

ChromSwordAuto 5

Everything a chromatography laboratory needs

Sergey Galushko

ChromSword, Germany

1

ChromSword 

ChromSwordAuto 5

- HPLCフルコントロール
- 自動化:
 - サンプル解析
 - メソッドスカウティング
 - メソッド開発
 - 頑健性テスト
 - データブラウザ、マネジメント

2

ChromSword 

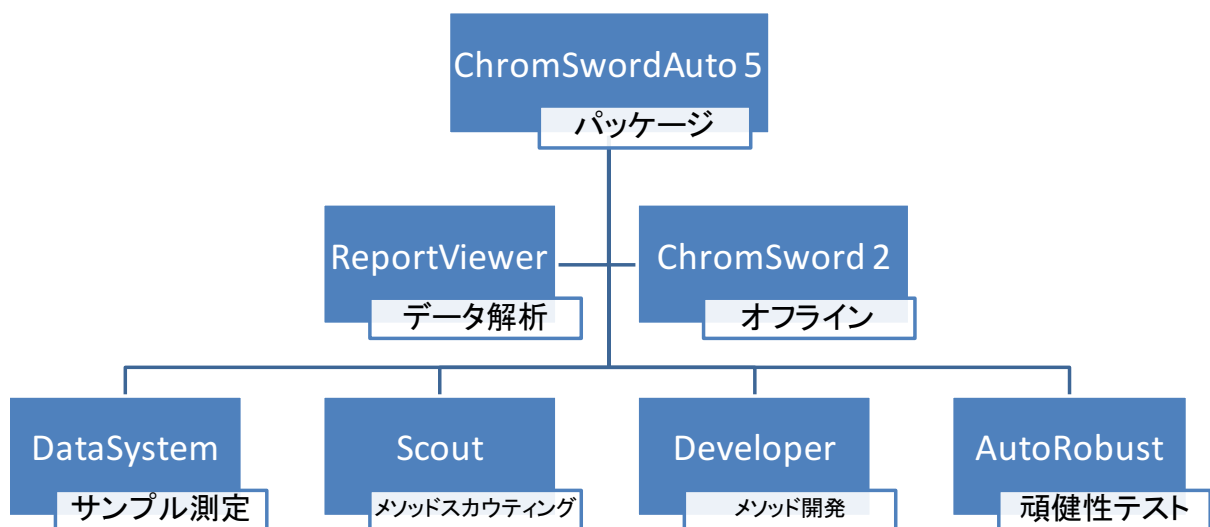
ChromSwordAuto 5 – free from other data systems and qualified PC

- 自動メソッド開発に適した、さらに進化したデータシステム
- **クロムソードオートがあれば、他のデータシステムは不要**
- ~~Empower~~
- ~~Chromeleon~~
- ~~OpenLab,~~
- ~~EZChrom~~

3

ChromSword 

ChromSwordAuto 5 suite package



4

ChromSword 

ChromSwordAuto 5 modules

- **DataSystem** – サンプル測定、ルーティン解析
 - **Scout** – メソッドスカウティング
 - **Developer** – メソッド開発、メソッド最適化、
サンプルプロファイリング
 - **AutoRobust** – DOEとQbDアプローチに基づく頑健
性評価テスト
 - **ReportViewer** – データブラウジング、処理、解析
-
- **ChromSword 2** – オフラインモードクロムソードメ
ソッド開発シミュレーション
(=Developer)

5

ChromSword 

ChromSwordAuto 5 flexibility

- それぞれスタンドアローンで使用可能
- 自由に組み合わせ可能

6

ChromSword 

ChromSword DataSystem

Simple data system for routine analysis

マルチタスク対応:

- サンプル解析
- キャリブレーション-内・外標準法
- システム適応テスト
- データ解析、レポート作成
- スペクトル取込機能

7

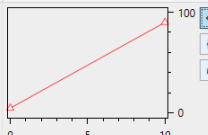
ChromSword 

ChromSword DataSystem

Creates sequence in seconds

迅速かつ簡単にシーケンスを作成

Step 4 of 7: Planned runs

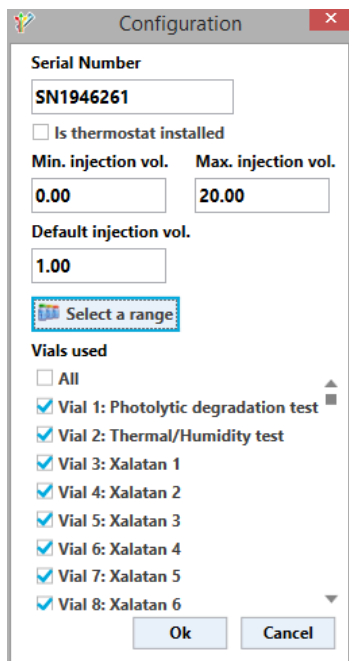
#	Enabled	Pump gradient	Buffer	Solvent	Vial	Calibration plot	Column
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Group #1 	A1 Unknown	B1 ACN	Vial 1: Photolytic degradation test	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1
2	<input checked="" type="checkbox"/>	Group #1	A1 Unknown	B1 ACN	Vial 2: Thermal/Humidity test	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1
3	<input checked="" type="checkbox"/>	Group #1	A1 Unknown	B1 ACN	Vial 3: Lamotrigine 1	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1
4	<input checked="" type="checkbox"/>	Group #1	A1 Unknown	B1 ACN	Vial 4: Lamotrigine 2	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1
5	<input checked="" type="checkbox"/>	Group #1	A1 Unknown	B1 ACN	Vial 5: Lamotrigine 3	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1
6	<input checked="" type="checkbox"/>	Group #1	A1 Unknown	B1 ACN	Vial 6: Lamotrigine 4	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1
7	<input checked="" type="checkbox"/>	Group #1	A1 Unknown	B1 ACN	Vial 7: Lamotrigine 5	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1
8	<input checked="" type="checkbox"/>	Group #1	A1 Unknown	B1 ACN	Vial 8: Lamotrigine 6	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1
9	<input checked="" type="checkbox"/>	Group #1	A1 Unknown	B1 ACN	Vial 9: Lamotrigine 7	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1
10	<input checked="" type="checkbox"/>	Group #1	A1 Unknown	B1 ACN	Vial 10: Lamotrigine 8	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1

8

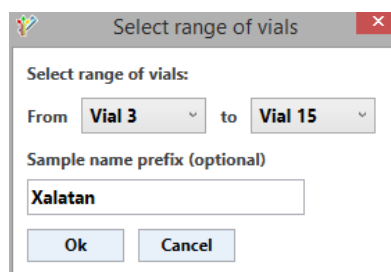
ChromSword 

ChromSword DataSystem

- サンプル名を自動的に簡単に入力



Configuration dialog box showing settings for the instrument. The Serial Number is SN1946261. The Min. injection vol. is 0.00 and the Max. injection vol. is 20.00. The Default injection vol. is 1.00. A button labeled "Select a range" is highlighted. Under "Vials used", several vials are checked, including Vial 1: Photolytic degradation test and Vial 3: Xalatan 1.



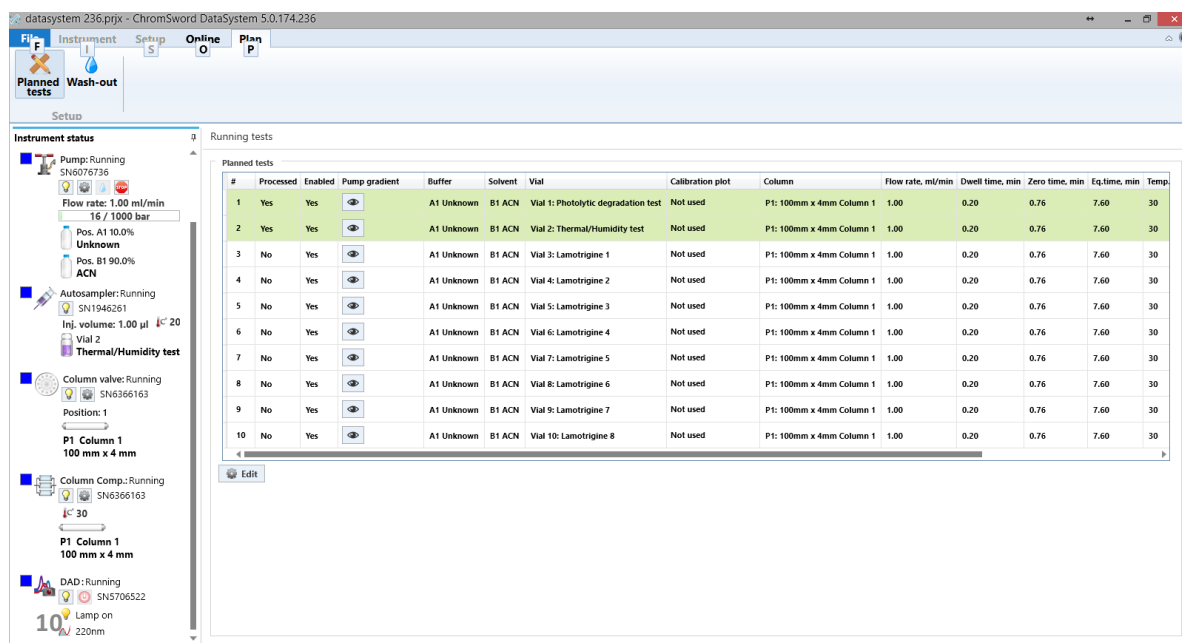
Select range of vials dialog box. The "From" dropdown is set to Vial 3 and the "to" dropdown is set to Vial 15. The "Sample name prefix (optional)" field contains "Xalatan".

9

ChromSword

ChromSword DataSystem Easy change running sequence

測定中、いつでも条件変更が可能



The main interface of ChromSword DataSystem showing instrument status and a table of planned tests. The instrument status on the left includes Pump: Running, Autosampler: Running, Column valve: Running, and DAD: Running. The "Planned tests" table lists 10 tests with columns for #, Processed, Enabled, Pump gradient, Buffer, Solvent, Vial, Calibration plot, Column, Flow rate, ml/min, Dwell time, min, Zero time, min, Eq. time, min, and Temp.

#	Processed	Enabled	Pump gradient	Buffer	Solvent	Vial	Calibration plot	Column	Flow rate, ml/min	Dwell time, min	Zero time, min	Eq. time, min	Temp
1	Yes	Yes		A1 Unknown	B1 ACN	Vial 1: Photolytic degradation test	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1	1.00	0.20	0.76	7.60	30
2	Yes	Yes		A1 Unknown	B1 ACN	Vial 2: Thermal/Humidity test	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1	1.00	0.20	0.76	7.60	30
3	No	Yes		A1 Unknown	B1 ACN	Vial 3: Lamotrigine 1	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1	1.00	0.20	0.76	7.60	30
4	No	Yes		A1 Unknown	B1 ACN	Vial 4: Lamotrigine 2	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1	1.00	0.20	0.76	7.60	30
5	No	Yes		A1 Unknown	B1 ACN	Vial 5: Lamotrigine 3	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1	1.00	0.20	0.76	7.60	30
6	No	Yes		A1 Unknown	B1 ACN	Vial 6: Lamotrigine 4	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1	1.00	0.20	0.76	7.60	30
7	No	Yes		A1 Unknown	B1 ACN	Vial 7: Lamotrigine 5	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1	1.00	0.20	0.76	7.60	30
8	No	Yes		A1 Unknown	B1 ACN	Vial 8: Lamotrigine 6	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1	1.00	0.20	0.76	7.60	30
9	No	Yes		A1 Unknown	B1 ACN	Vial 9: Lamotrigine 7	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1	1.00	0.20	0.76	7.60	30
10	No	Yes		A1 Unknown	B1 ACN	Vial 10: Lamotrigine 8	Not used	P1: 100mm x 4mm Column 1	1.00	0.20	0.76	7.60	30

ChromSword

ChromSword and ChromSwordAuto

1. コンピューターアシストメソッド開発
2. フルオートメソッド開発

11

ChromSword 

ChromSword

コンピューターアシストメソッド開発:

1. 逆相クロマトグラフィー

- 移動相条件(アイソクラティック, 定常もしくは多段階グラジエント)
- 温度
- pH 値
- 2次元パラメーター:
濃度ーグラジエント / 温度ー濃度 / pH値ー温度/ pH値ーカラム, 混合溶媒

2. 順相クロマトグラフィー

- 移動相
- 温度

3. イオン交換クロマトグラフィー

- ¹²- バッファー濃度
- 温度

ChromSword 

Procedure for computer-asisted method development with ChromSword

コンピューターアシストメソッド開発 <<方法>>

1. 最適化メソッドの選択：
 - グラジエント
 - アイソクラテック
 - 温度
 - pH値
2. 2 - 4 種類の測定条件設定 (異なる溶媒や温度)
3. クロマトグラム条件設定
4. クロマトグラムシミュレーション, 最適化
5. 実行

13

ChromSword 

Procedure for automated method development with ChromSwordAuto

フルオートメソッド開発 <<方法>>

1. 装置設定
 - 溶媒, B,C,D (最大 12)
 - バッファー - A1 - A4 (最大 12)
 - カラムセット - 1- 8
2. サンプル調整、セットオートサンプラー
3. ChromSword Developer 起動
4. 最適化法の選択- 迅速法, サンプルプロファイリング,
アイソクラテック or グラジエント
5. プランニング- カラム、溶媒選択
6. 測定スタート
7. データ閲覧、解析
8. レポーティング(結果が良ければ)
 - 結果がイマイチな場合: 溶媒、カラム、バッファーの再検討

14

ChromSword 

Automated Method Development Process Overview



ChromSword®Scout, ChromSword Developer (On-line)

ChromSword®
AutoRobust

ChromSword® (Off-line)

15

ChromSword 

ChromSword Scout

分析条件スカウティングを簡単設定

- 溶媒グラジエント
- カラム
- 溶媒
- バッファー
- 温度
- 流量

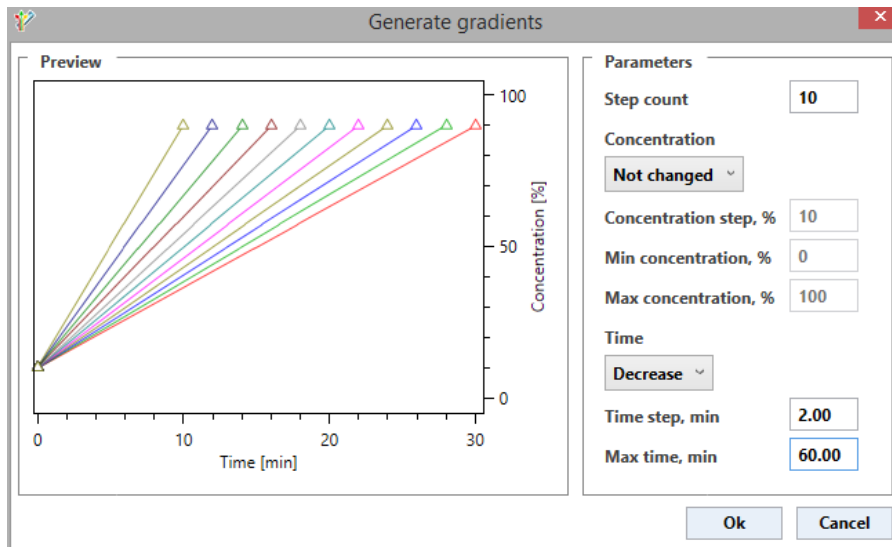
16

ChromSword 

ChromSword Scout

Generate library of gradients in one mouse click

超簡単にグラジエント条件を設定



17

ChromSword 

ChromSword Developer

タスク:

- 迅速メソッド開発
- サンプルプロファイリング、不純物サーチ
- アイソクラティック条件開発
- グラジエント条件開発

18

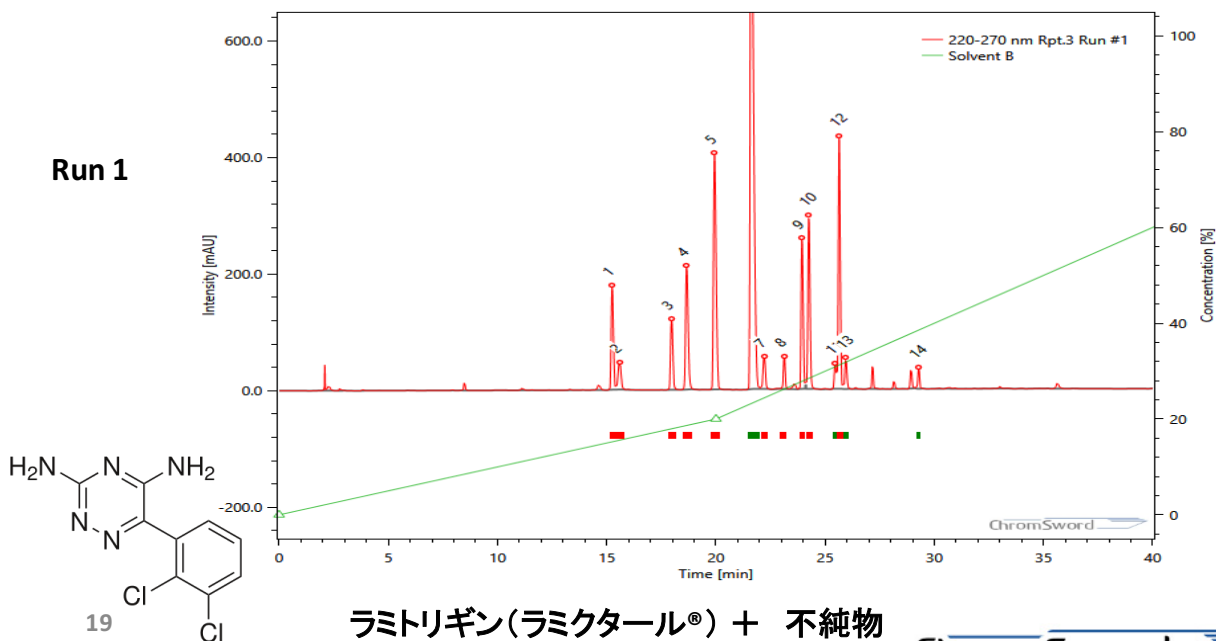
ChromSword 

ChromSword Developer

Rapid optimization in 3 – 5 runs

迅速メソッド最適(1回目測定)

Run 1



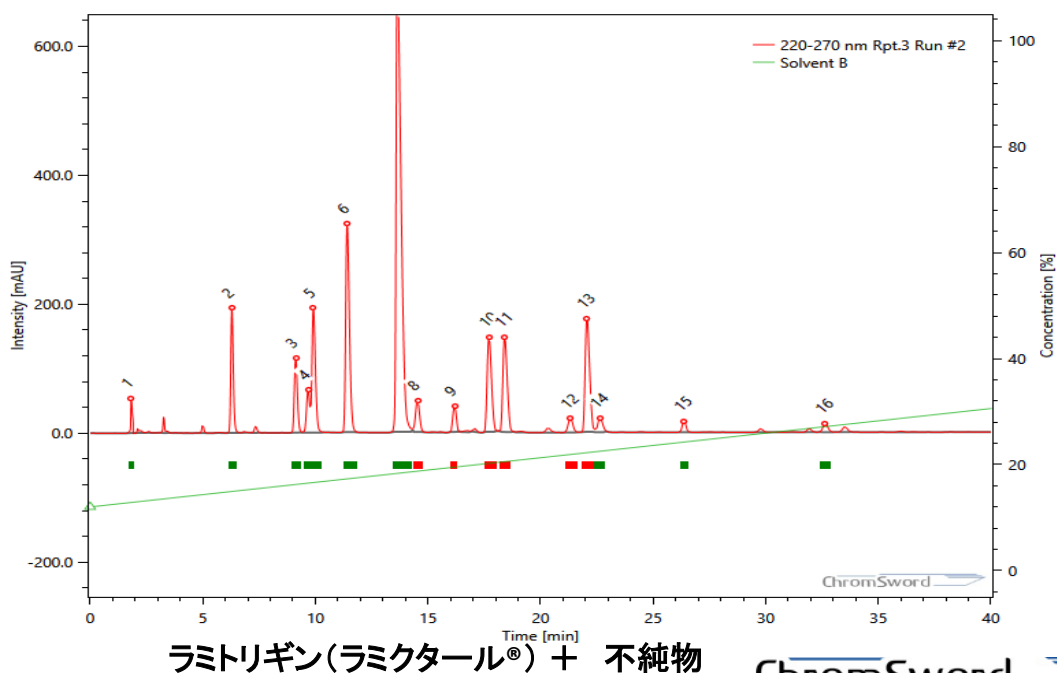
ChromSword

ChromSword Developer

Rapid optimization in 3 – 5 runs

迅速メソッド最適(2回目測定)

Run 2



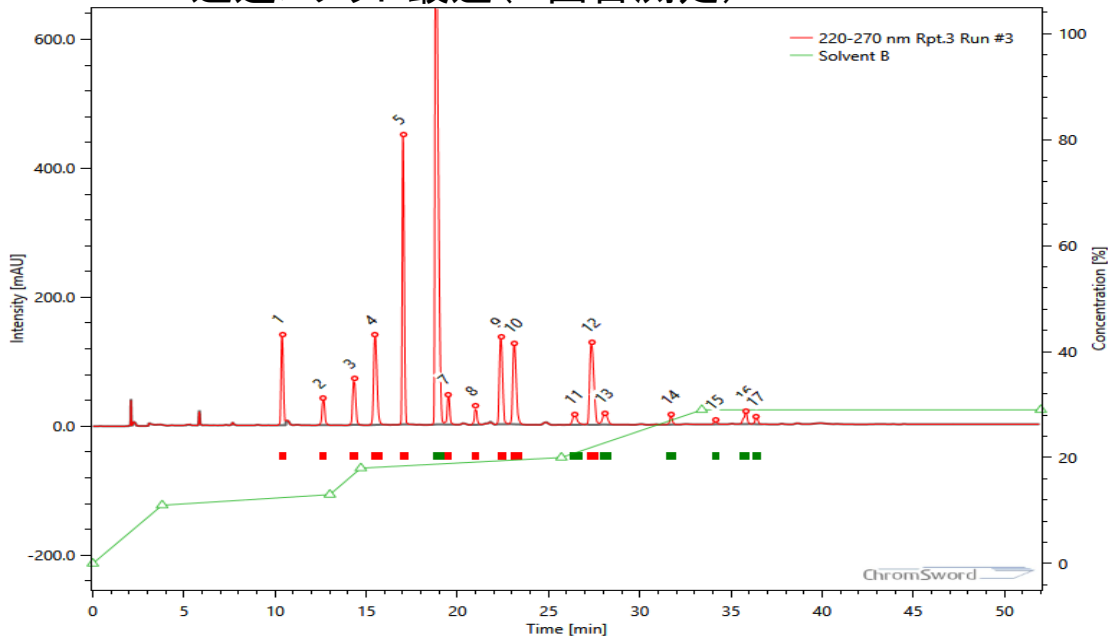
ChromSword

ChromSword Developer

rapid optimization in 3 – 5 runs

迅速メソッド最適(3回目測定)

Run 3



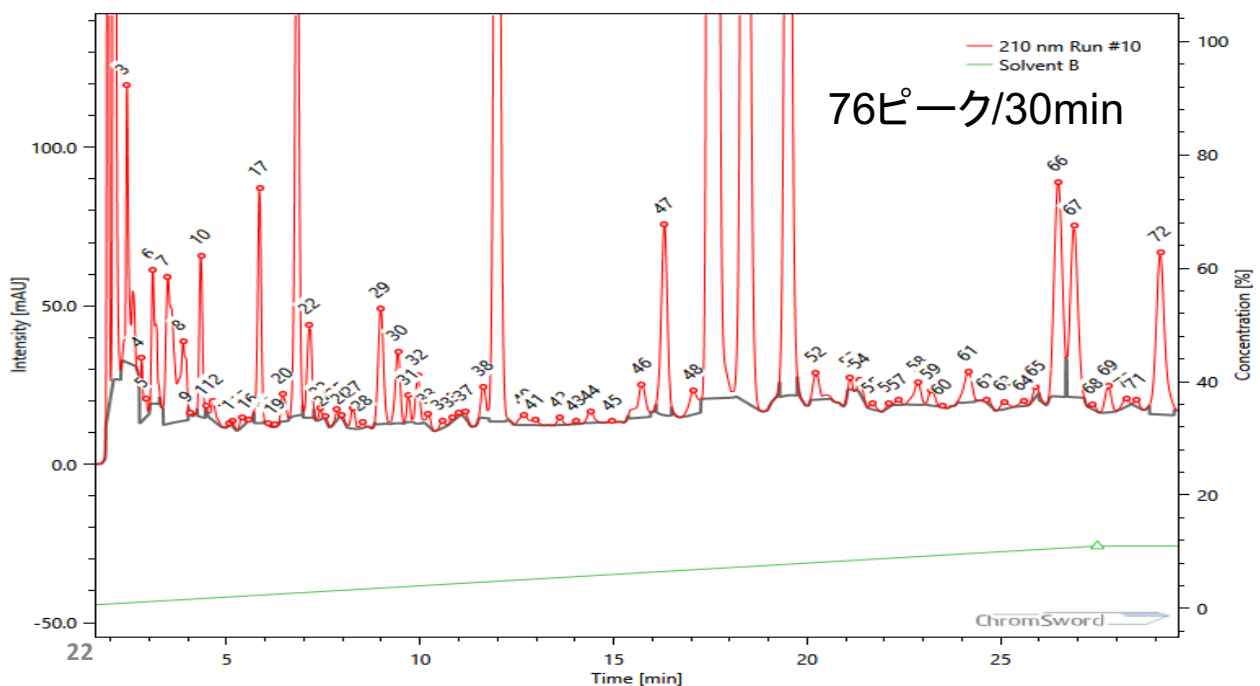
21

ラミトリギン(ラミクタール®) + 不純物

ChromSword

ChromSword Developer – sample profiling optimization of separation of coffee components – 76 peaks/30 min

サンプルプロファイリング、コーヒーの含有物質の分離最適化



22

Robustness testing

頑健性評価テスト

- メソッドバリデーション前やメソッド移行前に最初のステップとして最適化されたメソッドの頑健性評価テストを行う
- メソッドの頑健性評価結果は今後のメソッドバリデーションに重要

23

ChromSword 

ChromSword Auto Robust

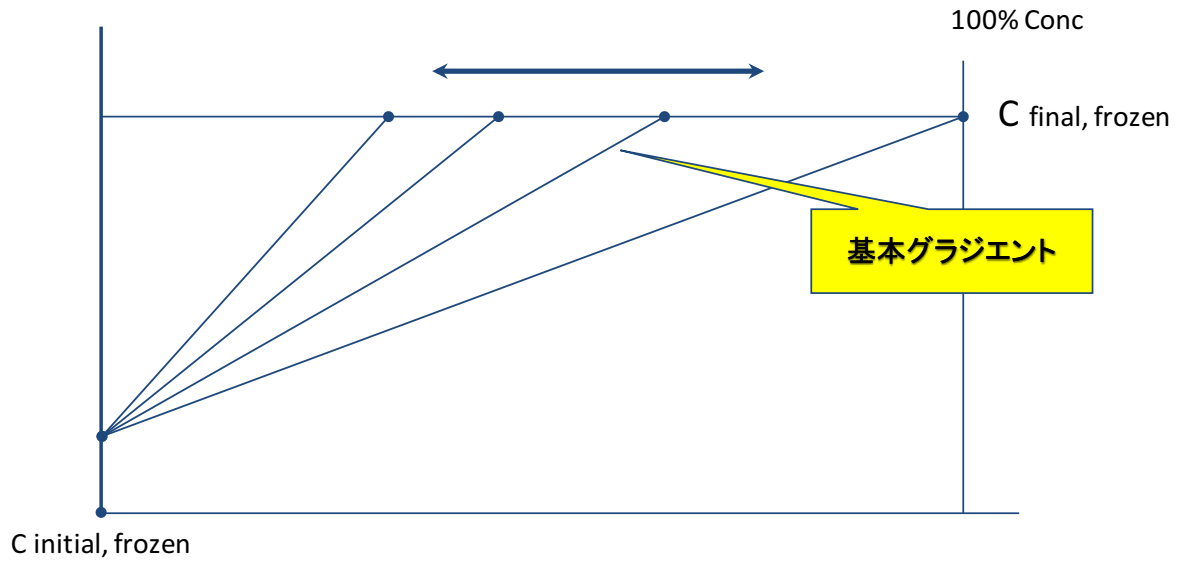
QbDアプローチに基づく、頑健性評価テストを1~7のパラメーターを自動的に変化させて、簡単かつ迅速に行いことができる

- 温度 e.g. +/- 1°C
- 流速 e.g. +/- 0.1 ml/min
- 濃度 e.g. +/- 1% org. modifier
- グラジエント条件 e.g. steps +/- 0.1 min
- バウツファー濃度/ pH e.g. +/- 0.1 pH 値
- 注入量 e.g. +/- 1 µl
- 平行化時間 e.g. +/- 1 min
- 波長 e.g. +/- 1 nm
- カラムバッチ e.g. 3本の異なるバッチ (スイッチングバルブ)

24

ChromSword 

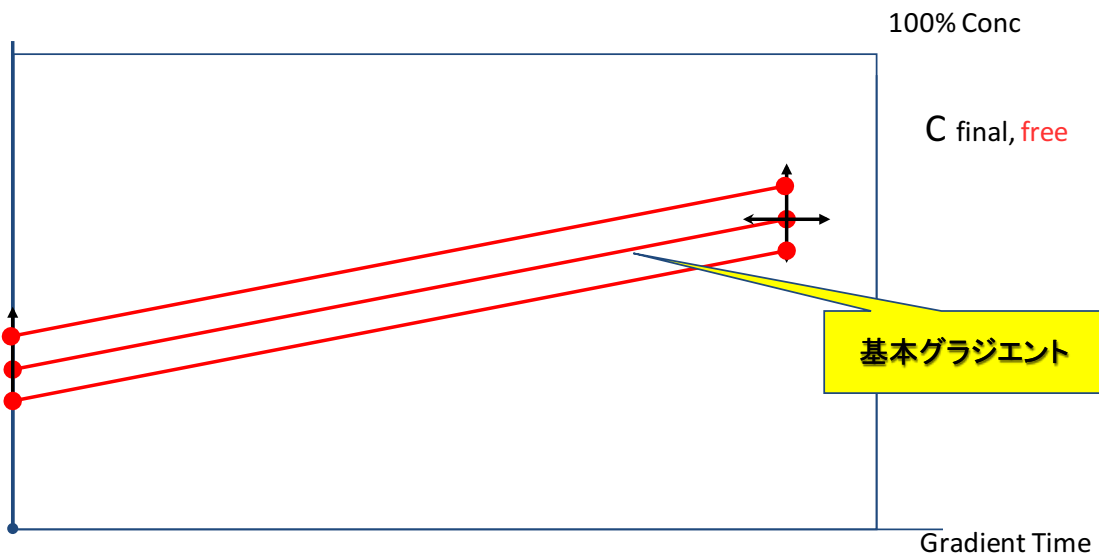
ChromSword Auto Robust



25

ChromSword 

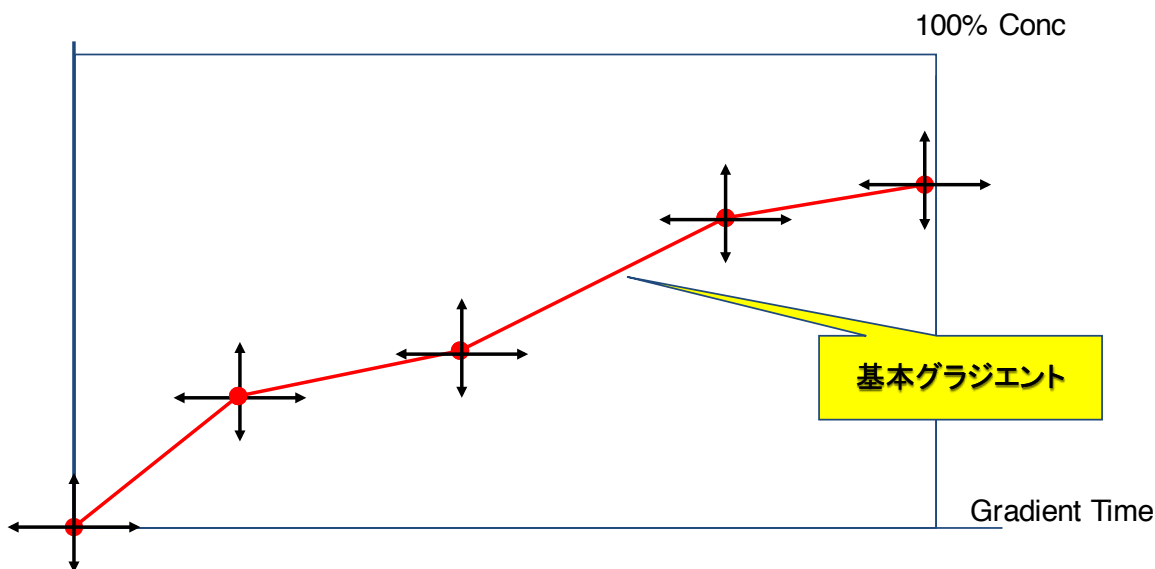
ChromSword Auto Robust



26

ChromSword 

ChromSword Auto Robust



27

ChromSword

ChromSword AutoRobust Easy create robustness tests plan

Step 6 of 10: Robustness setup

簡単に頑健性評価テストのプランニングを作成可能

Common properties

- Repeat basic method between each test
- Same robustness properties for all tests

Test type: **Plackett-Burman**

Property	Enabled	± Value	± Steps
Concentration, %	<input checked="" type="checkbox"/>	4.52	1
Breakpoint time, min	<input checked="" type="checkbox"/>	1	1
Column temperature, °C	<input checked="" type="checkbox"/>	3	1
Flow rate, ml/min	<input checked="" type="checkbox"/>	0.1	1
Equilibration time, min	<input checked="" type="checkbox"/>	0.76	1
Injection volume, µl	<input type="checkbox"/>	0.1	1
Wavelength, nm	<input type="checkbox"/>	5	1

Design of tests

	-3 °C temp.	+4.52 % conc.	-0.1 ml/min flow.	+1 min b.time.	+0.76 min eq.time.	+0.1 ml/min flow.	+3 °C temp.	-4.52 % conc.	-1 min b.time.	+1 min b.time.
Test #1	✓	✓	✓	✓	✓					
Test #2	✓	✓		✓	✓	✓				
Test #3	✓									
Test #4		✓		✓	✓	✓	✓			
Test #5							✓			
Test #6		✓	✓	✓	✓		✓			
Test #7								✓		
Test #8		✓								
Test #9									✓	
Test #10										✓
Test #11			✓							
Test #12						✓				
Test #13					✓					

28

ChromSword

ChromSword AutoRobust

Find critical parameters

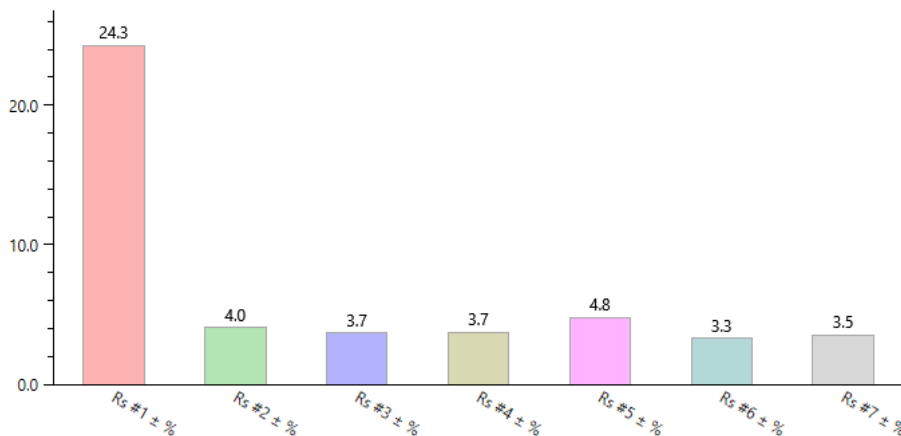
迅速かつ簡単に問題パラメーターを検出

Critical Runs and Parameters

Flow rate

254 ±2, 265 ±2, 254 Run #6 flow + 0.10

Deviation relative %



29

ChromSword

ChromSword AutoRobust

Resolution for all runs and pairs

Robustness report

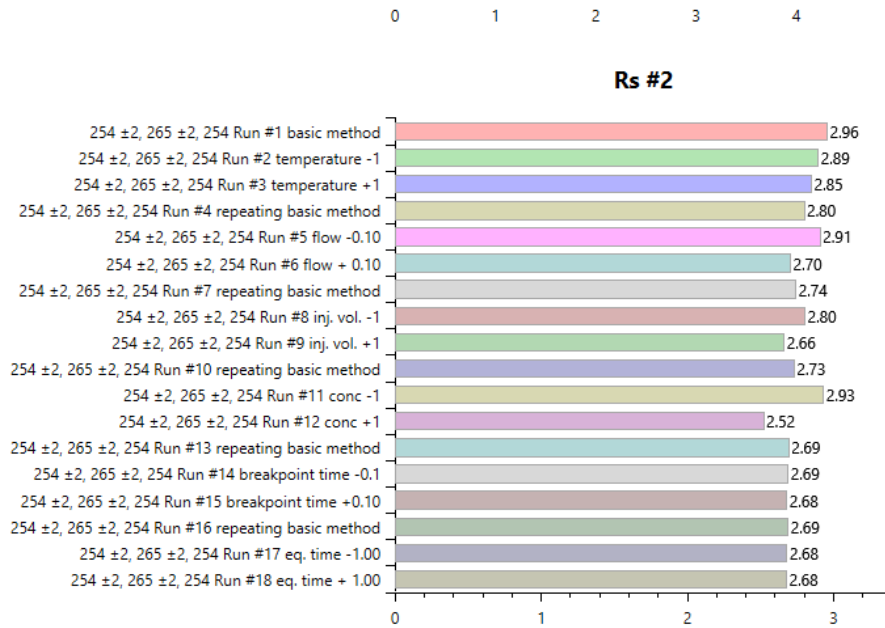
Pair resolution

Run Name	Peak Count	Rs #1	Rs #2	Rs #3	Rs #4	Rs #5	Rs #6	Rs #7
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #1 basic method	7	2.52	2.96	4.41	6.66	2.54	6.78	6.08
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #2 temperature -1	7	2.47	2.89	4.29	6.43	2.46	6.54	5.88
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #3 temperature +1	7	2.48	2.85	4.27	6.39	2.42	6.50	5.83
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #4 repeating basic method	7	2.43	2.80	4.19	6.25	2.37	6.37	5.71
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #5 flow -0.10	7	4.31	2.91	4.31	6.18	2.32	6.20	5.48
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #6 flow + 0.10	7	0.77	2.70	4.07	6.05	2.22	6.34	5.65
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #7 repeating basic method	7	2.40	2.74	4.07	6.04	2.29	6.17	5.52
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #8 inj. vol. -1	7	2.46	2.80	4.15	6.09	2.26	6.18	5.52
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #9 inj. vol. +1	7	2.32	2.66	3.99	5.89	2.24	6.07	5.45
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #10 repeating basic method	7	2.51	2.73	4.14	6.11	2.28	6.23	5.58
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #11 conc -1	7	2.80	2.93	4.43	6.31	2.07	6.28	5.66
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #12 conc +1	7	2.24	2.52	3.81	5.74	2.39	6.02	5.30
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #13 repeating basic method	7	2.47	2.69	4.08	5.99	2.23	6.11	5.46
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #14 breakpoint time -0.1	7	2.46	2.69	4.07	5.93	2.23	6.04	5.43
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #15 breakpoint time +0.10	7	2.46	2.68	4.04	5.98	2.21	6.09	5.44
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #16 repeating basic method	7	2.45	2.69	4.07	5.93	2.21	6.06	5.42
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #17 eq. time -1.00	7	2.45	2.68	4.04	5.91	2.21	6.04	5.40
254 ±2, 265 ±2, 254 Run #18 eq. time + 1.00	7	2.44	2.68	4.03	5.90	2.20	6.02	5.40
Mean	7.000	2.47	2.76	4.14	6.10	2.29	6.22	5.57
Std. Dev.	0.000	0.599	0.112	0.152	0.226	0.109	0.205	0.195
± %	0.0	24.3	4.0	3.7	3.7	4.8	3.3	3.5

30

ChromSword

ChromSword AutoRobust Resolution for all runs of a selected pair

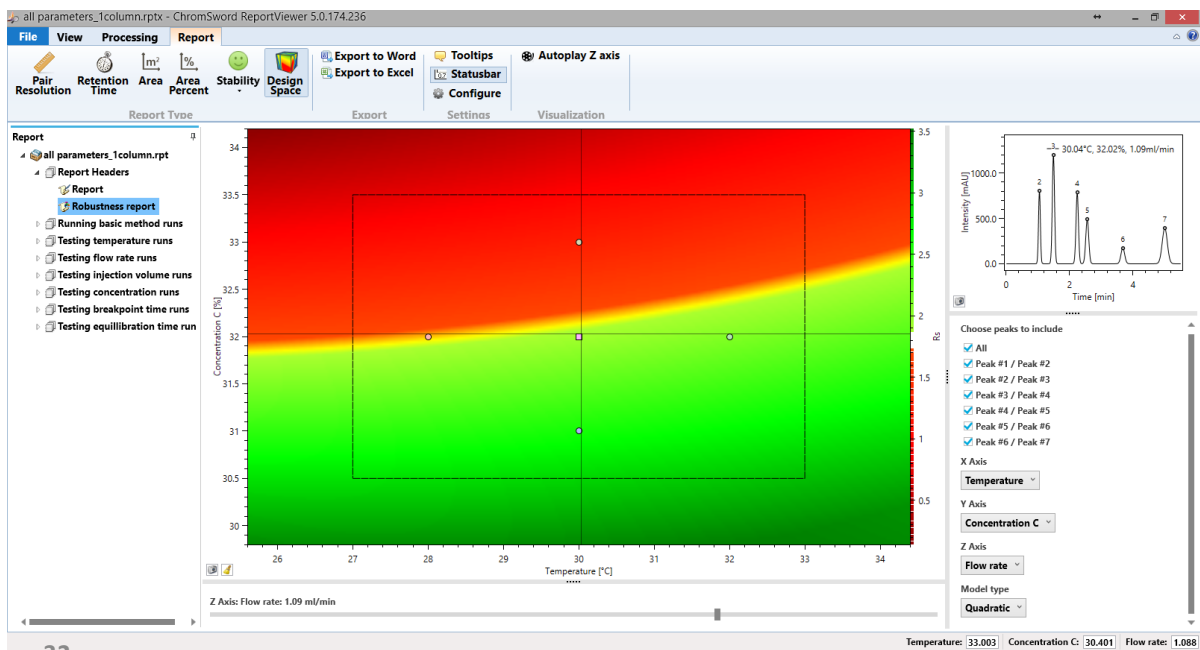


31

ChromSword

ChromSword AutoRobust Design space for all pairs

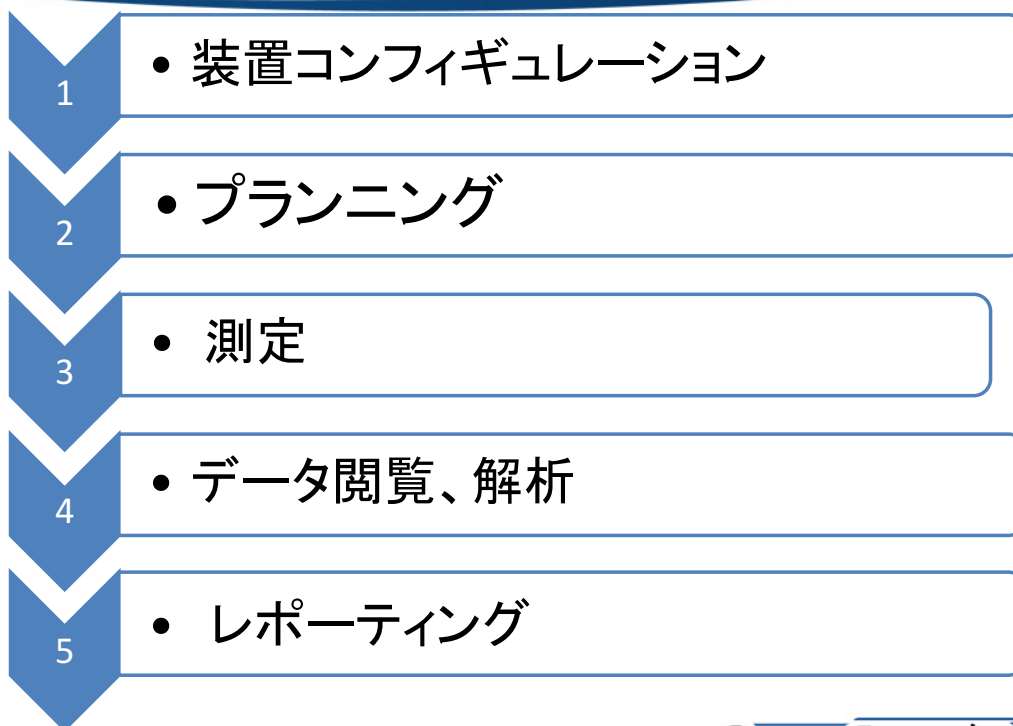
デザインスペースの活用



32

ChromSword

Straightforward procedure for all tasks and modules

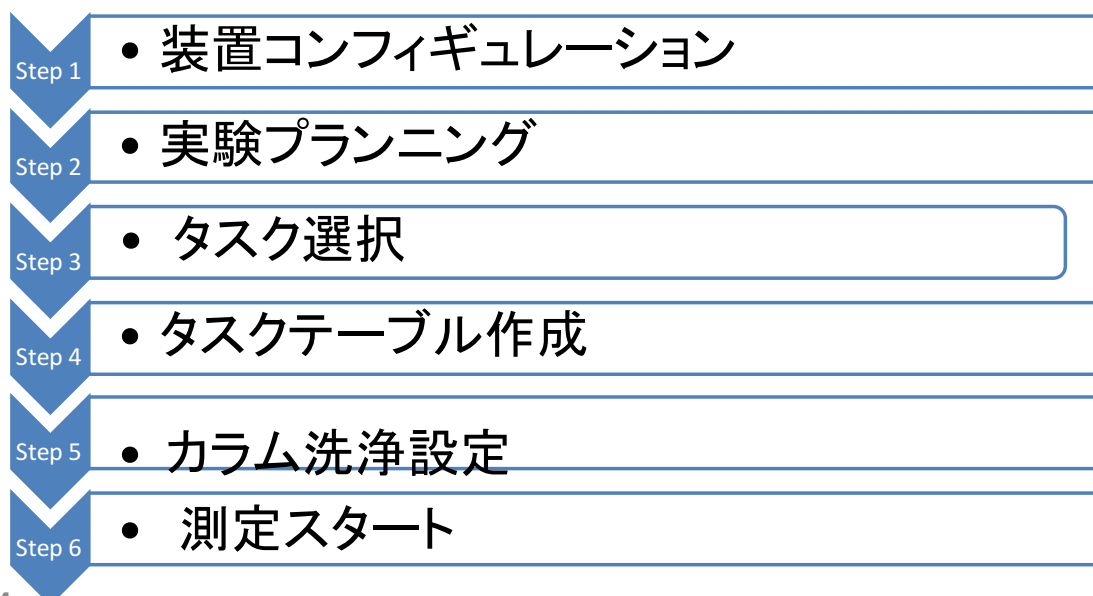


33

ChromSword 

Easy steps to create and start a project with the Project Assistant Wizard

アシスタントウィザードで誰でも簡単に実験プランニングを作成



34

ChromSword 

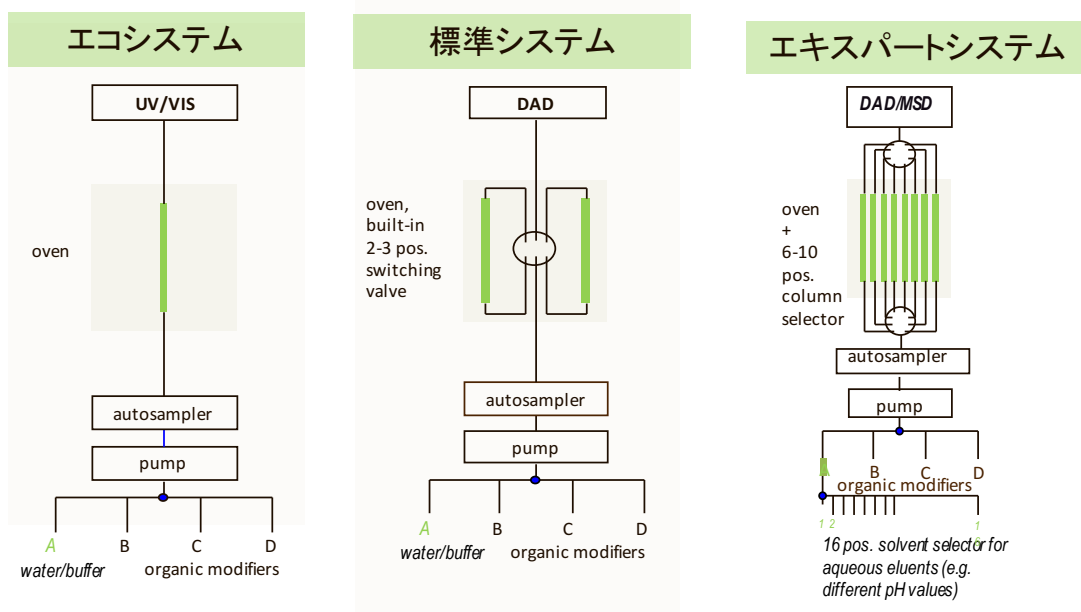
Step 1. Configure your instrument automatically



35

Instrumentation flexibility

目的に応じて様々なHPLCシステムを構築可能



36

Easy create instruments for routine analysis

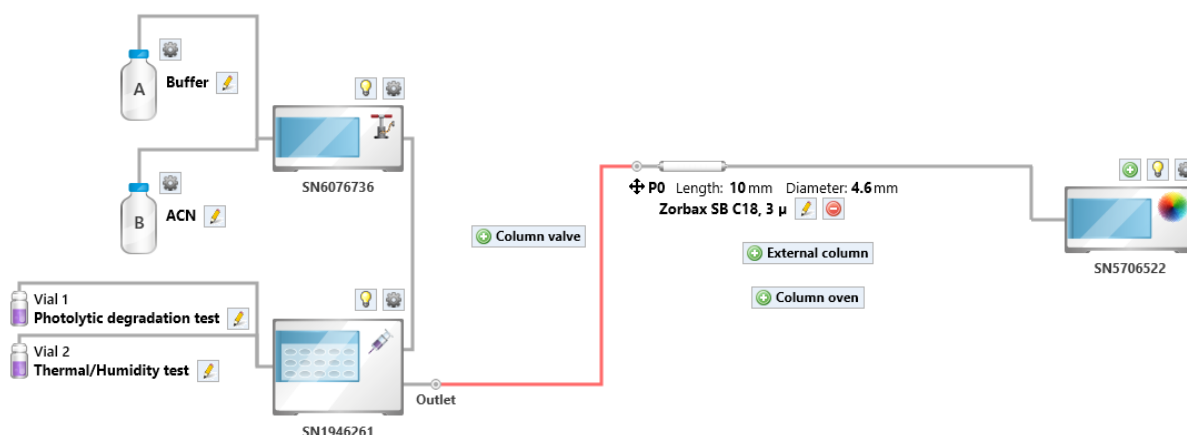
最小システム

- オートサンプラー
- UV or 多波長兼k種付き
- シングルカラム
- バイナリーポンプ

37

ChromSword

Configure new instrument graphically



38

ChromSword

Easy create powerful instruments for automated method development

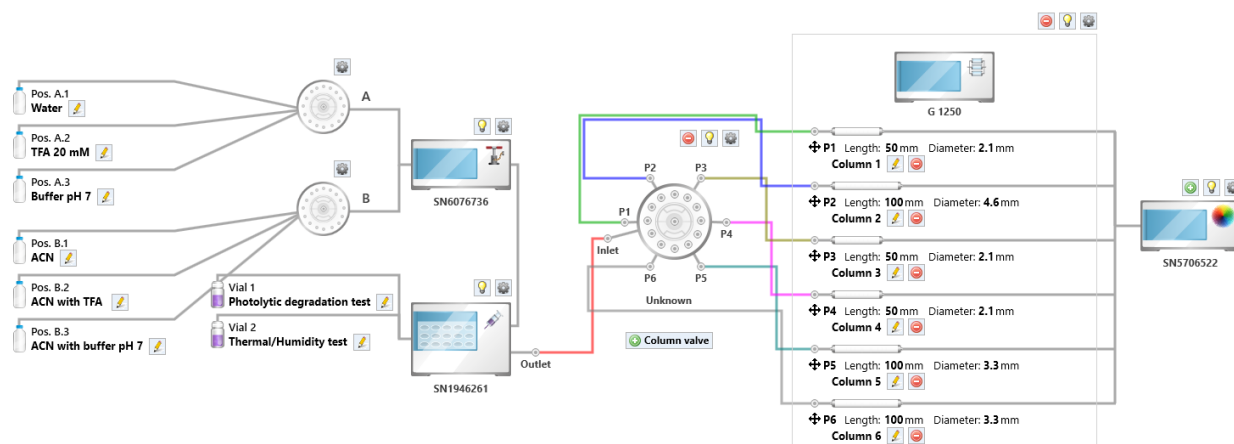
標準仕様

- ダイオードアレイ検出器
- 8本カラムシステム(バルブ)
- バイナリー or クォータナリーポンプ
- 外付けスイッチングバルブ-バッファー用
(A.1 – A.12 種類バッファー)
- 外付けスイッチングバルブ-有機溶媒用
(B.1-B.12 種類有機溶媒)
 - 溶媒 C
 - 溶媒 D

39

ChromSword

Configure new instrument graphically

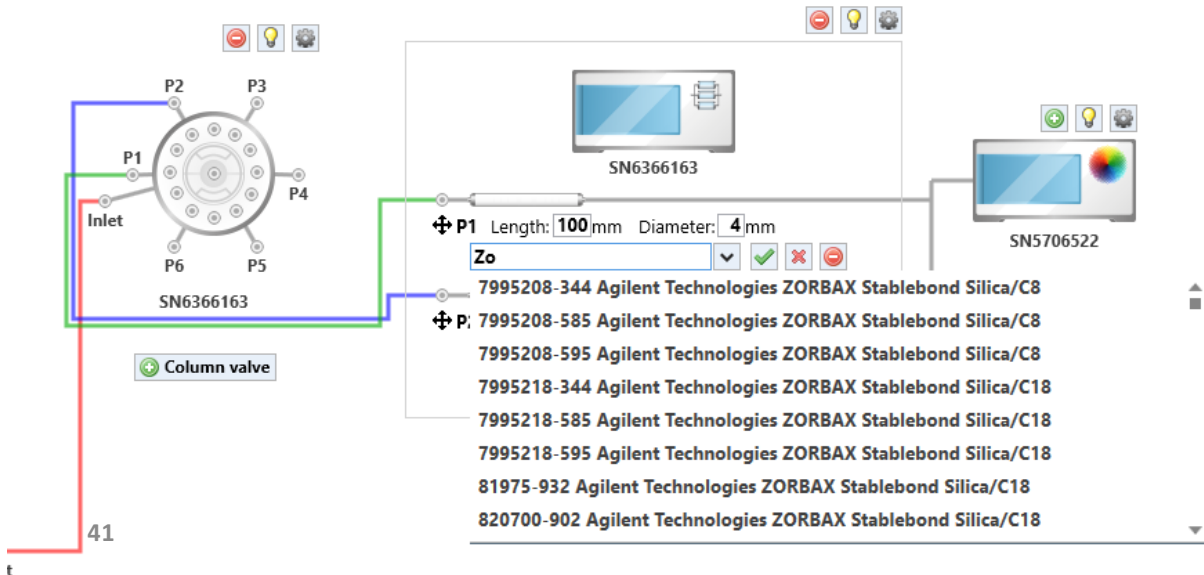


40

ChromSword

ChromSwordAuto 5

簡単にカラム名と情報をカラムデータベースより自動で取得、登録



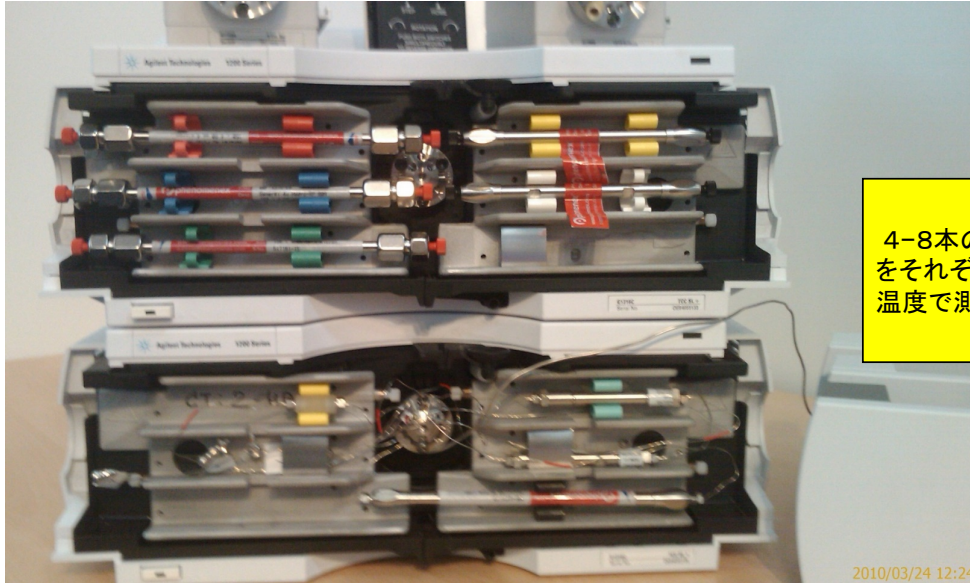
Super powerful instruments for automated method development

エキスパート仕様

- 2つの検出器 - フォトダイオードアレイ検出器 + 蛍光検出器
- 2つのカラムコンパートメント、8本カラムセット可能
- 外付け6ポジション、スイッチングバルブ、カラムコンパートメント用
- **16本カラム**
- バイナリー or クォータナリーポンプ (内蔵パージバルブ)
- 外付けスイッチングバルブ-バッファー用
- (A.1 - A.12 種類バッファー)
- 外付けスイッチングバルブ-有機溶媒用
- (B.1-B.12 種類有機溶媒)
- 溶媒 C
- 溶媒 D

UHPLC instrumentation: 2 Thermostates+ 2 Switching valves

2つのサーモスタット+2つのスイッチングバルブ

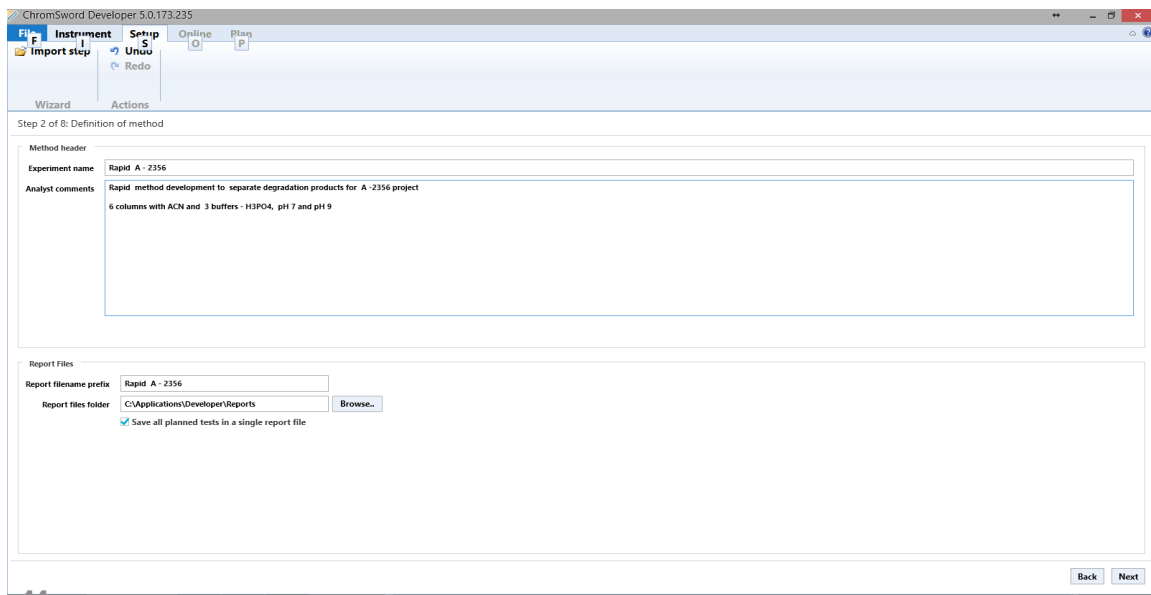


43

ChromSword

Step 2. Describe you project

実験プランニング



ChromSword

Step 3. Choose task

タスク選択

Conditions of pump

Development task Rapid optimization
 Sample profiling. Isocratic optimization
 Sample profiling. Isocratic and Gradient optimization

Concentration limited

Min. conc., %

Max. conc., %

45

ChromSword 

Step 5. Quickly create a plan to test different combinations and samples

誰でも直ぐ簡単に、様々な条件でサンプル測定プランニングが可能

Wizard Exclude solvent peak Actions

Step 5 of 8: Planned tests

#	Enabled	Buffer	Solvent	Vial	Column	Flow rate, ml/min	Dw. time, min	Zero time, min	Eq. time, min	Temp., °C	Inj.vol, µl	Rejection level	Int.delay, min	WL, nm
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Select a value	Select a value	Select a value	Select a value	1	0	0	0	30	1	0	0	220
2	<input checked="" type="checkbox"/>	A2 H3PO4 20 mM	B1 ACN	Vial 1: Photolytic degradation test	P1: 100mm x 4mm Column 1	1	0.2	0.76	7.6	30	1	0	1.14	220

Add

- カラム
- 有機溶媒
- バッファー
- 流量
- 温度

46

ChromSword 

Step 6. Specify routine procedures only once

- カラム平衡化
- カラム洗浄、スリープモード(測定終了後)
- チャンネル洗浄(カラムやバッファ交換時)
- **必要時に応じて、自動的に行ってくれる**

47

ChromSword 

Start

測定開始(他の業務を遂行)

後はクロムソードが勝手に適切なメソッドを作成してくれる

or

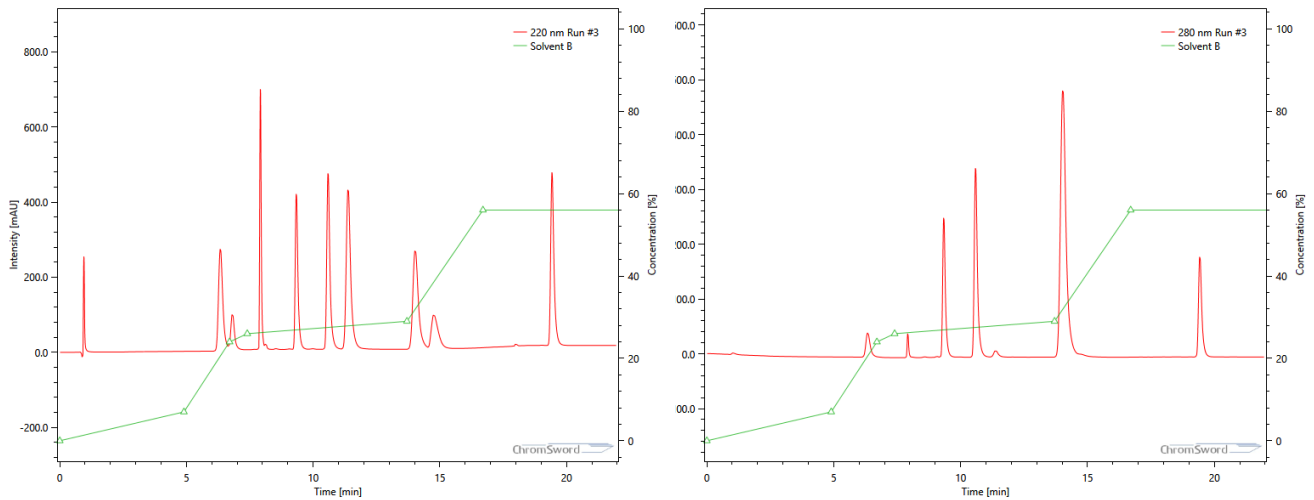
必要時に、システムのモニタリング、測定条件の変更を行う

48

ChromSword 

See more. View running chromatogram at any wavelength

いつでも好きな波長でクロマトグラムの閲覧が可能

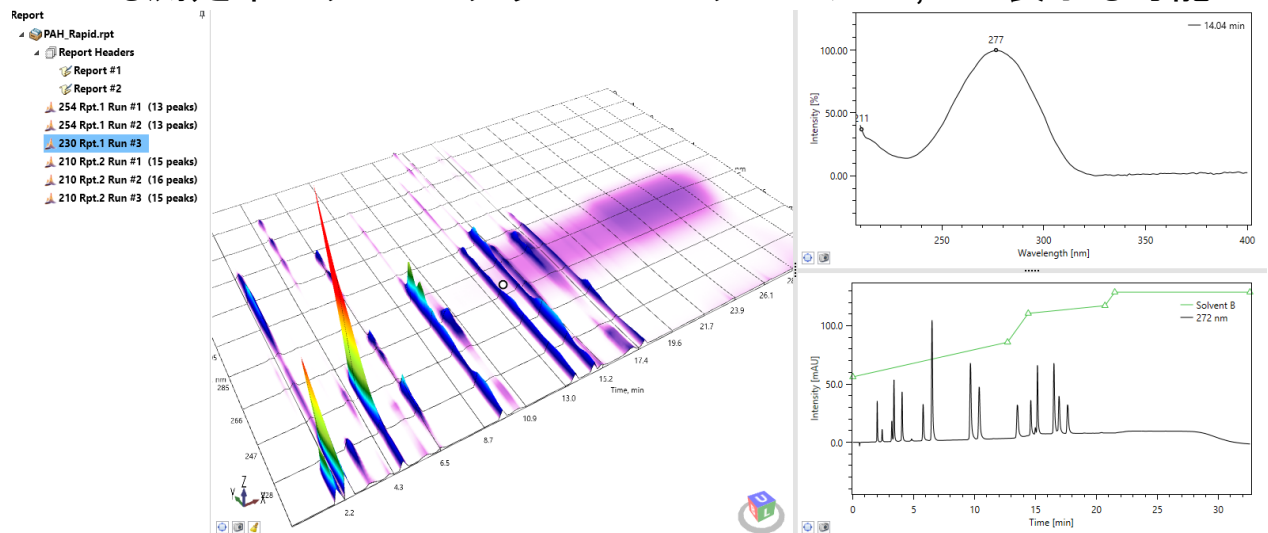


49

ChromSword

See more. View spectra, iso-plot and 3D plot of running chromatogram

いつでも測定中のクロマトグラムのスペクトルや2D, 3D表示も可能

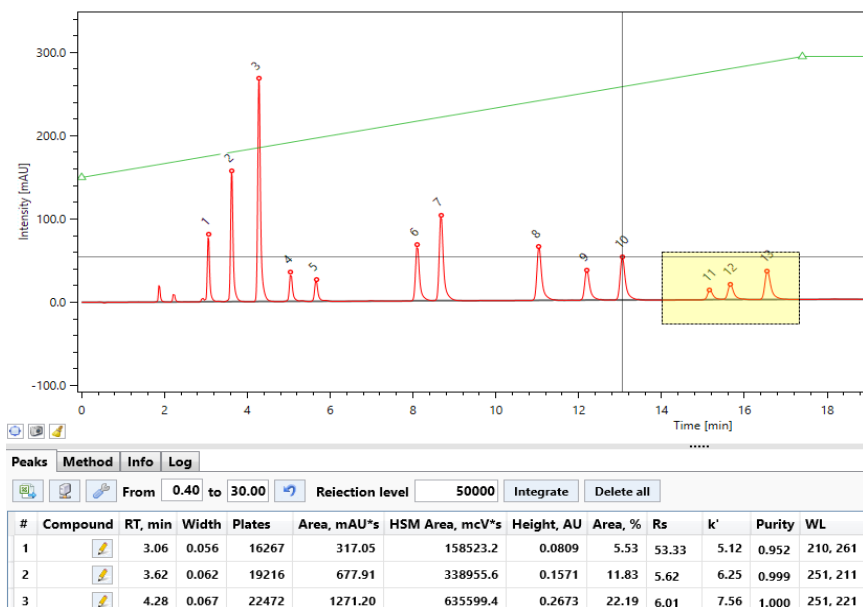


50

ChromSword

Process running chromatogram

いつでも簡単に測定中のクロマトグラムを閲覧、解析可能



51

ChromSword

Conclusion

ChromSwordAuto - 自動メソッド開発トータルソリューション

Data System - サンプル測定

Scout - メソッドスカウティング

Developer - メソッド開発

AutoRobust - 頑健性評価テスト

ReportViewer - データ閲覧、解析、レポート作成

52

ChromSword