

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