

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)



摘要

随着 Infinity III 液相色谱系列发布，Agilent 1290 Infinity III Multisampler 现可选配 Agilent InfinityLab 样品 ID 读取器，从而无需输入样品精确位置即可自动识别样品位置。条形码已成为分析工作流程的一部分，因此可以通过样品追踪来确认每个计划样品的分析。除了内置的样品 ID 读取器外，还可以将额外的外部手持式条形码读取器连接到 PC，或通过包含相应样品条形码信息的电子表格导入样品信息。本技术概述重点介绍了在使用样品 ID 读取自动进样器时，使用 1290 Infinity III Multisampler 在分析工作流程中的优势。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。

前言

许多分析实验室都配备了条形码读取器，将样品信息导入分析数据软件。通过条形码读取器录入的信息会显示在采集和分析软件界面中。1290 Infinity III Multisampler 可配备内部样品 ID 读取器，用于确认样品身份和正确的位置。这弥补了条形码引入采集软件到数据分析软件中关联样品之间的样品处理空白。

本技术概述展示了如何使用配备内置样品 ID 读取器的 1290 Infinity III Multisampler 实现自动样品位置识别。样品瓶底部贴有条形码，可从样品盘下方读取。系统会自动识别样品信息、定位样品位置，并存储分析追踪信息。本文分析了不同的对羟基苯甲酸酯，相应的样品瓶被随机插入 1290 Infinity III Multisampler 中，而没有在序列表中给出样品瓶位置。

另外两篇安捷伦技术概述展示了如何通过内部样品 ID 读取器确认样品的测量位置，以及借助软件实现完整的端到端工作流程^[1,2]。

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 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/工作流程设置

必须将 InfinityLab 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。

要启用条形码功能，请在序列运行选项中选择 **Use Barcode Reader Before Injection**（进样前使用条形码读取器）。在序列表中，可以直接从样品容器中读取额外的外部条形码，用于指定样品名称和数据文件名称。在预期条形码字段中，可以使用手持式扫描仪读取相应样品瓶的条形码，以便稍后在 Multisampler 中识别（图 1）。无需指定样品瓶的位置。将样品盘插入 Multisampler 样品盘抽屉后，整个样品盘都会被扫描，属于当前序列的样品瓶会被识别，随后即可开始采集。

		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

图 1. 序列表显示运行序列中包含的样品。可以读入外部条形码中的样品信息，例如样品名称和数据文件字段。相应样品瓶的条形码已读入预期条形码字段。没有给定样品瓶的位置

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试剂瓶中。化学品购自德国 VWR 公司。

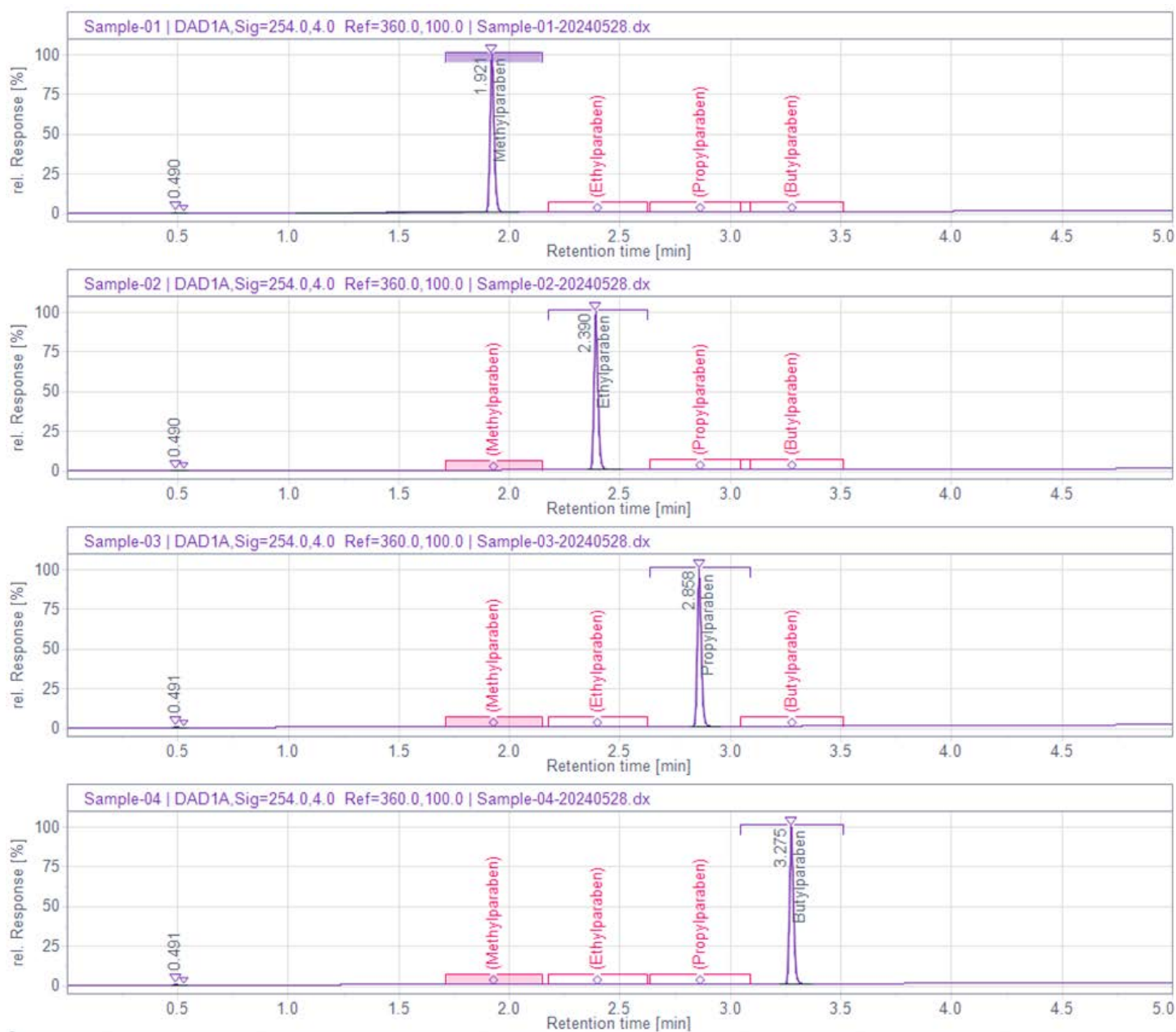
样品：

- 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：对羟基苯甲酸丁酯
- 样品 04：对羟基苯甲酸戊酯

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

将本研究中对羟基苯甲酸酯化合物溶解于乙腈中（每种化合物浓度为 100 mg/L），然后将每种化合物溶液各取 1 mL 转移到一个带有条形码的样品瓶中。手动扫描样品瓶上的条形码，将其录入序列表中对应的预期条形码字段中（图 1）。样品瓶未指定具体放置位置，而是以随机顺序和位置放置在一个 40 位样品盘中，供底部条形码读取使用。样品盘的其他位置则放置本研究中未使用的其他带条形码的样品瓶，或者保持空置。将样品盘放入 1290 Infinity III Multisampler 的抽屉中后，Multisampler 会自动取走样品盘并将其放置在内置样品 ID 读取器上方。样品盘扫描完成后，所有带条形码的样品瓶编号会被用来识别序列开始时样品瓶的特定位置。样品测定完成后，Agilent OpenLab 数据分析软件的进样列表中会确认并显示所测样品的预期条形码。所标识的位置也会填写在进样表中（图 2）。在色谱图中，预定义的数据分析方法会显示已识别的对羟基苯甲酸酯化合物。例如，样品 01 含有对羟基苯甲酸甲酯，位于样品盘前部抽屉 1 的 D1 位置 (D1F-D1)。预期条形码与 Multisampler 中的样品 ID 读取器从样品瓶扫描到的条形码相匹配。

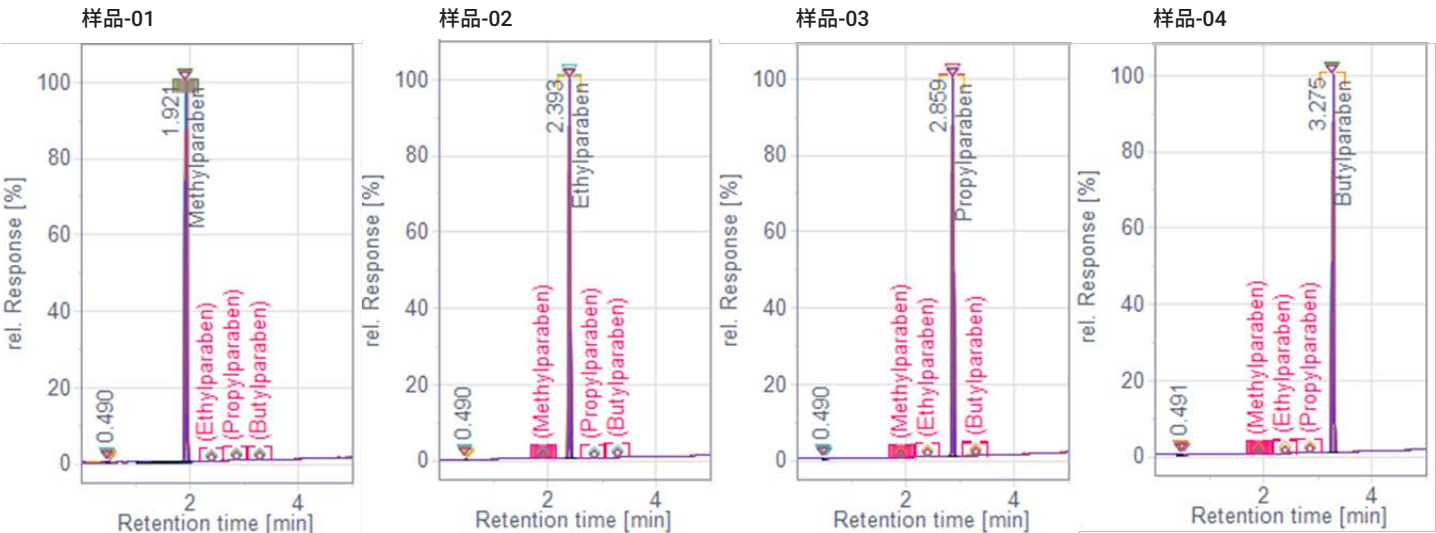


Inj. #	Sample name	Data file	Acq. method	Proc. method	Vial	Barcode	Expected barcode
1	Sample-01	Sample-01-20240528.dx	Parabene-01	Paraben-01	D1F-D1	36130101GD	36130101GD
1	Sample-02	Sample-02-20240528.dx	Parabene-01	Paraben-01	D1F-C8	36130101GN	36130101GN
1	Sample-03	Sample-03-20240528.dx	Parabene-01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

图 2. 通过预期条形码识别随机放置的样品。预期条形码已通过序列表导入。样品瓶位置在 Multisampler 确认条形码后得到了指定（样品瓶标签示例：D1F-D1：抽屉 1 前部，位置 D1）

为了更广泛地测试此功能，对 40 位样品盘中样品瓶的位置进行了随机更换。使用以下测量来确认样品的身份和位置（图 3）。扫描过程中还测试了样品盘在 A 行和 E 行的角落位置，分别位于位置 1 和 8（图 3，表格，第 4 行）。在接下来的实验中，样品瓶未集中放置在一个样品盘中，而是分别放置在一个

抽屉的前部和后部位置（图 3，表格，第 5 行和第 6 行）。最后，样品被放置在两个抽屉的两个样品盘中（图 3，表格，第 7 行和第 8 行）。在这两种情况下，需要对样品盘和抽屉进行一到两次更换，才能按顺序测量样品。所有已识别的化合物均以叠加（每个样品瓶）的形式显示在图 3 中。



行	样品-01	样品-02	样品-03	样品-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

图 3. 随机放置样品的识别，包括使用多个抽屉（D1、D2 = 抽屉 1 和抽屉 2，F、B = 前部、后部）。色谱图显示了相应样品的叠加结果

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，用于按指定顺序识别需要测量的样品位置的功能。样品可以随机放置在 1290 Infinity III Multisampler 中。通过条形码确认和样品位置识别，结果将在数据分析后显示于结果表中，以最终确认样品的测量。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。

参考文献

1. 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），*安捷伦科技公司技术概述*，出版号 5994-7568ZHCN，**2024**
2. 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**

查找当地的安捷伦客户中心：

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

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

www.agilent.com

DE26243705

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
5994-7569ZHCN