Nº do Certificado:

252/24

Documento de Qualificação

EMPRESA: UNIÃO QUÍMICA FARMACÊUTICA NACIONAL S/A.

EQUIPAMENTO: ESPECTROFOTÔMETRO FT-IR

IDENTIFICAÇÃO: ESP 004

MARCA: JASCO

MODELO: FT-IR 4100

Nº DE SÉRIE: B107261016

ACESSÓRIO: ATR MIRacle

Nº DE SÉRIE: 17414

LOCAL INSTALADO: Laboratório EQFAR

Especialista responsável pelo serviço:

MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA

Data de Início: 05/06/2024
Data do Término: 05/06/2024
Próximo Data: -- /06/2025

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

3.1. Modelo de Qualificação

A documentação de qualificação da Lab Provider 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 Lab Provider 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 Lab Provider 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 Lab Provider, e todo 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 Lab Provider.

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 Lab Provider.

5.2. Lab Provider

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: **UNIÃO QUÍMICA FARMACÊUTICA NACIONAL S/A.**	
Endereço: **RUA CORONEL LUIZ TENORIO DE BRITO**	**N°**: **90**
Bairro: **CENTRO**	**Cidade**: **EMBU-GUAÇÚ**
Estado: **SP**	**CEP**: **06900-095**
Responsável: **SANDRA APARECIDA KERCHER VERISSIMO**	
Cargo: **ANALISTA DE DESENVOLVIMENTO ANALÍTICO PLENO**	
Departamento: **EQFAR**	

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:	**MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA**
Cargo:	**ENGENHEIRO DE MANUTENÇÃO**
Data:	**05/06/2024**
Revisor:	**DANILO DE SOUZA MELO**
Cargo:	**ENGENHEIRO DE MANUTENÇÃO**
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	IR-04	23/11/2023	23/11/2028	A1
ATR VALIDATION STANDARD	ATR-04	23/11/2023	23/11/2028	A2
Executor: MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA **Data:** 05/06/2024				

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)

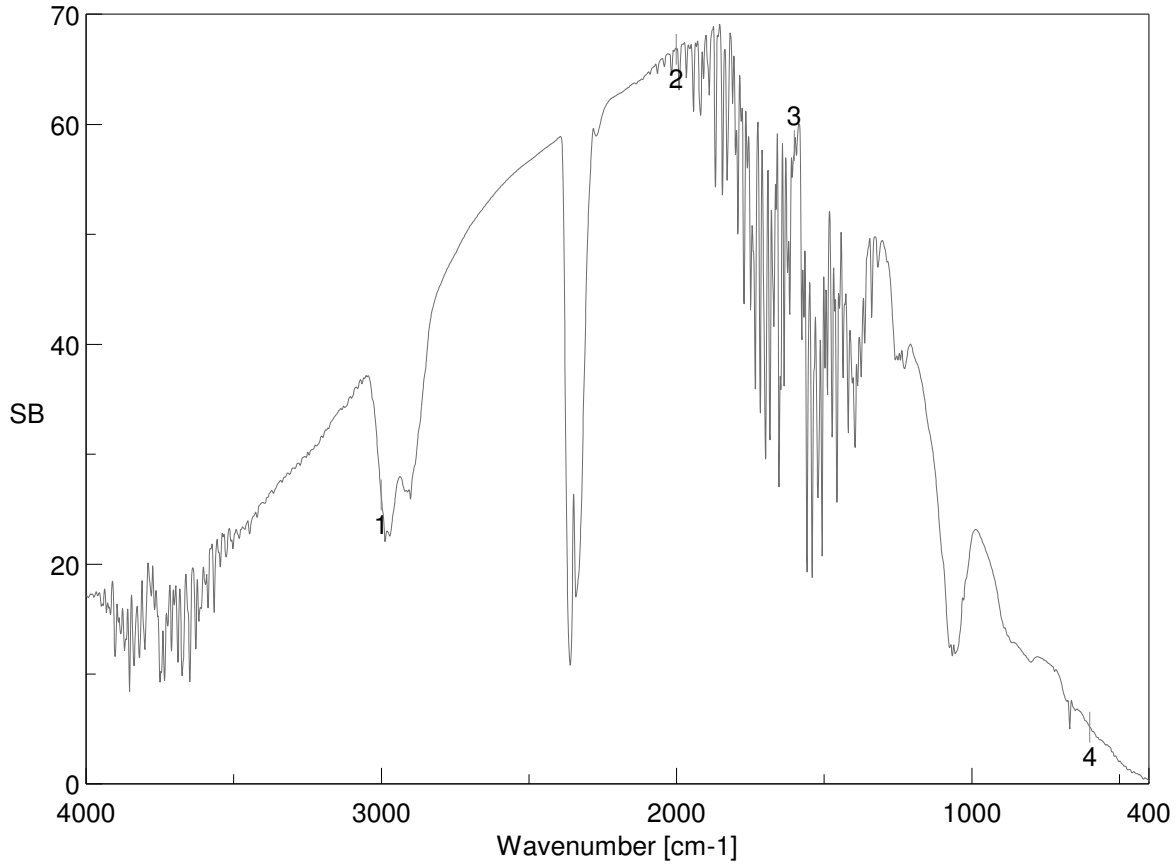
- ***Procedimento do teste:***

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	**26.2961**	**42.1054**	**62.45**	**> 60**	**APROVADO**
2000	**66.8062**	**70.4956**	**94.77**	**> 60**	**APROVADO**
1600	**58.047**	**63.4535**	**91.48**	**> 60**	**APROVADO**
600	**5.16414**	**5.51664**	**93.61**	**> 60**	**APROVADO**
Comentários: **N/A**					
Executor: **MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA** **Data:** **05/06/2024**					

Formulário 4 - Nível de Energia

Peak Find - Nível De Energia



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 10:34
Date modified	05/06/2024 10:37
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	SB
Start	399.193 cm-1
End	4000.6 cm-1
Data interval	0.964233 cm-1
Data points	3736

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 10:30
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	3000.69	26.2961	2	2000.78	66.8062
3	1600.63	58.047	4	600.717	5.16414

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

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: 2849.31, 1600.83, 1154.19, 906.380 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)

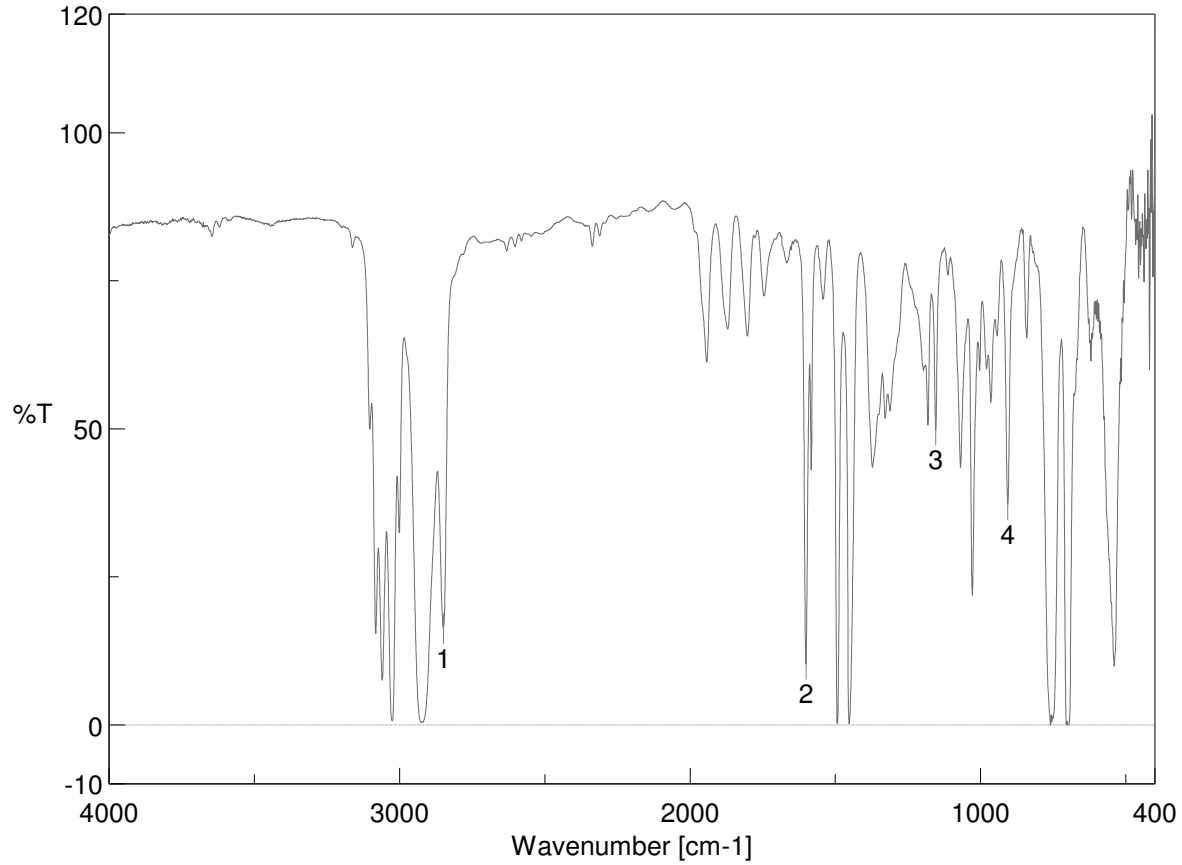
- ***Procedimento do teste:***

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: 2849.31, 1600.83, 1154.19, 906.380 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)
2849.31	**2849.31**	**0.000**	**± 2.0**	**APROVADO**
1600.83	**1601.11**	**0.280**	**± 2.0**	**APROVADO**
1154.19	**1154.67**	**0.480**	**± 2.0**	**APROVADO**
906.380	**906.862**	**0.482**	**± 2.0**	**APROVADO**
Comentários: **N/A.**				
Executor: **MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA** **Data:** **05/06/2024**				

Formulário 5 - Exatidão do Número de Onda

Peak Find - Exatidão Do Número De Onda



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 10:41
Date modified	05/06/2024 10:42
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	399.675 cm-1
End	4000.12 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	7469

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 10:41
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	16.2235	2	1601.11	10.2152
3	1154.67	49.7697	4	906.862	37.15

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

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)

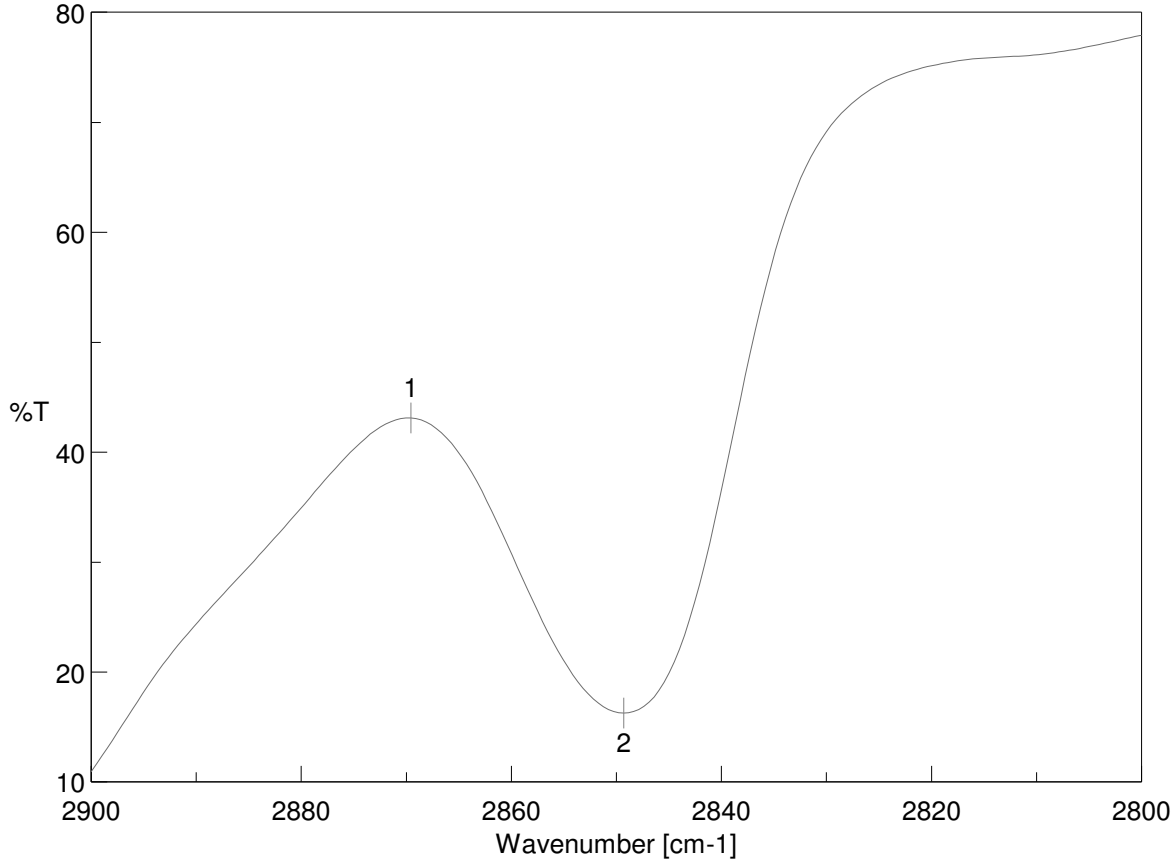
- ***Procedimento do teste:***

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 1550-1600 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	**43.0872**	**26.8423**	**> 18**	**APROVADO**
2851	**16.2449**			
1588	**60.9058**	**17.8082**	**> 10**	**APROVADO**
1583	**43.0976**			
Comentários: **N/A.**				
Executor: **MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA** **Data:** **05/06/2024**				

Formulário 6 - Resolução

Peak Find - Resolução



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 10:44
Date modified	05/06/2024 10:45
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	399.675 cm-1
End	4000.12 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	7469

[Measurement Information]

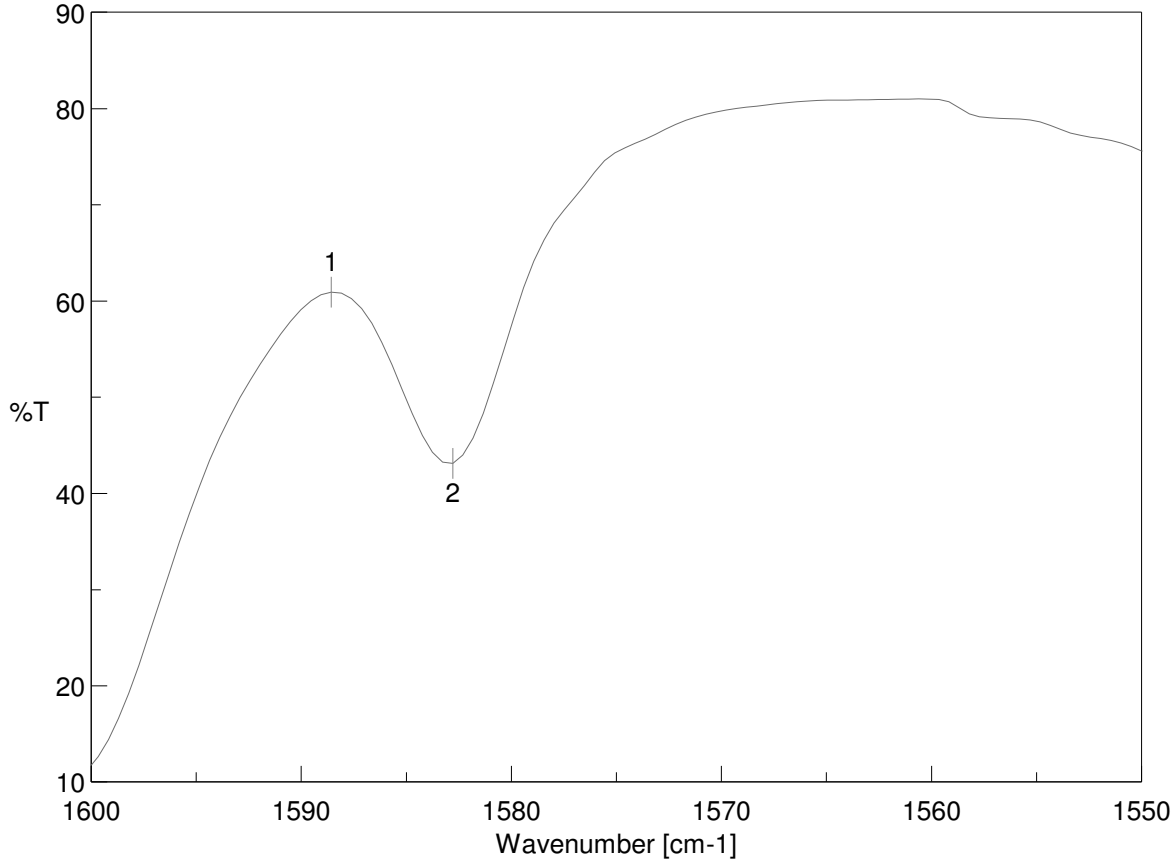
Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 10:43
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (2)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2869.56	43.0872	2	2849.31	16.2449

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

Peak Find - Resolução - 1600



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 10:49
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	399.675 cm-1
End	4000.12 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	7469

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 10:43
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	60.9058	2	1582.79	43.0976

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

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)

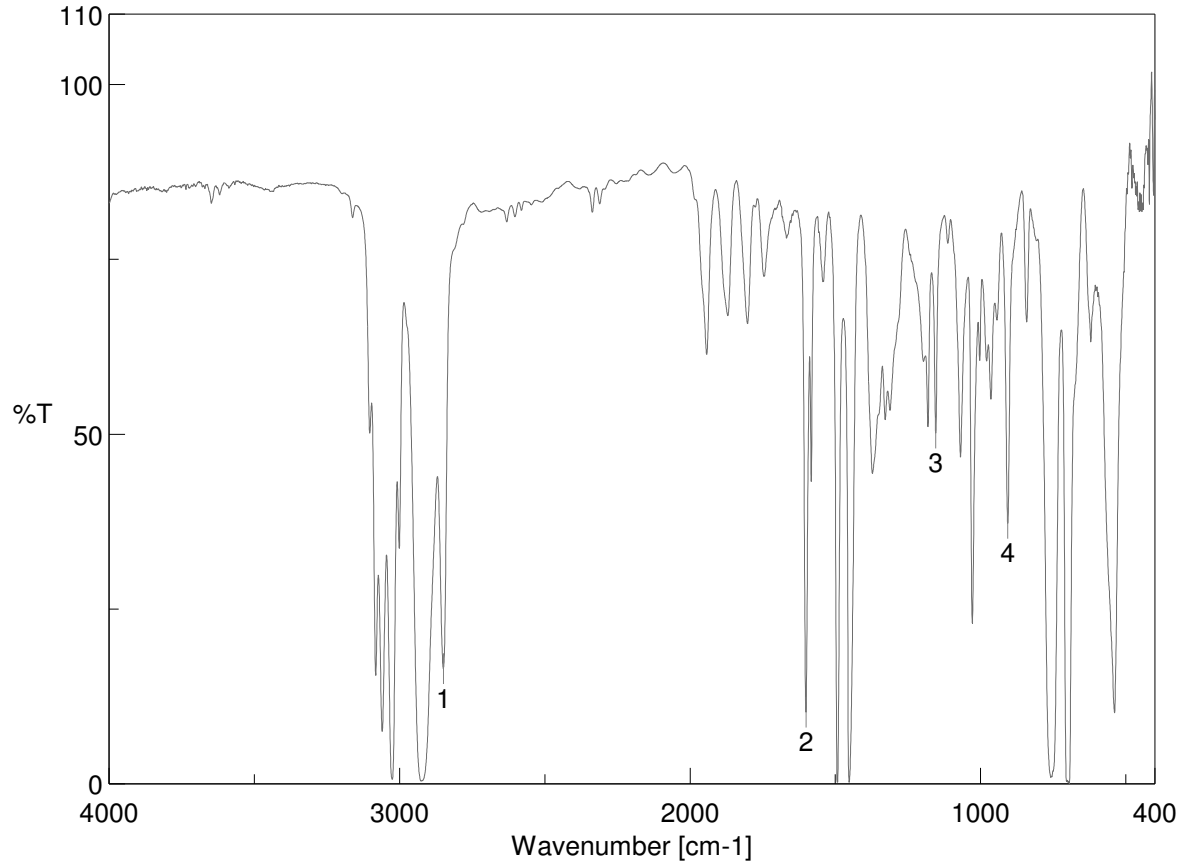
- ***Procedimento do teste:***

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: , 2849.31, 1600.83, 1154.19, 906.380 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)
2849.31	**2849.31**	**2849.31**	**0.000**	**± 1.0**	**APROVADO**
1600.83	**1601.11**	**1601.11**	**0.000**	**± 1.0**	**APROVADO**
1154.19	**1154.67**	**1154.67**	**0.000**	**± 1.0**	**APROVADO**
906.380	**906.379**	**906.379**	**0.000**	**± 1.0**	**APROVADO**
Comentários: **N/A.**					
Executor: **MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA** **Data:** **05/06/2024**					

Formulário 7 - Repetibilidade do Número de Onda

Peak Find - Repetibilidade Do Número De Onda - Rep. 1



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 10:51
Date modified	05/06/2024 10:52
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	399.675 cm-1
End	4000.12 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	7469

[Measurement Information]

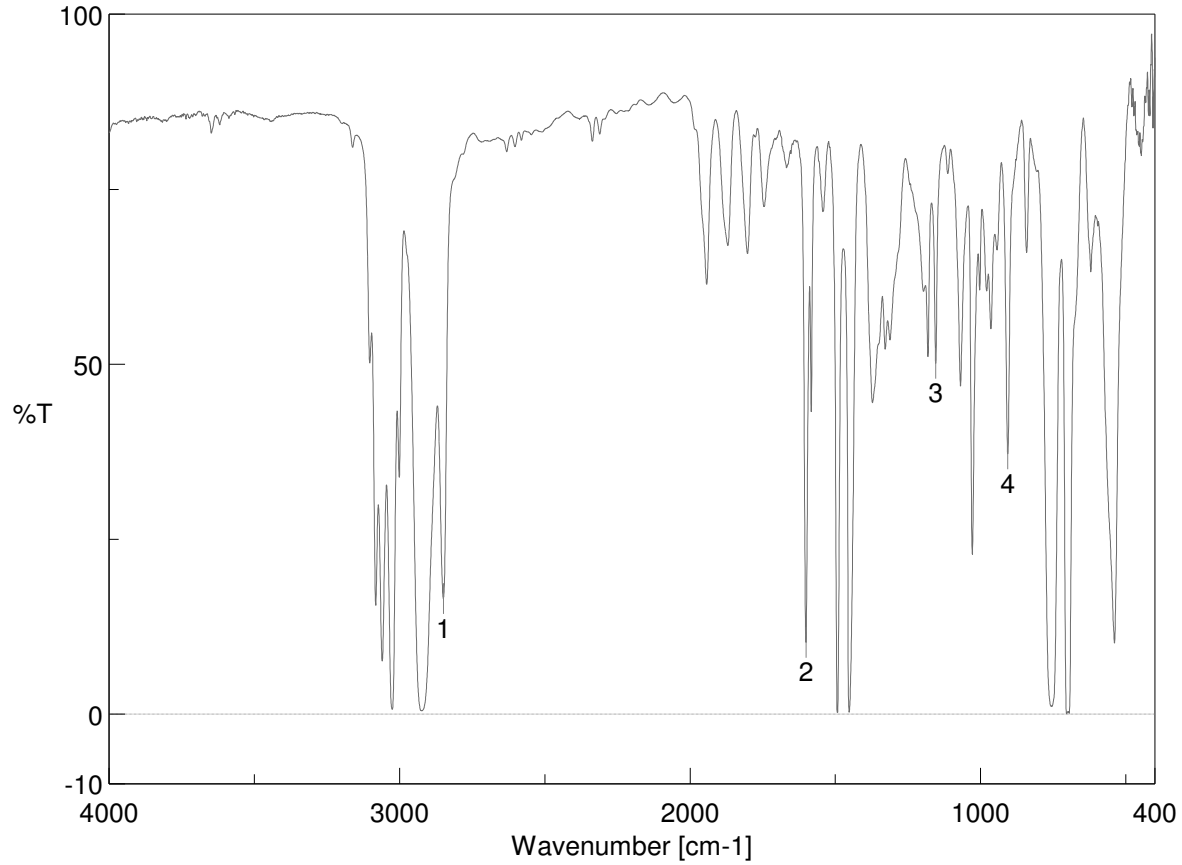
Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 10:50
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (2)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2849.31	16.4531	2	1601.11	10.2336
3	1154.67	50.1177	4	906.379	37.2158

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

Peak Find - Repetibilidade Do Número De Onda - Rep. 2



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 10:51
Date modified	05/06/2024 10:52
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	399.675 cm-1
End	4000.12 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	7469

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 10:51
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	16.4637	2	1601.11	10.2089
3	1154.67	50.1	4	906.379	37.1649

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

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)

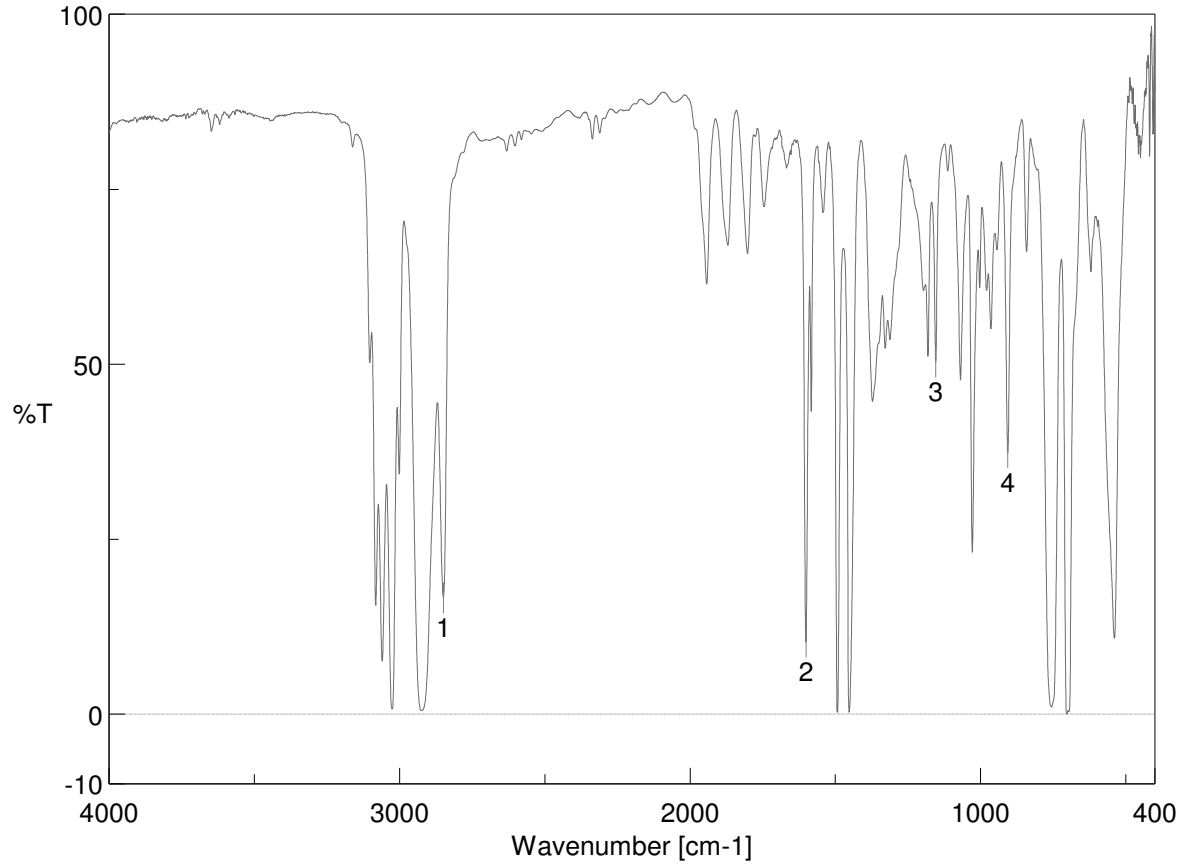
- ***Procedimento do teste:***

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:2849.31, 1600.83, 1154.19, 906.380cm^{-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)
2849.31	**16.5624**	**16.6118**	**-0.049**	**± 0.5**	**APROVADO**
1600.83	**10.2492**	**10.2517**	**-0.003**	**± 0.5**	**APROVADO**
1154.19	**50.2943**	**50.2497**	**0.045**	**± 0.5**	**APROVADO**
906.380	**37.36**	**37.3415**	**0.019**	**± 0.5**	**APROVADO**
Comentários: **N/A.**					
Executor: **MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA** **Data:** **05/06/2024**					

Formulário 8 - Repetibilidade Fotométrica

Peak Find - Repetibilidade Fotométrica - Rep. 1



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 10:55
Date modified	05/06/2024 10:56
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	399.675 cm-1
End	4000.12 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	7469

[Measurement Information]

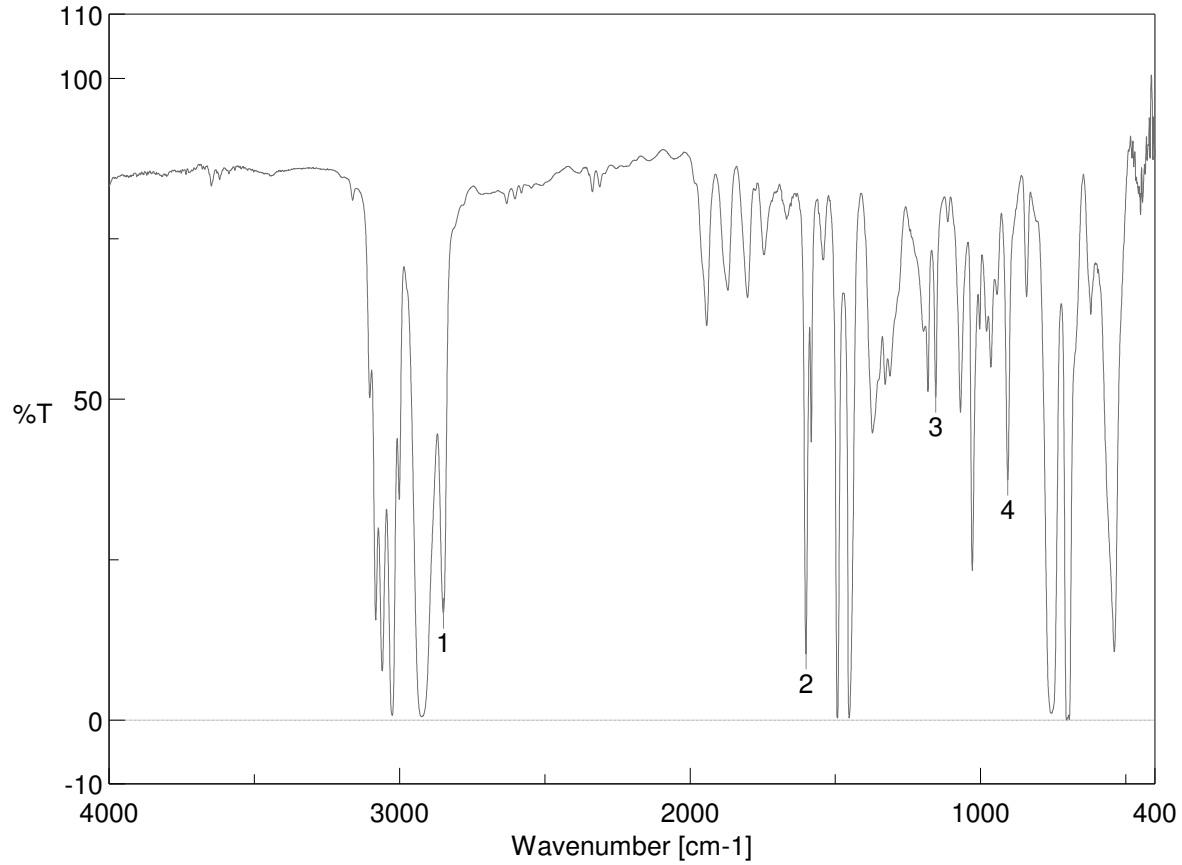
Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 10:54
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (2)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2849.31	16.5624	2	1601.11	10.2492
3	1154.67	50.2943	4	906.379	37.36

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

Peak Find - Repetibilidade Fotométrica - Rep. 2



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 10:55
Date modified	05/06/2024 10:57
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	399.675 cm-1
End	4000.12 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	7469

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 10:55
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	16.6118	2	1601.11	10.2517
3	1154.67	50.2497	4	906.379	37.3415

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

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)

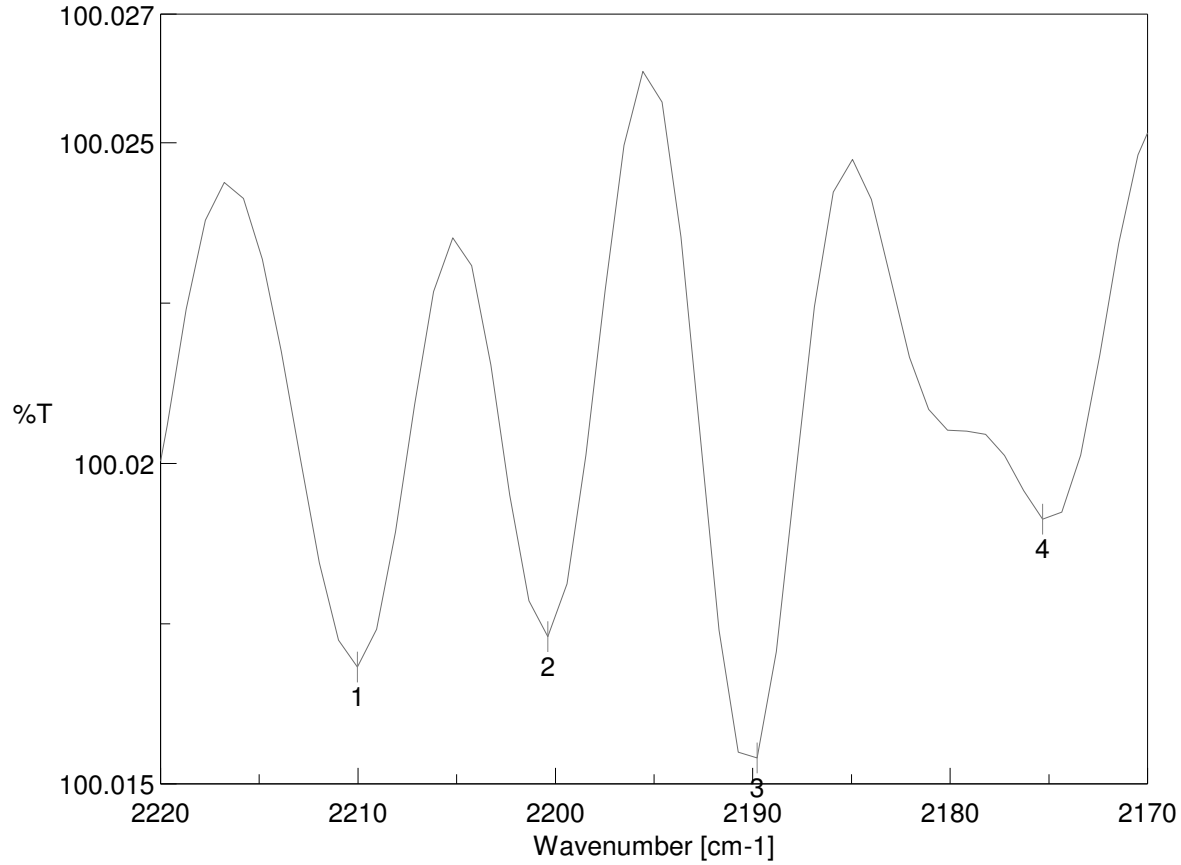
- ***Procedimento do teste:***

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)
100.019	0.004000	24999.99999997	> 5000 :1	APROVADO
100.015				
Comentários: N/A.				
Executor: MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA **Data:** 05/06/2024				

Formulário 9 – Sensibilidade

Peak Find - Sensibilidade



[Comments]
Sample name
Comment
User QPackSA
Workgroup Workgroup Jasco
Division Suporte Técnico
Company União Química

[Detailed Information]
Creation date 05/06/2024 11:01
Date modified 05/06/2024 11:02

Data array type Linear data array
Horizontal axis Wavenumber [cm-1]
Vertical axis %T
Start 399.193 cm-1
End 4000.6 cm-1
Data interval 0.964233 cm-1
Data points 3736

[Measurement Information]
Model Name FT/IR-4100typeA
Serial Number B107261016

Measurement Date 05/06/2024 11:01

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	2210.02	100.017	2	2200.38	100.017
3	2189.77	100.015	4	2175.31	100.019

Creation QPack Soluções Analíticas Ltda
Review
Approval

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)

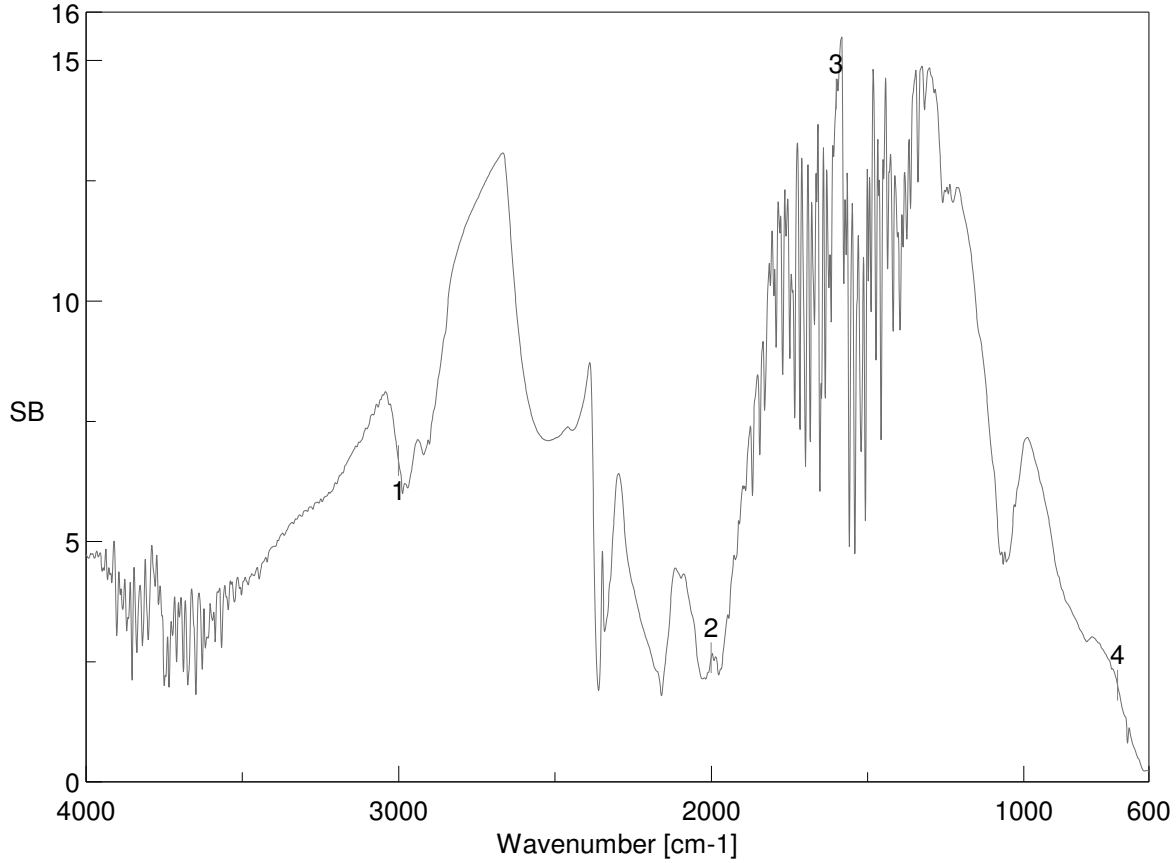
- ***Procedimento do teste:***

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	**6.67836**	**10.4227**	**64.08**	**> 60**	**APROVADO**
2000	**2.57835**	**3.6178**	**71.27**	**> 60**	**APROVADO**
1600	**14.2962**	**19.5259**	**73.22**	**> 60**	**APROVADO**
700	**2.01044**	**2.62916**	**76.47**	**> 60**	**APROVADO**
Comentários:	**N/A**				
Executor:	**MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA**				
Data:	**05/06/2024**				

Formulário 10 – ATR Nível de Energia

Peak Find - ATR - Nível De Energia



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 11:16
Date modified	05/06/2024 11:17
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	SB
Start	599.753 cm-1
End	4000.6 cm-1
Data interval	0.964233 cm-1
Data points	3528

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 11:16
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	3000.69	6.67836	2	2000.78	2.57835
3	1600.63	14.2962	4	700.034	2.01044

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

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: 2920.66, 1796.37, 965.198, 871.667 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)

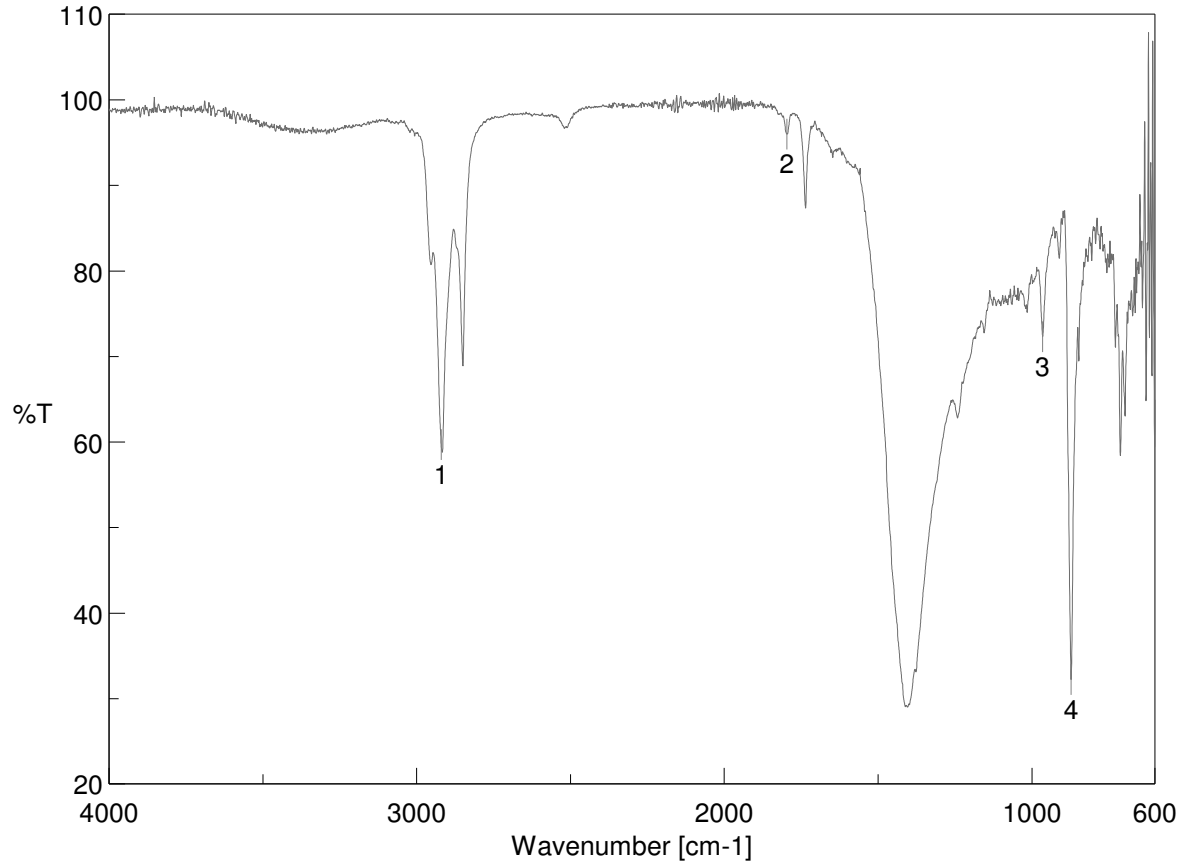
- ***Procedimento do teste:***

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: 2920.66, 1796.37, 965.198, 871.667 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)**
2920.66	**2920.18**	**0.480**	**± 2.0**	**APROVADO**
1796.37	**1796.37**	**0.000**	**± 2.0**	**APROVADO**
965.198	**965.198**	**0.000**	**± 2.0**	**APROVADO**
871.667	**872.149**	**-0.482**	**± 2.0**	**APROVADO**
Comentários: **N/A.**				
Executor: **MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA** **Data:** **05/06/2024**				

Formulário 11 – ATR Exatidão do Número de Onda

Peak Find - ATR - Exatidão Do Número De Onda



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 11:23
Date modified	05/06/2024 11:30
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	599.753 cm-1
End	4000.12 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	7054

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 11:23
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (8)
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	2920.18	59.6597	2	1796.37	95.961
3	965.198	72.2951	4	872.149	32.1814

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

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)

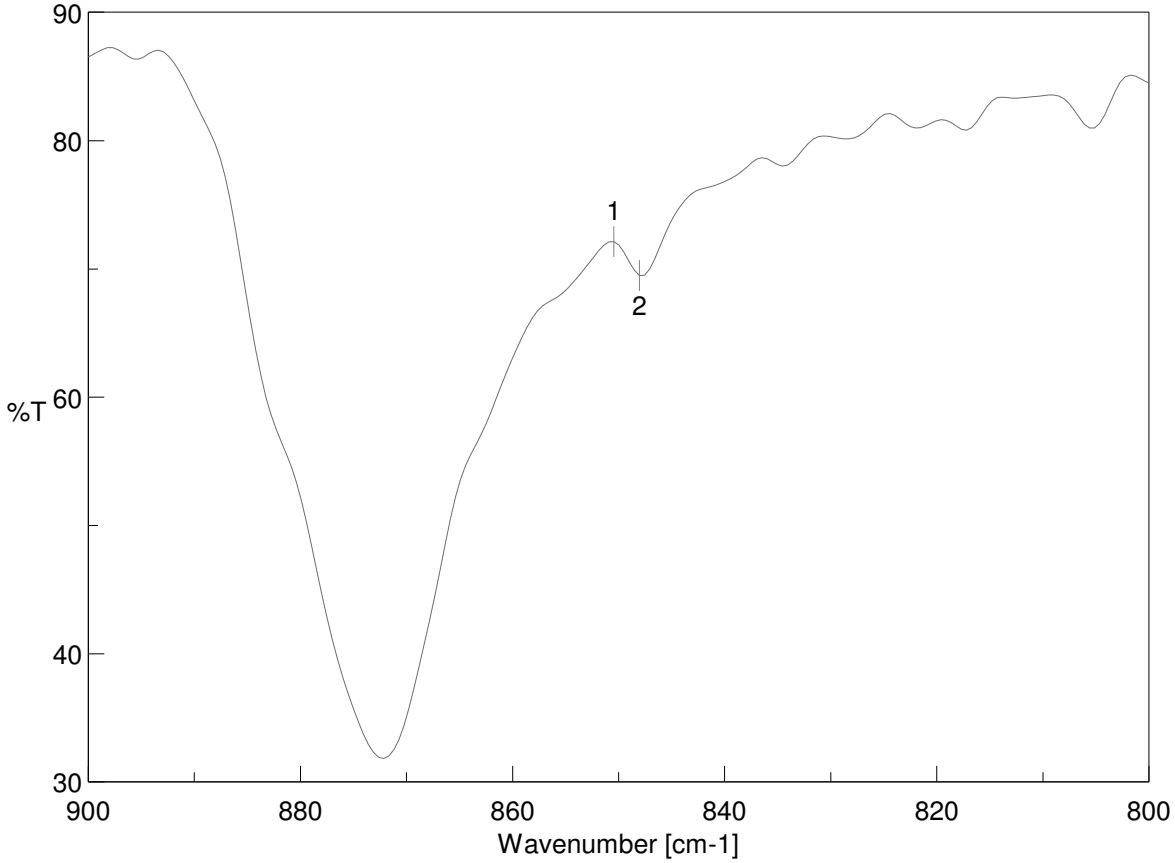
- ***Procedimento do teste:***

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	**72.1117**	**2.6317**	**> 0.5**	**APROVADO**
870	**69.48**			
Comentários	**N/A**			
Executor:	**MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA**			
Data:	**05/06/2024**			

Formulário 12 – ATR Resolução

Peak Find - ATR - Resolução



[Comments]

Sample name	
Comment	
User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 11:32
Date modified	05/06/2024 11:34
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	599.753 cm-1
End	4000.12 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	7054

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 11:32
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (8)
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	850.454	72.1117	2	848.043	69.48

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

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)

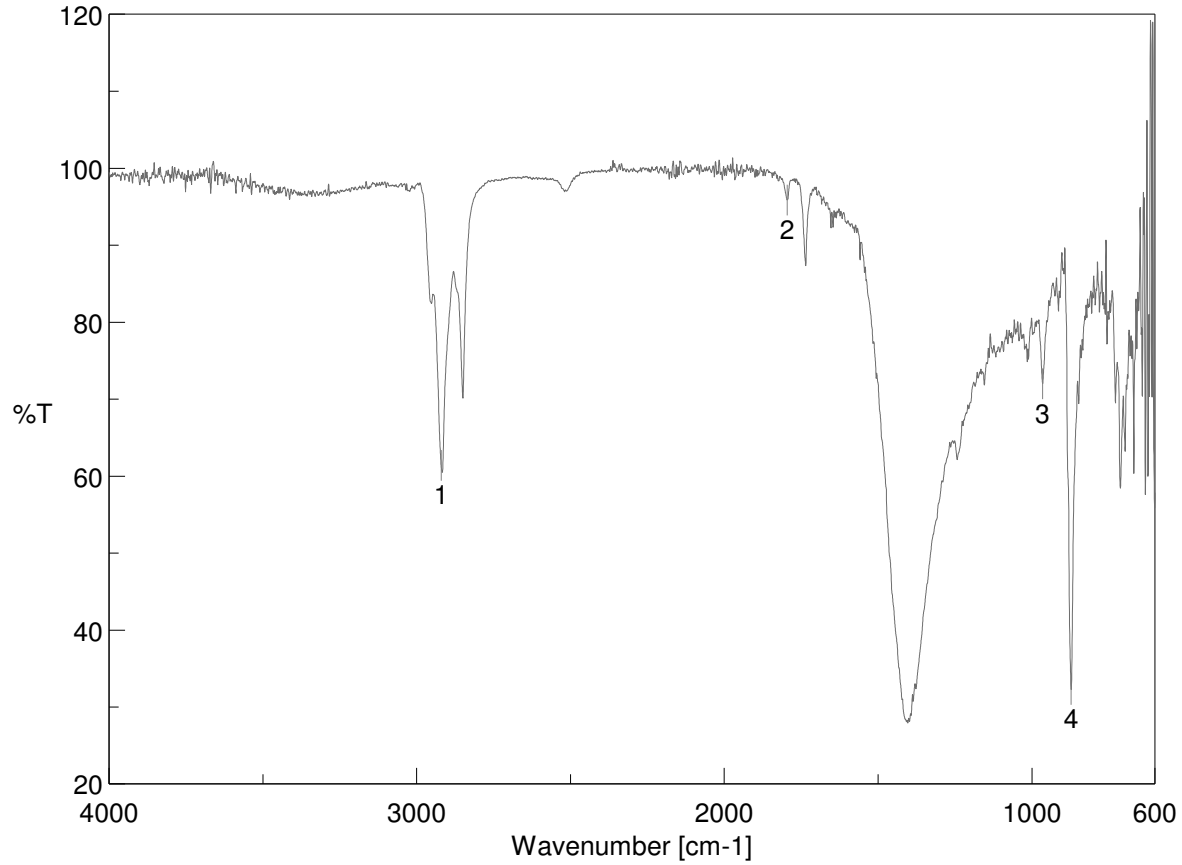
- ***Procedimento do teste:***

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: 2920.66, 1796.37, 965.198, 871.667 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)
2920.66	**2920.18**	**2920.18**	**0.000**	**± 1.0**	**APROVADO**
1796.37	**1795.4**	**1795.4**	**0.000**	**± 1.0**	**APROVADO**
965.198	**965.198**	**965.198**	**0.000**	**± 1.0**	**APROVADO**
871.667	**872.149**	**872.149**	**0.000**	**± 1.0**	**APROVADO**
Comentários	**N/A.**				
Executor:	**MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA**				
Data:	**05/06/2024**				

Formulário 13 – ATR Repetibilidade do Número de Onda

Peak Find - ATR - Repetibilidade Do Número De Onda - Rep. 1



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 11:38
Date modified	05/06/2024 11:40
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	599.753 cm-1
End	4000.12 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	7054

[Measurement Information]

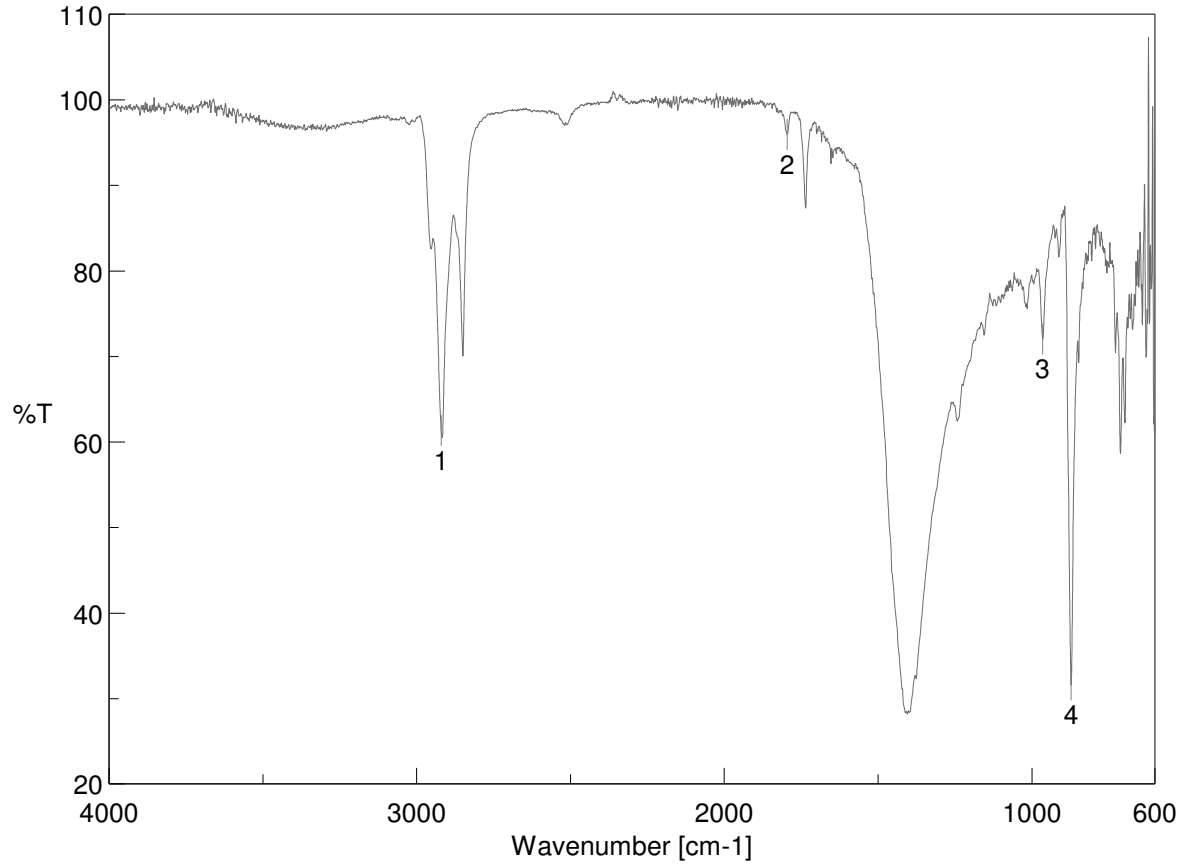
Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 11:36
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (8)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2920.18	61.352	2	1795.4	95.8485
3	965.198	71.9681	4	872.149	32.2704

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

Peak Find - ATR - Repetibilidade Do Número De Onda - Rep. 2



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 11:38
Date modified	05/06/2024 11:42
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	599.753 cm-1
End	4000.12 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	7054

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 11:36
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (8)
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	2920.18	61.3261	2	1795.4	95.9226
3	965.198	72.0149	4	872.149	31.5689

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

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)

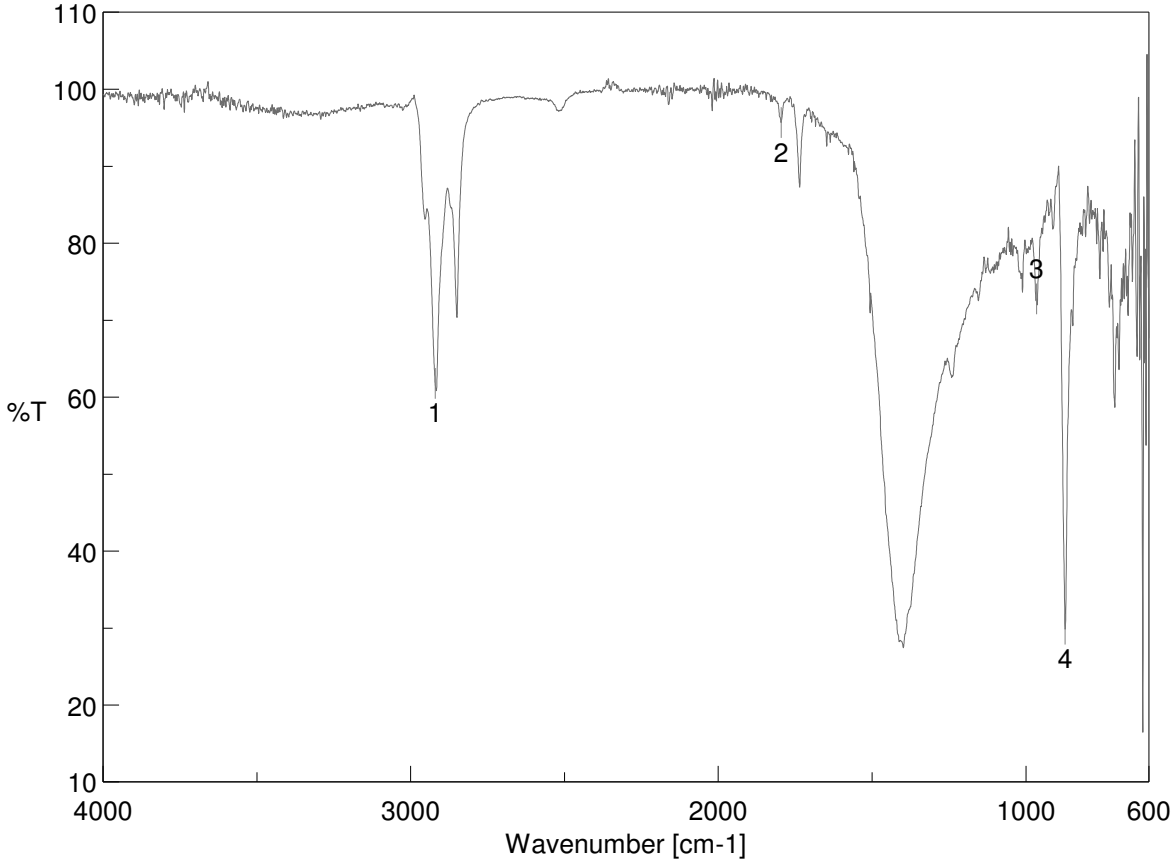
- ***Procedimento do teste:***

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: 2920.66, 1796.37, 965.198, 871.667 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)
2920.66	**61.7535**	**61.8341**	**-0.081**	**± 0.5**	**APROVADO**
1796.37	**95.6514**	**96.0087**	**-0.357**	**± 0.5**	**APROVADO**
965.198	**72.7639**	**72.9851**	**-0.221**	**± 0.5**	**APROVADO**
871.667	**29.8449**	**29.6447**	**0.200**	**± 0.5**	**APROVADO**
Comentários: **N/A.**					
Executor: **MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA** **Data:** **05/06/2024**					

Formulário 14 – ATR Repetibilidade Fotométrica

Peak Find - ATR - Repetibilidade Fotométrica - Rep. 1



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 11:43
Date modified	05/06/2024 11:45
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	599.753 cm-1
End	4000.12 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	7054

[Measurement Information]

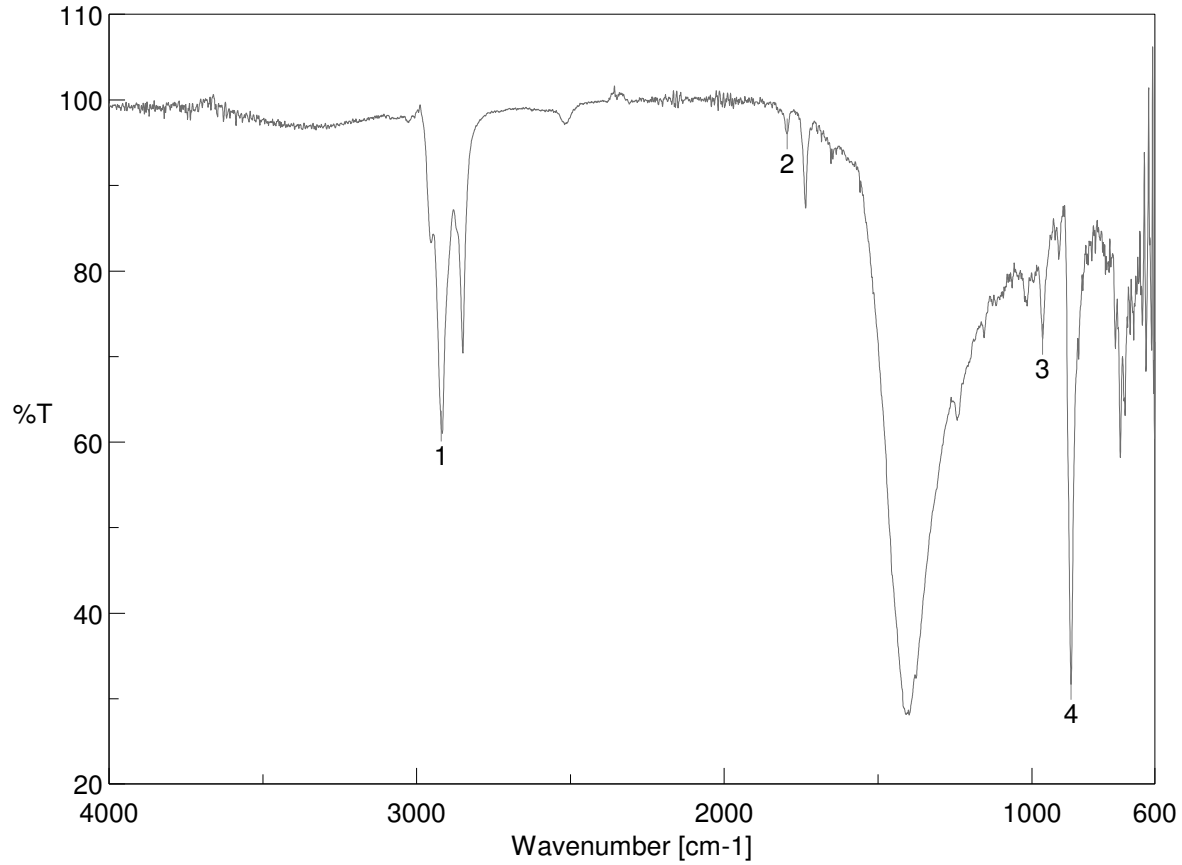
Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 11:43
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (8)
Aperture	Auto (5 mm)
Scanning Speed	Auto (2 mm/sec)
Filter	Auto (30000 Hz)

[Result of Peak Picking]

No.	Position	Intensity	No.	Position	Intensity
1	2920.18	61.7535	2	1795.88	95.6514
3	965.198	72.7639	4	872.149	29.8449

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

Peak Find - ATR - Repetibilidade Fotométrica - Rep. 2



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 11:44
Date modified	05/06/2024 11:51
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	599.753 cm-1
End	4000.12 cm-1
Data interval	0.482117 cm-1
Data points	7054

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 11:43
Light Source	Standard
Detector	TGS
Accumulation	16
Resolution	2 cm-1
Zero Filling	On
Apodization	Cosine
Gain	Auto (8)
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	2920.18	61.8341	2	1795.88	96.0087
3	965.198	72.9851	4	872.149	29.6447

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

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)

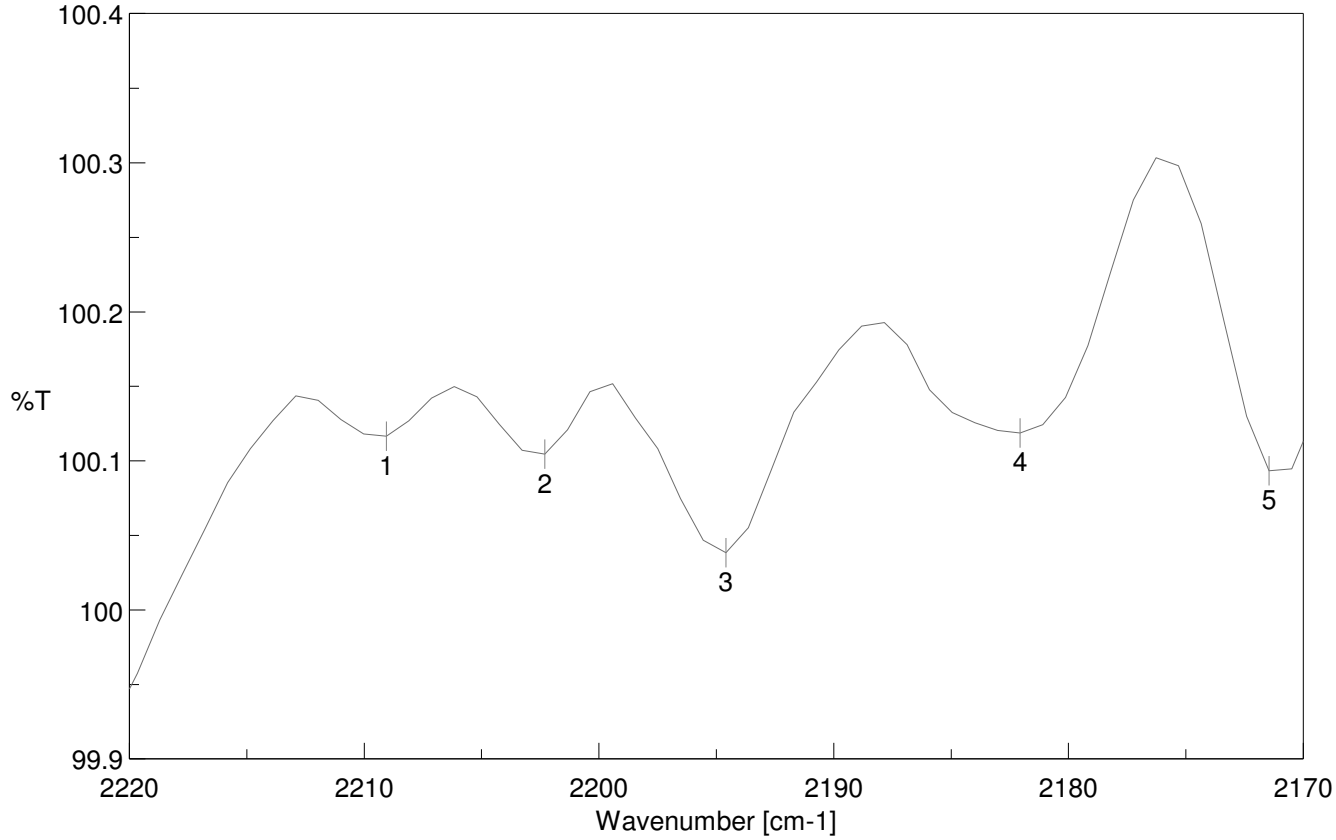
- ***Procedimento do teste por leitura de amostra:***

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)**
100.119	**0.08100**	**1,234.57**	**> 1000 :1**	**APROVADO**
100.038				
Metodo Utilizado:	☒ Por leitura de amostra		☐ Por Auto Teste	
Comentários: **N/A.**				
Executor: **MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA** **Data:** **05/06/2024**				

Formulário 15 – ATR Sensibilidade

Peak Find - ATR - Sensibilidade



[Comments]
Sample name
Comment

User	QPackSA
Workgroup	Workgroup Jasco
Division	Suporte Técnico
Company	União Química

[Detailed Information]

Creation date	05/06/2024 12:05
Data array type	Linear data array
Horizontal axis	Wavenumber [cm-1]
Vertical axis	%T
Start	599.753 cm-1
End	4000.6 cm-1
Data interval	0.964233 cm-1
Data points	3528

[Measurement Information]

Model Name	FT/IR-4100typeA
Serial Number	B107261016
Measurement Date	05/06/2024 11:55
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	No.	Position	Intensity
1	2209.06	100.116	2	2202.31	100.104	3	2194.6	100.038
4	2182.06	100.119	5	2171.45	100.093			

Creation	QPack Soluções Analíticas Ltda
Review	
Approval	

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: MICHAEL FERNANDO CARELI DA SILVA

Data: 05/06/2024

Revisor: _____
Assinatura Digital

Cliente:

Empresa: _____

Nome: _____

Departamento: _____

Assinatura: _____ **Data:** _____

Formulário 16 - Resultados da Qualificação do FT/IR - Rev. 00 - 23/03/2023