc hữu dụng về phân tích mẫu, giúp phát triển phương pháp.

Quản lý dữ liệu

ICP Expert có các công cụ tích hợp để hợp lý hóa quy trình phân tích dữ liệu của bạn. Hàng tóm tắt tự động chọn kết quả tốt nhất cho mỗi bước sóng từ tất cả các phép đo có sẵn của một mẫu và tập hợp chúng thành một hàng. Tất cả dữ liệu đo lại, chẳng hạn như pha loãng tương tác, được lưu giữ và sắp xếp theo mẫu và có thể thu gọn để chỉ hiển thị tóm tắt một dòng.

	Rack:Tube	Solution Label	Timestamp	As 188.980 nm ppm	Ba 455.403 nm ppm	Cd 214.439 nm ppm	Co 238.892 nm ppm	Cr 267.716 nm ppm
☐	S1:1	Blank	22/11/2023 1:21:28 PM	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
☐	S1:2	Standard 1	22/11/2023 1:22:08 PM	5.00	5.00	5.00	5.00	5.00
☐	S1:2	Sample 1	22/11/2023 1:33:51 PM	5.01	5.01	5.01	5.00	5.00
☒	S1:2	Summary	22/11/2023 1:33:51 PM	5.01	5.01	5.01	5.00	5.00
☐	S1:2	Original	22/11/2023 1:22:49 PM	5.01	5.01	5.01	5.00	5.00
☐	S1:2	Dilution - 10	22/11/2023 1:33:51 PM	5.42	5.65	5.59	5.43	5.51
☐	S1:2	Sample 2	22/11/2023 1:35:23 PM	4.98	4.99	4.99	4.98	4.99
☒	S1:2	Summary	22/11/2023 1:35:23 PM	4.98	4.99	4.99	4.98	4.99
☐	S1:2	Original	22/11/2023 1:23:29 PM	4.98	4.99	4.99	4.98	4.99
☐	S1:2	Dilution - 10	22/11/2023 1:35:23 PM	4.95	5.22	5.16	5.03	5.09

Hình 6. Summary Row (Tóm tắt hàng) hiển thị tóm tắt một dòng về kết quả tốt nhất hoặc tối ưu và chế độ xem mở rộng hiển thị tất cả các phép đo cho mỗi lọ mẫu.

Định dạng các điều kiện ngoại lệ

Tính năng Định dạng các điều kiện ngoại lệ (Outlier Conditional Formatting: OCF) cho phép người dùng ICP Expert xác định các kết quả có khả năng gây ra vấn đề. OCF sử dụng một hoặc nhiều quy tắc có thể định cấu hình dựa trên màu sắc để kiểm tra kết quả trên màn hình phân tích (Hình 7). Ví dụ, kết quả sẽ được đánh dấu nếu chúng:

- Trên phạm vi nồng độ được xác định
- Có %RSD cao
- Dưới giới hạn phát hiện của phương pháp (MDL)
- Không đạt các thử nghiệm chuẩn nội bộ

Nếu có nhiều bước sóng cho một thành phần trong bảng tính, OCF có thể làm nổi bật sự không nhất quán trong kết quả giữa các bước sóng. Việc thu được các kết quả khác nhau cho cùng một thành phần có thể chỉ ra sự cố nhiều hoặc hiệu chuẩn tiềm ẩn trên một hoặc nhiều bước sóng. Các kết quả được đánh dấu cũng sẽ được Summary Row hủy bỏ.

	Rack:Tube	Solution Label	Outlier Summary	Sb 206.834 nm ppm	Sb 217.582 nm ppm	Sb 231.146 nm ppm
☐	1:1	Blank		0.00	0.00	0.00
☐	1:2	Cr				
☐	1:3	Sb		50.00	50.00	50.00
☒	1:8	Cr	F	0.12	0.05	0.05
☐	1:9	Sb		4.91	4.92	4.88
☐	1:10	Sb+Cr	F	5.65	5.14	5.11
☐	1:11	Test3				
☐	1:12	Test4				

Outliers for [Sb+Cr]:
Element Concentration % RSD > Pass Value: Sb

Hình 7. Định dạng các điều kiện ngoại lệ (OCF) cung cấp một cách đơn giản để người dùng xác định các kết quả có khả năng gây ra vấn đề. Các kết quả không đáp ứng các quy tắc đã chỉ định sẽ được đánh dấu bằng một chữ cái tương ứng với chế độ lỗi và một cờ màu để xác định nhanh (chữ 'F' màu xanh lá cây trong hình ảnh này).

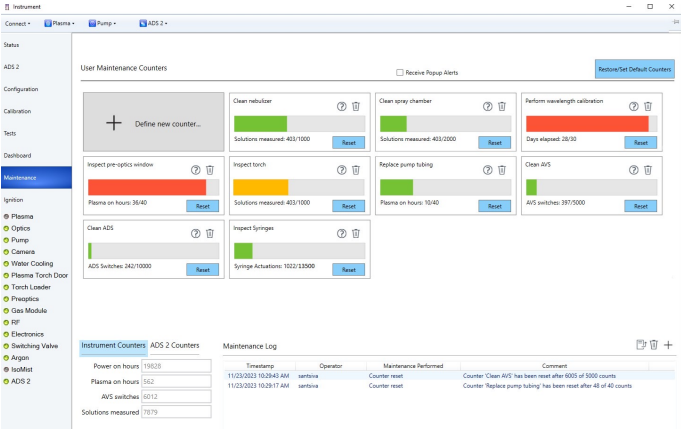
Phản hồi bảo trì sớm

Cả hai thiết bị 5800 và 5900 đều có hơn 100 cảm biến theo dõi hiệu suất của chúng. Phần mềm ICP Expert bao gồm chức năng phản hồi bảo trì sớm (EMF) sử dụng các cảm biến này và các bộ đếm khác để cảnh báo người vận hành khi cần bảo trì.

Mã màu đèn giao thông của các bộ đếm cho biết hoạt động bảo trì nào cần được thực hiện ngay lập tức và hoạt động nào có thể chờ (Hình 8). Các bộ đếm hữu ích cho hầu hết các ứng dụng chung, nhưng người dùng có thể đặt giới hạn bộ đếm cho phù hợp với các yêu cầu cụ thể của họ.

Nhật ký bảo trì được tích hợp vào EMF ghi lại lịch sử bảo trì của ICP-OES dưới dạng kỹ thuật số. Khi khắc phục sự cố, bạn có thể dễ dàng xác định xem thiết bị đã được bảo trì đầy đủ hay chưa.

EMF giảm thời gian chết và chi phí sửa chữa bằng cách lên lịch bảo trì định kỳ các thành phần dựa trên mức sử dụng thực tế, thay vì theo các khoảng thời gian đã đặt.



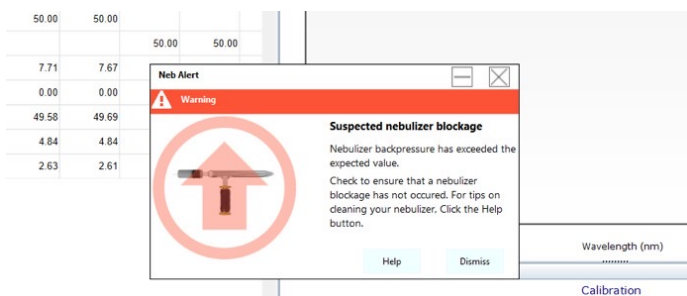
Hình 8. Chức năng phản hồi bảo trì sớm với nhật ký bảo trì tích hợp giúp bảo trì thiết bị của bạn đúng cách, giảm thời gian ngừng hoạt động ngoài kế hoạch và đảm bảo bạn tiếp tục tạo ra kết quả nhất quán, chất lượng cao.

Rửa thông minh

Chức năng phần mềm rửa thông minh có sẵn trong mô-đun phần mềm Pro-pack tùy chọn cho ICP Expert. Rửa thông minh theo dõi cường độ của các bước sóng phân tử được chỉ định trong thời gian rửa. Chức năng này tự động kết thúc rửa khi các cường độ này đạt đến ngưỡng. Ngưỡng dựa trên cài đặt rửa đã được chọn: Kỹ lưỡng (Thorough), Vừa phải (Moderate) hoặc Nhanh (Quick). Thời gian rửa thay đổi, tùy thuộc vào thời gian rửa từng mẫu riêng lẻ đến ngưỡng. Rửa thông minh cải thiện thông lượng mẫu trong khi vẫn giữ nguyên độ chính xác của kết quả.

Neb Alert (cảnh báo đầu phun)

Neb Alert là một tính năng thông minh của phần mềm ICP Expert theo dõi áp suất ngược của đầu phun sương trong quá trình phân tích. Neb Alert sẽ cảnh báo người dùng (Hình 9) nếu phát hiện thấy tắc nghẽn hoặc rò rỉ tiềm ẩn - một vấn đề thường gặp khi phân tích các mẫu có hàm lượng tổng chất rắn hòa tan (TDS) cao hoặc các mẫu vẫn chứa các hạt. Cảnh báo cho phép nhà phân tích dừng phân tích và khắc phục sự cố thay vì tiếp tục và thu thập dữ liệu có khả năng không chính xác.



Hình 9. Cảnh báo Neb cung cấp thông báo tức thời cho người dùng nếu phát hiện thấy ống phun sương bị tắc hoặc rò rỉ.

Điều khiển phụ kiện

Thiết bị lấy mẫu tự động Agilent SPS 4 được điều khiển hoàn toàn thông qua phần mềm ICP Expert. Người dùng có thể chọn loại giá đỡ mẫu, tốc độ bơm rửa và điều khiển đầu hút mẫu từ bên trong phần mềm.

Hoạt động của buồng phun được điều khiển nhiệt độ IsoMist có thể lập trình cũng được tích hợp hoàn toàn vào phần mềm ICP Expert.

Việc điều khiển van chuyển dòng Agilent Advanced Valve System (AVS) 6 hoặc 7 cổng và hệ thống pha loãng Agilent Advanced Dilution System 2 (ADS 2) được tích hợp hoàn toàn và được điều khiển thông qua phần mềm ICP Expert thông qua mô-đun phần mềm Pro-pack tùy chọn. (Phiên bản AVS 4 cổng được hỗ trợ bởi phần mềm cơ sở.) Việc tích hợp đầy đủ AVS và ADS 2 đảm bảo thời gian tối ưu, không giống như các phụ kiện van chuyển dòng của bên thứ ba sử dụng phần mềm điều khiển độc lập phức tạp. ICP Expert kết hợp Bảng tính thông số AVS giúp thiết lập và phát triển phương pháp của AVS 6/7 dễ dàng hơn. Hiện cũng bao gồm tính năng Giám sát thời gian AVS/ADS để tối ưu hóa thời gian và thông số.

Thiết bị làm lạnh tuần hoàn của Agilent cho phép người dùng theo dõi và cài đặt các thông số làm mát bằng nước trực tiếp từ máy tính của thiết bị.



Hình 10. Thiết bị làm lạnh tuần hoàn của Agilent

Thông báo trên màn hình cho phép phòng thí nghiệm phản ứng ngay lập tức với các lỗi và tránh các sự cố nghiêm trọng hơn.

Điều khiển liên mạch Hệ thống pha loãng Agilent Advanced Dilution System 2

Agilent Advanced Dilution System 2 (ADS 2) được tích hợp sẵn vào ICP Expert để có trải nghiệm pha loãng tự động liên mạch.

ADS 2 tự động hóa các tác vụ thủ công và được tối ưu hóa để tối đa hóa thông lượng với các chức năng sau:

- Hiệu chuẩn đa điểm từ một chuẩn lưu trữ duy nhất; không cần phải tạo chuẩn thủ công, tiết kiệm thời gian và tránh sai sót.
- Autocalibration Assistant (Trợ lý hiệu chuẩn tự động) (Hình 11) có thể đề xuất các chuẩn hiệu chuẩn trên một phạm vi nồng độ xác định bằng cách sử dụng danh sách chuẩn lưu trữ chung tích hợp. Nó tự động tính toán các hệ số pha loãng cần thiết để tạo chính xác từng chuẩn ở nồng độ yêu cầu.

Element	Minimum Concentration	Maximum Concentration	Calibration Points	Calibration Weighting
As	10.00	100.00	3	☒
Ca	200.00	100.00	3	☒
Cd	10.00	100.00	3	☒
Co	200.00	100.00	3	☒
Mn	10.00	100.00	3	☒

Stock Name	As	Ca	Cd	Mg	Mn	Na	P
Calibration mix 2	100.00	100.00	100.00				
Calibration mix major	100.00	100.00	100.00				
ICV-4 QC standard	100.00	100.00	100.00				
ICV-7 QC standard	10.00	100.00	5.00	500.00	15.00	100.00	
QCSTD-27 QC standard	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	
ANAL-8 QC standard			100.00	50.00			

Import	From Stock	Dilution Factor	As	Ca	Cd	Mg	Mn	Na	P
☒	Calibration mix 2	100.00	0.20	0.20	0.20				
☒	Calibration mix 2	20.00	5.00	5.00	5.00				
☒	Calibration mix 2	10.00	10.00	10.00	10.00				
☒	Calibration mix major	100.00	1.00	1.00	1.00				
☒	Calibration mix major	4.99	100.20	100.20	100.20				
☒	Calibration mix major	2.50	200.00	200.00	200.00				

Hình 11. Autocalibration Assistance có thể chuẩn bị các tiêu chuẩn từ dung dịch gốc được chỉ định.

- Pha loãng tương tác tự động; trong trường hợp có kết quả không mong muốn, chẳng hạn như phép đo mẫu nằm ngoài phạm vi hiệu chuẩn hoặc khi tỷ lệ chuẩn nội nằm ngoài ngưỡng tùy chỉnh đã xác định. Sau đó, tính năng hàng tóm tắt sẽ tự động chọn kết quả tối ưu cho từng thành phần trong số các phép đo khả dụng.
- Danh sách pha loãng cho phép tùy chỉnh thành phần và bước sóng nào có thể kích hoạt pha loãng phản ứng trên cơ sở từng mẫu, đảm bảo bạn chỉ thực hiện pha loãng khi cần.

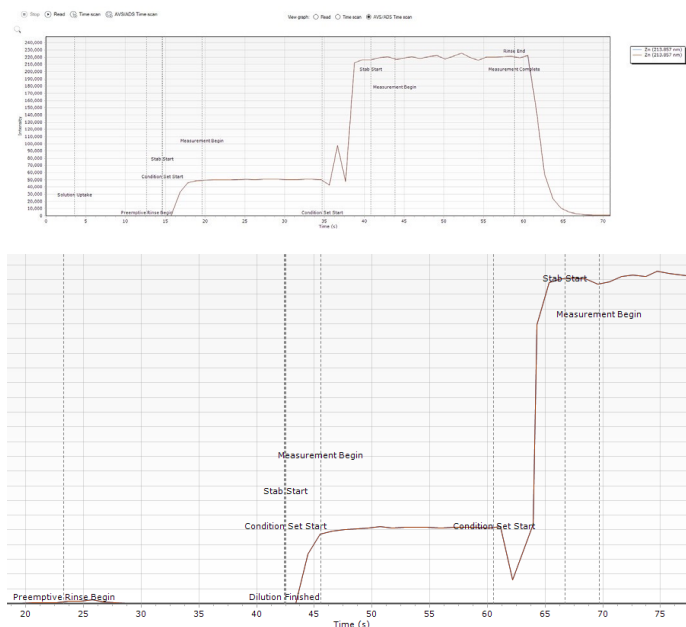
- Pha loãng theo quy định; trong quá trình thiết lập phương pháp, các nhà phân tích có thể nhập hệ số pha loãng (theo quy định) đã xác định và ADS 2 sẽ tự động thực hiện pha loãng theo quy định, loại bỏ bước thủ công khỏi quy trình làm việc, cải thiện độ chính xác, giảm ô nhiễm và đồ dùng phòng thí nghiệm bằng nhựa dùng một lần.
- Sơ đồ đường dẫn dòng chảy theo thời gian thực để hỗ trợ người dùng hiểu và khắc phục sự cố ADS 2 của họ, kết hợp với nội dung trợ giúp chi tiết.

Khả năng tương thích của ESI PrepFast và SampleSense

5800 và 5900 ICP-OES cũng có thể được ghép nối với hệ thống pha loãng tự động ESI prepFAST và van chuyển đổi SampleSense. Lưu ý phần mềm ESI SC cần chạy ở chế độ nền để tích hợp với ICP Expert.

Giám sát thời gian với AVS/ADS

Các nhà phân tích có thể khắc phục sự cố hệ thống AVS và ADS 2 của họ bằng cách sử dụng Timing Monitor. Nhiều vấn đề khác nhau với hệ thống giới thiệu mẫu có thể được phát hiện thông qua biểu đồ Timing Monitor. Điều này, kết hợp với nội dung mở rộng của Trung tâm trợ giúp và học tập, không chỉ hỗ trợ chẩn đoán sự cố mà còn giúp hiểu các bước tiếp theo sau khi sự cố được tìm thấy

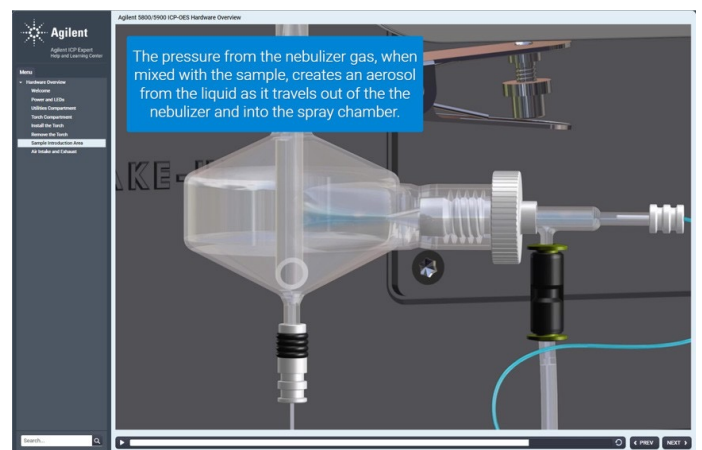


Hình 12. Màn hình theo dõi thời gian AVS/ADS toàn màn hình (trên) và thu phóng (dưới), hiển thị tín hiệu chất phân tích trong mỗi bước của phương pháp.

Trung tâm trợ giúp và học tập toàn diện

ICP Expert có Trung tâm trợ giúp và học tập toàn diện và tương tác (Hình 13). Tài nguyên này bao gồm một bộ video hướng dẫn mở rộng về cách thực hiện các tác vụ liên quan đến phần cứng và phần mềm phổ biến cùng với nội dung chi tiết về ICP-OES, AVS 6/7 và ADS 2 để hiểu rõ hơn về một số chức năng nhất định và hỗ trợ khắc phục sự cố. Các video giúp cải thiện sự tự tin và kiến thức của những người vận hành ít kinh nghiệm hơn bằng cách giúp họ thiết lập và bảo trì thiết bị của mình theo cách tốt nhất.

Các chức năng như Neb Alert được tích hợp với Trung tâm trợ giúp và học tập. Điều này có nghĩa là thông tin và video phù hợp sẽ được hiển thị khi cảm biến phát hiện ra sự cố.



Hình 13. Trung tâm trợ giúp và học tập của ICP Expert có các hướng dẫn bằng video chi tiết về cách thực hiện các tác vụ thiết lập và bảo trì thiết bị thông thường.

Tùy chọn chỉnh sửa phù hợp với mọi tình huống

Phần mềm ICP Expert cung cấp một số tùy chọn để hiệu chỉnh nhiều nền hoặc nhiễu phổ:

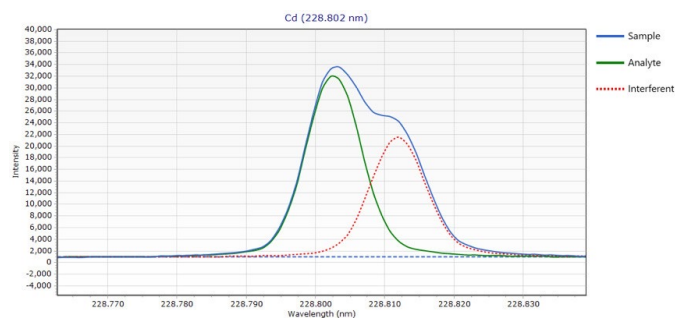
- Hiệu chỉnh nền phù hợp (Fitted background correction: FBC) sử dụng thuật toán tiên tiến để mô hình hóa tín hiệu nền dưới đỉnh chất phân tích. FBC được áp dụng đồng thời khi đo đỉnh chất phân tích (3), cung cấp hiệu chỉnh nền nhanh chóng, dễ dàng và chính xác. Không yêu cầu phát triển phương pháp, FBC cung cấp hiệu chỉnh chính xác và tự động cho cả cấu trúc nền đơn giản và phức tạp.
- Hiệu chỉnh ngoài đỉnh là kỹ thuật hiệu chỉnh ICP-OES truyền thống cho phép nhà phân tích chọn thủ công các điểm hiệu chỉnh - từ bên trái, bên phải hoặc cả hai bên của đỉnh phân tích.

- Hiệu chỉnh kỹ thuật đường cong tự động nhanh (Fast automated curve-fitting technique: FACT). Kỹ thuật FACT độc quyền của Agilent áp dụng mô hình phổ để phân tích chính xác các phổ phân tích phức tạp (4). FACT là một giải pháp thay thế mạnh mẽ cho Hiệu chỉnh liên nguyên tố (Inter-Element Correction: IEC) và cũng có thể được sử dụng để hiệu chỉnh chính xác đường nền. Nó hữu ích khi quan sát thấy các cấu trúc nền cực kỳ phức tạp và các kỹ thuật hiệu chỉnh nền khác như FBC hoặc hiệu chỉnh ngoài đỉnh không phù hợp.

FACT hiệu chỉnh phổ thời gian thực bằng kỹ thuật mô hình hóa phổ để giải chồng (deconvolution) bằng toán học (tách) tín hiệu chất phân tích khỏi phổ thô.

Các mô hình được xây dựng bằng cách đo các thành phần dự kiến riêng biệt. Phương pháp này thường bao gồm đo dung dịch trắng, dung dịch chất phân tích tinh khiết và dung dịch nhiều tinh khiết. Hình 14 cho thấy mô hình FACT được áp dụng cho vạch phát xạ Cd ở 228,802 nm, bị nhiễu từ As. FACT tách hai đỉnh về mặt toán học cho phép đo chính xác tín hiệu chất phân tích. Đối với các nhiễu chồng lẫn không thể giải quyết bằng FBC hoặc FACT, có thể sử dụng hiệu chỉnh liên phần tử (IEC).

Có thể áp dụng hiệu chỉnh nền cho từng chất phân tích sau khi phân tích thông qua màn hình hiển thị phổ.



Hình 14. Ví dụ về mô hình FACT được áp dụng cho Cd 228,802 nm, với sự can thiệp từ As. Một dung dịch chứa ~ 1000 µg/L Cd trong 20 mg/L As đã được phân tích trên Agilent 5900 ICP-OES.

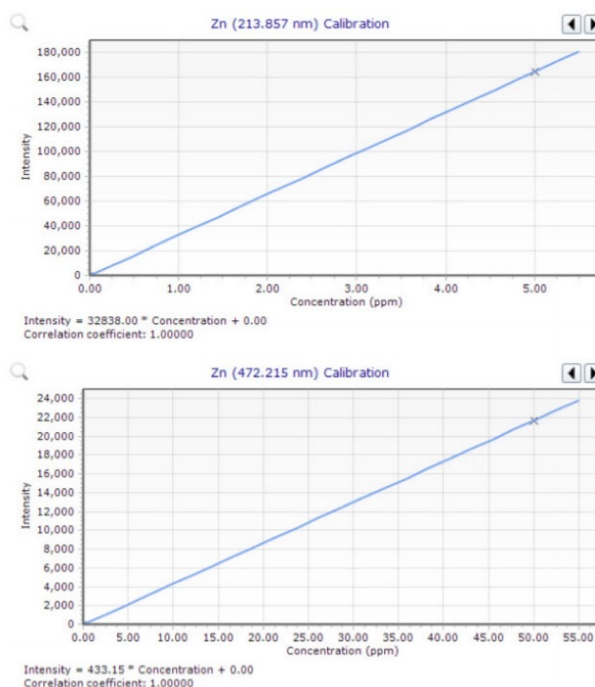
Khoảng động học được mở rộng

Sử dụng khoảng bước sóng rộng của detector CCD Vista Chip III, chức năng MultiCal của phần mềm ICP Expert có thể tạo ra nhiều khoảng hiệu chuẩn để phân tích mẫu. Khả năng này làm tăng khoảng động học tuyến tính.

Nhiều nguyên tố có thể được đo bằng nhiều hơn một bước sóng. Các bước sóng khác nhau thường có độ nhạy khác nhau, do đó, việc sử dụng kết hợp các bước sóng cho cùng một nguyên tố sẽ mở rộng phạm vi động học của việc xác định. Việc chọn đường nhạy nhất sẽ mang lại giới hạn phát hiện tốt nhất và phép đo chính xác các chất phân tích ở mức thấp. Các đường kém nhạy hơn cho phép đo các chất phân tích có nồng độ cao hơn trong cùng một lần đo.

Chức năng MultiCal chỉ yêu cầu một vài tiêu chuẩn để xác định phạm vi hiệu chuẩn cho từng bước sóng. Hình 15 hiển thị biểu đồ hai đường chuẩn cho Zn. Đường chuẩn đầu tiên sử dụng một bước sóng nhạy cho Zn, với phạm vi nồng độ từ 0 đến 5 ppm. Một bước sóng kém nhạy hơn đã mở rộng phạm vi hiệu chuẩn lên đến 55 ppm.

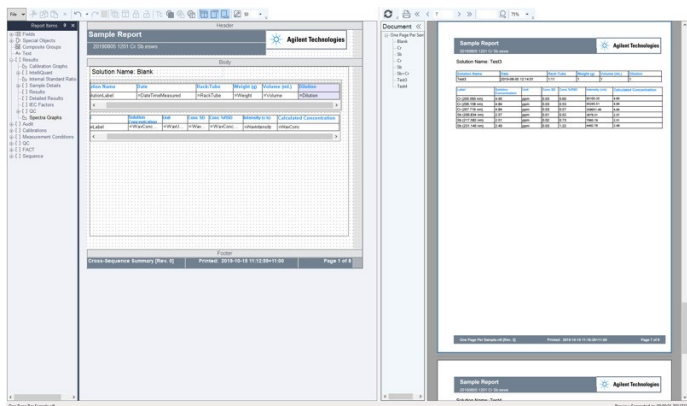
Dựa trên nồng độ đo được cho từng bước sóng, MultiCal báo cáo kết quả phù hợp dựa trên các phạm vi hiệu chuẩn đã xác định cho các bước sóng đó. Điều này mở rộng khoảng động học của phép phân tích từ phần tỷ (ppb) sang mức phần trăm (%). Các phạm vi nồng độ có thể chồng chéo nhau, cung cấp một cách đơn giản để xác minh kết quả mẫu.



Hình 15. Trong ví dụ này, MultiCal sử dụng vạch phát xạ Zn 213,857 nm để đo nồng độ trong phạm vi từ 0 đến 5 ppm và vạch 472,215 nm cho nồng độ cao hơn, lên tới 55 ppm.

Tùy chọn báo cáo

Phần mềm ICP Expert bao gồm nền tảng Báo cáo thông minh (Intelligent Reporting) OpenLab. Nền tảng này cho phép người dùng thiết lập bản báo cáo để chỉ bao gồm dữ liệu cần thiết và tùy chỉnh bố cục báo cáo, bao gồm thêm logo công ty. Sau khi thiết lập, bố cục và thiết kế báo cáo có thể được lưu dưới dạng mẫu để sử dụng trong tương lai, xem Hình 16.



Hình 16. Nền tảng Báo cáo thông minh OpenLab có thể tạo báo cáo tùy chỉnh.

Mở rộng hỗ trợ QC cho các phương pháp USP <232>/<233> và ICH Q3D

Phần mềm ICP Expert hỗ trợ tuân thủ các yêu cầu của USP và ICH để đo tạp chất nguyên tố trong các sản phẩm dược phẩm và các thành phần của chúng. Các tính năng của phần mềm bao gồm:

- Máy tính giá trị J (J-value spike calculator)
- Đánh dấu giới hạn tiêu chí chấp nhận đạt/không đạt cho các thử nghiệm thẩm định (validation test) và phân tích thành phần sản phẩm hoặc thành phần.
- Tương thích với gói mở rộng Agilent 21 CFR 11.
- Tạo điều kiện thuận lợi cho việc thiết lập, chạy và thẩm định phương pháp, tuân thủ USP<232>/<233> và ICH QRD.
- Phương pháp mẫu để đẩy nhanh quá trình phát triển phương pháp.

Điều khiển từ xa với Gói phần mềm tự động hóa

Automation Software Pack là một bộ công cụ lập trình (SDK) cho phép phần mềm máy khách của bên thứ ba kiểm soát thiết bị ICP-OES—gửi lệnh và nhận dữ liệu thời gian thực và cập nhật trạng thái thiết bị qua kết nối Internet. Đây là điều khiển từ xa thực sự và cung cấp tính linh hoạt tối đa.

Chuyển và xuất dữ liệu

Kết quả dễ dàng được chuyển đến Hệ thống quản lý thông tin phòng thí nghiệm (LIMS) hoặc ứng dụng khác bằng cách sử dụng các tùy chọn xuất dữ liệu được cung cấp trong phần mềm ICP Expert.

Dữ liệu có thể được xuất ở định dạng CSV để chuyển trực tiếp sang bảng tính hoặc chương trình khác để xử lý dữ liệu, phân tích xu hướng hoặc theo dõi quy trình. Phần mềm ICP Expert cho phép thực hiện nhiều tác vụ: Dữ liệu thu được có thể được xem xét, xử lý và báo cáo trong khi ICP-OES thu thập dữ liệu cho lô mẫu hiện tại..

Phiên bản Base và Pro-pack của phần mềm ICP Expert

Phần mềm ICP Expert có hai phiên bản:

base- và Pro-pack. Phần mềm ICP Expert base-pack được sử dụng để thiết lập thiết bị ICP-OES dễ dàng và vận hành thường xuyên. Phần mềm Pro-pack cung cấp các tính năng khác để nâng cao năng suất và hiệu suất của thiết bị bao gồm:

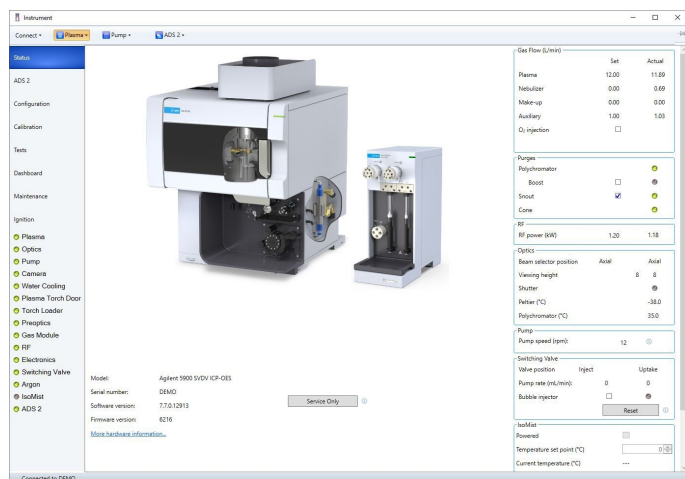
- QC theo tốc độ: tự động chạy các giải pháp QC sau một số lượng mẫu xác định
- IntelliQuant Screening bao gồm chế độ Snapshot để có thông tin chi tiết về mẫu nhanh
- Xuất sang Microsoft Excel (Excel không được cung cấp)
- Hỗ trợ cho các máy lấy mẫu tự động của bên thứ 3 như Cetac Oil 7400, 7600, ASX520, 560, 1400 và 1600 và EXR8, ESI
- SC-2, 4, 8, 14 và Micro và AIM 1250 và 3600
- Theo dõi xu hướng áp suất ngược argon đến máy phun sương và lượng khí argon phát ra trên mỗi dung dịch
- Bổ sung oxy và xả nitơ
- Kiểm soát tích hợp phụ kiện van chuyển đổi Hệ thống van nâng cao (AVS 6 hoặc 7)
- Kiểm soát tích hợp Hệ thống pha loãng nâng cao 2 (ADS 2)
- Kiểm soát hệ thống pha loãng tự động ESI prepFAST và van chuyển đổi SampleSense
- Rửa thông minh
- Khả năng tùy chỉnh số lượng bản sao cho các loại dung dịch khác nhau

Phần mềm ICP Expert tuân thủ 21 CFR Phần 11

Gói mở rộng 21 CFR 11 tùy chọn có sẵn để hỗ trợ các yêu cầu của US FDA 21 CFR Phần 11 (và các quy định tương đương ở các quốc gia khác). Gói này hỗ trợ việc chỉ định quyền truy cập của người dùng, tạo đường dẫn kiểm toán, hồ sơ điện tử và chữ ký điện tử. Cấu hình và hành động của Autodilutor cũng được ghi lại bằng các tính năng này. Gói mở rộng tương thích với phiên bản Pro-pack của ICP Expert.

Khắc phục sự cố dễ dàng

Như được hiển thị trong Hình 17, trang Trạng thái thiết bị (Instrument Status) cung cấp tổng quan ngay lập tức về trạng thái của hệ thống. Giám sát nền liên tục, tự động cho phép bạn nhanh chóng kiểm tra trạng thái thiết bị hoặc khắc phục sự cố, nếu có sự cố phát sinh.



Hình 17. Xem trang Instrument Status tương tác để kiểm tra trạng thái hiện tại của thiết bị và xác định nguyên nhân gây ra sự cố.

Sơ đồ tương tác của thiết bị cung cấp tổng quan về trạng thái của thiết bị bao gồm AVS 6/7 hoặc ADS 2 nếu được lắp và gợi ý nguyên nhân có thể gây ra bất kỳ lỗi nào. Để có hướng dẫn chi tiết hơn, bảng điều khiển thiết bị cung cấp thông tin trực tiếp về nhiều thông số khác nhau, giúp dễ dàng tìm và sửa lỗi. Trạng thái được tự động cập nhật khi có bất kỳ thay đổi nào của hệ thống xảy ra.

www.agilent.com/chem/icp-oes

DE.8138078704

This information is subject to change without notice.

© Agilent Technologies, Inc. 2024
Printed in the USA, May 1, 2024
5994-1517EN

Kiểm tra hiệu năng của thiết bị

Đối với việc kiểm tra hiệu năng định kỳ của thiết bị, một bộ các bài kiểm tra có sẵn để tự động xác minh hiệu năng của thiết bị. Các tiện ích và thiết lập thiết bị kém, đặc biệt là hệ thống nước, khí, khí thải và đưa mẫu vào, thường là nguyên nhân gây ra các vấn đề về hiệu năng hoặc hỏng thiết bị. Các bài kiểm tra kiểm tra chức năng cơ bản của thiết bị để xác nhận rằng hệ thống đang hoạt động theo thông số kỹ thuật, đây có thể là một công cụ khắc phục sự cố quan trọng. Các bài kiểm tra để xác nhận lắp đặt và chức năng của AVS 6/7 và ADS 2 cũng có sẵn.

Khi hoàn tất chu kỳ kiểm tra, có thể xuất báo cáo ở định dạng PDF sang bất kỳ vị trí nào trên mạng cục bộ.

Tham khảo

1. Agilent IntelliQuant Software: For greater sample insight and simplified method development, Agilent publication, [5994-1516EN](#)
2. Agilent IntelliQuant Screening: Smarter and quicker semiquantitative ICP-OES analysis, Agilent publication, [5994-1518EN](#)
3. Fitted Background Correction (FBC) — fast, accurate and fully-automated background correction, Agilent Publication, [5991-4836EN](#)
4. Real-time Spectral Correction of Complex Samples using FACT Spectral Deconvolution Software, Agilent Publication, [5991-4837EN](#)