

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



作者

Florian Rieck 和
Edgar Naegele
安捷伦科技有限公司

摘要

随着 Agilent Infinity III 液相色谱系列发布, Agilent 1260 和 1290 Infinity III Multisampler 现可以选配 Agilent InfinityLab 样品 ID 读取器。将液相色谱系统集成到客户端-服务器环境中, 可以使用附加软件, 例如 Agilent Sample Linking 软件以及用于 OpenLab 的 Agilent Sample Scheduler 样品调度程序, 以实现完整工作流程, 将来自任何实验室信息管理系统 (LIMS) 的样品关联到样品瓶和 HPLC 分析结果。本白皮书重点介绍了集成分析工作流程的优势。在此工作流程中, 条形码用于从样品列表到对应样品瓶位置的样品追踪, 无需手动输入位置即可识别正确的样品。这不仅节省了时间, 还提高了使用的便捷性, 并减少了整个工作流程中的错误。

前言

如今，分析实验室或分析部门正面临高样品负荷的问题，亟需实现更经济的实验室运营。从样品到报告的工作流程中，高样品负荷和手动步骤很可能会引入错误并延长工作流程时间。为了减少错误并节省时间，同时提高使用的便捷性，从样品接收到最终报告的集成化工作流程具有很大优势。这可以通过使用服务器集成解决方案和附加软件来实现，软件将每个样品容器与预先贴有条形码的唯一样品瓶进行关联。

完整的工作流程如图 1 所示。首先，将需要分析的样品注册到 LIMS 中，然后通过 OpenLab 的 Sample Scheduler 发送到 Sample Linking 软件，在此软件中管理样品容器与预先贴有条形码的目标样品瓶的关联和最终序列的生成。在这里，接收分析任务单的分析人员按照指导，逐步将样品转移到预先贴有条形码的样品瓶中（附录中提供了所用的其他材料示例）。样品和样品瓶的 ID 通过台式条码读取器和 Sample Linking 软件进行关联。样品和样品瓶 ID 均关联到分析序列，并通过用于 OpenLab 的 Sample Scheduler 样品调度程序发送至 Agilent OpenLab CDS 采集软件。预先贴有条形码的样品瓶可以以任意顺序随机放置在样品盘中。将样品盘放入 1260 或 1290

Infinity III Multisampler 后，选配的内置 InfinityLab 样品 ID 读取器会从底部对样品盘的完整内容进行内部扫描；然后，在序列开始时，无论样品放置在何处，都会得到正确识别和测量。数据采集和分析完成后，可以生成报告，通过比较扫描的条形码和预期的条形码来确认所需样品的测量结果。

包括 Sample Linking 软件、用于 OpenLab 的 Sample Scheduler 样品调度程序以及与 LIMS 连接的工作流程运行

在仪器准备过程中，可以在 OpenLab CDS 采集软件中启动 HPLC 来冲洗管路和毛细管，并平衡色谱柱和柱温。采集方法和序列模板均在 OpenLab CDS 采集软件中。为了分析采集的数据，Agilent OpenLab CDS 数据分析软件中提供了包含报告的数据分析方法。用于 OpenLab 的 Sample Scheduler 样品调度程序可以从 OpenLab CDS 采集软件中启动。

用于 OpenLab 的 Sample Scheduler 样品调度程序的开始屏幕如图 2 所示。开始界面提供了已连接的仪器（在 My Instruments（我的仪器）下）及其状态以及分析情况（在 My Analysis（我的分析）下）的全面概览。这一图形化概览中的所有方框、图表和数字都可以点击，以便用户直接获取相应的信息。

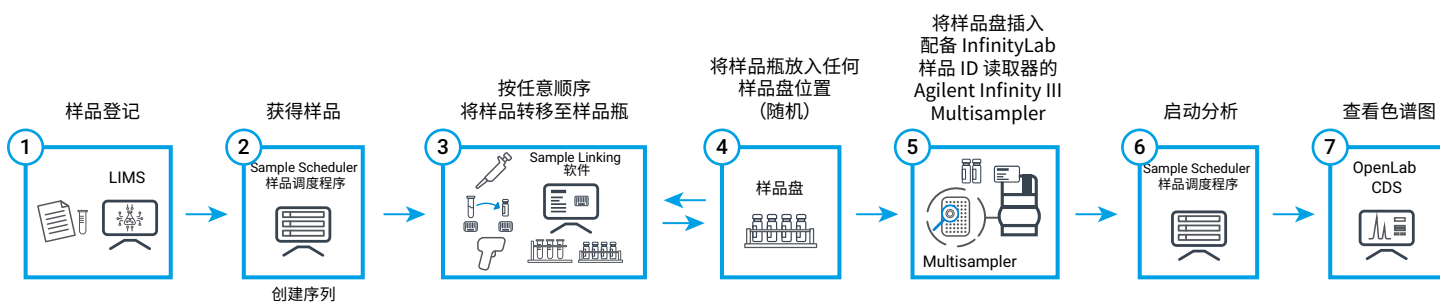


图 1. 从 LIMS 到结果的集成化工作流程

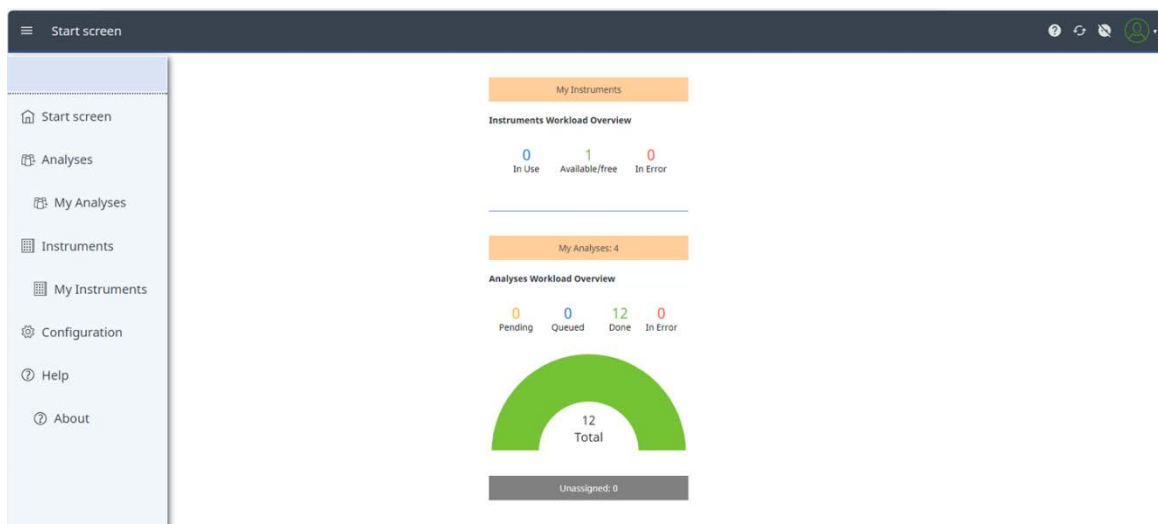


图 2. 用于 OpenLab 的 Agilent Sample Scheduler 样品调度程序的启动屏幕。通过单击框、图形和数字即可直接访问相关信息。左侧菜单也可用于导航

在工作流程开始时，接收样品后，样品名称和其他信息会直接从 LIMS 发送到 Sample Scheduler 样品调度程序，并为每个样品/LIMS ID 创建唯一的标识符，同时任务被分配给负责的分析人员。操作人员或技术人员启动并登录 OpenLab

的 Sample Scheduler 样品调度程序后，样品将在 Analyses（分析）选项卡中显示为单个样品，或在 LIMS 中定义的序列。OpenLab 采集软件中预定义的序列模板可在 Sample Scheduler 软件中使用，并可应用于指定样品（图 3）。

Analyses							
Search [] + Add [1] Copy [] Select All [] Deselect All [] Sort: [] Merge [] Split [] Assign to [] Apply Template []							
Name LIMS ID	State	Project	Data file	Acq. method	Proc. method	Barcode	Instrument Vial
	Waiting	Parabens					HPLC-01 Injections: 4
Butylparaben ep0000045678	Waiting		<D>	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		Vial: []
Propylparaben ep0000034567	Waiting		<D>	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		Vial: []
Ethylparaben ep0000023456	Waiting		<D>	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		Vial: []
Methylparaben ep0000012345	Waiting		<D>	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		Vial: []
	Ended	Parabens					HPLC-01 Injections: 4

图 3. 用于 OpenLab 的 Agilent Sample Scheduler 样品调度程序，其中分配的样品（显示为灰色）按照预定义的序列模板分组为一个序列。LIMS 标识符可以与样品名称一起显示，并包含来自序列模板的采集和处理方法

完成此步骤后，操作人员可以切换到 Sample Linking 软件，该软件将通过单个或多个步骤将带有条形码的样品容器关联到最终带有条形码的目标样品瓶，如下所示。在 Sample Linking 软件的主屏幕中，用户的序列会自动显示（图 4A）。序列中包含的单个样品会显示其名称和当前容器 ID。样品容器 ID 将通过扫描样品瓶的条码与空样品瓶的条码发生关联，这样样品

就会与样品瓶 ID 关联。如果样品不属于序列且条形码被意外扫描，系统会显示错误消息，也不会有样品瓶与该样品关联。将样品容器 ID 与样品瓶 ID 关联后，部分样品会被转移到样品瓶中。此过程会对序列的所有样品重复进行。当所有样品容器条形码与样品瓶条形码关联后，**Submit**（提交）按钮变为活动状态（图 4B）。

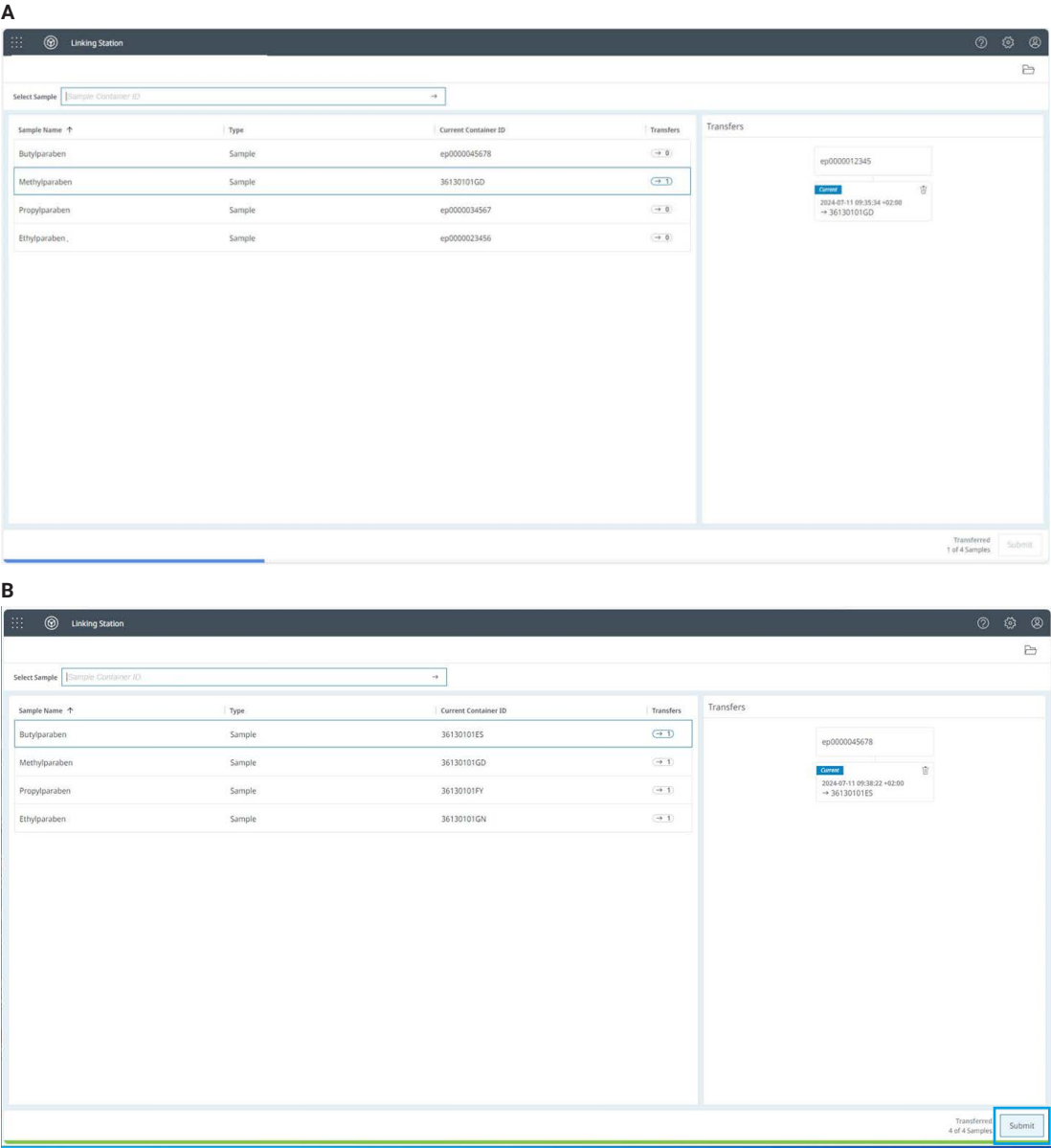


图 4. (A) Agilent Sample Linking 软件与选定序列的样品内容。突出显示样品的容器 ID 已从 LIMS ID 更新为样品瓶 ID。(B) Sample Linking 软件显示从 LIMS ID 到样品瓶 ID 的完整样品转移，以及处于活动状态的 Submit（提交）按钮

在 Sample Linking 软件中单击 **Submit**（提交）后，序列将在用于 OpenLab 的 Sample Scheduler 样品调度程序中更新，包含样品瓶 ID 和数据文件名。序列可以立即启动，也可在用于 OpenLab 的 Sample Scheduler 样品调度程序中计划启动时间。序列表中不需要输入任何样品瓶位置。1260 或 1290 Infinity III Multisampler 配备有 InfinityLab 样品 ID 读取器（集成条形码读取器），可以扫描新的样品盘并识别正确的进样位置，无需考虑样品排列顺序。序列运行时，序列状态和各样品状态可以通过左侧具有代表性颜色代码的状态栏查看 (图 5)。

在 Sample Scheduler 样品调度软件的 Instruments（仪器）选项卡中，会显示所有连接的仪器及其状态摘要。图 6 显示了连接的仪器正在运行该序列的第一个样品（4 次进样中的第 1 次进样）、分析方法、已完成的样品和待处理的样品。

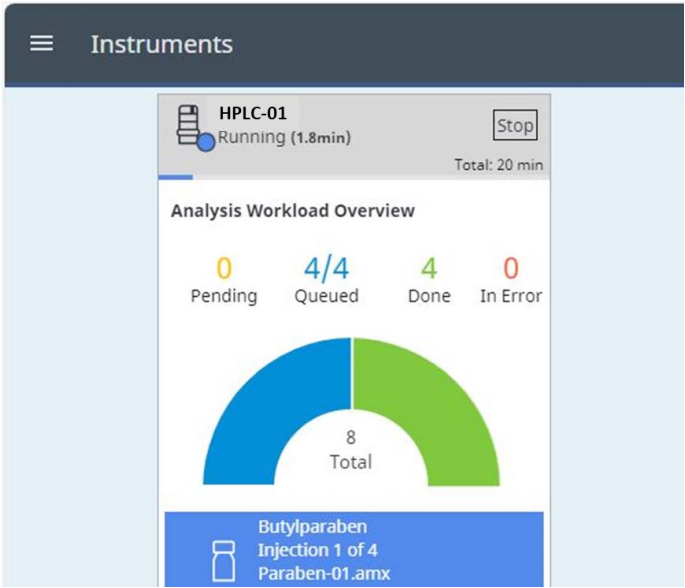


图 6. 正在运行的仪器的状态摘要

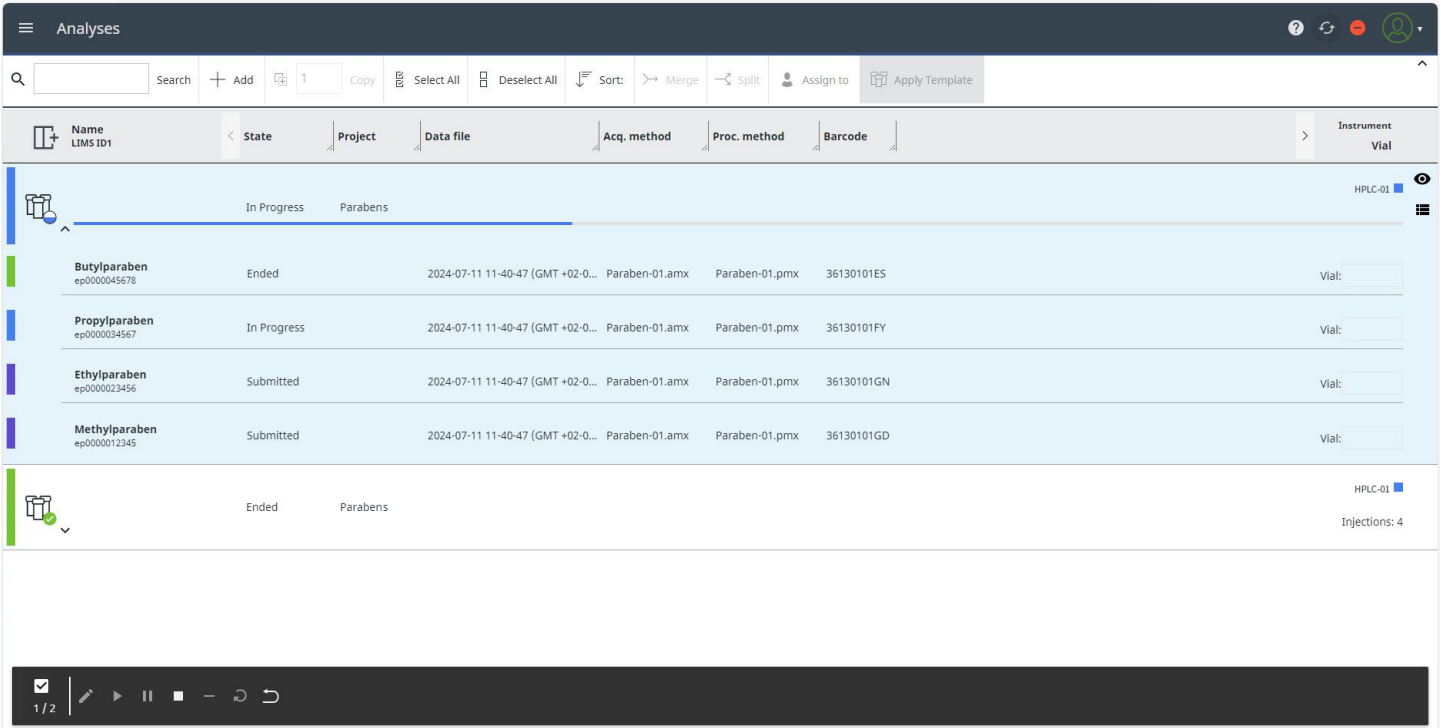


图 5. 启动序列后，用于 OpenLab 的 Agilent Sample Scheduler 样品调度程序界面。序列和第二个样品的状态为 In Progress（正在处理）（蓝色），第一个样品的状态为 Ended（已结束）（绿色），最后两个样品的状态为 Submitted（已提交）（紫色）

在序列结束时，所有样品都会标记为 Ended（已结束）状态，并以绿色编码标识。序列模板中选择的的分析会自动应用，定义的报告模板会填入计算结果（图 7）。可以通过快捷方式启动 OpenLab CDS 数据分析软件，来查看数据及其所需的数据文件。

如果没有可用的 LIMS，可以直接从 OpenLab CDS 或用于 OpenLab 的 Sample Scheduler 样品调度程序（包括 Sample Linking 软件）启动设置序列、样品测量确认和灵活样品放置的工作流程，这在另一篇技术概述中有详细介绍^[1,2]。

结论

本白皮书介绍了一种工作流程，可从任何 LIMS 启动的分析序列开始，然后将样品容器的条形码关联到预先贴有条形码的目标样品瓶的条形码。系统对样品进行分析以获得最终的数据结果，并将报告传回 LIMS。这种工作流程通过闭环设计，确保无误操作并节省时间，由 Agilent Sample Linking 软件和用于 OpenLab 的 Agilent Sample Scheduler 样品调度程序共同实现。通过使用条形码，样品可以在整个工作流程中被跟踪，准确地从其原始容器转移到最终的条形码样品瓶中，整个过程完全由 Sample Linking 软件管理。这不仅节省了时间、还提高了使用的便捷性，并减少了整个工作流程中的错误。

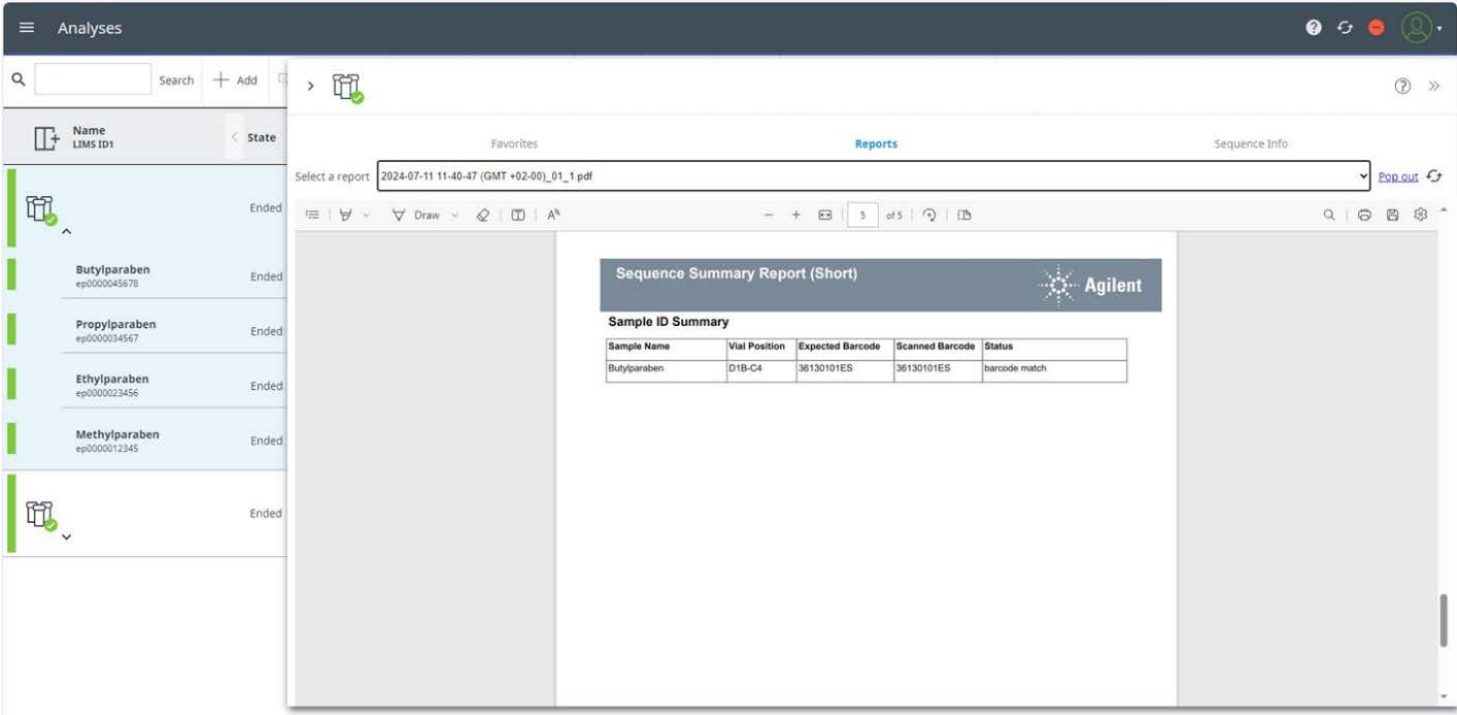


图 7. 序列完成后的用于 OpenLab 的 Agilent Sample Scheduler 样品调度程序界面（状态：Ended（已结束），以绿色编码表示）。应用选定的数据分析方法并生成报告。报告显示样品 ID 摘要，其中列出了预期条形码、扫描条形码和识别的样品瓶位置

附录

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）

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. 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**

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

DE-000519

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
5994-7570ZHCN