

Massgeschneiderte Strategien für die Laborautomatisierung

Zur Verbesserung der Effizienz, Reproduzierbarkeit und Sicherheit



METTLER TOLEDO

Inhaltsverzeichnis

Einführung

Fazit und weiterführende Literatur

1. Schrittweise Annäherung an die Automatisierung:

Lassen Sie manuelle Prozesse hinter sich

2. Implementierung der Automatisierung:

Skalierbare Lösungen für echten Nutzen

2.1 Produktivität: Skaleneffekte erreichen

2.2 Konsistenz: Steigerung der Wiederholbarkeit

2.3 Ergonomie: Bessere Prozesse durch Automatisierung

3. Softwarebasierte Automatisierungsoptionen

Für konforme Instrumente und Daten

3.1 Automatisierung von individuellen Prozessen

3.2 Softwaregesteuerte Automatisierung von Arbeitsabläufen



Klicken Sie auf die Glühbirnen und entdecken Sie mehr!



Einführung

Automatisierung – die Anwendung eines technologischen Ersatzes zur Durchführung von zuvor manuell ausgeführten Vorgängen – wird in modernen Laborumgebungen immer häufiger. Obwohl sie normalerweise als umfassende, softwaregestützte High-End-Lösung konstruiert wird, mit der vollständige Analysen ohne Eingriffe des Personals durchgeführt werden können, kann sie unterschiedliche Lösungen umfassen. Diese reichen von Optionen der „Prozessautomatisierung“ mit Einzelschritten bis hin zu Konfigurationen der „Automatisierung von Arbeitsabläufen“, die eine Abfolge von Massnahmen durchführen können und die Erfassung sowie Auswertung von Daten umfassen.

Die Automatisierung von einzelnen Prozessen, deren Ausführung andernfalls sehr aufwendig, subjektiv und fehleranfällig wäre, kann in routinemässigen Abläufen ebenso leistungsstark sein wie modernere Instrumente für speziali-

sierte Umgebungen. Einer der bedeutendsten Vorteile der Automatisierung liegt darin, dass der Einfluss der Arbeitsweise einzelner Mitarbeiter reduziert wird, was die Konsistenz zwischen Laboren verbessert und besonders bei Ringversuchen oder Kollaborationen mehrerer Standorte oder Institutionen von Bedeutung ist.

In diesem Leitfaden präsentieren wir Anregungen im Hinblick auf Geräte und Software, die meistens nützlich sind, u. a. in Bezug auf Zeiteinsparungen, Reproduzierbarkeit, Potenzial bei Kollaborationen, Datensicherheit und Übersicht über Anlagen. Des Weiteren sprechen wir über Wartungsoptionen zur Optimierung der Verfügbarkeit und von Wartezeiten.

Die aufgezeigten Ressourcen sind zeitlos, momentan kann ihre Implementierung allerdings zusätzliche Vorteile bieten, da COVID-19 uns eine schnelle Anpassung an die „neue Normalität“ abverlangt.



1. Schrittweise Annäherung an die Automatisierung

Lassen Sie manuelle Prozesse hinter sich

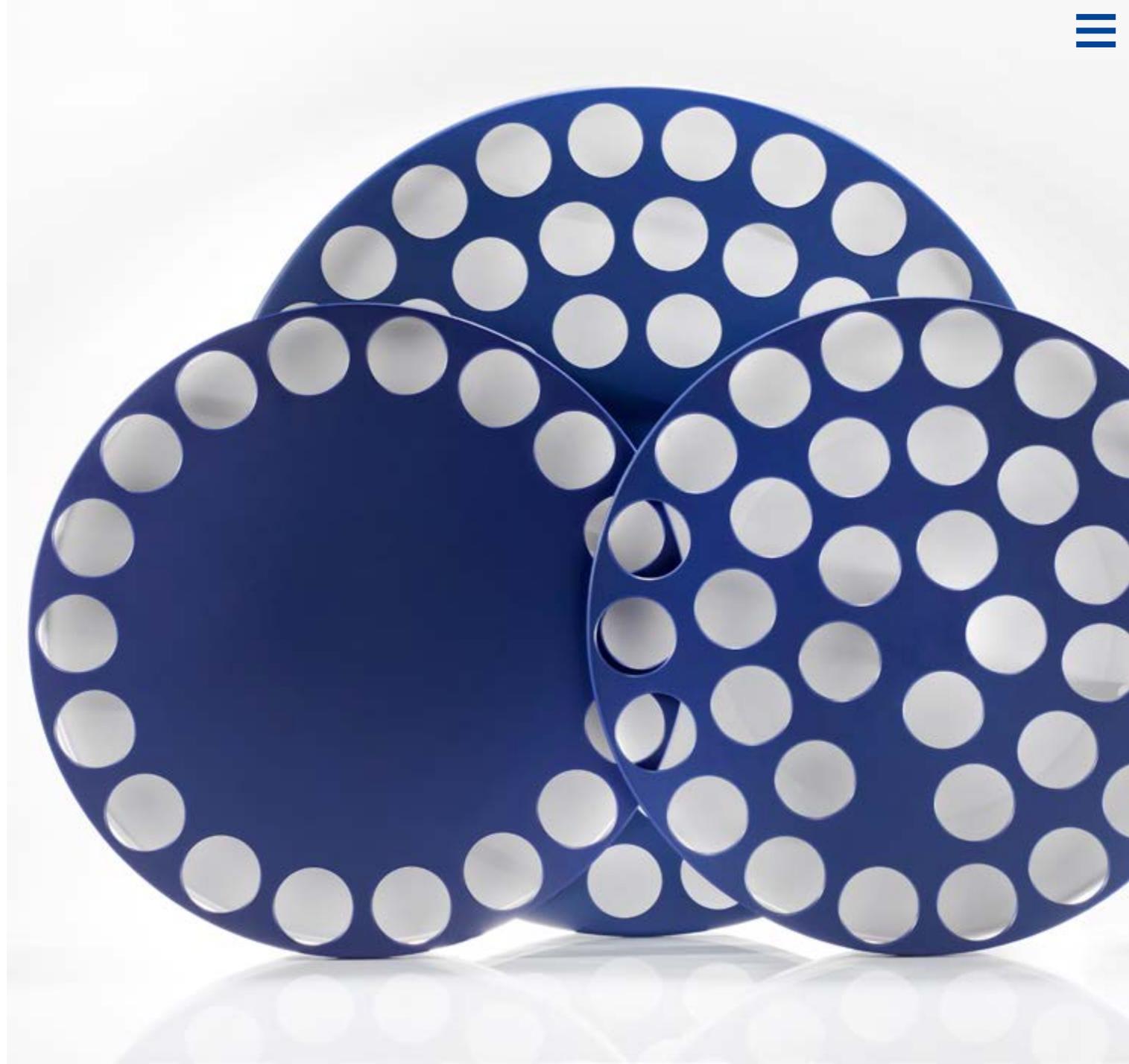


Wir bringen Automatisierung ins Labor

Die Strategien zur Laborautomatisierung reichen von schrittweise bis umfassend. Prinzipiell soll die Automatisierung jedoch folgende Vorteile bieten:

- Vereinfachung von Arbeitsabläufen
- Produktivitätssteigerung
- Verbesserung von Qualität und Reproduzierbarkeit experimenteller Resultate
- Unterstützung der Konformität mit Vorschriften und Standards
- Steigerung der Sicherheit von Mitarbeitern oder Schutz von Proben vor Veränderung oder Kontaminierung
- Ermöglichung von Experimenten oder Datenerfassungen, die andernfalls schwer durchzuführen oder unmöglich wären, zumindest mit dem Präzisionsgrad, den die Automatisierung bietet

Automatisierung kann ausserdem das Sammeln und/oder Teilen von Daten aus der Ferne erleichtern, was zunehmend an Bedeutung gewinnt, z. B. im Hinblick auf die Widerstandsfähigkeit gegen COVID-19.

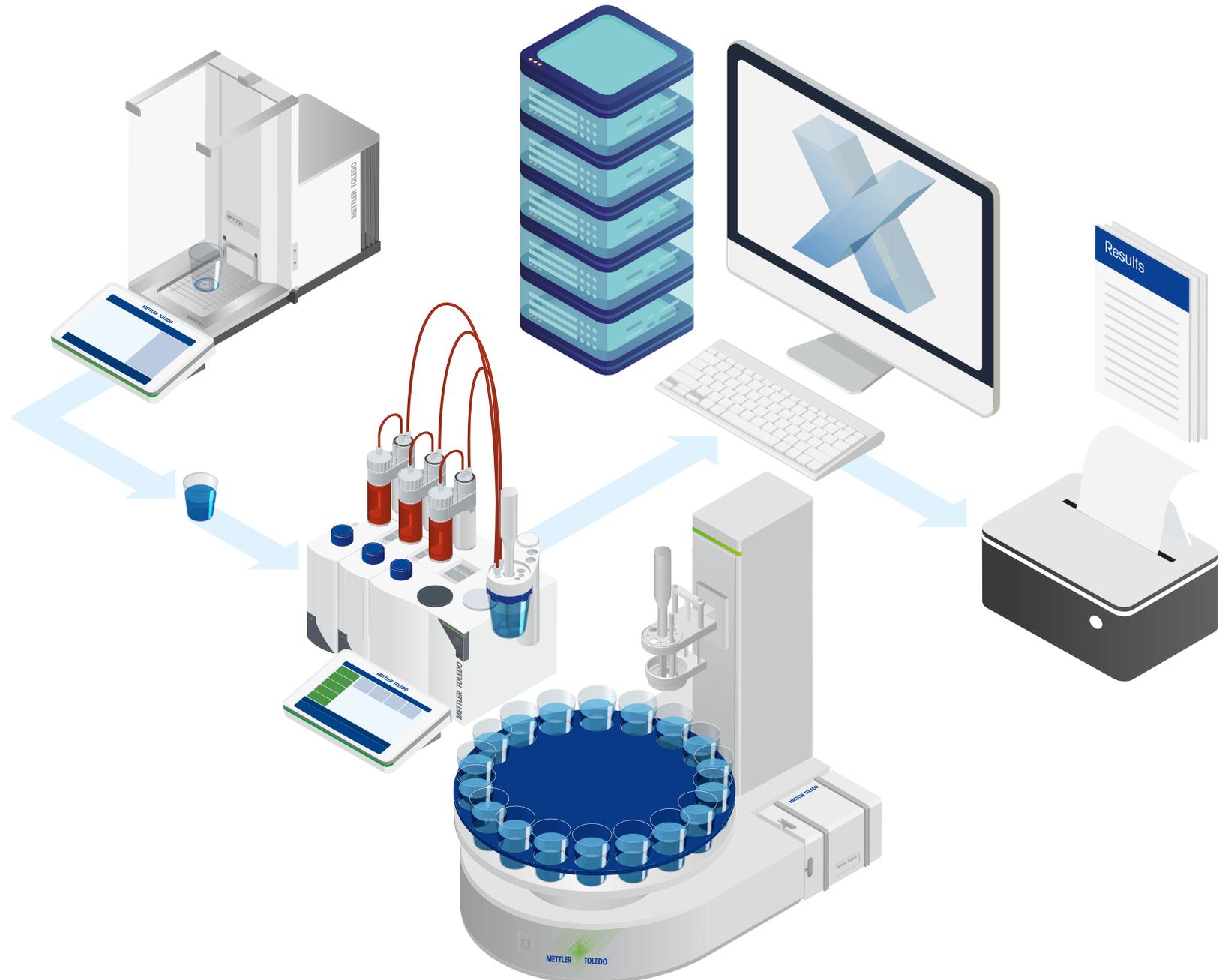


Implementierung von Automatisierung: Die Strategien „Prozess“ und „Arbeitsablauf“

Generell führt Automatisierung zu einer effizienteren Nutzung des Platzes und/oder der Ressourcen. Sie kann entweder zur Beschleunigung individueller Prozesse beitragen oder den Bedarf an Bediener Eingriffen während eines Arbeitsablaufes reduzieren. Zudem bietet sie den Vorteil, dass die Produktivität aufrechterhalten wird, während das Risiko von COVID-19-Übertragungen sinkt.

Holistische Automatisierung (von Arbeitsabläufen)

Wenn viele Proben oder Parameter zeitgleich kontrolliert oder ausgewertet werden müssen, führt die Automatisierung ganzer Arbeitsabläufe zu einer Produktivitätssteigerung, einer Reduktion der ergonomischen Belastungen und des Kontakts mit Giftstoffen sowie einer Erleichterung der Konformität und Auditbereitschaft. Klicken Sie für weitere Informationen über die schrittweise Automatisierung auf die Symbole rechts.





2. Implementierung der Automatisierung

Skalierbare Lösungen für echten Nutzen



Automatisierung und ihre Vorteile

Auch ohne Probenwechsler lassen sich einzelne Schritte eines Arbeitsablaufs mithilfe von einfachen Geräten, Peripheriegeräten oder vorprogrammierten Methoden, intelligentem Zubehör, Software etc. automatisieren. Bei der Probenvorbereitung und -analyse sowie der Datenerfassung, -übertragung und -auswertung handelt es sich um Vorgänge, die von Lösungen zur Prozessautomatisierung profitieren können. Die Vorteile sind zahlreich, lassen sich aber grob in Gruppen einteilen: Verbesserungen der Produktivität, Verbesserungen der Konsistenz, Verbesserungen der Ergonomie und Verbesserungen der Sicherheit.

Labors, in denen schwerpunktmässig Aufgaben wie Screening mit hohem Durchsatz, kombinatorische Chemie, automatische klinische und analytische Tests, Diagnosen etc. durchgeführt werden, würde es ohne die moderne Laborautomatisierung hingegen gar

nicht geben. Komplexe Automatisierungstechnologien liefern jedoch mehr Vorteile und ebnen so nicht nur den Weg für erhebliche Verbesserungen in puncto Effizienz, Reproduzierbarkeit und Sicherheit, sondern auch hinsichtlich der Erfassung grosser komplizierter Datensätze, die andernfalls nicht möglich wäre, zumindest bei dem gleichen Mass an Präzision, Genauigkeit, Sicherheit oder Geschwindigkeit.

In diesem Kapitel zeigen wir verschiedene Möglichkeiten für die Automatisierung von Wäge-, Dosier- und Liquid-Handling-Prozessen; Analyseprozessen; und der chemischen Synthese, v. a. was die Verbesserung der Produktivität, der Qualität und der Reproduzierbarkeit von Resultaten und die allgemeine Ergonomie anbelangt.



2.1 Produktivität: Skaleneffekte erreichen

Ein wichtiger Effekt der Automatisierung ist die Steigerung der Prozesseffizienz. Die Automatisierung kann nur einzelne Schritte oder eine ganze Abfolge von Aktivitäten umfassen und durch die Auswahl geeigneter Geräte, Zubehörteile und Software erreicht werden.

2.1.1 Automatisierung von zeitaufwendigen manuellen Prozessen

Bestimmte Vorgänge sind sowohl zeitaufwendig als auch kompliziert in der Ausführung und erfordern ein hohes Mass an Präzision, sodass der Austausch eines manuellen Geräts durch ein automatisches von erheblichem Vorteil sein kann. Hierzu zählen Wägeverfahren mit geringen Mengen oder anspruchsvollen Substanzen – wie z. B. im Fall von Standardvorbereitungen, die möglicherweise das Dosieren von Flüssigkeiten sowie von Feststoffen erforderlich machen.



Automatisierte Lösungsvorbereitung

Obwohl eine empfindliche Analysenwaage eine praktikable Option darstellt, wird die Vorbereitung von Lösungen und Standards mit automatisierten Geräten erleichtert, die eine Substanz von Interesse mit hoher Genauigkeit dosieren. Verlassen Sie sich auf Präzisionsinstrumente und sorgen Sie für eine sorgenfreie Dosierung von geringen Probenmengen und somit für schnellere Prozesse und eine gesteigerte Reproduzierbarkeit.



2.1.2 Schrittweise Automatisierung von Vorgangsgruppen

Wenn ähnliche Vorgänge gleichzeitig oder nacheinander ausgeführt werden müssen, sorgen Zubehör, Geräte und Automatisierungssysteme für kürzere Wartezeiten bis zum Ergebnis.

So gewährleistet beispielsweise ein automatisierter Küvettenwechsler die Erfassung einer Abfolge von Absorptionsmessungen am [Spektralphotometer](#), ohne dass das Instrument neu beladen werden muss oder Küvetten zwischen den Messungen gereinigt werden müssen. Ein Instrument zur Schmelz- oder Tropfpunktbestimmung, in das mehrere Kapillaren oder Probennippel

eingesetzt werden können, gewährleistet die gleichzeitige Beurteilung von Parallelproben mit der gleichen Methode und den gleichen Beurteilungsparametern.

Dementsprechend geben [Geräte zur Handhabung von Flüssigkeiten](#) wie Mehrkanalpipetten oder halbautomatische Systeme mit hohem Durchsatz (z. B. BenchSmart™ 96 oder Liquidator 96™) Bedienern die Möglichkeit zur Übertragung oder Mischung von 8, 12, 96, oder 384 Wells in einem einzigen Vorgang. Jede dieser Lösungen vereint Reproduzierbarkeit mit Effizienz für ein bestimmtes Verfahren bzw. eine bestimmte Messung.



2.1.3 Flexible Automatisierung für einen höheren Durchsatz

Bei längeren Abfolgen wiederholter Handlungen können Lösungen zur Automatisierung des Arbeitsablaufs zu Vorteilen führen – wie z. B. bei der Integration eines Autosamplers für die Zuführung vieler Proben zu demselben Gerät, wenn identische oder ähnliche Versuche durchgeführt werden.

Diese Arbeitsabläufe können ein Instrument oder mehrere Instrumente umfassen und werden mithilfe von in Laborsoftware programmierten SOPs gesteuert. Die Software kann Daten selbst archivieren oder in ein LIMS integrieren. Für die Standardisierung von Misch- und Reinigungsschritten zwischen Bestimmungen können Protokolle entwickelt werden, welche die Reproduzierbarkeit zusätzlich steigern; Daten werden zusammen mit vollständigen Metadaten erfasst, wodurch

sichergestellt wird, dass zu unterschiedlichen Zeitpunkten durchgeführte Messungen vergleichbar sind und entscheidende Details nicht verloren gehen.

METTLER TOLEDOS [InMotion™ Autosampler](#), der mit pH-Messgeräten, Dichtemessgeräten und Refraktometern, Titratoren und UV/VIS-Spektralphotometern der Excellence-Reihe verbunden werden kann, bewältigt mühelos Vorgänge mit hohen Durchsätzen, die von der [LabX® Software](#) geleitet werden. Der Probenwechsler kann 15 – 303 Proben aufnehmen, die vor Durchführung der Messungen durch ein integriertes Zusatzgerät gerührt werden können. CoverUp™ Deckel steigern die Sicherheit und minimieren Verdunstung sowie Umwelteinflüsse, während die Reinigung mit der PowerShower™ Kreuzkontamination zwischen Proben verhindert.



Automatisierte wasserspezifische Titration

Der [InMotion KF-Ofen-Autosamler](#) dient der Bestimmung des Wassergehalts und kann bis zu 26 volumetrische oder coulometrische Titrationen mit hochpräzisen Messungen von Proben mit einem Wassergehalt bis in den ppm-Bereich durchführen. Das Gerät eignet sich für Flüssigkeiten sowie Feststoffe und ist die branchenführende Lösung zur Extraktion von Wasserrückständen aus Feststoffen. Es verfügt über einen einzigartigen beheizten Transferschlauch zwischen der Probe und dem Titriergefäß, durch den eine Kondensation verhindert wird. Ausserdem bestimmt die Temperaturscan-Funktion die optimale Titrations-temperatur für jede Probe, während eine stabile Extraktionsnadel die Systemverfügbarkeit optimiert.



2.1.4 Automatisierung zeitaufwendiger Verfahren

Einer der bedeutendsten Vorteile der Automatisierung ist die Möglichkeit zur Erstellung von Datensätzen, die im Vergleich zu manuell erstellten Datensätzen umfangreicher sind – zumindest bei identischem Zeitrahmen. In einem Labor für die chemische Entwicklung wird zur Optimierung von Syntheseverfahren häufig ein grosser Aufwand betrieben, bevor ein Scale-up möglich ist. Mit sicheren und unbeaufsichtigten Experimenten rund um die Uhr, präzisen Kontrollen und kontinuierlichen Messungen beschleunigen [automatisierte Reaktoren](#) das Verständnis der Wissenschaftler von Reaktionen und Prozessen. Sonden für In-Situ-Reaktionsanalysen, z. B. via [Infrarot-](#) oder [Raman-Spektroskopie](#), bieten eine kontinuierliche Überwachung von entscheidenden Spezies der Reaktion.

Diese Tools geben Chemikern und Technikern die Möglichkeit, die möglichen Einflüsse verschiedener relevanter Parameter simultan zu untersuchen und gleichzeitig detaillierte Versuchsdaten aufzuzeichnen.

Durch eine Verfolgung des Fortschritts, der Initiierung, der Umsetzung, der Zwischenproduktbildung und der Endpunkte der Reaktion erhalten Wissenschaftler umfangreiche Datensätze, mit denen sie Tendenzen analysieren und leichter fundierte Entscheidungen für ein optimiertes Prozessdesign treffen können.

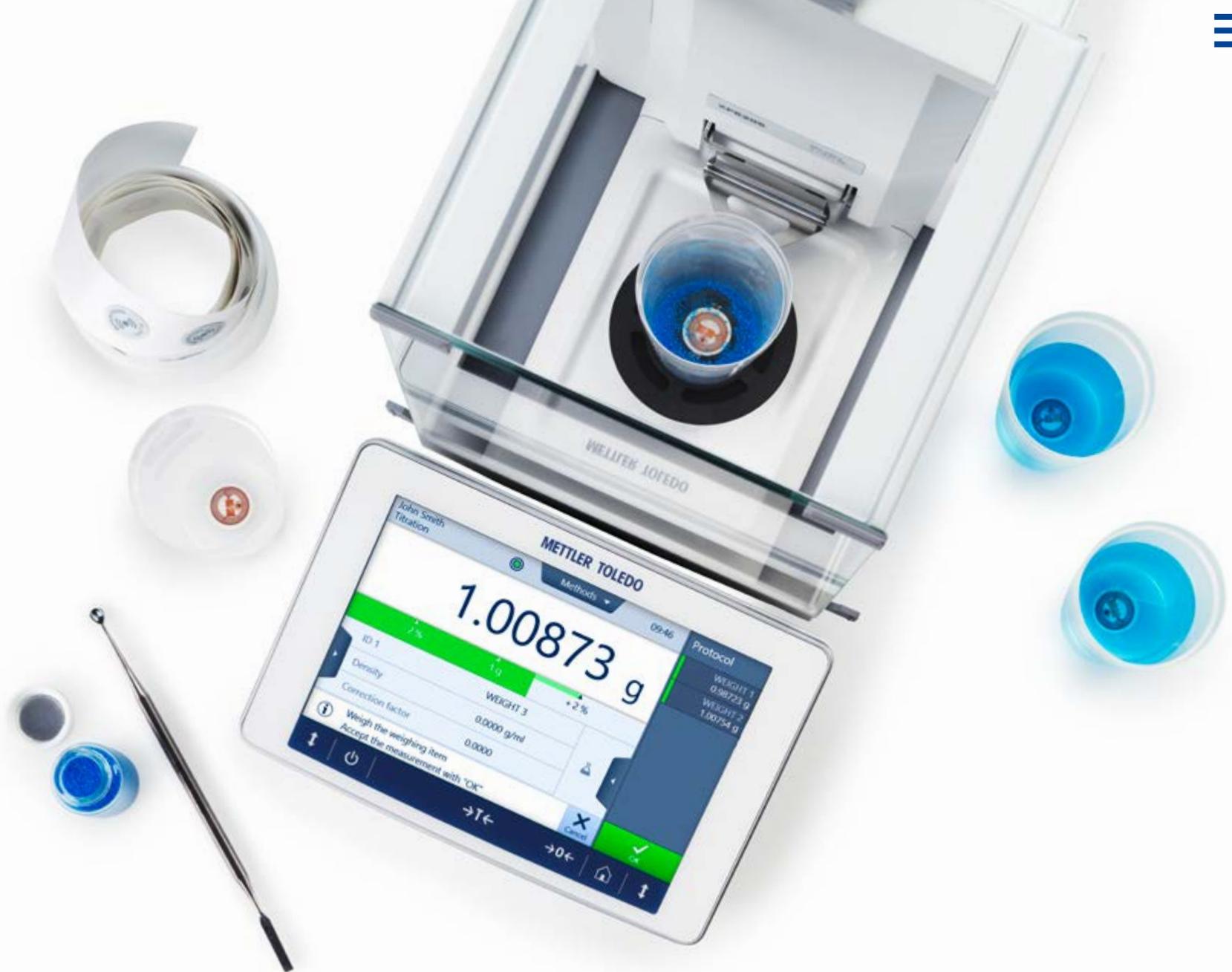
Mit sehr gut reproduzierbaren, regelmässig erfassten und inline analysierten Daten können Wissenschaftler Reaktionsendpunkte sicher erkennen, die Konsistenz zwischen Chargen sicherstellen und den Downstream-Durchsatz sowie die Produktqualität maximieren.



2.1.5 Automatisierte Probennachverfolgung

[Peripheriegeräte](#) können dabei helfen, den Informationsfluss zu optimieren. Beispielsweise können durch das Anschliessen eines Druckers an eine Waage oder andere Geräte direkt Reports erstellt werden.

Zusätzlich stellen Erweiterungen wie RFID-Tags oder Barcodes in Kombination mit Peripheriegeräten wie RFID- oder Barcode-Lesern ein automatisiertes Mittel dar, mit dem sichergestellt werden kann, dass identifizierende Details von Proben oder Reagenzien niemals verloren gehen. Beispielsweise können RFID-Tags auf Titrierbechern angebracht werden, um Proben mithilfe der [SmartSample™](#) Technologie von der Vorbereitung bis zur Analyse verfolgen zu können. SmartSample erleichtert ausserdem die Verdünnung von Proben und Standards bis zur richtigen Konzentration.



2.2 Konsistenz: Steigerung der Wiederholbarkeit

Instrumente und Software steigern nicht nur die Produktivität, sondern verringern auch den Einfluss von Bedienern bei der Probenvorbereitung und der Erfassung, Protokollierung und/oder Bewertung von Datensätzen. Durch die verbesserte Reproduzierbarkeit zwischen Replikaten, Chargen oder Standorten steigert eine Automatisierung das Vertrauen in die Gesamtgenauigkeit der Messungen oder Messreihen.

2.2.1 Automatisierung von zuvor manuell ausgeführten Prozessen

Eine effiziente Strategie zur Erreichung konsistenter Daten besteht darin, einen manuellen, subjektiven Prozesses in einen automatisierten, objektiven Prozess umzuwandeln. Beispiele hierfür sind die Verwendung von Geräten wie automatischen Titratoren, Feuchtigkeitswaagen beziehungsweise Moisture Analyzern oder [Schmelz- und Tropfpunktbestimmung](#) mit Videowiedergabe in Experimentabläufen. Diese Geräte enthalten einen Mechanismus

zur Erkennung einer chemischen oder physikalischen Veränderung in einheitlicher Form, wodurch unwahrscheinlicher wird, dass der Bediener ein kritisches Ereignis wie den Reaktionsendpunkt überschreitet. Ähnlich verhält es sich mit der Verwendung gravimetrischer Dosiersysteme anstelle von Messkolben oder [digitaler Dichtemessgeräte](#) anstelle von Pyknometern: Die Wahrscheinlichkeit einer Beeinträchtigung der Versuchsergebnisse durch individuelle Beurteilungen wird deutlich reduziert.



2.2.2 Automatisierte Probenauswertung gemäss SOP

Die Erstellung von Standardarbeitsanweisungen, kurz SOPs, fördert die Konsistenz bei der Erfassung von Daten häufig durchgeführter Aufgaben. SOPs können einfache ausgedruckte Checklisten mit den zu befolgenden Schritten sein oder Methodenkürzel, die an Geräten oder in Laborsoftware eingegeben werden. So können Benutzer wie bei einem Industriestandard zu jedem Zeitpunkt des Verfahrens sicher und dauerhaft Konformität wahren, sodass an verschiedenen Tagen oder durch verschiedene Bediener erstellte Datensätze vollständig vergleichbar sind. Neben der Vereinfachung von Audits begünstigen SOPs Zusammenarbeit und das Teilen von Informationen.



Schnelle und wiederholbare Feuchtebestimmung

Eine Automatisierung begünstigt auch die Reproduzierbarkeit von Feuchtemessungen. Die Bestimmung des Trocknungsverlusts, das ISO-definierte Standardverfahren, erfordert mit einem Trocknungssofen mitunter mehrere Stunden, sodass sich die Wartezeit bis zu den Resultaten erheblich verlängert, wenn die Bestimmung an mehreren Punkten durchgeführt wird (z. B. im Wareneingang, im Prozess und bei der abschliessenden Qualitätskontrolle). [Halogen Moisture Analyzer](#) sind eine leistungsstarke alternative Technologie zur Erzeugung wiederholbarer, ISO-konformer Resultate innerhalb von Minuten anstelle von Stunden – auch bei Proben mit geringem Feuchtegehalt. Messungen erfolgen unter Einhaltung spezifischer Protokolle; Daten können auf dem Gerät gespeichert werden oder automatisch an einen Drucker, eine Software oder einen USB-Stick übertragen werden. Dank schnellerer Ergebnisse können auch Entscheidungen schneller getroffen und somit Arbeitsabläufe vereinfacht werden.



2.2.3 Kontrollierte mehrstufige Vorgänge

Das doppelte Messen einer Probe – z. B. in einer Differenzwägenanwendung wie dem Filterwägen – kann dazu führen, dass Einflüsse durch Instrument, Umgebung oder Bediener das Resultat verfälschen. Es muss unbedingt sichergestellt werden, dass die Mindesteinwaage für das entsprechende Verfahren geeignet ist; zur Vermeidung von Wägefehlern wird normalerweise ein Sicherheitsfaktor einbezogen. Allerdings können Übertragungs- und Berechnungsfehler die Datenqualität ebenfalls beeinträchtigen.

Die Einführung von SOPs, die den Bediener zu jedem Schritt auffordern, Daten aufzeichnen und Berechnungen durchführen, erhöht die Genauigkeit und Wiederholbarkeit solcher Arbeitsabläufe. [Waagen der Excellence-Reihe](#) und LabX verbessern die Datenqualität sowie -sicherheit und tragen dazu bei, dass die Resultate mehrstufiger Wägeverfahren dauerhaft konsistent bleiben.



2.2.4 Automatisierte Probenzufuhr und Reinigung

Bei bestimmten Anwendungen kann die Probenzufuhr eine bedeutende Fehlerquelle darstellen. Die Reproduzierbarkeit von Dichte- und Brechungsindexergebnissen, die durch anspruchsvolle Probeneigenschaften wie z. B. Viskosität oder Flüchtigkeit beeinträchtigt werden kann, wird durch die Verwendung von [Probennahme- und Trocknungspumpen sowie eines Ventils](#) für den Anschluss verbessert. Ein solcher Aufbau garantiert, dass die Geschwindigkeit bei der Probenahme für jede Substanz angepasst wird, und reduziert das Risiko von Unregelmäßigkeiten durch den Bediener bei Probenzufuhr- oder Reinigungsverfahren.



Multiparametermessungen leicht gemacht

Die Steuerung des Probentransfers zu einer Messzelle mithilfe einer Pumpe kann auch für Multiparameterauswertungen angewendet werden – z. B. für Getränke, Aromen und Duftstoffe, die durch mehrere Bestimmungen geprüft werden müssen, bevor sie in den Verkauf gelangen können. Kohlensäure oder flüchtige Komponenten können zu systematischen Fehlern bei nacheinander durchgeführten QK-Messungen führen; eine effektive Gegenmassnahme ist die Vernetzung der Messzellen der relevanten Geräte, um die Analysen gleichzeitig durchzuführen.



2.3 Ergonomie: Bessere Prozesse durch Automatisierung

Durch einen geringeren Bedarf an Bediener Eingriffen können Automatisierungslösungen Verletzungen infolge von wiederholter Belastung vorbeugen; ausserdem kann man durch automatisierte Instrumente oder Systeme in geschützten Laborumgebungen wie Abzugsschränken, Bio-Sicherheitsschränken oder Glove Boxes dazu beitragen, dass Bediener weniger Gefahren und Proben weniger Umwelteinflüssen ausgesetzt werden.

2.3.1 Schutz für Bediener und Proben

Repetitive Handlungen, v. a. solche, die eine feinmotorische Kontrolle erfordern, können bei Bedienern zu Ermüdungserscheinungen und sogar Verletzungen führen. Automatisierte Alternativen, auch einfache, für manuelle Vorgänge können Bedienern daher erhebliche Vorteile verschaffen.

Obwohl manuelle Probenvorbereitungen auch mit einem Automatisierungssystem evtl.

weiterhin notwendig sind, können Aufgaben, die andernfalls die Ermüdungserscheinungen weiter verstärken könnten, mithilfe von softwaregesteuerten SOPs zur Ausführung von Versuchsrezepturen müheloser durchgeführt werden. Laborsoftware bietet ausserdem die Möglichkeit, Arbeitsabläufe ferngesteuert zu starten. So entsteht ein zusätzliches Sicherheitselement zum Schutz vor gefährlichen Probenarten oder zur leichteren Durchführung von Social-Distancing-Massnahmen.



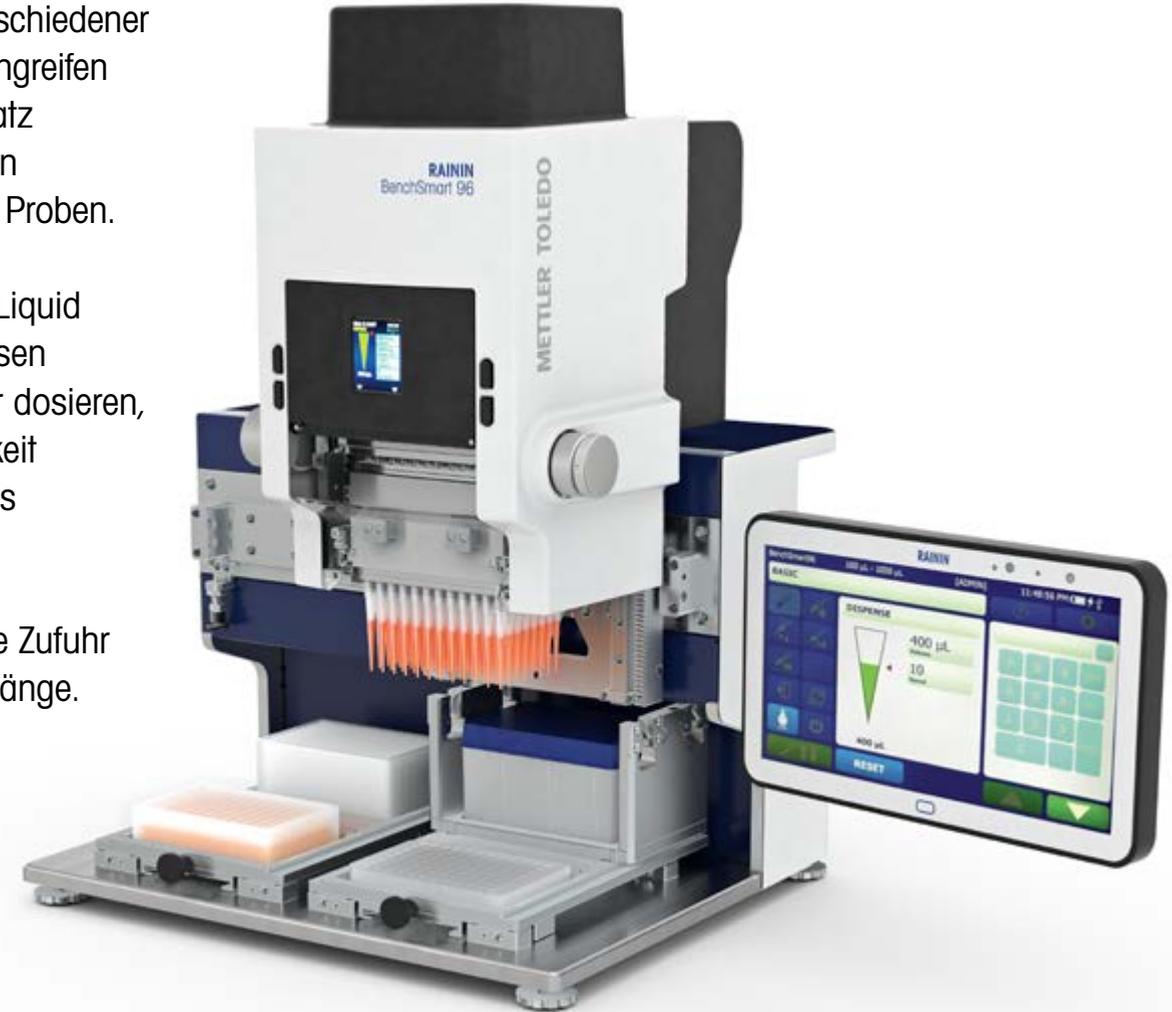
Sichere, schlankere Arbeitsabläufe

Der Effekt von Automatisierung auf Sicherheit und Ergonomie ist vielfältig:

- SOPs mindern bei wiederholten Vorgängen die Anzahl an manuellen Handlungen, einschliesslich der erforderlichen Tasteneingaben zum Erreichen einer Methode, wodurch Bediener fortwährend vor gefährlichen Proben geschützt und Verletzungen infolge von wiederholter Belastung (RSIs) vermieden werden.
- Automatische Titratoren schliessen giftige Titriermittel in Büretten ein, leiten Abfall automatisch in einen vorgesehenen Behälter und standardisieren die Datenerfassung mit weniger Verschüttungen und Unfällen.
- Gravimetrische Dosiersysteme funktionieren als geschlossene Systeme. Dadurch

ermöglichen sie die Dosierung verschiedener Substanzen ohne menschliches Eingreifen und schützen Bediener beim Einsatz in Einschlussvorrichtungen (z. B. in Abzugsschränken) vor Kontakt mit Proben.

- Dank elektronischer Pipetten und Liquid Handler für hohe Durchsätze müssen Bediener nicht mehr mischen oder dosieren, wodurch die Datenreproduzierbarkeit verbessert und das Risiko von RSIs deutlich reduziert wird.
- Peristaltikpumpen übernehmen die Zufuhr von Proben sowie Reinigungsvorgänge. So steigern sie die Konsistenz der Messungen erheblich und tragen dazu bei, dass Belastungen und Gefahren für Bediener abnehmen.



Sensorkontrolle für Prozesse

Periphere oder eingebaute Sensoren bieten ähnliche Vorteile wie die oben aufgeführten. So führen z. B. Fingerabdruckleser an Geräten zu unkomplizierteren Bedieneranmeldungen und stärken zudem Sicherheitsprotokolle; berührungslose Waagensensoren öffnen Windschutztüren automatisch und reduzieren so die für den Abschluss eines Wägevorgangs erforderliche Feinmotorik. Und Füllstandssensoren können Messungen bis zum Austausch einer Abfallflasche anhalten, wodurch ein Überlaufen gefährlicher Materialien verhindert wird.



3. Softwarebasierte Automatisierungsoptionen Für konforme Instrumente und Daten



Auditbereite Instrumente und Daten

Labore, die Audits unterzogen werden, bemühen sich durch strenge Kontrollen ihrer analytischen Arbeitsabläufe um Konformität. Geräte werden sorgfältig ausgesucht sowie installiert und ihre Verwendungen, Routineprüfungen und Wartungen müssen in detaillierter Form protokolliert werden, damit sichergestellt werden kann, dass Messungen genau sind, innerhalb der Toleranzen liegen und von qualifiziertem Personal durchgeführt werden.

METTLER TOLEDO unterstützt bei der Bereitschaft von Laboren für Audits durch [Hilfestellungen](#) hinsichtlich Geräteauswahl, Installationsort und Einrichtung, durch [Service](#)-Pakete, die einsetz- und bedarfsgerecht zugeschnitten werden, und durch [rückführbare Gewichte](#) sowie [zertifizierte Referenzsubstanzen](#) für Routineprüfungen.

Auf den folgenden Seiten behandeln wir [Laborsoftware](#) für konforme Experimente.



3.1 Automatisierung von individuellen Prozessen

Softwareoptionen zur Unterstützung von Komponenten eines umfangreicheren Arbeitsablaufs, der eine Bestandsverwaltung und die Übertragung von Resultaten umfasst, sind ein wahres Schutzbollwerk gegen Fehler. Bestandsmanagementsoftware gewährleistet eine unkomplizierte Instrumentenübersicht, aktueller Wartungsstatus und -verlauf inklusive, und steigert die Datenqualität, indem die Verwendung nicht spezifikationskonformer Geräte vermieden wird. So spart man Zeit und erhält eine unabhängige Aufzeichnung einschliesslich Metadaten von jeder Messung.

3.1.1 Bestandsmanagement für Pipetten

Die Software [PipetteX™](#) von METTLER TOLEDO ermöglicht die Überwachung von bis zu 200 Pipetten in mehreren Laboren und verfolgt die Leistung, Kalibrierung, Wartungshistorie sowie die Orte, an denen eine Pipette vor der Wartung zuletzt im Einsatz war. RFID-Chips in den Griffen enthalten identifizierende Informationen der Pipetten und synchronisieren über den EasyScan-Leser zur Beseitigung von Fehlern automatisch mit der Software. Die Software unterstützt die Konformität mit 21 CFR Part 11; für zusätzliche Genauigkeit kann ausserdem ein Audit Trail eingerichtet werden.



3.1.2 Automatische Datenübertragung

Selbst einfache Instrumentensoftwarepakete stärken die Produktivität, da manuelle Datenaufzeichnungen kaum mehr erforderlich sind. [EasyDirect™](#), mit Waagen, pH-Messgeräten, Titratoren, Feuchtebestimmern usw. von METTLER TOLEDO mitgeliefert, überträgt Daten automatisch in Tabellen. Resultate einschliesslich Metadaten können via Ethernet auf einen Server oder vernetzten Computer übertragen werden, wodurch Übertragungsfehler reduziert und weitere Analysen in Programmen wie Microsoft Excel ermöglicht werden.



3.2 Softwaregesteuerte Automatisierung von Arbeitsabläufen

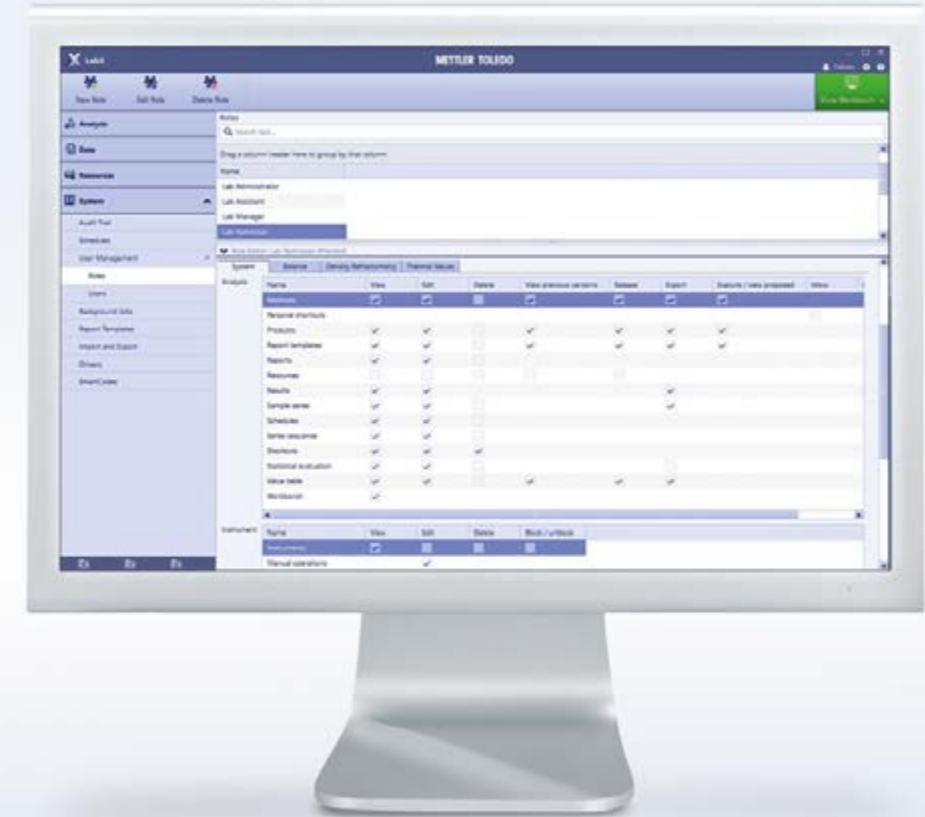
Holistische Automatisierung bzw. Automatisierung von Arbeitsabläufen ist abhängig von der Fähigkeit softwaregesteuerter Automatisierungssysteme zur stabilen und sicheren Verwaltung von Methoden und Daten. Software dieser Art beinhaltet häufig Funktionen zur Benutzerverwaltung sowie Funktionen zur Bestandsverwaltung, um Instrumentenverfügbarkeit und Servicestatus hervorzuheben.

3.2.1 Sichere Arbeitsabläufe

Mit Softwarepaketen haben Labore oder Compliance-Manager ausserdem die Möglichkeit, Grenzwerte für das Bestehen/Nicht bestehen bestimmter Versuche festzulegen und Datenreports zu individualisieren. Datenaufzeichnungen können direkt in eine sichere Datenbank übertragen oder an ein LIMS abgegeben werden.

In Bereichen mit strengen Vorschriften wie der Entwicklung und Produktion von Pharmazeutika ist die Datenkontrolle von entscheidender Bedeutung und muss daher effektiv, lücken-

los und transparent sein. Anforderungen der Richtlinie 21 CFR Part 11 für elektronische Daten und Signaturen müssen eingehalten werden; auch ausserhalb der Pharmabranche wollen Unternehmen das FDA-Regelwerk ALCOA+ einhalten, da diese Richtlinien als Massstab für bewährte Praktiken dienen und einen hilfreichen Rahmen bilden. Laborsoftwarepakete integrieren normalerweise entweder die technischen Kontrollen zur Unterstützung des Pharmastandards hinsichtlich Datenintegrität oder bieten optionale Module zur Einhaltung von Richtlinien.



3.2.2 LabX-Laborsoftware

[LabX](#) ist eine führende Laborsoftwareplattform für Waagen und Analysegeräte. Sie dient der Verwaltung von Methoden sowie Daten und kann in Kombination mit bis zu 30 Instrumenten der Excellence-Serie eingesetzt werden. Die Software liefert Möglichkeiten zur fortwährenden Kontrolle von Kalibrier-, Prüf- und Service-status sowie der Verfügbarkeit. Sie ermöglicht eine Benutzerverwaltung, erleichtert die Erstellung von SOPs und gewährleistet, dass Methoden bestimmten, spezifikationsgerechten Geräten zur Ausführung zugeschrieben werden.

Ob in einem einzelnen Labor oder einem Netzwerk aus mehreren Standorten – jede LabX-Installation erzeugt automatisch vollständige, kontextabhängige Rohdaten und Metadaten für Experimente, die mit den angeordneten Geräten durchgeführt werden. Die Software verfügt über sämtliche technischen Kontrollen, die für die Einhaltung der Vorgaben

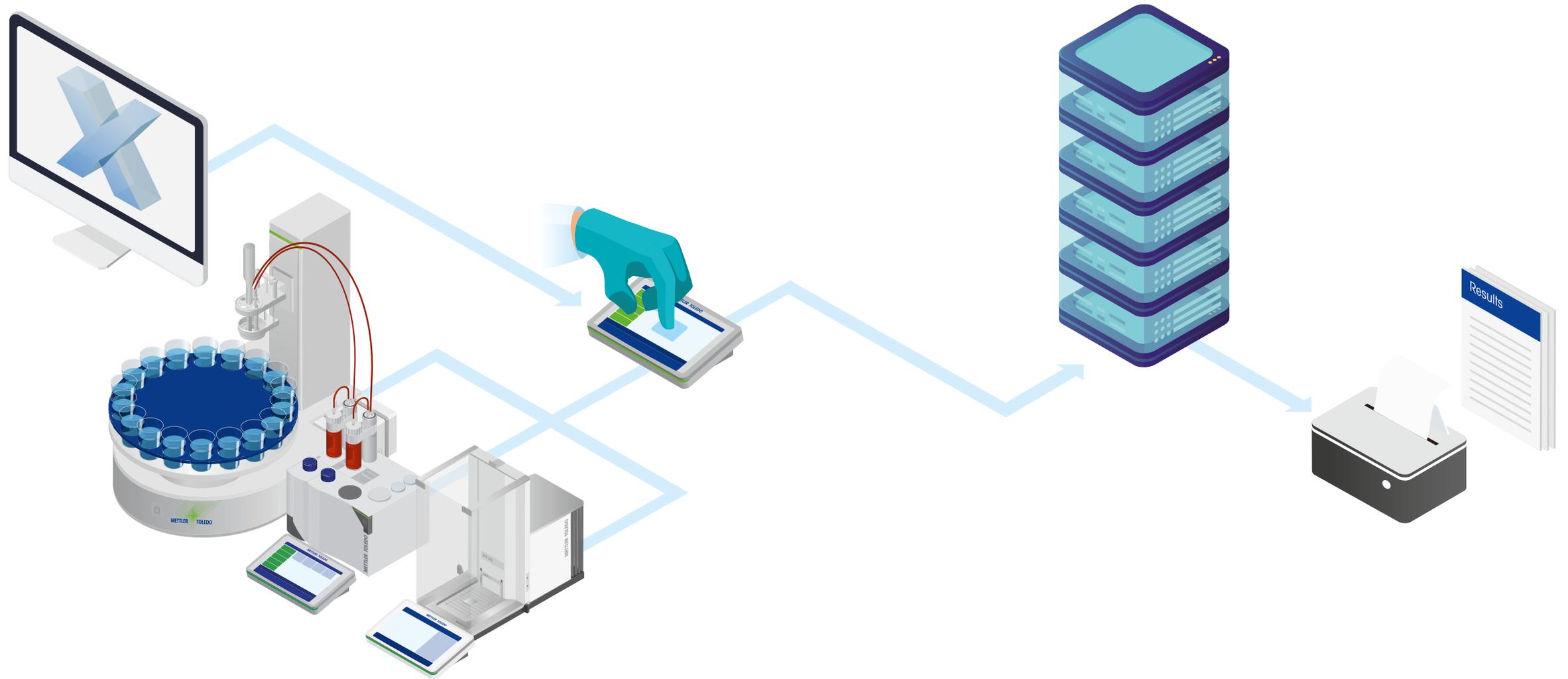
eines Labors erforderlich sind, einschliesslich 21 CFR Part 11. Resultate werden in der sicheren ALCOA+-konformen SQL-Datenbank gespeichert und können an ein LIMS, ELN oder eine CDS-Software übertragen werden. Da LabX eine einzige Schnittstelle zu solchen Systemen bietet, ist der Aufwand für die initiale Programmierung und Validierung geringer als mit Punkt-zu-Punkt-Lösungen, bei denen eine direkte Verbindung zwischen Gerät und LIMS besteht.

Datenwerte stehen während einer Analyse mit mehreren Instrumenten oder Parametern für alle einsetzbaren Geräte zur Verfügung, und ein Audit Trail zeichnet alle Änderungen auf, die in der Software oder an den vernetzten Instrumenten vorgenommen werden. Ausserdem ermöglichen die einfache Erstellung von Reports und deren Export eine unkomplizierte Analyse oder Gegenüberstellung von Datensätzen.





Arbeitsablaufkontrolle via LabX



3.2.3 STAR^e-Software zur thermischen Analyse

Das [STAR^e-System](#) liefert vollständige Automatisierungslösungen für DSC-, TGA- und TGA/DSC-Instrumente von METTLER TOLEDO. Im Konformitätsmodus sorgt STAR^e für nahtlose Arbeitsabläufe zur Unterstützung der Good Laboratory Practice (GLP) – von der Probenverwaltung und -messung bis zur Ergebnisinterpretation und -bestätigung. Die Ausführung und Auswertung von Experimenten der thermischen Analyse (TA) wird dank der hochmodernen Konstruktionsweise der Geräte in Kombination mit den hervorragenden Möglichkeiten von STAR^e erleichtert, wie nachfolgend erläutert:

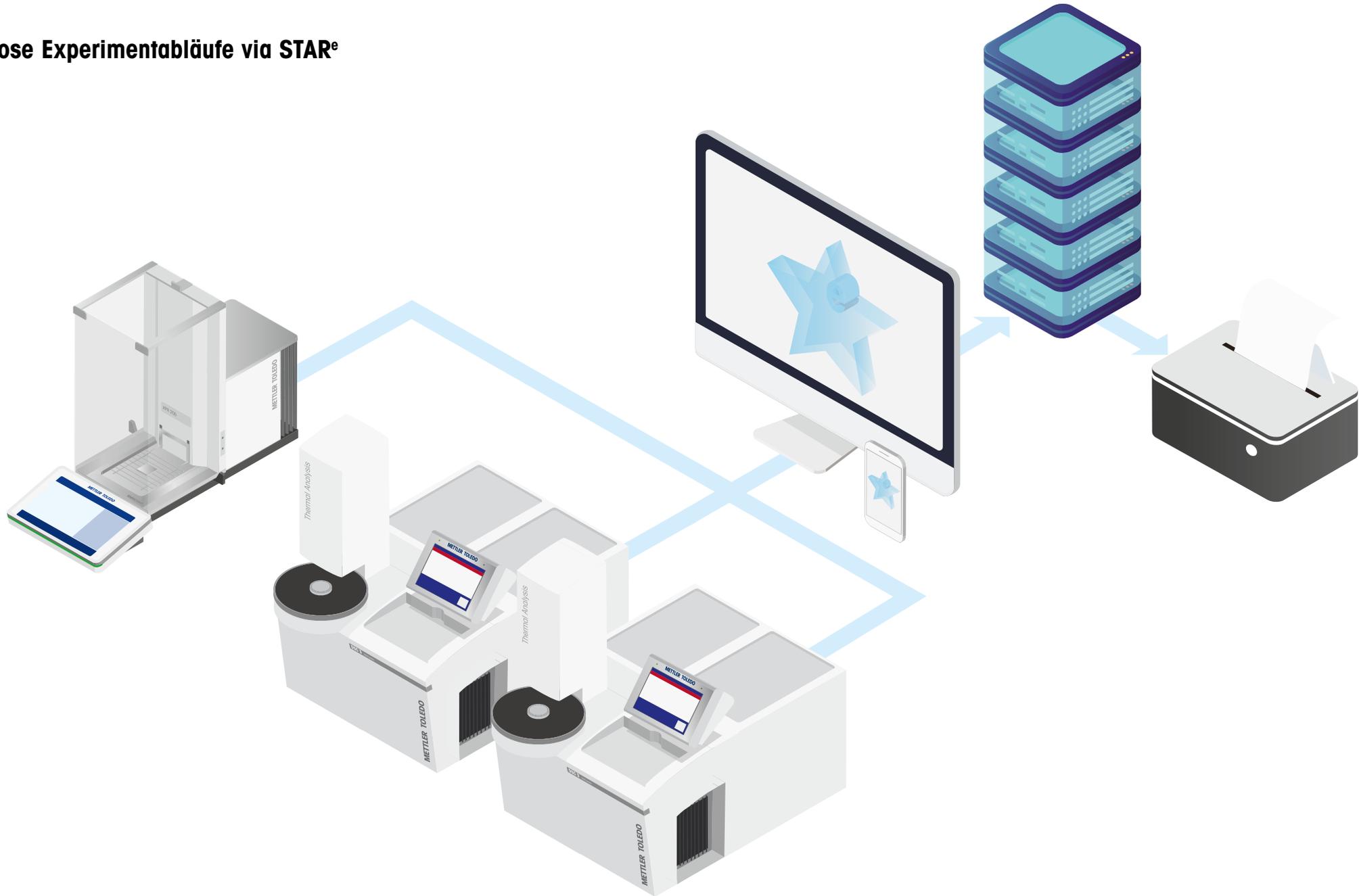
- Der Probenwechsler verarbeitet bis zu 34 Proben, bei Bedarf jede mit einer anderen Methode und einem anderen Tiegel; die automatische Deckelperforierung kurz vor der Messung von feuchtigkeitsempfindlichen Proben erhöht die Genauigkeit;

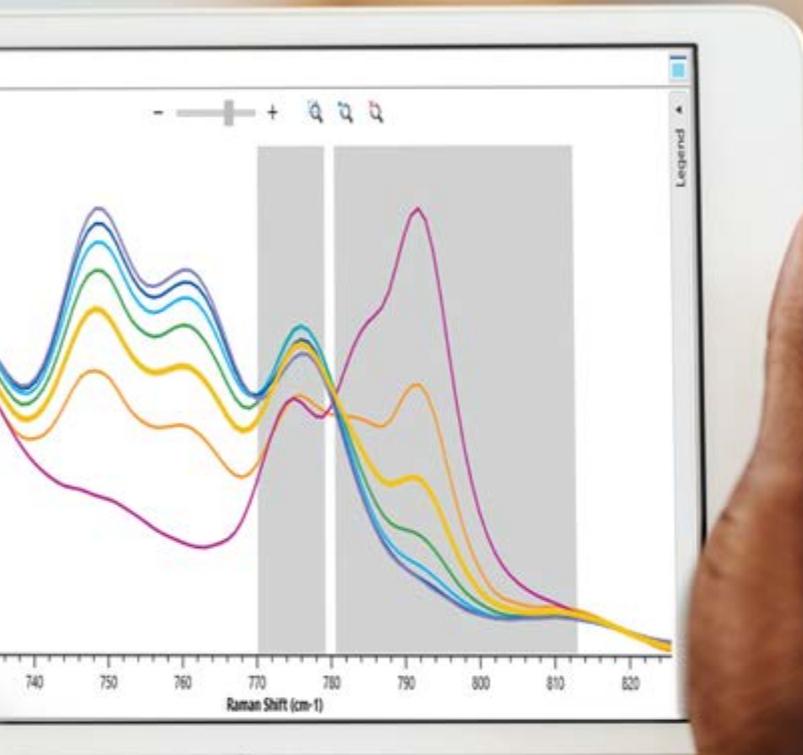
- EvalMacro ermöglicht automatische Kurvenauswertungen – ideal für wiederholte Experimente;
- Der integrierte Report Builder liefert vordefinierte Vorlagen für eine automatische Erstellung von Reports;
- Die FlexCal[®] Kalibrierung stellt bei jedem Versuch sicher, dass die richtigen Justierparameter verwendet werden. Somit können Datenwerte unabhängig von Heiz- und Abkühlraten, Tiegeltyp und Gasatmosphäre im Tiegel erstellt werden;
- Mit der Quality Control-Option können Resultate verschiedener Chargen überwacht und verglichen werden.

Das System unterstützt die kumulative Erzeugung hochkonsistenter und rückverfolgbarer Daten aus sämtlichen Analysen.



Nahtlose Experimentabläufe via STAR^e





3.1.4 iC-Softwareplattform

Während der chemischen Entwicklung liefern die Überlagerung und Synchronisierung von Betriebsbedingungen mit Inline-Messungen auf einer gemeinsamen Oberfläche Wissenschaftlern Einsicht in eine Synthese von Interesse. Die [iC Software](#) von METTLER TOLEDO nutzt intelligente Algorithmen, die Big Data-Prinzipien anwenden, sodass der Arbeitsablauf vom Experiment bis zur Entscheidung vereinfacht wird. Somit können Wissenschaftler Daten in Informationen umwandeln, Reports automatisch erstellen und in einer Organisation zusammenarbeiten.

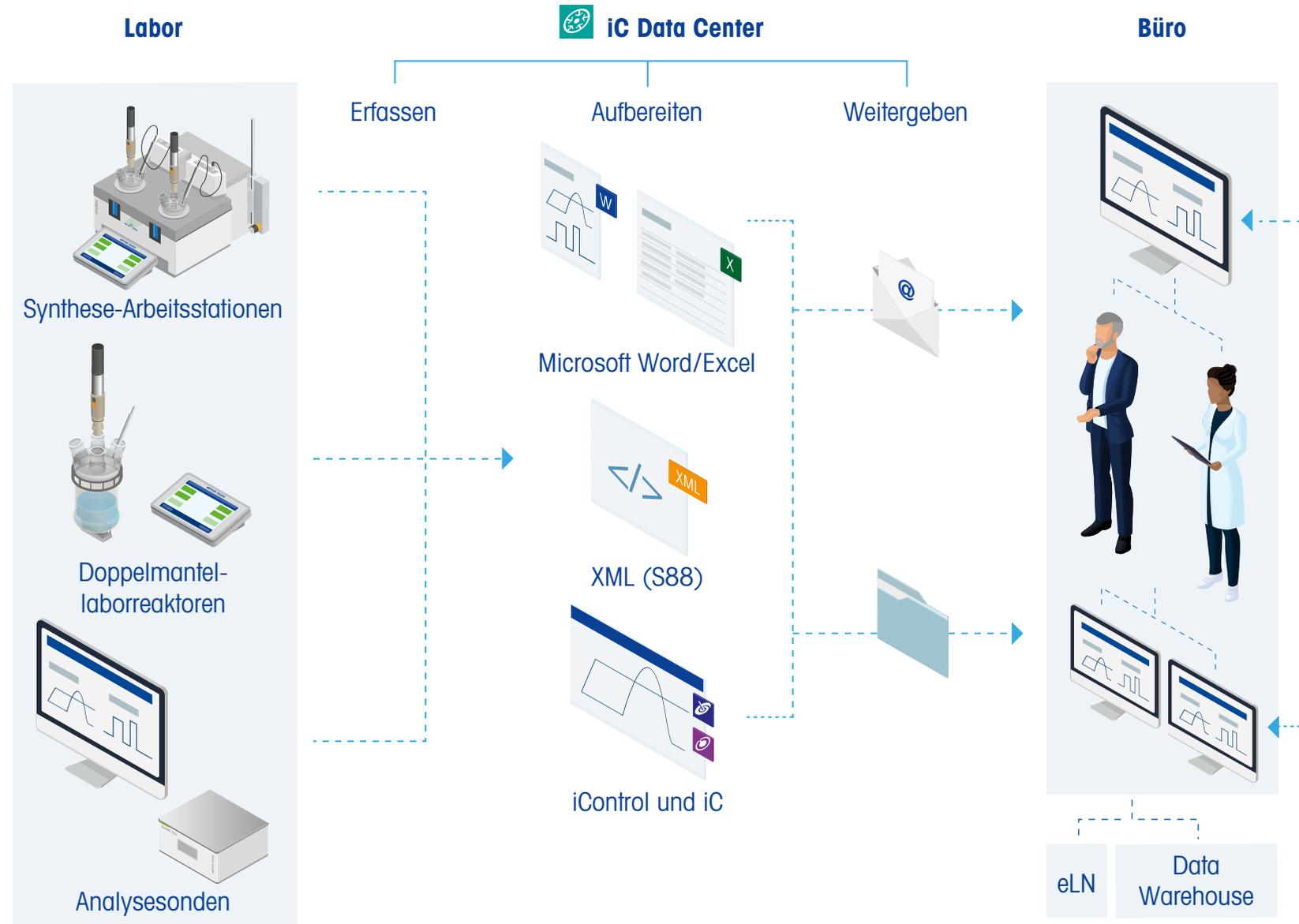
Das simple doch leistungsstarke iC-Paket ermöglicht eine konsistente Steuerung und Messung von Reaktionen und Prozessen. Dies reduziert menschliche Fehler sowie Schulungskosten und gewährleistet, dass wichtige Informationen nicht verloren gehen.

Benutzerfreundliche Tools für die Analyse, das Reporting und die Datenverwaltung erleichtern die Übertragung kritischer Prozessinformationen, mit denen Projektteams Entscheidungen rechtfertigen und somit schnell einen Konsens finden können. Die Software dient der Analyse von Anwendungen wie chemische Reaktionen, Kristallisationen oder Kalorimetrie und optimiert sowie beschleunigt die Dateninterpretation, wodurch sich Labore schneller neuen Projekten widmen können.



Aufbau institutionellen Wissens

Die Software [iC Data Center™](#) ermöglicht ein unternehmensweites Wissensmanagement für eine bessere Einhaltung von Vorschriften, indem jegliche Versuchsdaten von lokalen Geräten automatisch erfasst, in verständliche Formate strukturiert und an ein ELN- oder Datenverwaltungssystem übertragen werden. Mit einer leicht zu bedienenden, webbasierten Konfigurationsschnittstelle können Benutzer mehr Zeit für die chemischen Prozesse und weniger für die Datensicherung oder -hygiene aufwenden.



Fazit

In den vorangegangenen Kapiteln wurden Strategien zur Integration von Automatisierungslösungen in Laborarbeiten zusammengefasst – von Optionen für reibungslose Einzelschritte bei der Analyse bis hin zu Lösungen, die ganze Arbeitsabläufe bedienerunabhängig ausführen oder die Verwendung, Kalibrierung und Wartung von Geräten verfolgen können.

Obwohl sie die Anforderungen des jeweiligen Labors widerspiegeln sollte, birgt Automatisierung im weitesten Sinne in fast jedem Bereich Vorteile. Der Wechsel von einem manuellen zu einem automatisierten Prozess für Analysen verbessert sowohl die Effizienz als auch die Wiederholbarkeit der Resultate. Automatisierte Datenübertragungen oder -sicherungen sollten das Fehler- bzw. Verlustrisiko senken. Die Automatisierung vollständiger Versuchssequenzen gibt Laboren die Sicherheit, dass die Arbeitsschritte und Reinigungsmaßnahmen zwischen den Proben den SOPs

entsprechend ausgeführt werden, wodurch Datensätze verschiedener Tage, Proben oder Mitarbeiter leichter verglichen werden können. Die Automatisierung der Bestandsverwaltung garantiert eine gewisse Sicherheit hinsichtlich der Resultatqualität. Darüber hinaus erhalten Auditoren einen unabhängigen Beleg dafür, dass die Instrumente regelmässig geprüft und gewartet werden.

Durch eine höhere Genauigkeit der aufgezeichneten Daten und die Objektivität der Resultate verbessert eine Automatisierung im Allgemeinen die Vorgänge in einem Labor. Doch auch die zusätzlichen Vorteile im Hinblick auf Ergonomie, Sicherheit, Effizienz und Konformität mit geltenden Vorschriften sind beachtlich. Finden Sie heraus, wie Sie eine Automatisierung in Ihre eigenen Prozesse integrieren könnten; kontaktieren Sie die Profis des technischen Supports von METTLER TOLEDO für eine Beratung.



Weitere Informationen

Pharmazeutika und Kosmetikprodukte

Sichere, konforme Experimente und reproduzierbare Resultate sind von grundlegender Bedeutung, um die Qualität von Pharmazeutika und Kosmetikprodukten zu gewährleisten. Unsere Leitfäden geben Ihnen eine Übersicht über Software und Geräte zur effektiven Unterstützung und Optimierung Ihrer Prozesse:

- ▶ www.mt.com/pharma-lab-compliance
- ▶ www.mt.com/cosmetics-lab-compliance

Lebensmittel und Getränke

Sichere, frische und gesunde Lebensmittellieferungen lassen sich leichter erreichen, wenn man über neue Vorschriften und Standards informiert ist. Sorgfältig ausgewählte, geprüfte und gewartete Geräte bilden das Fundament für optimierte Prozesse. Mehr dazu in unserem Leitfaden:

- ▶ www.mt.com/lab-food-regulations

Lean Lab

Das Lean-Konzept wird in verschiedenen Branchen bei der Entwicklung sicherer Prozesse eingesetzt und an Anforderungen sowie Erwartungen angepasst, sodass sich hochwertige Resultate gewinnen lassen. Erfahren Sie in unserem Leitfaden, inwiefern Lean für Ihre eigene Arbeit vorteilhaft sein kann:

- ▶ www.mt.com/lab-lean

Datenverwaltung

Massgeschneiderte Strategien für das Datenmanagement sorgen dafür, dass Labore nicht auf der Stelle treten. Egal, ob Sie manuell oder in einer vollständig digitalisierten Umgebung arbeiten – sichere Datenaufzeichnungen sind ein Muss. Profitieren Sie mit unserem aktuellen Leitfaden von Best Practice-Beispielen:

- ▶ www.mt.com/lab-data-management

Good Measuring Practices

Good Measuring Practices-Richtlinien von METTLER TOLEDO liefern einen Rahmen für die Auswahl, Installation, Verwendung und Wartung von Instrumenten, die für Ihre Prozesse geeignet sind. Weitere Details:

- ▶ www.mt.com/gp

Service

Benutzerdefinierte Hilfestellungen bei der Installation und Qualifizierung Ihrer Instrumente sowie einen standardisierten Software-Servicevertrag erhalten Sie von einem engagierten Team. Kontaktieren Sie uns für weitere Informationen:

- ▶ www.mt.com/service



► www.mt.com/lab-automation

METTLER TOLEDO Group
Laboratory Division

Technische Änderungen vorbehalten
© 02/2021 METTLER TOLEDO.
Alle Rechte vorbehalten. L00855DE
Group MarCom RITM656845 LS/JK