

文件编号: WU-ISCMS-QM 2024E300

版本号:

受控状态:

分发号:

分子科学公共实验平台

质量管理文件

化学反应高通量优化筛选系统

标准操作规程

2025 年 10 月 21 日发布

年 月 日实施

分子科学公共实验平台 发布

目 录

1. 目的	1
2. 范围	1
3. 职责	1
4. 高通量精准化学实验室安全管理规范	2
4.1. 进入或离开实验室规定	2
4.2. 实验操作规定	2
4.3. 气瓶使用规定	3
5. 高通量精准化学实验室仪器设备管理规范	4
5.1. 预约与使用	4
5.2. 预约制度	4
5.3. 培训考核制度	5
6. 仪器操作	6
6.1 仪器组成及安全注意事项	7
6.1.1 仪器组成及作用	7
6.1.2 多功能机械臂 FTC 可使用工具	8
6.1.3 安全须知	8
6.2 运行前准备	11
6.2.1 实验前条件确认	11
6.2.2 实验项目建立	11
6.2.3 仪器准备工作	12
6.2.4 实验设计 (Library Studio 软件)	13
6.4 运行仪器	23
6.4.1 仪器准备工作确认	24
6.4.2 开机	24
6.4.3 仪器初始化	25
6.4.4 运行实验	26
6.5 数据查看	29
6.6 实验结束操作	29
7. 相关/支撑性文件	29
8. 记 录	29

1. 目的

建立化学反应高通量优化筛选系统标准使用操作规程, 使其被正确、规范地使用。

2. 范围

本规程适用于所有使用化学反应高通量优化筛选系统的用户。

3. 职责

3.1. 用户: 严格按本程序操作, 发现异常情况第一时间汇报设备管理员。

3.2. 设备管理员: 确保操作人员经过相关培训, 并按本规程进行操作。

3.3. 文章致谢格式:

根据学校指导意见, 使用各校级平台仪器设备表征产生的科研成果必须致谢平台。如果您在文章成果中使用了光谱、色质谱、磁共振波谱、全自动高通量设备以及其他属于分子科学平台的仪器设备, 请务必在文末致谢分子科学公共实验平台。英文文章致谢:

①Acknowledgement: The author thanks (Dr. XXX from) Instrumentation and Service Center for Molecular Sciences at Westlake University for (the assistance/discussion/supporting in) ... measurement/data interpretation.

②Coauthorship on the resulting publications would be appreciated if our staff make technical contributions (including but not limited to critical sample preparation, novel experiment designation and comprehensive data analyzation).

Affiliation address: "Key Laboratory of Precise Synthesis of Functional Molecules of Zhejiang Province, School of Science, Instrumentation and Service Center for Molecular Sciences, Westlake University, 18 Shilongshan Road, Hangzhou 310024, Zhejiang Province, China."

中文文章致谢:

① 致谢: 感谢西湖大学分子科学公共实验室平台 XXX 博士(或者 XXX 老师)在.....表征或数据分析上提供的帮助。

② 共同作者: 如果分子科学平台老师在您课题组样品表征或文章发表上有重要技术贡献(包括但不限于关键样品制备、新型实验设计和深度数据分析), 我们感谢

您将相关老师列为共同作者, 作者单位地址如下: 西湖大学, 分子科学公共实验平台, 功能分子与精准合成浙江省重点实验室, 杭州, 310030, 浙江。

4. 高通量精准化学实验室安全管理规范

4.1. 进入或离开实验室规定

- 4.1.1. 进入实验室之前必须通过学校、中心和平台的安全考试或考核, 严格遵守本实验室的各项安全警示标识。
- 4.1.2. 进入实验室, 请仔细阅读本实验室的安全管理规定。
- 4.1.3. 进入实验室需穿戴实验服, 严禁穿拖鞋、高跟鞋进入实验室, 长发请束起。
- 4.1.4. 进入实验室应了解消防器具与紧急逃生通道位置, 实验室通道及消防紧急通道必须保持畅通。
- 4.1.5. 严禁将自己授权的门卡转借他人, 一旦发现将进行禁用处理。
- 4.1.6. 禁止将实验无关人员带入实验室。
- 4.1.7. 严禁在实验室饮食、吸烟或随意走动。
- 4.1.8. 夜间实验, 需至少两人在场。
- 4.1.9. 为保持实验室内环境温度及湿度稳定, 进入实验室后保持实验室门窗关闭。实验结束后, 实验人员必须进行清场。最后离开实验室人员需检查水、电、门窗等。
- 4.1.10. 严禁戴手套接触门把手或电梯。禁止随意丢弃实验废弃物。
- 4.1.11. 实验室及相应仪器空间应保持整洁, 严禁摆放与实验无关的个人物品。
- 4.1.12. 空压机及 UPS 所处房间应使用空调, 要保持室内空气干燥, 在潮湿的季节应该除湿。至少每周一次检查除湿机有无积水。

4.2. 实验操作规定

- 4.2.1. 实验室内均为大型科研设备, 有专人负责管理, 未经培训人员, 不得擅自上机使用。化学反应高通量优化筛选系统的组成和培训部分较为复杂, 请根据已完成培训的内容使用相应功能, 未培训部分, 不得擅自使用/修改。
- 4.2.2. 送样或自主上机的用户, 均需使用大仪系统进行系统预约。试运行期间请先联系设备管理员预约使用时间, 使用记录会先采用登记形式。

- 4.2.3. 请严格按送样要求进行样品准备。由于样品问题造成仪器损坏或仪器配件更换, 无论独立上机或是委托测试, 费用将由用户所在课题组承担。
- 4.2.4. 请严格按仪器操作规程进行操作。实验过程中有任何不确定务必联系设备管理员。自主上机过程中, 因操作错误造成设备损坏的, 该用户课题组也需承担相关费用。
- 4.2.5. 实验过程中如发现仪器设备发生异常状况、仪器报错、报警等, 务必立即联系设备管理员, 严禁擅自处理、调整仪器主要部件, 凡自行拆卸者一经发现将给予严重处罚。
- 4.2.6. 仪器均为高压设备, 使用仪器需严格遵守用电安全规定, 严禁擅自更改电路或切断仪器电源等相关危险操作。
- 4.2.7. 实验室内的药品、试剂必须存放药品柜, 并做好使用登记。
- 4.2.8. 使用化学试剂或药品前, 必须了解其物理化学性质、毒性及防护方法, 使用时必须配戴护目镜、手套等, 做好个人防护。
- 4.2.9. 非常规实验测试须经设备管理员同意并指导方可进行。实验数据须通过学校数据中心进行下载, 禁止将个人 U 盘、移动硬盘等易带入病毒的存储设备与各仪器工作站连接拷贝数据。数据存储下载操作过程中请务必仔细谨慎, 以避免误删或误修改他人实验数据或编写程序的情况发生。
- 4.2.10. 垃圾、废液必须严格按标识进行分类, 禁止将锐器、玻璃丢弃在常规垃圾箱中。
- 4.2.11. 自主上机用户须在预约时间内须使用本人的账号登陆基理系统进行仪器使用; 使用结束应做好仪器使用登记, 如实记录仪器使用状态。

4.3. 气瓶使用规定

- 4.3.1. 首次使用实验室气瓶, 须经实验室技术员培训指导。
- 4.3.2. 请按实验室气瓶标识选择正确的气源。
- 4.3.3. 打开气瓶, 先确认管路已连接稳妥, 禁止未接气路或气路未连接稳妥, 开气瓶减压阀。

- 4.3.4. 更换气瓶, 首先确保减压阀关闭, 且管路中气压排空归零, 先用扳手拧松后, 再用手旋下管路。换气瓶, 确认气瓶螺纹吻合后, 先手紧气体管路, 再用扳手拧 1/8 圈左右。
- 4.3.5. 开气瓶或更换气瓶, 禁止站在减压阀出气口正前方。
- 4.3.6. 测试过程中, 请根据需要及时更换气瓶。使用者应根据气瓶使用情况, 变更气瓶使用牌状态“满瓶”“使用中”“空瓶”等。
- 4.3.7. 气瓶应保持正立并固定。

5. 高通量精准化学实验室仪器设备管理规范

5.1. 预约与使用

该仪器遵从学校“科研设施与公共仪器中心”对大型仪器设备实行的管理办法和“集中投入、统一管理、开放公用、资源共享”的建设原则, 面向校内所有教学、科研单位开放使用; 根据使用机时适当收取费用; 并在保障校内使用的同时, 面向社会开放。

该仪器的使用实行预约制度, 请使用者根据样品的测试要求在学校“大型仪器共享管理系统”(以下简称大仪网)进行预约, 并按照要求登记预约信息。根据预约制度可登陆大仪网站即时预约机时, 包括周末; 寒暑假及国庆假期将另行通知。

自主上机:

- ① 仪器培训需要约三小时, 申请培训前先与仪器负责人联系。
- ② 请在大仪网预约培训机时, 培训时请携带纸质版仪器培训申请表。
- ③ 设备管理员进行现场培训。
- ④ 培训后两周内, 用户可在设备管理员指导下用实际样品进行上机测试, 并按自主上机计费; 根据自身掌握情况, 用户需在两周内进行上机考核, 考核通过的用户即获得自主上机权限, 原则上一星期复考; 未考核或考核不通过的用户, 需重新接受培训。

5.2. 预约制度

为充分利用仪器效能、服务全校科研工作, 根据测试内容与时间的不同, 实验室仪器需进行网上预约制度。自主上机用户需根据预约制度登陆大仪共享网站最少

提前 2 个工作日预约机时；寒暑假及法定节假日请关注平台和实验室的实时通知。

请严格遵守预约时间使用仪器，以免浪费机时。如需调换时间段，在设备管理员同意下可与其他使用者协商。因故不能在预约时间内测试者，请提前 1 小时取消预约并通知设备管理员。恶意预约机时或有多次无故不遵预约时间的用户，实验室将进行批评教育、通报批评或取消上机资格等处罚。

预约时段		预约时间	测试内容
周一至周五	09:00 至 18:00	不限制	化学反应高通量 优化筛选系统

- (1) 校内使用者须经过设备管理员的实验操作培训，考核合格后方可预约机时上机使用已经培训过的部分；普通用户需在技术员的陪同下操作使用，高级用户可以在流程相对固定时，独立自主上机；
- (2) 实验开始时务必在实验记录本上登记，结束后如实记录仪器状态；
- (3) 严禁擅自处理、拆卸、调整仪器主要部件。使用期间如仪器出现故障，使用者务必及时通知技术员，以便尽快维修或报修，隐瞒不报者将被追究责任，加重处理；
- (4) 因人为原因造成仪器故障的（如硬件损坏），用户课题组须承担维修费用；
- (5) 本实验室所有原始数据不允许在仪器工作站上删改，尤其不允许用 U 盘与移动硬盘直接拷贝。用户应根据要求通过科研仪器网/数据服务器传送下载原始数据至本地电脑，以保存并做数据处理。
- (6) 用户应保持实验区域的卫生清洁，测试完毕请及时清洁仪器相关配件耗材，带走样品，设备管理员和技术员不负责保管。

使用者若违犯以上条例，将酌情给予警告、通报批评、罚款及取消使用资格等惩罚措施。

5.3. 培训考核制度

校内教师、研究生均可提出预约申请，由设备管理员安排时间进行第一轮通用性培训，培训内容包括仪器使用规章制度、送样须知及安全规范、基本硬件知识、标准操作规程及相应数据处理。

培训结束后, 两周内培训者需跟仪器管理员确定实验计划、准备实验样品、并在设备管理员的陪同下进行实验设计流程编辑及优化 (软件), 和实验设计试运行 (硬件)。在设备管理员的监督下进行 5 次左右操作, 培训者根据自己的掌握程度, 联系设备管理员进行上机考核。初级考核合格后, 可在管理人员监督下上机操作, 一周后复考;

设备管理员认为被培训者达到独立操作水平后, 给予培训者授权在所允许的可操作实验范围内独立使用仪器。如果因为人为操作错误导致仪器故障者, 除按要求承担维修费用之外, 给予重考惩罚、培训费翻倍。

对接受培训人员的核心要求:

- 1) 了解仪器的安全注意事项、基本原理、软硬件操作、及其应用的多学科背景知识
- 2) 熟悉化学反应高通量优化筛选系统的组成及各部分功能, 严格遵守仪器部件的开关顺序, 在突然停电或故障时能安全、及时地处理仪器并上报, 关注仪器各部件有无异常。
- 3) 熟练掌握化学反应高通量优化筛选系统的软件系统, 严格按照标准操作规程操作, 防止因人为操作不当造成仪器故障。
- 4) 认真做好仪器的使用记录, 注明任何异常情况 & 故障事件。

6. 仪器操作

6.1 仪器组成及安全注意事项

6.1.1 仪器组成及作用

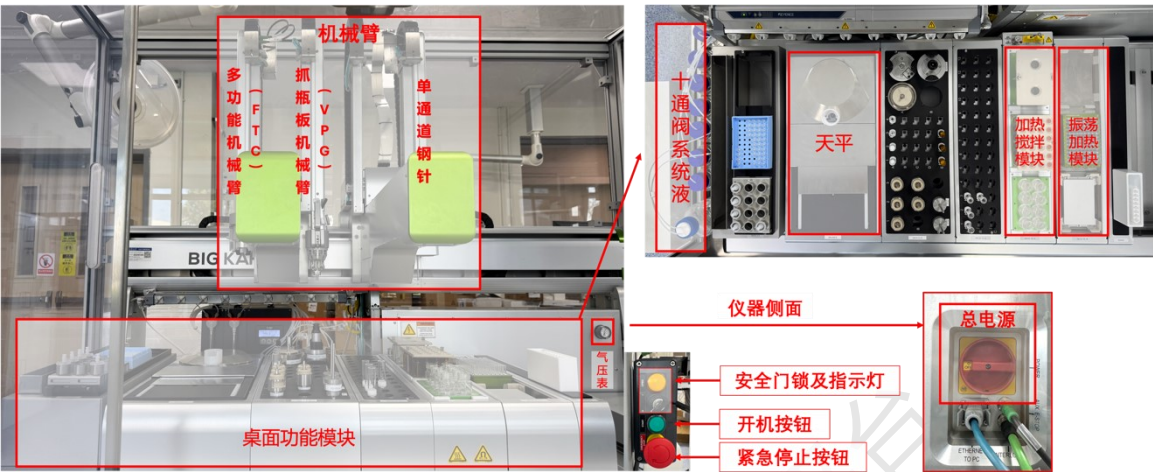


图 6-1-1 仪器组成实物图

表 6-1-1 仪器组成部件名称及作用

部件名称	作用
多功能机械臂 Flexible Tool Changer（FTC）	根据需要自动抓取相应工具如 classic hopper、SV hopper dispenser、液体 PDT 分配头等。
抓瓶/板机械臂 Vial/Plate Gripper (VPG)	根据实验流程，可以抓取相应小瓶和 SBS 规格多孔板。
单通道钢针 Single Tip Liquid Dispenser	单通道可加热带穿刺功能的液体分配器，各钢针单次最大分配量 2.5 mL，分配范围 10 uL 到 2.5 mL，与十通阀相连，可直接分配最多 10 种液体（包含系统液在内）。
天平 Balance	用于分配时称量，最大重量 1200 g，分辨率 0.1 mg，可整板直接称量，或称量小瓶（配合特殊载架，可拍照记录称量情况）。
加热搅拌模块 HSB	可进行搅拌，转速 0-750 rpm（开关、转速均同步）；每个板位可独立控温，最高能加热到 180 ℃。
振荡加热模块	可进行振荡加热，振荡速度 60-3570 rpm，温度最高可达 180 ℃。（Max load: 1700 g）
钢针清洗站 Wash Station	用于单通道钢针的清洗，与废液桶相连。

十通阀	与单通道钢针相连，可用于直接添加液体，最多可加 10 种液体（包括系统液在内）。
气压表	机械臂和天平的部分动作由气体驱动，需保证气压在 0.5-0.65 Mpa（表上绿色范围内）。

6.1.2 多功能机械臂 FTC 可使用工具

表 6-1-2 FTC 配置工具及功能

工具	照片	功能
经典粉末分配工具 Classic Hopper		通过搅拌的方式分配粉末，有25mL和10mL两种规格
SV粉末分配工具 SV Hopper Dispenser		配合SV hopper使用，通过拍打的方式分配粉末
粘稠液体分配工具 Viscous Liquid Dispenser		配合相应的吸头使用，根据吸头的不同，共有三种规格

6.1.3 安全须知

使用化学反应高通量优化筛选系统前，务必确保您已经接受了完整的使用培训，了解仪器的基本构造和运行原理，清楚正确的仪器操作规范及安全注意事项，理解并熟悉紧急情况处理方式。

紧急停止（Emergency Stop，E-Stop）：仪器配备有红色紧急停止按钮（见图 6-1-1），在可预见的危险将要发生时，请务必立即按下紧急停止按钮。该按钮按下后，仪器将会立刻终止机械臂的当前动作，并使仪器处于断电状态。（注意：紧急停止后进行中的**实验无法恢复继续**，如仅需暂停实验，可在 Automation Studio 软件中点击“暂停”按钮）

安全门：仪器带有与系统联动的安全门及配套的门锁和指示灯（图 6-1-2）。仪器运行开始前，请确保安全门完全关闭并上锁，此时指示灯熄灭（图 6-1-2 中）。若安全门未关/未锁，黄色指示灯亮起（图 6-1-2 右），此时原则上不建议运行仪器。若

因特殊情况, 此时仪器正在运行, 机械臂都会保持低速缓慢运行, 请务必保证无异物或人体进入到仪器工作区域以确保安全。

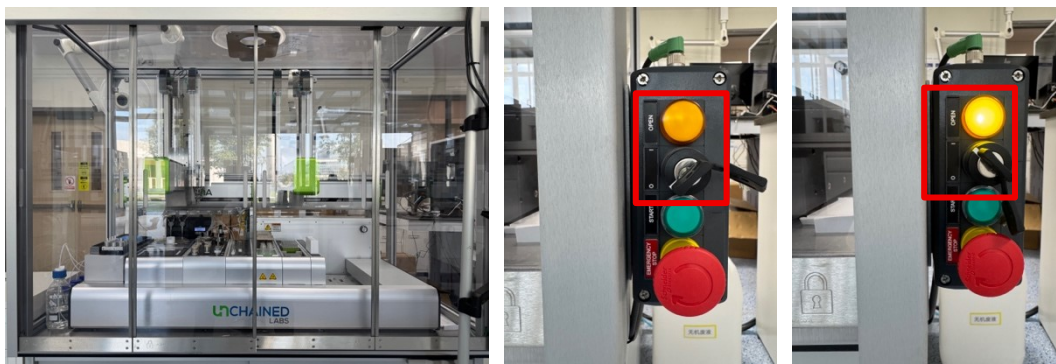


图 6-1-2 安全门与指示灯

1. 一般安全性标识

在对仪器进行操作前, 请确保您已知晓相应的安全操作规范, 佩戴好手套、护目镜, 穿好实验服, 长发需束发等必要的安全防护措施。确保您已阅读并理解仪器操作手册及仪器使用安全事项。除本文档所列举的安全注意事项外, 您还应遵守实验室和实验室化学品的安全操作规范。

2. 电气安全

确保仪器始终处于干燥状态, 切勿使用湿巾等擦拭电气部件。务必确保仪器电气连接的完好性, 仅由获得授权的工作人员或具备相应资质的工作人员进行电气连接的更改或维修。



图 6-1-3

注意: 张贴有此标识的模块, 代表具有可移动的电气接口或供电接口 (图 6-1-3)。仅在需要时, 由经过培训的操作人员在断电 (或特别说明) 的情况下进行操作。不当的操作可能有触电的风险, 并有损坏仪器的可能性。

3. 机械伤害预防

不当的错误可能会导致意外的机械性伤害, 请确保在实验前、实验中及实验后

保持警惕，切勿在机械臂运行过程中将头、手伸入到仪器内部机械臂移动区域。在需要对仪器平台内进行操作或干预时，请确保机械臂处于非工作状态（关机、停止或暂停状态）。



图 6-1-4

防止夹伤，机械臂的缝隙处可能会造成夹伤风险，即使在关机状态下，将手深入到这些区域也是危险的（图 6-1-4）。如需操作，请先联系实验室仪器管理员，并在厂家工程师的指导下进行操作。

特别提醒：仪器配备的单通道钢针具有锋利的尖端，即使在关机状态下，如需要对台面空间进行操作，请首先将单通道钢针移动至操作位置之外，并确保您已佩戴好手套等防护用具。

4. 高温伤害预防

仪器所配备的 HSB 模块具有加热功能，过高的温度可能带来烫伤风险。

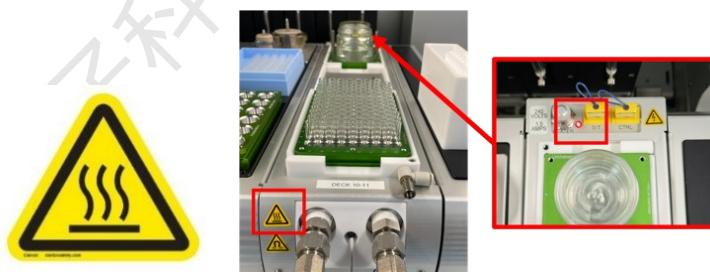


图 6-1-5

高温防护：HSB 模块在任一位置温度高于 40 °C 时，其上方红色 LED 指示灯会处于点亮状态（图 6-1-5）。如需操作，请等待温度降至 40 °C 以下时进行。如需立即操作，可在 Automation Studio 软件中查看实时温度，并在配备合适的防护措施（例如佩戴隔热手套等）后谨慎操作。

5. 气体伤害预防

仪器的部分使用氮气驱动，如管路有泄露，不仅会影响实验结果，还可能改变

密闭实验室内的氧气含量, 请确保实验室具有良好的通风条件。

除此之外, 实验过程中可能产生某些有害气体, 请确保通风设施处于正常工作状态, 及时将有害气体排出。

6. 化学品防护

仪器平台上所使用的任何化学品, 均须按照实验室化学品管理规定进行, 如有化学品洒落, 请立即将仪器关机或暂停后进行清理。

废液瓶应当在每次实验终止后立即清空, 废液的处理应当符合实验室废液管理规范的要求。

7. 强磁干扰

仪器的 HSB 模块使用强磁场进行磁力搅拌 (图 6-1-6), 请确保精密测量仪器、手表或手机等物品远离此区域, 否则可能会对其使用造成一定程度的干扰, 甚至是损坏风险。

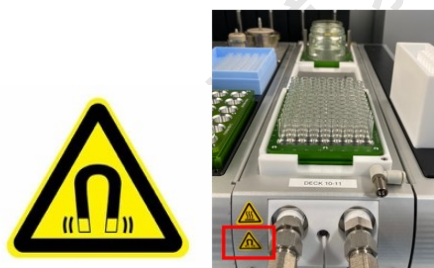


图 6-1-6

6.2 运行前准备

6.2.1 实验前条件确认

实验前, 请确认实验所需的固体和液体种类、数量、物理性质、质量/体积, 反应体积、组合、条件等相关信息, 用于培训中与仪器负责人针对性讨论, 确认实验及优化方案。

6.2.2 实验项目建立

实验开始前, 请确认系统中有无课题组项目分组 (Project)。若没有, 建议以课题组缩写命名, 新建项目分组, 便于结果查看与检索。具体建立方法见下图 6-2-1, 系统中查找 “Benchtop Administration Utility” → 右键选择 “More” → 选择 “Run as administrator” → 输入项目名称 → 点击 “Add” → 点击 “OK”, 添加完成。

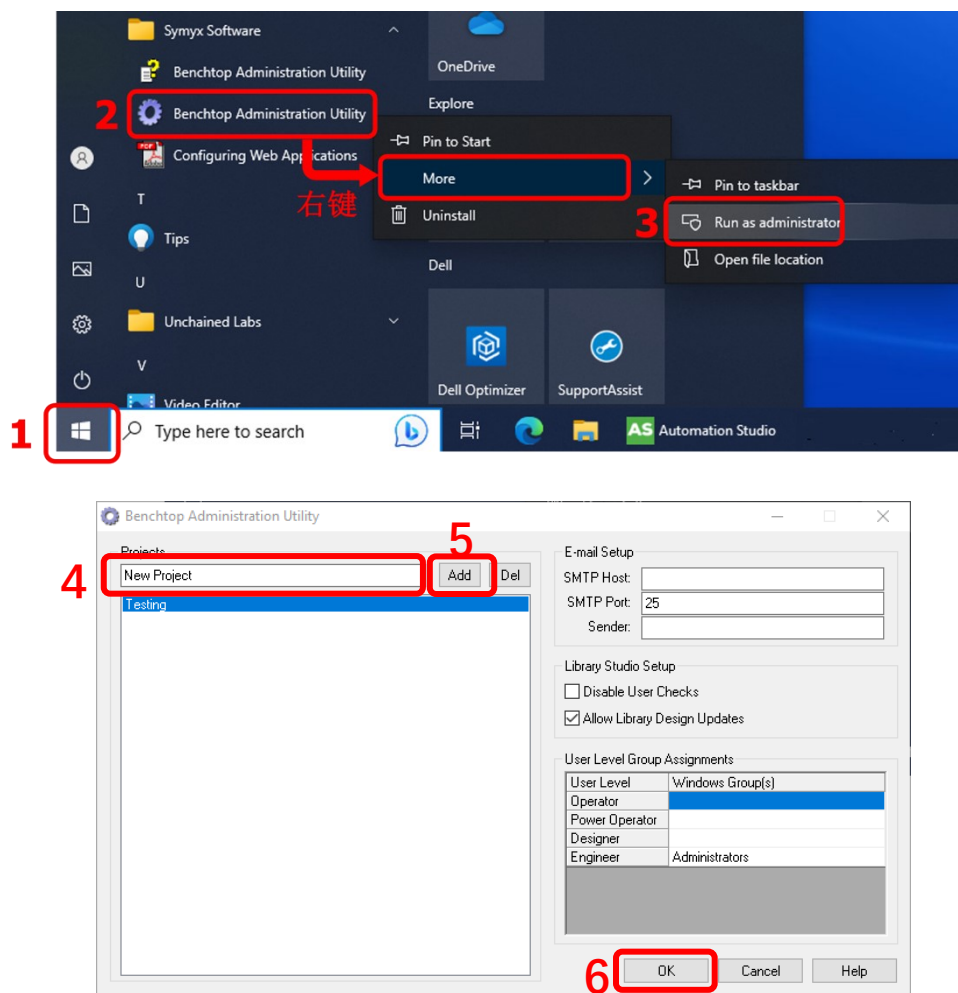


图 6-2-1

6.2.3 仪器准备工作

- 1) 检查系统液（图 6-2-2 左）的成分和体积，按需要进行补充或更换；
- 2) 检查废液桶情况：在开始实验前确认废液桶中废液体积及废液管道连接情况（图 6-2-2 右），根据实验流程和体系决定是否需要换新的废液桶并选择连接正确的废液桶（无机废液/有机废液），务必确保管道流畅以防止废液从仪器台面的洗站溢出；

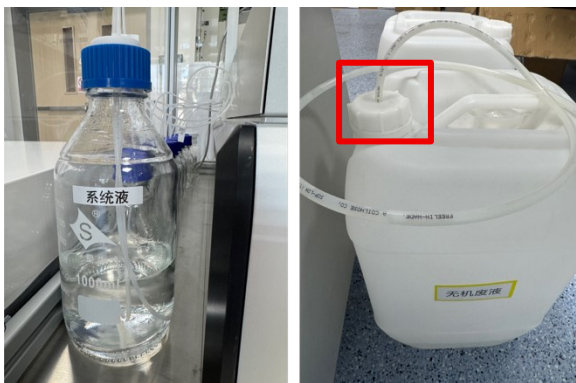


图 6-2-2

- 3) 如图 6-2-3, 确认仪器相连的 N_2 管路连接已打开, 并核对仪器上的压力表指针在绿色区域 (约 0.5 - 0.65 MPa);

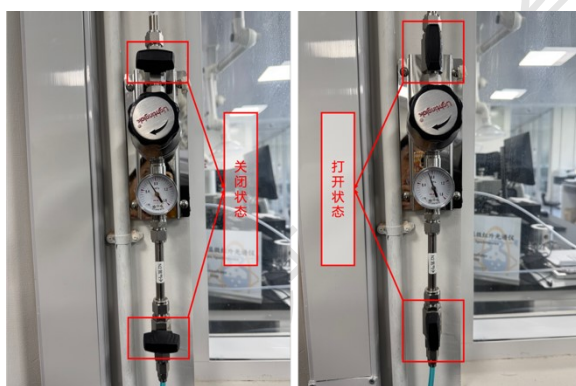


图 6-2-3

- 4) 准备好实验需要的原料 (固体样品需要经过研磨处理, 液体样品需要溶解在合适的溶剂中), 装到对应料斗或容器中, 并按照实验设计摆放在仪器台面相应板位上。

6.2.4 实验设计 (Library Studio 软件)

电脑开机后, 首先双击 “Stop ASCoreSvc”  后, 再打开 Library Studio 件

(LS 软件) 。实验流程编辑全部在 LS 软件中完成, 大致流程如下 (图 6-2-4):

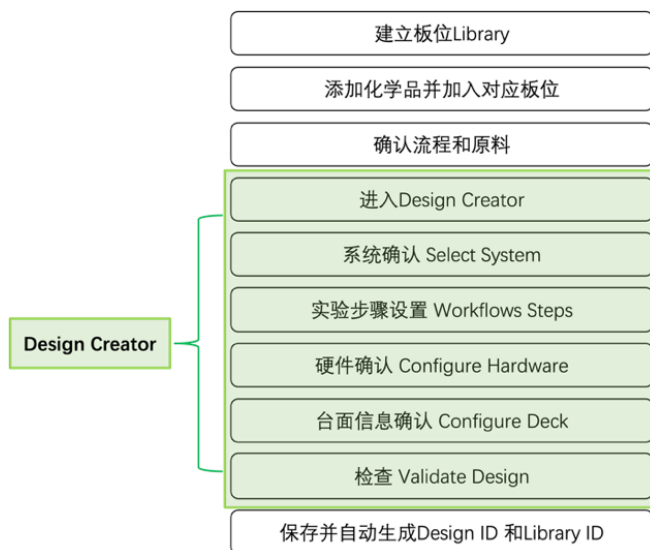


图 6-2-4

Library Studio 软件界面介绍:

软件界面分为 3 个主要部分（见图 6-2-5），左侧为 Sources，是实验中所有定义的 Chemicals、Mixtures 和 process parameters 的统称，并会显示在这个区间；右侧为 Library，实验中使用的板位 Plate/Library 会展示在这个区域；下方多功能区包括 “Chemicals”、“Mixtures”、“Parameters”、“Recipe” “Worksheet”，分别用于添加实验所需化合物、设计实验中所需溶液、设置实验中相关参数（压力、温度、时间等）、展示实验流程细节、展示每种原料所需的总量列表。

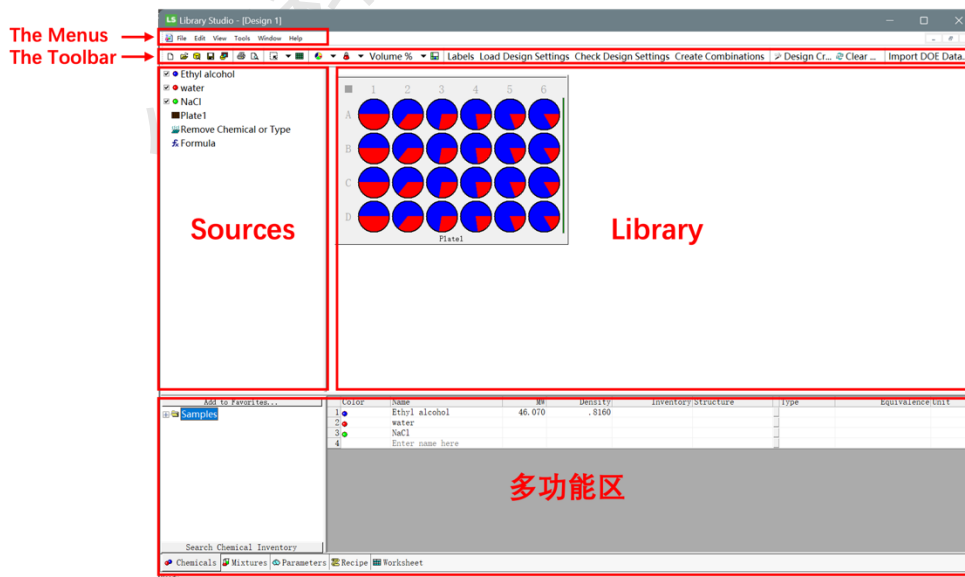


图 6-2-5

Library Studio 软件使用示例:

- 1) **新建 Library:** 在软件 Toolbar 中点击 ，根据需求在“Define Library”窗口中创建实验所需板位（图 6-2-6）。根据实验计划，命名板位（建议体现用途和规格，方便后续在 Design Creator 中识别调用），修改行数（Rows）和列数（Columns），可对其进行备注。

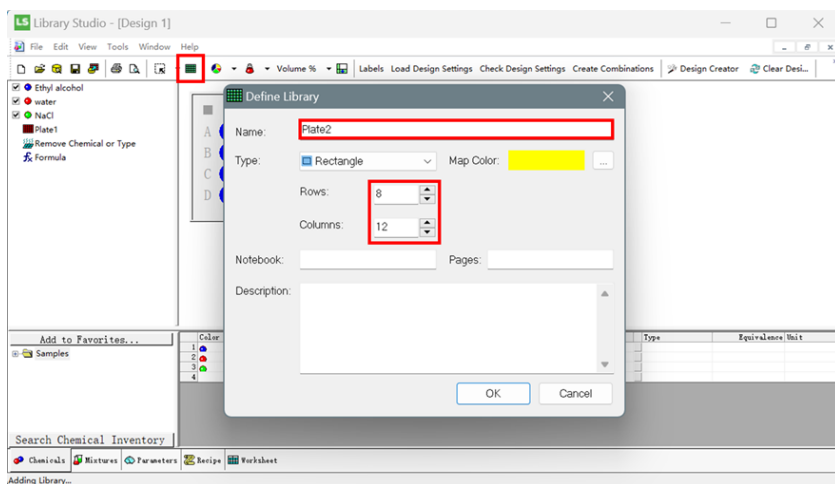


图 6-2-6

- 2) **编辑所需化学品信息:** 在多功能区中，选择“Chemicals”。可直接在右侧表格部分直接输入所需化学品，也可以从左侧“Favorites”中找到系统已有的化学品，选择并拖入到右侧区域。右侧表格中的化学品，会同时出现在“Sources”区域中（图 6-2-7）。

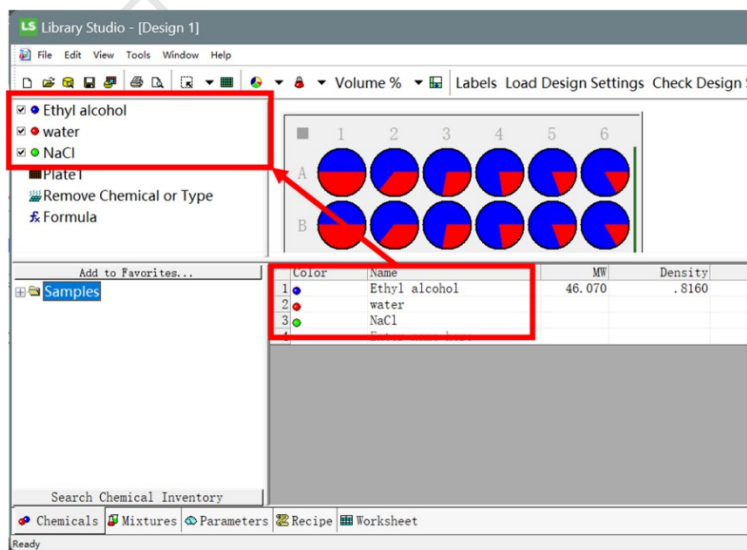


图 6-2-7

- 3) 添加化学品到实验板位中: 如图 6-2-8, 按照实验顺序, 选中“Sources”中的对应化学品, 并直接拖入对应板位中, 再在板位上选中需要添加该化学品的孔位(若需加入多个孔位, 可以直接拖拽选择连续孔位, 或者按下“Ctrl”键后鼠标左键选择相应孔位)。随后在出现的“Define Map”窗口中, 设置该化合物的单位(Dispense Unit 及 Design Unit, 两个单位必须保持一致), 所选单位应与样品类型匹配(例如, 固体选 mg/ug, 液体选 mL/μL)。其中“Map”选项的下拉菜单中也有多种输入方式可选, 包括手动输入(Discrete Amount)、表格导入(Exists)、百分比递增(Geometric)、梯度递增(Gradient)、统一(Uniform)等。完成后选择“OK”, 用同样的方法编辑添加其他化学品。

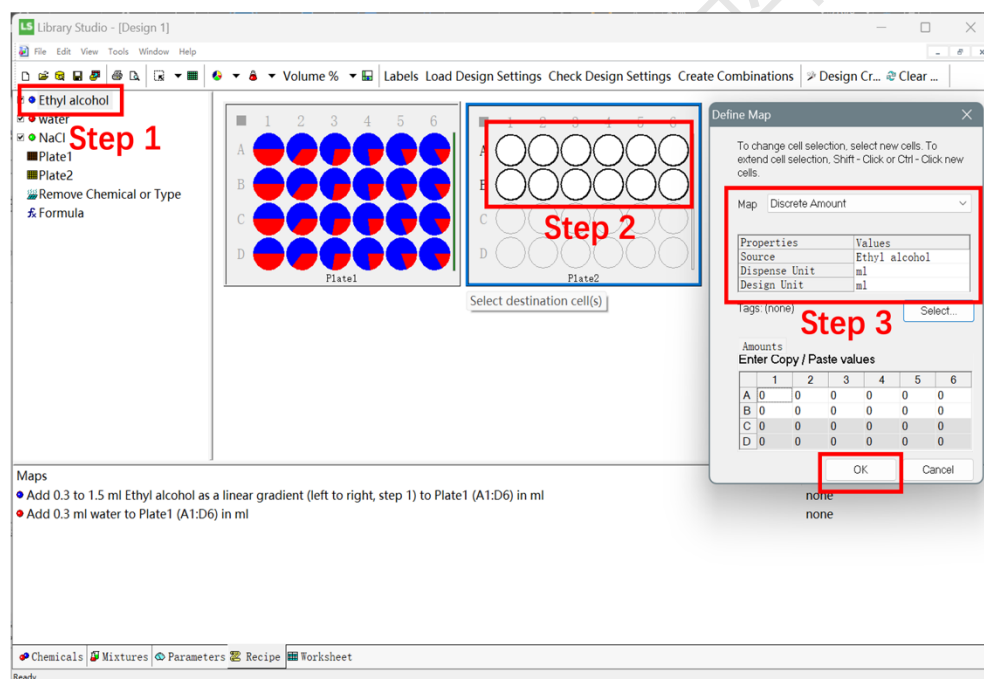


图 6-2-8

- 4) 确认原料分配流程: 全部添加完成后, 可在下方区域的“Recipe”(图 6-2-9A)中查看步骤, 并对其顺序进行调整, 一般建议先液体后固体。确认后进入下一步操作(加样顺序在后续步骤中无法调整); 在“Worksheet”(图 6-2-9B)中查看确认各种原料所需要的最小量。

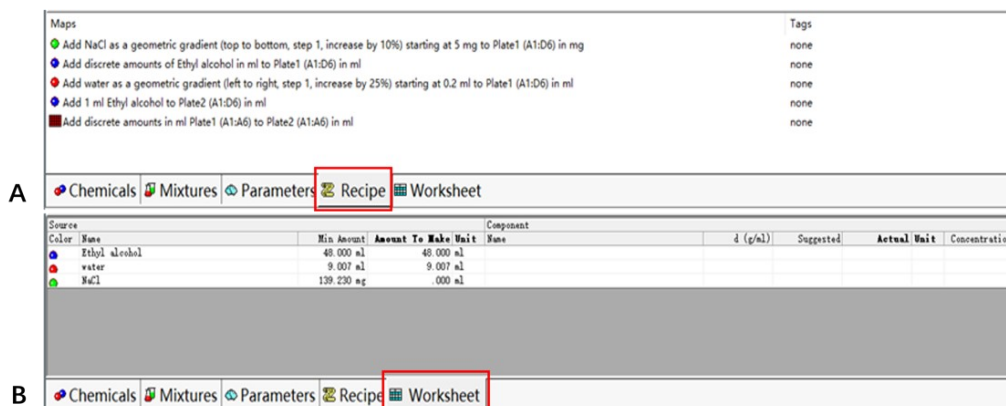


图 6-2-9

- 5) 进入 **Design Creator**: 确认无误后, 点击上方 Toolbar 中的 **Design Creator** 按钮, 会跳出 “Select Design” 窗口 (图 6-2-10), 选择 “Load design from active window” 进入下一步操作。若此时 Library Studio 软件中有多个 Design 窗口打开, 请务必确认接下来要使用编辑的窗口被选中并在最上层, 或者处于最大化状态 (如图 6-2-10 中的 Design 2), 再点击 **Design Creator** 按钮。

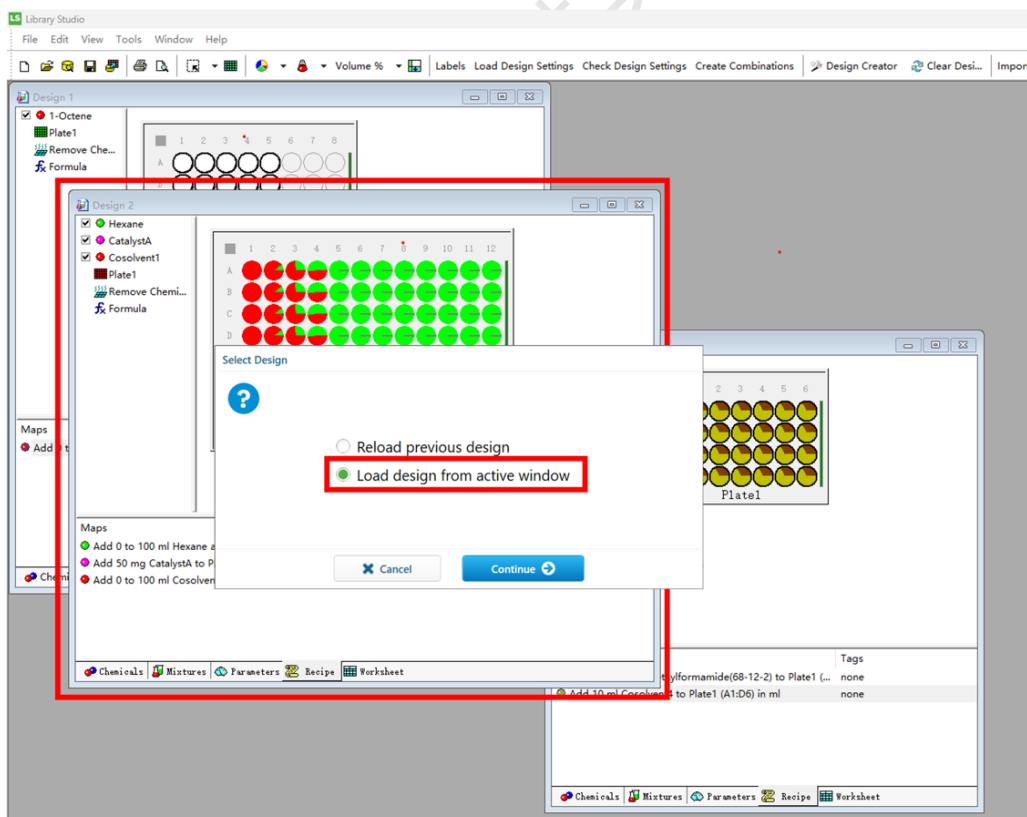


图 6-2-10

Design Creator 会开启新的编辑界面:

- a) 系统选择 **Select System**: 选择默认的系统 “Unchained Labs System” 即可, 点击下一步。

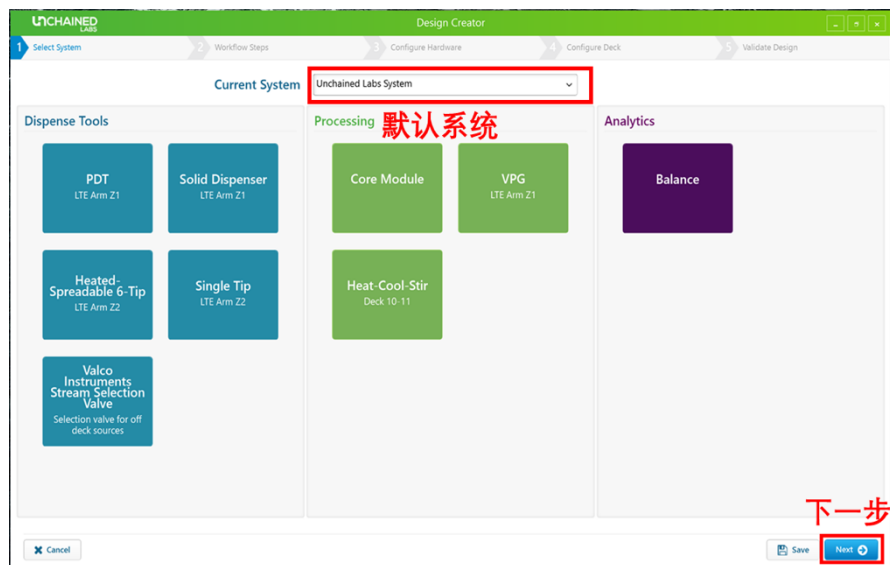


图 6-2-11

- b) 实验步骤设置 (**Workflows Steps**): 进入 Workflow Steps 之后, 中间 Workflow 会根据之前实验板位中设定的化合物添加, 按照顺序自动生成相关添加固体和液体的步骤 (注意: 固液分配顺序在此无法调整)。同时, 页面左侧为可添加的实验步骤 “Process Steps”, 右侧为 “Workflow” 中选中步骤的设定选项 “Options” (图 6-2-12)。

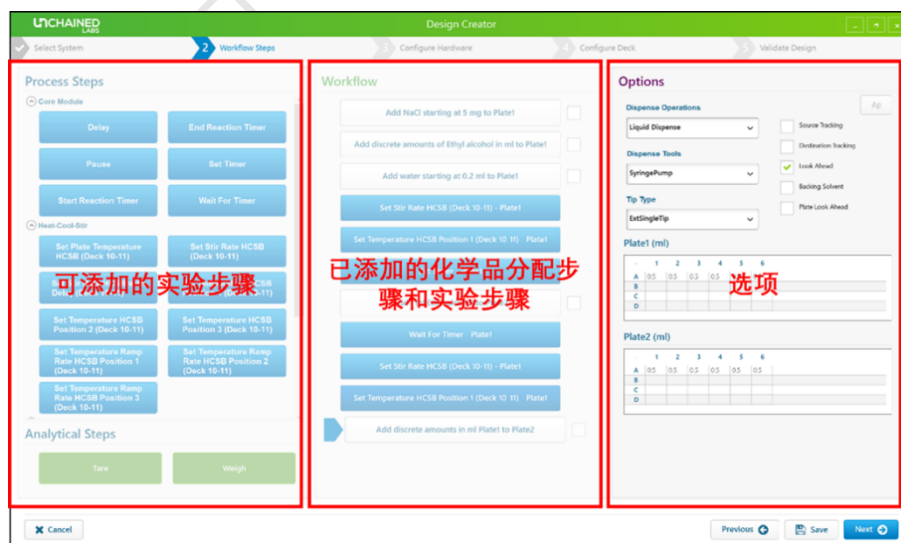


图 6-2-12

页面左侧的 Process Steps 大致分为“Core Module”(计时、暂停等)，“Heat-Stir”(转速、温度、升温速度等)，“Single-Tip”(温度设置)，“Heated Vortexer”(转速、温度设置)，“VPG”(瓶板移动设置)等。可直接拖动加入到中间栏，通过拖动调整顺序（部分选项已在图 6-2-13 中标注）。

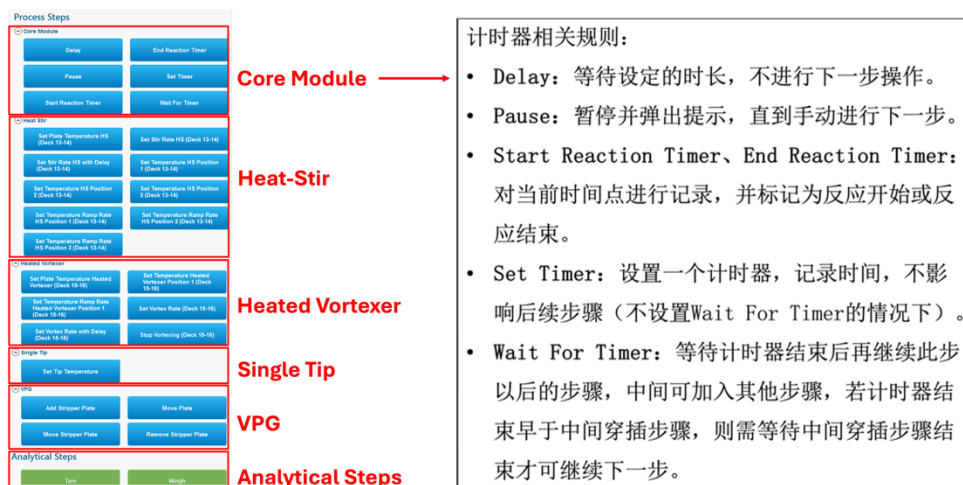


图 6-2-13

页面中间 Workflow 的所有步骤，可单击选中，在右侧 Options 中设置实验步骤的相关信息。选中对应条目，右侧栏会显示可设置选项，针对固体和液体分配，可按照样品类型选择固体或者液体的分配类型及使用的工具，常用工具和选项已经在下图中给出选择细节（图 6-2-14 和图 6-2-15）。（如需直接使用系统液或十通阀连接液体进行加液，必须选择 Back Solvent）。

全部实验步骤编辑结束后，点击“Next”，进入下一步。

固体分配:

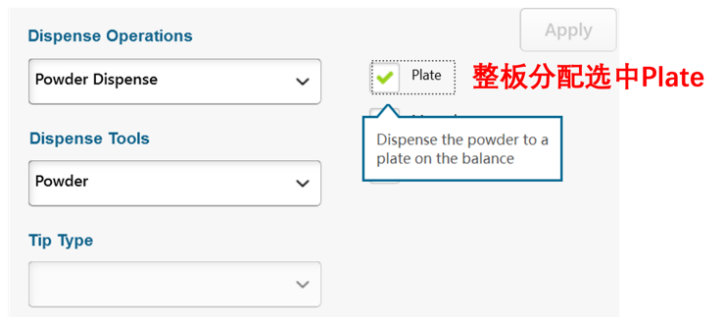


图 6-2-14



图 6-2-15

- c) 硬件确认 (Configure Hardware): 系统自动跳过, 进入下一步。
- d) 台面信息确认 (Configure Deck): 为已确定的实验步骤 Workflow 定义台面上的化合物的目标板位和源位置, 会按照默认顺序先后定义 Libraries 和 Sources。默认台面配置如图 6-2-16, 未标注为空位:

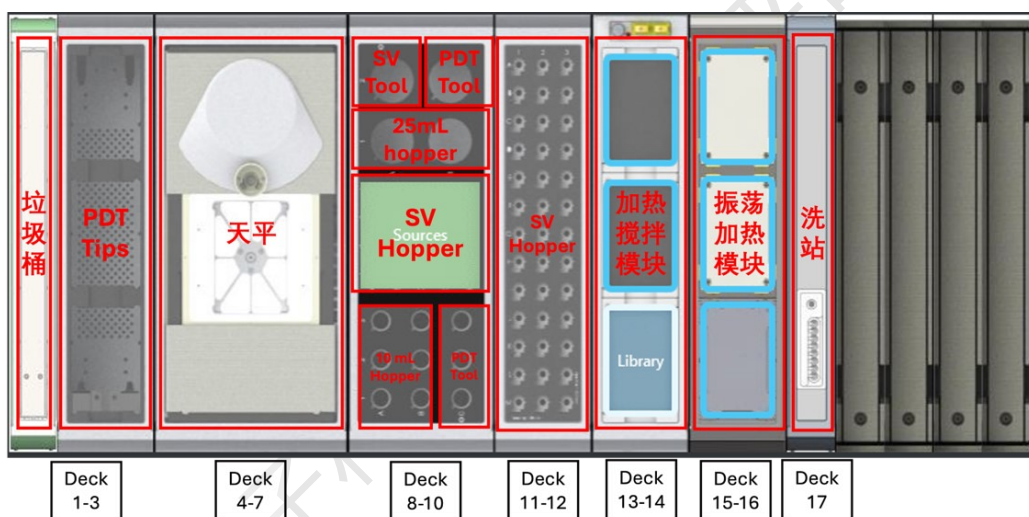


图 6-2-16

- i. **Libraries:** 确定 LS 软件中编辑过的 Libraries 在台面上的位置。如图 6-2-17, 首先确定 Substrate Type, 之后在 Selected Position 的下拉菜单中选择相应位置 (可选位置也会在台面布置图中由蓝框标出, 最终选定位置的会被蓝色选中)。选择台面位置时, 注意是否匹配后续的加热、搅拌等步骤。

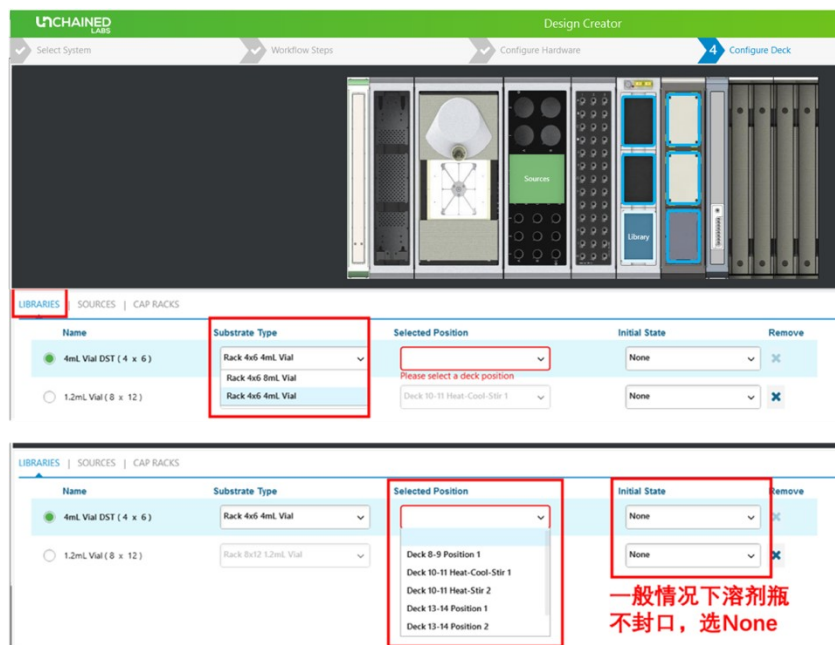


图 6-2-17

- ii. **Sources:** 确定各化学品源位置（注意：此步骤中只能以台面上的空位作为来源，不可从已设置 Library 的板位中选择化学品添加）

针对固体样品，需要定义化学品源的板位类型、板位及化学品位置、初始状态、和分配方法（图 6-2-18）。其中分配方法（Dispense Category）会在固体分配中自学习，若有新增的常用新化合物或者特殊分配需求，可以跟仪器管理员确认后新建使用。

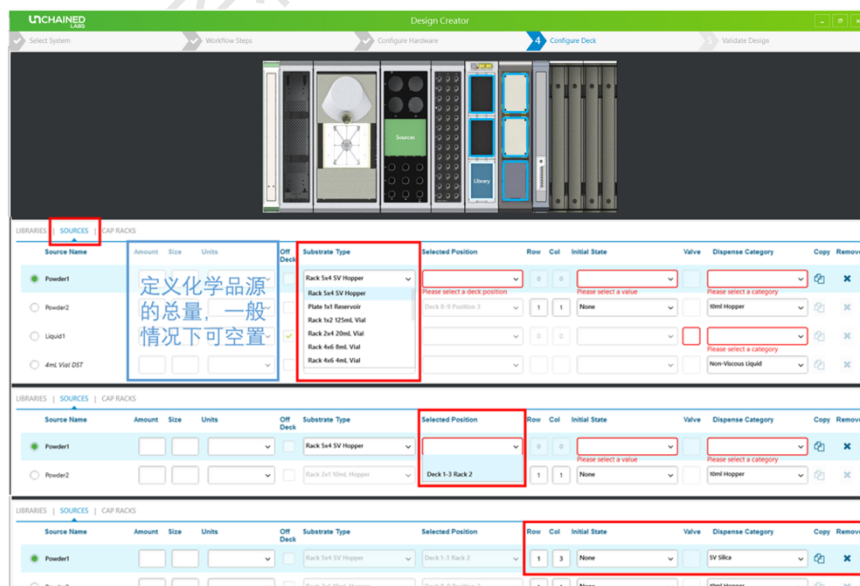


图 6-2-18

针对液体样品, 需要定义化学品源位置板位的类型、位置、初始状态, 以及分配类型方法 (图 6-2-19)。其中分配类型方法 (**Dispense Category**), 若有特殊需求, 可联系管理员讨论。若需使用十通阀加液, 需要同时勾选“Off Deck”, 并在“Valve”处选择匹配溶剂通道 (前期在实验步骤设计“Workflow Steps”编辑时, 相应步骤需要选择单通道钢针, 即“SyringePump”、“SingleTip”和“Backing Solvent”)。

全部选择完毕后, 点击“Next”进入下一步。

图 6-2-19

- e) **设计验证 (Validate Design):** 若软件“Validate Design”步骤验证无误会出现如下界面 (图 6-2-20), 点击“Finalize”即完成设计并进入下一步。若此步骤发现问题可点击“Previous”返回修改。

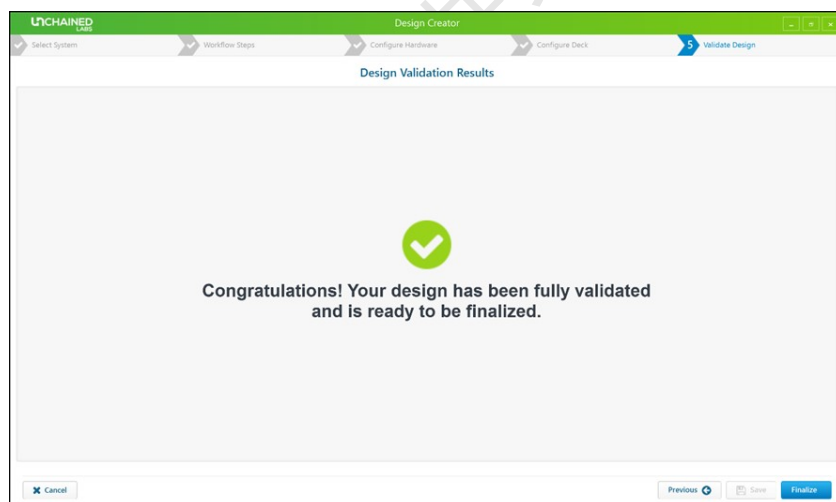


图 6-2-20

- 6) **新建 Design ID:** 点击“Finalize”后, 如下“Finalize Design”窗口会跳出 (图 6-2-21)。若是全新 Design, 请务必勾选“Create New Design ID”, 并输入“Design Name”, 选择相应项目归属“Select Project”。“Save”后, 软件会自动生成唯一数字 Design ID (显示在 Library Studio 软件的标题栏中, 图 6-2-22) 对应当前实验设计, 可在后续实验中直接输入该 ID 来运行此实验,

或查询相关实验结果。该 Design ID 中的所有 Libraries 都会自动生成唯一对应编号, 显示在 Library Studio 软件界面。

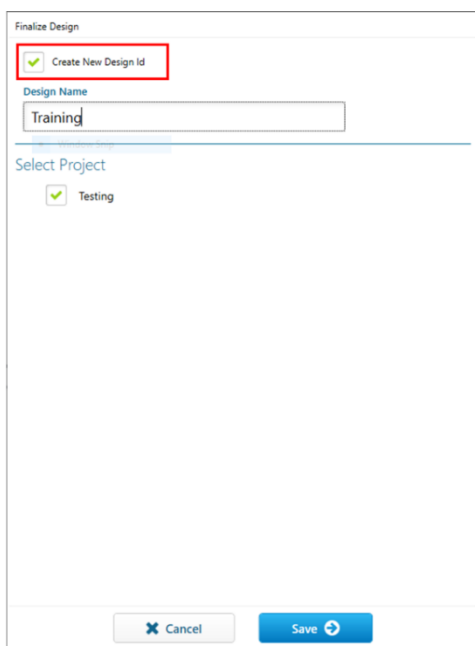


图 6-2-21

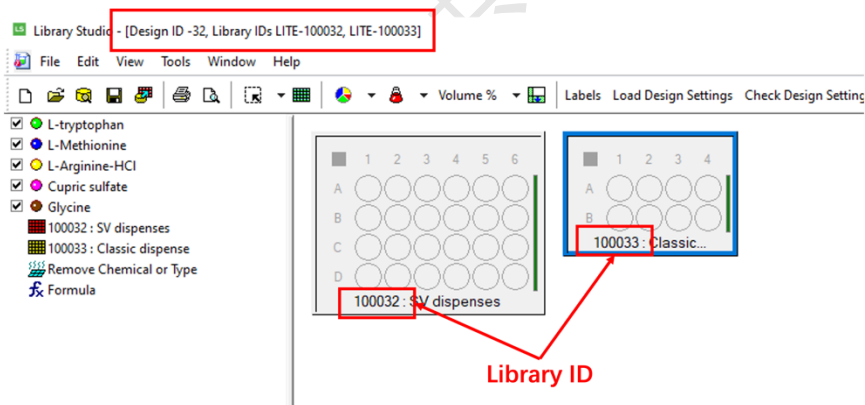


图 6-2-22

6.4 运行仪器

***基理系统登陆

接入大仪网的仪器操作电脑均需要登陆基理锁屏界面。

- (1) 如图(a), 如界面显示“一卡通用户”, 请在 Account 输入预约者的一卡通账户, Password 栏输入相应账户密码, 点击 Submit;

注意: 如账号或密码输入错误, 请按键盘 Delete 键进行删除, 再重新输入; 禁止点击 Cancel, 否则仪器会自行关机。

(2) 如图(b), 如界面显示“LIMS User”, Account 显示 Administrator, 请与相关老师联系。



6.4.1 仪器准备工作确认

- 1) 检查确认系统液的成分和体积, 按需要进行补充或更换;
- 2) 检查废液桶情况: 在开始实验前确认废液桶中废液体积及废液管道连接情况, 根据实验流程和体系决定是否需要换新的废液桶并选择连接正确的废液桶(无机废液/有机废液), 务必确保管道流畅以防止废液从仪器台面的洗站溢出;
- 3) 确认仪器的 N_2 管路连接已打开, 并核对仪器上的压力表指针在绿色区域(约 0.5 - 0.65 MPa);
- 4) 按照实验需求, 准备好固体液体原料(固体样品需要经过研磨处理, 液体样品需要溶解在合适的溶剂中), 装到对应料斗或容器中, 并按照实验设计摆放在仪器台面相应板位上。

6.4.2 开机

- 1) 打开仪器总电源开关, 位于仪器右侧靠后位置(图 6-4-1 左, 红色旋钮开关)。
- 2) 点击开机按钮, 位于仪器外罩正面右下角(图 6-4-1 右, 绿色按钮)。

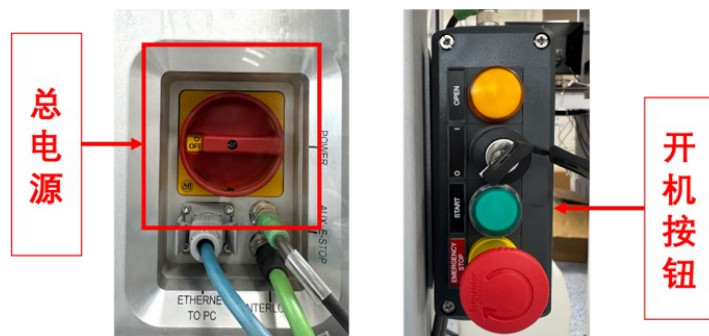


图 6-4-1

6.4.3 仪器初始化

关闭仪器围壳后, 打开 Automation Studio 软件(AS 软件), 选择“Utilities” → “CAN device map” → “Initialize gateway” (如下图左), 确认仪器状态。若一切正常, 窗口会变成如下图(右图)的状态, 硬件列表全部显示黑色, 此时可进入下一步, 系统初始化。

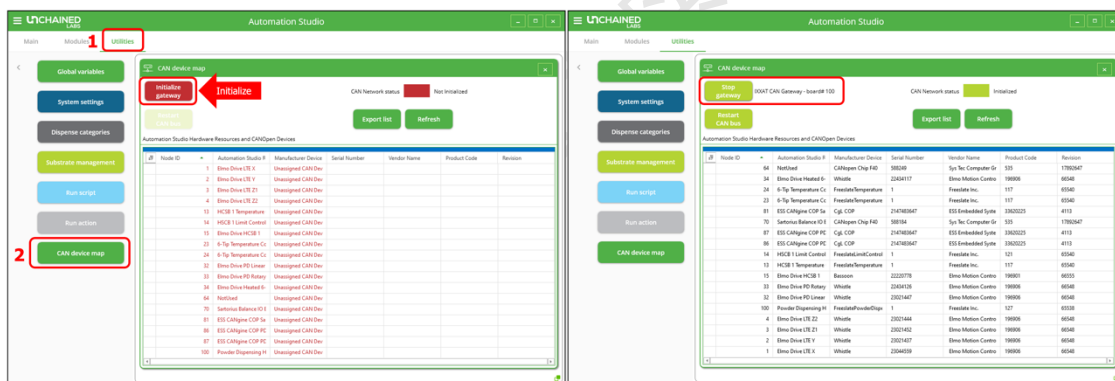


图 6-4-2

若硬件列表中有任何项出现橙色或红色, 可尝试重启 AS 软件系统 (关闭 AS 软件, 双击 , 打开 AS 软件), 若仍无法通过 “CAN device map”, 请联系仪器管理员。

当 “CAN device map” 通过后 (硬件列表全部显示黑色), 请再次确认仪器围壳保护罩完全关闭。然后点击 , 再点击 “Initialize system”, 进行系统初始化 (图 6-4-3)。初始化过程中, 机械臂会进行移动、清洗针头、抓取工具等动作, 请务必注意操作安全。如有任何问题, 请第一时间联系仪器管理员。

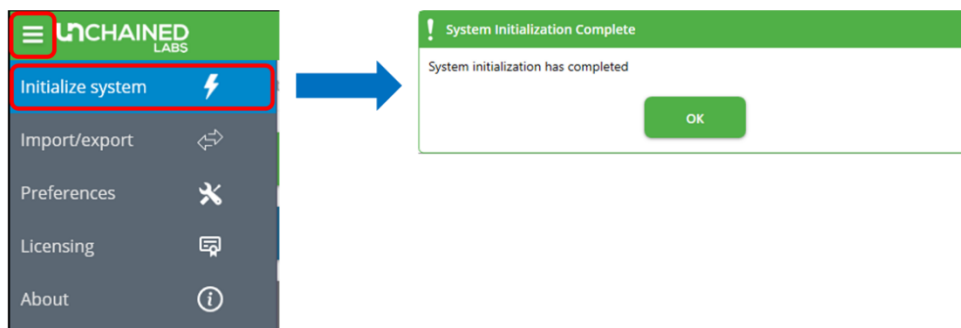


图 6-4-3

若运行期间有突发情况按下紧急停止按钮，需重启系统才能再次进行系统初始化。

系统重启（不重启电脑的情况下）：

- 1) 关闭 AS 软件；
- 2) 双击 Stop ASCoreSvc 图标 ；
- 3) 按下急停按钮 （请确保 FTC 机械臂上所有工具已手工取下，单通道钢针抬起，与台面分离）；
- 4) 旋转拉出急停按钮 ，然后按下绿色开机按钮 ；
- 5) 打开 AS 软件；
- 6) 选择“Utilities”→“CAN device map”→“Initialize gateway”，等待确认所有硬件列表全部显示黑色；
- 7) 然后点击 ，再点击“Initialize system”，进行系统初始化。

6.4.4 运行实验

- 1) 在仪器完成初始化后，点击“Run Experiment”，输入此次 LS 软件中生成的 Design ID，或点击  在 Project 中寻找此次需要运行的 Design ID（图 6-4-4，其余选项建议选择默认值，如需要调整，可与仪器管理员沟通），点击 Next。

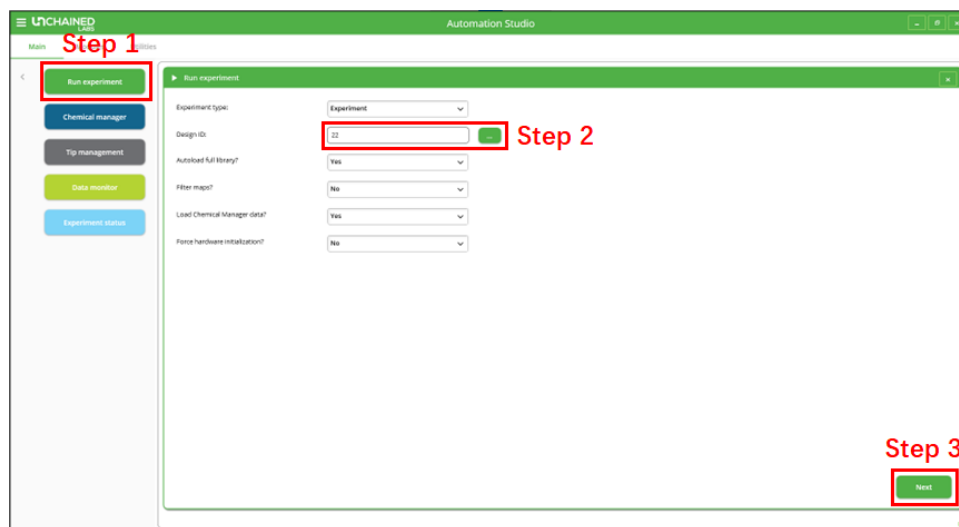


图 6-4-4

- 2) 确认化学品信息 Chemical manager: 实验开始前, 需确认台面上的设置与实验设计是否一致, 化学品位置是否正确、数量是否充足, 系统液是否合适、液体量是否充足。可做相应更改, 但是仅针对这一次实验运行, 不会更改 Design ID 对应的方法 (如需更改 Design ID 对应的方法, 可从 LS 界面进入修改)。

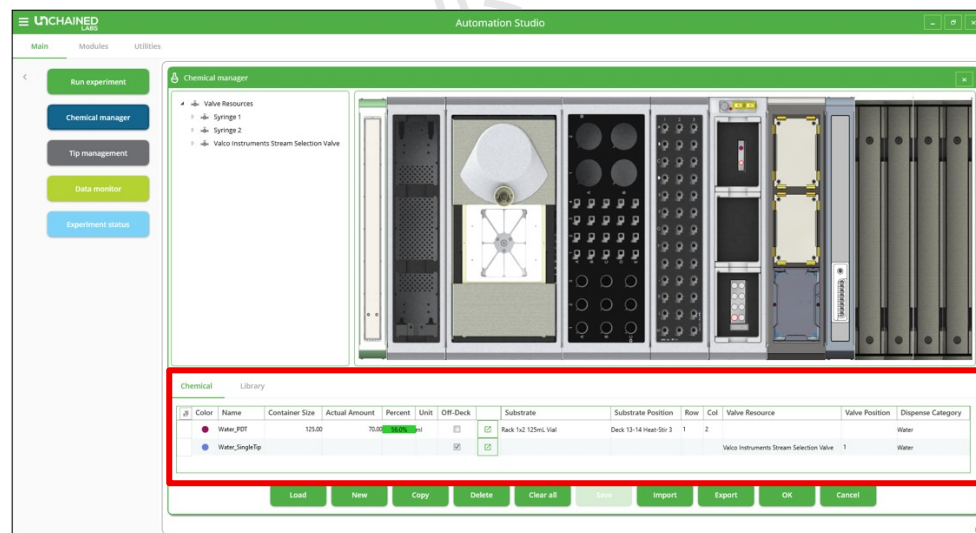


图 6-4-5

- 3) 确认天平状态: 运行开始时, 会先打开天平, 请务必肉眼确认内部是空的以及载架选择正确后 (如图 6-4-6 左), 勾选 “Confirm that balance door is open and no vial/plate is on the balance”, 天平设置选择 Plate (如图 6-4-6 右, 注

意：天平默认选择 Plate 模式，若需要用小瓶称量，请提前跟仪器管理员沟通确认，选错模式会导致仪器损坏。），点击下一步。仪器会按照实验设计流程开始运行。

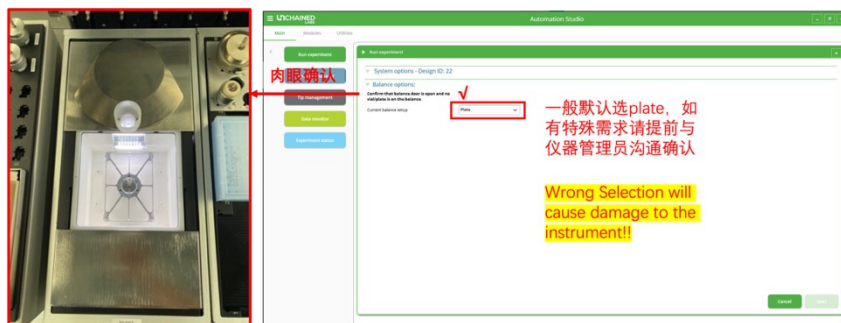


图 6-4-6

4) 运行状态查看：实验运行过程中，可在“Main”→“Experiment status”中查看仪器的运行状态以及运行过程中产生的数据。

运行中遇到问题可点击暂停或停止按钮控制软件程序的运行，如遇到危险，及时按下仪器上的紧急停止按钮，会在硬件层面终止仪器的全部动作，确认人员安全后，及时联系仪器管理员。

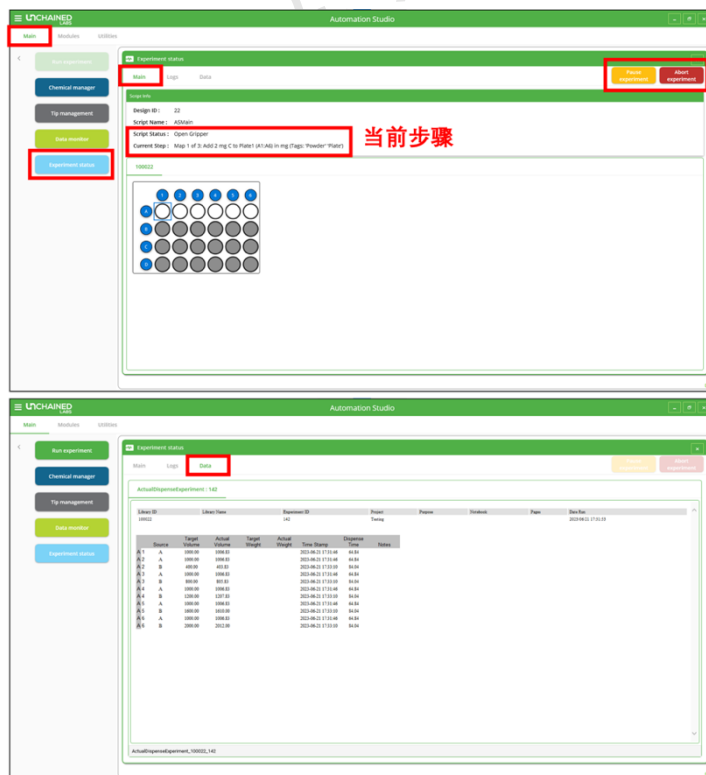


图 6-4-7

6.5 数据查看

实验结束后在 View Results 软件（VR 软件） 中根据相关信息搜索、查看结果，生成报告（图 6-5-1）。

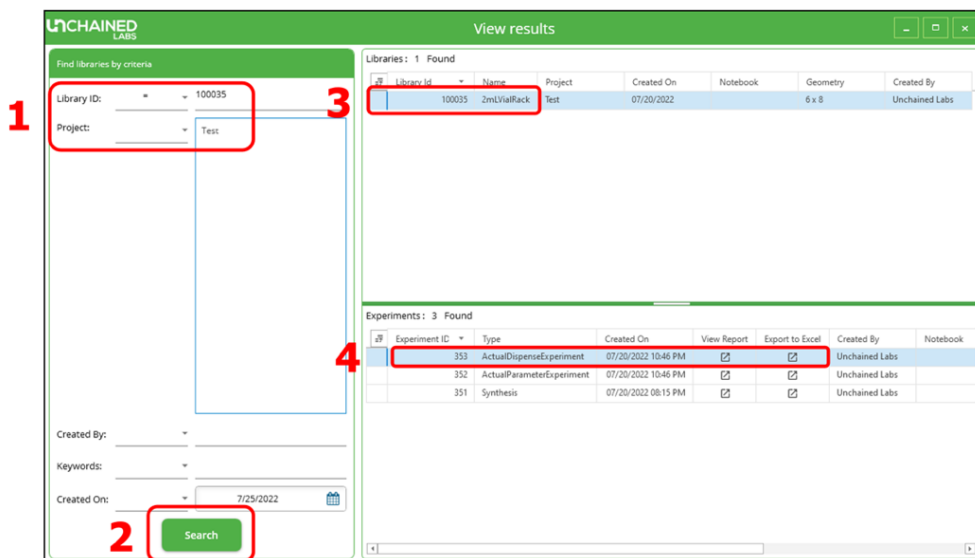


图 6-5-1

6.6 实验结束操作

- 1) 关机：先关闭 AS 软件，再关闭仪器总电源，并关闭氮气。
- 2) 清理实验过程中产生的废弃物，包括吸头、废液等。
- 3) 退出基理账号。
- 4) 完成实验登记。

7. 相关/支撑性文件

Q/WU FLHR001 文件编写规范。

8. 记录

