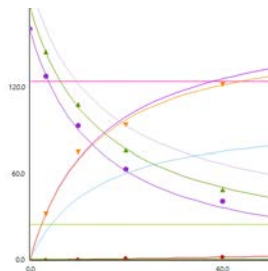
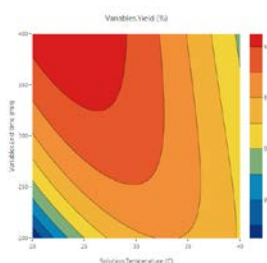


# Vorhersage der Reaktionsleistung mit kinetischer Modellierung



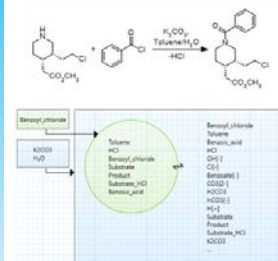
### Vermeidung unnötiger Versuche

Reaction Lab unterstützt einen effizienten, innovationsgetriebenen Prozessentwicklungsablauf, bei dem hochwertige Daten in ein einzigartiges Prozessverständnis umgewandelt werden. Eine kinetische Modellbibliothek ermöglicht die Erforschung des Design Space, ohne dass mehrere Versuche durchgeführt werden müssen.



### Optimierung der Reaktionsleistung

Die kinetische Modellierung vermittelt ein tiefgreifendes Verständnis der Reaktionsausbeute, Selektivität und Katalysatordeaktivierung. Diese Charakterisierung kann neue Möglichkeiten zur Prozessoptimierung aufzeigen, die in-silico ausgeführt und im Labor verifiziert werden können.



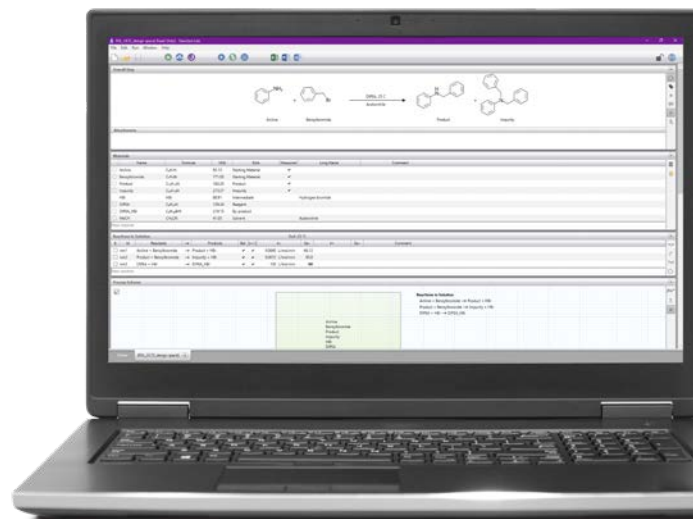
### Schnelle Entwicklung

Reaction Lab macht die Modellierung der Auswirkungen wichtiger Prozessparameter auf die Reaktionskinetik schnell und einfach. Diese Erkenntnisse können dann genutzt werden, um auf Anhieb Kampagnen mit der erwarteten Ausbeute und Qualität zu dosieren.



### Untersuchen neuer Technologien

Kinetische Modelle, die unter Batch-Bedingungen entwickelt wurden, können verwendet werden, um den Betrieb eines Prozesses im großen Maßstab in herkömmlichen Batch-Reaktoren oder in anderen Technologien wie Strömungsreaktoren zu untersuchen, ohne dass neue Geräte angeschafft und installiert werden müssen.



### Reaction Lab™

Reaction Lab ist eine leicht erlernbare kinetische Modellierungsplattform, die für Chemiker entwickelt wurde, die in der API-Prozessentwicklung tätig sind und noch keine Erfahrung in der Modellierung haben. Reaction Lab erstellt und löst die notwendigen Gleichungen, sodass sich der Benutzer auf die Analyse seiner chemischen Prozesse konzentrieren kann. Die leistungsstarken Modellierungstools in Reaction Lab umfassen Module für die kinetische Anpassung, die Durchführung von „Was wäre wenn?“-Simulationen, die automatische Optimierung und die Erkundung des „Design Space“ in-silico.

## Vorhersage der Reaktionsleistung mit der bedienerfreundlichen kinetischen Modellierung

- Leicht erlernbare Modellierungsumgebung
- Integriert Informationen von ELN und gängigen Tools für Chemiker wie ChemDraw®
- Funktioniert mit allen Zeitreihendaten wie IR oder HPLC
- Expertenschulungen und Support
- Einsetzbar auf jedem PC oder Notebook mit Windows 8 oder höher
- Verfügbar in den Sprachen Chinesisch, Japanisch und Koreanisch
- Offene Datenarchitektur, um die bestmögliche Nutzung und Wiederverwendung aller verfügbaren Datenströme zu ermöglichen

### Vorlagenmodelle für Reaction Lab umfassen:

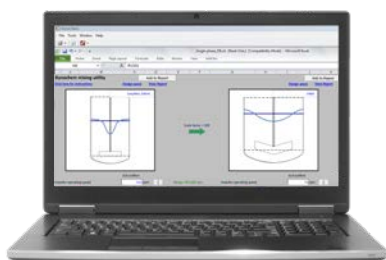
- Biphasische Flüssig-Flüssig-Reaktion (z. B. Schotten-Baumann-Reaktion)
- Biphasische Fest-Flüssig-Reaktion (z. B. Diels-Alder-Reaktion)
- Katalytische Hydrierung (z. B. Nitrilreduktion)
- Dehydrierung (z. B. Deprotonierung einer Diprotinsäure)
- Feb-Batch Teleskopische Reaktion (z. B. Wittig-Olefinierung)
- Heck-Reaktion
- Heterogene Fest-Flüssig-Reaktion (z. B. Aldol-Kondensation)
- Mitsunobu-Reaktion
- pH-empfindliche Reaktion (z. B. Aminacylierung)
- Phasentransferkatalyse
- Suzuki-Kupplung

## Scale-up Suite

Scale-up Suite ist die weltweit führende Software für die Entwicklung und das Scale-up von Wirkstoffprozessen für Wissenschaftler und Techniker in der Pharmaindustrie.

### DynaChem

Beschleunigte chemische  
Prozessentwicklung



### DynaChem Biologics

Beschleunigung der  
Bioprozessentwicklung



### Reaction Lab

Beschleunigung der  
katalytischen Reaktion



#### METTLER TOLEDO Group

Automatische Reaktoren und In-situ-Analysen  
Ansprechpartner vor Ort: [www.mt.com/contacts](http://www.mt.com/contacts)

[www.scale-up.com](http://www.scale-up.com)

Weitere Informationen