

## ● Beschreibung Fortbildungskurse/Anwenderschulungen

### Unser Kursangebot

- Grundlagen der FT-IR-Spektroskopie
- IR-Interpretationskurs
- OPUS-Grundkurs für MIR-Anwender\*
- FT-IR-Spektroskopie an Proteinen
- OPUS-Grundkurs für NIR-Anwender\*
- Grundkurs Quantitative Analyse
- OPUS/IDENT-Anwendungen\*
- NIR-Spektroskopie im GMP-Umfeld
- Fortgeschrittenkurs Quantitative Analyse\*
- Step Scan/Rapid Scan-Applikationen\*
- Oberflächenanalytik\*
- IR-Mikroskopie\*
- TGA-FT-IR-Kopplungstechniken\*
- Raman-Spektroskopie\*

\* Die Teilnahme an diesen Kursen ist Kunden der Bruker Optik vorbehalten.

Um die Kurse möglichst effizient durchführen zu können, müssen wir die Teilnehmerzahl je nach Kurs auf mindestens 8, maximal 25 Personen begrenzen.

#### Termine

Termine finden Sie in der Anmeldung oder im Internet unter:  
[www.brukeroptics.com/germantraining.html](http://www.brukeroptics.com/germantraining.html)

#### Ort

Bruker Optik GmbH, Ettlingen  
 Seminarräume 2. OG

#### Zeit

Vortrag, Übungen:	09.00 - 17.00 Uhr
Kaffeepausen:	11.00 und 15.30 Uhr
Mittagessen:	13.00 - 14.00 Uhr
	Cafeteria Bruker Optik

#### Arbeitsmaterial

in deutscher Sprache

#### Vortragende/Übungsleiter

Bruker Optik Applikationsspezialisten

#### Kursgebühr

beinhaltet:

- ◆ Übungsmöglichkeiten an Datenstationen/Spektrometern
- ◆ Betreuung durch Experten
- ◆ Arbeitsmaterialien
- ◆ Teilnahmezertifikat
- ◆ Mittagessen und zwei Kaffeepausen pro Tag
- ◆ Fahrdienst Hotel - Firma - Hotel

#### Anmeldung

Senden Sie bitte das ausgefüllte Anmeldeformular zurück oder melden Sie sich bequem im Internet an unter: [www.brukeroptics.com/germantraining.html](http://www.brukeroptics.com/germantraining.html)

#### ■ Grundlagen der FT-IR-Spektroskopie

Der Kurs bietet eine theoretische und praktische Einführung in die FT-IR-Spektroskopie. Er richtet sich an alle, die neu in das vielseitige Arbeitsfeld der FT-IR-Analytik einsteigen oder ihre IR-spektroskopischen Vorkenntnisse auffrischen wollen.

Nach einer theoretischen Einführung werden vor allem praxisnahe Aspekte, vornehmlich Anwendungen aus dem mittleren IR-Bereich, erörtert. Im anwenderbezogenen Teil werden Messungen in Transmission und mit der Mikro-ATR-Technik durchgeführt. Einfache Datenmanipulationen und -auswertungen runden die praktischen Übungen ab. Der Kurs soll dem Anwender ein grundlegendes Verständnis für die IR-Spektroskopie vermitteln bzw. dieses vertiefen.

- ◆ Einführung in die FT-IR-Spektroskopie
  - Grundlagen der FT-IR-Spektroskopie
  - Grundlagen der FT-IR-Messtechnik
  - Prinzipieller Aufbau des FT-IR-Spektrometers
  - Probenvorbereitung und Messtechniken
  - Praktische Übungen: Messen, Auswerten, Anpassen von Messparametern

#### ■ IR-Interpretationskurs

Es wird ein Überblick über die FT-IR-Spektroskopie sowie insbesondere eine Anleitung zum Interpretieren von IR-Spektren organischer Verbindungen vermittelt. Nach einer kurzen Erklärung der FT-IR-Messtechnik, der Probenvorbereitung sowie der physikalischen Grundlagen der Schwingungsspektroskopie wird das Schwerkraft auf die Interpretation von Spektren organischer Moleküle im mittleren IR ( $4000 \text{ cm}^{-1}$  -  $400 \text{ cm}^{-1}$ ) gelegt. IR-Spektren von Polymeren werden nicht behandelt. Die Materie wird anhand von Beispielen und Übungsspektren erläutert.

- ◆ Einführung in die Interpretation von IR-Spektren organischer Moleküle
  - Grundlagen der IR-Spektroskopie
  - Spektreninterpretation
  - Gruppenschwingungen
  - Zuordnung von Schwingungsdaten
  - Systematischer Interpretationsvorgang

#### ■ OPUS-Grundkurs für MIR-Anwender

Der Kurs behandelt vorwiegend Themen aus den klassischen IR-Routineanwendungen und wendet sich an alle Nutzer, die noch keine oder wenig Erfahrung mit der Spektroskopiesoftware OPUS haben.

Der Kurs bietet eine Einführung in die Bedienung sowie die Einsatzmöglichkeiten des Programms. Die Referenten arbeiten an einem PC mit Projektionseinrichtung. Während des Kurses steht jedem Teilnehmer ein Laptop zur Verfügung.

Die von den Referenten vorgestellten Funktionen können unmittelbar am Computer nachvollzogen und geübt werden.

Im Rahmen des Kurses wird auch die Möglichkeit für die Beantwortung spezieller Fragen gegeben.

Bitte beachten Sie, dass dieser Kurs nicht die OPUS-MENTOR-Funktionalität für das ALPHA und Mobile IR Spektrometer behandelt. Ferner beinhaltet der Kurs keine Einführung in die Infrarot-Spektroskopie. Siehe dazu auch die Kurse „Grundlagen der FT-IR-Spektroskopie“ und „IR-Interpretationskurs“.

- ◆ Einführung in OPUS
- ◆ Benutzerverwaltung und Arbeitsoberflächen
- ◆ Bedienungskonzept und Bedienungselemente
- ◆ Darstellen von Spektren, Bildschirmfunktionen
- ◆ Erläuterung des Messmenüs
- ◆ Einfache Funktionen zur Spektrenbearbeitung (z.B. Spektrenumwandlung, Basislinienkorrektur, Spektrensubtraktion)
- ◆ Integration und einfache Quantifizierung (nach Lambert-Beer)
- ◆ Möglichkeiten zur Identifizierung bekannter und unbekannter Substanzen
- ◆ Arbeiten mit Spektrenbibliotheken
- ◆ Drucken
  - Drucken von Spektren mit vorgefertigten Vorlagen
  - Erstellen von Druckvorlagen mit dem Plot Layout Editor
- ◆ Übersicht zu den erweiterten Paketen

#### ■ FT-IR-Spektroskopie an Proteinen

Der Kurs bietet eine theoretische und praktische Einführung in die Anwendung der FT-IR-Spektroskopie für die Proteinanalytik. Er richtet sich an alle, die die Methode zur Untersuchung der Struktur von Proteinen einsetzen wollen.

Neben der Bestimmung der Proteinstabilität und der Sekundärstruktur werden insbesondere temperaturinduzierte Entfaltungen und Aggregationsvorgänge vorgeführt und diskutiert. Zur Vorbereitung für den Kurs empfehlen wir Einsteigern die Teilnahme am FT-IR-Grundlagenkurs und am OPUS-Grundkurs.

Während des Kurses werden die Grundlagen der modernen FT-IR-Proteinspektroskopie erarbeitet, neben der Messtechnik auch die wichtigen Verfahren zur Auswertung vorgestellt und an konkreten Beispielen die typischen Anwendungen gezeigt. Im praktischen Teil führen die Teilnehmer dann einige Experimente selbst durch. Zudem erhalten sie einen Überblick über weitere wichtige Anwendungen im Bereich Life Science.

- ◆ Einführung in die Proteinanalytik mit FT-IR (Theorie und Praxis)
  - Grundlagen der Proteinstrukturanalytik
  - Bestimmung der Sekundärstruktur
  - Temperaturinduzierte Entfaltung/Rückfaltung
  - Proteinstabilität
  - Formulierung von Proteinwirkstoffen
  - Aggregationsprozesse
  - Protein-Liganden-Bindung

## ■ OPUS-Grundkurs für NIR-Anwender

Der Kurs richtet sich an alle Nutzer, die noch wenig Erfahrung mit der Spektroskopiesoftware OPUS haben. Es wird speziell auf die Anforderungen der Anwender eingegangen, die Nahinfrarot-Spektroskopie im Labor als Analyse-methode verwenden, d. h., es werden nur die für die NIR-Spektroskopie relevanten Funktionen berücksichtigt.

- ◆ NIR-Spektroskopie
  - Messtechniken
  - Messzubehöre
  - Anwendungen
- ◆ Einführung in OPUS
  - Bedienungselemente
  - Laden und Darstellen von Spektren
  - Erläuterung der Messmenüs
- ◆ Einfache Funktionen zur Spektrenbearbeitung (z. B. Normierung, Ableitung)
- ◆ Routinemessungen mit OPUS/LAB
  - Konfiguration von OPUS/LAB
  - Routinemessungen
  - Reports
- ◆ Benutzerverwaltung
  - Einrichten von Benutzern
  - Erstellen einer Benutzeroberfläche
  - GMP-gerechtes Arbeiten

## ■ Grundkurs Quantitative Analyse

Der Praxiskurs zum OPUS/QUANT-Softwarepaket wendet sich vornehmlich an NIR-Anwender, die noch wenig Erfahrung mit chemometrischen Analysemethoden haben. Der Kurs bietet eine leicht verständliche Einführung in die Theorie der multivariaten Kalibration. An einer Auswahl praktischer NIR-Beispiele wird der Umgang mit der OPUS/QUANT-Software erlernt.

- ◆ Quantitative Analyse
  - Grundlagen
  - Probenauswahl
  - Einfluss der Referenzanalytik
- ◆ OPUS/QUANT
  - Erstellen einer QUANT-Methode
  - Kalibration und Optimierung
  - Validierung
  - Darstellung und Plot von Kalibrationsergebnissen
  - Quantitative Analyse
- ◆ QUANT-Beispiele mit Übungen an den Datenstationen

## ■ OPUS/IDENT-Anwendungen

Anhand von praxisorientierten Beispielen - vornehmlich NIR - werden die Grundlagen der Spektrenidentifizierung erklärt sowie die Möglichkeiten der IDENT-Software gemeinsam erarbeitet. Die Teilnehmer lernen mehrstufige IDENT-Bibliotheken aufzubauen und zu validieren.

- ◆ Grundlagen
  - Spektrenvergleich
  - Datenvorbehandlung
  - IDENT-Algorithmen
  - Faktorisierung
- ◆ OPUS/IDENT-Software
  - Identitätsprüfung
  - Bibliotheksstruktur
  - Validierung
- ◆ Praktische Anwendungen der OPUS/IDENT-Software
  - Rohstoffprüfung
- ◆ Übungen an Datenstationen

## ■ NIR-Spektroskopie im GMP-Umfeld

Am Beispiel eines FT-NIR-Spektrometers wird das Vorgehen zur Spektrometerqualifizierung anhand zertifizierter Referenzstandards besprochen. Ein Überblick über die von Bruker bereitgestellten Werkzeuge zur Validierung von OPUS schließt sich an.

Einer der Schwerpunkte des Kurses ist die beispielhafte Nutzung der „21 CFR Part 11“-Funktionen von OPUS.

- ◆ Validierung von NIR-Spektrometern
  - DQ, IQ, OQ, PQ
  - OPUS/OVP
  - Zertifizierte Standards
- ◆ Softwarevalidierung
  - Voraussetzungen in OPUS
  - Dokumente für OPUS
- ◆ Arbeiten mit OPUS im GMP-Umfeld
  - Arbeitsoberflächen
  - Zugangsverwaltung
  - 21 CFR Part 11

## ■ Fortgeschrittenenkurs Quantitative Analyse

Dieser Kurs richtet sich an erfahrene Anwender, die chemometrische Grundkenntnisse besitzen und bereits praktische Erfahrungen in der Erstellung quantitativer Methoden mit QUANT (PLS) gesammelt haben. Anhand ausgewählter Beispiele werden sowohl vertiefende Kenntnisse über die Funktionen der QUANT-Software als auch Strategien zum Bilden robuster Kalibrationen vermittelt.

- ◆ Quantitative Analyse
  - Vertiefende Theorie
  - Strategien zur Methodenentwicklung
  - Robustheit von Kalibrationsmodellen
- ◆ OPUS/QUANT
  - Optimieren von QUANT-Methoden
  - Spezielle Funktionen
- ◆ QUANT-Beispiele mit Übungen an den Datenstationen

Die nachfolgend beschriebenen Praxiskurse finden einmal jährlich im Frühjahr statt. Sie befassen sich mit den verschiedenen Anwendungsmöglichkeiten sowohl des Spektrometers als auch der Software.

Diese messtechnisch orientierten Kurse beginnen am Vormittag mit der theoretischen Einführung in die Methode. Am Nachmittag werden zu den einzelnen Techniken und Auswertungen praktische Übungen an den Spektrometern in den Applikationslabors durchgeführt.

Die Kursteilnehmer sollten möglichst Erfahrung in der Bedienung ihres FT-IR-Spektrometers besitzen.

## ■ Step Scan/Rapid Scan-Applikationen OPUS/STEP, OPUS/3D

Der Kurs behandelt detailliert die grundlegende Funktionsweise der zeitaufgelösten Techniken Rapid Scan und Step Scan. Anhand von Beispielen werden Kriterien herausgearbeitet, die dem Anwender die Wahl der geeigneten Technik für seine Applikation erleichtern.

- ◆ Technische Voraussetzungen
- ◆ Step Scan
  - Wiederholbare Reaktionskinetiken
  - Triggerung, Parameter und Datenaufnahme
- ◆ Rapid Scan
  - Zeitaufgelöste Einzelreaktionen
  - Rapid Scan Methodeneditor
- ◆ Grenzen für zeitaufgelöste Messungen
- ◆ Übungen in den Applikationslaboren
  - Rapid Scan und Step Scan
  - OPUS/3D

## ■ Oberflächenanalytik

- ◆ Abgeschwächte Totalreflexion (ATR)
  - Mikro-ATR-Einheiten
  - ATR-Materialien
- ◆ Gerichtete Reflexion und IRRAS
  - Kramers-Kronig-Transformation
  - Polarisations-Modulationstechnik (PMA 50: PM-IRRAS und Vibrational Circular Dichroism (VCD))
- ◆ Diffuse Reflexion (DRIFT)
  - Probenpräparation
  - Messzubehöre
- ◆ Photoakustische Spektroskopie
- ◆ Übungen in den Applikationslaboren

## ■ IR-Mikroskopie OPUS/MAP, OPUS/VIDEO, OPUS/3D

- ◆ IR-Mikroskopie
  - Probenhandhabung
  - HYPERION-Eigenschaften
  - ATR-Objektiv
  - GIR-Objektiv
- ◆ FPA-Imaging
- ◆ Datenaufnahme mit OPUS/MAP und OPUS/VIDEO
  - Datenaufnahme, Parameterwahl
  - Contour-Fensterchromatogramme
  - Integrationsfunktionen
  - Bild/Intensitäts-Overlays
  - Objektwahl am Videobild
- ◆ Datenauswertung, Datendarstellung und Dokumentation unter OPUS/3D
  - 3D-Plot
  - Contourplot
  - Nachträgliche Fensterchromatogrammerstellung
- ◆ Übungen in den Applikationslaboren

## ■ TGA-FT-IR-Kopplungstechniken (TGA, GC, SFC, DC), OPUS/CHROM, SEARCH, 3D

- ◆ Kopplungsverfahren der thermischen Analyse TG/DSC mit der FT-IR-Spektroskopie
- ◆ FT-IR-Kopplungsverfahren der Chromatographie GC/HPLC/SFC/DC
- ◆ Datenaufnahme mit OPUS/CHROM
  - Datenaufnahme, Parameterwahl
  - Gram-Schmidt-Chromatogramm
- ◆ Bibliotheksuche mit OPUS/SEARCH
  - Spektrensuche, Informationssuche, Peaksuche
  - Erstellung eigener Bibliotheken
- ◆ Darstellung und Dokumentation mittels OPUS/3D
- ◆ Übungen in den Applikationslaboren

## ■ Raman-Spektroskopie

- ◆ Einführung in die Raman-Spektroskopie
  - Der Raman-Effekt
  - Aufbau von dispersiven und FT-Raman-Spektrometern
  - Einsatzbereiche der Raman-Spektroskopie
- ◆ FT-Raman-Spektroskopie
  - Spektrometertypen, Komponenten, Zubehöre
  - Nebeneffekte in der FT-Raman-Spektroskopie
  - Anwendungen
- ◆ Raman-Mikroskopie
  - Spektrometertechnik, Komponenten, Zubehöre
  - Messen und Auswerten
    - Spektrenaufnahme mit OPUS/MAP und OPUS/VIDEO
    - konfokale Raman-Mikrospektroskopie
    - Methoden zur Fluoreszenzunterdrückung und -vermeidung
    - Spektrenauswertung mit OPUS/3D
  - Anwendungen
- ◆ Übungen an den Spektrometern