

Ingo Green

Empower 3 Verstehen

Empower®3 ist eine eingetragene Marke der Waters Corporation

Leseprobe

Leseprobe

Ingo Green

Empower 3 Verstehen

Kompendium zum bekannten

Chromatographiedatensystem

Inklusive Themen zur regulatorischen Compliance

Leseprobe

Auflage 1.0

Verfasser: Ingo Green (Cromingo e.K.)

Klosterufer 2, 245825 Bordesholm

info@cromingo.com

www.cromingo.com

Copyright: Bordesholm 2025

Herausgabe im Eigenverlag

Satz & Layout: Ingo Green

Umschlag& Illustration: Ingo Green

Fachliche Durchsicht: Dr. Britta Kupfer

Druck: KDP, unabhängig veröffentlicht

ISBN: 9798304318785

Haftungsausschluss

Dieses Handbuch zur Empower 3 Software stellt keine offizielle Herstellerdokumentation dar. Die Darstellungen in diesem Buch beruhen auf der persönlichen Erfahrung, Recherche und Einschätzung des Autors und sind frei von Herstellerinteressen gehalten. Trotz sorgfältiger Ausarbeitung und der langjährigen Expertise des Autors mit dem System kann keine Gewähr für die Richtigkeit aller angebotenen Darstellungen gegeben werden.

Um Kosten bei der Erstellung dieses Buchs niedrig zu halten, wurde auf den Einsatz eines professionellen Lektorats und Korrektorats verzichtet. Trotz sorgfältiger und aufwendiger Überprüfung von Rechtschreibung und Grammatik, kann keine Gewähr für einen fehlerfreien Text gegeben werden.

Inhalt

1.	Allgemeines	14
1.1.	Besonderheiten der Empower Software – Vorzüge im regulierten Umfeld	14
1.2.	Einwahl und Startfenster	14
1.3.	Benutzerverwaltung	16
1.4.	Empower Projekte	17
2.	Das Empower Projektfenster	19
2.1.	Tabellenansichten und Navigation (Terminologie)	20
2.2.	Funktionen im Projektfenster	22
2.3.	Id Konzept	24
2.4.	Methoden Typen und Funktionen der Method Properties	25
2.5.	Empower Online Hilfe	26
3.	Datenaufnahme	28
3.1.	Aufrufen der Run Samples Funktion	28
3.2.	Das Run Samples Fenster	28
3.3.	Tabellenreiter und Online-Plot	29
3.4.	Erstellen einer Instrument Method	30
3.5.	Baseline Monitoring	32
3.6.	Control Panel	34
3.7.	Erstellen eines Sample Sets	34
3.8.	Einsatz von Table Preferences	35
3.9.	Die Spalten im Sample Set	36
3.10.	Starten eines Sample Sets	39
3.11.	Run Samples Defaults	41
3.12.	Abbruch Szenarien	42
3.13.	Starten von mehreren Sample Sets nacheinander	42
3.14.	Bearbeiten von laufenden Sample Sets und Sample Set Queue	43
3.15.	Bearbeiten einer Instrument Method	44
3.16.	Erstellung eines Sample Sets basierend auf einer Sample Set Method	45
3.17.	Eingabe von Standardeinwaagen - Component Editor	45
3.18.	Angabe von Plate Types	47
3.19.	Auswertung von laufenden Messungen	50
4.	Datenauswertung	51
4.1.	Auffinden eines abgeschlossenen Sample Sets	51
4.2.	Einsatz der Alter Samples Funktion	51
4.3.	Einsatz der Review Funktion	54
4.4.	Auswertung eines Sample Sets mittels Background Processing	57
4.5.	Betrachten von Ergebnissen	58
4.6.	Varianten zum Erzeugen von Ergebnissen	63
5.	Empfehlungen zur Datenauswertung	68
5.1.	Selektion von Channels im Method Set	68
5.2.	Automatische Auswahl von Channels im Review	69
5.3.	Abzug eines Blindwertes	71
5.4.	Processing Codes	73

6.	Manuelle Integration und Reprozessieren.....	75
6.1.	Vorgehen	75
6.2.	Versionierung von Ergebnissen.....	79
6.3.	Zusammenfassung zur Versionierung von Ergebnisdaten	81
7.	Betrachten und Vergleichen von Chromatogrammen.....	85
7.1.	Die Overlay Funktion	85
7.2.	Review Ansichten (Sample Sets, Injections, Channels, Result Set, Results)	87
7.3.	Die Compare Funktion	91
8.	Roter Faden	94
9.	Processing Method (Einführung)	95
9.1.	Bearbeiten einer Processing Method	95
9.2.	Erstellung einer neuen Processing Method (Wizard)	102
9.3.	Erstellung einer neuen Processing Method ohne Wizard	107
10.	Processing Method für Fortgeschrittene	109
10.1.	Reiter: Integration	109
10.2.	Reiter: Smoothing/Offset	124
10.3.	Reiter: Components.....	125
10.4.	Reiter: Impurity.....	129
10.5.	Reiter: Peak Ratios (MS Ion Ratios).....	134
10.6.	Reiter: Default Amounts/Purity	136
10.7.	Reiter: Named Groups	137
10.8.	Reiter: Timed Groups	138
10.9.	Reiter: Suitability	139
10.10.	Reiter: Limits	150
10.11.	Reiter: Noise and Drift	151
11.	Kalibrierung.....	152
11.1.	Externe Kalibrierung.....	152
11.2.	Kontrollstandards	155
12.	Quantifizierung.....	157
12.1.	Quantifizierung mittels externer Kalibrierfunktion	157
12.2.	Quantifizierung mittels Internem Standard	162
12.3.	Quantifizierung ohne Kalibrierfunktion.....	165
13.	Aufbau von Sample Sets/Sample Set Methods.....	171
13.1.	Unterscheidung Sample Set/Sample Set Method	171
13.2.	Erstellen einer Sample Set Method (Editor).....	172
13.3.	Auswerteschema (Labels, Label References, Function und Processing).....	173
13.4.	Sample Set Method Wizard	175
13.5.	Sample Set Method Template	176
13.6.	Process Only Sample Sets.....	178
14.	Empfehlungen für spezielle Einsatzgebiete	182
14.1.	Einsatz in der Routineanalytik	182
14.2.	Einsatz in der Inprozesskontrolle	184

14.3.	Einsatz im Entwicklungslabor	185
14.4.	Einsatz zur Gerätequalifizierung	186
15.	Einsatz von View Filtern	188
15.1.	Vorbemerkungen	188
15.2.	Statische View Filter	189
15.3.	Dynamische View Filter (JIT)	191
15.4.	Definition von Bedingungen	193
16.	Message Center	194
16.1.	Vorbemerkungen	194
16.2.	Aufrufen des Message Centers	194
16.3.	Nearline Messages	195
17.	Reporting	197
17.1.	Vorbemerkungen	197
17.2.	Preview/Publisher Funktion und Überblick	197
17.3.	Vorbereitung einer neuen Reportvorlage – Method Properties	201
17.4.	Anordnung von Reportobjekten	203
17.5.	Auffinden von Reportobjekten	207
17.6.	Grundlagen zu Report Tabellen	212
17.7.	Chromatogramme	216
17.8.	Calibration Plot	222
17.9.	Composite Groups	227
17.10.	Erweiterte Einstellungen für Chromatogramme und Peak Tabellen	229
17.11.	Trend Charts	233
17.12.	Einsatz der elektronischen Unterschrift	237
17.13.	Ausdrucken von Reports	239
17.14.	Hinweise zur Validierung von Reportvorlagen	239
17.15.	Report Method Wizard	241
17.16.	Manage Defaults	242
18.	Custom Fields	246
18.1.	Vorbemerkungen	246
18.2.	Konzept	246
18.3.	Erstellen von Custom Fields	248
18.4.	Erstellen von Auswahllisten	252
18.5.	Erstellen von Feldern mit einfachen Berechnungen	254
18.6.	Überprüfen von Feldern mit einfachen Berechnungen	256
18.7.	Erstellen von logischen Abfragen	257
18.8.	Operatoren und Funktionen in Custom Field Formeln	260
18.9.	Einsatz von Variablen	262
18.10.	Peakbezeichnungen in Custom Field Formeln	263
18.11.	Summary Funktionen	264
18.12.	Intersample Berechnungen	264
18.13.	Auslesen von ‚Component Type‘ Feldern in Peak Tabellen	269
18.14.	Berechnendes Enum Feld	269
18.15.	Bedingte Berechnungen	271
18.16.	Arbeiten mit Text Strings	271

18.17.	Anwendungsbeispiele	276
20.	Auswertung von UV-VIS 3D-Daten	285
20.1.	Einführung	285
20.2.	Darstellung von 3D-Daten	285
20.3.	Prozessieren von 3D-Daten	295
20.4.	Bestimmung der "Peak Reinheit"	303
20.5.	Bewertung der Reinheit	306
20.6.	Spektrbibliotheken	309
20.7.	Identitätstests mittels Spektrenabgleich	319
20.8.	Bibliotheksabgleich mittels Library Funktionen im Review	323
20.9.	Verwalten von Spektrenbibliotheken	326
21.	Datenimport und -export.....	327
21.1.	Importieren von Daten.....	327
21.2.	Exportieren von Daten	330
21.3.	Toolkit Anwendungen	335
21.4.	Migration von Spektrenbibliotheken.....	335
22.	Administration im Configuration Manager.....	337
22.1.	Aufrufen des Configuration Manager	337
22.2.	System Policies	338
22.3.	Default Strings	345
22.4.	Copy Preferences	346
22.5.	Projekte	347
22.6.	Verwalten eines Projekts	350
22.7.	Gestaltungsmöglichkeiten zum Berechtigungs- und Zugriffskonzept.....	353
22.8.	Datensicherung	354
22.9.	Sperrern und Entsperrern von Projekten.....	357
22.10.	Benutzerverwaltung	361
22.11.	Systems und Nodes	369
22.12.	Libraries	376
22.13.	System Audit Trail	376
23.	Verfahren zum Daten und Audit Trail Review	378
23.1.	Anforderungen und Definitionen	378
23.2.	Ablauf eines operativen Daten und Audit Trail Reviews.....	383
23.3.	Checkliste für den operativen Daten- und Audit Trail Review.....	394
23.4.	Nicht-operativer Review des Project Audit Trails	394

Warum dieses Buch?

Möchte man sich auf eigene Faust über den Einsatz von Empower 3 informieren, werden einem viele Quellen angeboten. Der Hersteller selbst stellt bereits zahlreiche Anleitungen und Dokumente zu den verschiedensten Themen zur Verfügung. Weiterhin gibt es auf der Waters-Webseite eine spezielle Rubrik ‚Empower Tipp of the Week‘, die nützliche Informationen zu bestimmten Anwendungsfällen bietet und der Hersteller bemüht sich mit regelmäßigen Veranstaltungen, Empower 3 Themen zu besprechen. Viele Präsentationen zur Software sind auch über eine Suchmaschine im Internet zu finden. Nicht zuletzt bietet die Software selbst eine umfangreiche Online Hilfe.

Aber Eines wird dabei auch deutlich: Sich hier durchzuarbeiten ist mit erheblichem Zeitaufwand verbunden und erfordert Eigeninitiative. So fehlen meist die Ressourcen sich intensiv mit der Software auseinanderzusetzen und Empower-Anwender haben andere Prioritäten im Arbeitsalltag zu verfolgen. Da die Quellen vielfältig sind, wird man nie Gewissheit haben bereits alle Informationen zu einem Thema gefunden und bearbeitet zu haben. So erlangen viele Empower-Anwender ihr Wissen hauptsächlich über die Einarbeitung durch erfahrene Kollegen oder durch eigenes Ausprobieren im Arbeitsalltag. Ein systematisches und strukturiertes Heranführen an die Software bleibt meistens aus.

In meiner über 18 jährigen Zeit als unabhängiger Empower Berater erfahre ich daher regelmäßig den Wunsch nach einer zentralen und aktuellen Dokumentation. Diese sollte sowohl Empower Einsteigern einen schnellen Zugang zur Software ermöglichen, aber auch als leicht verständliches Nachschlagewerk zu den wesentlichen Themen des Laboralltags Hilfestellung bieten können. Wegen des fokussierten Einsatzes von Empower 3 im Pharmabereich, sollen dabei auch Fragestellungen zum Abbilden von Geschäftsprozessen behandelt werden, die über die eigentliche Funktionalität der Software hinausgehen. Zugegeben, kein einfacher Unterfangen.

Ein erstes Handbuch hatte ich bereits 2007 für meinen damaligen Arbeitgeber zusammengestellt, dabei konnte auch auf bereits vorhandene Dokumente aus anderer Feder zurückgegriffen werden. Dieses fand wenig Aufmerksamkeit, was sicher an einer unvorteilhaften Aufmachung, aber auch an dem fehlenden Vermarktungskonzept lag. 2015 erschien schließlich eine überarbeitete Version. Dafür habe ich sogar eine Ausbildung zum Grafikdesign und Textlayout wahrgenommen, um so auch direkten Einfluss auf die Gestaltung nehmen zu können. Und dieses Buch wurde dann wirklich ein unerwarteter und bahnbrechender Erfolg. Dabei hat es sich inhaltlich wenig von seinem Vorgänger unterschieden. Im gleichen Jahr folgte noch eine englischsprachige Version und noch heute werde ich regelmäßig bei meinen Kunden auf dieses Handbuch angesprochen. Zumindest im deutschsprachigen Raum scheint es sich zu einer Art Standardwerk zu Empower etabliert zu haben. Allerdings ist vielen nicht bewusst, wer der eigentliche Autor dieses Buches ist, da es unter der Marke meines damaligen Arbeitgebers vertrieben wurde. Mit meinem Ausscheiden verblieb das Buch auch dort, da ich versäumt hatte, mir die nötigen Rechte an dem Buch zu sichern, wurde seit dem aber auch nicht weiter aktualisiert und ist nun auch nicht mehr am Markt verfügbar.

Mittlerweile bin ich Inhaber meines eigenen Unternehmens und schaue nach 10 Jahren mit einem anderen Blick auf dieses Buch. Durch fortlaufenden Kundenkontakt, eigene Erfahrung und zeitintensive Recherchen sind mir viele Lücken und Ungenauigkeiten aufgefallen. Vieles würde ich heute so nicht mehr schreiben. Aber auch die Software selbst hat sich in 10 Jahren natürlich weiterentwickelt.

Daher bestand schon lange der Wunsch nach einer Neuauflage, keine Ergänzung zum bestehenden, was auch rechtlich bedenklich wäre, sondern eine wirkliche Neufassung. Im Sommer 2024 habe ich dann den Entschluss gefasst, loszulegen. Wie damals sollte alles wieder in Eigenregie ablaufen, von der Rohfassung bis zur fertigen Druckvorlage. Dieses Mal hatte ich aber viel mehr Zeit zur Verfügung, da eine Erstellung nicht nach Feierabend erfolgen musste.

Das Buch basiert auf keinem bestimmten Release Stand, sondern versucht die Release Stände Empower FR5 bis Empower 3.8 zusammenfassend darzustellen. Außerdem werden die Themen grundsätzlich unter der Annahme vorgestellt, dass Sie alle benötigten Berechtigungen besitzen. Es kann also durchaus sein, dass Ihnen Funktionen vorgestellt werden, die Sie mit Ihrer Berechtigungsstufe im eigenem System nicht ausführen können. Weiterhin bauen die Kapitel inhaltlich aufeinander auf. Auf die Erläuterung von Funktionen, die bereits zuvor beschrieben wurden, wird nicht erneut in der gleichen Detailtiefe eingegangen. Diese müssen dann als bekannt vorausgesetzt werden. Wo immer nötig, wird aber mit Verweisen gearbeitet. Bei der Darstellung einzelner Abläufe wird auch weitestgehend auf Selbstverständlichkeiten verzichtet. Es wird also nicht jedes Mal erwähnt, dass man mit ‚OK‘ ein Objekt abspeichert oder mit ‚Next‘ das nächste Fenster im Wizard angezeigt wird. Dennoch habe ich Wert auf eine umfangreiche Bebilderung gelegt. Gerade das ist ein Grund, weswegen der Einsatz einer Online Hilfe in reiner Textform als schwierig angesehen wird. Mit Bildern können wir Zusammenhänge viel schneller und präziser erfassen.

Nun hoffe ich, dass mit diesem Buch ein Werk entstanden ist, das seinem Anspruch erfüllt. Bewusst soll es nun nicht nur Firmenkunden angeboten werden, sondern direkt über den Buchhandel auch privat erworben werden können, zu einem deutlich günstigeren Preis. Das Print on Demand Verfahren im Eigenverlag eröffnet dabei neue Möglichkeiten. So bietet es den Vorteil ohne große Investitionskosten auf einfache Weise aktualisierte Fassungen anzubieten. Mir ist bewusst, dass es auch weiterhin Wünsche geben wird, auf die dieses Buch nicht im erwarteten Umfang eingeht oder weitere Themen, die aktuell noch ausgeklammert werden. Dem möchte ich künftig bestmöglich nachkommen.

Spezielle Optionen wie Dissolution, Massspectrometry, GPC. CE werden in dieser Edition noch nicht berücksichtigt. Außerdem beschränkt sich die Darstellung auf das Pro Interface. Neben einer englischsprachigen Übersetzung sind aber auch Erweiterungen diesbezüglich geplant.

Mein Angebot an Sie soll daher auch als Bitte verstanden werden: Schreiben Sie mich für Fragen und Anregungen direkt an. Ich garantiere Ihnen eine Antwort, die Ihnen weiterhilft, und es wird auch uns helfen, dieses Werk weiterzuentwickeln. (info@croaming.com)

Empower hat sich in den letzten Jahrzehnten dermaßen etabliert, dass es weltweit für Hunderttausende an Arbeitnehmern alltagsprägend geworden ist. So wie Microsoft Office Produkte am Computerarbeitsplatz, ist Empower zumindest im pharmazeutisch-analytischen Labor nicht mehr wegzudenken. Damit sehe ich es auch als gerechtfertigt an, frei von Herstellerinteressen Unterstützung anzubieten. Eine unabhängige Positionierung ermöglicht es auch, in anderer Form auf die Tücken der Software einzugehen und konstruktive Vorschläge zum Umgang mit diesen Tücken zu formulieren.


Meine Erfahrung zeigt, dass ein solches Werk in Anwenderkreisen zu mehr Akzeptanz für die Empower Software führen kann. Man erfährt auch heutzutage immer noch eine gewisse Ablehnung des Systems, insbesondere bei Anwendern, die bereits mit anderen Systemen vertraut sind. Das ist meist dadurch zu erklären, dass Empower seiner eigenen, sehr individuellen Logik folgt und so nur schwer mit bereits bekannten

System verglichen werden kann. So wird der gedankliche Zugang zu Empower erschwert. Dennoch bestätigt sich wiederholt aufs Neue, dass die Möglichkeiten von Empower dankend angenommen werden, nachdem anfängliche Hürden im Verstehen der Software überwunden sind.

Denn nicht zuletzt wegen seiner Einzigartigkeit ist es ein unvergleichbar starkes und mächtiges Programm in der Welt der chromatographischen Datensysteme. Vollkommen zurecht konnte Empower daher seine Marktführerschaft, insbesondere im pharmazeutischen Sektor, in den letzten Jahrzehnten behaupten.

Bedanken möchte ich mich ausdrücklich bei Dr. Britta Kupfer, die mit vielen Anregungen, einen differenzierten Blick auf die Thematik und einer peniblen Durchsicht der einzelnen Kapitel einen wertvollen Beitrag zum Gelingen dieses Buches geleistet hat.

Lassen Sie uns nun gemeinsam mit diesem Buch auf die Reise begeben, um die Empower 3 Welt zu erkunden und besser zu verstehen.



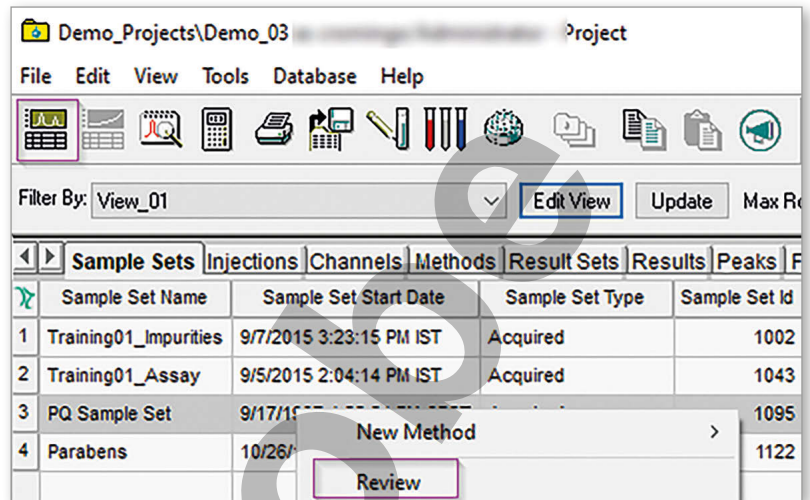
Ingo Green

Hinweis: In diesem Buch wird durchgehend das generische Maskulinum verwendet, um einen leichten Lesefluss zu ermöglichen. Damit dürfen sich aber Leserinnen und Leser in gleicher Weise angesprochen fühlen.

4.3. Einsatz der Review Funktion

Um nun einen Blick auf die erzeugten Chromatogramme werfen zu können, laden Sie das Sample Set in die Review Ansicht („rechte Maustaste > Review“ oder Direktauswahl über „Review“ Taste im Menüband).

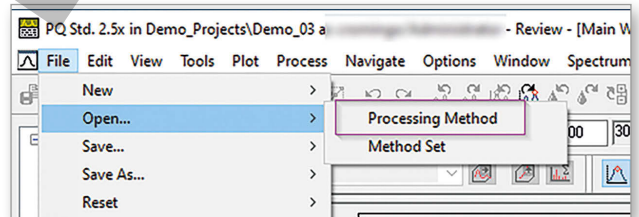
Das Review Fenster lässt sich grundsätzlich über die Tabellenansichten ‚Sample Sets‘, ‚Injections‘ und ‚Channels‘ für nicht ausgewertete Daten aufrufen und über die Ansichten ‚Result Sets‘ und ‚Results‘ für bereits erzeugte Ergebnisse. Ein Sonderfall bildet noch der Aufruf von Review im Run Samples Fenster. Auf die Unterschiede und welche Vor- und Nachteile sich jeweils ergeben wird im Abschnitt [„7.2. Review Ansichten \(Sample Sets, Injections, Channels, Result Set, Results\)“](#) auf Seite 87 näher eingegangen.



Die Review Funktion wird auch benötigt, um einen Abgleich mit einer bereits bestehenden Processing Method vorzunehmen oder eine neue Processing Method zu erstellen.

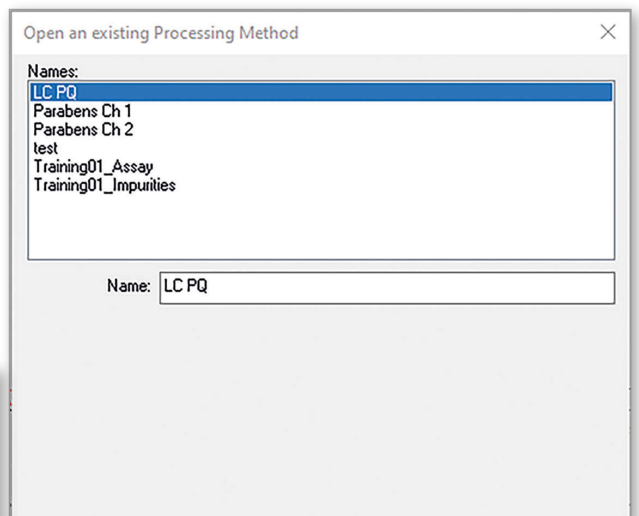
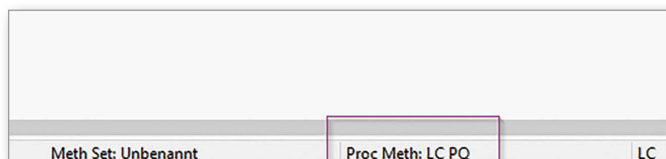
Tragen Sie dafür Sorge, dass gleich zu Beginn, also beim Öffnen des Review Fensters, eine passende Processing Method geladen wird. Sie können eine Methode aktiv in die Review Ansicht laden, es gibt aber auch Möglichkeiten, dies zu automatisieren. Dazu später mehr.

Zunächst lassen Sie uns ein Beispiel durchspielen, bei dem bereits eine passende Methode vorliegt und diese nicht weiter bearbeitet werden braucht. Wählen Sie über ‚File > Open > Processing Method‘ die benötigte Methode aus.



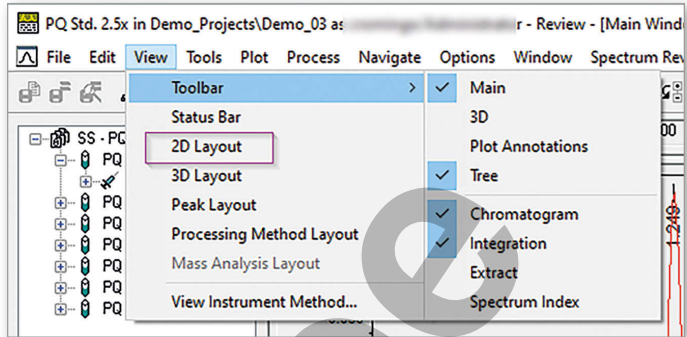
In unserem Fall wählen wir ‚LC PQ‘ aus. Über ‚Open‘ wird die Methode in die Review Ansicht geladen.

Sie können jederzeit über die Anzeige unten rechts im Fenster kontrollieren, welche Methode gerade im Hintergrund geladen ist. ‚Untitled‘ oder ‚Unbenannt‘ bedeutet letztlich ‚keine Methode‘, und es kann methodenunabhängig mit Standardwerten gearbeitet werden.



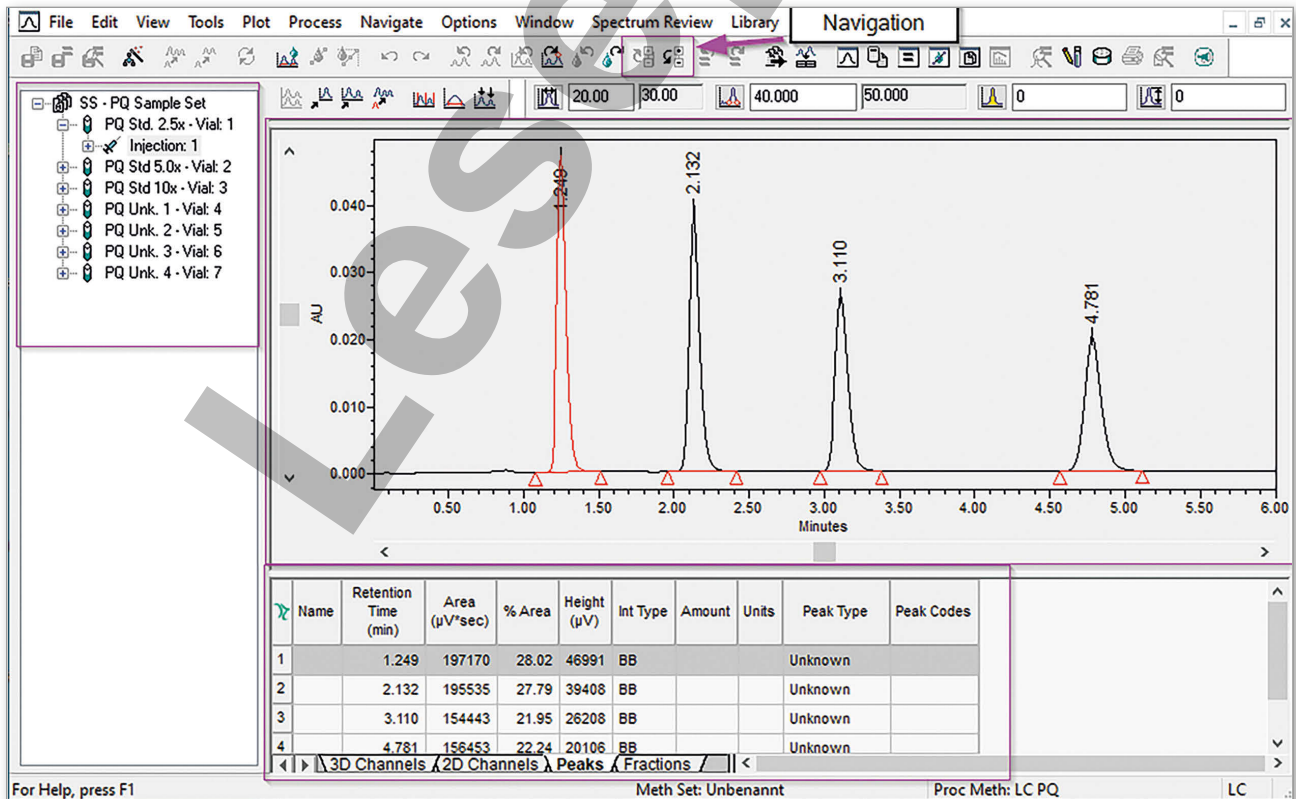
4.3.1. Übersicht Review Main View (Aufruf über Tabelle ‚Sample Sets‘)

- » Öffnen Sie die Review Maske erstmalig, dann werden Sie feststellen, dass die einzelnen Elemente anfänglich etwas ungünstig angeordnet sind. Dies können Sie an Ihre Bedürfnisse anpassen, z.B. wie folgt:
- » Wählen Sie ‚View > 2D Layout‘ aus
- » Blenden Sie all 3D Elemente und das Annotation Tool aus, indem Sie mehrfach ‚View > Toolbar‘ aufrufen und die Elemente ‚3D‘, ‚Plot Annotation‘, ‚Extract‘ und ‚Spectrum Index‘ abwählen.
- » Speichern Sie die getroffenen Einstellungen über ‚File > Save Preferences‘, um sicherzustellen, dass Sie beim nächsten Mal eine vorteilhaftere Ansicht erhalten.



Hinweis: Gerade Einsteigern kann die Orientierung in Empower große Schwierigkeiten bereiten. Viele unterschiedliche Fenster, viele oft ungünstig angeordnete Schaltflächen und Tabellen erschweren die Orientierung. Gewöhnen Sie sich daher an, die Fenster ein wenig aufzuräumen und nach Ihren Bedürfnissen zu gestalten, bevor Sie mit der eigentlichen Arbeit beginnen. Ihre individualisierten Einstellungen können Sie regelmäßig im Benutzerprofil abzuspeichern. In einem geordnetem Fenster wird man deutlich leichter und zielgerichteter arbeiten können.

Die Darstellung im Review sollte nun wie in der nächsten Abbildung dargestellt aussehen.



Manuelle Nachbearbeitung ist im oberen Chromatogramm klar über die Basislinien Codes zu erkennen (Kleinbuchstaben beim Basislinienstart).

Und allein über die visuelle Überprüfung der unterschiedlichen Versionen des integrierten Chromatogramms, kann überhaupt die Zulässigkeit des nachträglichen Eingriffs bewertet werden. Die alleinige Betrachtung von definierten Integrationsvorgaben hilft hier nicht weiter.

Zur weiteren Aufklärung hilft ein Blick über den Tellerrand. Denn es gibt CDS-Systeme, bei denen nicht jede einmal erzeugte Version eines integrierten Chromatogramms direkt abrufbar vorliegt und damit unterschiedliche Versionsstände direkt visuell miteinander verglichen werden können. Lediglich der Veränderungsverlauf wird in der Historie aufgezeichnet. Konkret wird dem nachbearbeiteten Chromatogramm dann z.B. eine abgewandelte Version der ursprünglichen Integrationsmethode zugewiesen.

In diesem Fall muss natürlich die Peakintegration in einer Form beschrieben sein, dass jederzeit aus dem Rohdatenchannel die resultierende Integration des Chromatogramms abgerufen bzw. präzise reproduziert werden kann.

In diesem Zusammenhang ist die eingangs beschriebene Anforderung dann auch unerlässlich und es ist davon auszugehen, dass besagte CDS-Anwender in der Vergangenheit mit einem System gearbeitet hatten, wo diese Anforderung so umzusetzen ist.

Man kann also von einer Anforderung sprechen, die sich aus der eigentlichen Kernanforderung, wie in ICH M10 beschrieben, ableitet, aber letztlich nur auf die technische Umsetzung des Audit Trails in der verwendeten Software bezieht. Da es sich aber nur um eine abgeleitete Anforderung handelt, kann diese so nicht einfach auf andere Systeme wie Empower übertragen werden, da hier die Kernanforderung durch andere technische Möglichkeiten bereits erfüllt ist.

[1] [„Can We Continue to Draw the Line?“, H. Longden, R.D. McDowall, LCGC Ausgabe vom Dezember 2019](#)

7. Betrachten und Vergleichen von Chromatogrammen

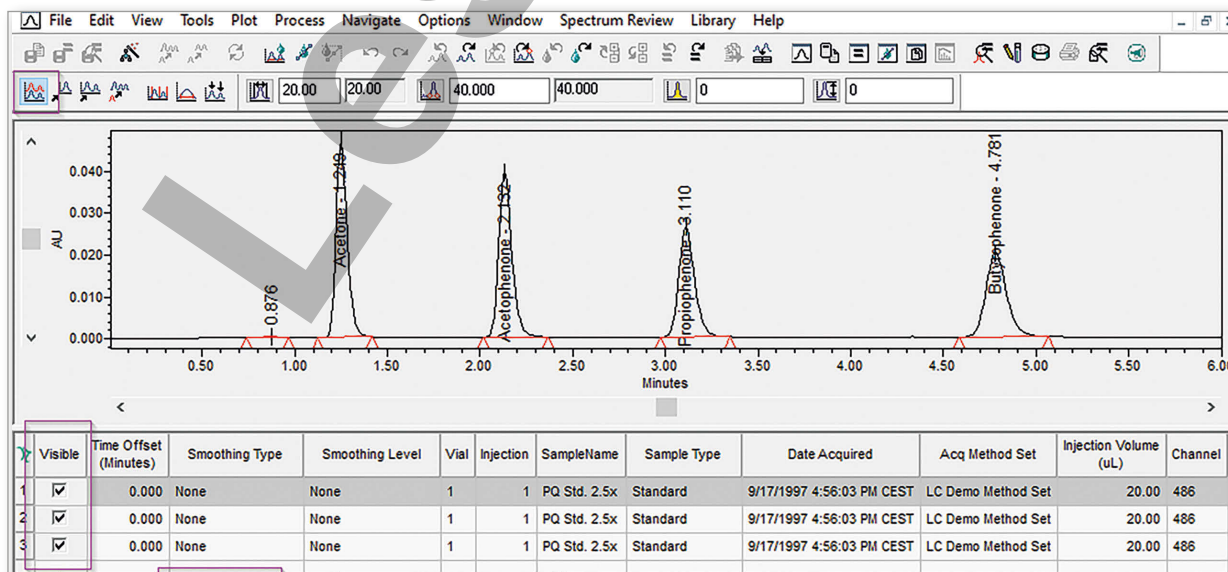
7.1. Die Overlay Funktion

Im Review Fenster können Chromatogramme aus unterschiedlichen Injektionen auch übereinandergelegt werden. Bedingung hierfür ist, dass das Review entweder über den Tabellenreiter ‚Channels‘ oder ‚Results‘ aufgerufen wird. Gehen Sie wie folgt vor:

- » Wir wählen für unser Beispiel zunächst die Ansicht ‚Result Sets‘ aus.
- » Wir wählen dann die beiden Result Sets aus, welche die Ergebnisse enthalten, die wir vergleichen möchten.
- » Wir rufen für diese Result Sets den Befehl ‚View As > Results‘ auf. Die Ansicht wechselt über auf den Tabellenreiter ‚Results‘.
- » Wir klicken auf den Spaltenkopf für die Spalte ‚Vial‘, um die Einträge nach Vial Position zu sortieren.
- » Wir wählen alle Einträge einer Positionsnummer aus, in unserem Beispiel Position 1.







SampleName	Vial	Injection	Sample Type	Date Processed	Result Id	Manual	Result #	# of Results Stored	Result Superseded
PQ Std. 2.5x	1	1	Standard	8/5/2024 2:00:49 PM CEST	1548	<input checked="" type="checkbox"/>	6	6	<input type="checkbox"/>
PQ Std. 2.5x	1	1	Standard	8/5/2024 1:56:50 PM CEST	1541	<input checked="" type="checkbox"/>	5	6	<input type="checkbox"/>
PQ Std. 2.5x	1	1	Standard	8/5/2024 12:47:22 PM CEST	1526	<input type="checkbox"/>	4	6	<input checked="" type="checkbox"/>
PQ Std 5.0x	2	1	Standard	8/5/2024 2:00:49 PM CEST	1549	<input type="checkbox"/>	5	5	<input type="checkbox"/>

- » Wir rufen für die Auswahl den Befehl ‚Review‘ auf. Es öffnet sich das Review Fenster.
- » Wir wählen unter dem Chromatogramm die Tabelle ‚Channels‘ aus und aktivieren die Overlay Ansicht über die kleine Schaltfläche oben links über dem Chromatogramm.



8. Roter Faden

Lassen Sie uns den bisherigen Ablauf einmal illustrativ in einem Diagramm darstellen. Damit kann Ihnen einen roten Faden an die Hand gegeben werden. Die einzelnen Aktionen sind in der entsprechenden Reihenfolge entlang des roten Fadens abzarbeiten. Die Spalten zeigen auf, in welchem Anwendungsfenster die jeweilige Aktion abzulaufen hat. Eine farbliche Kennzeichnung einer Zelle bedeutet, dass das entsprechende Anwendungsfenster geöffnet ist.

Aktion	Project	Run Samples	Alter Samples	Component Editor	Review	Preview/Publisher
						
Instrument Method erstellen	●	●				
Sample Set erstellen.		●				
Standard-Einwaagen eintragen				●		
Sample Set starten		●				
Sample Set bearbeiten	●		●	●		
Chromatogramme ansehen	●				●	
Processing Method abgleichen					●	
Sample Set prozessieren	●					
Result Set prüfen	●				●	
Result Set manuell nachintegrieren					●	
Result Set reprozessieren	●					
Result Set berichten	●					●

Feld	Erläuterung
CCompRef1, CCompRef2, CCompRef3	Angabe einer Bezugskomponente, die als Variable in Custom Field Formeln für Interpeak Berechnungen verwendet wird. Im Gegensatz zur globalen Variable ‚CCalRef1‘ können diese Referenzen komponentenbezogen eingesetzt werden.
CConst1 bis CConst7	Angabe einer komponentenbezogenen Konstante, die als Variable bei peakgebundenen Custom Field Berechnungen verwendet wird.

10.4. Reiter: Impurity

Einstellungen zur Berechnung von Verunreinigungen werden in der Processing Method beim Reiter ‘Impu-

The screenshot shows the 'Impurity' tab in a software interface. The interface is divided into several sections:

- Top Section:** 'Impurity Response' dropdown (1) set to '% Adjusted Area', 'Main Component' dropdown (2), and 'w Value' dropdown.
- ICH Thresholds:** 'Reporting' input field (3) set to 0.05, 'Identification' and 'Qualification' input fields.
- Adjusted Total Area: Excluded Component Types:** A list of checkboxes (4) including 'Internal Standard Peaks', 'Main Component', 'Mobile Phase Peak', 'Diluent Peak', 'System Peak', 'Matrix Peak', 'Formulation Peak', 'Excipient Peak', and 'Low Level Impurity'.
- Impurity Groups:** 'Calculate Total Impurities' checkbox, 'User Defined Impurity Groups' table (5), and 'Specified Impurities' table (6).

The 'User Defined Impurity Groups' table has the following structure:

Group Name	Component Type	Source of Calibration X Value
1 Specified Impurities	Specified Impurity	Not Calibrated, Sum Peaks for Quantitation

The 'Specified Impurities' table has the following structure:

Component Name	Reporting Threshold	Identification Threshold	Qualification Thresh
1 NK01	0.05	6	
2 NK02	0.05		

urity‘ getätigt. Lassen Sie mich zunächst die Funktionen im Detail vorstellen.

1. Impurity Response: Auswahl der Bezugsgröße
2. Auswahl einer Hauptkomponente
3. ICH Thresholds: Definition von globalen Grenzwerten
4. Auswahl von ‚Component Types‘, die bei der Berechnung des Wertes ‚Adjusted Total Area‘ nicht berücksichtigt werden sollen
5. Impurity Groups: Definition von selbst gewählten Peakgruppen
6. Specified Impurities: Auswahl von Komponenten, für die spezifische Grenzwerte gelten sollen.

Die Funktionen werden im Folgenden im Detail beschrieben.

Impurity Response

Im Feld ‚Impurity Response‘ (1) kann die Peakkennzahl angegeben werden, auf deren Grundlage eine Auswertung erfolgen soll. Hier stehen standardmäßig folgende Größen zur Auswahl: