

Bei Mensch und Software kommt es auf Kommunikation an

Mehr Licht fürs Team – mehr Tempo in der HPLC

Das Labor der Zukunft durchflutet mehr Licht, entlastet das Team von lästigen Routinearbeiten und gibt Forschung und Kreativität mehr Raum. Gleichzeitig interagieren Softwares stärker miteinander – und bringen zum Beispiel mehr Tempo in die HPLC-Methodenentwicklung.

Der Abzug als klassisches Element von Chemielaboratorien symbolisiert den Wandel in beeindruckender Weise: Man ist es gewohnt, ihn von Hand öffnen und schliessen zu können. Bei modernen Varianten tippt man einfach mit dem Fuss gegen einen fast unsichtbar unter dem Unterschrank integrierten Schalter – schon fährt der Frontschieber automatisch nach oben. Das ist ergonomisch, und die Hände des Laboranten bleiben frei, um im nächsten Moment mit dem Versuchsaufbau zu beginnen.

Alarm vom Abzug

Zwanzig Minuten später läuft vielleicht schon eine Reaktion. Aus Sicherheitsgründen lässt der Laborant den Frontschieber herunter. Nun öffnet er die beiden Seitenschieber des modernen Abzugs, um von dort letzte Temperaturnachre-

gelungen vorzunehmen. Dann möchte er sich für andere Arbeiten entfernen und lässt versehentlich die Seitenschieber offen. Doch der Abzug bekommt das über seinen Bewegungsmelder mit. Sogleich signalisiert er mit rot aufleuchtenden LED-Lampen und einem Alarmton: «Achtung, hier stimmt etwas nicht – bitte noch einmal zurück und alle Schieber schliessen!»

Der Laborant kommt der Aufforderung nach, entfernt sich nun endgültig und behält den Fortgang der Reaktion doch stets im Blick. Denn eine hygienisch einwandfrei in die Abzugsdecke integrierte Webcam, überträgt alles auf sein mobiles Endgerät – oder wahlweise auf einen PC an seiner nächsten Arbeitsinsel.

Auch die gesamte Anmutung des Abzugs wird smarter. Wirkt die klassische Ausführung eher

wie ein Gehäuse, fällt in Zukunft sehr viel mehr Tageslicht durch Seitenteile und Rückenwände aus Glas. Dieses stellt übrigens nicht zuletzt wegen seiner hohen Resistenz gegenüber Chemikalien einen Idealwerkstoff dar.

Für das Laborteam schafft das eine kommunikative Atmosphäre: Man sieht sich, verständigt sich einfacher und hilft sich unmittelbar. Und das lässt ganz allgemein den Gedanken und Ideen mehr Freiraum.

Kommunikative Software

Eine bessere Verständigung steht auch bei der Software ganz oben auf der Tagesordnung. Das mag zuweilen etwas abstrakt wirken, wenn sich zum Beispiel in der Analytik immer mehr Geräte – wie Probenaufbereitungsroboter, Autosamplern

Hier präsentiert sich eine aktuelle Laboreinrichtung mit Tischabzügen inklusive geräumigen Unterschränken und Medienwänden an der Technischen Universität Hamburg auf 700 Quadratmetern.



© Köttermann



Ästhetische Gestaltung von Laboren der Ludwig-Fresenius-Schulen und der Technischen Universität Hamburg: klar und sachlich, farblich dezent akzentuiert

und Detektoren – miteinander zu riesigen «Strassen» vernetzen. Natürlich bringt das Tempo, und am Ende stehen standardisierte und gut handhabbare Protokolle der Ergebnisse. Aber wo bleibt der nächste qualitative Riesenschritt?

Er könnte darin bestehen, dass in weitreichende Chromatographiedatensoftware-Pakete (CDS) zunehmend Scouting- oder Methodenentwicklungsverfahren für die HPLC integriert werden.

Konzepte für die Unterstützung der Methodenentwicklung

Scouting-Softwares screenen stationäre und mobile Phasen für eine bestimmte chemisch-analytische Fragestellung, erstellen aus einer Vielzahl von Chromatographie-Experimenten

einen Datenreport und ermöglichen eine automatisierte und effizientere Methodenoptimierung. Ziel sind meistens sauber basisliniengrenzte Peaks. Darüber hinaus ist ein Up- oder Downscaling bestehender HPLC-Methoden möglich (z. B. Method Scouting Solution und Method Transfer, Shimadzu, Duisburg).

Scouting-Softwares simulieren allerdings keine Chromatogramme. Dies ist den «echten» Methodenentwicklungsprogrammen vorbehalten, zum Beispiel der Software Drylab (Molnár-Institut, Berlin). Sie kann nach Vorgabe einiger experimenteller Chromatogramme (typischerweise 12) eine Vielzahl neuer Chromatogramme (> 1000000) unter veränderten Bedingungen berechnen (andere Fliessmittelzusammensetzung, andere organische Komponente, anderer pH-Wert etc.)

und die optimale Trennmethode finden. Auch deren Test auf Robustheit gegenüber kleinen Abweichungen von den Ideal-Bedingungen, wie sie im Alltag erfahrungsgemäss vorkommen können, ist Teil des Leistungsumfangs. Schliesslich lässt sich in einem nächsten Schritt die Analysenzeit minimieren, und am Ende wird die Gesamtheit aller Ergebnisse in einem sogenannten «Knowledge Management Document» (KMD) für das eigene Laborteam wie für Aussenstehende (z. B. Behörden) nachvollziehbar zusammengestellt.

Während Drylab immer von experimentellen Chromatogrammen ausgeht und die chemischen Strukturen der Analyten unberücksichtigt lässt, leitet das Methodenentwicklungsprogramm ChromSword (Dr. Galushko Software Entwicklung GmbH, Mühlital) aus eben jenen chemischen

Platform for Chemistry,
Pharmacy and Biotechnology

ILMAC

19. bis 21. Oktober 2021 | Messe Basel | ilmac.ch



NEU parallel zur ILMAC
MUT
19. – 21.10.2021



Jetzt registrieren:
www.ilmac.ch/registration



Das Labor der Zukunft darf Spass machen – erfolgreich dafür auf Messen getestet: Off-lable-use eines Liquid-Handlers als Barmixer.

Strukturen in Kombination mit bekannten charakteristischen Säulenparametern aus einer umfangreichen Datenbank alles her. Das ergibt geeignete chromatographische Startbedingungen ohne einen einzigen HPLC-Lauf! Auf dem

Stand der Technik lässt sich damit ein vollroboterisiertes System betreiben: Die Software schlägt neue chromatographische Bedingungen vor, ein entsprechender Datensatz wird an die HPLC-Hardware geschickt, und die Ergebnisse neuer Läufe erhält wiederum die Software als zusätzlichen Input für die weitere Optimierung.

Intensivierte Zusammenarbeit

Aktuell wächst alles zusammen. Scouting-Software kommuniziert mit Methodenentwicklungsprogrammen (z. B. Shimadzu mit DryLab oder mit der ACD/Method Selection Suite von Advanced Chemistry Development, Toronto). DryLab wiederum lässt sich mit leistungsfähigen CDS-Paketen verbinden, unter anderem mit der Analytik-Software Empower (Waters, Milford/Eschborn). Dies hat besonders weitreichende Konsequenzen. Denn Empower setzen nicht nur Anwender der HPLC- und UPLC-Systeme von Waters ein. Diese Analytik-Software kombiniert man gern auch mit vielen anderen Systemen (z. B. von Agilent). Die HPLC-Methodenentwicklung scheint, gegenüber klassischen «Trial-&Error»-Verfahren, durch Software-Integration systematischer und schneller zu werden.

Ilmac Basel 2021

Dauer:

Dienstag, 19. Oktober, 9.00 bis 17.00 Uhr
Mittwoch, 20. Oktober, 9.00 bis 18.30 Uhr
Donnerstag, 21. Oktober, 9.00 bis 17.00 Uhr

Ort:

Messe Basel, Halle 1.0

Veranstalter:

MCH Messe Schweiz (Basel) AG
info@ilmac.ch
www.ilmac.ch

Ob offeneres Design für das Labor-Team oder unterschiedliche Software-Tools für analytische Aufgabenstellungen – stets führt eine intensivierte Kommunikation auf die nächste Entwicklungsstufe. Dasselbe gilt für die Besucher der diesjährigen Ilmac in Basel. Sie begutachten die obigen Entwicklungen, vergleichen, diskutieren darüber und optimieren auf dieser fundierten Informationsbasis ihr eigenes Labor.



Bachelor of Science in Medizininformatik

Der schweizweit exklusive Bachelor-Studiengang an der Schnittstelle von Medizin, Gesundheit und Informatik.

Nächste Infoveranstaltung am **24. Juni 2021**.
Wir freuen uns auf Ihre Teilnahme!



Daten, Infos und Anmeldung:
bfh.ch/medizininformatik