

시료 위치 확인

Agilent InfinityLab 시료 ID 리더와 함께
Agilent 1290 Infinity III Multisampler 사용 - 1/2 파트



개요

Agilent 1290 Infinity III Multisampler에는 Agilent OpenLab Acquisition 소프트웨어의 시퀀스 테이블에 제공된 위치를 확인하기 위해 시료 위치를 인식하는 기능을 제공하는 Agilent InfinityLab 시료 ID 리더를 추가로 장착할 수 있습니다. 바코드를 분석 워크플로에 통합하면 사용이 더욱 편리해지고 오류가 줄어들어 사용자 시간이 절약됩니다.

소개

현대 실험실에서 바코드 판독은 시료를 처리하고, 시료가 측정되었는지 확인하며, 각각의 정확한 결과가 개별 시료와 연결되는지 확인하는 데 중요한 역할을 합니다. 분석 실험실에서 다수의 시료를 다룰 경우에는 이것이 특히 중요하며, 다양한 산업과 조직에 적용할 수 있습니다. 이 기술 개요에서는 시료 ID 리더가 내장된 1290 Infinity III Multisampler를 사용하여 시료 위치를 식별하고 OpenLab Acquisition 소프트웨어의 시퀀스 테이블에서 선택한 위치를 확인하는 방법을 보여줍니다. 시료의 위치 확인은 일반적으로 화장품의 향균제로 사용되는 paraben 화합물을 사용하여 수행됩니다.¹ 무작위로 선택된 시료 위치 식별에 InfinityLab 시료 ID 리더가 장착된 1290 Infinity III Multisampler와 완전한 소프트웨어 지원 엔드투엔드 워크플로의 사용에 대해서는 다른 두 개의 애질런트 기술 개요에서 다룹니다.^{2,3}

실험

기기

- Agilent 1290 Infinity III 고속 펌프(G7120A)
- 바이알 트레이 드로어 2개와 Agilent InfinityLab 시료 ID 리더 (G4756A 또는 Agilent 1260 Infinity III Multisampler와 1290 Infinity III Multisampler의 옵션 #110)가 장착된 Agilent 1290 Infinity III Multisampler(G7167B)
- Agilent 1290 Infinity III MCT(G7116B)
- 10mm Agilent Max-Light 플로우 셀이 장착된 Agilent 1290 Infinity III 다이오드 어레이 검출기(G7117B)
- Agilent InfinityLab Assist Interface(G7179A)와 Agilent InfinityLab Assist Hub(G7180A)로 구성된 Agilent InfinityLab Assist Upgrade(G7178A)

소프트웨어

Agilent OpenLab CDS, 버전 2.8 이상

컬럼

Agilent ZORBAX Eclipse Plus C18, RRHD, 2.1 × 100mm, 1.8µm(부품 번호 959758-902)

LC 분석법

표 1. LC 분석법.

파라미터	값
용매	A) 물 B) ACN
유속	0.5mL/분
그라디언트	시간(분) %B 0 15 5 95 정지 시간: 5분 사후 시간: 2분
주입량	1µL
니들 세척	용매 B에서 3초
컬럼 온도	45°C
검출	254/4nm, 참조 360/16nm, 데이터 속도 20Hz

추가 재료

- 바닥 바코드가 있는 바이알(부품 번호 5190-4032-ID)
- 크립프 캡, 알루미늄, PTFE/빨간색 고무 셉타 (부품 번호 5061-3370)
- 바코드 판독을 위한 바닥 구멍이 있는 40 바이알 시료 용기 (부품 번호 5401-0068)
- 바코드 판독을 위한 열린 바닥이 있는 시료 트레이 팔레트 (G7167-60205)
- USB 핸드헬드 바코드 스캐너(부품 번호 5018-0003)

기기 및 워크플로 설정

시료 ID 리더 모듈은 1290 Infinity III Multisampler의 바이알 드로어 부분에 삽입하여 원래 하단 드로어의 자리를 대체해야 합니다. 위쪽 3개 드로어는 시료 바이알 트레이로 사용할 수 있습니다. 시료 ID 리더는 Agilent OpenLab CDS 소프트웨어에서 자동으로 인식되고 Multisampler의 OpenLab 소프트웨어 제품군 사용자 인터페이스에 QR 코드 모양의 아이콘으로 표시됩니다.

시퀀스 테이블에서 바이알 바코드는 수집 PC에 연결된 휴대용 바코드 리더를 사용하여 예상 바코드 필드에 입력되었습니다 (그림 1). 시료 이름과 데이터 파일 이름 필드도 바코드 스캔으로 입력시킬 수 있습니다. 측정 확인을 위한 바이알 위치는 바이알 컬럼에 수동으로 입력되었습니다.

사용된 화학물질에는 methylparaben, ethylparaben, propylparaben 및 butylparaben이 포함됩니다. Paraben은 acetonitrile에 100mg/L로 용해한 후, QR 코드가 적힌 개별 바이알에 밀봉했습니다. 화학물질은 VWR(독일)에서 구입하였습니다.

시료

- 시료 01: methylparaben
- 시료 02: ethylparaben
- 시료 03: propylparaben
- 시료 04: butylparaben

용매

사용된 용매는 모두 LC 등급입니다. 초순수는 0.22µm의 membrane Point-of-Use 카트리지를(Millipak)를 장착한 Milli-Q Integral 시스템에서 얻었습니다.

	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	HipAls	Sample-01	Sample-01-20240606	36130101GD
2	<input checked="" type="checkbox"/> Inject	D1F-A2	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		1 Use Method	HipAls	Sample-02	Sample-02-20240606	36130101GN
3	<input checked="" type="checkbox"/> Inject	D1F-A3	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		1 Use Method	HipAls	Sample-03	Sample-03-20240606	36130101EI
4	<input checked="" type="checkbox"/> Inject	D1F-A4	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		1 Use Method	HipAls	Sample-04	Sample-04-20240606	36130101ES

그림 1. Agilent OpenLab 소프트웨어 제품군에서 사용되는 시퀀스 테이블. 예상 바이알 바코드를 외부 핸드헬드 바코드 리더로 스캔하고, 선택한 바이알 위치를 바이알 열에 입력했습니다

결과 및 토의

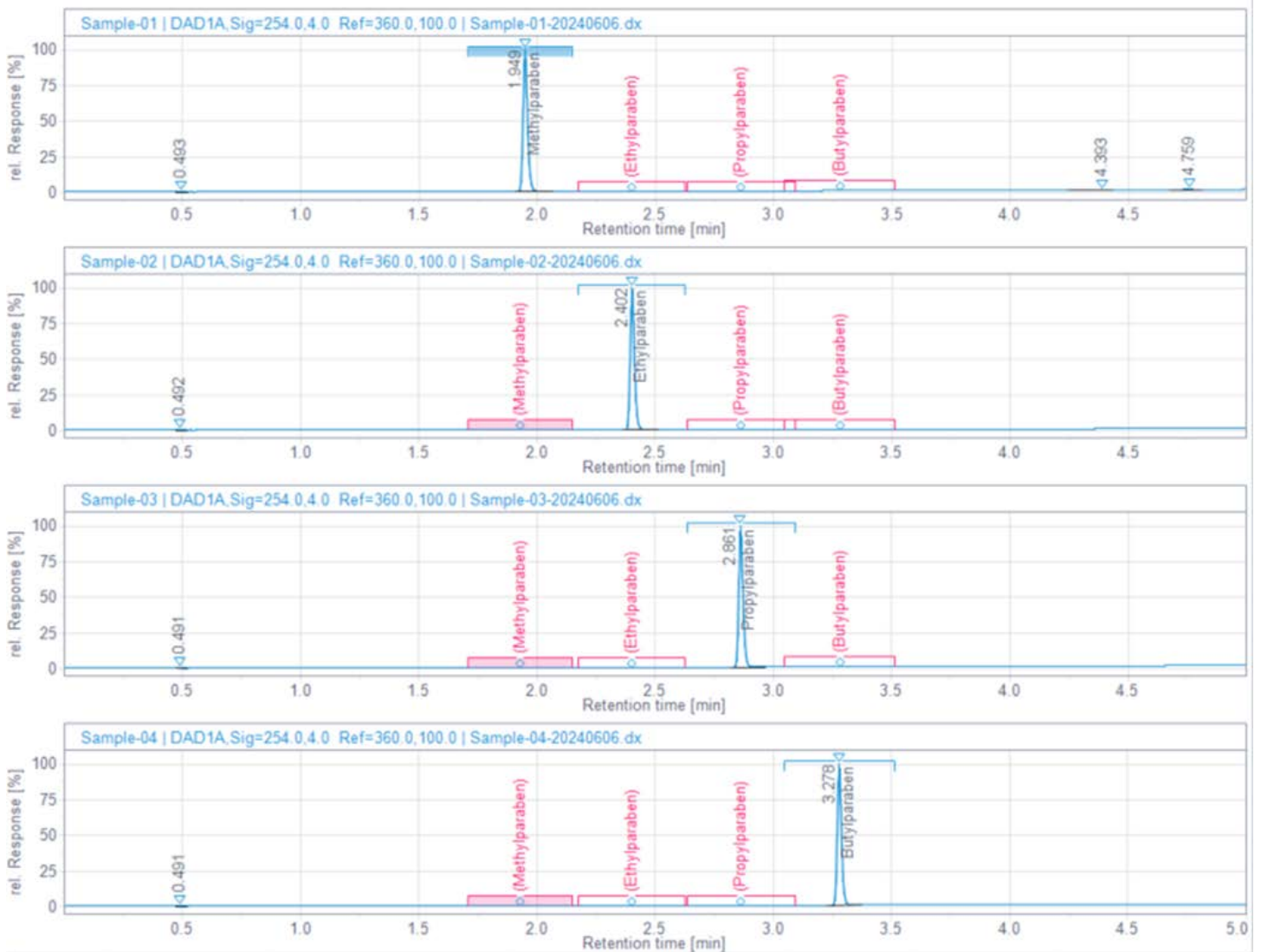
일반적인 분석 워크플로에서, 준비된 시료는 시료 식별 정보를 담은 바코드 라벨이 붙은 상태로 도착합니다. 이 바코드는 시료 이름으로 시퀀스 목록에 읽혀졌습니다(그림 1). 시료는 바닥에 바코드가 있는 바이알로 옮겨졌고, 바이알 식별 고유 번호가 시퀀스 목록의 예상 바코드 열에 읽혀졌습니다. 바이알 위치는 바이알 열에 수동으로 입력되었습니다.

완전한 시퀀스를 생성한 후, 시료 트레이를 시료 ID 리더가 장착된 1290 Infinity III Multisampler의 시료 드로어에 삽입했습니다. 드로어를 닫으면 트레이에 있는 모든 바이알이 자동으로 스캔되어 정보가 저장됩니다. 시퀀스가 시작될 때, 수집 소프트웨어는 스캔된 바이알의 정보를 시퀀스 목록에 있는 예상 바코드의 해당 위치와 비교합니다. 그런 다음, 시퀀스 목록의 순서에 따라 분석이 이루어집니다. 전체 시퀀스의 데이터 분석 결과로, 주입 목록과 확인을 위한 예상 바코드, 그리고 측정된 정보와 해당 바이알 위치가 표시됩니다(그림 2).

바이알 바코드가 없거나, 바이알이 실수로 해당 바코드에 의해 시퀀스 목록에 정의된 위치와 일치하지 않는 위치에 놓인 경우, 시퀀스 옵션에서 오류 처리를 설정할 수 있습니다.

잘못 놓인 바이알을 처리하는 방법에는 두 가지가 있습니다.

1. 임의로 주입: 이 방법의 경우 시료를 주입하고, 정의된 수집 방법으로 측정을 수행한 다음, 수집된 데이터를 정의된 대로 분석합니다. 예상 바코드 및 일치하지 않는 바코드 모두 데이터 파일에 보고됩니다.
2. 현재 주입 중단: 이 방법의 경우 주입 없이 시료를 건너뛩니다.



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

그림 2. 시퀀스 실행 후 데이터 분석 결과. 주입 목록에는 일치하는 바코드와 함께 확인을 위한 예상 바코드, 그리고 해당 바이알 위치가 표시됩니다. 크로마토그램은 예상 화합물을 보여줍니다

그림 3은 **그래도 주입** 옵션을 사용하여 잘못된 위치에 놓인 바이알에서 주입한 결과를 보여줍니다. 주입 목록에서 시료 03에 대한 예상 바코드와 관찰된 바코드가 일치하지 않습니다. 그 결과 생성된 크로마토그램은 또 다른 화합물이 0.976분의 머무름 시간에 용출된 것으로 나타납니다. 이 바코드 확인은 잘못된 측정값이 실수로 수락되어 허위 양성 또는 허위 음성 데이터가 제공되는 것을 방지합니다.

그림 2와 3에 표시된 바코드 일치 및 불일치 시나리오는 스캔된 바코드와 예상 바코드의 일치 상태(그림 4)에 대한 정보가 포함된 간략한 시퀀스 요약 보고서에서 확인할 수 있습니다.

다음과 같은 시나리오가 표시될 수 있습니다.

표 2. 가능한 바코드 시나리오 표시자.

시나리오	표시자
예상 바코드와 스캔된 바코드가 동일	색상 구분 없음
예상 바코드와 스캔된 바코드가 다름	빨간색으로 구분됨
스캔된 바코드가 없지만 예상 바코드가 존재함	빨간색으로 구분됨
스캔된 바코드가 없고 예상 바코드도 없음	색상 구분 없음

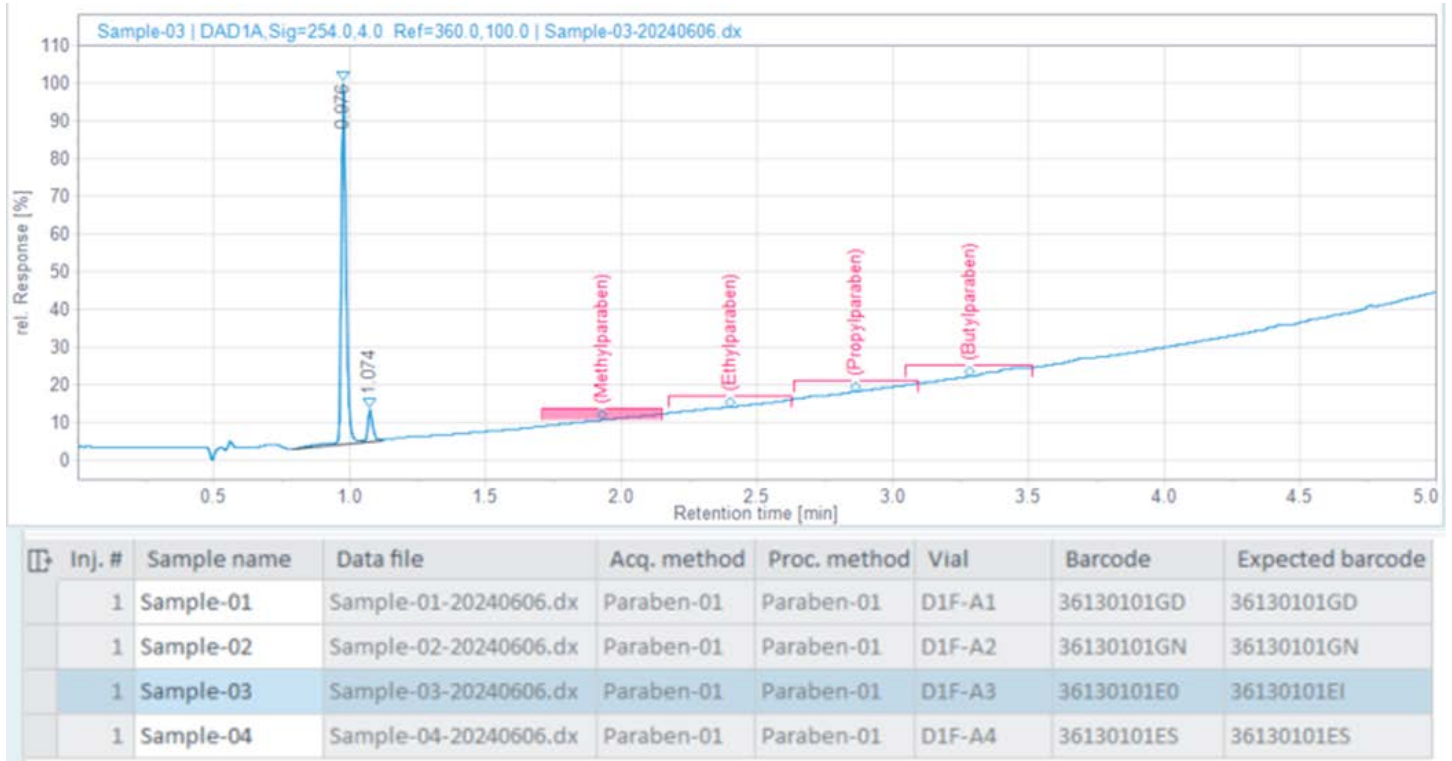


그림 3. 정의된 위치에서 시료 측정 확인. 예상 바코드는 실수로 잘못 놓인 시료를 보여줍니다

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

그림 4. 바코드 일치 상태를 포함한 시퀀스 요약 보고서. (A) 예상된 모든 바코드가 스캔된 바코드와 일치합니다(그림 2).
(B) 스캔된 바코드가 예상 바코드와 일치하지 않으며 빨간색으로 표시되었습니다(그림 3)

결론

이 기술 개요에서는 시료 위치 확인을 위한 Agilent InfinityLab 시료 ID 리더가 장착된 Agilent 1290 Infinity III Multisampler의 기능을 설명했습니다. 시퀀스에서 주어진 바이알 위치와 바코드는 Multisampler의 시료 ID 리더가 식별한 바코드와 비교됩니다. 데이터 분석 후 최종적으로 시료 측정을 확인하기 위해 바코드 확인 및 식별된 위치가 결과 표에 제공됩니다. 잘못 놓인 시료를 강조 표시한 바코드 보고서를 만들 수 있습니다. 이를 통해 시간이 절약되고 사용이 편리해지며 시료 분석 확인 시 오류가 줄어듭니다.

참고 자료

- 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.
- Sample Position Identification and Measurement Confirmation – Using the Agilent 1290 Infinity III Multisampler with Agilent InfinityLab Sample ID Reader – Part 2 of 2. *Agilent Technologies 기술 개요*, 발행 번호 5994-7569EN, **2024**.
- Agilent Advanced Sample Linking – A Complete Workflow from Any Laboratory Information Management System to the Vial and Analytical Results. *Agilent Technologies 백서*, 발행 번호 5994-7570EN, **2024**.

www.agilent.com

DE25242301

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2024
2024년 10월 18일, 한국에서 인쇄
5994-7568KO

한국에질런트테크놀로지스(주)
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,
A+ 에셋타워 9층, 06621
전화: 82-80-004-5090 (고객지원센터)
팩스: 82-2-3452-2451
이메일: korea-inquiry_lsca@agilent.com



Trusted Answers