ThermoFisher
SCIENTIFIC

Welches Chromatographie-Datensystem ist das Richtige für mich?

Matthias Hrobarsch
Chromeleon Support Specialist
Thermo Fisher Scientific, Dreieich

Sommer 2016 CDS Webinar - Übersicht

- Innovative Benutzeroberfläche
- Universelle Instrumentensteuerung
- Erfolgreiches Starten von Analysen
- Datenbearbeitung – schnell und zuverlässig
- Arbeiten im regulierten Umfeld

Sommer 2016 Webinar Serie

- **Innovative Benutzeroberfläche**
- Universelle Instrumentensteuerung
- Erfolgreiches Starten von Analysen
- Datenbearbeitung – schnell und zuverlässig
- Arbeiten im regulierten Umfeld

ThermoFisher SCIENTIFIC

Chromeleon 7 CDS - Operational Simplicity

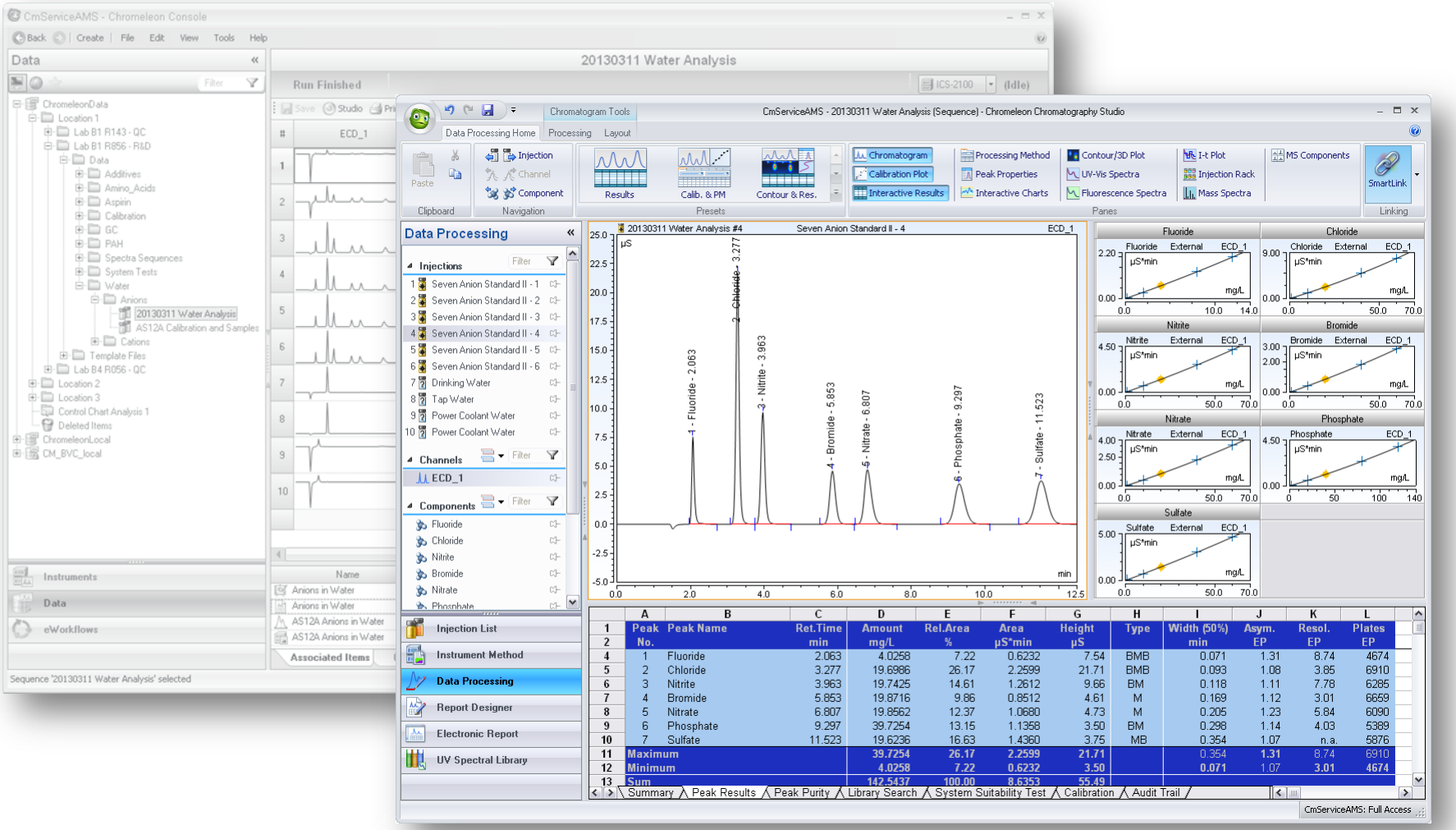
Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 7.2 SR4
Chromatography Data System (CDS) Software

- „**Operational Simplicity**“ by Design
  - Reduzierung der Anzahl an Schritten,
    um etwas Bestimmtes zu erreichen
  - Alle Schritte sind leicht zu verstehen und zu bedienen
  - Schnell zu einem Ergebnis

- Drei Hauptmerkmale von **Operational Simplicity**:
  - Intuitives Aussehen und „Gefühl“
  - Peak Erkennung mit Cobra- und Smart Peaks Assistent
  - eWorkflows™ (automatischer Arbeitsablauf)

Schnell und einfach von der Probe zum Ergebnis

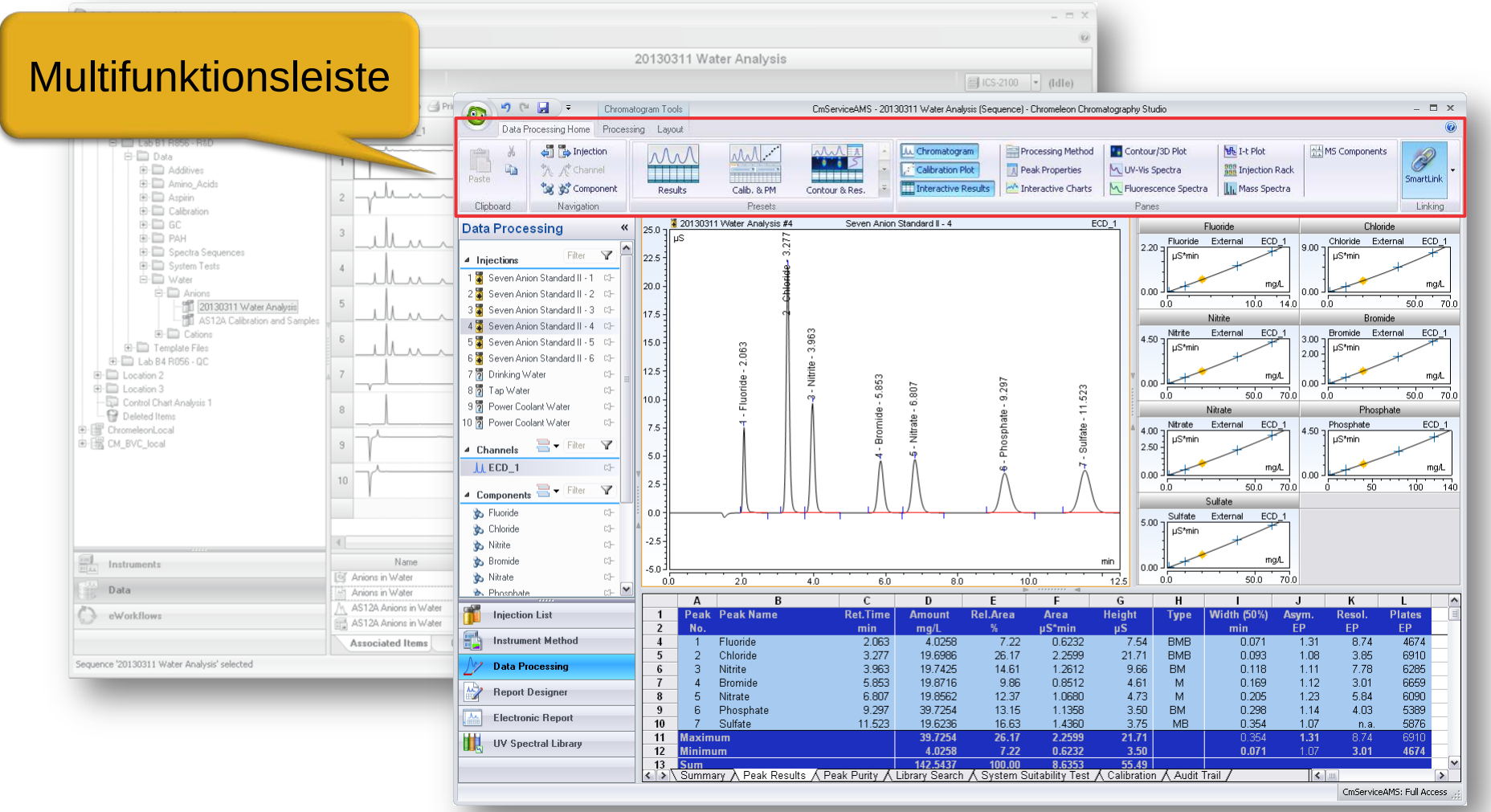
Chromeleon Chromatography Studio- alle Informationen im Blick



No.	Peak No.	Peak Name	Ret.Time min	Amount mg/L	Rel.Area %	Area µS*min	Height µS	Type	Width (50%) min	Asym. EP	Resol. EP	Plates EP
4	1	Fluoride	2.063	4.0258	7.22	0.6232	7.54	BMB	0.071	1.31	8.74	4674
5	2	Chloride	3.277	19.6986	26.17	2.2599	21.71	BMB	0.093	1.08	3.85	6910
6	3	Nitrite	3.963	19.7425	14.61	1.2612	9.66	BM	0.118	1.11	7.78	6285
7	4	Bromide	5.853	19.8716	9.86	0.8512	4.61	M	0.169	1.12	3.01	6659
8	5	Nitrate	6.807	19.8562	12.37	1.0680	4.73	M	0.205	1.23	5.84	6090
9	6	Phosphate	9.297	39.7254	13.15	1.1358	3.50	BM	0.298	1.14	4.03	5389
10	7	Sulfate	11.523	19.6236	16.63	1.4360	3.75	MB	0.354	1.07	n.a.	5876
11	Maximum			39.7254	26.17	2.2599	21.71		0.354	1.31	8.74	6910
12	Minimum			4.0258	7.22	0.6232	3.50		0.071	1.07	3.01	4674
13	Sum			142.5437	100.00	8.6353	55.49					

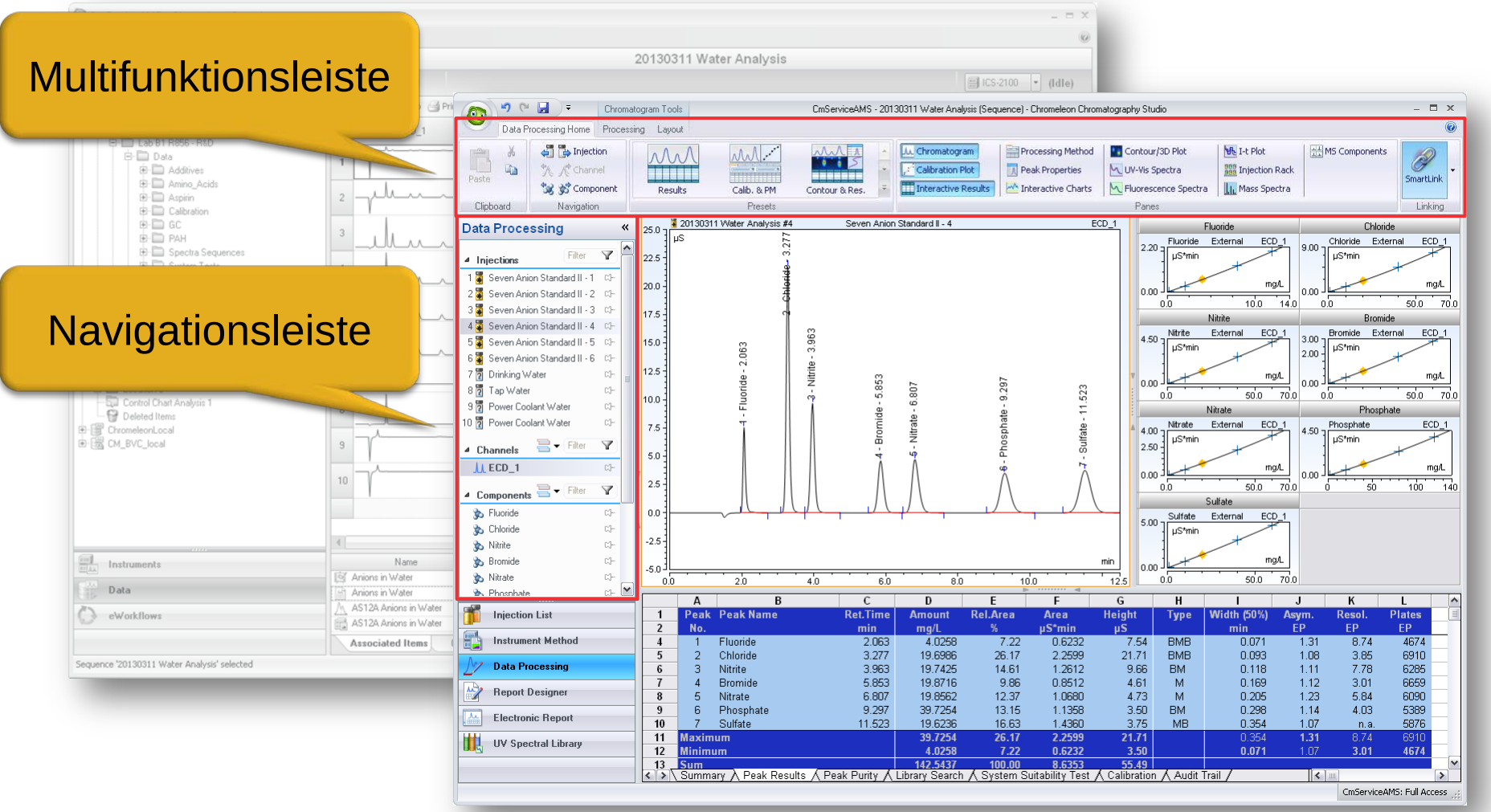
ThermoFisher SCIENTIFIC

Chromeleon Chromatography Studio- alle Informationen im Blick



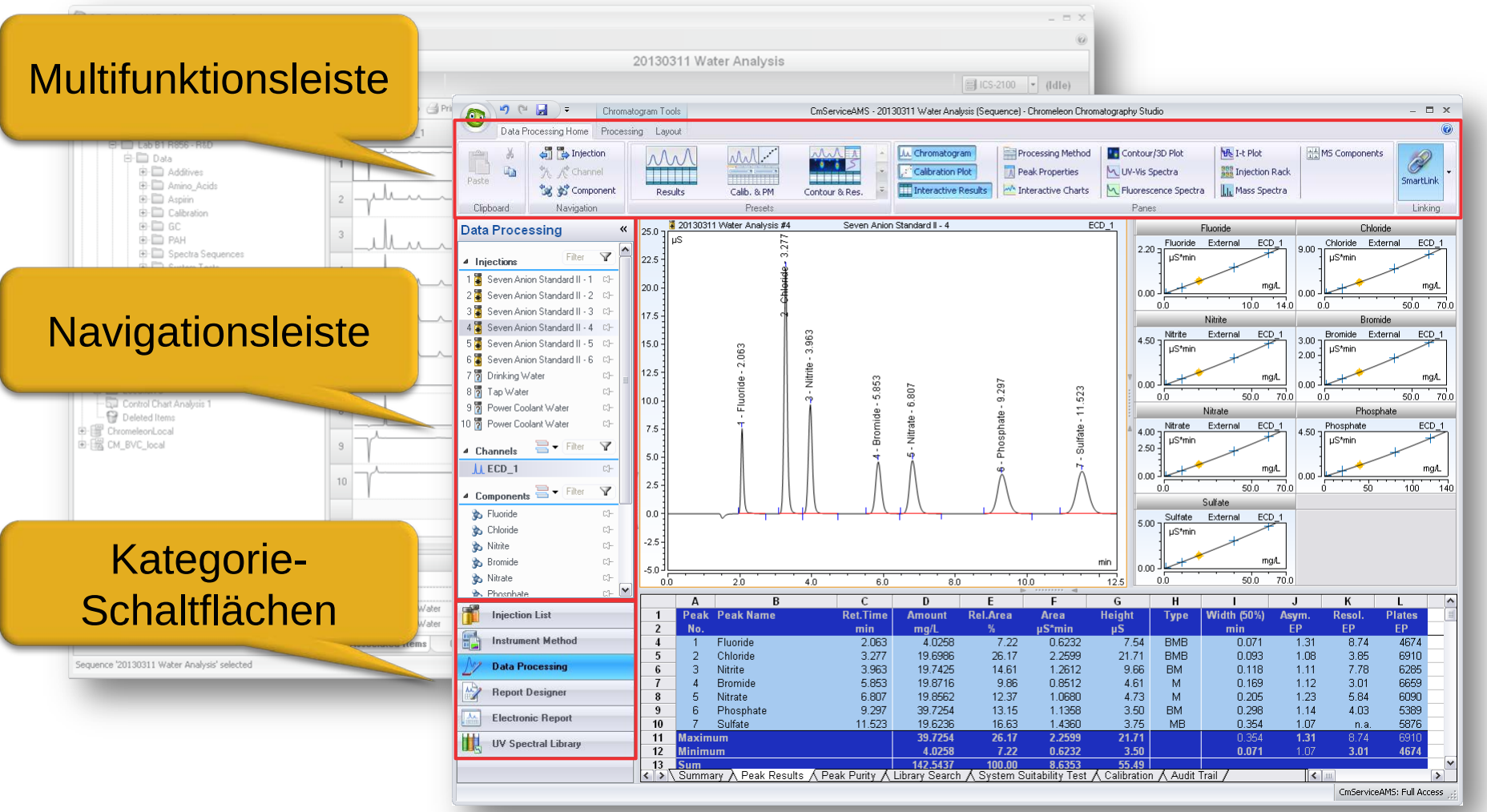
No.	Peak Name	Ret.Time min	Amount mg/L	Rel.Area %	Area µS*min	Height µS	Type	Width (50%) min	Asym. EP	Resol. EP	Plates EP
1	Fluoride	2.063	4.0258	7.22	0.6232	7.54	BMB	0.071	1.31	8.74	4674
2	Chloride	3.277	19.6986	26.17	2.2599	21.71	BMB	0.093	1.08	3.85	6910
3	Nitrite	3.963	19.7425	14.61	1.2612	9.66	BM	0.118	1.11	7.78	6285
4	Bromide	5.853	19.8716	9.86	0.8512	4.61	M	0.169	1.12	3.01	6659
5	Nitrate	6.807	19.8562	12.37	1.0680	4.73	M	0.205	1.23	5.84	6090
6	Phosphate	9.297	39.7254	13.15	1.1358	3.50	BM	0.298	1.14	4.03	5389
7	Sulfate	11.523	19.6236	16.63	1.4360	3.75	MB	0.354	1.07	n.a.	5876
Maximum			39.7254	26.17	2.2599	21.71		0.354	1.31	8.74	6910
Minimum			4.0258	7.22	0.6232	3.50		0.071	1.07	3.01	4674
Sum			142.5437	100.00	8.6353	55.49					

Chromeleon Chromatography Studio- alle Informationen im Blick



No.	Peak No.	Peak Name	Ret.Time min	Amount mg/L	Rel.Area %	Area µS*min	Height µS	Type	Width (50%) min	Asym. EP	Resol. EP	Plates EP
4	1	Fluoride	2.063	4.0258	7.22	0.6232	7.54	BMB	0.071	1.31	8.74	4674
5	2	Chloride	3.277	19.6986	26.17	2.2599	21.71	BMB	0.093	1.08	3.85	6910
6	3	Nitrite	3.963	19.7425	14.61	1.2612	9.66	BM	0.118	1.11	7.78	6285
7	4	Bromide	5.853	19.8716	9.86	0.8512	4.61	M	0.169	1.12	3.01	6659
8	5	Nitrate	6.807	19.8562	12.37	1.0680	4.73	M	0.205	1.23	5.84	6090
9	6	Phosphate	9.297	39.7254	13.15	1.1358	3.50	BM	0.298	1.14	4.03	5389
10	7	Sulfate	11.523	19.6236	16.63	1.4360	3.75	MB	0.354	1.07	n.a.	5876
11	Maximum			39.7254	26.17	2.2599	21.71		0.354	1.31	8.74	6910
12	Minimum			4.0258	7.22	0.6232	3.50		0.071	1.07	3.01	4674
13	Sum			142.5437	100.00	8.6353	55.49					

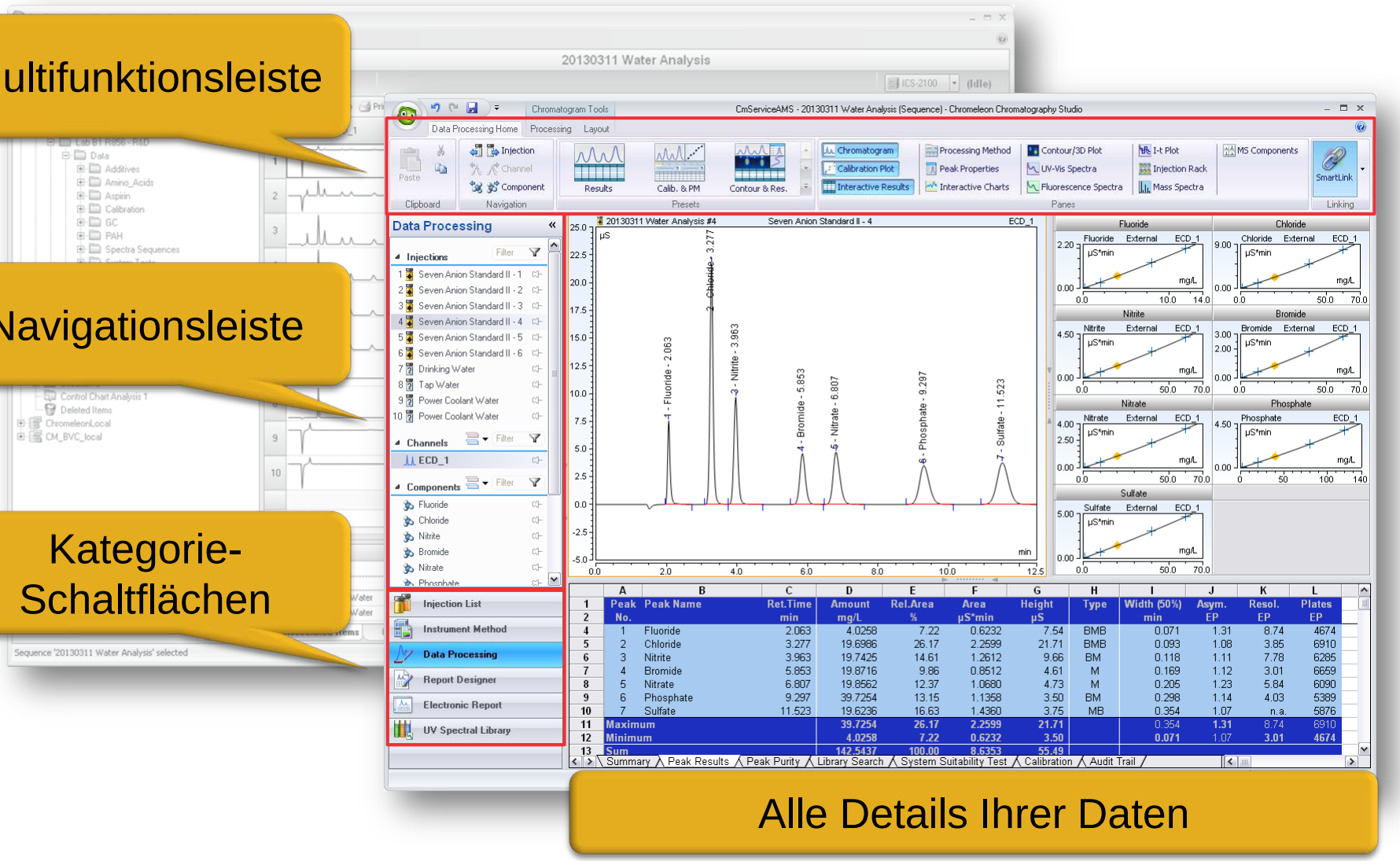
Chromeleon Chromatography Studio- alle Informationen im Blick



No.	Peak No.	Peak Name	Ret.Time min	Amount mg/L	Rel.Area %	Area µS*min	Height µS	Type	Width (50%) min	Asym. EP	Resol. EP	Plates EP
4	1	Fluoride	2.063	4.0258	7.22	0.6232	7.54	BMB	0.071	1.31	8.74	4674
5	2	Chloride	3.277	19.6986	26.17	2.2599	21.71	BMB	0.093	1.08	3.85	6910
6	3	Nitrite	3.963	19.7425	14.61	1.2612	9.66	BM	0.118	1.11	7.78	6285
7	4	Bromide	5.853	19.8716	9.86	0.8512	4.61	M	0.169	1.12	3.01	6659
8	5	Nitrate	6.807	19.8562	12.37	1.0680	4.73	M	0.205	1.23	5.84	6090
9	6	Phosphate	9.297	39.7254	13.15	1.1358	3.50	BM	0.298	1.14	4.03	5389
10	7	Sulfate	11.523	19.6236	16.63	1.4360	3.75	MB	0.354	1.07	n.a.	5876
11	Maximum			39.7254	26.17	2.2599	21.71		0.354	1.31	8.74	6910
12	Minimum			4.0258	7.22	0.6232	3.50		0.071	1.07	3.01	4674
13	Sum			142.5437	100.00	8.6353	55.49					

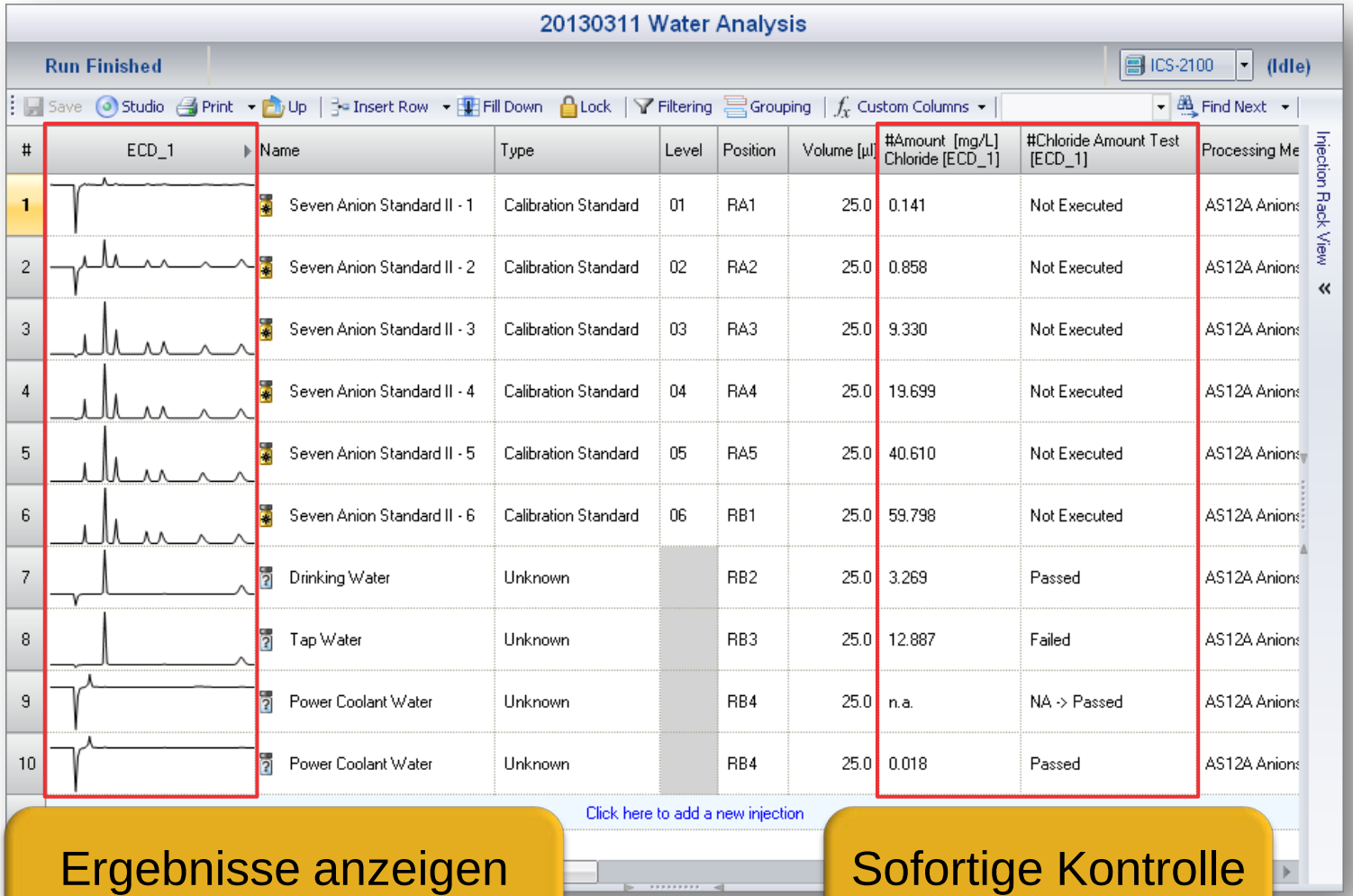
ThermoFisher SCIENTIFIC

Chromeleon Chromatography Studio- alle Informationen im Blick



No.	Peak Name	Ret.Time min	Amount mg/L	Rel.Area %	Area µS*min	Height µS	Type	Width (50%) min	Asym. EP	Resol. EP	Plates EP
1	Fluoride	2.063	4.0258	7.22	0.6232	7.54	BMB	0.071	1.31	8.74	4674
2	Chloride	3.277	19.6986	26.17	2.2599	21.71	BMB	0.093	1.08	3.85	6910
3	Nitrite	3.963	19.7425	14.61	1.2612	9.66	BM	0.118	1.11	7.78	6285
4	Bromide	5.853	19.8716	9.86	0.8512	4.61	M	0.169	1.12	3.01	6659
5	Nitrate	6.807	19.8562	12.37	1.0680	4.73	M	0.205	1.23	5.84	6090
6	Phosphate	9.297	39.7254	13.15	1.1358	3.50	BM	0.298	1.14	4.03	5389
7	Sulfate	11.523	19.6236	16.63	1.4360	3.75	MB	0.354	1.07	n.a.	5876
Maximum			39.7254	26.17	2.2599	21.71		0.354	1.31	8.74	6910
Minimum			4.0258	7.22	0.6232	3.50		0.071	1.07	3.01	4674
Sum			142.5437	100.00	8.6353	55.49					

Ergebnisspalten – Schneller Zugriff auf Ergebnisse



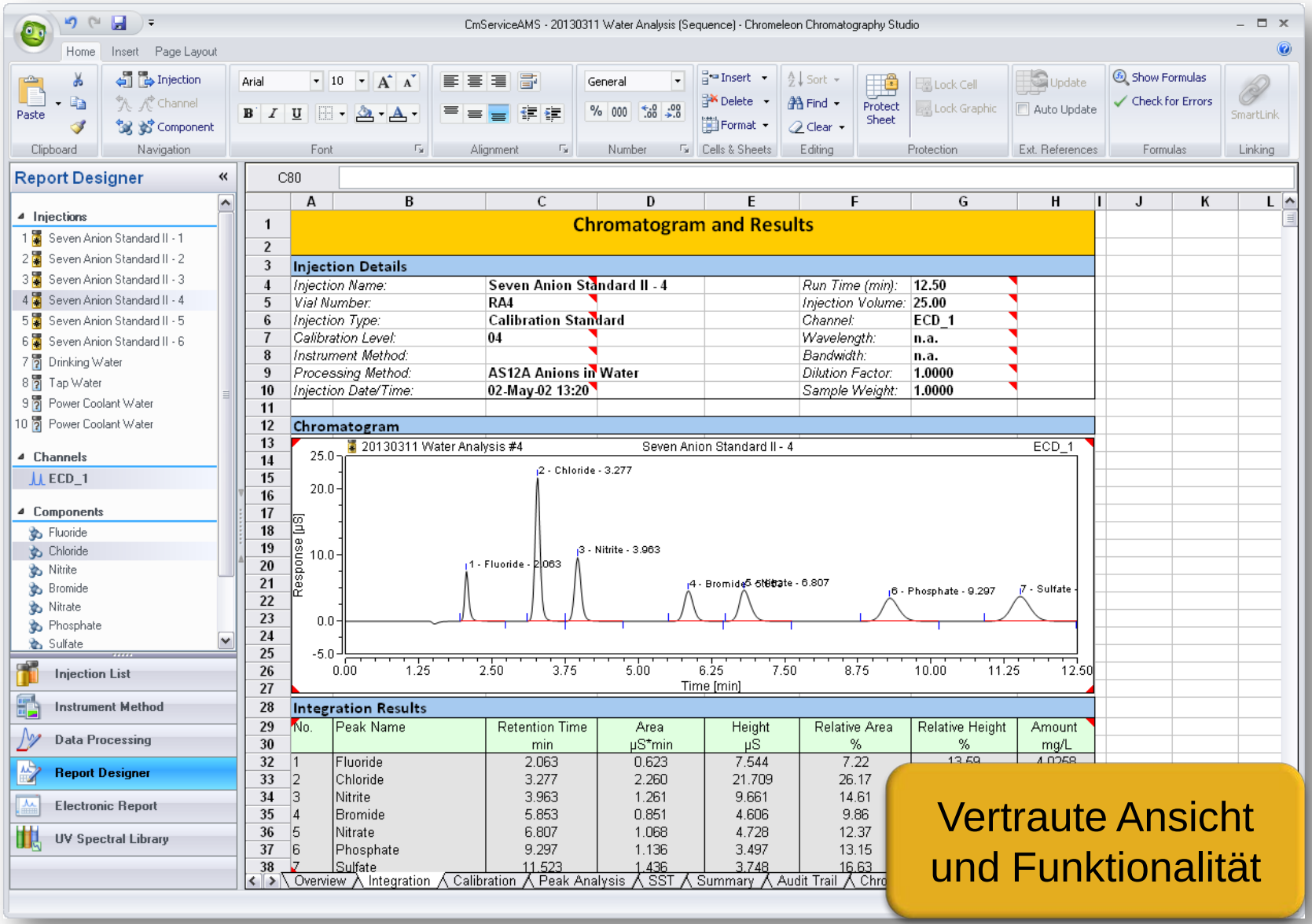
#	ECD_1	Name	Type	Level	Position	Volume [µl]	#Amount [mg/L] Chloride [ECD_1]	#Chloride Amount Test [ECD_1]	Processing Me
1		Seven Anion Standard II - 1	Calibration Standard	01	RA1	25.0	0.141	Not Executed	AS12A Anions
2		Seven Anion Standard II - 2	Calibration Standard	02	RA2	25.0	0.858	Not Executed	AS12A Anions
3		Seven Anion Standard II - 3	Calibration Standard	03	RA3	25.0	9.330	Not Executed	AS12A Anions
4		Seven Anion Standard II - 4	Calibration Standard	04	RA4	25.0	19.699	Not Executed	AS12A Anions
5		Seven Anion Standard II - 5	Calibration Standard	05	RA5	25.0	40.610	Not Executed	AS12A Anions
6		Seven Anion Standard II - 6	Calibration Standard	06	RB1	25.0	59.798	Not Executed	AS12A Anions
7		Drinking Water	Unknown		RB2	25.0	3.269	Passed	AS12A Anions
8		Tap Water	Unknown		RB3	25.0	12.887	Failed	AS12A Anions
9		Power Coolant Water	Unknown		RB4	25.0	n.a.	NA -> Passed	AS12A Anions
10		Power Coolant Water	Unknown		RB4	25.0	0.018	Passed	AS12A Anions

Ergebnisse anzeigen ohne Öffnen der Probe

Sofortige Kontrolle des Systemtests

ThermoFisher SCIENTIFIC

Darstellung – Reporting mittels Rechenblatt



Sommer 2016 Webinar Serie

- Innovative Benutzeroberfläche
- **Universelle Instrumentensteuerung**
- Erfolgreiches Starten von Analysen
- Datenbearbeitung – schnell und zuverlässig
- Arbeiten im regulierten Umfeld

Umfassende Steuerung von Geräten - Treiberkonzept

- Chromeleon verwendet ein Druckertreiber Plug-In Konzept zur eigenen Gerätesteuerung und der von Drittanbietern
  - Standardisierte Gerätesteuerung für Thermo Scientific und 3rd Party Instrumenten über das Chromeleon Driver Development Kit (DDK)
    - Von Thermo Fisher Scientific für alle internen Treiberentwicklungen verwendet
    - Für andere Hersteller zur Treiberentwicklung verfügbar
    - Integration von Treiber Plug-In Lösungen führender Gerätehersteller
      - Agilent Instrument Control Framework (ICF)
      - Waters Instrument Control Software (ICS)
- Chromeleon unterstützt über 400 unterschiedliche Module von 18 verschiedenen Herstellern

Chromeleon für die Massenspektroskopie

Thermo Scientific™
ISQ™ Series GC-MS

Thermo Scientific™ Q
Exactive™ MS

- Client-Server Architektur
- Einmalige Bedienerfreundlichkeit
- Fremdgerätesteuerung
- Umfangreiche Compliance Tools

+

- über 30 Jahre MS Erfahrung
- Spitzentechnik im MS Portfolio
- Hohe MS Applikationsexpertise
- Integrierte MS Gerätetreiber

=

Das CDS mit integrierter MS-Funktion für den Routinealltag!

- Innovative Benutzeroberfläche
- Universelle Instrumentensteuerung
- **Erfolgreiches Starten von Analysen**
- Datenbearbeitung – schnell und zuverlässig
- Arbeiten im regulierten Umfeld

Mehr “Right First Time” Analysen

- Workflow Automatisierung mittels eWorkflows
  - Erstellen und automatisches Starten von Analysen nach eigenen SOP´s mit wenigen Mausklicks
- Sequence Ready Check
  - Statuskontrolle der Sequenzen gewährleistet korrekten Start
- Sicherstellen der Messbereitschaft
  - Instrument Smart Startup sichert kontrollierte Bedingungen vor der Datenaufnahme
- Entscheidungen während der Datenaufnahme
  - Integrierte System Suitability Tests mit Intelligent Run Control übernehmen automatisch innerhalb der Sequenz Aktionen, basierend auf den aktuellen chromatographischen Ergebnissen

eWorkflows

eWorkflows - Verwendung

- eWorkflows automatisieren / vereinfachen
  - alle chromatographischen Prozesse
    - LC / IC / GC / MS
    - Routine & Methodenentwicklung
- In wenigen Schritten von der Probe zum Ergebnis
- **Operational Simplicity™** - Design

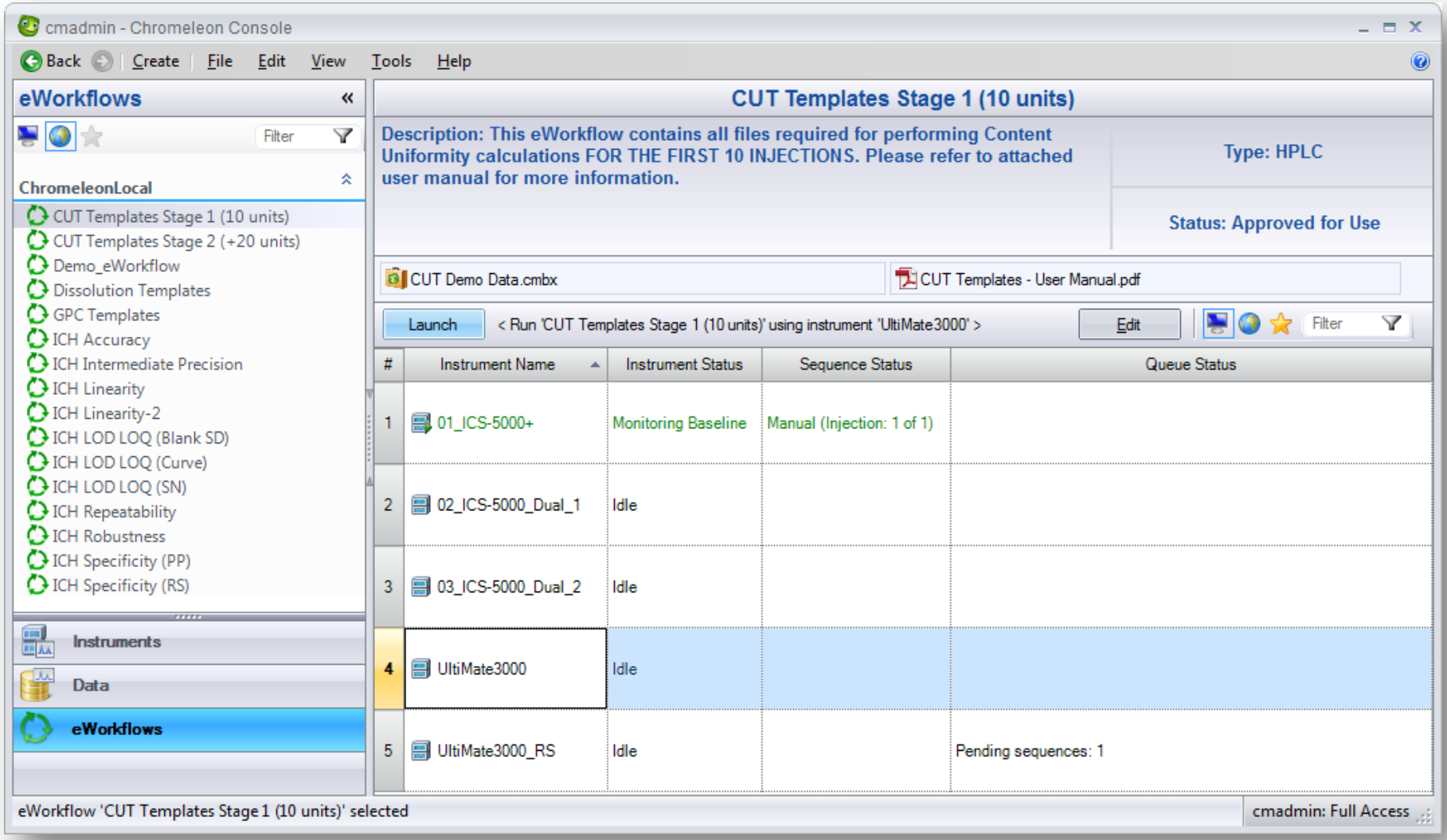
eWorkflows - Vorteile

- eWorkflows stellen sicher, dass die SOP befolgt wird
- Verringert Fehler
- Produziert schneller zuverlässige Ergebnisse
- Wird auf die Applikation angepasst
  - QA/QC
  - Methodenentwicklung
  - Research & Development
- Minimaler Aufwand an Training durch hohe Automatisierung

eWorkflows - Definition

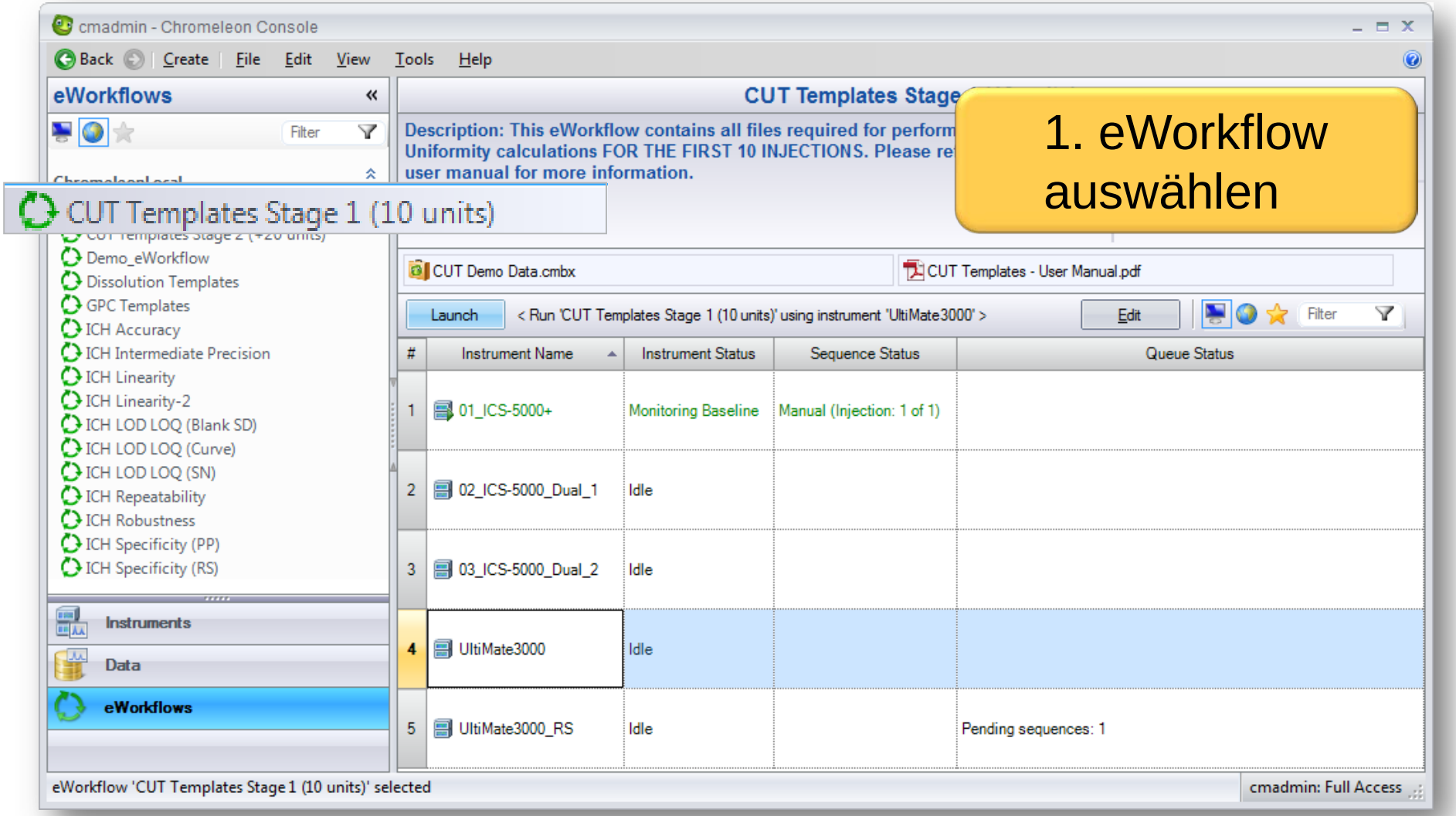
- Definition der eWorkflows
  - Auswahl des Instruments
  - Alle notwendigen Dateien vorhanden
    - Instrumentenmethode, Auswertemethode
    - Reports, Spektrenbibliotheken
    - Zusätzliche Anhänge, wie z.B. PDFs, Excel-Dateien, etc.
  - Sequenzname und Speicherort können vorgegeben werden
  - Custom Variables, Benutzerdefinierte Variablen (Custom Variables)
  - Sequenzlayout festlegen

eWorkflows – Erfolgreiches Starten von Analysen



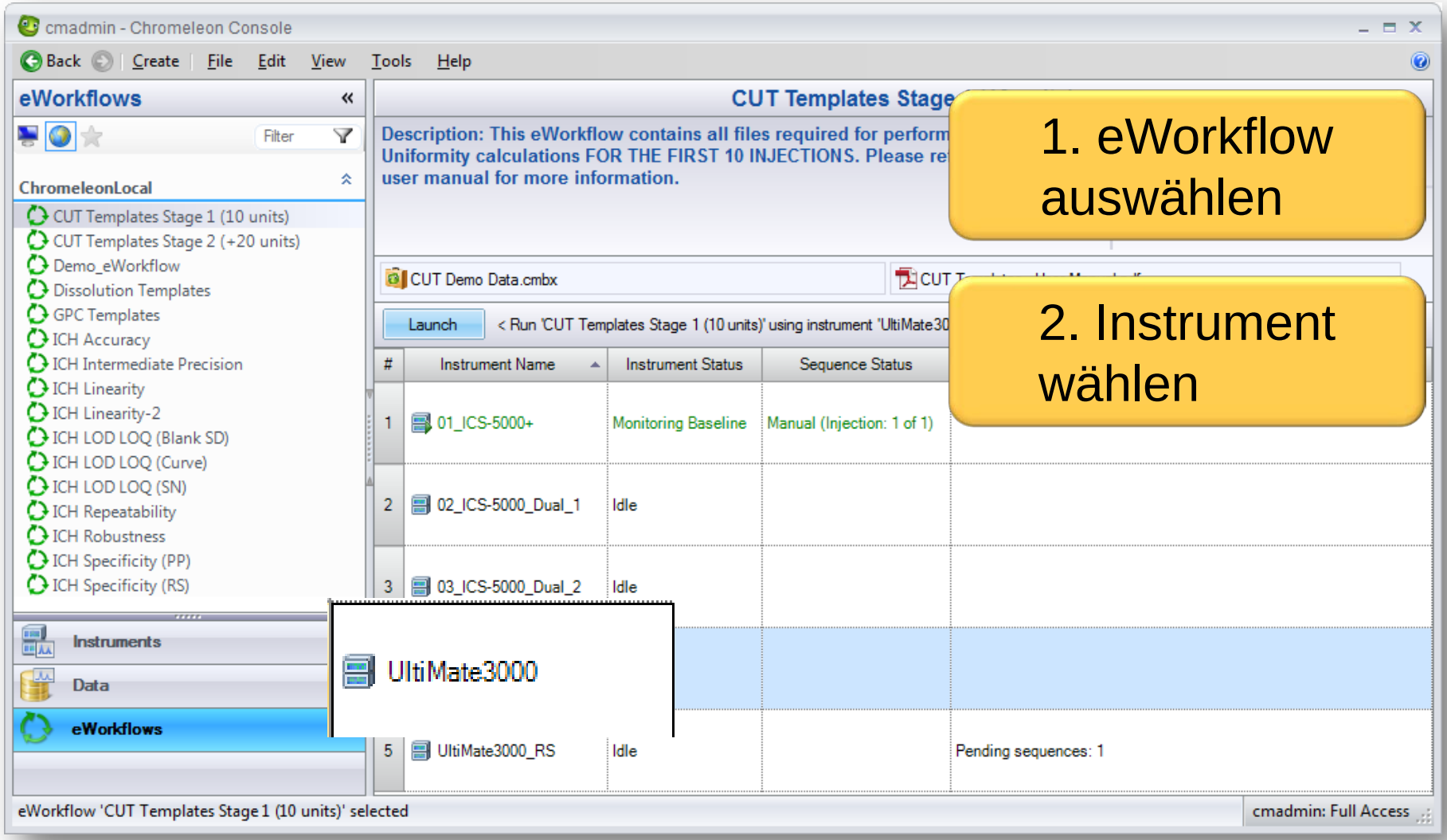
ThermoFisher SCIENTIFIC

eWorkflows – Erfolgreiches Starten von Analysen



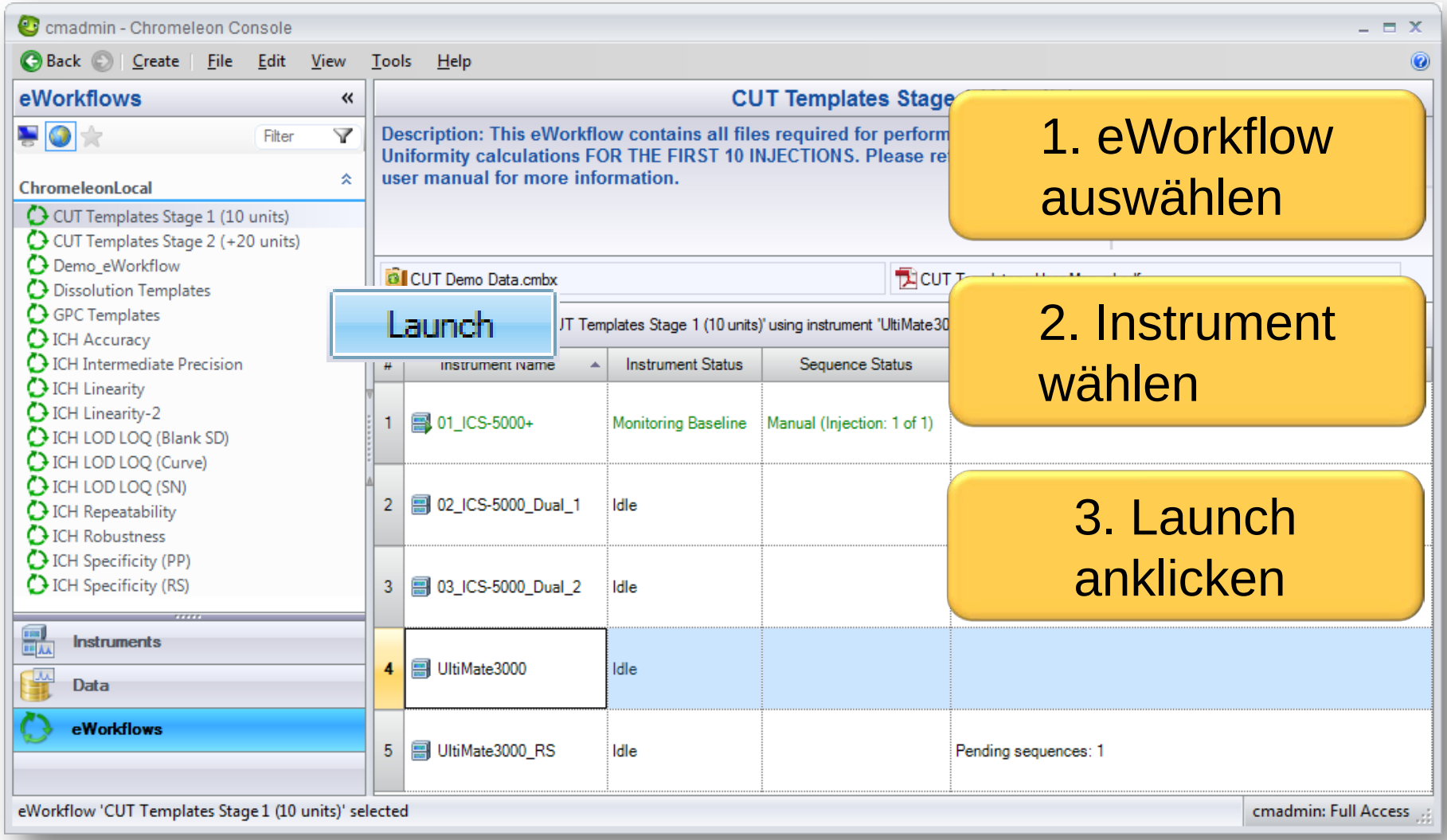
ThermoFisher SCIENTIFIC

eWorkflows – Erfolgreiches Starten von Analysen



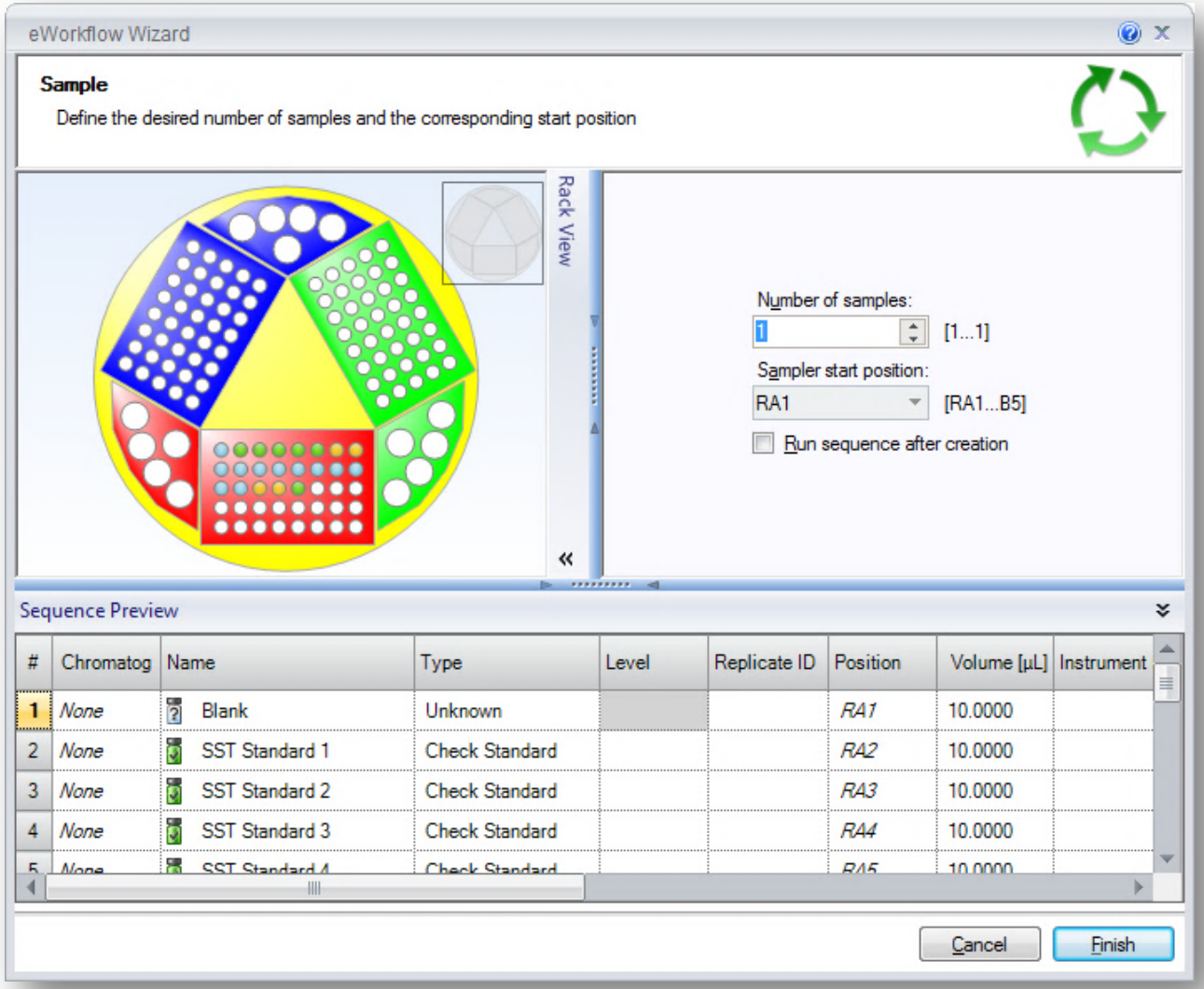
ThermoFisher SCIENTIFIC

eWorkflows – Erfolgreiches Starten von Analysen



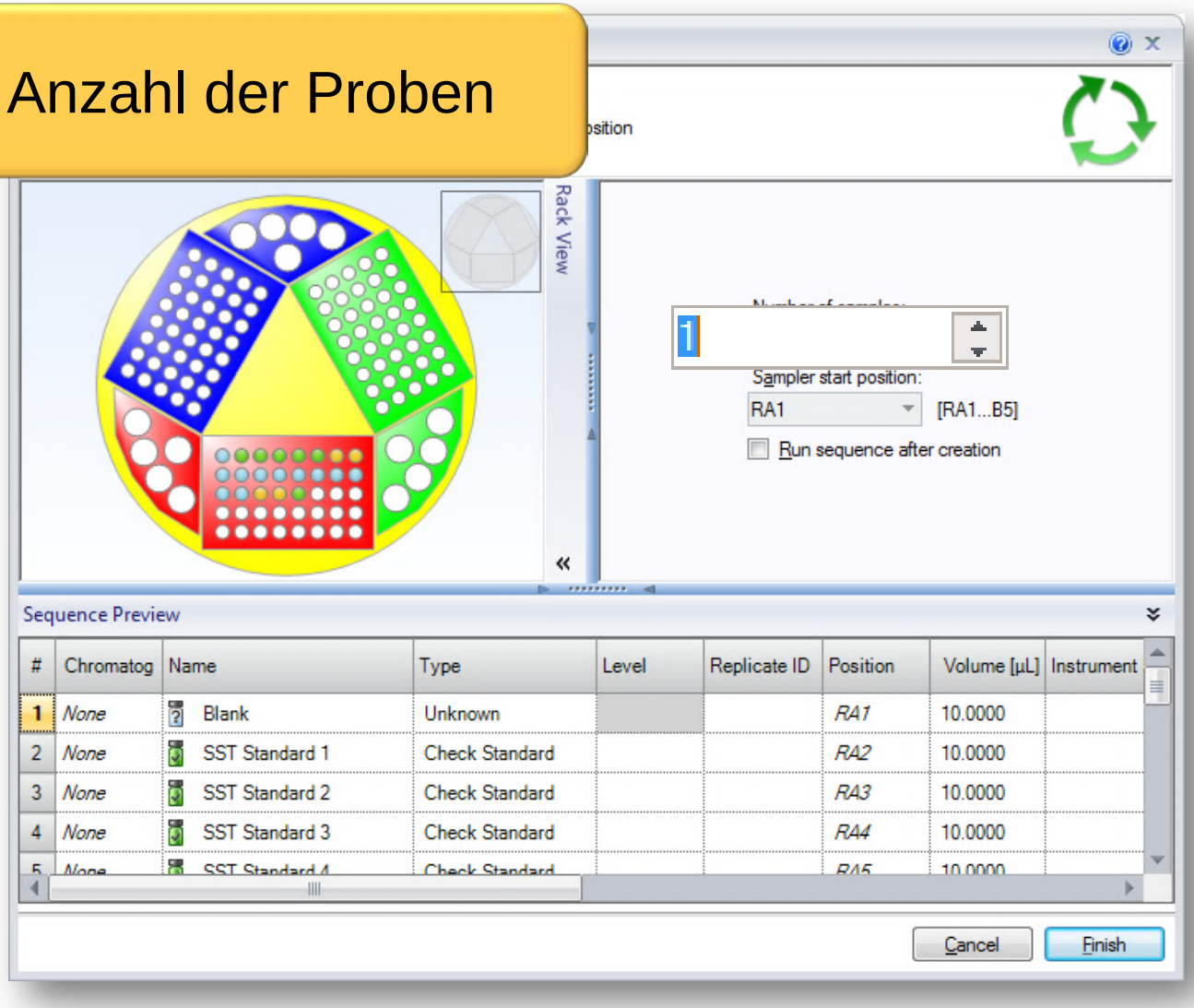
ThermoFisher SCIENTIFIC

eWorkflows – Erfolgreiches Starten von Analysen



ThermoFisher SCIENTIFIC

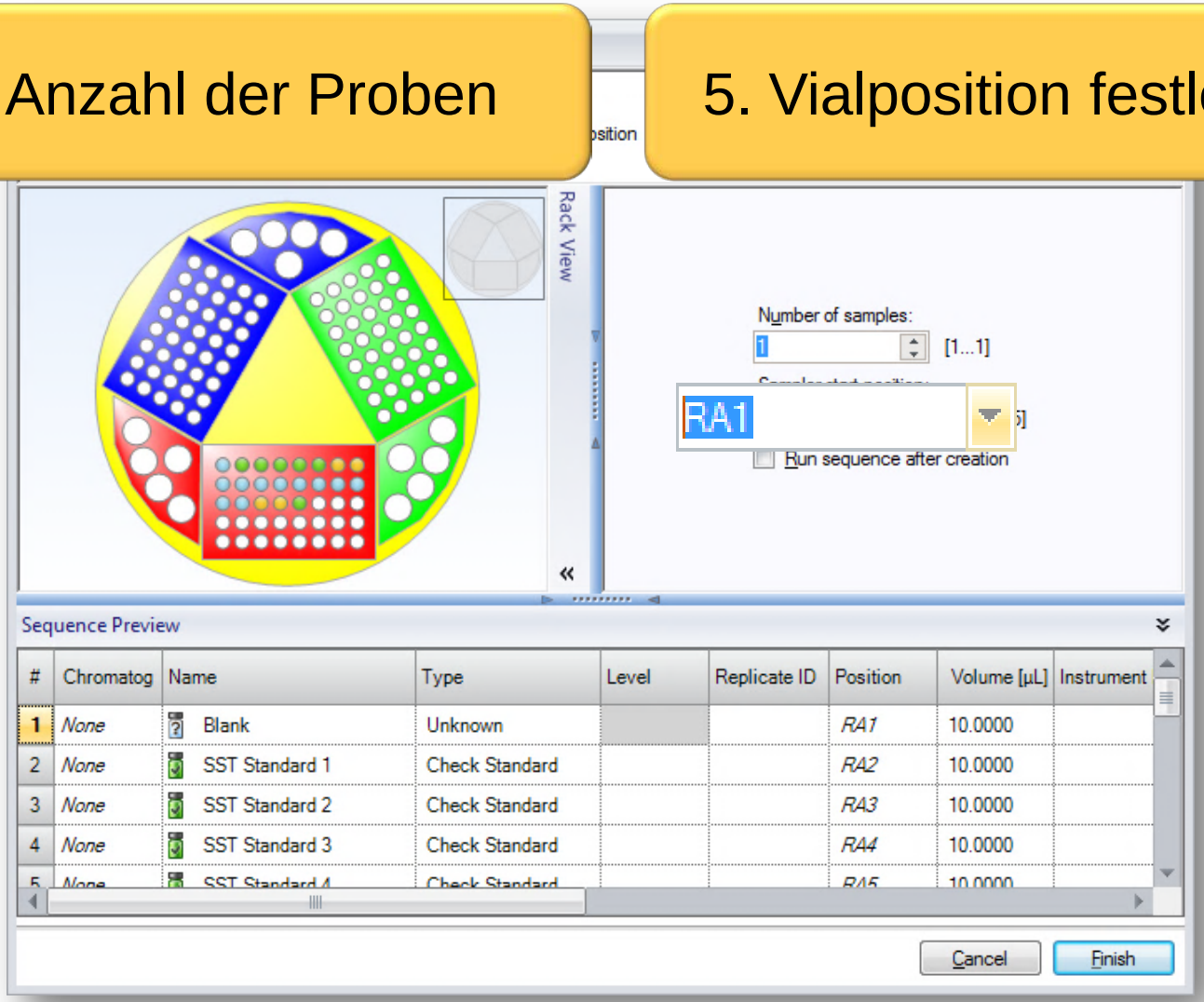
4. Anzahl der Proben



eWorkflows – Erfolgreiches Starten von Analysen

4. Anzahl der Proben

5. Vialposition festlegen

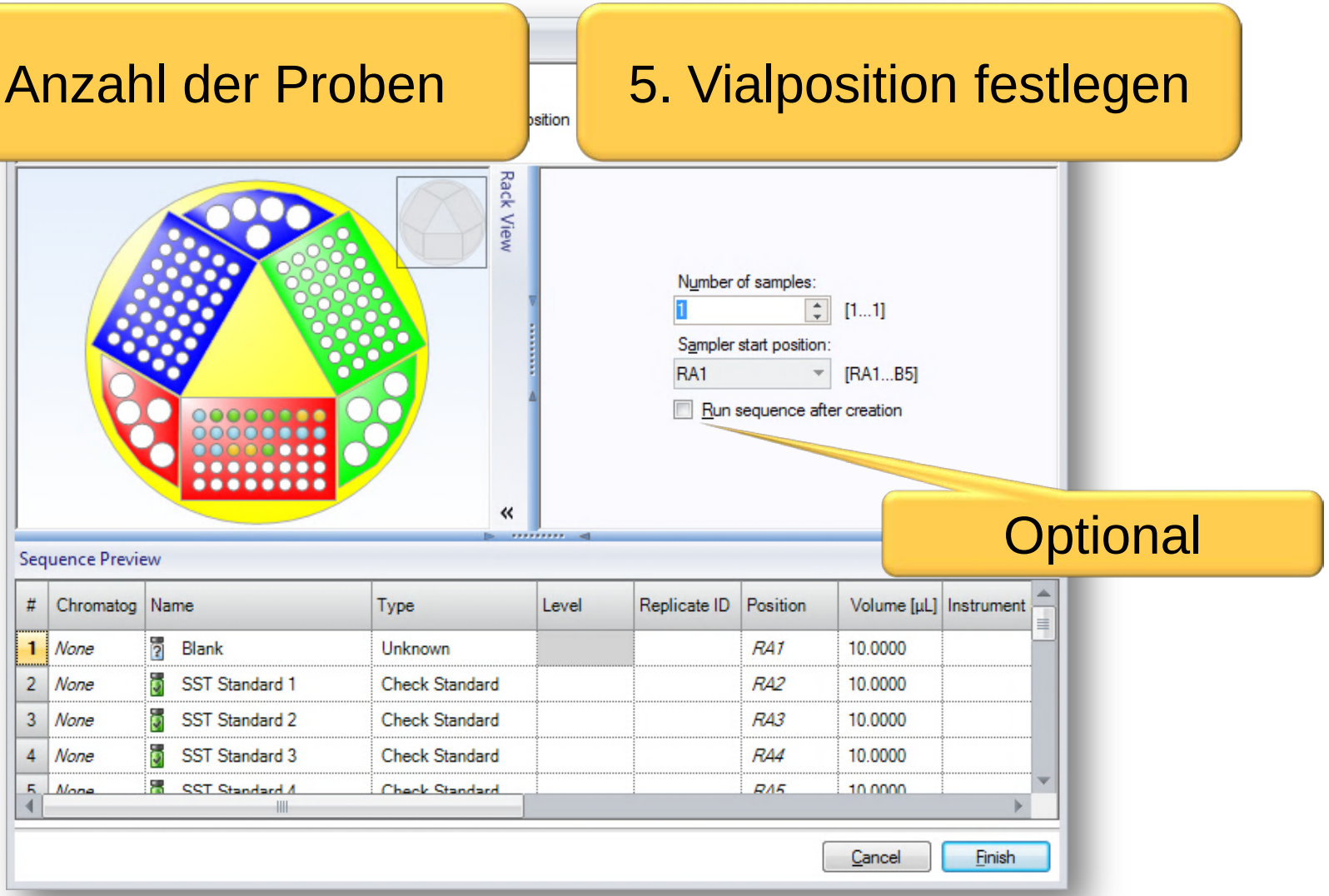


ThermoFisher SCIENTIFIC

eWorkflows – Erfolgreiches Starten von Analysen

4. Anzahl der Proben

5. Vialposition festlegen

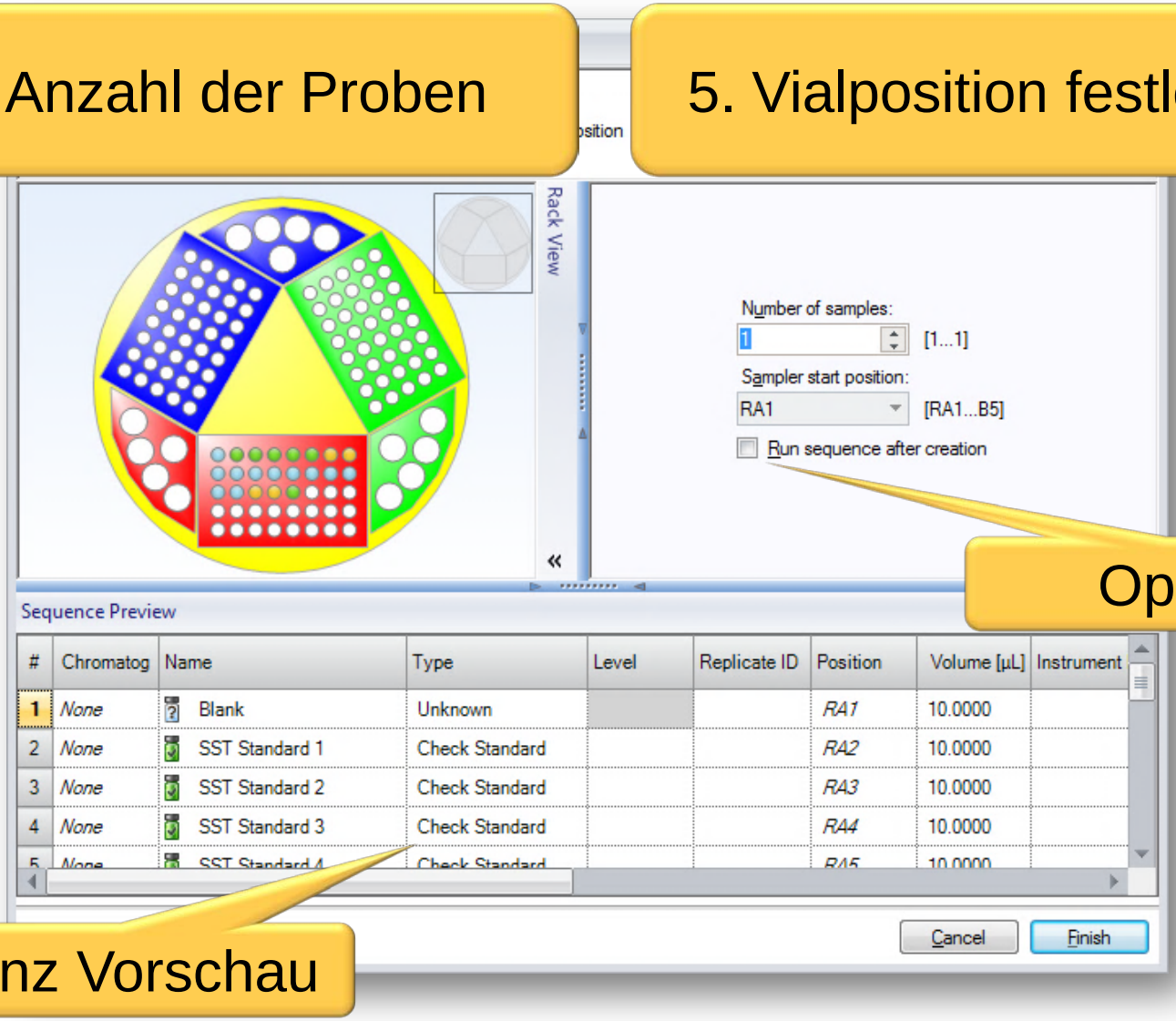


ThermoFisher SCIENTIFIC

eWorkflows – Erfolgreiches Starten von Analysen

4. Anzahl der Proben

5. Vialposition festlegen



Optional

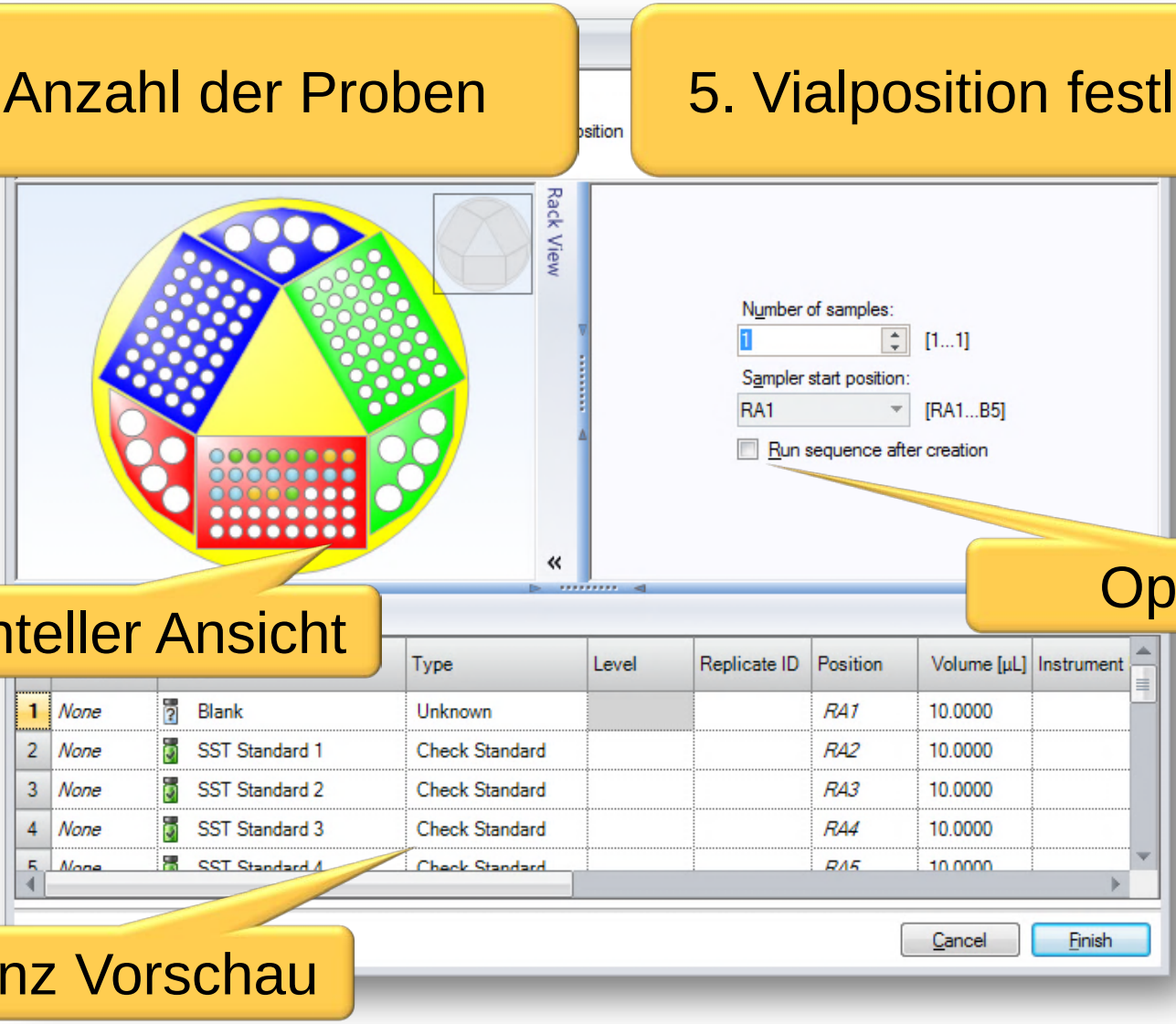
Sequenz Vorschau

ThermoFisher SCIENTIFIC

eWorkflows – Erfolgreiches Starten von Analysen

4. Anzahl der Proben

5. Vialposition festlegen



Probenteller Ansicht

Optional

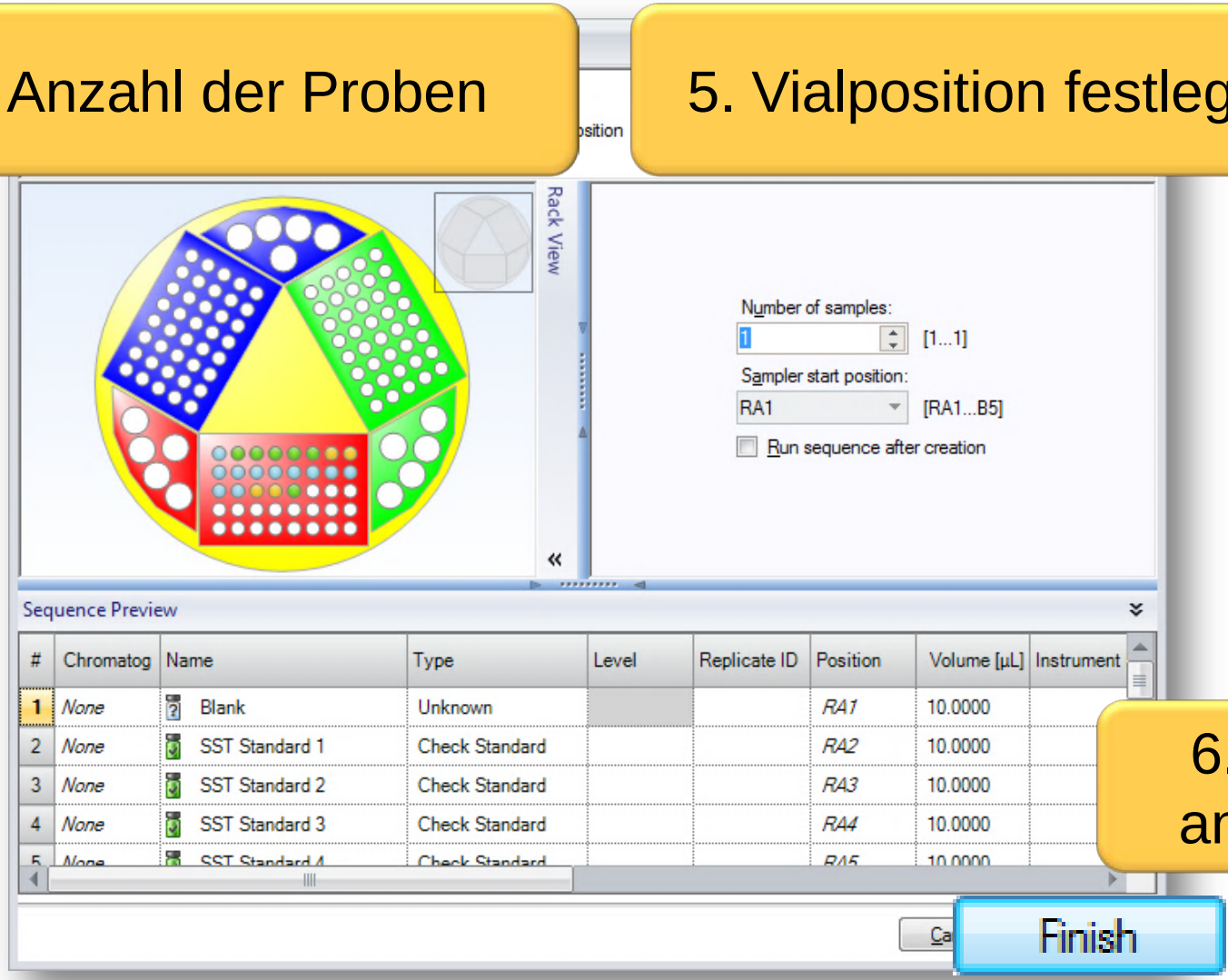
Sequenz Vorschau

ThermoFisher SCIENTIFIC

eWorkflows – Erfolgreiches Starten von Analysen

4. Anzahl der Proben

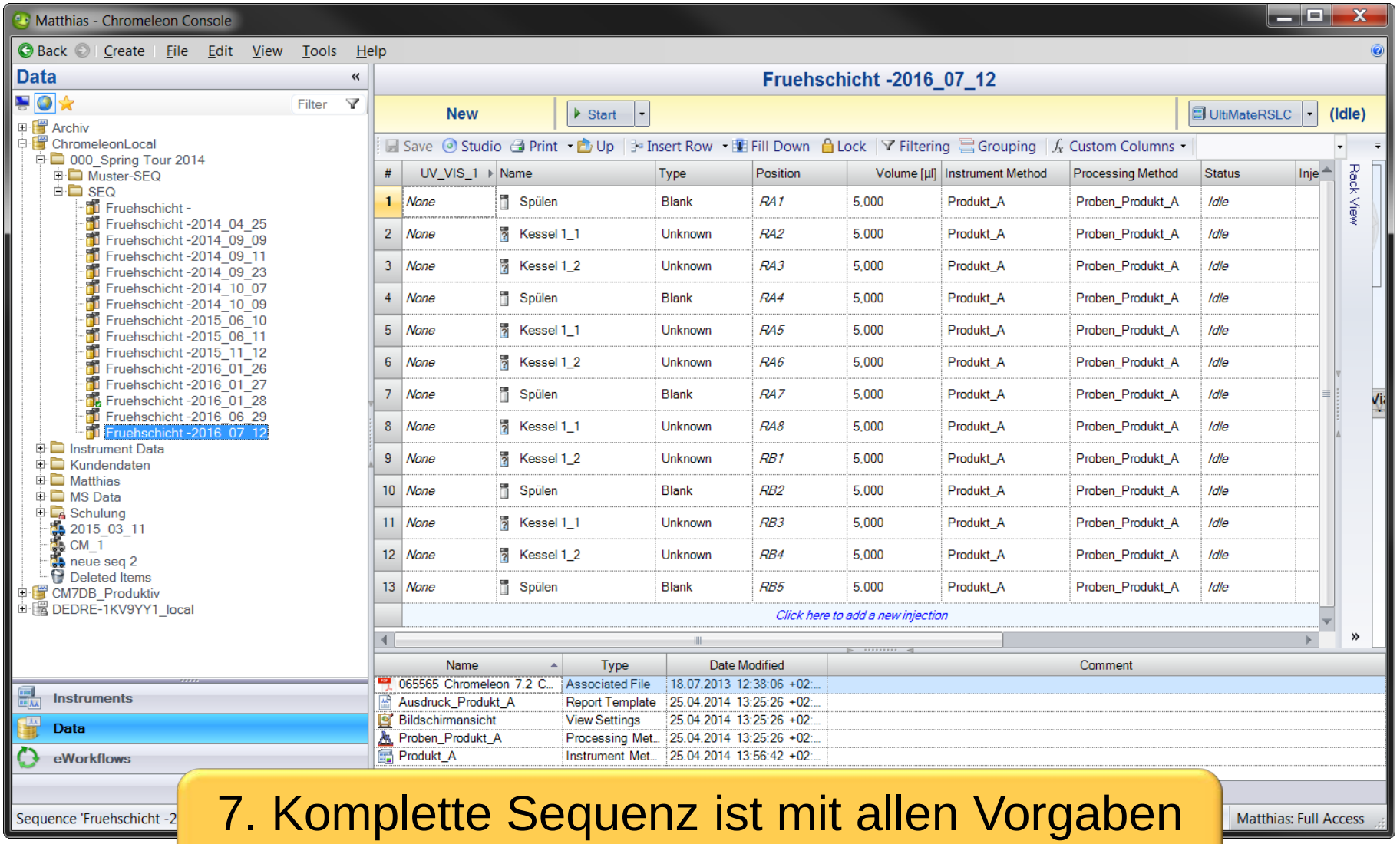
5. Vialposition festlegen



6. Finish anklicken

ThermoFisher SCIENTIFIC

eWorkflows – Erfolgreiches Starten von Analysen



7. Komplette Sequenz ist mit allen Vorgaben für das vorgesehene Instrument erstellt

ThermoFisher SCIENTIFIC

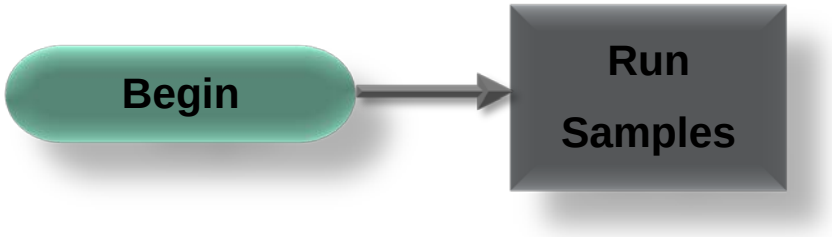
- Innovative Benutzeroberfläche
- Universelle Instrumentensteuerung
- Erfolgreiches Starten von Analysen
- **Datenbearbeitung – schnell und zuverlässig**
- Arbeiten im regulierten Umfeld

Schnelle und einfache Datenbearbeitung

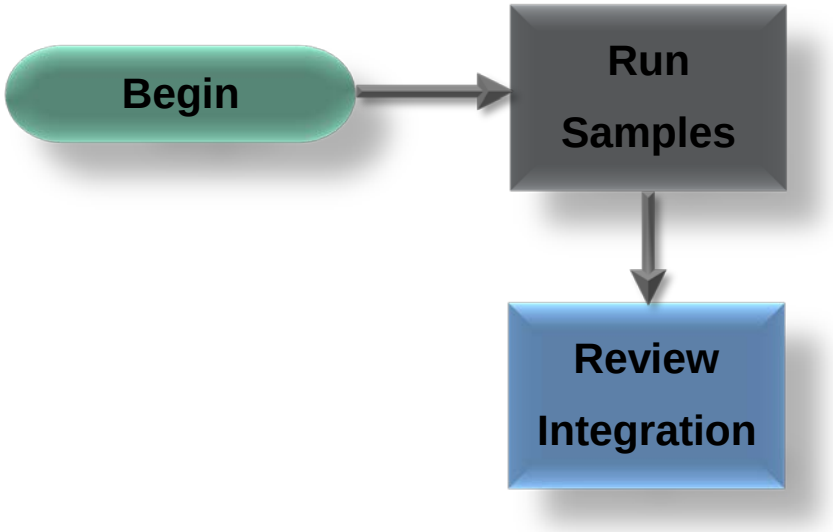
- Das ideale CDS benötigt folgendes:
  - Ein etabliertes Gerät, dass zuverlässige Daten (SST) liefert
  - Aufnahme (korrekter) Daten und zuverlässige Integration
  - Etabliertes Kalibierverfahren
  - Berechnung von Proben und Überprüfung von Qualitätskontrollen mit dem Kalibriermodell
  - Kalkulation von Ergebnissen und Reporterstellung mit Abgleich gegen vorgegebene Spezifikationen

- Nicht alle CDS Systeme können das – oder?
- Und – manche sind deutlich intuitiver als andere!

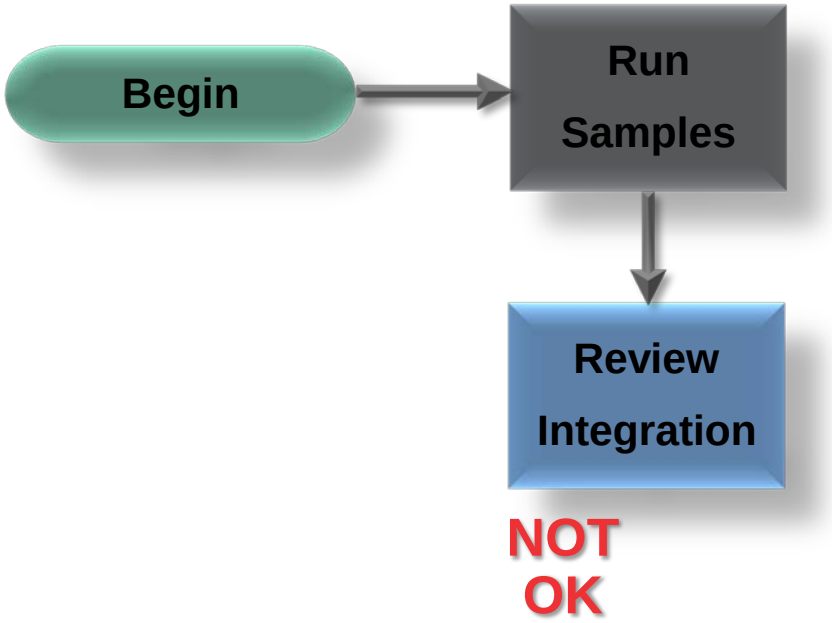
Chromeleon CDS Data Processing



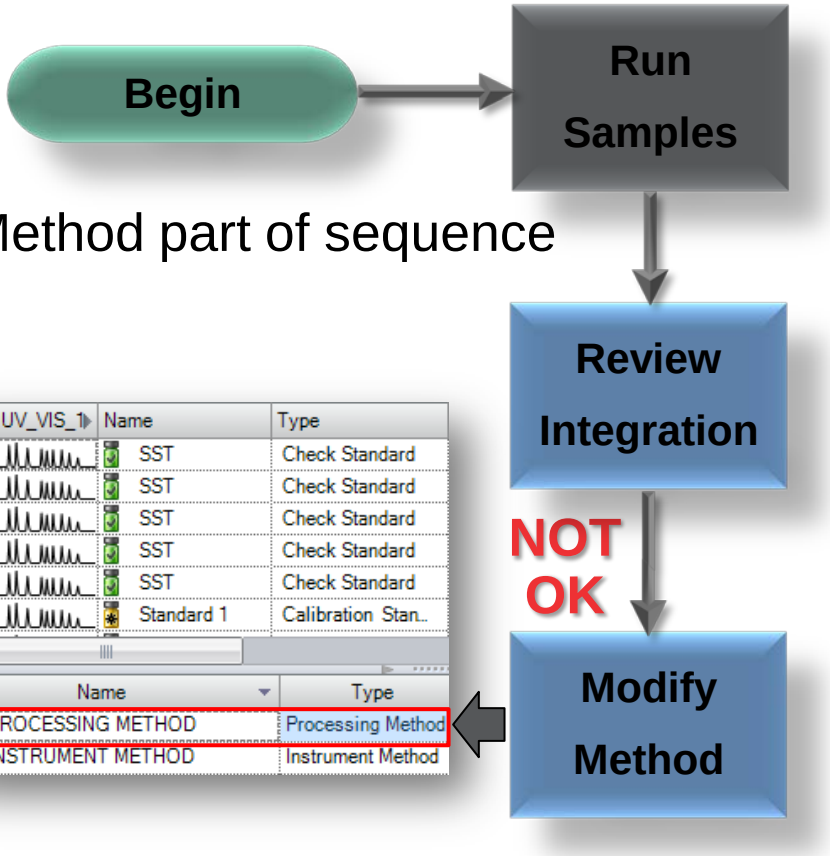
Chromeleon CDS Data Processing



Chromeleon CDS Data Processing

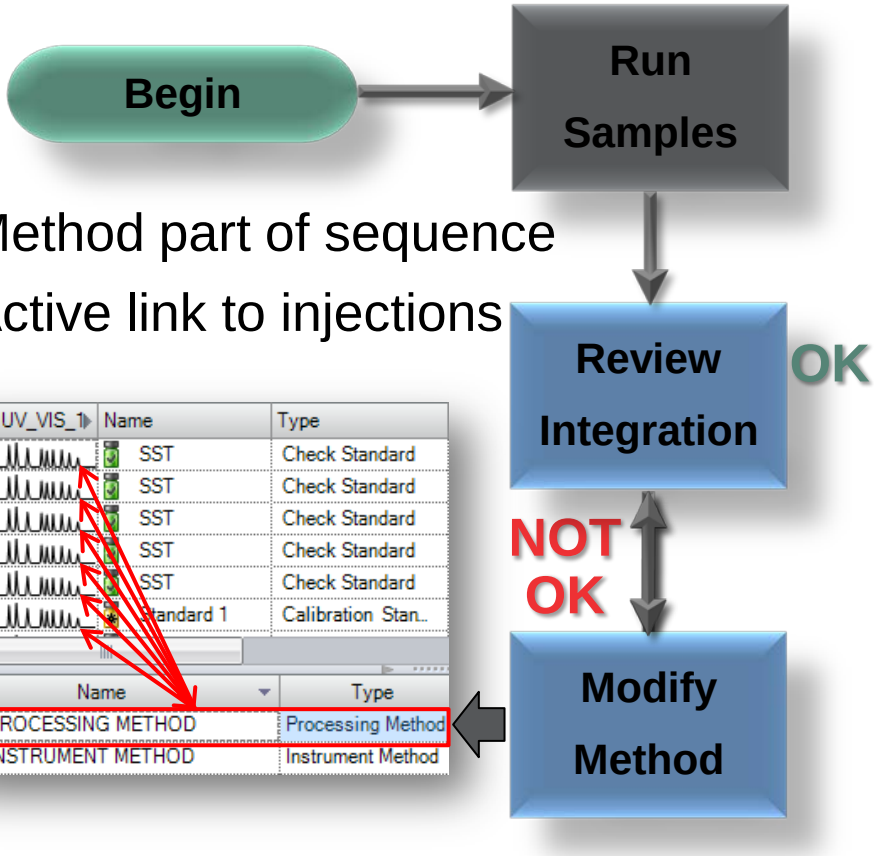


Chromeleon CDS Data Processing



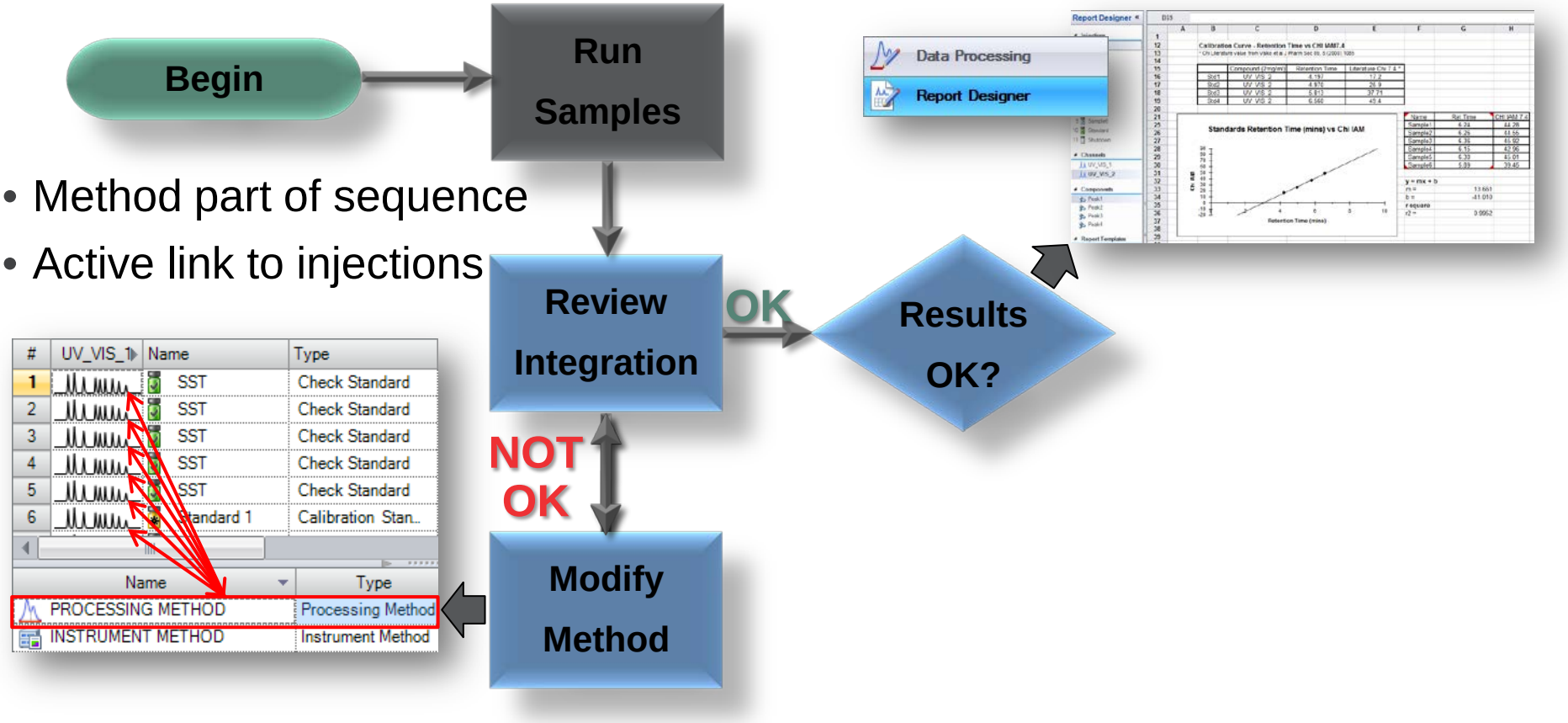
- Method part of sequence

Chromeleon CDS Data Processing



- Method part of sequence
- Active link to injections

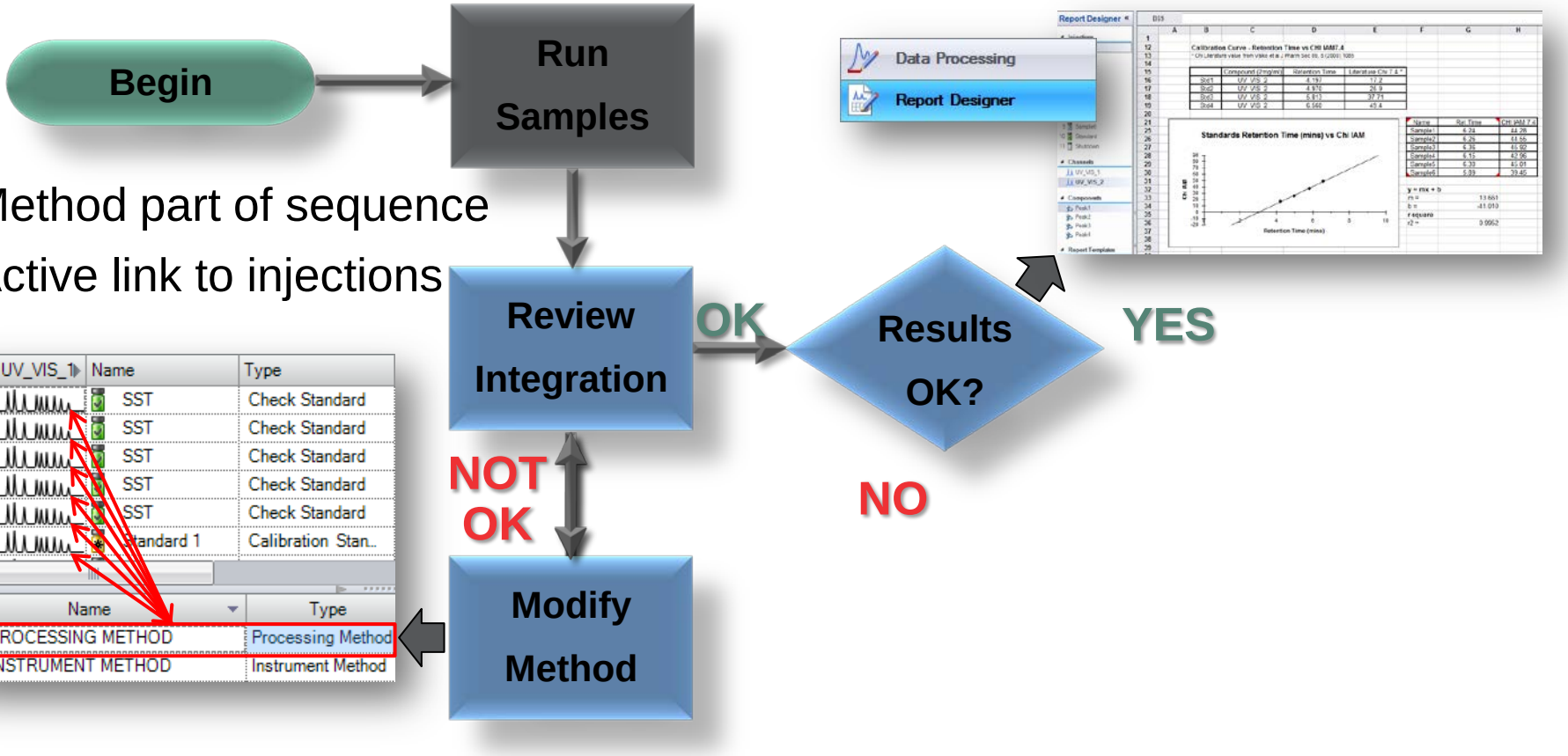
Chromeleon CDS Data Processing



- Method part of sequence
- Active link to injections

ThermoFisher SCIENTIFIC

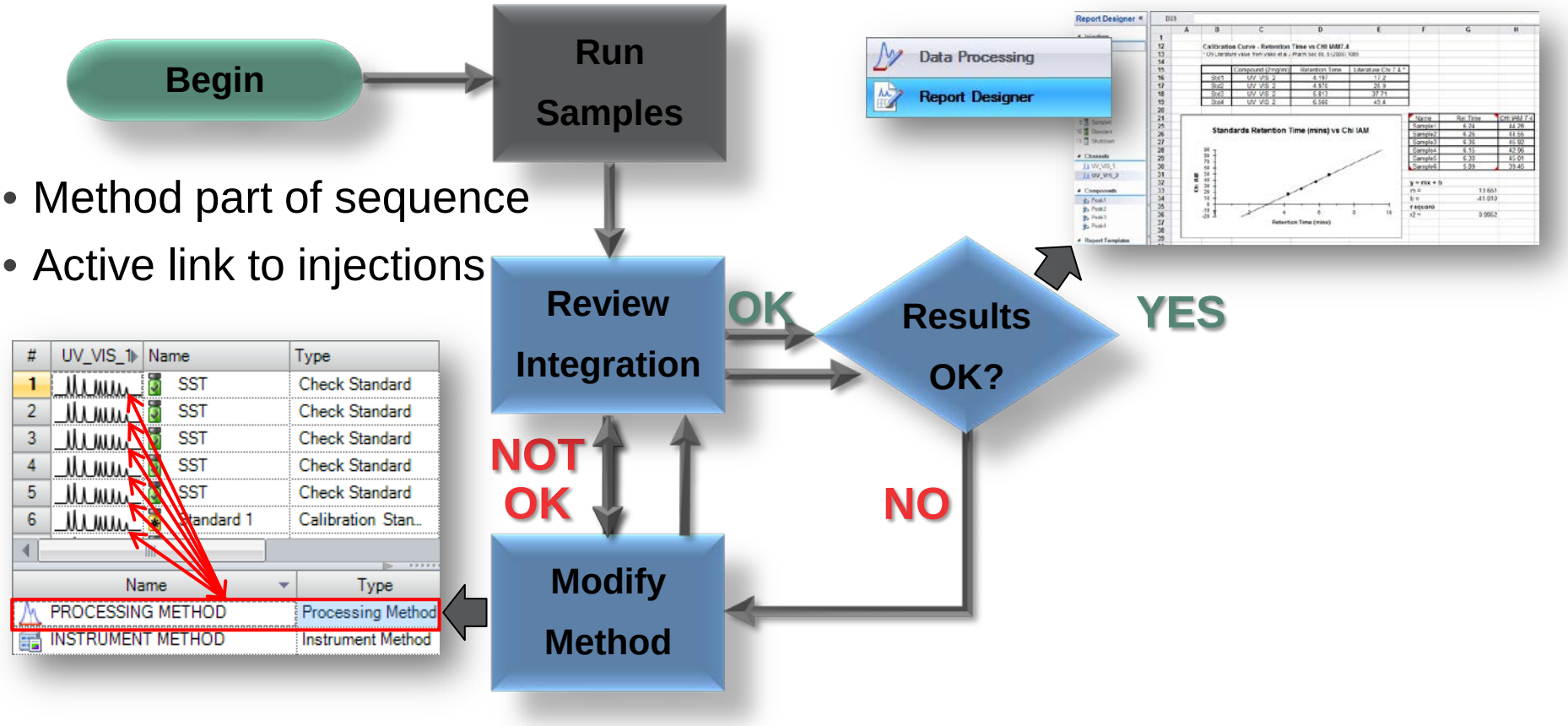
Chromeleon CDS Data Processing



- Method part of sequence
- Active link to injections

ThermoFisher SCIENTIFIC

Chromeleon CDS Data Processing

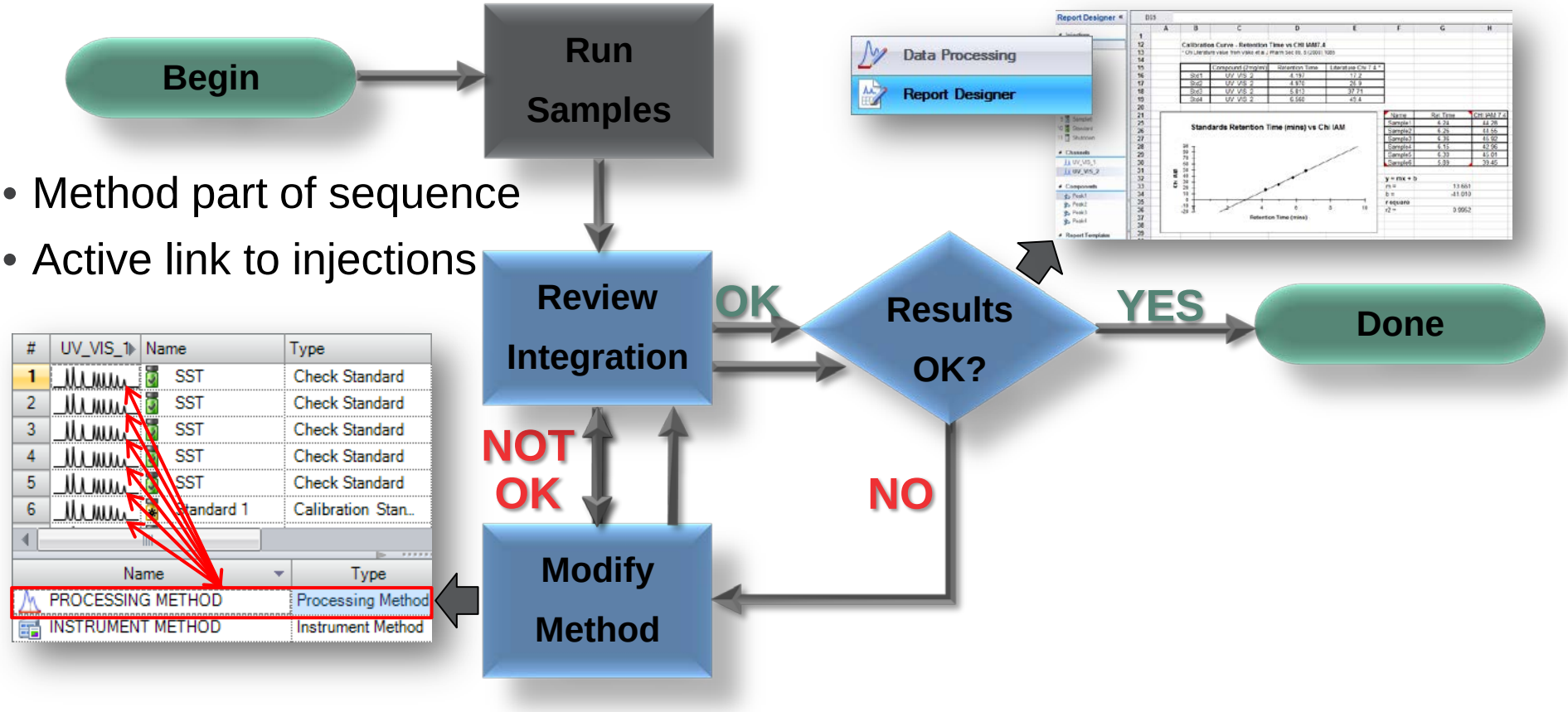


- Method part of sequence
- Active link to injections

ThermoFisher SCIENTIFIC

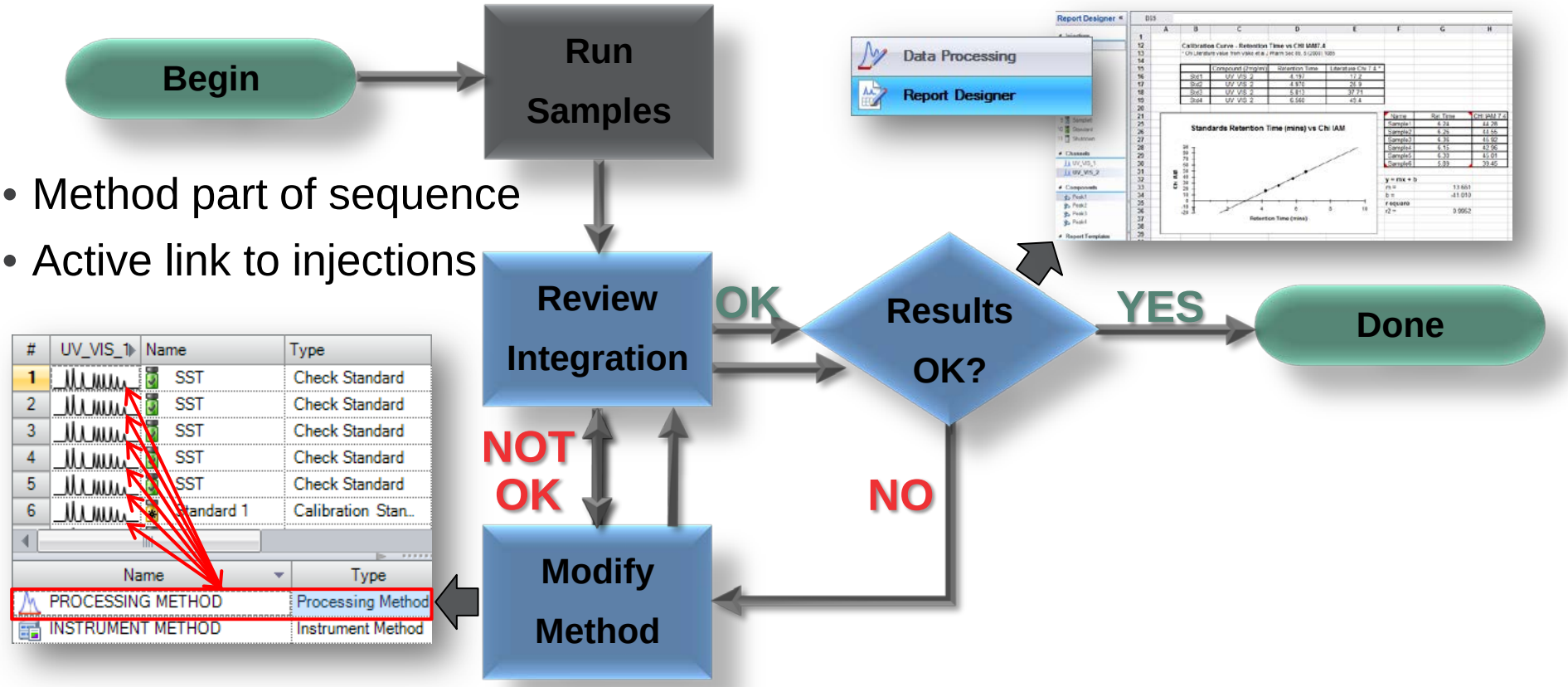
Chromeleon CDS Data Processing

- Method part of sequence
- Active link to injections



ThermoFisher SCIENTIFIC

Chromeleon CDS Data Processing



- Method part of sequence
- Active link to injections

Operational Efficiency

- Methode dynamisch mit der Injektion verknüpft = sofortige Aktualisierung
- Kein Datenexport notwendig
- Alle Reports und Berechnungen werden im validierten Umfeld erstellt
- Bessere Produktivität – bis zu 98% Zeitersparnis

- Innovative Benutzeroberfläche
- Universelle Instrumentensteuerung
- Erfolgreiches Starten von Analysen
- Datenbearbeitung – schnell und zuverlässig
- **Arbeiten im regulierten Umfeld**

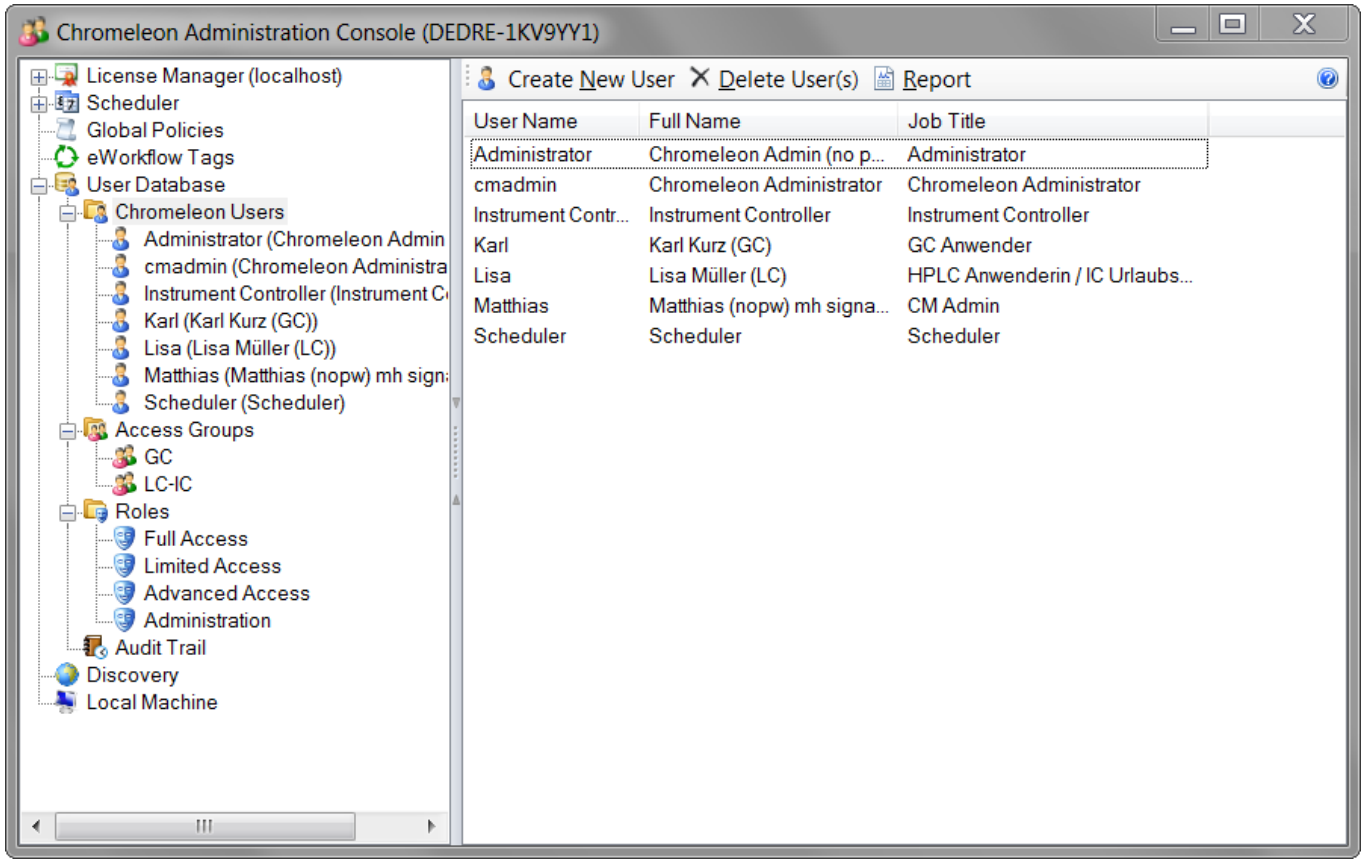
Arbeiten im regulierten Umfeld

- Hauptsächlich vorgegeben durch FDA 21 CFR Part 11, August 20, 1997
- Certificate of Software Validation / IQ / OQ / PQ für verwendete Systeme und Methoden
- Digitale Signaturen – eindeutige Definition von Rohdaten und deren Metadaten
- Audit Trail (Instrument und Datenaufnahme / Bearbeitung) – typischerweise mit Zeitstempel und computergeneriert, erfasst alle Änderungen am Objekt und ordnet diese eindeutig einem Anwender zu
- Möglichkeit der elektronischen Unterschrift mit dem Verweis, ob die Ergebnisse überprüft und/oder freigegeben wurden
- Kontrollierter Zugang nur für berechtigte Personen – Zugangsmodell und Sicherheitssystem über klar definierte Privilegien
- IQ / OQ / PQ Prozesse und deren Dokumentation
- Datenintegrität, Archivierung und einfache Wiederherstellbarkeit

BENUTZER VERWALTUNG

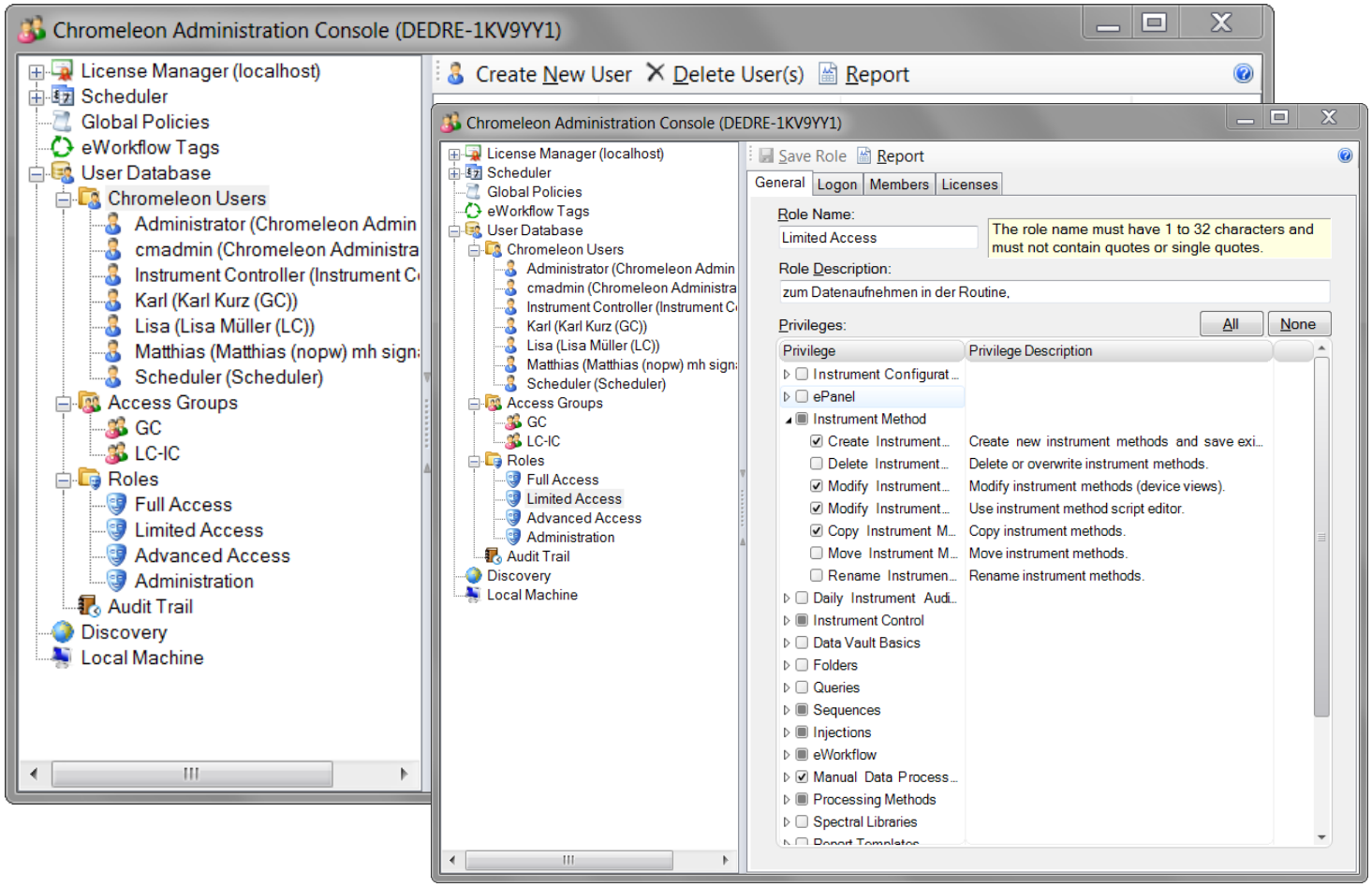
Zugangskontrolle – Benutzer Verwaltung

- Erstellen von Users, Roles und Access Groups



Zugangskontrolle – Benutzer Verwaltung

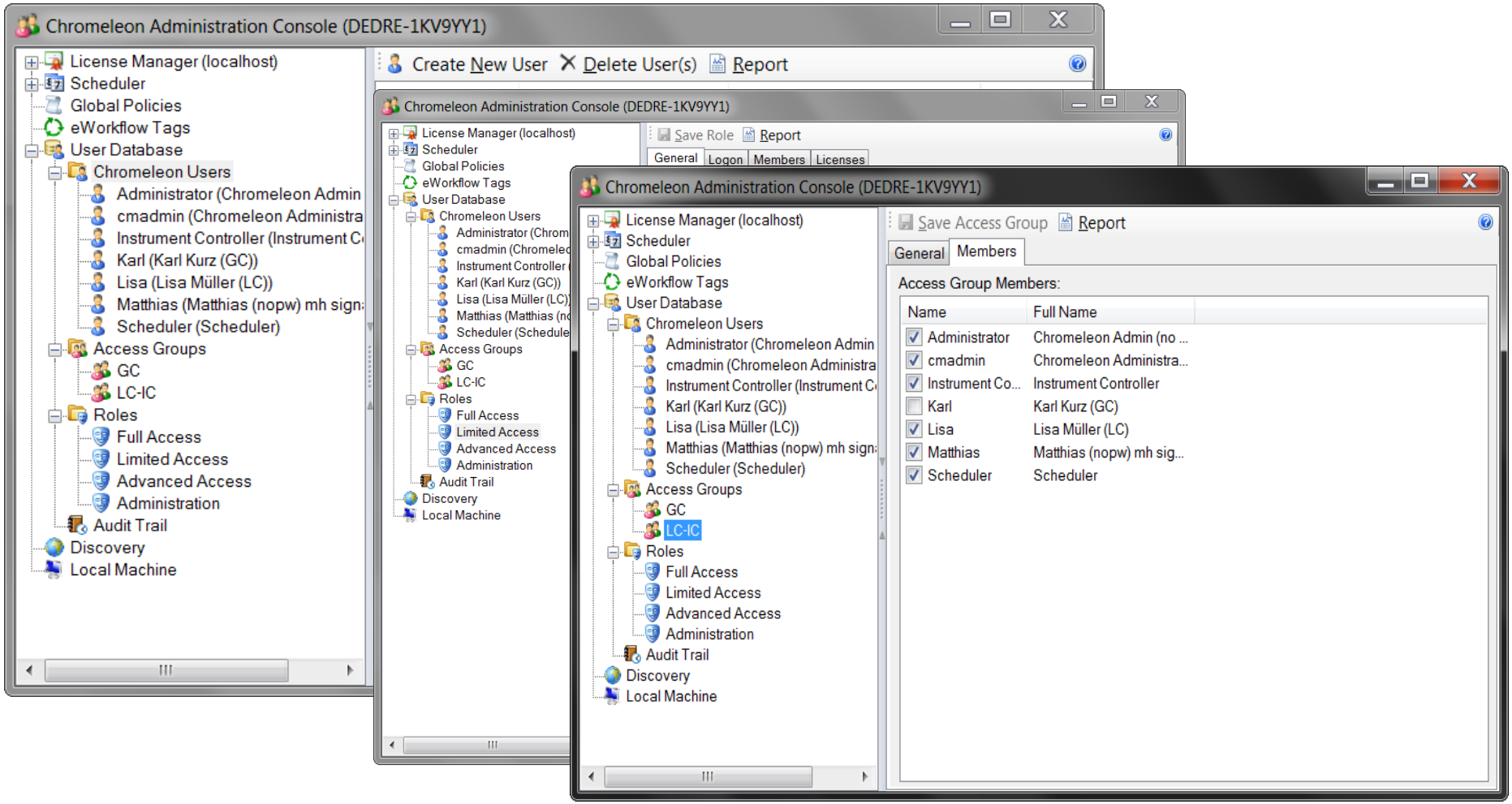
- Erstellen von Users, Roles and Access Groups



ThermoFisher SCIENTIFIC

Zugangskontrolle – Benutzer Verwaltung

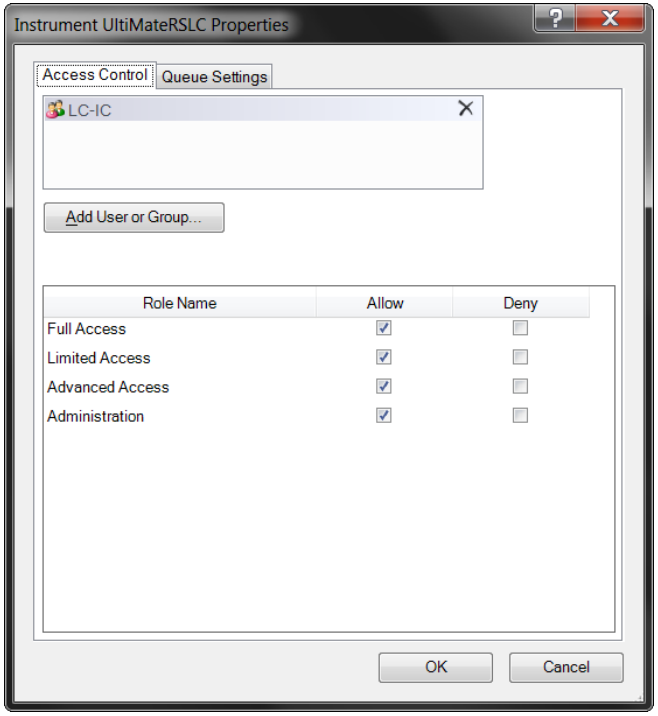
- Erstellen von Users, Roles and Access Groups

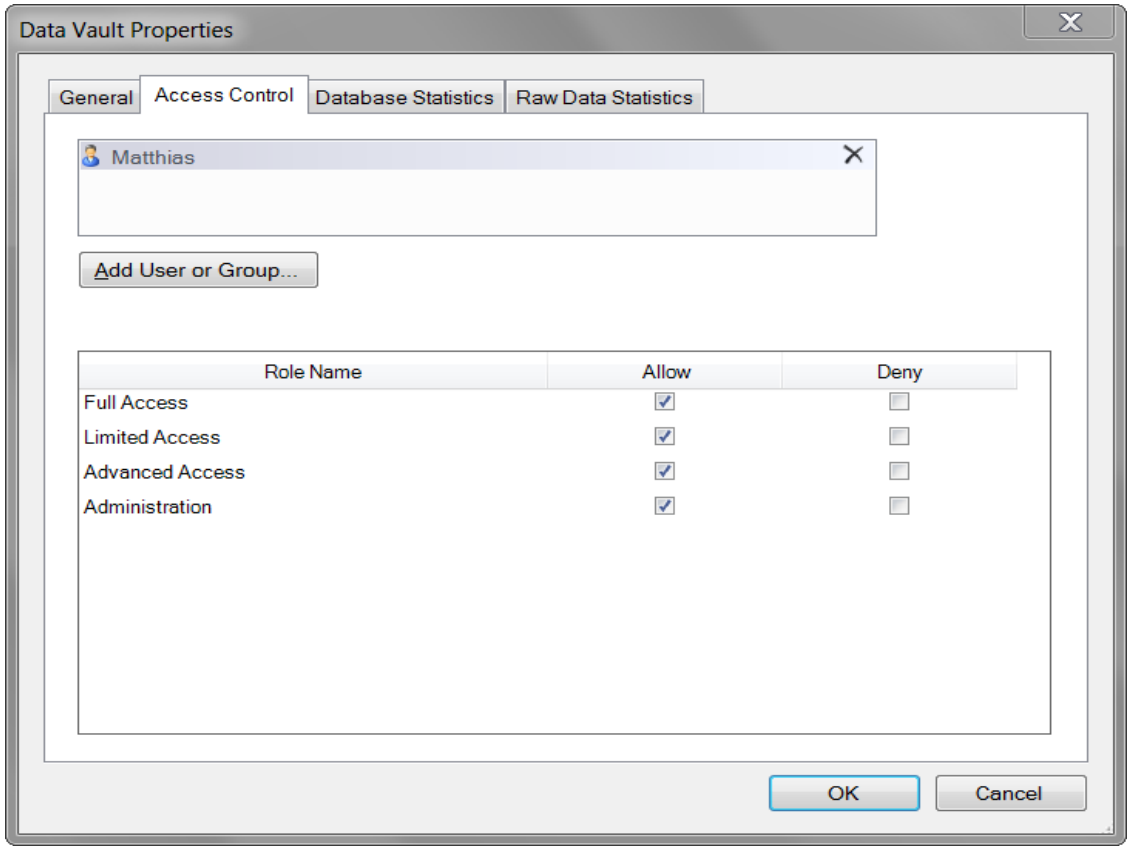


ThermoFisher SCIENTIFIC

Chromeleon 7.2 SR4 – Benutzerverwaltung – Access Group

- Zuweisen von Access Gruppen auf Objekte über deren Eigenschaften
- Instruments
- Data Vaults & Folder

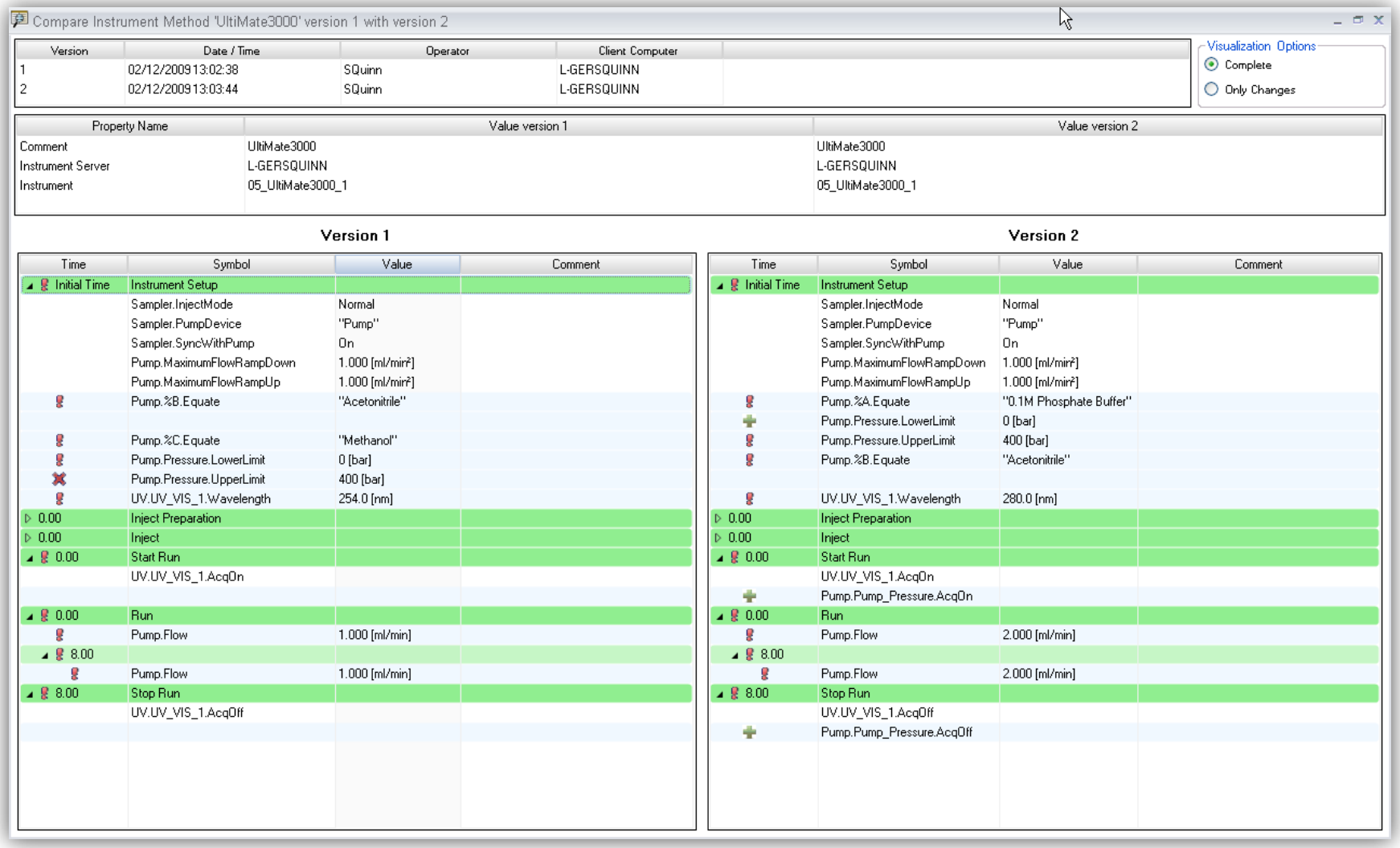




ThermoFisher SCIENTIFIC

AUDIT TRAIL - VERSIONIERUNG

Object Audit Trails – Version Comparison



Version	Date / Time	Operator	Client Computer
1	02/12/2009 13:02:38	SQuinn	L-GERSQUINN
2	02/12/2009 13:03:44	SQuinn	L-GERSQUINN

Property Name	Value version 1	Value version 2
Comment	UltiMate3000	UltiMate3000
Instrument Server	L-GERSQUINN	L-GERSQUINN
Instrument	05_UltiMate3000_1	05_UltiMate3000_1

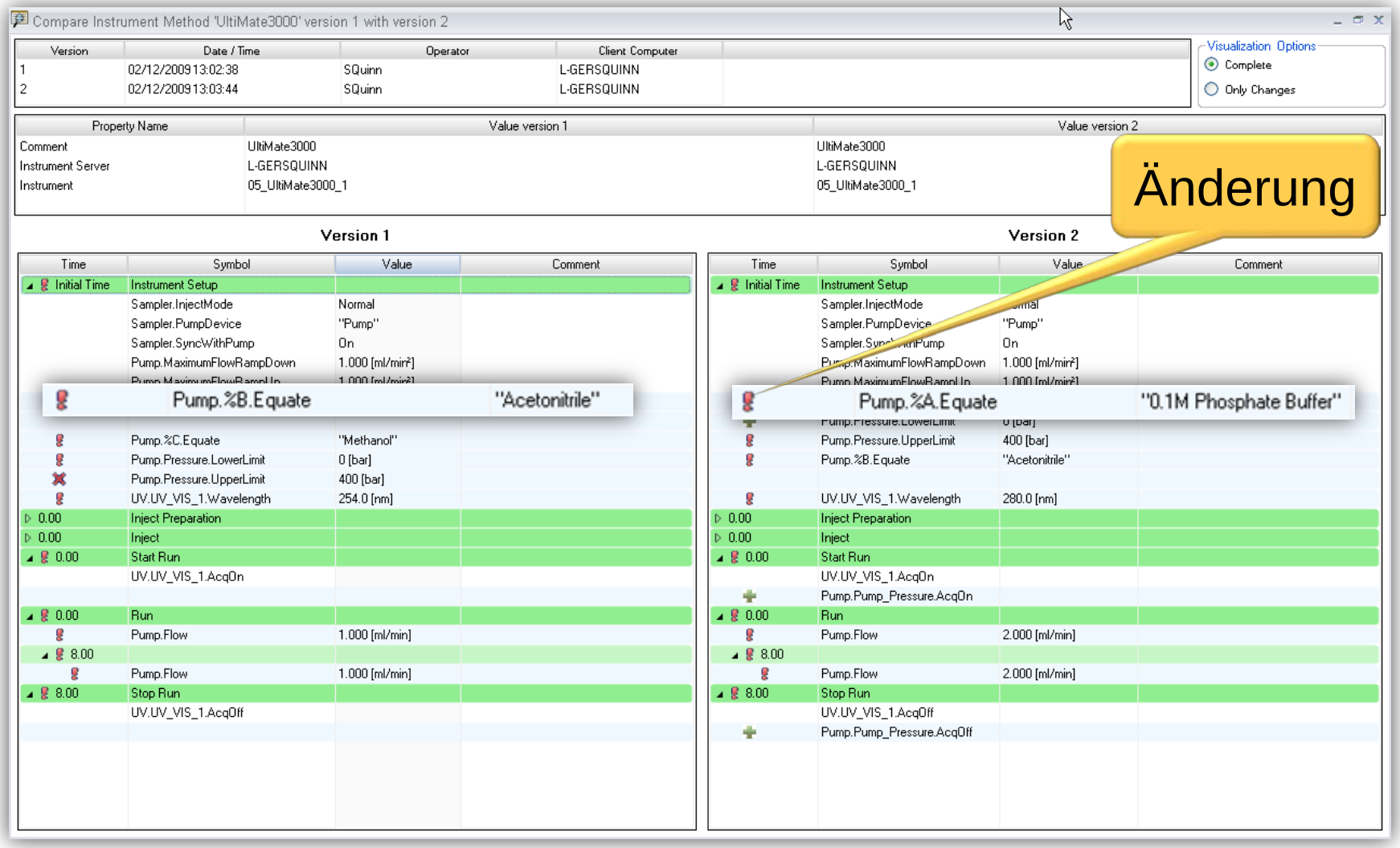
Version 1

Time	Symbol	Value	Comment
Initial Time	Instrument Setup		
	Sampler.InjectMode	Normal	
	Sampler.PumpDevice	"Pump"	
	Sampler.SyncWithPump	On	
	Pump.MaximumFlowRampDown	1.000 [ml/min²]	
	Pump.MaximumFlowRampUp	1.000 [ml/min²]	
	Pump.%B.Equate	"Acetonitrile"	
	Pump.%C.Equate	"Methanol"	
	Pump.Pressure.LowerLimit	0 [bar]	
	Pump.Pressure.UpperLimit	400 [bar]	
	UV.UV_VIS_1.Wavelength	254.0 [nm]	
0.00	Inject Preparation		
0.00	Inject		
0.00	Start Run		
	UV.UV_VIS_1.AcqOn		
0.00	Run		
	Pump.Flow	1.000 [ml/min]	
8.00			
	Pump.Flow	1.000 [ml/min]	
8.00	Stop Run		
	UV.UV_VIS_1.AcqOff		

Version 2

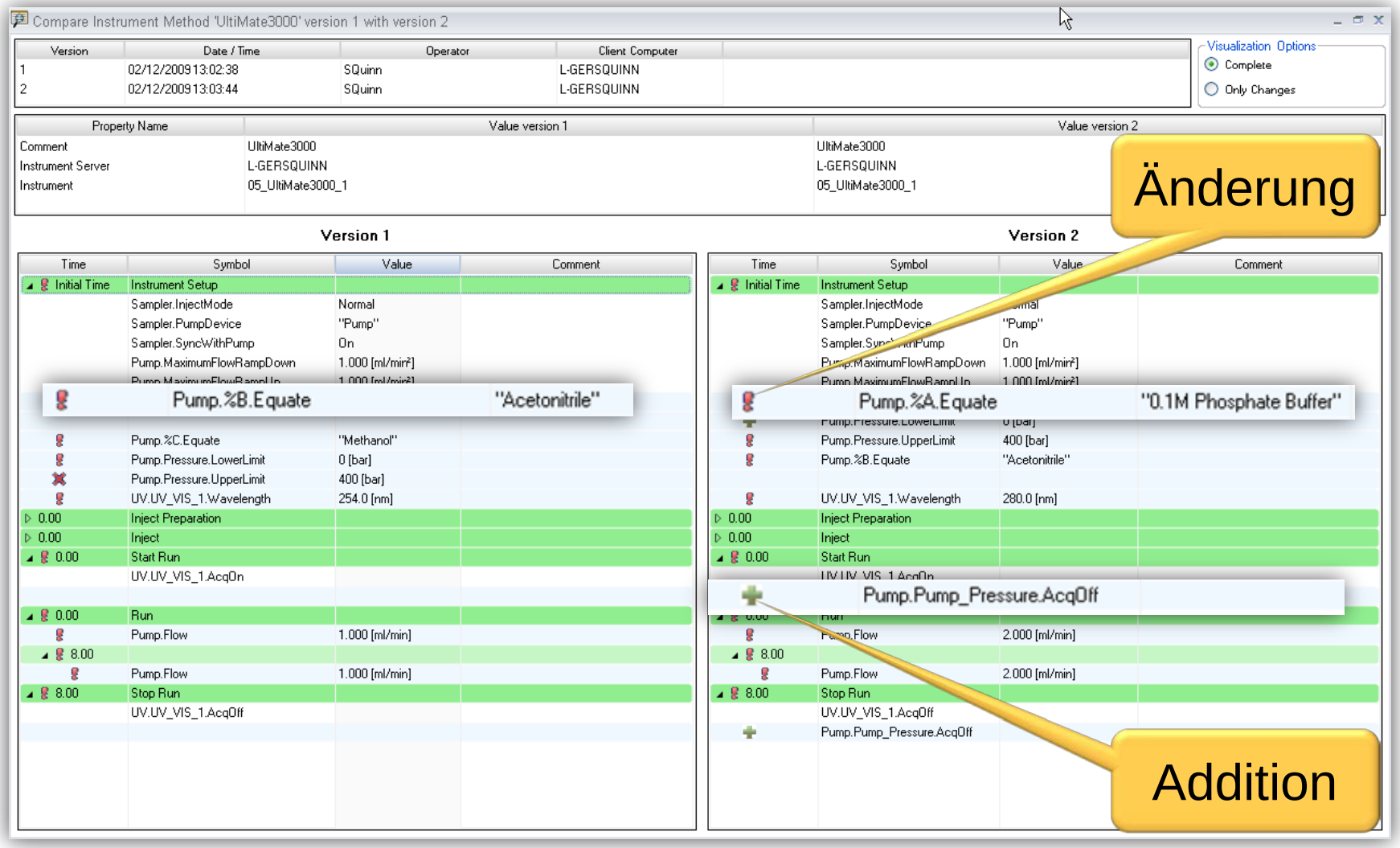
Time	Symbol	Value	Comment
Initial Time	Instrument Setup		
	Sampler.InjectMode	Normal	
	Sampler.PumpDevice	"Pump"	
	Sampler.SyncWithPump	On	
	Pump.MaximumFlowRampDown	1.000 [ml/min²]	
	Pump.MaximumFlowRampUp	1.000 [ml/min²]	
	Pump.%A.Equate	"0.1M Phosphate Buffer"	
	Pump.Pressure.LowerLimit	0 [bar]	
	Pump.Pressure.UpperLimit	400 [bar]	
	Pump.%B.Equate	"Acetonitrile"	
	UV.UV_VIS_1.Wavelength	280.0 [nm]	
0.00	Inject Preparation		
0.00	Inject		
0.00	Start Run		
	UV.UV_VIS_1.AcqOn		
	Pump.Pump_Pressure.AcqOn		
0.00	Run		
	Pump.Flow	2.000 [ml/min]	
8.00			
	Pump.Flow	2.000 [ml/min]	
8.00	Stop Run		
	UV.UV_VIS_1.AcqOff		
	Pump.Pump_Pressure.AcqOff		

Object Audit Trails – Version Comparison



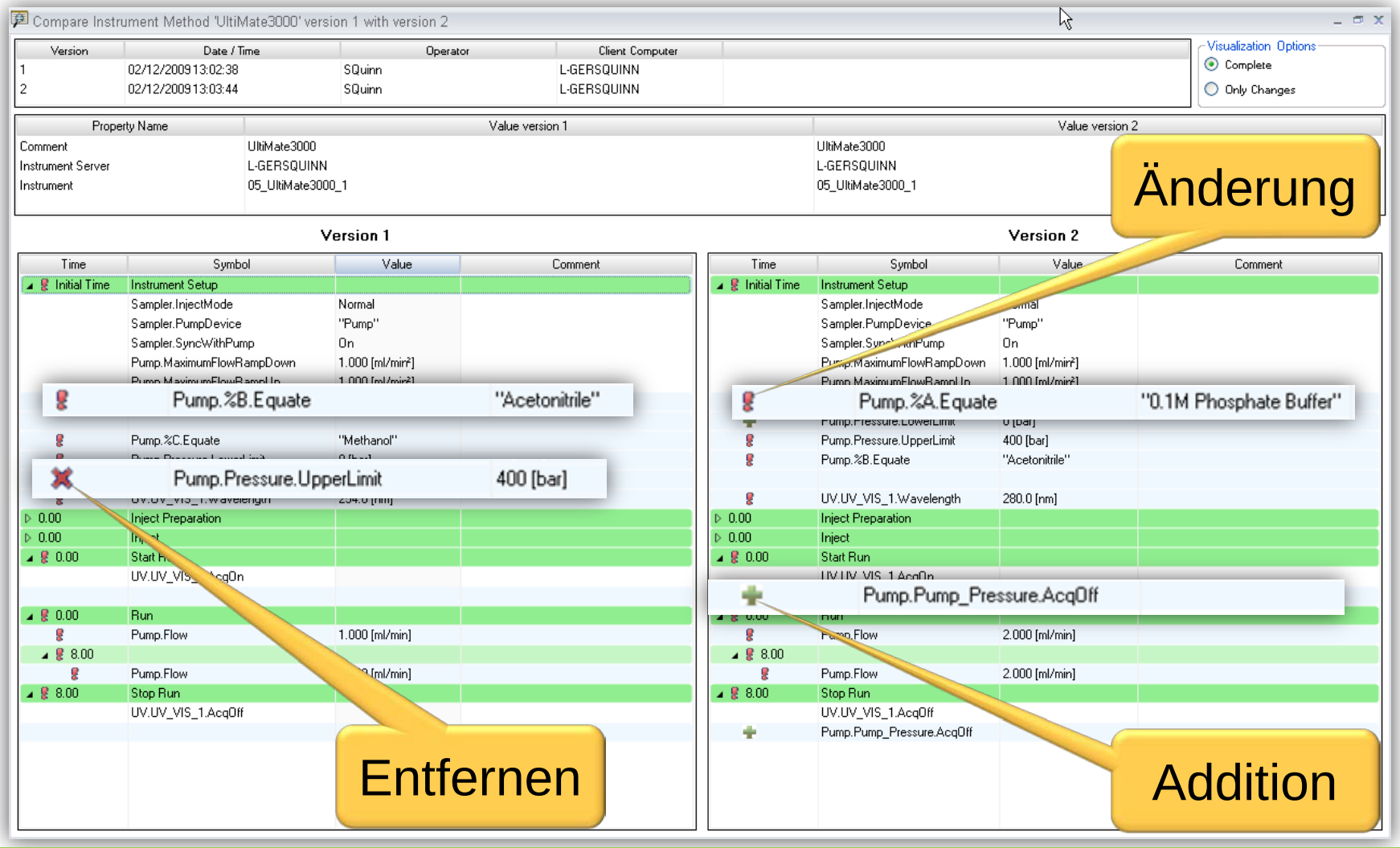
ThermoFisher SCIENTIFIC

Object Audit Trails – Version Comparison



ThermoFisher SCIENTIFIC

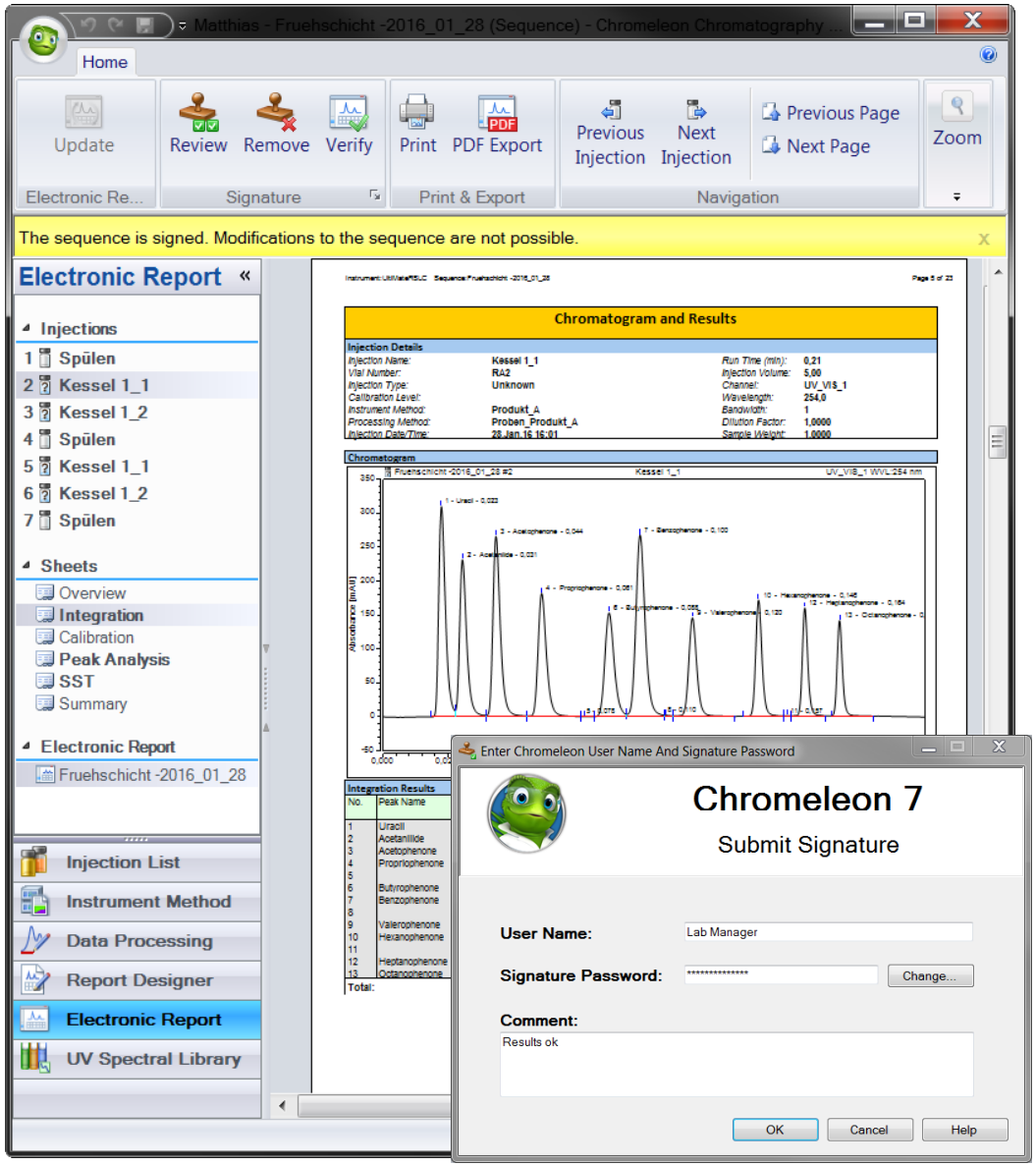
Object Audit Trails – Version Comparison



Änderungen der Objekte sind leicht zu identifizieren

ThermoFisher SCIENTIFIC

Datenaufzeichnung– Elektronische Unterschriften



- Drei Hierarchien der Unterschriften
  - Submit, Review, Approve
- Werden im elektronischen Dokument verwendet
- Sequenzen werden über Checksummen geschützt
- Über die Benutzer Privilegien gesteuert

ThermoFisher SCIENTIFIC

Welches CDS ist denn nun das Richtige für mich?

- Chromeleon 7.2 SR4 Chromatography Data System (CDS) Software

  – die nächste Generation von CDS

- **„Simply Intelligent”**
  - Intelligente Funktionalität – es macht das, was Sie benötigen!

- **„Operational Simplicity™“**
  - alles geht schnell und einfach!
  - Intuitiv - intelligent – leichter zu bedienen
  - Vereinfacht alle chromatographischen Prozesse

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit

Benötigen Sie weitere Informationen oder möchten Sie Ihre Demo CD anfordern, dann besuchen Sie uns unter:

www.thermofisher.com/chromeleon

Folgen Sie Charlie Chromeleon auf

facebook.com/CharlieLovesChromatography

Bitte wenden Sie sich mit weiteren Fragen direkt an uns per Email:

analyze.eu@thermofisher.com

ThermoFisher SCIENTIFIC