

Aufgabenstellung zur Masterarbeit von cand. M. Sc. Vorname Nachname

Einbindung eines ESI-MS in eine autonome Robotikstation zur automatisierten Probenanalyse

(Integration of an ESI-MS into a robotic station for automated sample analysis)

Hintergrund

Autonome Laborplattformen (engl. *self-driving labs*, *SDLs*) verbinden Robotik-basierte Laborautomatisierung mit künstlicher Intelligenz (KI) und sind dadurch in der Lage, Experimente eigenständig zu planen, durchzuführen, zu analysieren und zu optimieren. SDLs haben sich bereits als äußerst wirksame Werkzeuge für die beschleunigte Entwicklung von z.B. organischen Verbindungen, Nanomaterialien, Dünnschichten, sowie Biomolekülen und Biosystemen erwiesen. Die Vorteile autonomer Labore liegen auf der Hand: Sie bieten eine höhere Reproduzierbarkeit, da sie unabhängig vom Bediener arbeiten, und können synthetische und analytische Aufgaben kontinuierlich ausführen. Durch die Integration von automatisierter Datenanalyse, Auswertung und datengetriebener Optimierung der Prozessparameter können experimentelle Daten in hoher Geschwindigkeit und standardisierter Qualität erzeugt werden. Durch die intelligente Versuchsplanung können Optimierungsprobleme mit einer verringerten Anzahl an Experimenten und mit geringerem Zeitaufwand im Vergleich zu herkömmlichen Verfahren gelöst werden. Zentrale Herausforderungen bestehen dabei in der Koordination der unterschiedlichen Softwaresysteme der einzelnen Geräte und der Entwicklung von Aufbauten, die eine reibungslose und fehlerfreie Durchführung automatisierter Experimente ermöglichen. Die Überwindung dieser Hürden ist entscheidend, um das volle Potenzial autonomer Laborsysteme zur Beschleunigung wissenschaftlicher Entdeckungen auszuschöpfen.

Aufgaben

Im Rahmen dieses Projektes soll ein Messgerät für Elektrospray-Ionisations-Massenspektrometrie (ESI-MS) in eine Robotikstation integriert werden, um eine automatisierte Probenanalyse zu ermöglichen. Zunächst muss dafür die Programmierschnittstelle (API) des Geräts in die bestehende Python-basierte Software der Robotikstation eingebunden werden. Anschließend wird ein Substratscreening für einen Übergangsmetallkatalysator durchgeführt. Dies umfasst die Entwicklung und Durchführung eines vollständigen Workflows, beginnend bei der Probenvorbereitung bis hin zur anschließenden Analyse mittels ESI-MS. Sobald geeignete Substrate identifiziert wurden, sollen die Reaktionsparameter für diese Substrate, soweit möglich, algorithmisch optimiert werden, um signifikante Substratumsetzungen zu erzielen.

Praktische Teilaspekte der Arbeit sind:

- Einbindung der API des ESI-MS in die Python-basierte Software der Robotikstation
- Entwicklung eines Workflows von der automatisierten Probenvorbereitung bis hin zur ESI-MS Analytik für Screening- und autonome Optimierungsexperimente
- Durchführung eines Substratscreenings und Demonstration der autonomen Optimierung von Reaktionsparametern für geeignete Substrate
- Übersichtliche Dokumentation der Ergebnisse in schriftlicher Form und Präsentation in einem Seminarvortrag

Beginn der Arbeit: xx.xx.xxxx

Aufgabensteller: apl. Prof. Dr.-Ing. Matthias Franzreb

Betreuer: Sebastian Putz, Dr. Katharina Bleher

apl. Prof. Dr.-Ing. Matthias Franzreb