

サンプル位置の確認

Agilent 1290 Infinity III マルチサンプルと
Agilent InfinityLab サンプル ID リーダーを使用 – パート 1/2



概要

Agilent 1290 Infinity III マルチサンプルに Agilent InfinityLab サンプル ID リーダーを追加で取り付けると、サンプル位置を認識して Agilent OpenLab Acquisition ソフトウェアのシーケンステーブルでその位置を確認できます。バーコード利用を分析ワークフローに組み込むことができ、使いやすさの向上とエラーの減少によって、ユーザーの時間を節約できます。

はじめに

バーコード読み取りは、現代のラボで重要な役割を果たします。バーコード読み取りによってサンプルを処理し、サンプルが測定されたことを確認し、正しい結果をそれぞれ個々のサンプルにリンクできるためです。これは分析ラボで多くのサンプルを処理する場合は特に重要であり、さまざまな業界や組織に応用できます。この技術概要では、1290 Infinity III マルチサンプルとサンプル ID リーダーによってサンプル位置を特定し、OpenLab Acquisition ソフトウェアのシーケンステーブルで選択した位置を確認する方法を説明します。サンプルの位置確認にはパラベン化合物を使用します。パラベン化合物は通常、化粧品の抗菌剤として使用されます。¹ InfinityLab サンプル ID リーダーを備えた 1290 Infinity III マルチサンプルによるランダムに選択したサンプル位置の識別と、ソフトウェアによる完全なエンドツーエンドワークフローについては、他の 2 つのアジレント技術概要で説明しています。^{2,3}

実験方法

装置構成

- Agilent 1290 Infinity III ハイスピードポンプ (G7120A)
- Agilent 1290 Infinity III マルチサンプル (G7167B) と 2 つのバイアルトレイドローワーおよび Agilent InfinityLab サンプル ID リーダー (G4756A または Agilent 1260 Infinity III マルチサンプルと 1290 Infinity III マルチサンプルのオプション #110)
- Agilent 1290 Infinity III MCT (G7116B)
- Agilent 1290 Infinity III ダイオードアレイ検出器 (G7117B) と 10 mm の Agilent Max-Light フローセル
- Agilent InfinityLab Assist アップグレード (G7178A) (Agilent InfinityLab Assist インタフェース (G7179A) と Agilent InfinityLab Assist ハブ (G7180A) を含む)

ソフトウェア

Agilent OpenLab CDS、バージョン 2.8 以降

カラム

Agilent ZORBAX Eclipse Plus C18, RRHD, 2.1 × 100 mm, 1.8 μm (部品番号 959758-902)

LC メソッド

表 1. LC メソッド

パラメータ	設定値
溶媒	A) 水 B) ACN
流量	0.5 mL/min
グラジエント	時間 (分) %B 0 15 5 95 ストップタイム: 5 分 ポストタイム: 2 分
注入量	1 μL
ニードル洗浄	溶媒 B で 3 秒
カラム温度	45 °C
検出	254/4 nm、リファレンス波長 360/16 nm、 データレート 20 Hz

その他の部品

- バーコード付きバイアル (部品番号 5190-4032-ID)
- クリンピャップ、アルミニウム、PTFE/赤ラバーセプタム (部品番号 5061-3370)
- 40 バイアルサンプル容器、バーコード読み取り用の下部ホール付き (部品番号 5401-0068)
- サンプルトレイパレット、バーコード読み取り用に下部が開いている (G7167-60205)
- USB ハンドヘルドバーコードスキャナ (部品番号 5018-0003)

機器とワークフローの設定

サンプル ID リーダーモジュールは、1290 Infinity III マルチサンブラのバイアルドロワー領域に、下部ドロワーと入れ替えて挿入する必要があります。上の 3 つのドロワーは、サンプルバイアルトレイとして使用できます。サンプル ID リーダーは Agilent OpenLab CDS ソフトウェアにより自動的に認識され、マルチサンブラの OpenLab ソフトウェアのユーザーインターフェイスに QR コードスタイルのアイコンとして表示されます。

シーケンステーブルには、取り込み用 PC に接続されているハンドヘルドバーコードリーダーにより、バイアルバーコードが、予想されるバーコードのフィールドに入力されています (図 1)。サンプル名とデータファイル名のフィールドも、バーコードスキャンで入力できます。測定確認用のバイアル位置は、バイアル列に手動で入力しました。

使用した化学薬品はメチルパラベン、エチルパラベン、プロピルパラベン、ブチルパラベンなどです。パラベン類はアセトニトリルで 100 mg/L で溶解させ、個々の QR コード付きのバイアルに封入しました。化学薬品はドイツの VWR 社から購入しました。

サンプル

- サンプル 01: メチルパラベン
- サンプル 02: エチルパラベン
- サンプル 03: プロピルパラベン
- サンプル 04: ブチルパラベン

溶媒

使用したすべての溶媒は LC グレードです。超純水は、0.22 µm のメンブレナカートリッジ (Millipak) を装着した Milli-Q Integral システムで製造しました。

結果と考察

一般的な分析ワークフローでは、前処理されたサンプルは、サンプル ID の詳細情報を示すバーコードが付いた状態で到着します。このバーコードがサンプル名としてシーケンスリストに読み込まれました (図 1)。サンプルは下部にバーコードが付いたバイアルに移され、ユニークなバイアル ID 番号が、シーケンスリストの予想されるバーコード列に読み込まれました。バイアル位置は、バイアル列に手動で入力しました。

すべてのシーケンスの生成後に、サンプル ID リーダー付き 1290 Infinity III マルチサンブラのサンプルドロワーにサンプルトレイを挿入しました。ドロワーを閉じると、トレイ内のすべてのトレイが自動的にスキャンされ、情報が保存されました。シーケンスの開始時に、取り込み用ソフトウェアが、シーケンスリストから予想されるバーコードを用いて、スキャンしたバイアルからの情報とその位置を比較します。ソフトウェアは、シーケンスリストの順序に従って分析を実行します。シーケンス全体のデータ解析により、確認のために、注入リストと予想されるバーコード、および測定結果情報と個々のバイアル位置が表示されます (図 2)。

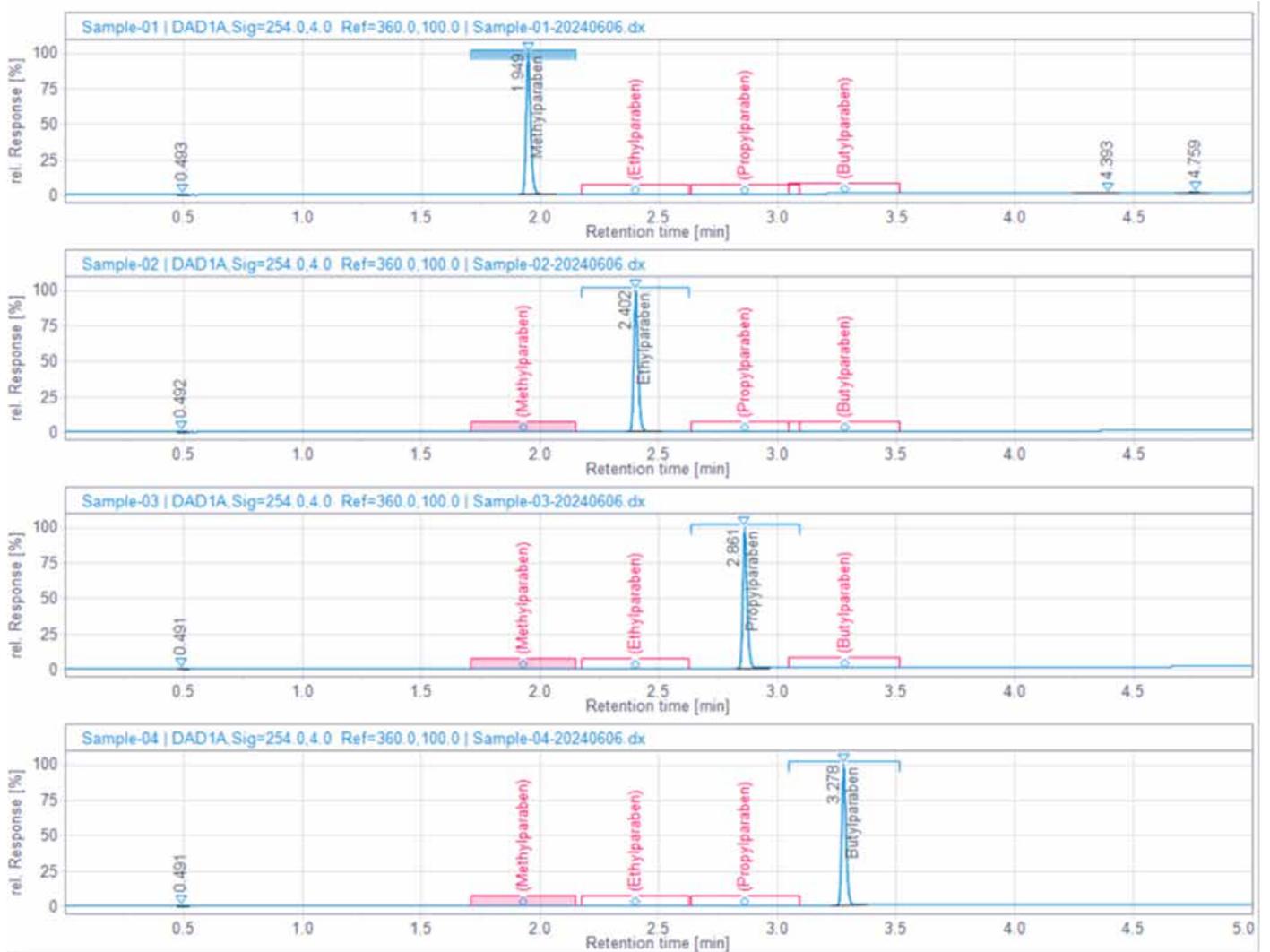
バイアルのバーコードがなかったり、個々のバーコードによりシーケンスリスト内で定義されている位置とバイアルの位置が対応しなかったりする場合、シーケンスオプションでエラー処理を設定できます。

正しくない場所に配置されているバイアルの処理方法は次の 2 つです。

1. 強制注入: この方法では、サンプルが注入され、所定の取り込みメソッドで測定され、採取されたデータが所定の方法で分析されます。データファイルでは、予想されるバーコードと不適合のバーコードの両方が報告されます。
2. 現在の注入を中断: この方法では、サンプルが注入されずにスキップされます。

	Action	Vial	Acq. method	Proc. method	Inj/Vial	Volume	Injection source	Sample name	Data file	Expected barcode
1	<input checked="" type="checkbox"/> Inject	D1F-A1	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		1 Use Method	HipAIs	Sample-01	Sample-01-20240606	36130101GD
2	<input checked="" type="checkbox"/> Inject	D1F-A2	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		1 Use Method	HipAIs	Sample-02	Sample-02-20240606	36130101GN
3	<input checked="" type="checkbox"/> Inject	D1F-A3	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		1 Use Method	HipAIs	Sample-03	Sample-03-20240606	36130101EI
4	<input checked="" type="checkbox"/> Inject	D1F-A4	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		1 Use Method	HipAIs	Sample-04	Sample-04-20240606	36130101ES

図 1. Agilent OpenLab ソフトウェアで使用されるシーケンステーブル。予想されるバイアルバーコードが外付けハンドヘルドバーコードリーダーでスキャンされ、選択したバイアル位置がバイアル列に入力されています。



Inj. #	Sample name	Data file	Acq. method	Proc. method	Vial	Barcode	Expected barcode
1	Sample-01	Sample-01-20240606.dx	Paraben-01	Paraben-01	D1F-A1	36130101GD	36130101GD
1	Sample-02	Sample-02-20240606.dx	Paraben-01	Paraben-01	D1F-A2	36130101GN	36130101GN
1	Sample-03	Sample-03-20240606.dx	Paraben-01	Paraben-01	D1F-A3	36130101EI	36130101EI
1	Sample-04	Sample-04-20240606.dx	Paraben-01	Paraben-01	D1F-A4	36130101ES	36130101ES

図 2. シーケンス実行後のデータ解析の結果。注入リストに、確認用の予想されるバーコードと一致するバーコード、および個々のバイアル位置が表示されています。クロマトグラムには、予想される化合物が表示されています。

図 3 に、**強制注入** オプションを使用した場合の、不適切な位置のバイアルからの注入結果を示します。注入リストでは、サンプル 03 の予想されるバーコードと実際のバーコードの間に不一致があります。この結果、クロマトグラムには、0.976 分のリテンションタイムで溶出した別の化合物が表示されています。このバーコード確認により、偽陽性または偽陰性のデータを提供する正しくない測定を誤って受け入れてしまうことを防止できます。

図 2 と図 3 のとおり、バーコードの一致/不一致のシナリオは、シーケンスサマリレポートで一目で把握できます。このレポートには、スキャンしたバーコードと予想されるバーコードに関する情報が、一致ステータスと共に表示されます (図 4)。

次のシナリオを表示できます。

表 2. 考えるバーコードシナリオのインジケータ

シナリオ	インジケータ
予想されるバーコードとスキャンしたバーコードが同じ	色分けなし
予想されるバーコードとスキャンしたバーコードが異なる	赤で表示
スキャンしたバーコードはないが、予想されるバーコードはある	赤で表示
スキャンしたバーコードがなく、予想されるバーコードもない	色分けなし

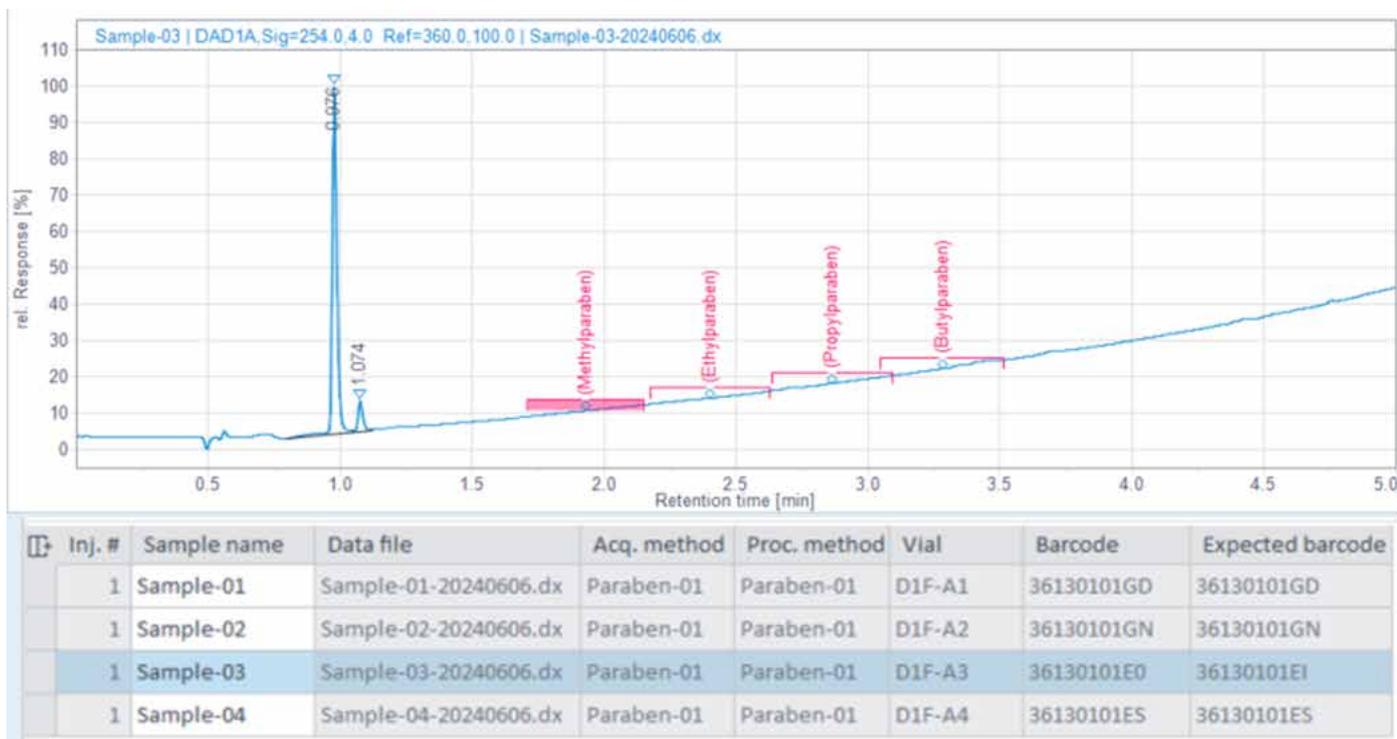


図 3. 所定の位置でのサンプル測定の確認。予想されるバーコードにより、誤って配置されているサンプルが明らかになります。

A

Sequence Summary Report (Short)



Sample ID Summary

Sample Name	Vial Position	Expected Barcode	Scanned Barcode	Status
Sample-01	D1F-A1	36130101GD	36130101GD	barcode match
Sample-02	D1F-A2	36130101GN	36130101GN	barcode match
Sample-03	D1F-A3	36130101EI	36130101EI	barcode match
Sample-04	D1F-A4	36130101ES	36130101ES	barcode match

B

Sequence Summary Report (Short)



Sample ID Summary

Sample Name	Vial Position	Expected Barcode	Scanned Barcode	Status
Sample-01	D1F-A1	36130101GD	36130101GD	barcode match
Sample-02	D1F-A2	36130101GN	36130101GN	barcode match
Sample-03	D1F-A3	36130101EI	36130101E0	barcode mismatch
Sample-04	D1F-A4	36130101ES	36130101ES	barcode match

図 4. バーコード一致のステータスを含むシーケンスサマリレポート。(A) 予想されるバーコードがすべてスキャンしたバーコードと一致 (図 2)
(B) スキャンしたバーコードが予想されるバーコードと一致せず、赤で表示されている (図 3)

結論

この技術概要では、Agilent 1290 Infinity III マルチサンプルと Agilent InfinityLab サンプル ID リーダーの、サンプル位置の確認機能について説明しています。マルチサンプルのサンプル ID リーダーにより識別されるバーコードに対して、シーケンス内で示されるバイアルの位置とバーコードを確認します。データ解析後に、バーコード確認と特定された位置が、サンプル測定の結果確認のために結果テーブルに表示されます。位置が正しくないサンプルを強調表示して、バーコードを報告できます。これにより、サンプル分析の確認において、時間を節約し、使いやすさを向上させ、エラーを減らすことができます。

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。

DE25242301

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2024

Printed in Japan, October 18, 2024

5994-7568JAJP

参考文献

- Aoyama, A.; Doi, T.; Tagami, T.; Kajimura, K. Simultaneous Determination of 11 Preservatives in Cosmetics by High-Performance Liquid Chromatography. *J. Chromatogr. Sci.* **2014**, *52*(9), 1010-1015.
- サンプル位置の特定と測定の確認 – Agilent 1290 Infinity III マルチサンプルと Agilent InfinityLab サンプル ID リーダーを使用 – パート 2/2. *Agilent Technologies technical overview*, publication number 5994-7569JAJP, **2024**.
- Agilent Advanced Sample Linking – ラボ情報管理システムからバイアルおよび分析結果までの包括的なワークフロー. *Agilent Technologies white paper*, publication number 5994-7570JAJP, **2024**.

