

Inhaltsverzeichnis

Vorwort.....	V
Abkürzungsverzeichnis.....	IX
Prolog.....	X
1 Überblick und Einstieg.....	1
1.1 IR-Spektroskopie im Europäischen Arzneibuch.....	2
1.1.1 NIR-Spektrometer-Gerätetypen.....	6
1.1.2 Messverfahren für NIR-Geräte.....	7
2 Probenvorbereitung und Probenpräsentation in der NIRS.....	12
2.1 Einflussfaktoren auf NIR-Messungen im Laboralltag.....	15
2.2 Qualitative Analyse (Identifizierung und Charakterisierung) mittels NIR.....	17
3 Überprüfung der Funktionsfähigkeit eines NIR-Geräts.....	20
3.1 Anforderungen bei der Anwendung und Entwicklung individueller Methoden.....	22
3.1.1 Betriebssicherheit von NIR-Geräten.....	24
3.1.2 NIRS in der Defekturanalytik.....	25
3.2 Reicht NIRS alleine aus?.....	27
4 Installation und Praxistipps.....	31
4.1 Hiperscan apo-ident.....	31
4.1.1 Praktische Tipps.....	34
4.2 Sentronic Sentroid APO.....	36
4.3 Dokumentation der Validierung.....	37
4.3.1 Betrieb von NIR- und MIR-Spektrometern.....	37
5 NIRS und Chemometrie.....	43
5.1 Vergleich von Spektren.....	43
5.2 Datenvorbehandlung.....	44
5.2.1 Rauschen.....	44
5.2.2 Verzerrung: Multiplikative Signal-Korrektur (MSC).....	45
5.3 Spektrenvergleich.....	47

6	Validierung und Kalibrierung	52
6.1	Prüfmittelüberwachung gemäß Arzneibuch	52
6.2	Dokumentation, Validierung und Instrumentenqualifizierung....	54
6.2.1	Prüfprotokoll	54
6.2.2	Instrumentenqualifizierung.....	55
6.2.3	Validierung	56
6.2.4	Ablage der Roh-Messdaten, der Daten zur Gerätequalifizierung und Validierung, und der generierten Prüfprotokolle	57
	Glossar.....	58
	Literaturverzeichnis	63
	Sachregister	65
	Die Autoren	67

Abkürzungsverzeichnis

ATR	Attenuated total reflection (abgeschwächte Totalreflexion)
CIE	International Commission on Illumination
EDQM	European Directorate for the Quality of Medicines
FT	Fourier-Transformation
FTIR	Fourier-Transformations Infrarotspektroskopie (im MIR-Bereich)
IR	Infrarot
MSC	Multiplikative Signal-Korrektur (engl. Multiplicative Scatter Correction)
MIR	Mittleres Infrarot
MIR	Multiple internal reflectance (Multiple interne Reflexion)
MIRS	Infrarotspektroskopie im MIR-Bereich
NIR	Nahinfrarot
NIRS	Nahinfrarotspektroskopie/Nahinfrarotspektrometrie
PCA	Principal Component Analysis
PLS	Partial Least Square
PLSR	Partial Least Square Regression
SOP	Standard Operating Procedure (Standardarbeitsanweisung)