

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



著者

Florian Rieck and
Edgar Naegele
Agilent Technologies, Inc.

概要

Agilent Infinity III LC シリーズのリリースにより、Agilent 1260 および 1290 Infinity III マルチサンブラにオプションで 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。LC システムをクライアントサーバー環境に統合することで、Agilent Sample Linking ソフトウェアや Agilent OpenLab 用サンプルスケジューラなどの追加ソフトウェアを使用できるため、あらゆるラボ情報管理システム (LIMS) からのサンプルをバイアルや HPLC の分析結果とリンクする包括的なワークフローを実現できます。このホワイトペーパーでは、この統合分析ワークフローの利点を説明します。このワークフローでは、サンプルがサンプルリストからバイアル位置までバーコードにより追跡され、正しいサンプルが配置されていることが位置の手動入力なしで認識されます。このためワークフロー全体で、時間を節約し、使いやすさを改善し、エラーを減らすことができます。

はじめに

今日の分析ラボや分析部門は、多くのサンプル数をより経済的に処理しなければならないという課題に直面しています。サンプル取得からレポート作成までのワークフローで、サンプル数や手作業が多いと、エラーが発生したり、ワークフロー時間が長くなったりする可能性が高くなります。エラーと分析時間を減らし、使いやすさを向上させるには、サンプル取得から最終レポートまでを網羅する統合ワークフローが非常に有益です。このためには、すべてのサンプル容器と一意のバーコード化されたバイアルをリンクする、追加のソフトウェアを備えたサーバー統合型ソリューションを使用します。

図 1 に、ワークフロー全体を示します。まず、分析対象サンプルを LIMS に登録してから、OpenLab 用サンプルスケジューラを介して Sample Linking ソフトウェアに送ります。Sample Linking ソフトウェアでは、サンプル容器と事前にバーコード化されたターゲットバイアルのリンク、および最終シーケンスの生成が管理されます。LIMS およびサンプルスケジューラからの試験指示を受けた分析者は、ステップバイステップのガイドに従って、バーコード化されたバイアルにサンプルを入れます（使用される追加部品の例については、付録をご覧ください）。サンプルとバイアルの ID は、ベンチトップバーコードリーダーと Sample Linking ソフトウェアによりリンクされます。サンプル ID とバイアル ID はいずれも分析シーケンスにリンクされ、OpenLab 用サンプルスケジューラを介して Agilent OpenLab CDS Acquisition ソフトウェアに送られます。バーコード化されたバイアルは、サンプルトレイに任意の配列でランダムに配置することが

可能です。1260 または 1290 Infinity III マルチサンプルラにサンプルトレイを配置すると、オプションの内蔵 InfinityLab サンプル ID リーダーによってトレイの中身が下側から内部でスキャンされ、シーケンスの開始時には個々のサンプルがどの位置にあっていても同定および測定されます。データの取り込みおよび解析後に、スキャンしたバーコードと予想されるバーコードを比較することで、必要なサンプルの測定を確認するレポートを生成できます。

Sample Linking ソフトウェア、 OpenLab 用サンプルスケジューラ、LIMS との接続を含む ワークフロー操作

事前のコンディショニングとして、HPLC を OpenLab CDS Acquisition ソフトウェアで起動して流路や配管を洗浄し、カラムとカラム温度を平衡化できます。取り込みメソッドとシーケンスプレートは、OpenLab CDS Acquisition ソフトウェアに含まれています。取り込んだデータを解析するため、Agilent OpenLab CDS Data Analysis ソフトウェアでレポートを含むデータ解析メソッドが提示されます。OpenLab 用サンプルスケジューラは、OpenLab CDS Acquisition ソフトウェアから起動できます。

図 2 に、OpenLab 用サンプルスケジューラの開始画面を示します。この画面では、接続されている機器とそのステータス（My Instruments の下）、および分析（My Analysis の下）についての全体的な概要が表示されます。このグラフィカルな概要のボックス、グラフ、数値はすべて、クリックして個々の情報を直接表示できます。

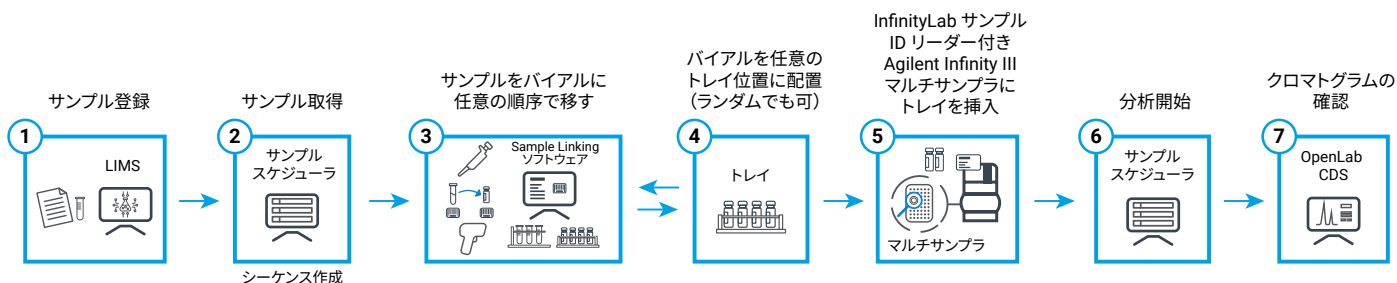


図 1. LIMS から分析結果までの統合型ワークフロー

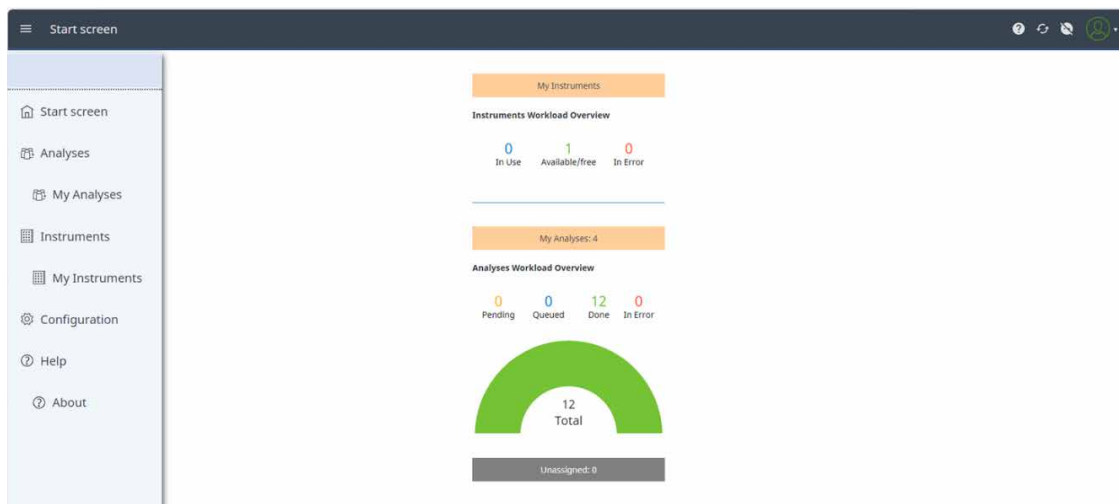


図 2. Agilent OpenLab 用サンプルスケジューラの開始画面。ボックス、グラフィック、数字をクリックすると、個々の情報に直接アクセスできます。左側のメニューはナビゲーションにも使用できます。

ワークフローの開始時にサンプルが到着すると、サンプル名とその他の情報が、LIMS から直接サンプルスケジューラに送られ、各サンプルの一意的 ID/LIMS ID が作成されて、タスクが分析担当者に割り当てられます。オペレータまたは技術者が OpenLab 用サンプルスケジューラを起動してログインすると、サンプルが Analyses タブに 1 つのサンプル

またはシーケンス（LIMS で定義されている場合）として表示されます。OpenLab Acquisition ソフトウェアで事前定義されているシーケンステンプレートは、サンプルスケジューラソフトウェアで使用でき、割り当てられたサンプルに適用できます（図 3）。

Name	LIMS ID	State	Project	Data file	Acq. method	Proc. method	Barcode	Instrument Vial
Butylparaben	ep0000045678	Waiting	Parabens	<D>	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		HPLC-01 Injections: 4 Vial: <input type="text"/>
Propylparaben	ep0000034567	Waiting	Parabens	<D>	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		HPLC-01 Injections: 4 Vial: <input type="text"/>
Ethylparaben	ep0000023456	Waiting	Parabens	<D>	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		HPLC-01 Injections: 4 Vial: <input type="text"/>
Methylparaben	ep0000012345	Waiting	Parabens	<D>	Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx		HPLC-01 Injections: 4 Vial: <input type="text"/>
		Ended	Parabens					HPLC-01 Injections: 4

図 3. Agilent OpenLab 用サンプルスケジューラと割り当てられたサンプル（灰色で表示）。サンプルは、事前定義されたシーケンステンプレートによってシーケンスにグループ化されています。LIMS ID がサンプル名と一緒に表示され、シーケンステンプレートからの取り込みメソッドと処理メソッドが含まれています。

このステップが完了すると、オペレータは Sample Linking ソフトウェアに切り替えることができます。これで次のように、1 つまたは複数のステップで、バーコード付きサンプル容器がバーコード付きの最終ターゲットバイアルにリンクされます。Sample Linking ソフトウェアのメイン画面には、ユーザーのシーケンスが自動的に表示されます (図 4A)。シーケンスに含まれる個々のサンプルは、名前と現在の容器 ID と共に表示されます。バイアルのバーコードをスキャンすることで、サンプル容器 ID が空のバイアルのバーコードとリンクされ、サンプルがバイアル ID とリンクされます。

サンプルがシーケンスに含まれておらず、そのバーコードが誤ってスキャンされた場合は、エラーメッセージが表示され、バイアルがこのサンプルにリンクされることはありません。サンプル容器 ID とバイアル ID がリンクされると、分析者はサンプルの一部をバイアルに移します。この手順が、シーケンスのすべてのサンプルで繰り返されます。すべてのサンプル容器のバーコードがバイアルバーコードにリンクされると、**Submit** ボタンが有効になります (図 4B)。

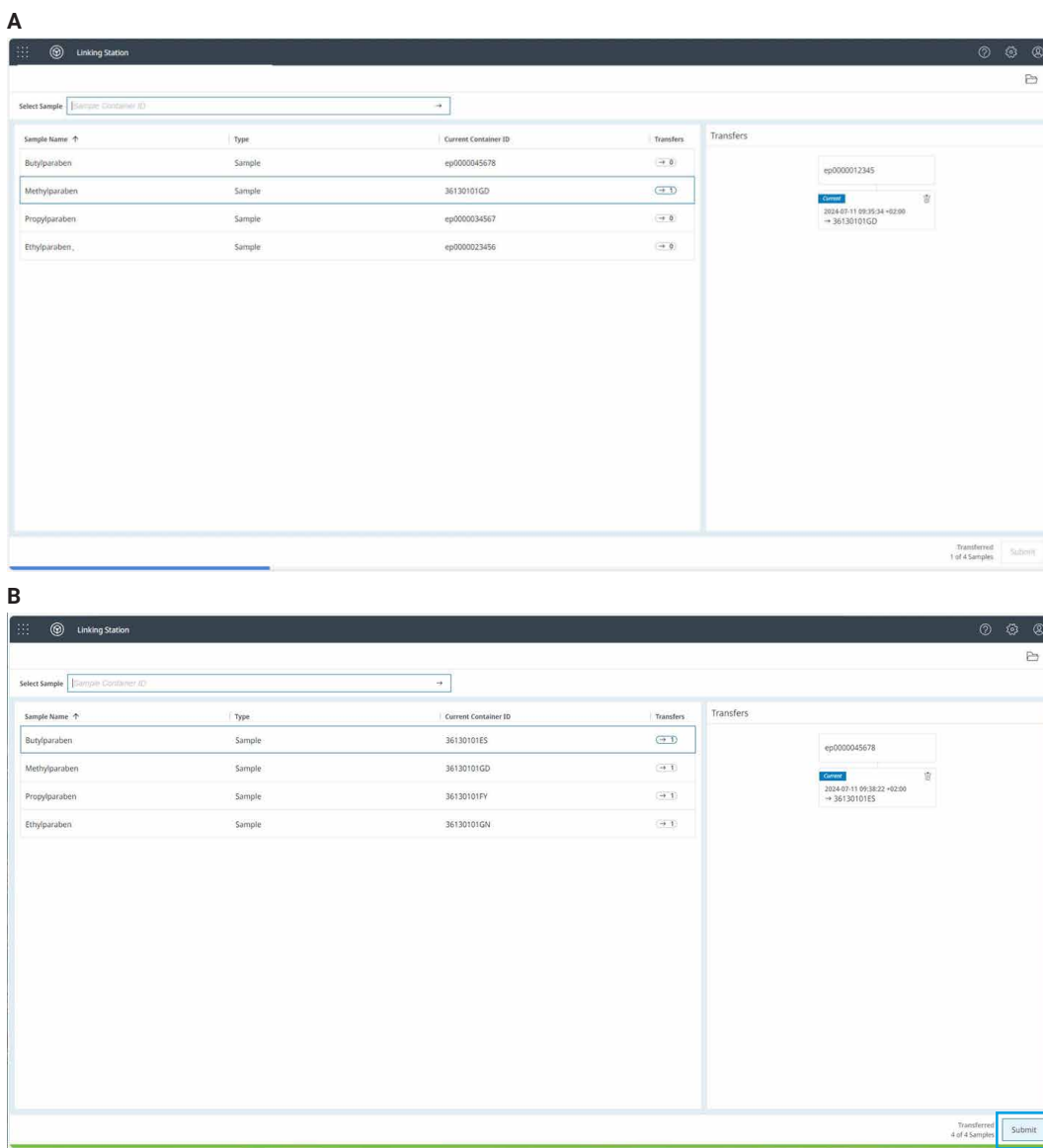


図 4. (A) Agilent Sample Linking ソフトウェアと選択したシーケンスのサンプル成分。強調表示されているサンプルの容器 ID はすでに、LIMS ID からバイアル ID に更新されています。(B) Sample Linking ソフトウェアと LIMS ID からバイアル ID までの完全なサンプル移送、および有効な Submit ボタン

Sample Linking ソフトウェアで **Submit** をクリックすると、OpenLab 用サンプルスケジューラで、シーケンスのバイアル ID とデータファイル名が更新されます。シーケンスはすぐに開始することも、OpenLab 用サンプルスケジューラで開始時間のスケジュールを設定することもできます。シーケンステーブルにバイアル位置を入力する必要はありません。1260 または 1290 Infinity III マルチサンプルラと InfinityLab サンプル ID リーダー（一体型バーコードリーダー）が新しいサンプルトレイをスキャンして、サンプルの配置にかかわらず、注入に適したサンプルバイアル位置を特定します。シーケンスを実行するために、わかりやすく色分けされた左側のステータスバーで、シーケンスや個々のサンプルのステータスを確認できます（図 5）。

サンプルスケジューラソフトウェアの Instruments タブには、接続されているすべての機器が、そのステータスの概要と共に表示されます。図 6 に、シーケンスの最初のサンプル（注入 1/4）を分析している接続先の機器、分析メソッド、完了したサンプル、保留中のサンプルが表示されています。

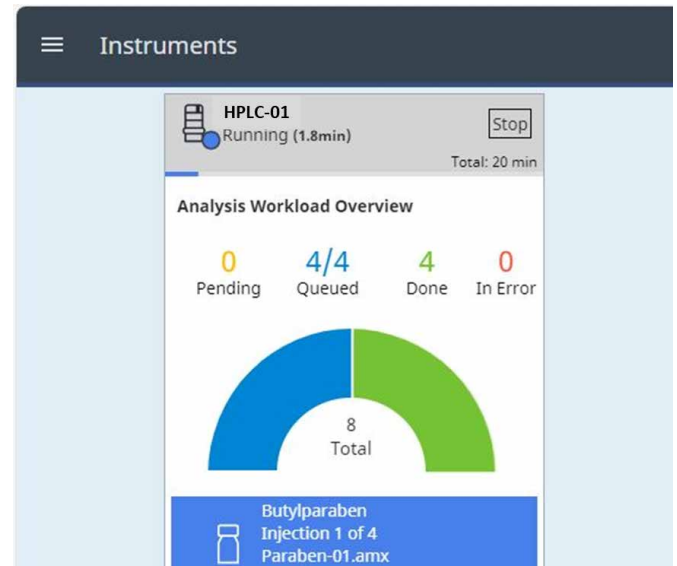


図 6. 稼働中の機器のステータス概要

Name	State	Project	Data file	Acq. method	Proc. method	Barcode	Instrument Vial
Butylparaben ep0000045678	Ended	Parabens	2024-07-11 11-40-47 (GMT +02-0... Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx	36130101ES	Vial: <input type="text"/>	
Propylparaben ep0000034567	In Progress	Parabens	2024-07-11 11-40-47 (GMT +02-0... Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx	36130101FY	Vial: <input type="text"/>	
Ethylparaben ep0000023456	Submitted	Parabens	2024-07-11 11-40-47 (GMT +02-0... Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx	36130101GN	Vial: <input type="text"/>	
Methylparaben ep0000012345	Submitted	Parabens	2024-07-11 11-40-47 (GMT +02-0... Paraben-01.amx	Paraben-01.pmx	36130101GD	Vial: <input type="text"/>	

図 5. シーケンス開始後の Agilent OpenLab 用サンプルスケジューラ。ステータスは、シーケンスと 2 番目のサンプルが「In Progress」（青）、最初のサンプルが「Ended」（緑）、最後の 2 つのサンプルが「Submitted」（紫）です。

シーケンスの最後には、すべてのサンプルのステータスが「Ended」になり、緑で表示されます。シーケステンプレートで選択されているデータ解析が自動的に適用され、定義済みのレポートテンプレートに計算結果が入力されます（図 7）。OpenLab CDS Data Analysis ソフトウェアを必要なデータファイルで起動するショートカットにより、データを確認できます。

使用できる LIMS がない場合は、シーケンス、サンプル測定の確認、柔軟なサンプル配置を設定するワークフローは、OpenLab CDS または Sample Linking ソフトウェアを含む OpenLab 用サンプルスケジューラから直接開始できます。詳細は、他の技術概要をご覧ください。^{1, 2}

結論

このホワイトペーパーでは、まずいずれかの LIMS によって開始される分析シーケンスを実行してから、サンプル容器のバーコードとターゲットバイアルのバーコードをリンクするワークフローについて説明しています。サンプルが分析されて最終データ結果が取得されると、レポートが LIMS に返送されます。Agilent Sample Linking ソフトウェアと Agilent OpenLab 用サンプルスケジューラを組み合わせることで、このクローズドループの、エラーのない、時間を節約できるワークフローを実現できます。バーコードを使用してサンプルをワークフロー全体で追跡し、元の容器から最後のバーコード付きバイアルまで正確に移送できます。これらはすべて、Sample Linking ソフトウェアが管理します。このためワークフロー全体で、時間を節約し、使いやすさを改善し、エラーを減らすことができます。

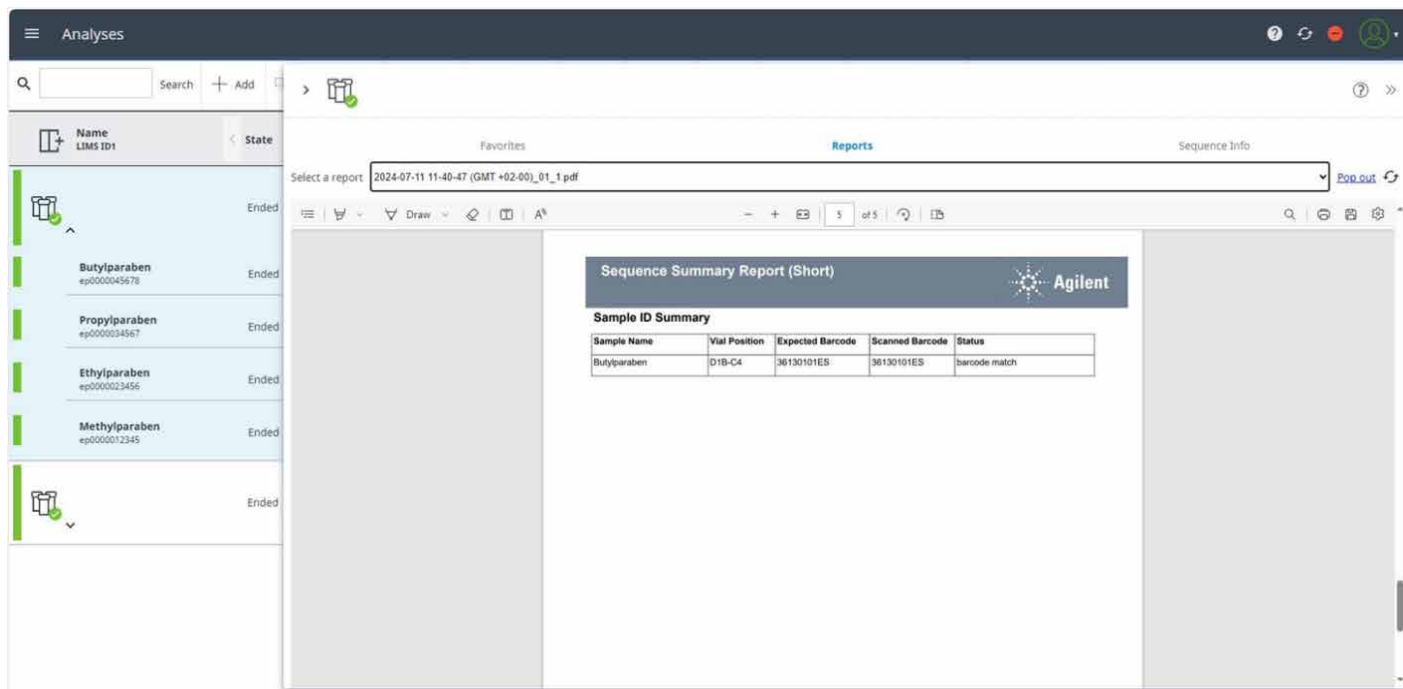


図 7. シーケンス完了後の Agilent OpenLab 用サンプルスケジューラ（ステータス：「Ended」、緑）。選択したデータ解析メソッドが適用され、レポートが生成されます。このレポートの Sample ID Summary には、予想されるバーコード、スキャンしたバーコード、特定されたバイアル位置が一覧表示されます。

付録

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）

参考文献

1. サンプル位置の確認 – Agilent 1290 Infinity III マルチサンブラと 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. サンプル位置の特定と測定の確認 – Agilent 1290 Infinity III マルチサンブラと Agilent InfinityLab サンプル ID リーダーを使用 – パート 2/2. Agilent Technologies technical overview, publication number 5994-7569JAJP, **2024**.

ホームページ

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

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いません。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。

DE-000519

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

5994-7570JAJP