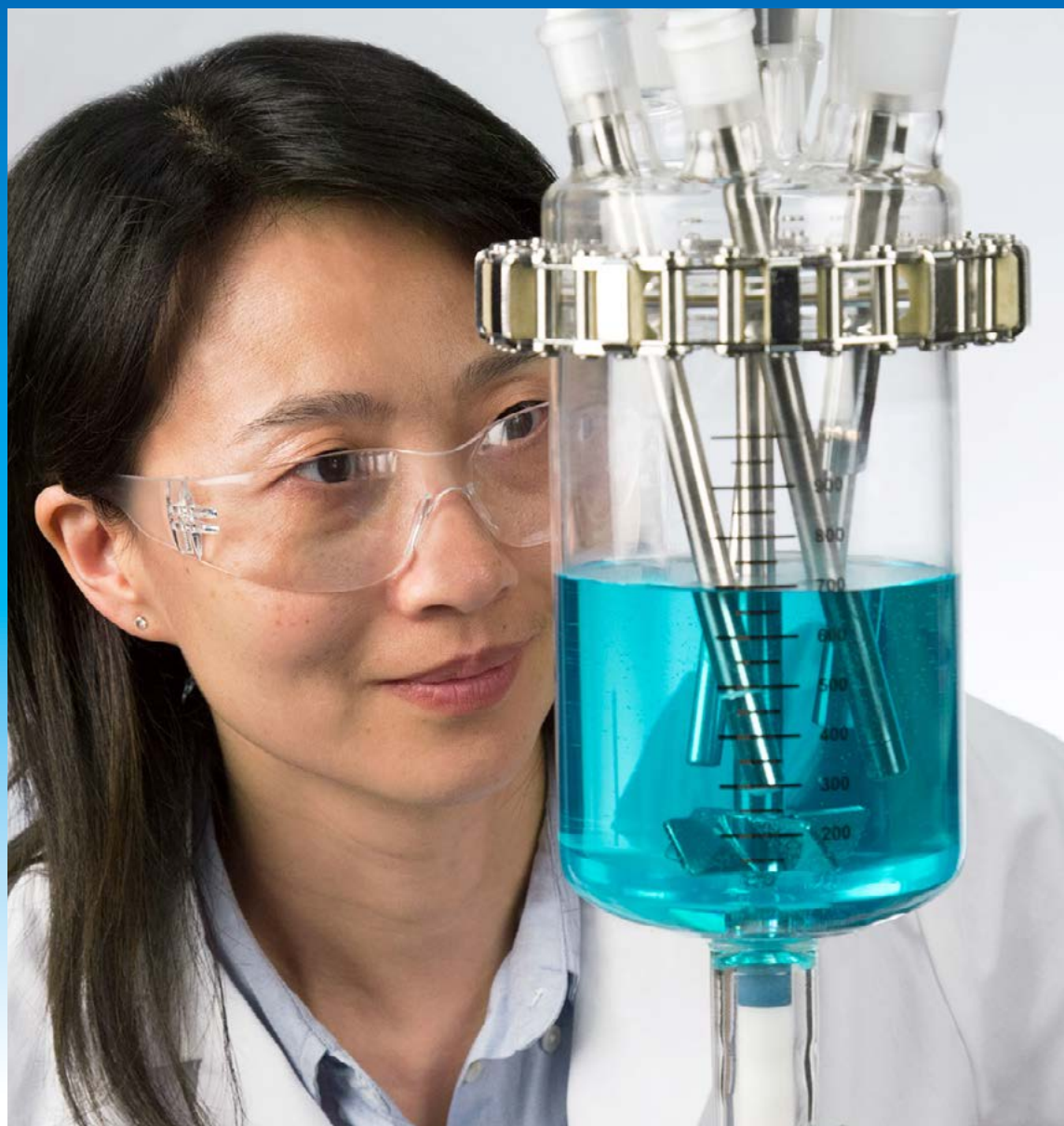


工艺开发解决方案



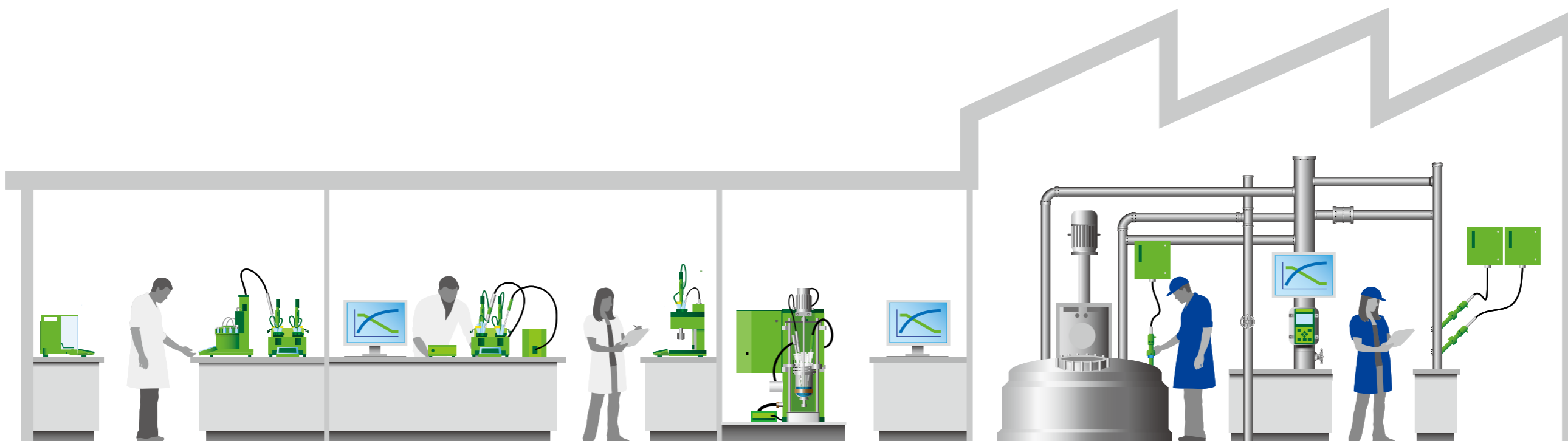
自动合成&在线分析
从分子到生产

METTLER TOLEDO

创新开发 从分子到生产

整个开发阶段都面临挑战。创新的研究和开发包括在每个阶段寻找解决方案，同时兼顾成本和质量。

从研发到生产
理解和应对开发过程中每个阶段的挑战意味着科学家要解决关键问题并做出更好、更明智的决定。



发现分子

研究人员正在寻求创造活性化合物。科学家们探索新的实验条件来鉴别新的化合物。

- 分子在这个特定的应用中起作用吗？
- 我们如何开发新的化合物？
- 个人安全能得到改善吗？

开发反应

化学反应的开发为合成分子提供了稳健、可持续的路径。后序将对它们进行纯度和产量的优化。

- 这个反应是否安全？能否带来收益？
- 路径能不能简化？
- 我们能够鉴别出最优反应条件么？

创建工艺

为了安全、产率和稳定性，必须创建和优化每个工艺。

- 这个工艺可放大么？
- 危险事件是否得到控制？
- 我们能否确定工艺符合工厂条件？

生产物料

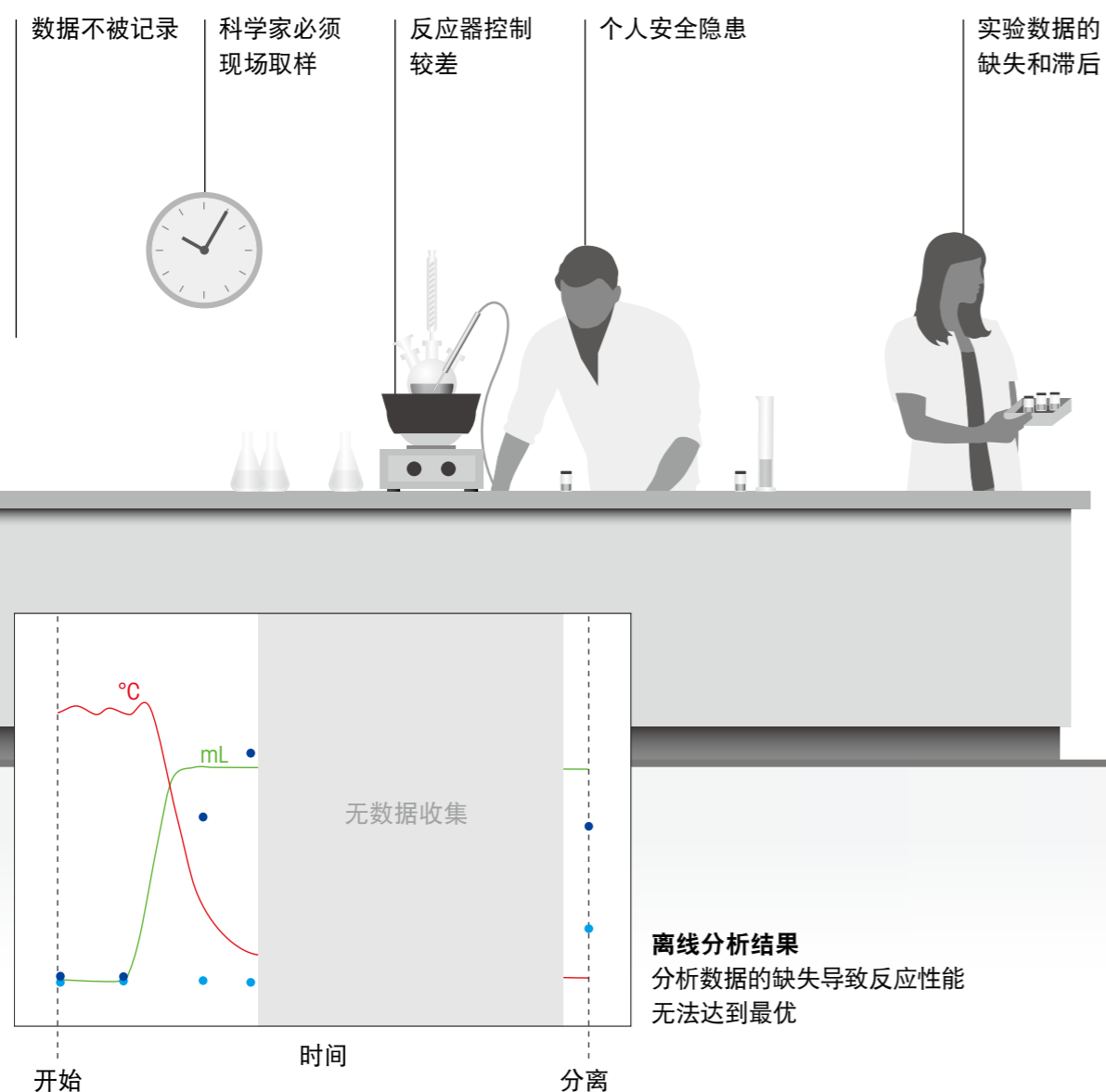
当一个工艺过程转移至生产时，避免失败，连续工艺得到控制，周期被缩短。

- 这个工艺过程可重复么？
- 它能在放大后得到改进吗？
- 盈利能力能否提高？

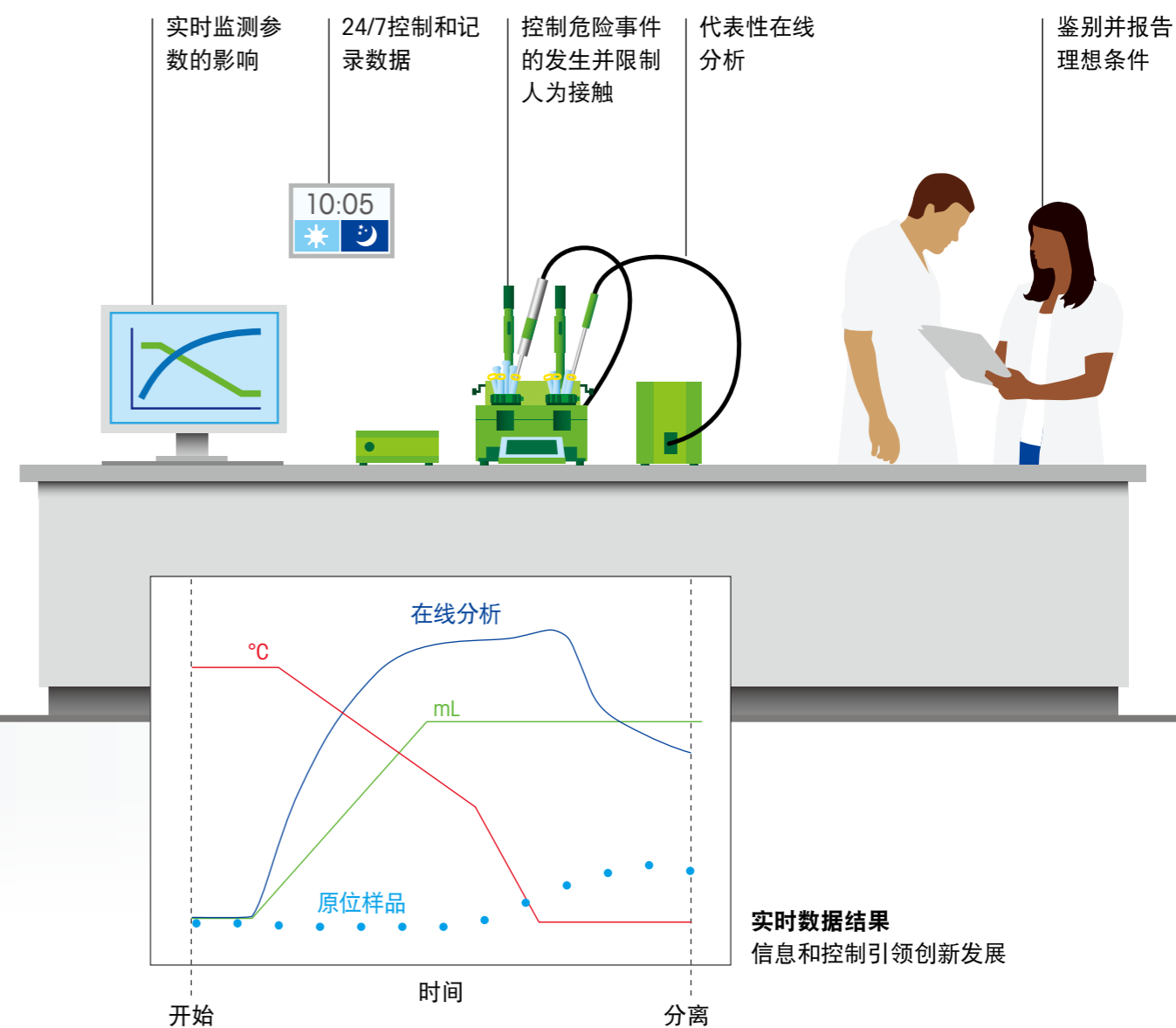
现代实验室的演变

通过24小时安全、无人值守的实验、精确的控制和连续的测量，研究人员能够迅速了解参数变化的影响，并做出更好、更明智的决策。现代实验室的信息和控制引领创新发展。

传统实验室技术



现代化实验室



现代化合成 自动化反应器平台

自动合成反应器取代了传统的圆底烧瓶和夹套实验室反应器。这些工具使得有机合成的化学家和工程师们可以探索新的反应条件，同时可以自动化地记录所有实验数据。所有反应器、搅拌器和恒温器都通过直观的触摸屏进行控制，通过统一的操作界面，减少了培训需求。



EasyMax™ 102

EasyMax™ 402

OptiMax™

RX-10™

灵活的配置



自动化反应器使得化学家在没有任何冰浴、油浴、加热套或低温恒温器的情况下进行反应，并且能够探索更加宽泛的操作温度。丰富的反应器选择使得化学反应的合成、优化和表征更加灵活，可实现从0.5毫升至几升范围的化学反应。

无人值守控制

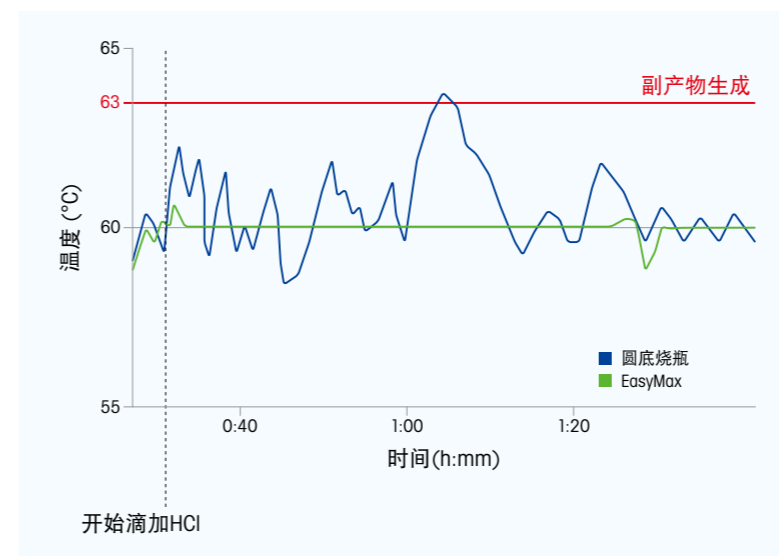


直观和一致的触摸屏能够降低培训需求，提高使用率和研究效率。科学家们通过24小时安全控制反应器并记录参数来筛选反应条件。每个研究人员完成的成功实验数目增加，达到提高生产效率的目的。

无缝集成



将实时、原位分析仪器整合到合成工作站中，科学家能够深入了解过程。通过分析工艺过程趋势，控制温度、混合、加料和pH值，快速识别和优化工艺事件。



超越圆底烧瓶的合成过程

EasyMax、OptiMax和RX-10使得实验易于执行，且能在更宽的温度范围内获得高精度和可重复的数据。科学家能够测量过程变量对反应的影响。

在这幅图中，手动系统无法使温度得到稳定的控制，增加了潜在的不一致性，例如副产物的形成。EasyMax提供了非常稳定的温度控制，减少了重复实验，改进了实验间的对比，提高检测放热过程的能力，并降低副产物形成的风险。

完整理解反应过程 原位红外光谱分析

用衰减全反射(ATR)傅里叶变换红外(FTIR)光谱进行原位反应分析, 提供了对关键反应物的连续监测。通过跟踪反应进程、起始、转化、中间体形成和终点, 研究人员能够做出明智的决定, 用于优化工艺设计和质量。



反应理解



原位反应监测跟踪关键的反应和瞬时产物, 以了解机理路径, 确定动力学, 并检测反应过程。实时监测提供关键信息, 以控制和优化离线采样和分析太慢或困难的反应。

促进研发

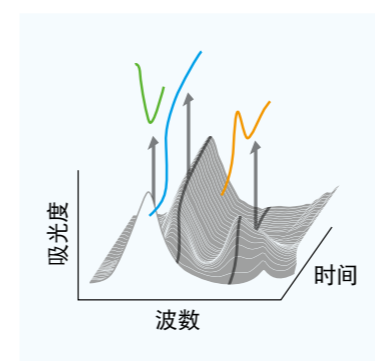
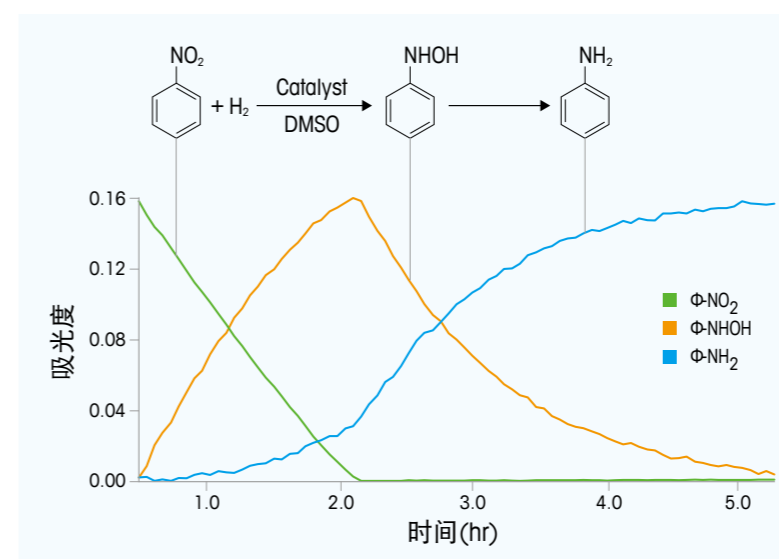


ReactIR帮助化学家开发出安全、稳定的工艺。基于探头的技术确保更简单的设置和可重复的结果, 使得工艺开发更快、工艺放大更加安全。应用实例包括: 流动化学、聚合反应、高压化学、动力学等。

避免离线取样



适用于广泛的反应条件(包括有毒或腐蚀性溶剂和极端温度或压力), ReactIR能够实时、原位监测反应关键信息, 以全面理解和控制反应。



研究者期望了解溶剂类型、催化剂、温度和压力对选择性和反应活性的影响。

反应动力学和机理

使用ReactIR, 化学家避免了离线测量带来的时间延迟。通过实时监测反应, 研究人员可以获取反应瞬时信息, 从而更快地做出更好的决策。

在这个案例中, ReactIR连续收集光谱。通过在反应过程中对于特征峰的跟踪, 揭示反应的起点、终点、中间体和动力学等关键信息。这些数据可以帮助科学家获取反应指纹信息, 在此基础上优化条件, 提高产率和受益。

观看“ReactIR光谱介绍”视频, 获取更多信息

www.mt.com/video-ReactIR

无人值守、代表性取样 从每一个实验获取丰富数据

通过对每一个实验以一定时间间隔完整收集高度重复性的分析数据，化学家可以获得最佳的反应理解，并在更短时间内完成研究。从化学反应中得到更多、更准确的样品，能够揭示反应的基本信息，从而更快做出有效的决定。



EasySampler™

化学反应取样困难



对于取样费时费力，甚至根本无法取样的化学反应，比如空气敏感、有毒、高温/高压或者低温反应，可获得更好的反应信息。

24/7无人值守

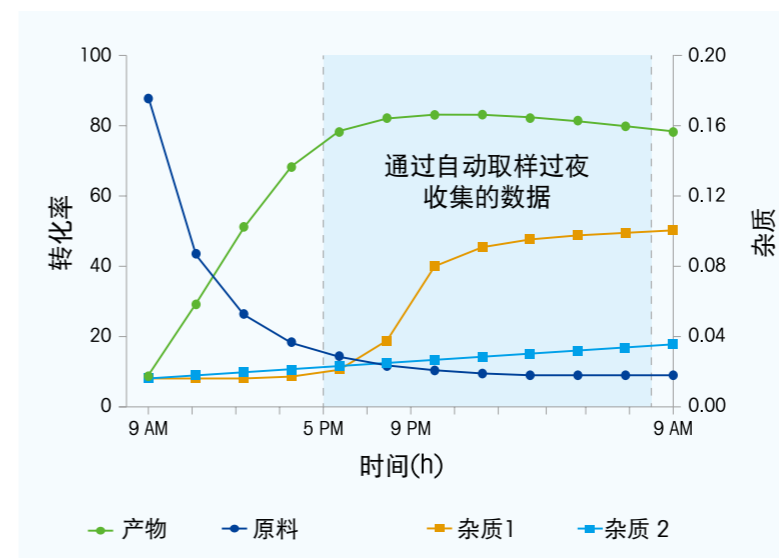


EasySampler可以轻松设置采样序列，全天24小时连续取样，获得完整的反应趋势图。

获取反应基础信息



完整了解杂质演化情况，提高产率 and 产品质量。将工艺条件和杂质生成位点进行关联。



通过深入数据阐明问题

了解反应过程中产物、副产物以及杂质的动力学及转化机制，对于化学工艺开发至关重要。反应分析中一个重要的困难在于有些反应需要无人值守并过夜，从而产生了数据缺失。

EasySampler的使用解决了数据缺失的问题，使得研究人员能够通过仪器自动从化学反应收集、淬灭和制备HPLC样品，并24/7无人值守运行。

了解Novartis如何确定氢化反应中副产物形成的根本原因

www.mt.com/wp-EasySampler

控制颗粒 在线颗粒大小、形貌和数目

在线颗粒分析技术跟踪工艺过程中颗粒的变化速率和程度。无需稀释，实时监测颗粒或液滴大小、形状以及数目，使得科学家可以获取终点信息，确保批次间的稳定性，并且优化下游产量和质量。



EasyViewer™100

ParticleTrack™ G400

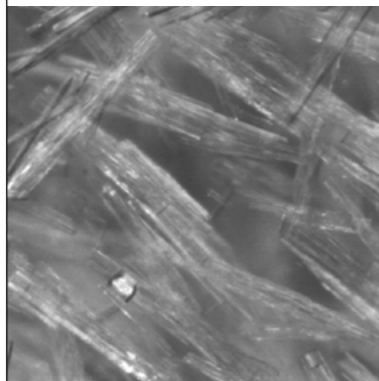
ParticleTrack™ G600

颗粒大小、形貌和数目



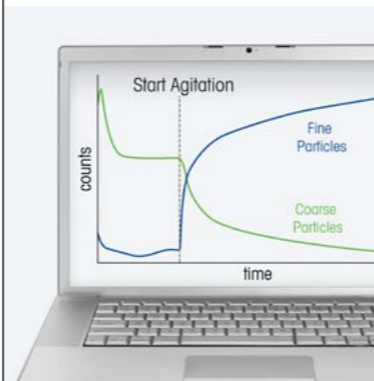
颗粒直接影响结晶、乳化等多相体系的反应性能。通过实时监测颗粒，科学家可以放心地理解、优化并放大工艺。

无需取样，理解工艺

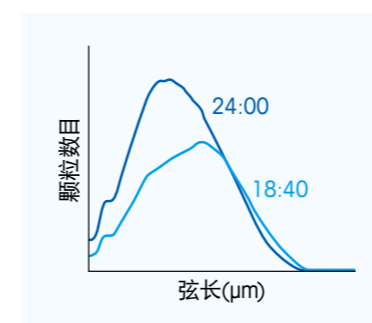
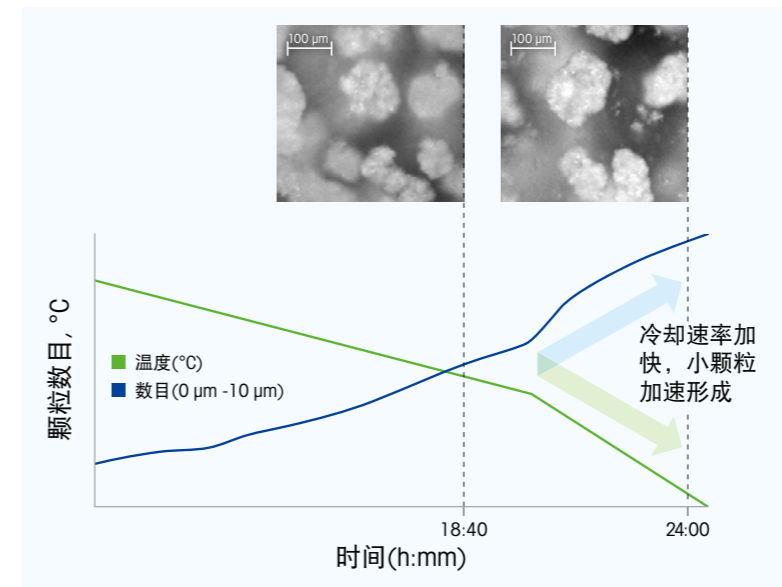


离线分析中的取样和制样可能造成颗粒的变化。通过对工艺过程中颗粒的粒径和数目变化进行跟踪，科学家可以安全并没有延迟地获得工艺信息，尤其是在极端的温度和压力下。

优化工艺



通过连续监控颗粒和实验参数、物料的调整，研究者可以基本确定最优的操作条件。在实验室及工厂获取的信息，能够保证通过高效的工艺获取目标颗粒。



时间轴上对比不同批次的颗粒分布，了解工艺参数对于颗粒或液滴体系的影响。

理解和控制结晶过程

通过使用ParticleTrack和ParticleView，科学家们可以轻松了解工艺参数对于颗粒体系的影响。确定工艺参数对于生长、聚集、破碎及形貌变化等结晶机制的影响，使得工艺优化方向有据可查。

在这个案例中，ParticleTrack连续监测颗粒粒径分布的变化，并将其与时间关联。当降温速率增加，小颗粒数目(0-10 μm)同样增加。ParticleView获取实时显微镜照片，提供颗粒大小及形貌的信息。这些数据被用于描述工艺指纹信息，并轻松地辨别批次差异。通过控制小颗粒形成，研究者可以优化下游的分离步骤，并且提高产品质量。

下载“通过颗粒粒径分析优化工艺”白皮书，了解更多信息

www.mi.com/wp-PSA

通过反应量热设计安全工艺

通过在开发全过程建立安全文化，科学家避免了频繁接触化学品。通过自动控制放热事件，发生事故的危險大大降低。通过辨识和调整导致放热的反应条件，增强放大工艺的信心，开发尽可能安全的工艺。



EasyMax HFCal™

OptiMax HFCal™

RC1mx™

保证人员安全



远距离控制温度、加料和混合等参数，使用在线分析技术进行监测，大大减少了研究人员与危险或高放热反应接触的机会。

确定无法放大的体系

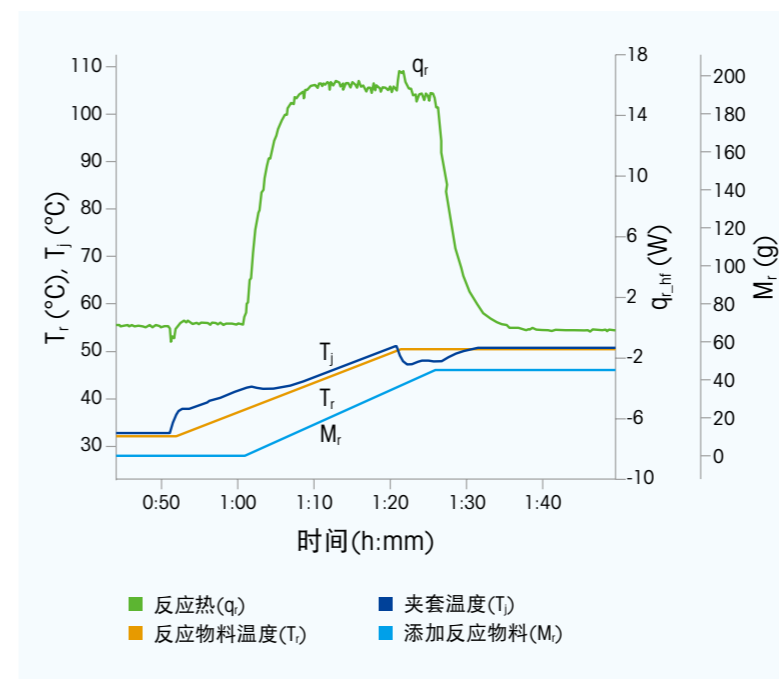


在全工艺条件下高重复性地获得准确量热数据。测量热转移、比热、热流、焓变等热力学参数，确保微小因素的影响也不被忽略。

降低风险，保证成功放大



通过预测最坏情况的后果，选择放大所需的设备。关键的信息(如诱导期、反应起点/终点，以及最大放热量和焓变，热累积以及绝热温升)确保可能的安全隐患被提前识别。



安全的设计

反应量热仪通过实验测量每个放热反应，可以在早期检测出不安全的过程。即使在某些极端条件下，研究人员也能够确信每个过程都是安全的、可放大的。

在左边的半间歇反应中，反应物是在温度上升过程中加入的。重叠的效应(温度上升，反应物增加，反应本身)需要精确地确定反应釜壁的热流，热累积，以及升高添加反应物温度所需要的能量。这对测量系统的精度和数据评估提出了很高的要求。

要了解更多信息，请下载“温度上升的风险-安全工艺开发实践”指南

► www.mt.com/wp-RisingTemp

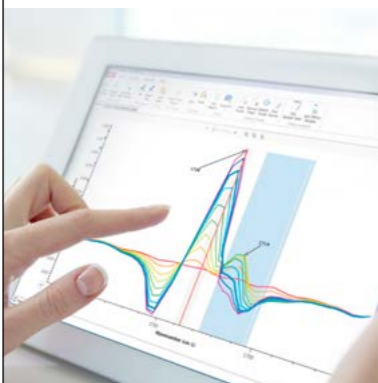
集成软件 从实验到决策

通过在统一窗口中叠加和同步操作条件和在线测量曲线，研究人员从每个实验中获得了相互关联的全景了解。智能算法应用大数据手段来简化从实验到决策的工作流程。这使得研究人员可以将数据转化为信息，自动生成报告，并在整个组织中共享信息。



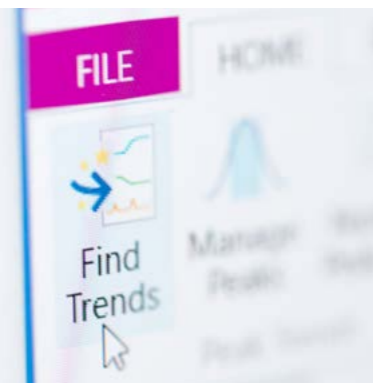
对所有数据进行专业的分析。集成软件使研究人员能够轻松地提取关键的信息，方法是在一个简单而强大的平台上获取所有分析数据，并将其可视化、分析和比较。

直观和智能



简单而强大的软件可以对反应和过程进行一致的控制和测量。这减少了人为错误和培训成本，并保证重要信息不会丢失。

一键分析(One Click Analytics™)

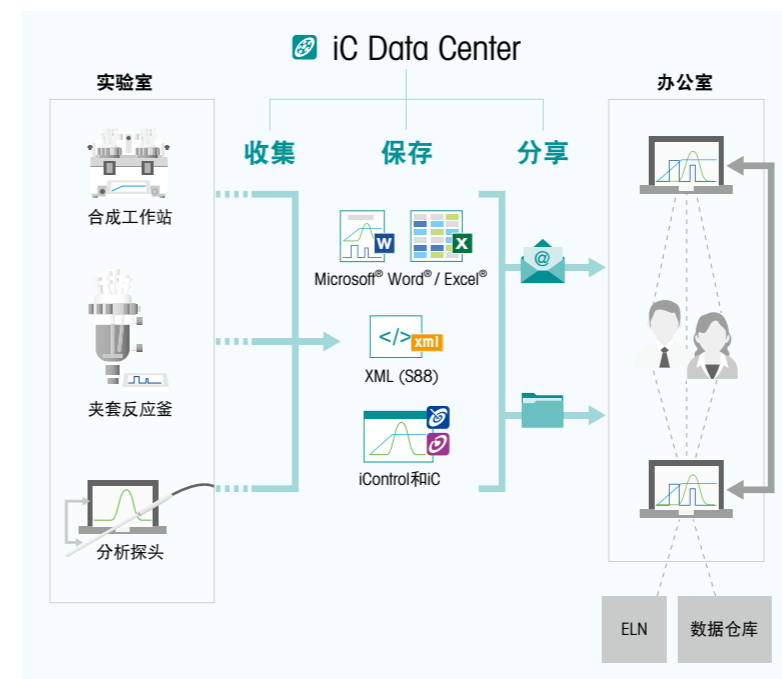


易于使用的分析、报告和数据管理工具允许通过单击按钮创建图片、视频和演示文稿。关键的过程信息可以被很容易地共享，使得项目团队能够为决策提供依据，并迅速达成共识。

多重应用场景下的工作流程



iC软件通过最优的数据解读流程引导用户，并被应用于分析化学反应、结晶或量热等场景。特定的分析工具意味着更快的数据分析，保证更多的时间以进行下一个实验。



数据管理解决方案-iC Data Center™

据统计，由于没有从实验室仪器中转移出来，或者根本没有被记录下来，85%的实验室数据被直接丢失。

iC Data Center软件支持全公司的信息管理，并确保所有实验数据自动从本地工具中获取，保存为有用的格式，并在电子实验室笔记本(ELN)或数据管理系统上共享，从而符合法规规定。

通过一个易于使用的基于web的配置界面，iC Data Center让用户花更多聚焦在化学反应上，而使用较少的时间转移文件或将数据转换成其他格式。

要了解更多信息，请下载白皮书“将85%的实验数据丢失转化为100%的数据捕获”

www.mt.com/wp-iCDC

反应过程及晶型转换监测 原位拉曼光谱分析

基于探头，结合iC Raman 7.0软件，ReactRaman可监测化学反应和结晶过程，揭示单相或多相系统中的反应机制和动力学特征。在晶型转换过程中，通过对不同晶型的特征峰进行分辨，科学家可以准确判断转晶程度及其终点，从而避免晶型杂质。



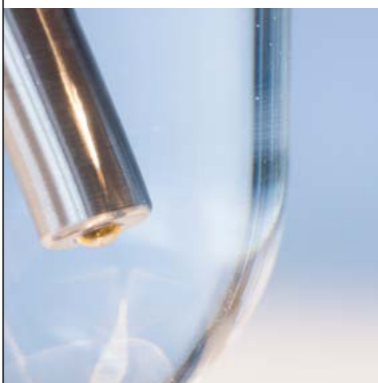
ReactRaman™ 785



广泛应用各种技术 支持研究和分析

梅特勒-托利多的综合产品系列针对每一类应用，为用户提供灵活性和精确性，同时保证卓越的质量和性能。

均相及多相反应监测



拉曼光谱与红外光谱互补，利用探头技术，对于有机、聚合等反应体系进行原位研究，无需离线取样，直接获得反应动力学及机理信息。

跟踪晶型转换



在线拉曼技术被广泛应用于相转变研究，比如结晶中的晶型转换，以及水合物转化、无定型化等过程，同时也可以用于研究共晶的生成机理。

一键分析数据



基于iC软件平台以及反应分析领域近三十年的经验，iC Raman能够快速地将数据转化为对用户有用的信息，指导科学家做出正确的工艺决策。



称重



滴定



pH测量



热分析



物理参数



移液器



紫外/可见光谱



自动化化学

了解更多

梅特勒-托利多自动化合成和在线分析的世界领导者。通过同行评审的科学论文、白皮书、研讨会和案例研究，获得关于科学应用和行业趋势的具体信息。



应用文献

大量应用实例，包括杂质分析、反应动力学、流动化学、结晶、反应量热法、混合和质量转移、热传递和放大等领域。

► www.mt.com/ac-library



在线和现场研讨会

应用户需求推出的在线研讨会，学习在科研和工业环境中的同行如何应用自动化的合成和过程分析技术。

► www.mt.com/ac-seminars

www.mt.com/autochem

访问网站，了解更多信息

梅特勒-托利多 METTLER TOLEDO

地址：上海市桂平路589号

邮编：200233

传真：021-64853351

地址：江苏省常州市新北区太湖西路111号

邮编：213125

传真：0519-86641991

E-mail: ad@mt.com

梅特勒-托利多始终致力于其产品功能的改进工作。基于该原因，产品的技术规格亦会受到更改。如遇上述情况，恕不另行通知。

12320684 Printed in P.R. China 2021/08



官方微信 MT-Official