

Synthese- und Rezepturoptimierung mit LABS/R

Bernd Winker, iCD.GmbH

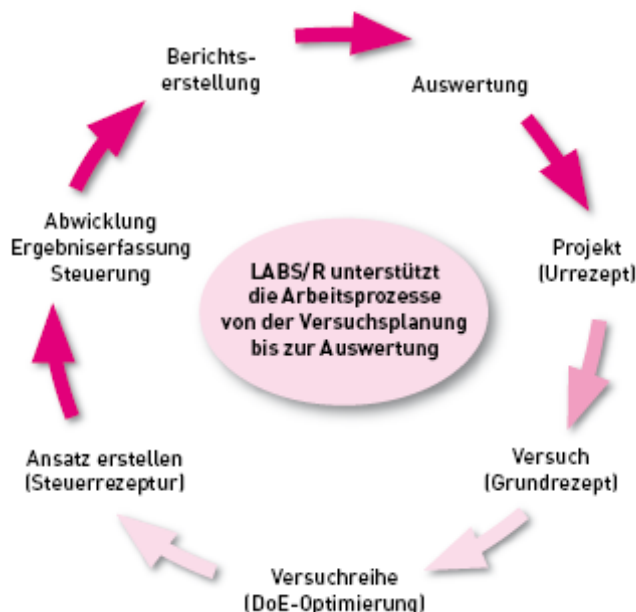
Ob in der kombinatorischen Chemie, galenischen Entwicklung oder Anwendungstechnik – häufig ist eine Vielzahl von Versuchsserien nötig, um die Ausbeute einer Synthese oder die Eigenschaften eines Produktes zu verbessern. Die Planung der Versuche auf Basis des vorhandenen Wissens, die Steuerung der Prozesse und die gesamte Dokumentation sowie die Zusammenfassung der Ergebnisse mit den entsprechenden Auswertungen ist oft zeitraubend, unvollständig oder sogar unmöglich.

Die aktuelle Release des LIMS LABS/Q[®] bietet als Option LABS/R die Möglichkeit, die Arbeitsprozesse von der Planung des Versuchs bis zur Auswertung zu unterstützen.

Projekt In einem ersten Schritt wird das Projekt mit dem Urrezept inkl. chemische Struktur aus Datenbanken wie z.B. von MDL, deren Anforderungen sowie Ziele beschrieben.

Versuch Zum Projekt können unterschiedliche Versuche erstellt werden. Der Versuch beschreibt detailliert, wie der Herstellprozess sowie die Ausprüfung durchgeführt werden soll. Dabei wird der Workflow anhand von Grundfunktionen, Grundoperationen sowie Prüfungsverfahren festgelegt. Zusätzlich werden die einzusetzenden Materialien/Chemikalien sowie Stoffgruppen z.B. unterschiedliche Katalysatoren mit den stöchiometrischen oder gravimetrischen Verhältnissen beschrieben.

Versuchsreihen Auf Basis des Versuchs sowie den vorhandenen Ergebnissen können mit Unterstützung der statistischen Versuchsplanung (DoE) Versuchsreihen angelegt werden. In den Versuchsreihen wird die Versuchsplanung für durchzuführende Experimente konkretisiert. Dabei werden die Versuchsparameter, einzusetzenden Geräte, die Chargen mit ihrer Reinheit festgelegt.



Ansatzabwicklung Auf Basis der Versuchsreihen werden dann die Ansätze erstellt. Die angebotenen Geräten (z.B. Syntheseautomaten, Prozessleitsysteme, Messgeräte) werden mit den notwendigen Informationen z.B. Steuerrezepturen, Probensequenzen versorgt. Sobald die Aufgaben an den Automaten durchlaufen, werden auch die Messwerte parallel vom LIMS übernommen. Auf Basis der erfassten Werte sowie deren grafischer Darstellung können dann zeitnah Entscheidungen getroffen werden, ob z.B. die Bearbeitung des Ansatzes beendet werden soll.

Auswertung/Berichtserstellung Das LABS/Q[®] verfügt über eine offene Reporttool Schnittstelle, welche dem autorisierten Anwender erlaubt, das von ihm bevorzugte Tool z.B. MS Office, Oracle-/Crystal-Reports sowie dem iCD eigenen Tool FreeForms zur Erstellung der Berichtsvorlage zu verwenden. Über Data Mining Tools sowie Funktionen im LABS/Q[®] sind einfache und gezielte Auswertungen möglich.

→ www.icd.eu

iCD. experts in laboratory software

Synthese- und Rezeptoptimierung
LABS/R

Freisetzungstests
LABS/DS

Methodenvalidierung
VALIDAT

LIMS
LABS/Q[®]

und mehr...

iCD. GmbH
Augustinusstr. 9d
50226 Frechen
+49 (0) 2234 96634-0
info@icd.eu
www.icd.eu

