

## サンプル位置の特定と測定の確認

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



### 概要

Infinity III LC シリーズのリリースにより、Agilent 1290 Infinity III マルチサンプルラにオプションで Agilent InfinityLab サンプル ID リーダーを取り付けられるようになりました。これにより、サンプル位置を正確な場所を入力しなくても認識できます。バーコードは分析ワークフローの一部であるため、サンプル追跡により、各スケジュール済みサンプルの分析を確認できます。内蔵のサンプル ID リーダーのほか、追加で外付けハンドヘルドバーコードリーダーを PC に接続したり、適切なサンプルバーコード情報を含むスプレッドシートによってサンプル情報を導入したりすることもできます。この技術概要では、分析ワークフローにおいて、サンプル ID 読み取り用オートサンプルラを使用する場合に 1290 Infinity III マルチサンプルラを使用するメリットを説明します。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。

## はじめに

多くの分析ラボには、サンプル情報を分析データソフトウェアに取り込むためのバーコードリーダーがあります。この情報が、取り込みおよびデータ解析ソフトウェアのインターフェースに表示されます。1290 Infinity III マルチサンプルと内蔵のサンプル ID リーダーにより、サンプル ID と正しい位置を確認できます。これにより、バーコード導入から取り込みソフトウェアまでと、データ解析ソフトウェアでのサンプルとの関連付けの間で、サンプル処理に齟齬が発生するのを防ぐことができます。

この技術概要では、1290 Infinity III マルチサンプルと内蔵のサンプル ID リーダーによる、サンプル位置の自動特定について説明します。バイアルの下部にはバーコードが付いており、トレイの下から読み取ることができます。自動識別、位置、分析追跡の情報が保存されます。この実験では、さまざまなパラベン類を分析しました。個々のバイアルは、シーケンステーブルでバイアル位置を指定せずに、1290 Infinity III マルチサンプルにランダムに設置しました。

内蔵サンプル ID リーダーによる所定のサンプル位置でのサンプル測定の確認と、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。<sup>1,2</sup>

## 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 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 min 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、参照波長 360/16 nm、データレート 20 Hz

### その他の部品

- バイアルおよび底面バーコード (部品番号 5190-4032-ID)
- クリンピキャップ、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/ワークフローの設定

InfinityLab サンプル ID リーダーモジュールは、1290 Infinity III マルチサンプルのバイアルドローワーに、下部ドローワーと入れ替えて挿入する必要があります。上の 3 つのドローワーは、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、マルチサンプルの OpenLab ソフトウェアサイトのユーザーインターフェースに QR コードスタイルのアイコンとして表示されます。

バーコード機能を切り替えるには、シーケンス実行オプションで **Use Barcode Reader Before Injection** を選択します。シーケンステーブルでは、サンプル容器から直接、追加の外部バーコードを読み込んで、サンプル名とデータファイル名を指定できます。予想されるバーコードのフィールドには、ハンドヘルドスキャナで個々のバイアルからバーコードを読み込み、後でマルチサンプルに認識させることができます (図 1)。バイアルの位置は必ずしも必要ありません。バイアルトレイをマルチサンプルのバイアルトレイドローワーに挿入した後に、トレイ全体がスキャンされます。現在のシーケンスに属するバイアルが特定されて、取り込みを開始できます。

	Action	Vial	Acq. method	Proc. method	Inj/Vial	Volume	Injection source	Sample name	Data file	Expected barcode
1	<input checked="" type="checkbox"/> Inject		Parabene-01.amx	Paraben-01.pmx		1 Use Method	HipAls	Sample-01	Sample-01-20240528	36130101GD
2	<input checked="" type="checkbox"/> Inject		Parabene-01.amx	Paraben-01.pmx		1 Use Method	HipAls	Sample-02	Sample-02-20240528	36130101GN
3	<input checked="" type="checkbox"/> Inject		Parabene-01.amx	Paraben-01.pmx		1 Use Method	HipAls	Sample-03	Sample-03-20240528	36130101EI
4	<input checked="" type="checkbox"/> Inject		Parabene-01.amx	Paraben-01.pmx		1 Use Method	HipAls	Sample-04	Sample-04-20240528	36130101ES

図 1. 分析シーケンスに含まれるサンプルを示すシーケンステーブル。例えば、サンプル情報を含む外部バーコードを、サンプル名とデータファイルのフィールドに読み込むことができます。個々のバイアルのバーコードは、予想されるバーコードのフィールドに読み込みました。バイアルの位置は指定しませんでした。

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。

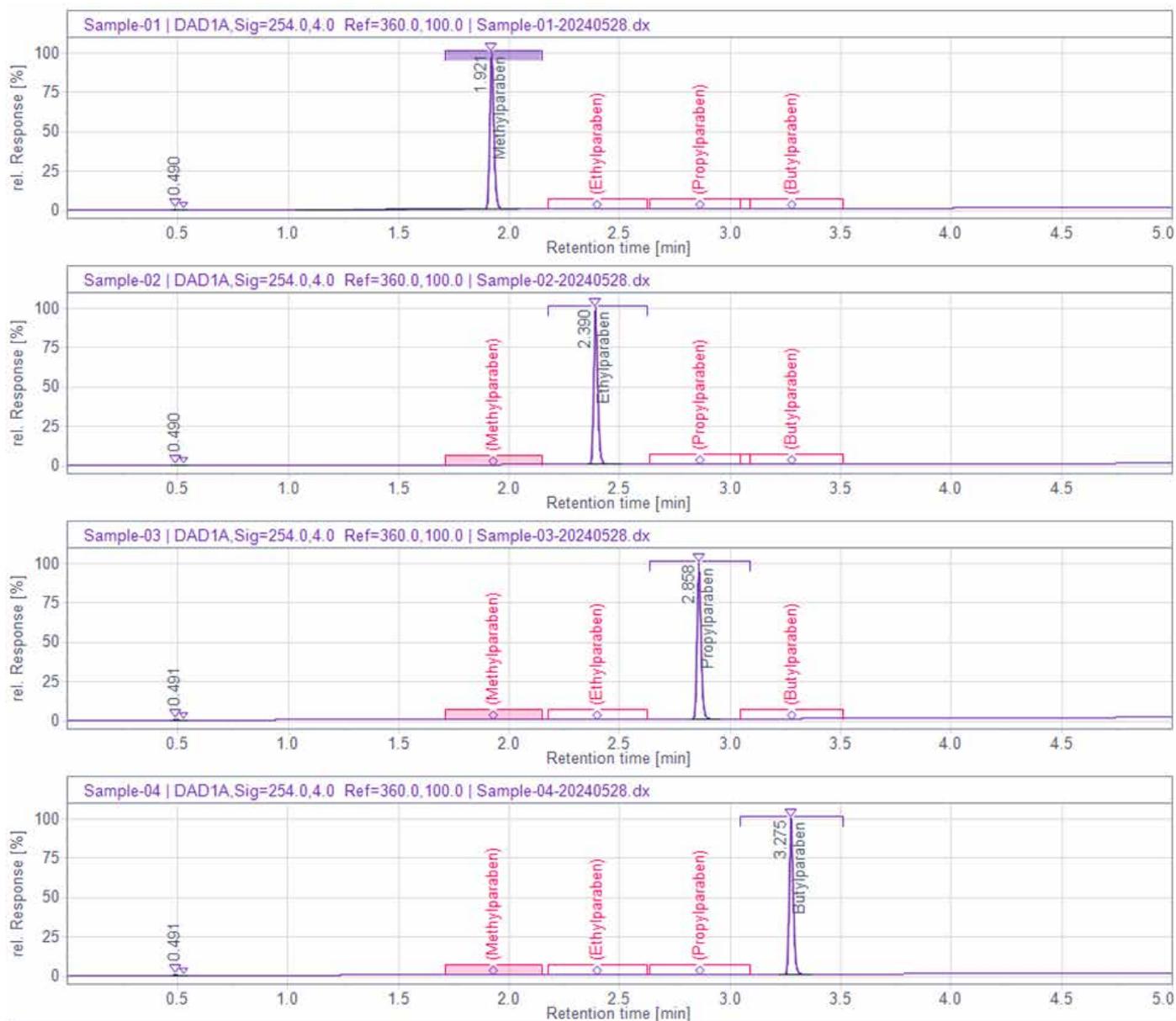
### サンプル：

- 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：ブチルパラベン
- サンプル 04：ペンチルパラベン

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 メンブレンカートリッジ (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

この研究で使用するパラベン化合物は、アセトニトリル（それぞれ 100 mg/L）で溶解させ、それぞれ 1 mL をバーコード付きバイアルに移しました。バイアルのバーコードは手動でスキャンして、シーケンステーブルの予想されるバーコードのフィールドに入力しました（図 1）。特定のバイアル位置は指定しませんでした。バイアルは、下部のバーコード読み取りのために、40 バイアルトレイにランダムな順序と位置で配置しました。トレイのその他の位置には、この実験で使用しないその他のバーコードバイアルを配置するか、空のままにしました。1290 Infinity III マルチサンプルのドロワー内にバイアルトレイを配置すると、トレイは自動的にマルチサンプルに取り込まれ、内蔵のサンプル ID リーダーの上に配置されました。トレイのスキャン後、シーケンスの開始時に、すべてのバーコード付きバイアル番号を使用して、特定のバイアル位置を特定しました。サンプルの測定後に、測定済みサンプルの予想されるバーコードが確認され、Agilent OpenLab Data Analysis ソフトウェアの注入リストテーブルに表示されました。特定された位置も注入テーブルに入力されました（図 2）。クロマトグラムでは、事前定義したデータ解析メソッドに同定されたパラベン化合物が表示されます。例えば、サンプル 01 にはメチルパラベンが含まれており、前トレイのドロワー 1 の D1 の位置 (D1F-D1) にあることがわかりました。予想されるバーコードは、マルチサンプルのサンプル ID リーダーによってバイアルからスキャンされるバーコードと一致しています。

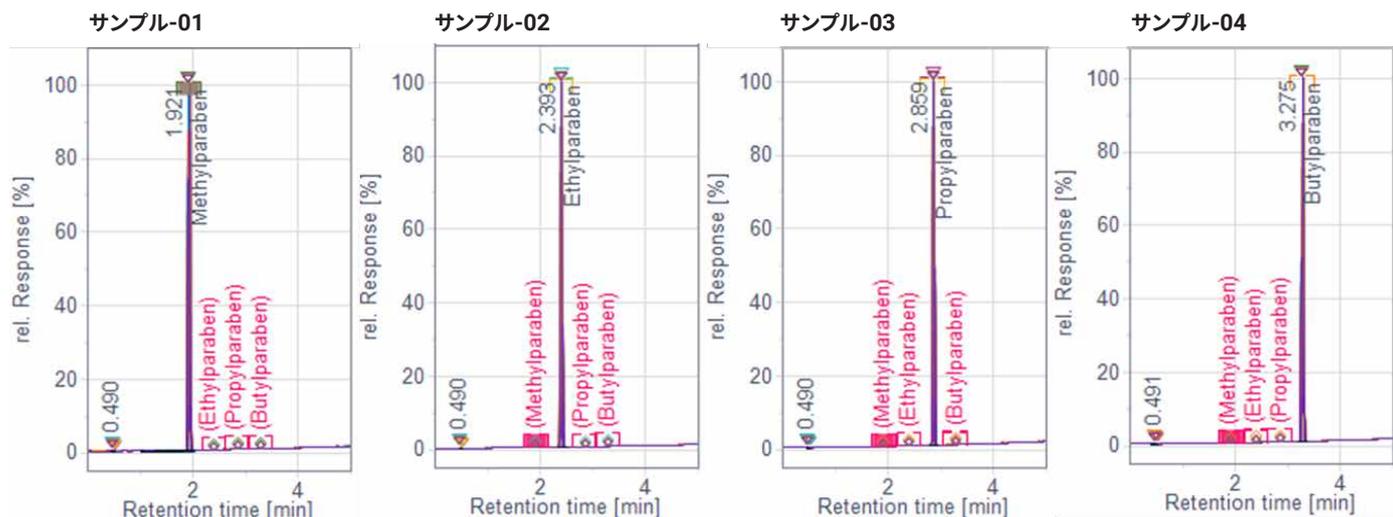


Inj. #	Sample name	Data file	Acq. method	Proc. method	Vial	Barcode	Expected barcode
1	Sample-01	Sample-01-20240528.dx	Parabene-01	Paraben-01	D1F-D1	36130101GD	36130101GD
1	Sample-02	Sample-02-20240528.dx	Parabene-01	Paraben-01	D1F-C8	36130101GN	36130101GN
1	Sample-03	Sample-03-20240528.dx	Parabene-01	Paraben-01	D1F-D6	36130101EI	36130101EI
1	Sample-04	Sample-04-20240528.dx	Parabene-01	Paraben-01	D1F-A1	36130101ES	36130101ES

図 2. 予想されるバーコードによるランダムに配置したサンプルの同定。予想されるバーコードが、シーケンステーブルに入力されています。マルチサンプルによるバーコードの確認後に、バイアル位置が割り当てられました（バイアルラベルの例：D1F-D1：ドローワー 1 前、位置 D1）

この機能をより詳細にテストするため、40 バイアルトレイでのバイアルの位置をランダムに変更しました。次の測定を使用して、サンプルの ID と位置を確認しました (図 3)。トレイの角の位置 (行 A および E の位置 1 および 8) のスキャンプロセスもそれぞれテストしました (図 3、表、行 4)。その後の実験では、サンプルバイアルを 1 つのバイアルトレイではなく、1 つのドロワーの前と後ろの位置に配置しました (図 3、表、行 5 および 6)。最後に、サンプルを 2 つのドロワーの 2 つのバイアルトレイに配置

しました (図 3、表、行 7 および 8)。いずれの場合も、シーケンス内でサンプルを測定するにはバイアルトレイとドロワーの 1 ~ 2 回の変更が必要となるように、サンプルを配置しました。図 3 では、同定されたすべての化合物が (バイアル単位で) 重ね表示されています。



ライン	サンプル-01	サンプル-02	サンプル-03	サンプル-04
1	D1F-D1	D1F-C8	D1F-D6	D1F-A8
2	D1F-A4	D1F-E3	D1F-C6	D1F-C2
3	D1F-C2	D1F-B5	D1F-E1	D1F-C5
4	D1F-E1	D1F-A1	D1F-A8	D1F-E8
5	D1F-B4	D2F-C3	D1F-C5	D2F-C6
6	D2F-C4	D1F-C2	D1F-E4	D1F-A6
7	D1B-D6	D1F-C1	D1F-D5	D1F-B7
8	D1B-B4	D1F-D2	D1B-D6	D1F-C6

図 3. 複数のドロワーの使用を含む、ランダムに配置したサンプルの同定 (D1、D2 = ドロワー 1 とドロワー 2、F、B = 前、後ろ)。クロマトグラムには、個々のサンプルが重ね表示されています。

## 結論

この技術概要では、Agilent 1290 Infinity III マルチサンプラと Agilent InfinityLab サンプル ID リーダーの、所定のシーケンスで測定する必要があるサンプル位置の特定機能について説明していました。サンプルは、1290 Infinity III マルチサンプラにランダムに配置できます。データ解析後に、バーコード確認と特定された位置が、サンプル測定の最終確認のために結果テーブルに表示されます。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。

## 参考文献

1. サンプル位置の確認 – Agilent 1290 Infinity III マルチサンプラと Agilent InfinityLab サンプル ID リーダーを使用 – パート 1/2. Agilent Technologies technical overview, publication number 5994-7568JAJP, **2024**.
2. 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**.

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。

DE26243705

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

5994-7569JAJP