

# Softwarelösungen für GPC-Analytik

Moderne GPC-Software unterstützt den Anwender in allen Phasen einer Analyse. In den Bereichen Proben- und Ergebnisverwaltung sowie automatische Kalibration/Rekalibration/Auswertung wurden in letzter Zeit deutliche Fortschritte erzielt. Am Beispiel von PSS WinGPC werden die verschiedenen Prozesse einer GPC-Analyse sowie deren automatisch ablaufende Abschnitte diskutiert.

Die Gelpermeationschromatographie (GPC) hat sich als Standardmethode für die Charakterisierung von Polymeren etabliert, da sie viele Informationen mit nur einer einzigen Analyse liefert. Die Bedeutung der GPC hat in den letzten Jahren durch die vielseitigen Möglichkeiten der Kopplung mit anderen Methoden sogar noch einmal deutlich zugenommen. Das führte natürlich zu einem erhöhten Probenaufkommen in diesem Bereich und dazu, dass Arbeitsprozesse im Laborablauf neu und effektiver gestaltet werden mussten. Unterschiedlichste Automatisierungsbestrebungen haben bereits dazu geführt, dass mehr Proben in kürzerer Zeit untersucht werden können. Die Probenvorbereitung und -injektion wurde durch leistungsstarke Autosampler und vorkonfektionierte Kalibrierstandards, die dem Anwender das zeitaufwendige Einwiegen abnehmen, deutlich vereinfacht. Die Analysenzeiten konnten durch die Entwicklung von HighSpeed Säulen um den Faktor 5-10 gesenkt werden. Auch bei der Entwicklung von Software zur Datenaufnahme und -analyse haben Automatisierungen eine entscheidende Rolle gespielt. Vollautomatische Abläufe von Kalibration/Rekalibration über Auswertung bis hin zur Reporterstellung und -ausgabe sind heute eine berechnete Forderung der Anwender. Denn in dem Maße, in dem die eigentliche Routinearbeit weniger wurde, sind die Anforderungen in anderen Bereichen gestiegen. Der Analytiker ist zum Manager vieler zum Teil parallel ablaufender Prozesse geworden. Neue Aufgaben (z.B. bezüglich Daten- und Ergebnisverwaltung) kamen hinzu, andere Aufgaben haben eine deutlich höhere Priorität gewonnen, zum Beispiel die Bereitstellung von Ergebnissen im Inter- oder Intranet. Die Analyse von Proben mittels GPC umfasst damit viele Einzelprozesse, bei denen verschiedene Stufen von Automatisierungen wünschenswert sind. Abb. 1 zeigt die rele-

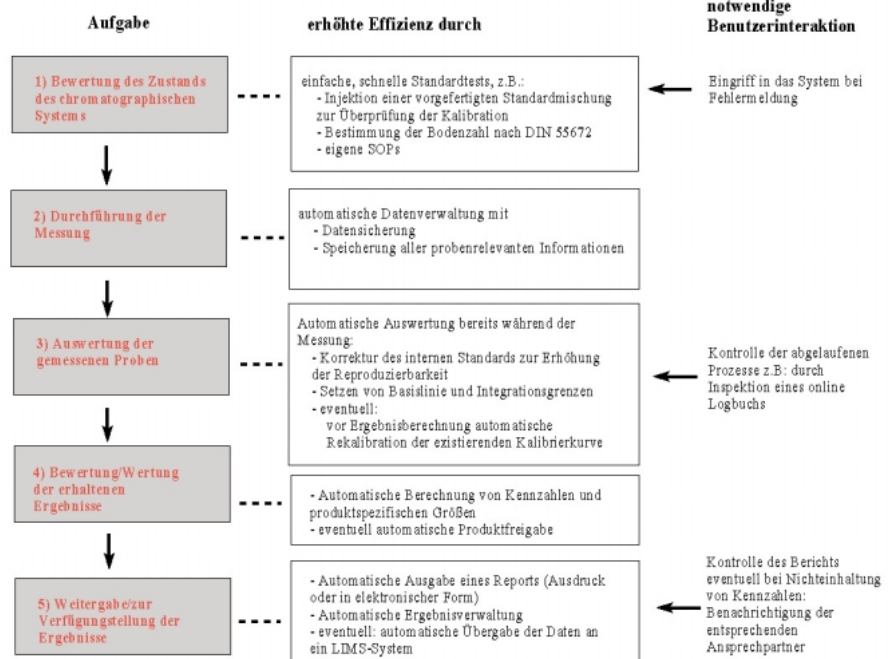


Abb. 1: Die fünf zu durchlaufenden Prozesse bei einer GPC-Analyse sowie die verschiedenen Automatisierungsstufen.

vanten Prozesse sowie die möglichen automatisch ablaufenden Abschnitte. Eine moderne GPC-Software sollte den Anwender bei den hier aufgeführten fünf Prozessen unterstützen und die ausgeführten Schritte nachvollziehbar dokumentieren. Am Beispiel der Datenerfassungs- und Auswertesoftware PSS WinGPC werden die einzelnen Prozesse beschrieben und eingeordnet.

## Bewertung des Zustands des chromatographischen Systems – einfache und schnelle Standardtests

Die DIN-Norm für GPC gibt den Anwendern mit der Bestimmung von Bodenzahl, Trennleistung und Asymmetrie einen schnellen und robusten Test an die Hand, mit dem der Zustand des Messsystems sehr gut beurteilt werden kann. Der Systemtest in PSS WinGPC ist konform mit DIN 55672 und berechnet alle relevanten Größen. In vielen Labors existieren noch eigene SOPs oder es wird die Möglichkeit genutzt die Kalibration mit einer vorkonfektionierten Standardmischung zu überprüfen. Auch diese Einzeltests können in den automatisierten Ablauf mit eingebunden werden.

## Durchführung der Messung – automatische Probenverwaltung

Bei der Datenverwaltung haben sich Datenbanken bewährt. Sie sichern die Aktualität der Ergebnisse und erlauben ein schnelles

Wiederfinden von Proben durch die Verwendung von Filtermasken. PSS WinGPC nutzt seit langem das Datenbankkonzept, um sicherzustellen dass alle relevanten Informationen und Parameter an einem Ort zusammengefasst sind. Ferner erlaubt es den Anwendern einen schnellen Zugriff, auch auf ältere Daten. Für die aktuelle WinGPC Version wurde die Datenbankfunktion um zusätzliche Parameter erweitert und die Filtermaske ausgebaut. Anwender können somit auch bei vagen Angaben zu einer Analyse mit wenig Zeitaufwand die gewünschten Informationen beschaffen (Abb. 2). Eine Datenbank bedarf natürlich auch der Pflege. Hier nimmt PSS WinGPC den Anwendern viel Arbeit ab. Zu einem unbeabsichtigtem Überschreiben von Daten kann es

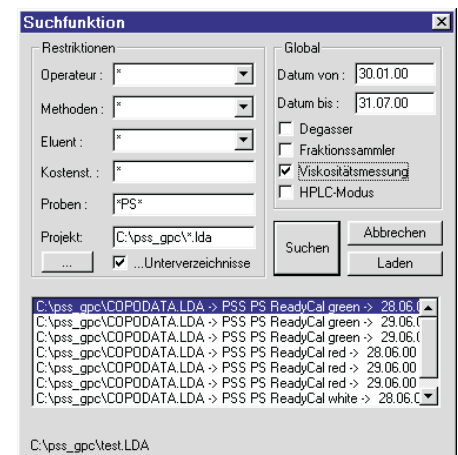


Abb.2: Filtermaske in PSS WinGPC zum Durchsuchen der Probandatenbank.

## Keywords

GPC, Software, Automatisierung, Client/Server

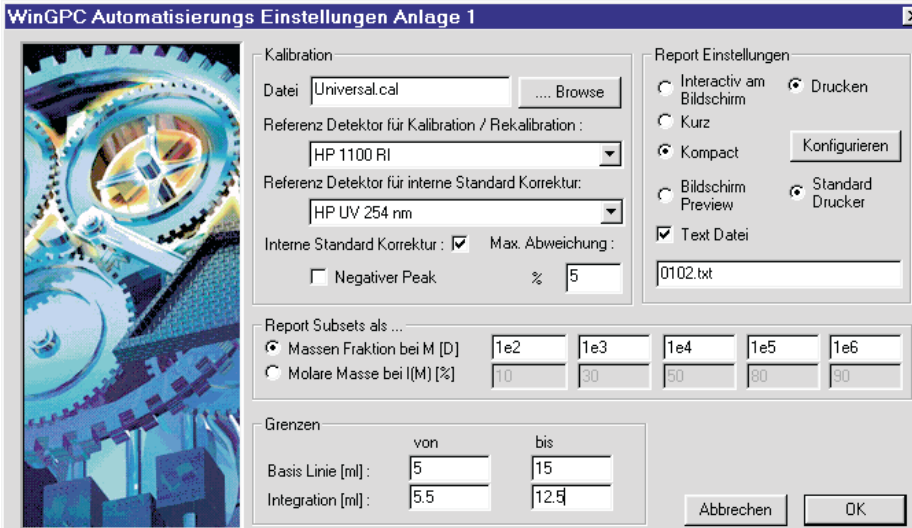


Abb.3: Automatisierungseinstellungen in PSS WinGPC mit interner Standardkorrektur und automatischer Rekalibration.

durch die eingebaute Versionskontrolle gar nicht kommen, auch wenn gleiche Probenamen verwendet werden. Die Methoden- und Kalibrierinformationen werden automatisch verwaltet und in der Datenbank mitgespeichert, ohne dass der Anwender sie explizit noch einmal eintragen muss. Damit können die Vorteile der Datenbank voll ausgenutzt werden ohne den Nachteil einer zeitaufwendigen Pflege durch die Anwender.

### Auswertung der gemessenen Proben – Automatische Auswertung

PSS WinGPC bietet eine umfassende automatische Auswertung an. Neben den üblichen Auswerterroutinen wie interne Standardkorrektur über einen zugesetzten Flußmarker, Setzen von Basislinie und Integrationsgrenzen gehören auch die automatische Erstellung von Kalibrierkurven sowie deren Rekalibration zum Leistungsumfang (Abb. 3). Die flexible Mehrbereichsauswertung ist auf Wunsch

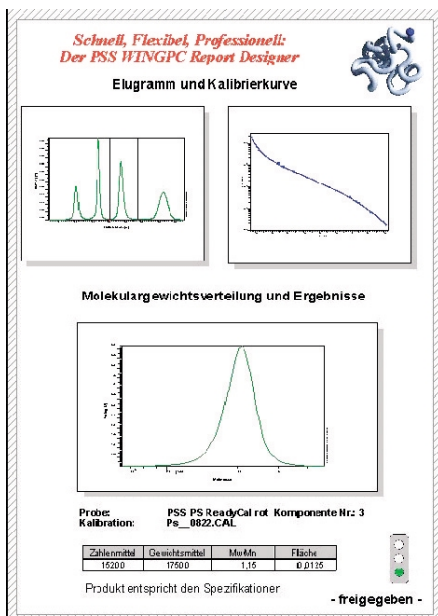


Abb.4: Ausdruck aus dem PSS WinGPC Report Designer mit automatischer Produktfreigabe.

in die Auswertung integrierbar. Automatisch ausgeführte Auswertungen werden im Logbuch dokumentiert. Dieses ist direkt im Hauptprogramm integriert und kann von dort aus eingesehen werden. Somit kann der Anwender die Auswertung Schritt für Schritt nachvollziehen und belegen.

### Bewertung der erhaltenen Ergebnisse – Automatische Berechnung von Kennzahlen

Auch der leistungsstarke PSS WinGPC Report Designer kann in die Automatisierung eingebunden werden. Dabei ist der WinGPC Report Designer deutlich mehr als nur ein Ergebnisausgabemedium mit DTP Qualität. Beim Ausdruck überprüft er z.B. Freigabekriterien, die der Anwender selbst festlegen kann oder berechnet produktspezifische Kenngrößen. Werden die vorgegebenen Spezifikationen nicht eingehalten wird das auf dem Ausdruck ohne weitere Benutzeraktivität dokumentiert. So reicht eine einfache Kontrolle der fertigen Reports, um festzustellen, ob die Proben den Anforderungen entsprechen (Abb. 4).

### Weitergabe der Ergebnisse – Automatische Reportausgabe

Neben dem Ausdruck auf Papier erlaubt PSS WinGPC die elektronische Bereitstellung von Ergebnissen. Reports können unter anderem als jpeg, pdf oder im html-Format zur Verfügung gestellt und abgelegt werden. Somit können die Ergebnisse auch per e-mail geschickt oder ins Inter-/Intranet gestellt werden.

Zur Ergebnisverwaltung haben viele Firmen ihre eigenen LIMS-Systeme eingerichtet, um Daten zentral verfügbar zu machen und zu sichern. PSS WinGPC bietet die Möglichkeit die Ergebnisse aus der WinGPC Datenbank direkt und ohne Mehraufwand in das LIMS-System einzubinden.

### Fazit

PSS WinGPC unterstützt den Anwender in allen Phasen der Analyse einer Probe. Durch die zugrundeliegende Datenbank wird eine hohe Flexibilität erreicht, die die Probenverwaltung stark vereinfacht. Sich wiederholende Prozesse können von der automatisierten Auswertung übernommen werden und die Report- und Ergebnisausgabe sind an die Anforderungen eines modernen Analytiklabors angepasst. Unbedingt erwähnt werden muss noch die neue Datenerfassungshardware zu PSS WinGPC. Schon seit langer Zeit ist die Speicherung der Daten auf ein Netzwerklaufwerk möglich. Da zur PSS WinGPC Auswertelizenzen kostenlos erhältlich sind, war es dem Anwender bequem möglich nicht nur am Messrechner auszuwerten sondern an jedem beliebigen Rechner im Netzwerk. Seit der Einführung des neuen PSS LAN-Interfaces hat man diese Flexibilität auch für die Datenerfassung. Diese ist von beliebigen Netzwerkrechnern aus möglich. Als weiteren Baustein bietet PSS den Terminalserver zur PSS WinGPC an. Dieser verwaltet bis zu 16 Anlagen, die Anwender über das Netzwerk reservieren können. Wurde die Datenaufnahme gestartet kann die laufende Messung von allen Netzwerkrechnern aus bearbeitet, kontrolliert oder ausgewertet werden. Die Zugangskontrolle sorgt dafür, dass kein Unbefugter in die Messung eingreifen kann. Somit bietet PSS WinGPC nun das ganze Leistungsspektrum von der lokalen Einzelplatzlösung hin zur effektiven Client/Server Lösung für Laboratorien mit vielen Instrumenten, auf die gleichzeitig viele Anwender zugreifen müssen. Da sowohl die Software als auch die Datenerfassungshardware zudem modular aufgebaut sind, ist die Erweiterung eines bestehenden Systems denkbar einfach und ohne großen Mehraufwand jederzeit realisierbar.

### DIE AUTORIN



#### Dr. Daniela Held

Studium der Chemie an der Johannes Gutenberg-Universität Mainz seit 2000 Tätigkeit bei Polymer Standards Service GmbH, Abteilung Software und Komplettlösungen

### INFORMATIONEN

Polymer Standards Service GmbH  
In der Dalheimer Wiese 5  
55023 Mainz