

## 样品位置确认

使用配备 Agilent InfinityLab 样品 ID 读取器的  
Agilent 1290 Infinity III Multisampler — 第 1 部分  
(共 2 部分)



### 摘要

Agilent 1290 Infinity III Multisampler 可以额外选配 Agilent InfinityLab 样品 ID 读取器，该读取器能够识别样品位置，以确认 Agilent OpenLab 采集软件序列表中给出的位置。条形码的使用可以集成到分析工作流程中，从而提高操作便捷性，减少错误，节省用户时间。

前言

条形码读取在现代实验室中发挥着重要作用，可用于处理样品、确认样品已被测量，以及确保每个正确的结果都与单个样品相关联。这一点在分析实验室需要处理大量样品时显得尤为重要，并适用于各种行业和组织。本技术概述演示了如何使用配备内置样品 ID 读取器的 1290 Infinity III Multisampler 来识别样品位置，并确认 OpenLab 采集软件中的序列中所选的位置。本文使用对羟基苯甲酸酯化合物（通常用作化妆品中的抗菌剂）来演示样品的位置确认<sup>[1]</sup>。安捷伦的另外两篇技术概述则展示了如何使用配备 InfinityLab 样品 ID 读取器的 1290 Infinity III Multisampler 识别随机选择的样品位置，并实现软件辅助的完整端到端工作流程<sup>[2,3]</sup>。

实验部分

仪器

- Agilent 1290 Infinity III 高速泵 (G7120A)
- Agilent 1290 Infinity III Multisampler (G7167B)，配备两个样品盘抽屉和一个 Agilent InfinityLab 样品 ID 读取器 (G4756A 或 Agilent 1260 Infinity III Multisampler 和 1290 Infinity III Multisampler 的选件 #110)
- Agilent 1290 Infinity III MCT (G7116B)
- Agilent 1290 Infinity III 二极管阵列检测器 (G7117B)，配备 10 mm 安捷伦最大光强流通池
- Agilent InfinityLab Assist 升级组件 (G7178A)，包括 Agilent InfinityLab Assist 触摸屏 (G7179A) 和 Agilent InfinityLab Assist 控制器 (G7180A)

软件

Agilent OpenLab CDS 2.8 版或更新版本

色谱柱

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

液相色谱方法

表 1. 液相色谱方法

参数	设定值
溶剂	A) 水 B) 乙腈
流速	0.5 mL/min
梯度	时间 (min)    %B 0                15 5                95  停止时间: 5 min 后运行时间: 2 min
进样量	1 μL
进样针清洗	溶剂 B 中 3 s
柱温	45 °C
检测	254/4 nm, 参比 360/16 nm, 数据采集速率 20 Hz

其他材料

- 带底部条形码的样品瓶（部件号 5190-4032-ID）
- 钳口盖，铝质，PTFE/红色橡胶隔垫（部件号 5061-3370）
- 带底部孔的 40 位样品容器，用于条形码读取（部件号 5401-0068）
- 带有开放式底部的样品盘，用于条形码读取 (G7167-60205)
- USB 手持式条形码扫描器（部件号 5018-0003）

仪器和 workflows 设置

必须将样品 ID 读取器模块插入 1290 Infinity III Multisampler 的样品瓶抽屉区域，替换底部抽屉。上方三个抽屉可以用于放置样品盘。样品 ID 读取器会被 Agilent OpenLab CDS 软件自动识别，并在 Multisampler 的 OpenLab 软件套装用户界面中显示为二维码样式的图标。

在序列表中，样品瓶条形码信息由连接到采集 PC 的手持式条形码读取器录入到预期条形码 (Expected barcode) 字段中 (图 1)。样品名称 (Sample name) 和数据文件名 (Data file) 字段也可以通过条形码扫描来录入。在样品瓶 (Vial) 列中手动输入用于测量确认的样品瓶位置。

所用化学品包括对羟基苯甲酸甲酯、对羟基苯甲酸乙酯、对羟基苯甲酸丙酯和对羟基苯甲酸丁酯。将这些对羟基苯甲酸酯溶解在乙腈中，浓度为 100 mg/L，并密封在带有二维码的单独样品瓶中。化学品购自德国 VWR 公司。

样品

- 样品 01：对羟基苯甲酸甲酯
- 样品 02：对羟基苯甲酸乙酯
- 样品 03：对羟基苯甲酸丙酯
- 样品 04：对羟基苯甲酸丁酯

溶剂

所有溶剂均为液相色谱级。新制超纯水产自配置 0.22 µm 膜式终端过滤器 (Millipak) 的 Milli-Q Integral 水纯化系统。

结果与讨论

在典型的分析工作流程中，前处理好的样品会贴上带有样品识别详细信息的条形码。该条形码会作为样品名称扫描录入序列表 (图 1)。将样品转移到底部带有条形码的样品瓶中，并将样品瓶的唯一识别号扫描录入序列表中的预期条形码列中。样品瓶位置已手动输入到样品瓶列中。

在生成完整序列后，将样品盘插入配备样品 ID 读取器的 1290 Infinity III Multisampler 的样品抽屉中。关闭抽屉时，系统将自动扫描样品盘中的所有样品瓶，并存储相关信息。在序列开始时，采集软件会将扫描到的样品瓶信息与其在序列表中的预期条形码对应的位置进行比较，并按照序列表中的顺序对它们进行分析。完整序列的数据分析显示了进样列表和预期条形码以供确认，同时还会显示测量信息和相应的样品瓶位置 (图 2)。

如果样品瓶条形码缺失，或者样品瓶意外放置在与相应条形码在序列表中规定位置不符的地方，则可以在序列选项中设置错误处理。

对于放置错误的样品瓶，有两种处理方式：

1. Inject anyway (仍然进样)：在此方式下，样品会按照定义的采集方法进行进样和测量，并按照定义的方式分析采集的数据。数据文件中会同时报告预期条形码和不匹配的条形码信息
2. Abort current injection (中止当前进样)：在此方式下，样品会被跳过，不进样

		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

图 1. Agilent OpenLab 软件套装中使用的序列表。使用外部手持式条形码读取器扫描录入预期的样品瓶条形码，并将选定的样品瓶位置手动输入到样品瓶列中



图 2. 序列运行后的数据分析结果。进样列表显示预期条形码，以及各自的样品瓶位置，以便与匹配的条形码进行确认。色谱图显示了预期化合物

图 3 显示了使用 **inject anyway**（仍然进样）选项从错误放置的样品瓶中进样的结果。在进样列表中，样品 03 的预期条形码和观察到的实际条形码不匹配。得到的色谱图显示，在 0.976 min 的保留时间处洗脱出了另一个化合物。此条形码确认功能可以防止意外接受错误的测量数据，从而避免产生假阳性或假阴性数据。

图 2 和图 3 中展示的条形码匹配和不匹配的情况可以在 at-a-glance（一览）序列总结报告中清晰呈现，该报告中包含有关扫描和预期条形码及其匹配状态的信息（图 4）。

可以展示以下场景：

表 2. 可能的条形码匹配场景的颜色标记

场景	标记
预期条形码与扫描条形码相同	无着色
预期条形码与扫描条形码不同	红色
无扫描条形码，但有预期条形码	红色
无扫描条形码，且没有预期条形码	无着色

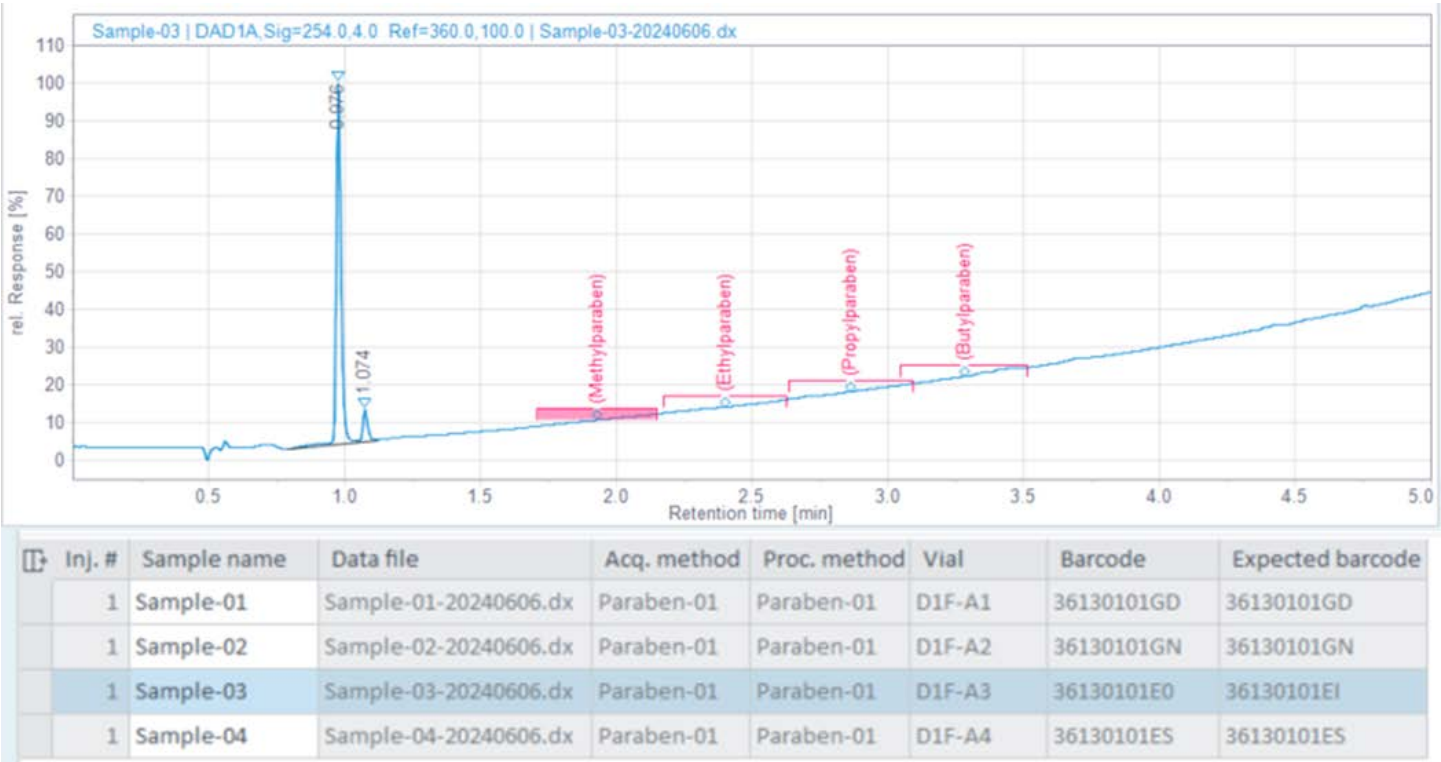


图 3. 在定义的位置确认样品测量。预期条形码揭示了意外放错的样品

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
<b>Sample-03</b>	<b>D1F-A3</b>	<b>36130101EI</b>	<b>36130101E0</b>	<b>barcode mismatch</b>
Sample-04	D1F-A4	36130101ES	36130101ES	barcode match

图 4. 序列摘要报告，包括条形码匹配的状态。(A) 所有预期条形码与扫描条形码匹配（图 2）。(B) 扫描条形码与预期条形码不匹配，以红色标注（图 3）

## 结论

本技术概述介绍了配备 Agilent InfinityLab 样品 ID 读取器的 Agilent 1290 Infinity III Multisampler，用于确认样品位置的功能。在序列中给出的样品瓶位置和条形码会与 Multisampler 中样品 ID 读取器识别的条形码进行核对。在数据分析后，条形码确认结果和识别的位置会显示在结果表中，用于最终样品测量确认。条形码信息可以生成报告，突出显示放错位置的样品。这不仅节省了时间，还提高了使用的便捷性，并减少了样品分析确认中的错误。

[www.agilent.com](http://www.agilent.com)

## 参考文献

1. 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
2. 样品位置识别和测量确认 — 使用配备 Agilent InfinityLab 样品 ID 读取器的 Agilent 1290 Infinity III Multisampler — 第 2 部分（共 2 部分），安捷伦科技公司技术概述，出版号 5994-7569ZHCN，**2024**
3. Agilent Advanced Sample Linking — 从任意实验室信息管理系统到样品瓶和分析结果的完整工作流程，安捷伦科技公司白皮书，出版号 5994-7570ZHCN，**2024**

DE25242301

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2024  
2024 年 10 月 18 日，中国出版  
5994-7568ZHCN

查找当地的安捷伦客户中心：

[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://www.agilent.com/chem/contactus-cn)

免费专线：

800-820-3278, 400-820-3278（手机用户）

联系我们：

[LSCA-China\\_800@agilent.com](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)

在线询价：

[www.agilent.com/chem/erfq-cn](http://www.agilent.com/chem/erfq-cn)

