Nº do Certificado:

150/23

Documento de Qualificação

EMPRESA:	NEWTECH ASSESSORIA CONSULT. E PREST. DE SERVIÇOS S/S LTDA
EQUIPAMENTO:	ESPECTROFOTÔMETRO FT/IR
IDENTIFICAÇÃO:	NT-266
MARCA:	JASCO
MODELO:	FT/IR 4700
Nº DE SÉRIE:	C004661788
ACESSÓRIO:	ATR PRO ONE X
Nº DE SÉRIE:	A001062140
LOCAL INSTALADO:	LABORATÓRIO

Especialista responsável pelo serviço:

DANILO DE SOUZA MELO

Data de Início: 23/03/2023
Data do Término: 23/03/2023
Próximo Data:

QPack Soluções Analíticas Ltda.
Rua Ema Gazzi Magnusson, 138 – Comercial Vitoria Martini – Indaiatuba – SP
CEP 13347-630 - www.qpack.com.br - Fone: 55 (19) 2660-1110
E-mail: qpack@qpack.com.br

1. INTRODUÇÃO

Este procedimento de qualificação operacional do espectrofotômetro FT-IR, foi desenvolvido para o uso de especialistas treinados e qualificados para executar e revisar o conteúdo descrito nesta documentação, que verificará se o equipamento opera segundo suas especificações.

Muitos equipamentos de laboratórios, instrumentos e sistemas analíticos computadorizados, são utilizados dentro da indústria farmacêutica, alimentícia, laboratórios de prestação de serviços e entre outros. Estes sistemas são utilizados para a aquisição de dados e com isso assegurar que os produtos estão adequados para os seus propósitos. Com o crescimento, a sofisticação e a automatização de instrumentos analíticos, há uma crescente demanda para qualificar esses sistemas de modo a assegurar a confiabilidade dos seus dados.

Quando todos os procedimentos são executados e todos os itens são aprovados na inspeção, isto garante que o sistema vai operar conforme com as condições para a qual foi designado.

Esta documentação exige três tipos de pessoas:

- O Executor - sendo pessoa treinada e qualificada (como definido pelo BPL, BPF e órgãos reguladores) para executar os procedimentos de qualificação desta documentação.
- O Revisor - sendo a pessoa treinada e qualificada (como definido pelo BPL, BPF e órgãos reguladores) para revisar e aprovar os testes realizados pelo Executor.
- O Cliente - sendo a pessoa treinada e qualificada (como definido pelo BPL, BPF e órgãos reguladores) para conferir e aprovar todos os testes realizados nesta documentação.

2. SIGLAS E DEFINIÇÕES

Abreviação	**Descrição**
ASTM	American Society for Testing and Materials
ATR	Attenuated Total Reflectance
BPF	Boas Práticas de Fabricação
BPL	Boas Práticas de Laboratório
EP	European Pharmacopeia
QD	Qualificação de Desempenho
F	Formulário
FTIR	Fourier Transform Infrared
N/A	Não Aplicável
P/N	Part Number – Número do artigo
QI	Qualificação de Instalação
QO	Qualificação de Operação
USP	United States Pharmacopeia
Cm^{-1}	Número de Onda
JP	*Japanese Pharmacopeia*

3. OBJETIVO

O objetivo deste documento é orientar sobre a estrutura, conceito e procedimento do protocolo de qualificação para um espectrofotômetro FT-IR seguindo os procedimentos de qualidade da QPack.

3.1. Modelo de Qualificação

A documentação de qualificação da QPack baseia-se no modelo indicado na tabela abaixo. Os princípios básicos de recomendações para qualificação correspondem com as diretrizes BPF e BPL atualmente aplicáveis. É recomendado ao cliente realizar estas atividades de qualificação para todas as unidades instaladas no laboratório.

Requerimentos	Verificação
O sistema deve ser instalado conforme as especificações do fabricante.	Qualificação de instalação – Prestador de Serviços
Versão de firmware, ajustes e configurações são documentadas.	*Logbook* de registro de atividades – Cliente / Prestador de Serviços
O sistema cumpre os critérios de aceitação especificados.	QO (Qualificação Operacional) – Prestador de Serviços
O usuário deverá ser treinado.	Documentação de Treinamento - Prestador de Serviços
Documentos escritos para o bom funcionamento devem estar presentes.	Instruções de operação – Cliente
Execução de uma leitura de amostra do cliente de um método validado, para avaliação dos parâmetros de *System Suitability.*	QD (Qualificação de Desempenho) – Cliente.

3.2. Critério de Aceitação

Os parâmetros estabelecidos neste protocolo são com base nas edições atuais da USP, EP, JP e ASTM, que formam a base para a aceitação da qualificação. Para os parâmetros que não estão especificados na USP, EP, JP e ASTM, foram seguidos os limites propostos pelos fabricantes do espectrofotômetro FT-IR.

Caso haja necessidade de mudança na documentação para qualquer teste ou limite diferente dos propostos neste protocolo, a alteração deverá ser solicitada ao técnico antes do início do serviço. A QPack reserva-se o direito de garantir a conformidade apenas com a variância originalmente proposta nos testes. As personalizações de limites dos testes podem sujeitar o sistema a limites que excedem o intervalo operacional típico. Estas alterações serão aplicadas ao protocolo, porém, com uma notificação que irá refletir esta situação.

Obs.: A QPack não será responsável por falhas de teste para limites com faixa mais estreita (mais exigentes ou desafiadores) do que os valores recomendados.

3.3. Testes Adicionais

Testes adicionais que não são considerados parte da programação necessária para a conclusão do serviço contratado, deverão ser avaliados, e se for compatível com os padrões e documentos, serão cobrados os custos adicionais ao serviço inicialmente contratado.

4. DIREITOS RESERVADOS

Este documento foi desenvolvido pela equipe de documentação da QPack Soluções Analíticas, e todo o seu conteúdo é de direito reservado, não podendo, portanto, ser usado ou reproduzido sem acordo e autorização prévia dos proprietários dos direitos.

As informações e procedimentos contidos neste documento estão sujeitas a mudanças sem notificação prévia, estando relacionadas especialmente com as definições dos órgãos competentes, não cabendo assim, nem uma responsabilidade para a QPack Soluções Analíticas.

5. RESPONSABILIDADES

A qualificação deste equipamento será realizada levando-se em consideração as condições externas (fatores como posição do instrumento, temperatura ambiente, umidade relativa, rede elétrica, nível de bancada, entre outros), as quais podem afetar o desempenho do equipamento. Assim sendo, não nos responsabilizamos por eventuais mudanças que ocorram nestas condições de instalação após a execução do serviço.

5.1. Cliente

Aprovar os parâmetros e limites estipulados neste protocolo de qualificação antes da execução da qualificação do instrumento;

O cliente se responsabiliza em prover boas condições para a realização do serviço, tais como temperatura controlada, rede elétrica estabilizada, espaço físico suficiente para realizar o serviço, vidrarias, solventes diversos, reagentes, assim como local apropriado para o descarte dos mesmos;

Conferir a etiqueta de qualificação do equipamento que será entregue no dia do encerramento do serviço de qualificação;

Conferir e assinar a ordem de serviço do trabalho realizado;

O cliente se responsabiliza por conferir e aprovar toda a documentação entregue, aceitando assim, a qualificação do equipamento fornecido pela QPack.

5.2. QPack

Enviar um técnico treinado e qualificado para executar todos os procedimentos de qualificação;

Prover a cada técnico, um kit de qualificação adequado para execução do serviço, compatível com qualquer configuração do FT-IR disponível;

Realizar a manutenção preventiva do instrumento antes da qualificação do mesmo, quando contratada;

Preencher o relatório de desvios e recomendações para resolução de problemas quando aplicável;

Fornecer o certificado de calibração ou de análise comprovando que os padrões e soluções de referência estão dentro da validade;

Entregar para o cliente toda a documentação pertinente à execução do serviço, e relatório final de qualificação.

6. EQUIPAMENTOS E MATERIAIS NECESSÁRIOS

Kit de padrões.

7. PRÉ-REQUISITOS PARA A QUALIFICAÇÃO

Para completar o procedimento de qualificação operacional mencionados nesta documentação, é necessário certificar-se de ter os itens abaixo disponíveis para consulta:

- A especificação completa do instrumento a ser qualificado;
- Configuração do *software* de controle e aquisição de dados;
- Os manuais de operação do instrumento.

8. PREENCHIMENTO DOS FORMULÁRIOS

O Executor e o Revisor devem usar as seguintes diretrizes para o preenchimento dos formulários desta documentação:

Todos os itens dos formulários devem ser preenchidos (exceto o campo, comentários que é opcional, e deve se traçar uma linha diagonal da esquerda inferior para a direita superior caso este campo não seja utilizado).

Todas as datas deverão ser preenchidas no formato DD/MM/AAAA.

Qualquer desvio a partir de um procedimento definido no protocolo e/ou resultados obtidos onde medidas corretivas forem necessárias, estas devem ser documentados no formulário “Lista de Desvios”, contida neste documento. O responsável pelo instrumento tem que dar aprovação documentada com seu aceite para qualquer adequação ou divergência no protocolo antes das assinaturas de aprovações finais. O teste em questão deverá ser novamente executado e anexado ao protocolo numerando a página conforme a página do teste que falhou, seguido de letras em ordem alfabética (ex.: Página 12A, Página 12B, etc.).

Quando o valor ou campo não for aplicável ao modelo do equipamento, ou a função testada for inexistente, o mesmo deverá ser riscado com uma reta na diagonal total do campo da esquerda inferior para a direita superior.

Todos os espectros, relatórios, anexos, certificados de treinamento e dos padrões devem ser anexos ao final deste documento, e entregues ao cliente.

9. MANUTENÇÃO PREVENTIVA

Tem como objetivo assegurar que o equipamento esteja em boas condições e possa ser operado com segurança dentro da rotina do laboratório. Este procedimento torna-se de vital importância no processo de qualificação operacional, pois o sistema será verificado em seus pontos críticos, sofrendo ajustes quando necessário, e/ou substituição de peças de desgaste natural.

10. QUALIFICAÇÃO OPERACIONAL

Seguindo corretamente os procedimentos de qualificação do espectrofotômetro FT-IR descritos nesta documentação, os resultados obtidos assegurarão propriamente a qualificação e manutenção deste equipamento.

Informações coletadas durante o processo de qualificação deverão ser escritas nos formulários que oferecerão evidências para os órgãos regulatórios de que o espectrofotômetro FT-IR opera adequadamente.

11. DIRETRIZES DA REQUALIFICAÇÃO

É sugerido que o proprietário ou responsável do espectrofotômetro FT-IR siga estas diretrizes para determinar quando é necessário realizar a requalificação:

• A periodicidade da requalificação deverá ser definida pelo cliente, baseando-se na frequência do uso, desgaste de lâmpadas, lasers, fonte de infravermelho, unidade óptica, e/ou procedimentos internos.

• Quando o equipamento for transferido do local onde foi qualificado.

• Deve-se sempre requalificar após a substituição de componentes ou peças de maior importância como: placas de controle, placas de interface, placas amplificadoras, lâmpadas e peças da parte óptica.

• É importante requalificar sempre que adicionar um acessório, realizar alguma modificação, atualização, hardware ou software.

12. PROCEDIMENTO INICIAL DA QUALIFICAÇÃO

Antes de iniciar a qualificação operacional, certifique-se de que o Executor e o Revisor tenham lido e entendido todas as partes deste documento de qualificação. As páginas anteriores detalham os procedimentos de preenchimentos dos formulários.

Após completar cada procedimento de qualificação, o Executor deve registrar todos os resultados obtidos no formulário correspondente.

Se o Executor não completar corretamente um procedimento desta documentação de qualificação, ele não deverá continuar os testes até que o problema seja resolvido. O Executor deverá documentar que ação foi tomada para corrigir o problema na seção de comentários do formulário correspondente.

Quando for executar os testes de qualificação, o técnico deve seguir as boas práticas de laboratório todo o tempo. Sempre usar óculos de segurança e roupas adequadas e tomar cuidado quando for manipular solventes.

13. IDENTIFICAÇÃO DO SOLICITANTE

Preencher o formulário 1 para identificar os dados da empresa solicitante.

Nome da Empresa: **NEWTECH ASSESSORIA CONSULT. E PREST. DE SERVIÇOS S/S LTDA**	
Endereço: **RUA ERNESTO GONÇALVES ROSA JR.**	**N°**: **437**
Bairro: JD. SÃO PAULO	**Cidade**: **SÃO CARLOS**
Estado: **SÃO PAULO**	**CEP**: **13.570-46**
Responsável: RAFAEL VICTOR ALDEIA	
Cargo: COORDENADOR DE LABORATÓRIO	
Departamento: **LABORATÓRIO**	

Formulário 1 - Identificação do solicitante.

14. IDENTIFICAÇÃO DO EXECUTOR E DO REVISOR

Preencher o formulário 2 para identificar o Executor e o Revisor que executará e aprovará os procedimentos desta documentação de qualificação.

Executor:	**DANILO DE SOUZA MELO**
Cargo:	**ENGENHEIRO DE MANUTENÇÃO**
Data:	**23/03/2023**
Revisor:	**VINÍCIUS VIERA FIGUEIREDO**
Cargo:	**AUXILIAR ADMINISTRATIVO**

*Obs: Antes de assinar digitalmente é necessário imprimir como PDF para que todos os campos editáveis sejam travados.

Assinatura Digital: _____

Formulário 2 - Identificação do executor e do revisor.

15. INFORMAÇÕES DE EQUIPAMENTOS E MATERIAIS UTILIZADOS NOS PROCEDIMENTOS DE QUALIFICAÇÃO

Preencher o formulário 3 para registrar as informações de calibração dos equipamentos e materiais utilizados nos procedimentos de qualificação.

Insira os certificados de calibração no final desta pasta identificados como anexos A1, A2 etc.

EQUIPAMENTO OU MATERIAL UTILIZADO	TAG/ID OU NÚMERO DE SÉRIE	DATA DA ÚLTIMA CALIBRAÇÃO	DATA DA PRÓXIMA CALIBRAÇÃO	ANEXO
POLYSTYRENE FILM	1921b	08/06/2021	31/12/2022	A1
ATR VALIDATION STANDARD	0410	23/03/2021	23/03/2026	A2
Executor: DANILO DE SOUZA MELO **Data:** 23/03/2023				

Formulário 3 - Informações de Equipamentos e Materiais Utilizados.

16. PROCEDIMENTO DE QUALIFICAÇÃO DO FT/IR

16.1. NÍVEL DE ENERGIA

- ***Método de teste:***

O perfil do *background* analisado, com o compartimento de amostras vazio, é comparado com o perfil do *background* coletado na instalação do equipamento usando determinados números de onda para realizar esta comparação.

- ***Parâmetros de leitura:***

Números de Scans: 16
Resolução: 4 cm^{-1}
Modo de leitura: Single Beam
Ganho: Auto (se selecionável)
Abertura: Auto (se selecionável)
Velocidade: Auto (se selecionável)
Tipicamente 2 mm/sec para detectores DTGS
Filtro: Auto (se selecionável)
Função: Cosseno (se selecionável)

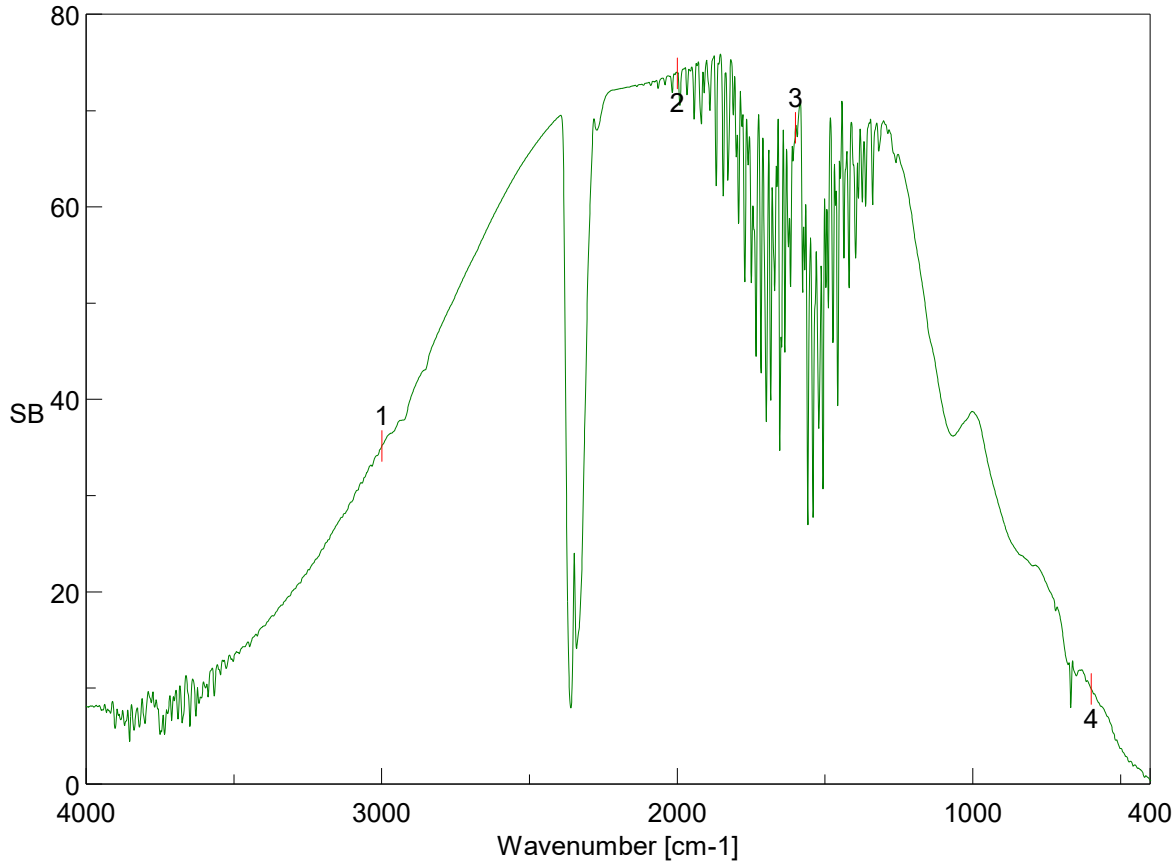
- ***Procedimento do teste:***

1. Configurar os parâmetros de leitura;
2. Certificar de que o compartimento de amostra se encontra vazio;
3. Iniciar a leitura do espectro do *background*;
4. Verificar o nível de energia em 3000, 2000, 1600 e 600 cm^{-1};
5. Preencher o formulário 4 - Nível de Energia.

NÚMERO DE ONDA (cm^{-1})	VALOR OBTIDO (%T)	VALOR DA INSTALAÇÃO (%T)	PROPORÇÃO (%)	CRITÉRIO DE ACEITAÇÃO (%)	RESULTADO (Aprovado) (Reprovado)
3000	**35.1219**	**40.1502**	**87.48**	**> 60**	**APROVADO**
2000	**73.8542**	**72.4231**	**101.98**	**> 60**	**APROVADO**
1600	**68.1904**	**66.5308**	**102.49**	**> 60**	**APROVADO**
600	**9.88373**	**9.12035**	**108.37**	**> 60**	**APROVADO**
Comentários: **N/A**					
Executor: **DANILO DE SOUZA MELO** **Data:** **23/03/2023**					

Formulário 4 - Nível de Energia

Peak Find - FT-IR Nível de Energia.jws



[Comments]

Sample name	
Comment	
User	
Division	
Company	NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 09:27
Date modified	23/03/2023 09:29
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	SB
Start	349.053 cm-1
End	7800.65 cm-1
Data interval	0.964233 cm-1
Data points	7729

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 09:25
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	4 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (1)
Aperture	Auto (7.1 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2999.73	35.1219	2	1999.82	73.8542
3	1599.66	68.1904	4	599.753	9.88373

16.2. EXATIDÃO DO NÚMERO DE ONDA

- ***Método de teste:***

O padrão mais comum utilizado para a verificação da exatidão do número de onda é o SRM 1921b, um filme de Poliestireno de aproximadamente 38 µm de espessura com bandas de absorção bem definidas e certificada, fornecida pelo National Institute of Standards and Technology (NIST).

O método consiste na leitura do espectro a 2 cm^{-1} de resolução, e deve ser verificada a posição das seguintes bandas de absorção: 2850.20, 1601.38, 1154.62, 906.820 cm^{-1}

- ***Parâmetros de leitura:***

Números de Scans: 16
Resolução: 2 cm^{-1}
Modo de leitura: Single Beam para a leitura do *background*
T % para a leitura da amostra
Ganho: Auto (se selecionável)
Abertura: Auto (se selecionável)
Velocidade: Auto (se selecionável)
Tipicamente 2 mm/sec para detectores DTGS
Filtro: Auto (se selecionável)
Função: Cosseno (se selecionável)

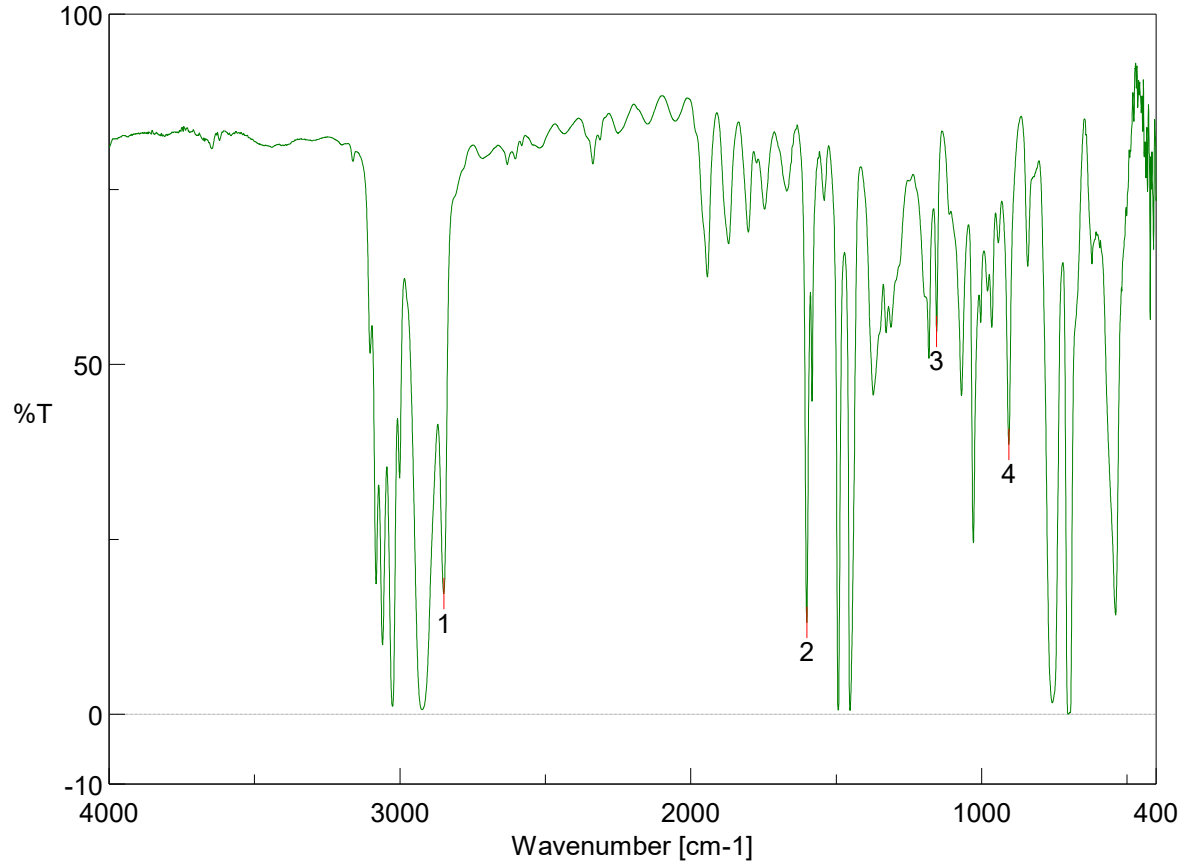
- ***Procedimento do teste:***

1. Configurar os parâmetros de leitura;
2. Certificar de que o compartimento de amostra se encontra vazio;
3. Iniciar a leitura do espectro do *background*;
4. Colocar o padrão de poliestireno no compartimento de amostra;
5. Iniciar a leitura do padrão;
6. Verificar a posição das seguintes bandas de absorção: 2850.20, 1601.38, 1154.62, 906.820 cm^{-1};
7. Preencher o formulário 5 - Exatidão do Número de Onda.

POSIÇÃO ESPERADA (cm^{-1})	POSIÇÃO OBTIDA (cm^{-1})	DIFERENÇA (cm^{-1})	CRITÉRIO DE ACEITAÇÃO (cm^{-1})	RESULTADO (Aprovado) (Reprovado)
2850.20	**2849.31**	**0.890**	**± 2.0**	**APROVADO**
1601.38	**1601.11**	**0.270**	**± 2.0**	**APROVADO**
1154.62	**1154.67**	**0.050**	**± 2.0**	**APROVADO**
906.820	**906.379**	**0.441**	**± 2.0**	**APROVADO**
Comentários: **N/A.**				
Executor: **DANILO DE SOUZA MELO** **Data:** **23/03/2023**				

Formulário 5 - Exatidão do Número de Onda

Peak Find - Exatidão do Número de Onda.jws



[Comments]

Sample name	
Comment	
User	
Division	
Company	NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 09:42
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.535 cm-1
End	7800.17 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	15455

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 09:33
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (2)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2849.31	17.1924	2	1601.11	13.1148
3	1154.67	54.6689	4	906.379	38.5481

16.3. RESOLUÇÃO

- ***Método de teste:***

O padrão de filme de poliestireno usado para verificar a exatidão do número de onda e a repetibilidade do número de onda e fotométrica, possui bandas com picos e vales bem afilados permitindo a verificação da resolução do instrumento.

- ***Parâmetros de leitura:***

Números de Scans: 16
Resolução: 2 cm^{-1}
Modo de leitura: Single Beam para a leitura do *background*
T % para a leitura da amostra
Ganho: Auto (se selecionável)
Abertura: Auto (se selecionável)
Velocidade: Auto (se selecionável)
Tipicamente 2 mm/sec para detectores DTGS
Filtro: Auto (se selecionável)
Função: Cosseno (se selecionável)

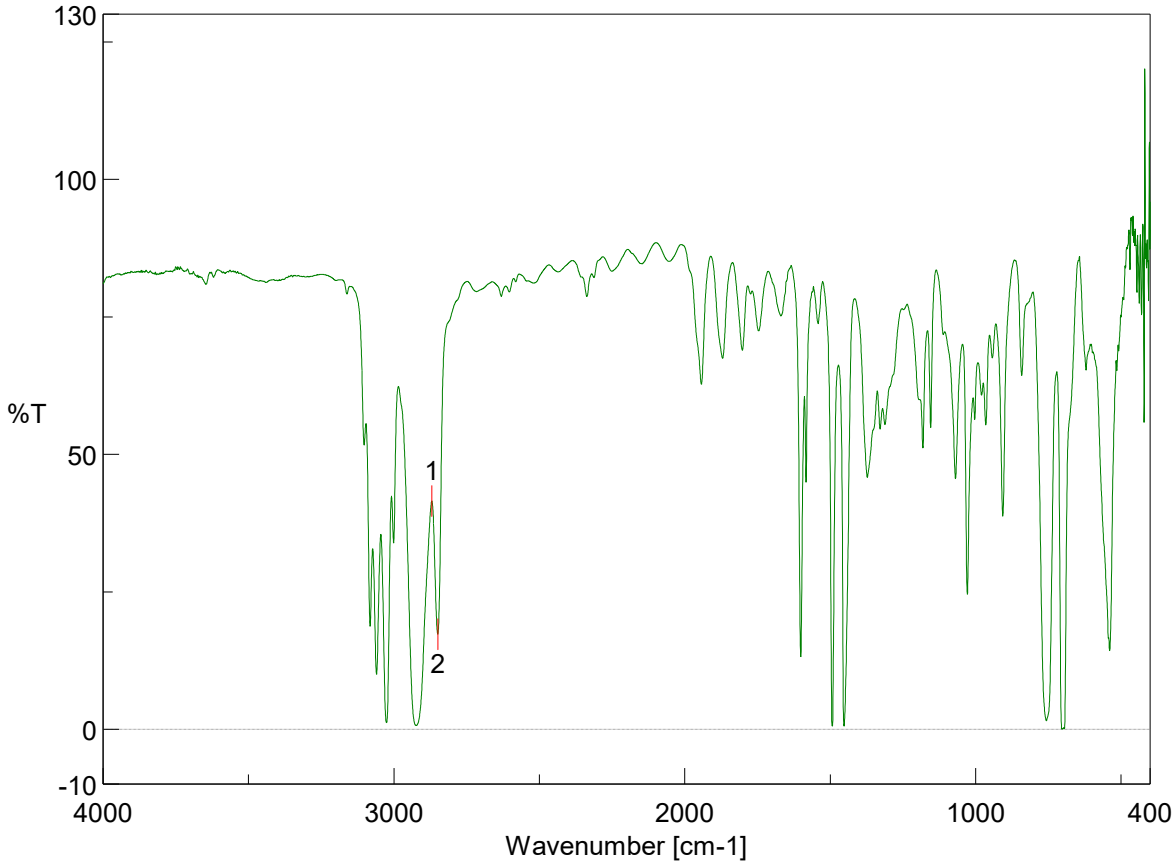
- ***Procedimento do teste:***

1. Configurar os parâmetros de leitura;
2. Certificar de que o compartimento de amostra se encontra vazio;
3. Iniciar a leitura do espectro do *background*;
4. Colocar o padrão de poliestireno no compartimento de amostra;
5. Iniciar a leitura do padrão;
6. Ampliar a região de 2800-2900 cm^{-1} e verificar a diferença de %T entre o vale de 2870 cm^{-1} e o pico de 2851 cm^{-1};
7. Ampliar a região de 1500-1600 cm^{-1} e verificar a diferença de %T entre o vale de 1588 cm^{-1} e o pico de 1583 cm^{-1};
8. Preencher o formulário 6 – Resolução.

NÚMERO DE ONDA (cm^{-1})	VALOR ENCONTRADO (%T)	DIFERENÇA ENTRE OS VALORES ENCONTRADOS (%T)	CRITÉRIO DE ACEITAÇÃO (%T)	RESULTADO (Aprovado) (Reprovado)
2870	**41.477**	**24.2322**	**> 18**	**APROVADO**
2851	**17.2448**			
1588	**60.4448**	**15.5254**	**> 10**	**APROVADO**
1583	**44.9194**			
Comentários: **N/A.**				
Executor: **DANILO DE SOUZA MELO** **Data:** **23/03/2023**				

Formulário 6 - Resolução

Peak Find - FT-IR Resolução.jws



[Comments]

Sample name	
Comment	
User	
Division	
Company	NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 09:53
Date modified	23/03/2023 09:54
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.535 cm-1
End	7800.17 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	15455

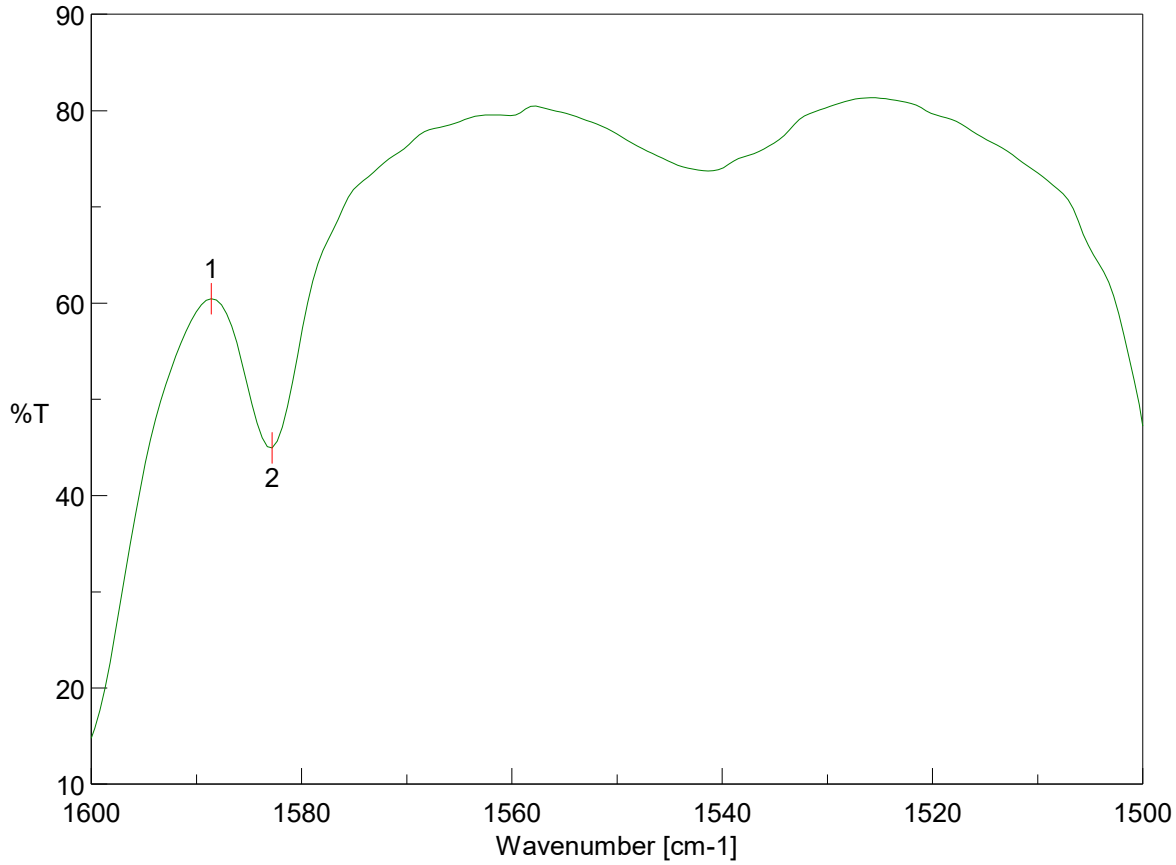
[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 09:52
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (2)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2869.56	41.477	2	2849.31	17.2448

Peak Find - FT-IR Resolução.jws



[Comments]
Sample name
Comment
User
Division
Company NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 09:53
Date modified	23/03/2023 09:54
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.535 cm-1
End	7800.17 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	15455

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 09:52
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (2)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	1588.57	60.4448	2	1582.79	44.9194

16.4. REPETIBILIDADE DO NÚMERO DE ONDA

- ***Método de teste:***

Este teste requer o uso de uma amostra comum, como o filme de poliestireno fornecido junto com o instrumento, deve-se verificar a repetibilidade da posição das bandas selecionadas de duas leituras sucessivas.

- ***Parâmetros de leitura:***

Números de Scans: 16
Resolução: 2 cm^{-1}
Modo de leitura: Single Beam para a leitura do *background*
T % para a leitura da amostra
Ganho: Auto (se selecionável)
Abertura: Auto (se selecionável)
Velocidade: Auto (se selecionável)
Tipicamente 2 mm/sec para detectores DTGS
Filtro: Auto (se selecionável)
Função: Cosseno (se selecionável)

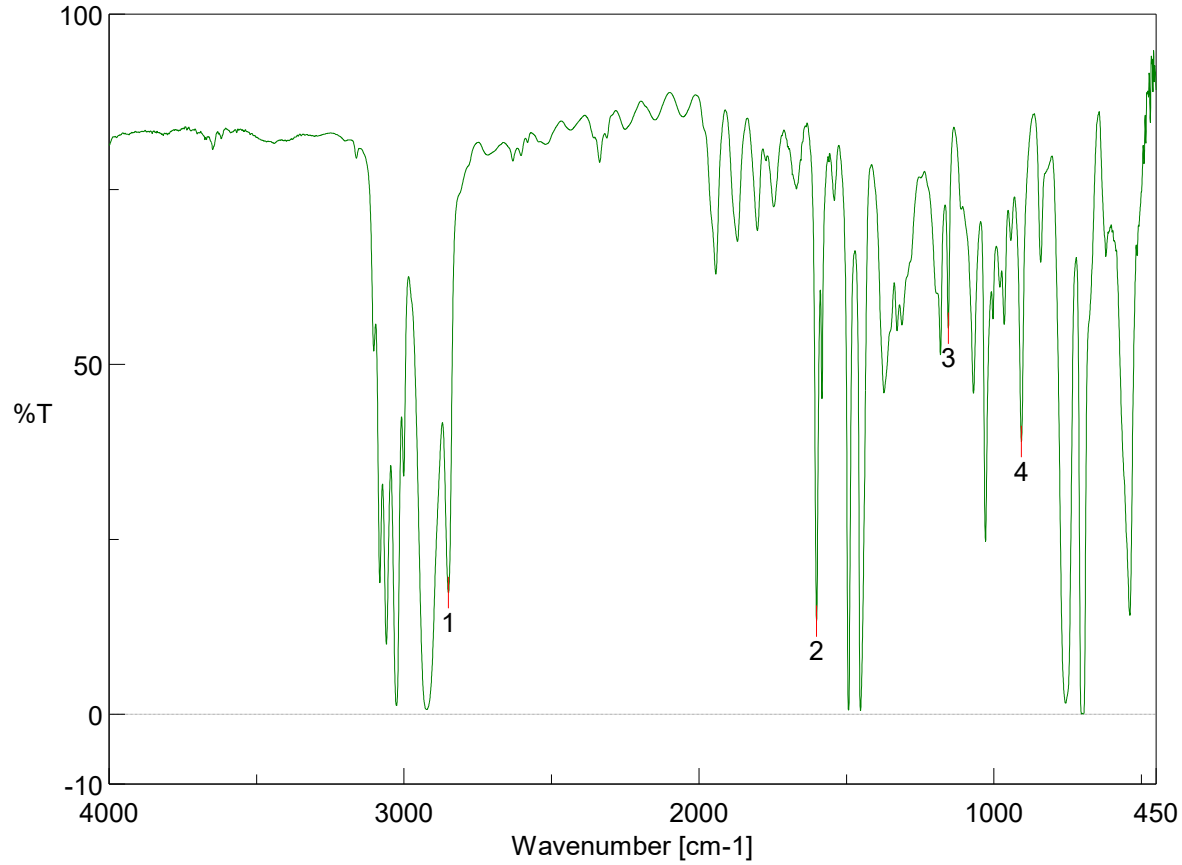
- ***Procedimento do teste:***

1. Configurar os parâmetros de leitura;
2. Certificar de que o compartimento de amostra se encontra vazio;
3. Iniciar a leitura do espectro do *background*;
4. Colocar o padrão de poliestireno no compartimento de amostra;
5. Iniciar a leitura do padrão;
6. Repetir a leitura do espectro do *background* e do padrão;
7. Verificar a posição das seguintes bandas de absorção: , 2850.20, 1601.38, 1154.62, 906.820 cm^{-1};
8. Preencher o formulário 7 - Repetibilidade do Número de Onda.

NÚMERO DE ONDA (cm^{-1})	1ª POSIÇÃO (cm^{-1})	2ª POSIÇÃO (cm^{-1})	DIFERENÇA (cm^{-1})	CRITÉRIO DE ACEITAÇÃO (cm^{-1})	RESULTADO (Aprovado) (Reprovado)
2850.20	**2849.31**	**2849.31**	**0.000**	**± 1.0**	**APROVADO**
1601.38	**1601.11**	**1601.11**	**0.000**	**± 1.0**	**APROVADO**
1154.62	**1154.67**	**1154.67**	**0.000**	**± 1.0**	**APROVADO**
906.820	**906.379**	**906.862**	**-0.483**	**± 1.0**	**APROVADO**
Comentários: **N/A.**					
Executor: **DANILO DE SOUZA MELO** **Data:** **23/03/2023**					

Formulário 7 - Repetibilidade do Número de Onda

Peak Find - FT-IR Repetibilidade do Número de Onda 01.jws



[Comments]
Sample name
Comment
User
Division
Company NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 09:59
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.535 cm-1
End	7800.17 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	15455

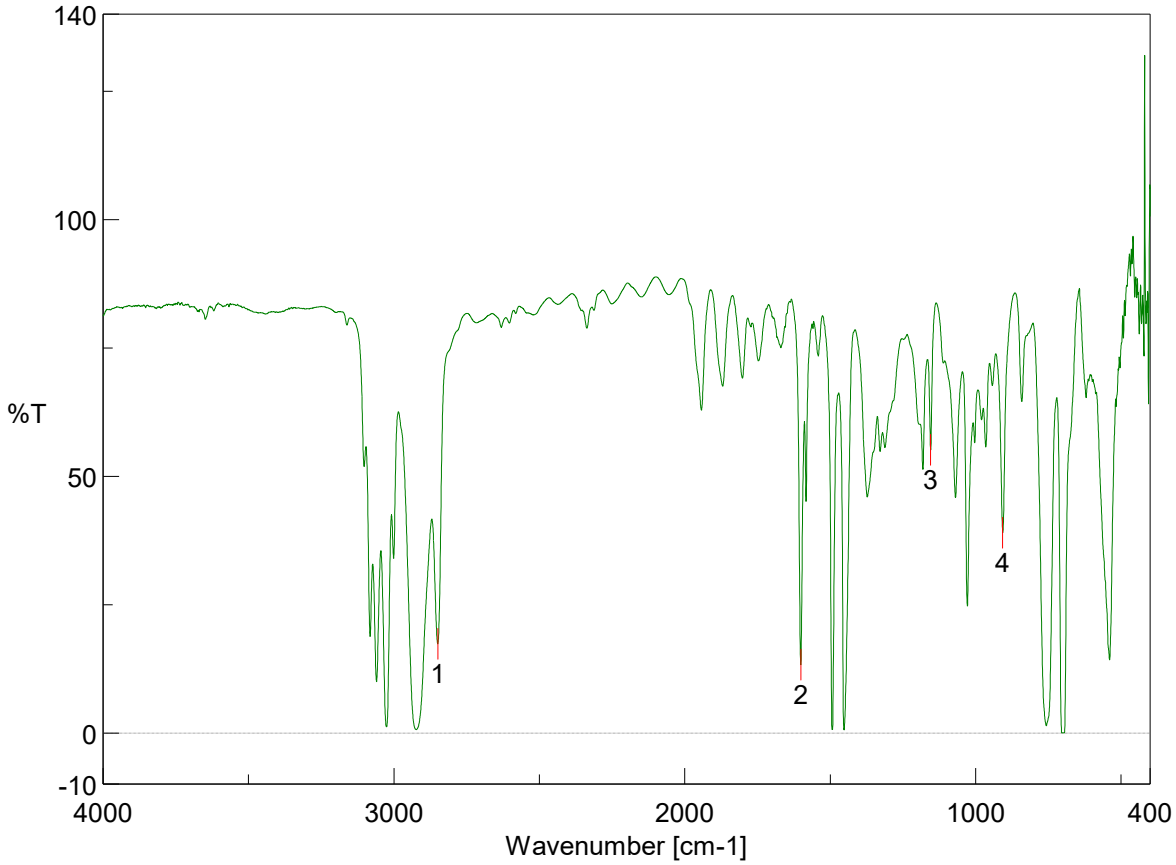
[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 09:58
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (2)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2849.31	17.3291	2	1601.11	13.2977
3	1154.67	55.1317	4	906.379	38.9219

Peak Find - FT-IR Repetibilidade do Número de Onda 02.jws



[Comments]
Sample name
Comment
User
Division
Company NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 09:59
Date modified	23/03/2023 10:05
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.535 cm-1
End	7800.17 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	15455

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 09:59
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (2)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2849.31	17.3124	2	1601.11	13.2636
3	1154.67	55.1008	4	906.862	38.9842

16.5. REPETIBILIDADE FOTOMÉTRICA

- ***Método de teste:***

Este teste requer o uso de uma amostra comum, como o filme de poliestireno fornecido junto com o instrumento, deve-se verificar a repetibilidade fotométrica das bandas selecionadas de duas leituras sucessivas.

- ***Parâmetros de leitura:***

Números de Scans: 16
Resolução: 2 cm^{-1}
Modo de leitura: Single Beam para a leitura do *background*
T % para a leitura da amostra
Ganho: Auto (se selecionável)
Abertura: Auto (se selecionável)
Velocidade: Auto (se selecionável)
Tipicamente 2 mm/sec para detectores DTGS
Filtro: Auto (se selecionável)
Função: Cosseno (se selecionável)

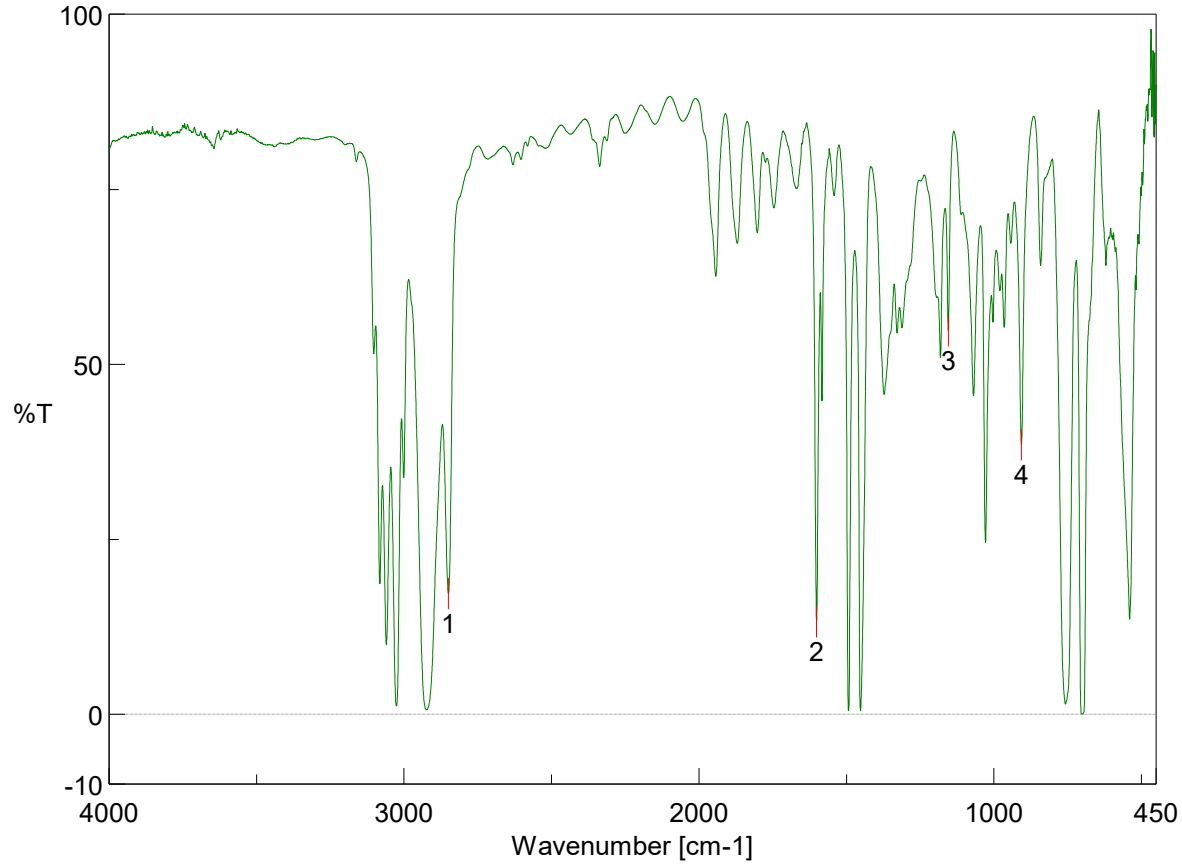
- ***Procedimento do teste:***

1. Configurar os parâmetros de leitura;
2. Certificar de que o compartimento de amostra se encontra vazio;
3. Iniciar a leitura do espectro do *background*;
4. Colocar o padrão de poliestireno no compartimento de amostra;
5. Iniciar a leitura do padrão;
6. Repetir a leitura do espectro do *background* e do padrão;
7. Verificar a posição das seguintes bandas de absorção:2850.20, 1601.38, 1154.62, 906.820cm^{-1};
8. Preencher o formulário 8 - Repetibilidade Fotométrica.

NÚMERO DE ONDA (cm^{-1})	1° VALOR (%T)	2° VALOR (%T)	DIFERENÇA (%T)	CRITÉRIO DE ACEITAÇÃO (%T)	RESULTADO (Aprovado) (Reprovado)
2850.20	**17.1995**	**17.2474**	**-0.048**	**± 0.5**	**APROVADO**
1601.38	**13.1845**	**13.2243**	**-0.040**	**± 0.5**	**APROVADO**
1154.62	**54.7714**	**54.6091**	**0.162**	**± 0.5**	**APROVADO**
906.820	**38.4671**	**38.4066**	**0.061**	**± 0.5**	**APROVADO**
Comentários:	**N/A.**				
Executor:	**DANILO DE SOUZA MELO**				
Data:	**23/03/2023**				

Formulário 8 - Repetibilidade Fotométrica

Peak Find - FT-IR Repetibilidade Fotométrica 01.jws



[Comments]
Sample name
Comment
User
Division
Company NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 10:08
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.535 cm-1
End	7800.17 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	15455

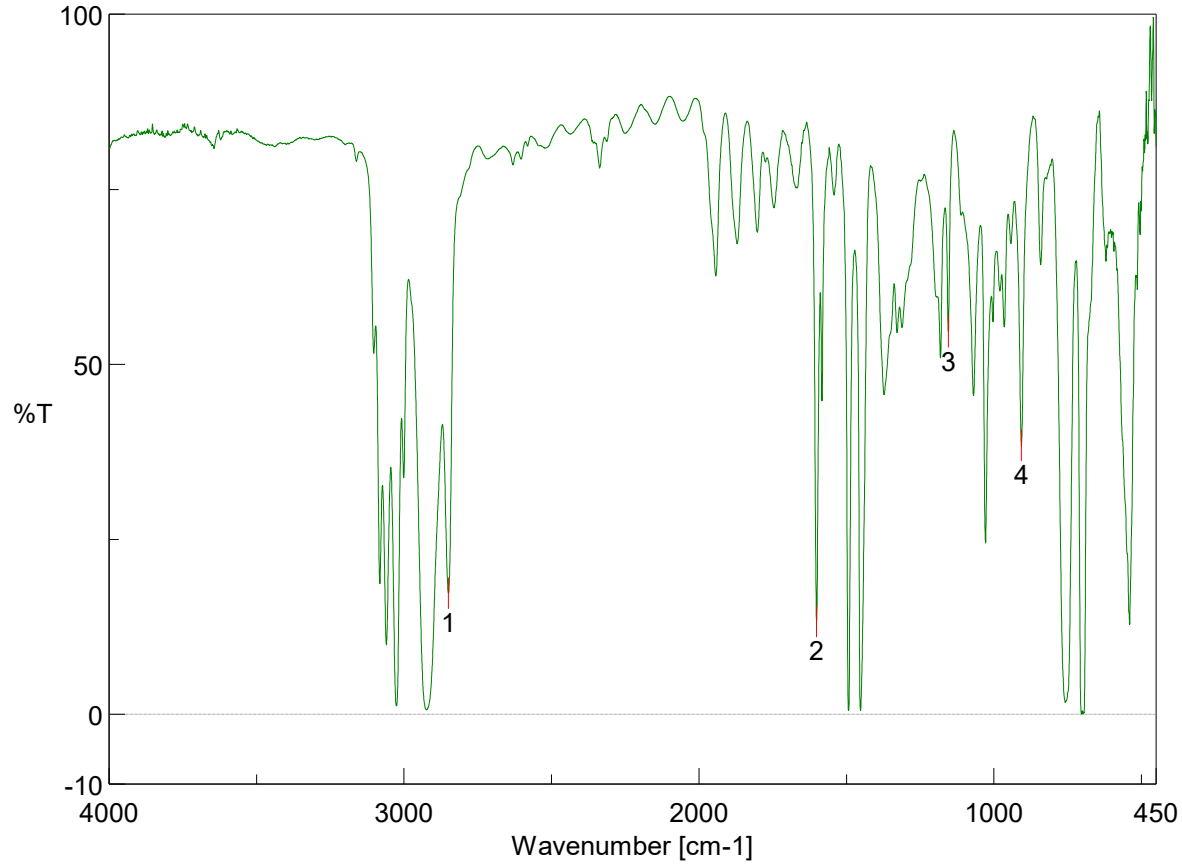
[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 10:06
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (2)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2849.31	17.1995	2	1601.11	13.1845
3	1154.67	54.7714	4	906.862	38.4671

Peak Find - FT-IR Repetibilidade Fotométrica 02.jws



[Comments]
Sample name
Comment
User
Division
Company NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 10:08
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.535 cm-1
End	7800.17 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	15455

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 10:07
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (2)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2849.31	17.2474	2	1601.11	13.2243
3	1154.67	54.6091	4	906.862	38.4066

16.6. SENSIBILIDADE

- ***Método de teste:***

A leitura do backgound e a leitura da amostra são coletados com o compartimento de amostras vazios, e acumulando os espectros por 1 minuto a 4 cm^{-1} de resolução, deve ser verificado a região de 2200 cm^{-1} onde nem o CO2 e nem a umidade podem afetar as medidas.

- ***Parâmetros de leitura:***

Números de Scans: 48
Resolução: 4 cm^{-1}
Modo de leitura: Single Beam para a leitura do *background*
T % para a leitura da amostra
Ganho: Auto (se selecionável)
Abertura: Auto (se selecionável)
Velocidade: Auto (se selecionável)
Tipicamente 2 mm/sec para detectores DTGS
Filtro: Auto (se selecionável)
Função: Cosseno (se selecionável)

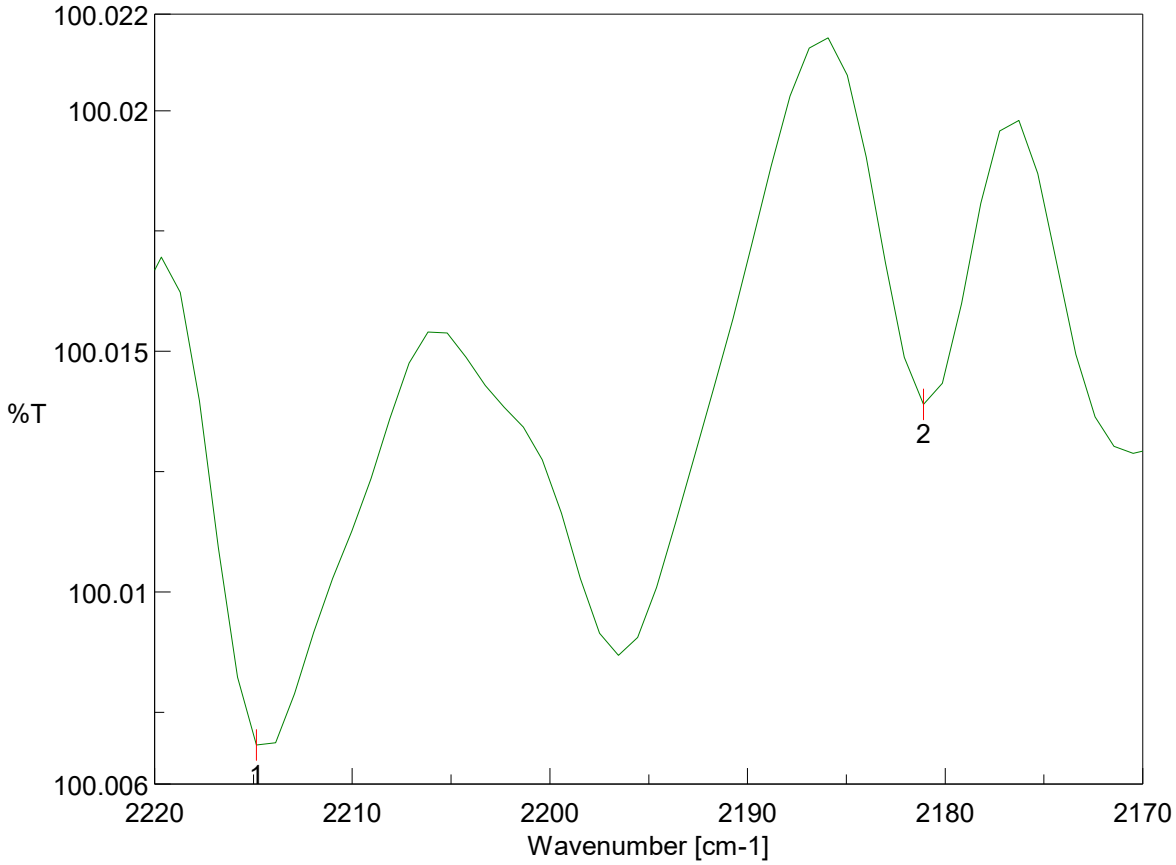
- ***Procedimento do teste:***

1. Configurar os parâmetros de leitura;
2. Certificar de que o compartimento de amostra se encontra vazio;
3. Iniciar a leitura do espectro do *background*;
4. Iniciar a leitura sem inserir o padrão no compartimento de amostras;
5. Ampliar a região de 2220-2170 cm^{-1} e verificar a diferença de %T entre o maior pico e o menor pico;
6. O valor do sinal-ruído é expresso como: 100/(diferença de pico a pico) : 1;
7. Quando necessario será realizado o "Auto Test" do equipamento para a aprovação do teste.
8. Preencher o formulário 9 – Sensibilidade.

VALOR DE %T DO PICO MAIS ALTO E MAIS BAIXO ENCONTRADOS	DIFERENÇA DOS VALORES DOS PICOS	DIVIDIR 100 PELA DIFERENÇA ENCONTRADA. VALOR OBTIDO	CRITÉRIO DE ACEITAÇÃO	RESULTADO (Aprovado) (Reprovado)
100.014	0.007000	14285.71428573	> 5000 :1	APROVADO
100.007				
Comentários: N/A.				
Executor: DANILO DE SOUZA MELO **Data:** 23/03/2023				

Formulário 9 – Sensibilidade

Peak Find - FT-IR Sensibilidade.jws



[Comments]
Sample name
Comment
User
Division
Company NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 10:16
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.053 cm-1
End	7800.65 cm-1
Data interval	0.964233 cm-1
Data points	7729

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 10:16
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	48
Resolution	4 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (1)
Aperture	Auto (7.1 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2214.84	100.007	2	2181.1	100.014

17. PROCEDIMENTO DE QUALIFICAÇÃO DO ATR.

17.1. ATR NÍVEL DE ENERGIA

- ***Método de teste:***

O perfil do *background* analisado, com o ATR vazio, é comparado com o perfil do *background* coletado na instalação do equipamento usando determinados números de onda para realizar esta comparação.

- ***Parâmetros de leitura:***

Números de Scans: 16
Resolução: 4 cm^{-1}
Modo de leitura: Single Beam
Ganho: Auto (se selecionável)
Abertura: Auto (se selecionável)
Velocidade: Auto (se selecionável)
Tipicamente 2 mm/sec para detectores DTGS
Filtro: Auto (se selecionável)
Função: Cosseno (se selecionável)

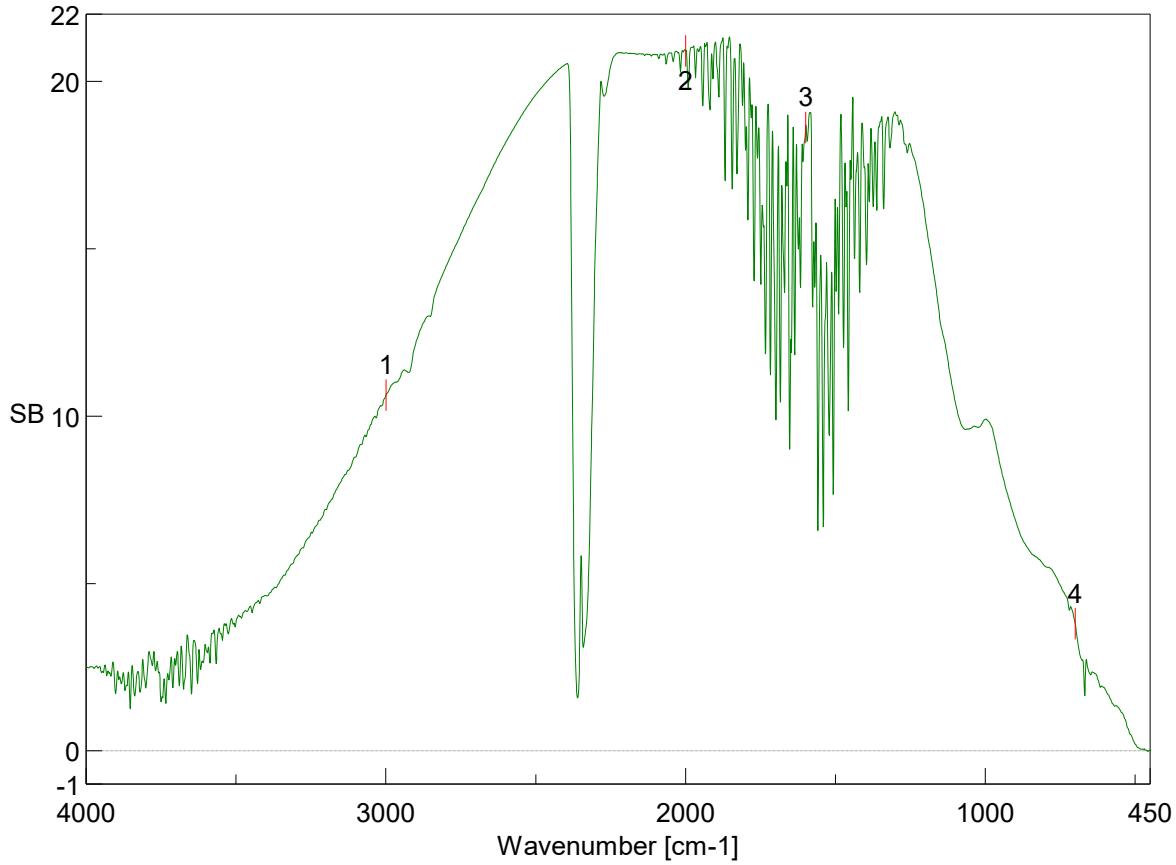
- ***Procedimento do teste:***

1. Configurar os parâmetros de leitura;
2. Certificar de que o compartimento de amostra se encontra vazio;
3. Iniciar a leitura do espectro do *background*;
4. Verificar o nível de energia em 3000, 2000, 1600 e 700 cm^{-1};
5. Preencher o formulário 10 – ATR Nível de Energia.

NÚMERO DE ONDA (cm^{-1})	VALOR OBTIDO (%T)	VALOR DA INSTALAÇÃO (%T)	PROPORÇÃO (%)	CRITÉRIO DE ACEITAÇÃO (%)	RESULTADO (Aprovado) (Reprovado)
3000	**10.6212**	**10.6212**	**100.00**	**> 60**	**APROVADO**
2000	**20.899**	**20.899**	**100.00**	**> 60**	**APROVADO**
1600	**18.6131**	**18.6131**	**100.00**	**> 60**	**APROVADO**
700	**3.79093**	**3.79093**	**100.00**	**> 60**	**APROVADO**
Comentários:	**O ACESSÓRIO DE ATR FOI SUBSTITUIDO POR UM NOVO, SEGUE ACIMA OS NOVOS VALORES DE INSTALAÇÃO.**				
Executor:	**DANILO DE SOUZA MELO**				
Data:	**23/03/2023**				

Formulário 10 – ATR Nível de Energia

Peak Find - ATR Nível de Energia.jws



[Comments]
Sample name
Comment
User
Division
Company NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 10:23
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	SB
Start	349.053 cm-1
End	7800.65 cm-1
Data interval	0.964233 cm-1
Data points	7729

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 10:22
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	4 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (4)
Aperture	Auto (7.1 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2999.73	10.6212	2	1999.82	20.899
3	1599.66	18.6131	4	700.034	3.79093

17.2. ATR EXATIDÃO DO NÚMERO DE ONDA

- ***Método de teste:***

O padrão mais comum utilizado para a verificação da exatidão do número de onda é o padrão 162-5470, que consiste em um material com bandas de absorção bem definidas e certificada.

O método consiste na leitura do espectro a 2 cm^{-1} de resolução, e deve ser verificada a posição das seguintes bandas de absorção: 2962.13, 1257.84, 1007.62, 786.332 cm^{-1}

- ***Parâmetros de leitura:***

Números de Scans: 16
Resolução: 2 cm^{-1}
Modo de leitura: Single Beam para a leitura do *background*
T % para a leitura da amostra
Ganho: Auto (se selecionável)
Abertura: Auto (se selecionável)
Velocidade: Auto (se selecionável)
Tipicamente 2 mm/sec para detectores DTGS
Filtro: Auto (se selecionável)
Função: Cosseno (se selecionável)

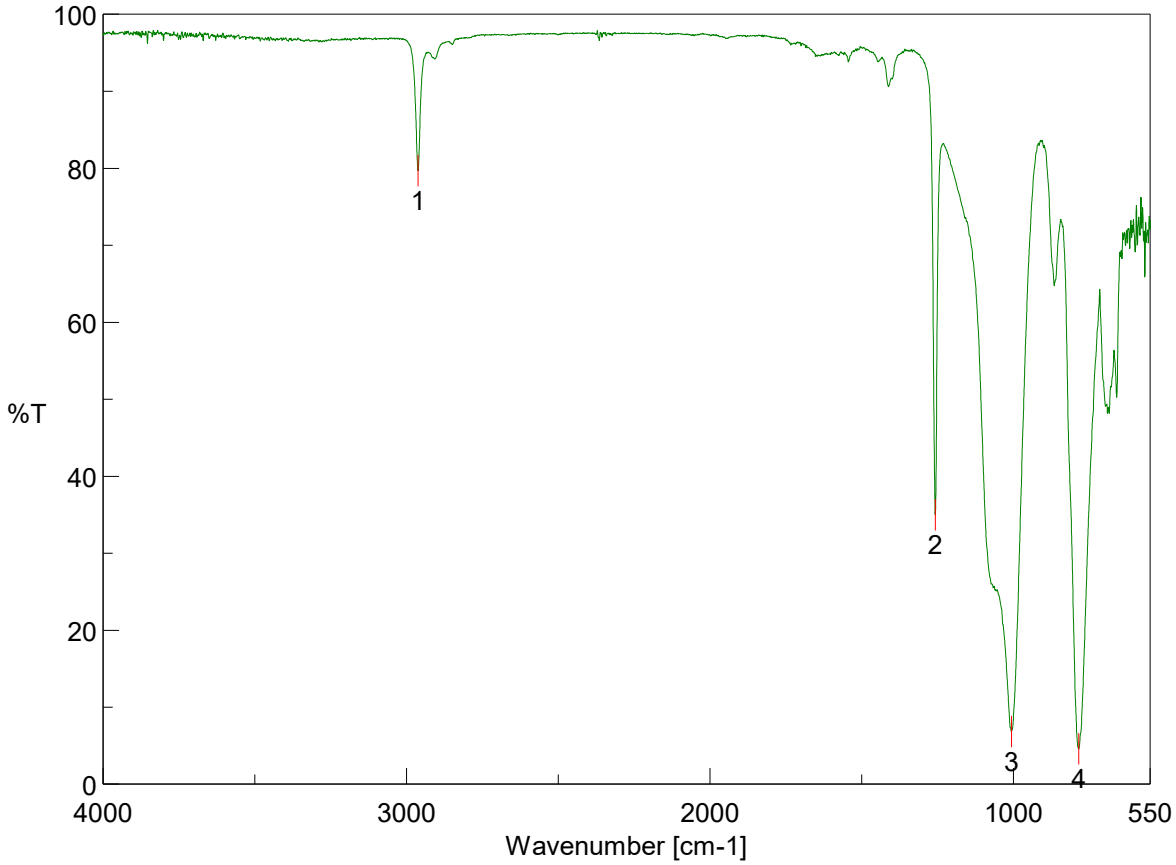
- ***Procedimento do teste:***

1. Configurar os parâmetros de leitura;
2. Certificar de que o compartimento de amostra se encontra vazio;
3. Iniciar a leitura do espectro do *background*;
4. Colocar o padrão de ATR no compartimento de amostra;
5. Iniciar a leitura do padrão;
6. Verificar a posição das seguintes bandas de absorção: 2962.13, 1257.84, 1007.62, 786.332 cm^{-1};
7. Preencher o formulário 11 – ATR Exatidão do Número de Onda.

POSIÇÃO ESPERADA (cm^{-1})	POSIÇÃO OBTIDA (cm^{-1})	DIFERENÇA (cm^{-1})	CRITÉRIO DE ACEITAÇÃO (cm^{-1})	RESULTADO (Aprovado) (Reprovado)
2962.13	**2962.13**	**0.000**	**± 2.0**	**APROVADO**
1257.84	**1257,84**	**0.000**	**± 2.0**	**APROVADO**
1007.62	**1007.14**	**0.480**	**± 2.0**	**APROVADO**
786.332	**784.886**	**1.446**	**± 2.0**	**APROVADO**
Comentários: **N/A.**				
Executor: **DANILO DE SOUZA MELO** **Data:** **23/03/2023**				

Formulário 11 – ATR Exatidão do Número de Onda

Peak Find - ATR Exatidão do Número de Onda.jws



[Comments]
Sample name
Comment
User
Division
Company NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 10:31
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.535 cm-1
End	7800.17 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	15455

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 10:30
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (4)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2962.13	79.6759	2	1257.84	34.967
3	1007.14	6.82464	4	784.886	4.58375

17.3. ATR RESOLUÇÃO

- ***Método de teste:***

O método de calibração mais comum para verificar a exatidão do número de onda e a repetibilidade do número de onda e fotométrica, possui bandas com picos e vales bem afilados permitindo a verificação da resolução do instrumento.

- ***Parâmetros de leitura:***

Números de Scans: 16
Resolução: 2 cm^{-1}
Modo de leitura: Single Beam para a leitura do *background*
T % para a leitura da amostra
Ganho: Auto (se selecionável)
Abertura: Auto (se selecionável)
Velocidade: Auto (se selecionável)
Tipicamente 2 mm/sec para detectores DTGS
Filtro: Auto (se selecionável)
Função: Cosseno (se selecionável)

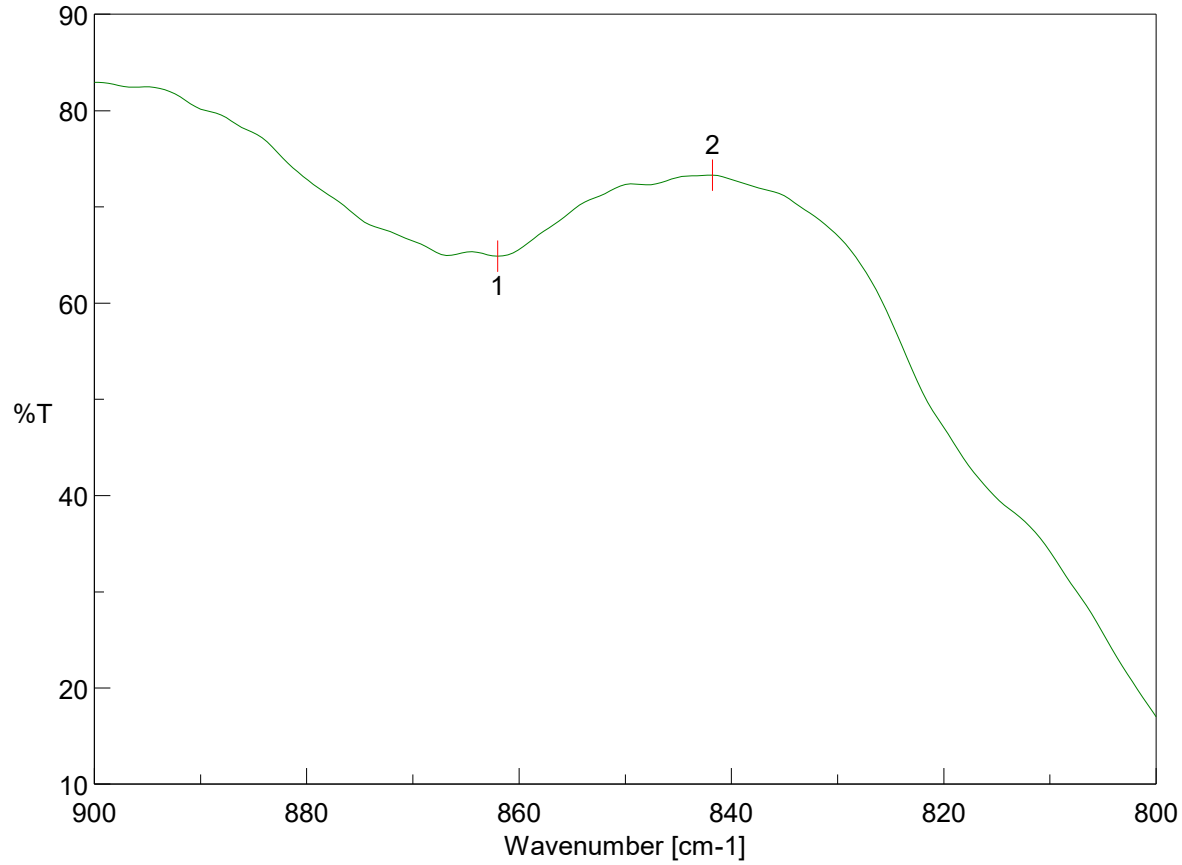
- ***Procedimento do teste:***

1. Configurar os parâmetros de leitura;
2. Certificar de que o compartimento de amostra se encontra vazio;
3. Iniciar a leitura do espectro do *background*;
4. Colocar o padrão de ATR no compartimento de amostra;
5. Iniciar a leitura do padrão;
6. Ampliar a região de 900 - 800 cm^{-1} e verificar a diferença de %T entre o vale de 870 cm^{-1} e o pico de 850 cm^{-1};
7. Preencher o formulário 12 – ATR Resolução.

NÚMERO DE ONDA (cm^{-1})	VALOR ENCONTRADO (%T)	DIFERENÇA ENTRE OS VALORES ENCONTRADOS (%T)	CRITÉRIO DE ACEITAÇÃO (%T)	RESULTADO (Aprovado) (Reprovado)
850	**73.2838**	**8.4433**	**> 5.0**	**APROVADO**
870	**64.8405**			
Comentários	**N/A**			
Executor:	**DANILO DE SOUZA MELO**			
Data:	**23/03/2023**			

Formulário 12 – ATR Resolução

Peak Find - ATR Resolução.jws



[Comments]
Sample name
Comment
User
Division
Company NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 10:35
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.535 cm-1
End	7800.17 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	15455

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 10:32
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (4)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	862.025	64.8405	2	841.776	73.2838

17.4. ATR REPETIBILIDADE DO NÚMERO DE ONDA

- ***Método de teste:***

O padrão a ser utilizado para a verificação da repetibilidade do número de onda é um padrão com bandas de absorbância certificada. O padrão mais comum é o 162-5470 e deve-se verificar a repetibilidade da posição das bandas selecionadas de duas leituras sucessivas.

- ***Parâmetros de leitura:***

Números de Scans: 16
Resolução: 2 cm^{-1}
Modo de leitura: Single Beam para a leitura do *background*
T % para a leitura da amostra
Ganho: Auto (se selecionável)
Abertura: Auto (se selecionável)
Velocidade: Auto (se selecionável)
Tipicamente 2 mm/sec para detectores DTGS
Filtro: Auto (se selecionável)
Função: Cosseno (se selecionável)

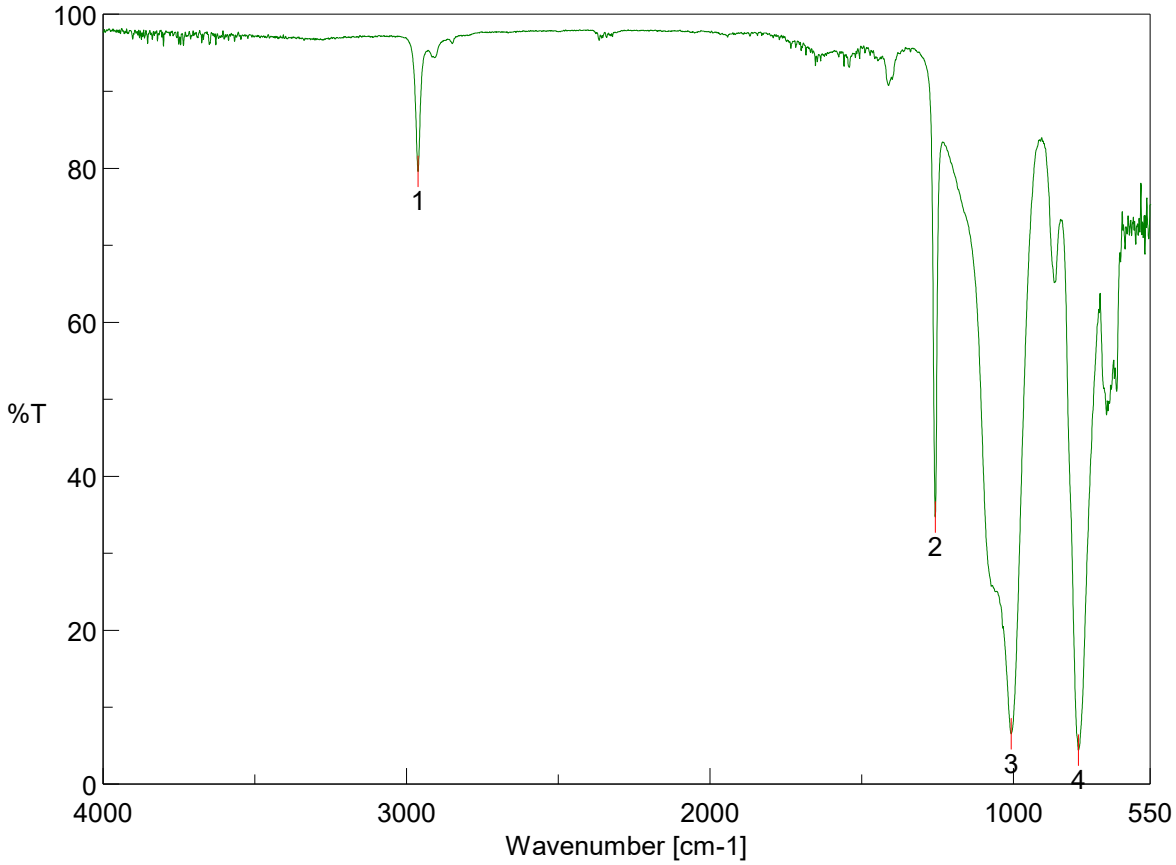
- ***Procedimento do teste:***

1. Configurar os parâmetros de leitura;
2. Certificar de que o compartimento de amostra se encontra vazio;
3. Iniciar a leitura do espectro do *background*;
4. Colocar o padrão de ATR no compartimento de amostra;
5. Iniciar a leitura do padrão;
6. Repetir a leitura do espectro do *background* e do padrão;
7. Verificar a posição das seguintes bandas de absorção: 2962.13, 1257.84, 1007.62, 786.332 cm^{-1};
8. Preencher o formulário 13 – ATR Repetibilidade do Número de Onda.

NÚMERO DE ONDA (cm^{-1})	1ª POSIÇÃO (cm^{-1})	2ª POSIÇÃO (cm^{-1})	DIFERENÇA (cm^{-1})	CRITÉRIO DE ACEITAÇÃO (cm^{-1})	RESULTADO (Aprovado) (Reprovado)
2962.13	**2962.13**	**2962.13**	**0.000**	**± 1.0**	**APROVADO**
1257.84	**1257.84**	**1257.84**	**0.000**	**± 1.0**	**APROVADO**
1007.62	**1008.11**	**1008.11**	**0.000**	**± 1.0**	**APROVADO**
786.332	**786.332**	**786.815**	**-0.483**	**± 1.0**	**APROVADO**
Comentários	**N/A.**				
Executor:	**DANILO DE SOUZA MELO**				
Data:	**23/03/2023**				

Formulário 13 – ATR Repetibilidade do Número de Onda

Peak Find - ATR Repetibilidade do Número de Onda 01.jws



[Comments]
Sample name
Comment
User
Division
Company NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 10:44
Date modified	23/03/2023 10:46
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.535 cm-1
End	7800.17 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	15455

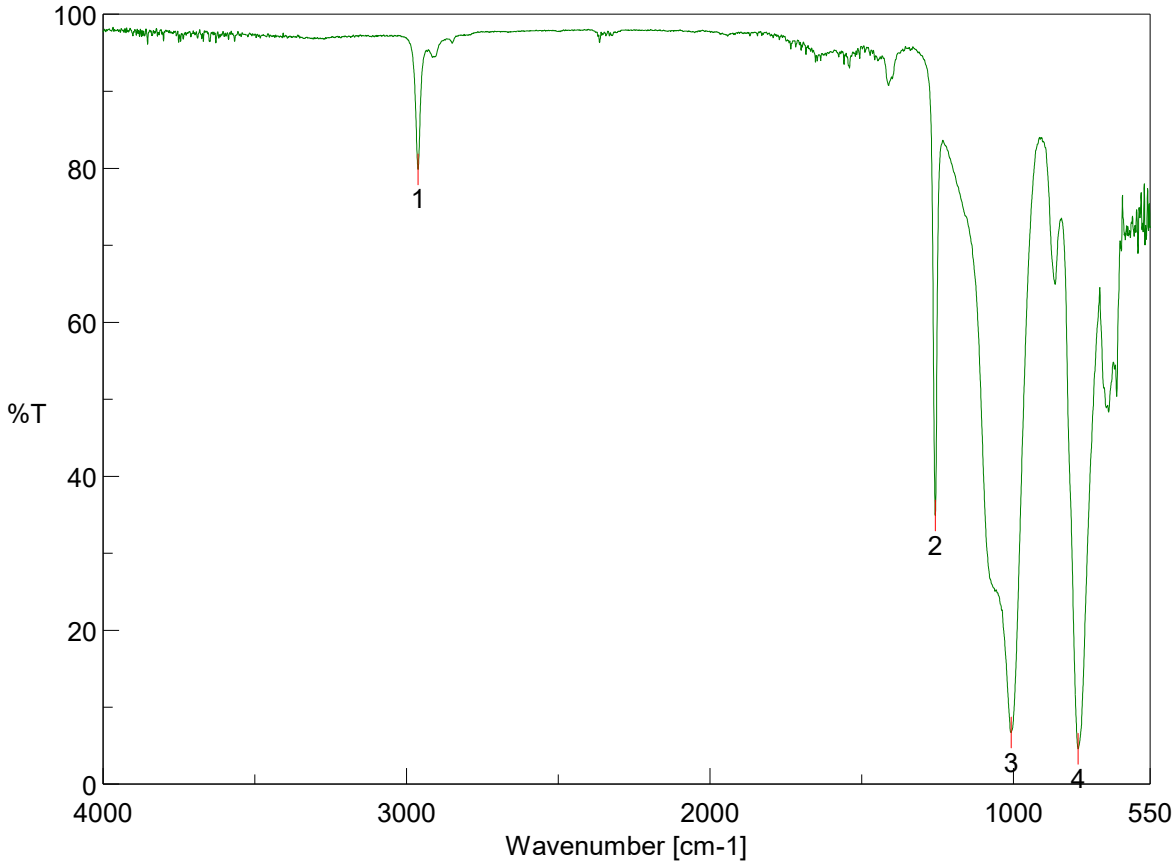
[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 10:38
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (4)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2962.13	79.5971	2	1257.84	34.691
3	1008.11	6.52596	4	786.332	4.41831

Peak Find - ATR Repetibilidade do Número de Onda 02.jws



[Comments]

Sample name	
Comment	
User	
Division	
Company	NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 10:44
Date modified	23/03/2023 10:48
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.535 cm-1
End	7800.17 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	15455

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 10:38
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (4)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2962.13	79.8165	2	1257.84	34.8794
3	1008.11	6.68237	4	786.815	4.57553

17.5. ATR REPETIBILIDADE FOTOMÉTRICA

- ***Método de teste:***

Este teste requer o uso de uma amostra comum, como o padrão ATR fornecido junto com o instrumento, deve-se verificar a repetibilidade fotométrica das bandas selecionadas de duas leituras sucessivas.

- ***Parâmetros de leitura:***

Números de Scans: 16
Resolução: 2 cm^{-1}
Modo de leitura: Single Beam para a leitura do *background*
T % para a leitura da amostra
Ganho: Auto (se selecionável)
Abertura: Auto (se selecionável)
Velocidade: Auto (se selecionável)
Tipicamente 2 mm/sec para detectores DTGS
Filtro: Auto (se selecionável)
Função: Cosseno (se selecionável)

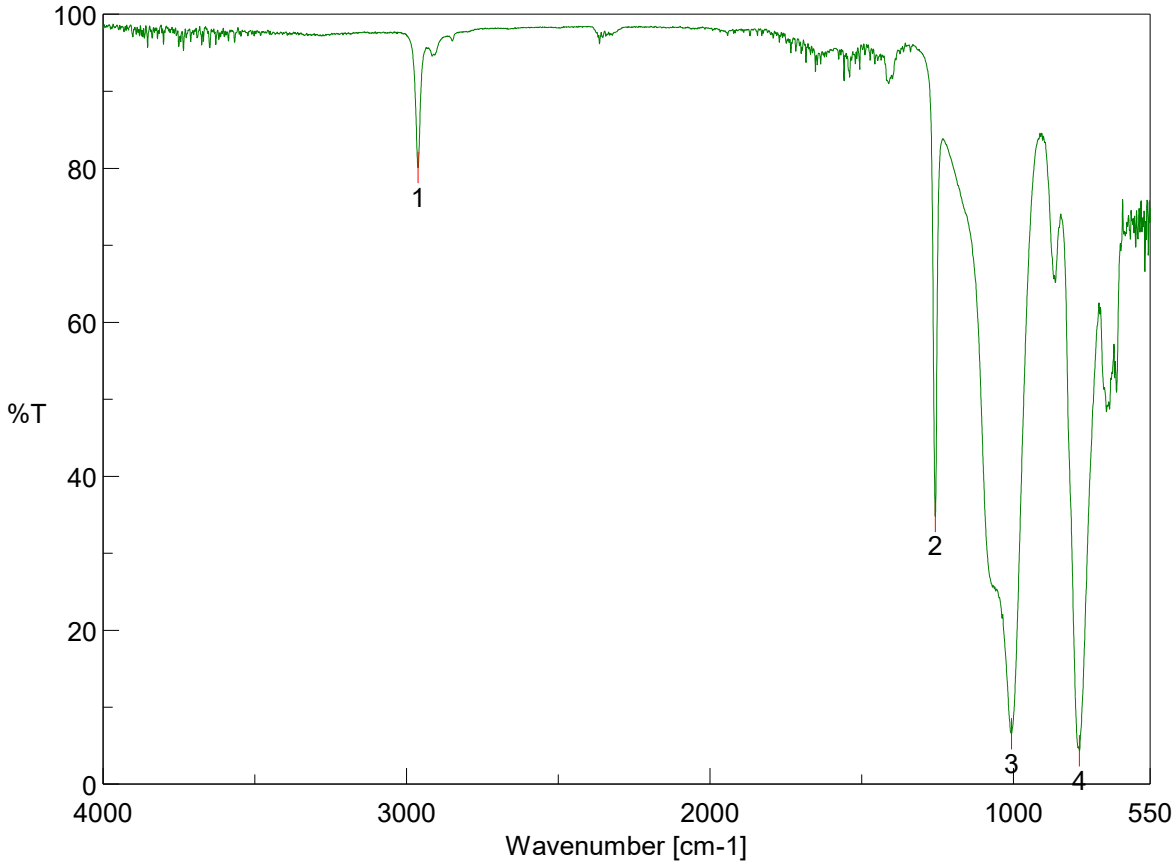
- ***Procedimento do teste:***

1. Configurar os parâmetros de leitura;
2. Certificar de que o compartimento de amostra se encontra vazio;
3. Iniciar a leitura do espectro do *background*;
4. Colocar o padrão de ATR no compartimento de amostra;
5. Iniciar a leitura do padrão;
6. Repetir a leitura do espectro do background e do padrão;
7. Verificar a posição das seguintes bandas de absorção: 2962.13, 1257.84, 1007.62, 786.332 cm^{-1};
8. Preencher o formulário 14 – ATR Repetibilidade Fotométrica.

NÚMERO DE ONDA (cm^{-1})	1° VALOR (%T)	2° VALOR (%T)	DIFERENÇA (%T)	CRITÉRIO DE ACEITAÇÃO (%T)	RESULTADO (Aprovado) (Reprovado)
2962.13	**80.0722**	**79.985**	**0.087**	**± 0.5**	**APROVADO**
1257.84	**34.7636**	**34.6521**	**0.112**	**± 0.5**	**APROVADO**
1007.62	**6.53023**	**6.48798**	**0.042**	**± 0.5**	**APROVADO**
786.332	**4.3272**	**4.14956**	**0.178**	**± 0.5**	**APROVADO**
Comentários: **N/A.**					
Executor: **DANILO DE SOUZA MELO** **Data:** **23/03/2023**					

Formulário 14 – ATR Repetibilidade Fotométrica

Peak Find - ATR Repetibilidade Fotométrica 01.jws



[Comments]
Sample name
Comment
User
Division
Company NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 10:55
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.535 cm-1
End	7800.17 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	15455

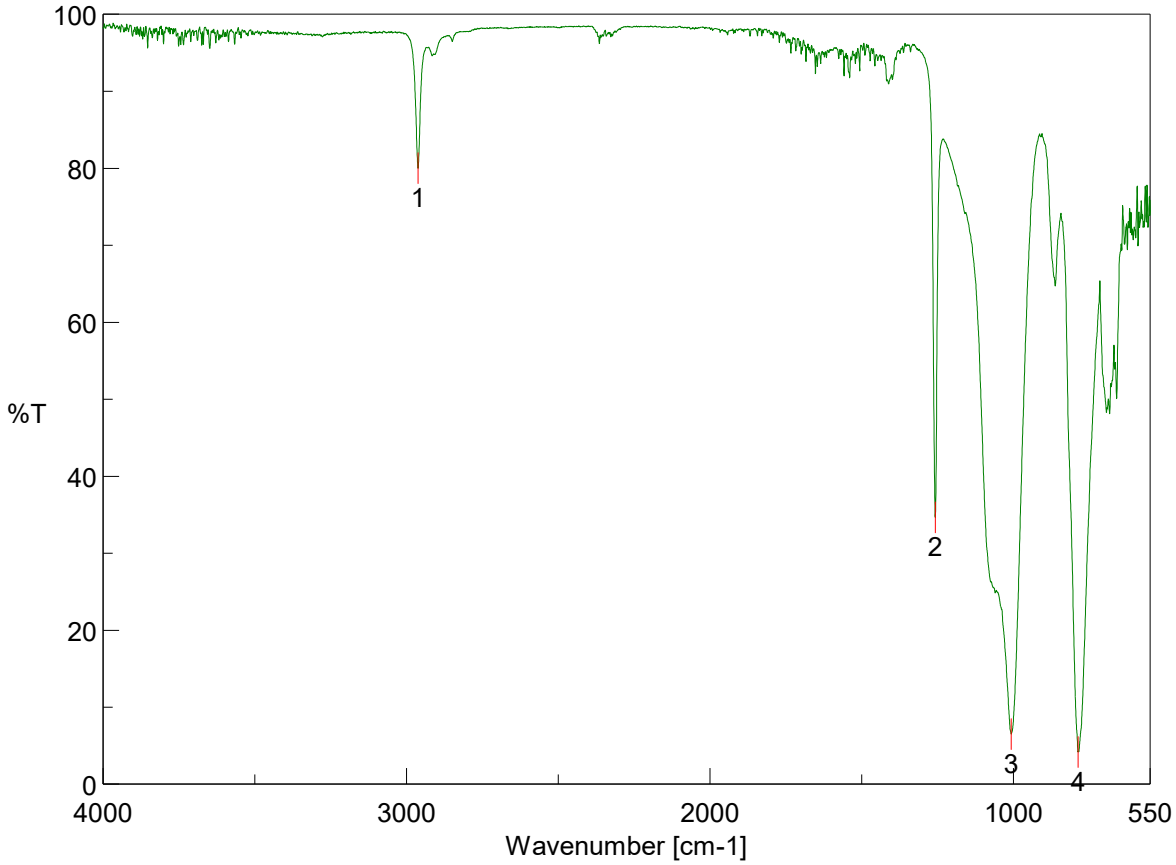
[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 10:50
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (4)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2962.13	80.0722	2	1257.84	34.7636
3	1006.66	6.53023	4	782.958	4.3272

Peak Find - ATR Repetibilidade Fotométrica 02.jws



[Comments]
Sample name
Comment
User
Division
Company NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 10:55
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.535 cm-1
End	7800.17 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	15455

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 10:51
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (4)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2962.13	79.985	2	1257.84	34.6521
3	1007.62	6.48798	4	787.779	4.14956

17.6. ATR SENSIBILIDADE

- ***Método de teste:***

O teste pode ser realizado através de um auto teste de sinal-ruído feito através do software de operação ou da leitura do backgound seguido da leitura da amostra com o compartimento de amostras vazios em ambos. O teste por leitura de amostra será realizado acumulando 48 espectros a 4 cm-1 em uma região onde nem o CO2 e nem a umidade podem afetar as medidas com energia máxima conforme a composição do cristal do ATR.

- ***Parâmetros de leitura:***

Números de Scans:	48
Resolução:	4 cm^{-1}
Modo de leitura:	Single Beam para a leitura do background T % para a leitura da amostra
Ganho:	Auto (se selecionável)
Abertura:	Auto (se selecionável)
Velocidade:	Auto (se selecionável) Tipicamente 2 mm/sec para detectores DTGS
Filtro:	Auto (se selecionável)
Função:	Cosseno (se selecionável)

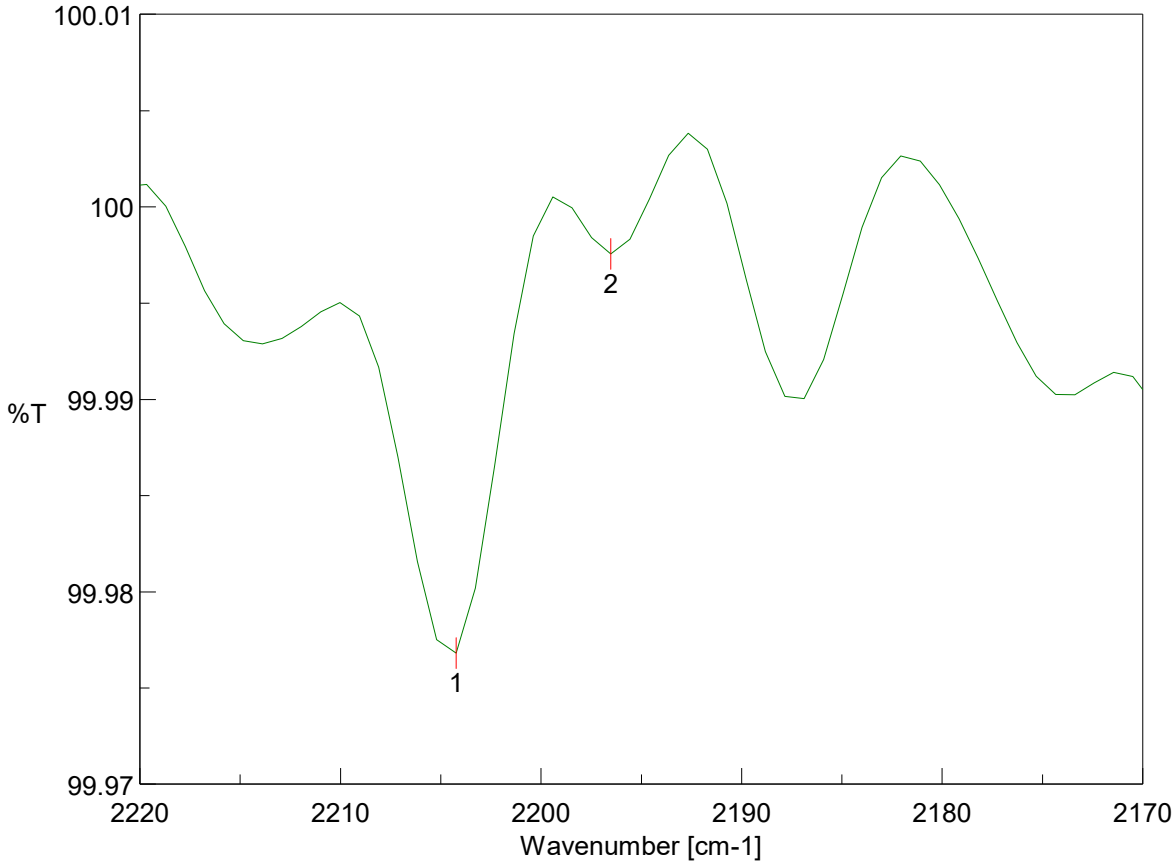
- ***Procedimento do teste por leitura de amostra:***

1. Configurar os parâmetros de leitura;
2. Certificar de que o compartimento de amostra se encontra vazio;
3. Iniciar a leitura do espectro do *background*;
4. Iniciar a leitura sem inserir o padrão no compartimento de amostras;
5. Ampliar a região de 2220-2170 cm-1 para o cristal de ZnSe ou 2800-2750 cm-1 para o cristal de diamante, verificar a diferença de %T entre o maior pico e o menor pico;
6. O valor do sinal-ruído é expresso como: 100/(diferença de pico a pico) : 1;
7. Preencher o formulário 15 – ATR Sensibilidade.

Cristal Utilizado:	☒ ZnSe		☐ Diamante	
VALOR DE %T DO PICO MAIS ALTO E MAIS BAIXO ENCONTRADOS	**DIFERENÇA DOS VALORES DOS PICOS**	**DIVIDIR 100 PELA DIFERENÇA ENCONTRADA. VALOR OBTIDO**	**CRITÉRIO DE ACEITAÇÃO**	**RESULTADO (Aprovado) (Reprovado)**
99.9975	**0.02070**	**4,830.92**	**> 1000 :1**	**APROVADO**
99.9768				
Metodo Utilizado:	☒ Por leitura de amostra		☐ Por Auto Teste	
Comentários:	**N/A.**			
Executor:	**DANILO DE SOUZA MELO**			
Data:	**23/03/2023**			

Formulário 15 – ATR Sensibilidade

Peak Find - ATR Sensibilidade.jws



[Comments]
Sample name
Comment
User
Division
Company NEWTECH

[Detailed Information]

Creation date	23/03/2023 11:03
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	349.053 cm-1
End	7800.65 cm-1
Data interval	0.964233 cm-1
Data points	7729

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4700typeA
Serial Number	C004661788
Measurement Date	23/03/2023 11:00
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	48
Resolution	4 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (4)
Aperture	Auto (7.1 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2204.24	99.9768	2	2196.52	99.9975

18. RESULTADOS DA QUALIFICAÇÃO DO FT/IR E ASSINATURAS DE APROVAÇÃO DESTE DOCUMENTO DE QUALIFICAÇÃO

TESTES REALIZADOS	RESULTADO (Aprovado) (Reprovado)
Item 16.1 Nível de Energia	APROVADO
Item 16.2 Exatidão do Número de Onda	APROVADO
Item 16.3 Resolução	APROVADO
Item 16.4 Repetibilidade do Número de Onda	APROVADO
Item 16.5 Repetibilidade Fotométrica	APROVADO
Item 16.6 Sensibilidade	APROVADO
Item 17.1 ATR Nível de Energia	APROVADO
Item 17.2 ATR Exatidão do Número de Onda	APROVADO
Item 17.3 ATR Resolução	APROVADO
Item 17.4 ATR Repetibilidade do Número de Onda	APROVADO
Item 17.5 ATR Repetibilidade Fotométrica	APROVADO
Item 17.6 ATR Sensibilidade	APROVADO

Executor: DANILO DE SOUZA MELO

Data: 23/03/2023

Revisor: _____
Assinatura Digital

Cliente:

Empresa: _____

Nome: _____

Departamento: _____

Assinatura: _____ **Data:** _____

Formulário 16 - Resultados da Qualificação do FT/IR - Rev. 03.5 - 24/02/2022