



React
ALL

反应筛选的未来

加快产品开发

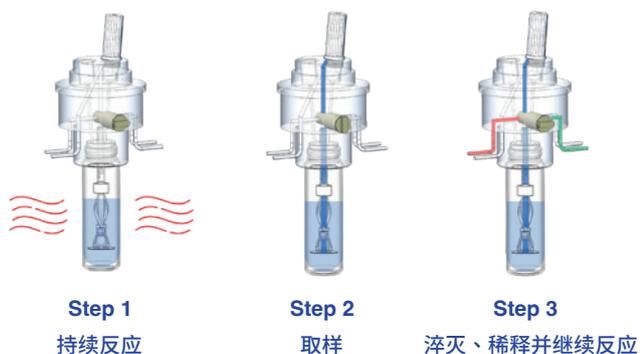
ReactALL 是一款创新的台式多反应器系统，具有新颖的自动取样和顶置搅拌功能，适用于中等通量实验。这一尖端设备专为满足化学反应筛选和优化的需要而设计，包括路线考察以及工艺开发和优化。它填补了高通量筛选与大型实验室反应器之间的空白，以中等通量提供高质量、数据丰富的实验，且材料需求量低。取样装置可以捕捉具有代表性的固体，搅拌装置可以悬浮但不研磨固体，集成的摄像头可以观察和剖析颗粒的大小和形状，从而很好地适应非均相反应。所有这些都通过 Technobis 的 SmartCap™ 技术在 5-10 mL 工作容量的标准样品瓶中实现。

特点

- 五个独立控制的反应器，工作容积为 5-10 mL
- 集成自动取样、淬灭和稀释功能，可直接将样品收集到 HPLC 瓶中，每个反应器最多可容纳 18 个样品
- 无需刺穿反应器隔膜，即可对非均相反应中的样品进行取样
- 使用 CFD 设计的新型螺旋搅拌器进行高空搅拌，无需研磨即可均匀悬浮固体
- 使用带有 SmartCaps™ 的标准样品瓶，具有新颖的取样和搅拌机制
- 集成彩色摄像头，用于观察和分析反应器内颗粒的大小、形状和浊度
- 开放式应用程序接口--可与机器人集成
- 使用少量的原材料，能够得到高产量、高质量、数据丰富的实验

集成自动取样、淬灭和稀释功能，可直接取样到 HPLC 瓶中

该系统由五个小型反应器组成，每个反应器都配备了全自动取样装置。取出来的样品会被立即淬灭、稀释并转移到 ReactALL 上的标准 HPLC 瓶中。系统可精确控制样品量和稀释量，以进行定量分析。宽口径管道和流线型无泵流体技术确保了样品的稳健传输，即使是非均相样品也不例外。此外，新颖的 SmartCap™ 取样技术不会刺穿反应器隔膜，因此不会出现穿孔导致溶剂流失。稀释后的样品收集到高效液相小瓶架上，便于转移到高效液相上，从而简化了工作流程。



节省多达 76% 的实验时间

加快产品上市速度，节省宝贵的时间、资源和成本。晚上开始试验，第二天早上即可知道结果。

利用 SmartCap™ 技术的强大功能

在每个反应器中进行全自动无人值守取样。

整个程序完全受控

取样-淬灭-稀释-冲洗序列执行无误，无需额外的探针或内部泵。

专为均匀混合而设计

使用专门设计的搅拌器实现均匀混合。

以最少的材料用量探索更多的可能性

ReactALL 使您能够探索数据丰富的多种实验条件，同时节省资源。

最小体积，最大输出

只需 5 mL 反应混合物即可进行实验。

多功能筛选

是有机合成和多条件筛选的理想选择。

独立温度控制

可以独立控制 5 个反应器中每个反应器的实验温度。温度范围从 $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$ 到 $150\text{ }^{\circ}\text{C}$ ，无需冷却器。使用选配的冷却器，温度可低至 $-25\text{ }^{\circ}\text{C}$ 。





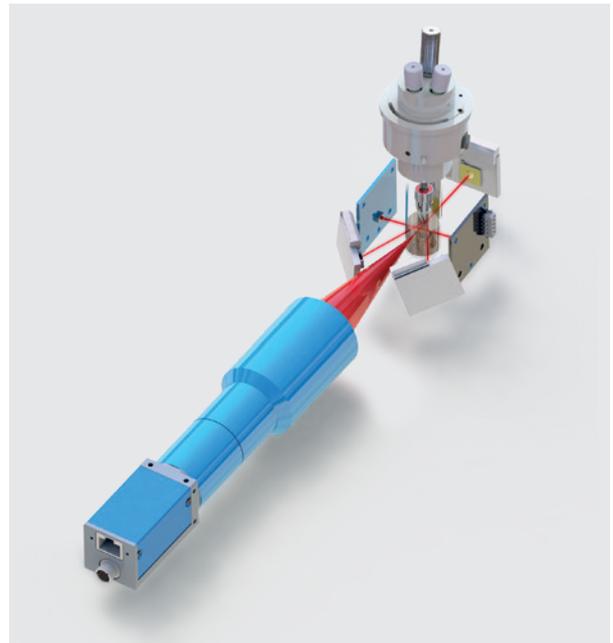
顶置式搅拌，避免研磨固体

SmartCap™ 悬挂着创新的搅拌器，这种搅拌器是在计算流体力学的帮助下设计的，可以均匀地悬浮固体而避免研磨。螺旋叶片上方的螺旋形状会产生小漩涡，从而促进固体的混合和均匀分布，即使在小直径的反应器中也是如此。重要的是，搅拌器不会研磨固体，这与搅拌棒相比更有优势，因为搅拌棒会研磨固体并改变化学性质。

叶轮



螺旋叶片



利用新一代分析技术实现卓越研究

ReactALL 配备了集成式彩色摄像头，可提供有关颗粒形状和大小的宝贵信息，并允许您持续监控正在进行的反应。

仪器的在线分析无需探头、电线或管路，也不与反应混合物接触，从而避免了潜在的干扰或交叉污染。

此外，仪器也保留透光率作为基础功能，作为观察反应过程中反应体系变化的重要指标。

您想使用拉曼光谱跟踪在线化学反应吗？ReactALL 也可以配备在线拉曼光谱。

专为未来实验室设计

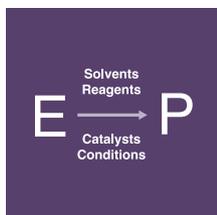
节省时间和材料，同时提高洞察力和成果。ReactALL 可集成到未来实验室中，在简化实验流程的同时提供用户友好的直观体验。

- 精确、可重复、标准化和可扩展
- 通过开放式应用程序接口与其他第三方设备连接
- 仪器体积小巧，优化了生产效率



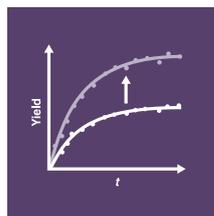
路线考察

路线考察是药物化学研发中的重要步骤。在临床前阶段之后，药物发现阶段使用的合成路线可能不适合大规模生产。在确定最终合成路线前，要考虑安全、环境、经济、控制和产量等多种因素。与高通量筛选相比，ReactALL 有更丰富的数据和更高质量的实验控制的独特优势。与典型的自动化实验室反应器相比，它还能以更少的材料提供更大的通量。这样，当定制合成中间体供应有限且价格昂贵时，就可以在工艺开发的早期阶段应用高质量、数据丰富的实验，真正做到事半功倍。例如，通过更快、更详细地研究更多的反应条件，使关键但困难的反应发挥作用，从而更快地拿到更高效的合成路线。



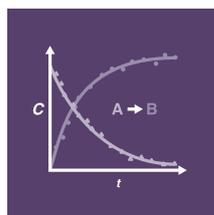
反应筛选

筛选最佳催化剂、试剂或溶剂的反应一般是通过高通量机器人平台使用极少量的样品实现。虽然这些系统可以探索各种变量，但实验条件可能无法预测，而且每个反应提供的数据很少，通常只有反应终点分析。需要在更具规模预测性的条件下进行更大规模的确认实验，尤其是非均相反应（约占 70% 的反应）。ReactALL 处理非均相反应的能力使其成为筛选实验的理想选择。ReactALL 还可以用于筛选反应放大的参数，即对反应放大敏感的参数：如化学当量增加（如浓度梯度的放大）、温度的变化（如局部升温/降温）以及原料、中间体和溶剂的批次变化。重要的是，与典型的自动化实验室反应器相比，ReactALL 的反应样品用量更少，通量更高，因此可以在定制合成中间体供应有限且非常昂贵的情况下，在工艺开发时间线的早期进行这些关键实验。



反应优化

要根据温度和化学计量学等连续变量优化反应产率、选择性和杂质控制，就需要进行高质量、数据丰富的实验，理想情况下还需要 ReactALL 可提供更高的通量和更小的规模，从而提高速度和效率。由于 HPLC 的适用范围很广，ReactALL 集成的 HPLC 采样功能不仅可对主要成分分析，对痕量杂质的分析也非常有价值。



反应解析和动力学研究

反应解析对于定性观察和定量动力学建模很有价值，ReactALL 的高效液相色谱 (HPLC) 自动取样功能集成粒度和粒形分析相机，可实现这两方面的功能。定性观察是反应筛选（通过寻找在错误条件下运行的良好反应，即纠正假阴性结果）和反应优化（找到不仅能获得高产率和选择性的最佳条件，在这个条件下产率和选择性随反应时间和条件的变化而稳定存在）的关键。通过剖析还可以了解反应停滞或诱导期、反应中间产物和任何产物分解。在 ReactALL 中一次性就可以探索五个条件。

反应解析对反应动力学和定量建模也极具价值，可以为反应优化提供机理认识，通过反应建模将测量的反应条件推断到更广阔的假设反应空间，包括尚未进行实验研究的反应参数和规模（从而节省时间和资源）。根据反应曲线（如 HPLC）建立的模型比仅根据反应终点数据建立的模型更丰富。对杂质（可通过 HPLC 检测）的形成进行建模尤为重要，因为形成痕量物种的机理可能非常复杂且不直观，而杂质的控制对于药物合成非常重要。ReactALL 的优势在于将反应浓度曲线（来自 HPLC）与反应质地和颗粒特征（来自集成相机）联系起来，从而建立模型，理解关键但难以察觉的效应。

系统的配置



ReactALL



SmartCap™



螺旋搅拌器



叶轮搅拌器



用于淬灭-稀释-冲洗-废料的瓶子



带托盘的标准高效液相色谱



熔块过滤器 (0.5-10 μm)

ReactALL 参数

反应器	5
反应器类型	16 mL 小瓶
工作容积 (mL)	5 - 10
温度曲线	5
温度范围 (°C)	-10 至 150 無冷却器 -25 至 150 可选配冷却器*
温度精度 (°C)	0.5
加热/冷却速率 (°C/min)	0.1 - 20
搅拌模式	叶轮和螺旋形
搅拌器材料	3D 打印铬镍铁合金和聚四氟乙烯涂层磁铁
搅拌速率 (rpm)	0 - 1250
浊度	每个反应器
回流	0 - 35 °C 超压溢流阀
取样量	12 - 15 μl
采样方式	连续采样
制样时间	2.5 - 4 分钟
稀释倍数	70-100 倍
取样体积 (包括淬灭和稀释)	~1.2 mL
样品瓶	标准 HPLC
全自动取样 (取样、淬灭、稀释和冲洗)	每个反应器 16 - 18 个
在线分析	5个相机和/或拉曼探针
粒度 and 粒形分析	是 - 使用粒子视图成像摄像机
额外功能	额外的固体/液体加料口
数据导出	Word 报告、XML、CSV
占地面积 (长x宽x高, 厘米)	93 x 52 x 43
附加软件	高级图像分析

* 当环境温度为 21°C ± 2°C 时，冷却器在 18°C 时的消耗功率约为 1180 瓦。

