



Software MicroLab Agilent

Manual de operação

Avisos

Nº de peça do manual

0020-410

Edição 11, outubro de 2024

Direito autoral

© Agilent Technologies, Inc. 2024

Nenhuma parte deste material pode ser reproduzida de qualquer forma ou por qualquer meio (incluindo armazenamento e recuperação eletrônica ou a tradução para outro idioma) sem autorização prévia por escrito da Agilent Technologies, Inc. de acordo com as leis de direitos autorais americanas e internacionais.

Agilent Technologies Australia [M] Pty Ltd

679 Springvale Road

Mulgrave, Victoria 3170, Australia

www.agilent.com

Revisão de software

Este guia é válido para a revisão 5.7 ou superior do MicroLab Agilent, até ser substituído.

Garantia

O material contido neste documento é fornecido "no estado em que se encontra" e está sujeito a alterações, sem aviso prévio em edições futuras. Além disso, com o máximo rigor permitido pelas leis aplicáveis, a Agilent isenta-se de responsabilidade em relação a garantias, expressas ou implícitas, em relação a este manual e a qualquer informação contida nele, incluindo mas não limitado as garantias implícitas de adequação comercial e adequação a um propósito específico. A Agilent não será responsável por erros ou por danos incidentais ou consequenciais relacionados ao fornecimento, ao uso ou ao desempenho deste documento ou de qualquer informação nele contida. Se a Agilent e o usuário possuírem um acordo por escrito em separado com os termos de garantia cobrindo o material neste documento que entrem em conflito com esses termos, os termos de garantia do documento em separado prevalecerão.

Licenças de tecnologia

O hardware e/ou software descrito(s) neste documento é/são fornecido(s) sob licença, podendo ser usado(s) ou copiado(s) somente de acordo com os termos dessa licença.

Legenda de direitos restritos

Direitos restritos ao governo dos EUA. Os direitos de software e dados técnicos concedidos ao governo federal incluem apenas os direitos normalmente concedidos aos clientes usuários finais. A Agilent fornece esta licença comercial habitual relativamente a software e dados técnicos de acordo com a FAR 12.211 (Dados técnicos) e 12.212 (Software de computador) e, para o Departamento de Defesa, segundo a DFARS 252.227-7015 (Dados técnicos – Itens comerciais) e DFARS 227.7202-3 (Direitos relativos a software de computador comercial ou documentação de software de computador).

Avisos de segurança

CUIDADO

Um aviso de **CUIDADO** representa um perigo. Ele chama a atenção para um procedimento, prática ou algo semelhante que, se não forem corretamente realizados ou cumpridos, podem resultar em avarias no produto ou perda de dados importantes. Não prossiga após uma indicação de **CUIDADO** até que as condições indicadas sejam completamente compreendidas e atendidas.

Índice

1	Introdução	7
	Instrumentos compatíveis	8
2	MicroLab Mobile	9
	Conectar o PDA ao instrumento para comunicação via Bluetooth	9
	Fazer login pela primeira vez	11
	Software IQ no FTIR 4300 portátil	12
	Gerenciar usuários	13
	Adicionar	13
	Definições das funções	14
	Ícones comuns	15
	Tela inicial	15
	Status	15
	Iniciar	16
	Método	16
	Método de referência	16
	Log Off (desconectar)	16
	Bloquear	16
	Menu	16
	Tela Method	17
	Lista Methods	18
	Ativar	18
	Editar	18
3	MicroLab PC	19
	Tela inicial	19

Índice

Status	19
Iniciar	20
Métodos	20
Métodos de referência	20
Desconectar & Sair	20
Bloquear	20
Previous Results (resultados anteriores)	20
Advanced Features (recursos avançados)	20
Métodos	21
Página principal	21
Criar um Novo Método/Editar um Método Existente	22
Advanced Features (recursos avançados)	34
Verificação do sistema	34
Diagnóstico	34
Endereços MAC	35
Gerenciamento de bibliotecas	35
Gerenciamento de usuários	37
Transferência de método multivariável do GRAMS PLS/IQ para o MicroLab PC	37
Exportar o arquivo *.cal do PLS/IQ para ASCII	37
Gerar o arquivo de método	38
Transferência de modelo quantitativo MicroLab do MicroLab Expert para o MicroLab PC	39
Usar verificação de alinhamento pré-amostragem	40
Transferir métodos editados para o MicroLab Mobile	42
Usar o MicroLab Lite Synchronize	42
Copiar via Meu Computador	43

Índice

Como mover arquivos em um ambiente habilitado para 21 CFR Parte 11	43
Verificação do sistema	44
4 MicroLab Quant	45
Tela inicial	45
(Logoff) Desconectar	46
Bloquear	46
Iniciar novo modelo	46
Importar modelos	51
Recursos da norma 21 CFR Parte 11	52
Norma 21 CFR Parte 11	52
E-Sign	52
5 MicroLab OQ	53
Qualificação Operacional (OQ)	53
Verificação de diagnóstico do sistema operacional	53
Validação de Desempenho	54
Executar a OQ	54
Relatório de OQ	55
6 MicroLab com 21 CFR Parte 11	57
SCM	57
SDA	58
Componentes do software 21 CFR Parte 11 no MicroLab	59
Bloquear	59
E-sign	60
Motivo para alteração	61
Norma 21 CFR Parte 11	61

Índice

7	Medir amostras	63
	Limpar a interface de amostragem	63
	Coletar uma medição de background	64
	Coletar a medição de amostra	64
8	Visualizar resultados	67
	MicroLab Mobile	67
	Tela Results	67
	Manusear dados	67
	Previous Results (resultados anteriores)	69
	MicroLab PC/MicroLab Lite	70
	Tela Results	71
	Importar espectros para o GRAMS	78
	Criação de relatório no MicroLab	79
	Atribuir um modelo de relatório a um método	79
	Criar um novo modelo de relatório	80
9	Atualizações e solução de problemas	83
	Atualização de firmware	83
	Solução de problemas	83
	Falha na inicialização	83
	Relatar falha na criação do modelo	84
	Alterações no ganho não são salvas	84
	Problemas de acesso ao banco de dados	84
	Appendix A: Tipo de arquivo do MicroLab	85

O pacote de software MicroLab Agilent foi projetado para execução nos espectrômetros FTIR Agilent 4100 ExoScan, 4200 FlexScan, 4300 Handheld FTIR, série 4500, série 5500 e Cary 630. O software está disponível em dois pacotes diferentes:

Software MicroLab FTIR e Software MicroLab Mobile.

O pacote de software MicroLab FTIR é composto pelos quatro módulos a seguir:

- MicroLab PC - conecta e controla um instrumento
- MicroLab Quant - para desenvolvimento de métodos quantitativos
- MicroLab OQ - para qualificação operacional
- MicroLab Lite - visualização de dados e desenvolvimento de métodos

O pacote de software MicroLab Mobile vem com o seguinte:

- MicroLab Mobile
- Pacote de software MicroLab FTIR

NOTA

O pacote de software MicroLab Mobile é aplicável somente ao FTIR 4300 portátil e aos instrumentos que costumavam ser enviados com um PC portátil (PDA): Agilent 4100 ExoScan, 4200 FlexScan e Série 4500.

A Agilent não envia mais o PDA com esses instrumentos.

O pacote de software opcional MicroLab Pharma (número de peça G4984-64000) e o pacote de software MicroLab Pharma Upgrade (número de peça G4985-64000) fornecem controles técnicos incorporados que garantem a segurança dos dados, controlam o acesso e facilitam o cumprimento da norma 21 CFR, Parte 11 da FDA norte-americana, do Anexo 11 da UE e regulamentos nacionais equivalentes sobre registro eletrônico.

Neste documento, referência ao software Norma 21 CFR Parte 11, ambientes, recursos, etc. é qualquer ambiente/componente de integridade de dados que esteja usando o software MicroLab Pharma.

Os pacotes de software MicroLab fornecem funcionalidade e estrutura similares, com as seguintes exceções:

- Os métodos não podem ser editados no software MicroLab Mobile
- Os dados não podem ser coletados no software MicroLab Lite

Introdução

- Um instrumento deve ser conectado para que os softwares MicroLab PC e MicroLab Mobile sejam executados com o computador.

O software foi desenvolvido para facilitar o uso por principiantes e usuários avançados, com telas acionadas por menus e instruções que conduzem os usuários pelas análises.

O software incorpora um login de usuário; cada usuário possui "funções" definidas que são atribuídas pelo administrador. Essas funções permitem que os administradores limitem os métodos e as ações autorizadas para usuários de nível mais baixo.

Instrumentos compatíveis

Esta versão de software é adequada para uso com os instrumentos FTIR Agilent Cary 630, 4100 ExoScan, 4200 FlexScan, 4300 Handheld, 4500 Portable e 5500 Compact.

2 MicroLab Mobile

Conectar o PDA ao instrumento para comunicação via Bluetooth	9
Fazer logon pela primeira vez	11
Software IQ no FTIR 4300 portátil	12
Gerenciar usuários	13
Ícones comuns	15
Tela inicial	15
Tela Method	17

Para instalar ou fazer atualização do software, consulte as instruções para instalação de software da MicroLab que acompanham o software.

NOTA

O pacote de software MicroLab Mobile é aplicável somente ao FTIR 4300 portátil e aos instrumentos que costumavam ser enviados com o PDA: Agilent 4100 ExoScan, 4200 FlexScan e Série 4500.

Conectar o PDA ao instrumento para comunicação via Bluetooth

NOTA

Esta seção é aplicável somente aos instrumentos FTIR Agilent 4100 ExoScan, 4200 FlexScan e Série 4500.

- 1 Para configurar a conexão do Bluetooth entre o instrumento e o PDA, clique no ícone do Bluetooth na página inicial. Se o "modo avião" estiver habilitado, desabilite-o. Clique na barra do Bluetooth para ativar a comunicação via Bluetooth, caso ainda não esteja no modo "ON".
- 2 No menu, selecione **Bluetooth Settings**.
- 3 Na guia Devices, remova os dispositivos selecionando-os com a caneta Stylus e mantenha-a pressionada até que o menu apareça. Em seguida, clique em **Delete**.

- 4 Assim que os dispositivos forem removidos, clique em **Add a New Device**. Aguarde a lista de dispositivos habilitados para Bluetooth aparecer e selecione o dispositivo apropriado. Clique em **Next** na parte inferior da tela.
- 5 A conexão com os dispositivos portáteis exige uma senha universal. A senha solicitada é **7890**. Insira esse valor e selecione **Next**. O sistema então testará a conexão com o dispositivo FTIR portátil e adicionará o dispositivo.
- 6 Assim que o dispositivo for adicionado, selecione **Advanced** e verifique se a caixa de configuração da porta serial está marcada. A caixa fica desmarcada por padrão e deverá ser habilitada para que o dispositivo funcione adequadamente. Clique em **Save**.
 - A opção avançada aparece somente após a conexão. Caso desapareça e a guia de dispositivos retorne, selecione o dispositivo que você acabou de conectar clicando nele com a caneta Stylus. Você será levado à seção Advanced acima para configurar a comunicação da porta serial.
- 7 Assim que a porta serial for configurada, selecione a guia **COM Ports** na parte inferior da tela de configurações Bluetooth.
- 8 Selecione **New Outgoing Port**. Selecione o dispositivo recém-adicionado à configuração de comunicação via Bluetooth e clique em Next.
- 9 A porta COM padrão da versão 4.0 e posteriores do MicroLab Mobile é COM 1. Defina a porta COM como COM 1 e DESMARQUE a caixa **Secure Connection**. Após essa definição, selecione Finish na parte inferior da tela.
 - Se houver problemas de comunicação na porta COM selecionada, o PDA alertará você exibindo uma mensagem de erro. A porta COM padrão de comunicação pode ser alterada através do arquivo de comunicação do dispositivo portátil. Entre em contato com a equipe de suporte da Agilent se você precisar de instruções de instalação adicionais para alterar as configurações da porta COM.
- 10 Você será levado de volta para a tela de configuração inicial do Bluetooth. Clique em **OK** no canto superior direito e feche todos os programas abertos até retornar à tela inicial principal.
- 11 Selecione o menu Start. O MicroLab Mobile deverá aparecer como uma seleção.

Fazer login pela primeira vez

Fazer login no MicroLab Mobile pela primeira vez:

- 1 Os PCs portáteis e integrados enviados com os sistemas FTIR Agilent 4100 ExoScan e FTIR Agilent série 4500 são fornecidos com um atalho para o software MicroLab Mobile instalado no menu Iniciar. Para iniciar o software, clique em **Start** e então no ícone **MicroLab Mobile**. O software também pode ser iniciado em My Device\Program Files\MicroLab Mobile e clicando no ícone **MicroLabMobileEX.exe** ou selecionando Programs no menu Start e selecionando o ícone apropriado.

O FTIR 4300 Agilent portátil vem com o MicroLab Mobile pré-carregado no computador integrado. O MicroLab Mobile será iniciado automaticamente quando o FTIR 4300 portátil for ligado.
- 2 O software será executado e exibirá uma mensagem informando que uma sincronização inicial é necessária. Essa sincronização carregará os perfis criados no SCM (para software compatível com 21 CFR Parte 11) e todos os métodos da pasta Public Mobile Methods no PDA ou computador integrado. Veja a Página 43 para obter informações sobre como mover arquivos em um ambiente 21 CFR Parte 11.
- 3 Abra o MicroLab Lite no PC e faça login.
 - Para conexão com o PDA, verifique se o Windows Mobile Device Center está instalado no PC. Instale o aplicativo a partir do disco de instalação do software MicroLab.
- 4 Conecte o cabo de comunicação do PDA ou do computador integrado ao PC.
- 5 Se a sincronização não for acionada automaticamente, clique em **Advanced Features** e em **Synchronize**.
- 6 Clique em **New**.
- 7 Clique em **Get Connected Device Name**. O nome do dispositivo aparecerá no campo.
- 8 Clique em **Browse** e navegue até a pasta Public Mobile Results. Todos os dados coletados serão salvos nessa pasta.
- 9 Clique em **OK**.
- 10 Clique em **Sync** e em **Yes** na mensagem exibida para iniciar a sincronização.
- 11 Clique em **OK** assim que a sincronização for concluída.

- 12** No PDA ou computador integrado, execute novamente o MicroLab Mobile e faça login assim que a tela Security for exibida. Você usará as mesmas credenciais de login que foram criadas no MicroLab Lite ou no PC. O sistema exibirá a tela inicial em seguida.

Para ambientes 21 CFR Parte 11: Faça login usando um perfil que tenha privilégio no MicroLab Mobile. Insira o nome de usuário adequado ao perfil criado no SCM. Os campos Groups e Projects serão preenchidos automaticamente. Digite a senha e clique em **Login**.

NOTA

Tanto o nome de usuário quanto a senha diferenciam maiúsculas e minúsculas. No MicroLab Mobile 21 CFR Parte 11, deve-se usar apenas caracteres alfanuméricos. Não use caracteres especiais, como \$, @, e assim por diante. É recomendável fazer login no MicroLab Mobile ou no MicroLab Lite, mas não em ambos ao mesmo tempo e com o mesmo perfil, quando o dispositivo portátil estiver conectado ao PC.

Software IQ no FTIR 4300 portátil

NOTA

Esta seção se aplica somente ao FTIR 4300 Agilent portátil.

O MicroLab Mobile tem um recurso IQ/OQ integrado no computador do instrumento. Execute o teste de qualificação da instalação (IQ) do software para garantir que todos os arquivos relevantes estejam instalados.

Para executar o IQ/OQ:

- 1 Na tela de login, clique em **Exit** para fechar o MicroLab Mobile.
- 2 Clique em **OK** quando a caixa de diálogo de confirmação de saída for exibida.
- 3 A tela entrará no modo "Pass Through", onde haverá dois ícones. O ícone superior é o MicroLab Mobile e o ícone inferior representa o software IQ/OQ.
- 4 Selecione o ícone inferior para executar o **IQ/OQ**.
- 5 A tela de login será exibida. Digite seu nome de usuário e senha para entrar.
- 6 Clique em **Next** no canto inferior direito para executar a IQ – Teste de software.
- 7 A página de resultados será exibida. Certifique-se de que a qualificação da instalação seja PASS.
- 8 Clique no botão **Next** para gerar um relatório de IQ.
- 9 Clique em **Exit** para retornar ao modo "Pass Through".

Gerenciar usuários

A opção Advanced Features permite que o administrador gerencie usuários autorizados e altere os recursos de sistema MicroLab. O sistema é instalado com níveis múltiplos de usuários: Administrador, Desenvolvedor, Técnico, Assinante Eletrônico e Serviço. Usuários adicionais podem ser adicionados a qualquer momento. É recomendável configurar o sistema com os usuários desejados e senhas na execução inicial, caso vários operadores forem utilizar o sistema.

NOTA

Somente usuários com privilégios administrativos podem acessar o gerenciamento de usuários.

Esse recurso não é disponibilizado quando o ambiente 21 CFR Parte 11 está habilitado. Todas as funções de gerenciamento são executadas no software Spectroscopy Configuration Manager (SCM). Para mais informações, consulte o Guia de Usuário do SCM fornecido com o software.

Adicionar

Para adicionar usuários ao sistema:

- 1 Toque no botão **Advanced Features** na página inicial do MicroLab Mobile.
- 2 Clique em **User Management**.
- 3 Clique em **Add New User**.
- 4 Insira uma ID de usuário personalizada na caixa de texto.
- 5 Insira o nome completo do usuário.
- 6 Insira uma nova senha.
- 7 Identifique a função do novo usuário (Administrador, Serviço, Desenvolvedor e Técnico).
- 8 Clique em **Apply Changes**.
- 9 Uma janela aparecerá informando que você será desconectado do sistema. Será solicitado o login novamente após a aplicação das alterações.

NOTA

O sistema desconectará o usuário automaticamente. A nova ID de usuário aparecerá no menu suspenso User Name, na tela de login.

Definições das funções

Service: A função Service (serviço) fornece acesso a todos os parâmetros do instrumento dentro de um método, incluindo a tecnologia de amostragem para o método.

Admin: A função Admin (administração) é reservado à(s) pessoa(s) responsável(is) pela manutenção contínua e pelas alterações no software MicroLab, incluindo edição de métodos, criação de novos métodos, definição de métodos públicos, condução de verificação de instrumento e controle de acesso de usuários.

Developer: A função Developer (desenvolvedor) permite acesso à validação de desempenho do sistema, além de oferecer capacidade de editar e executar métodos. Contudo, essa função não tem acesso às funções de gerenciamento de usuário ou diagnósticos de sistema.

Technician: A função Technician (técnico) é para usuários-padrão do sistema. O técnico tem acesso apenas a execuções de métodos definidos pelo Admin como públicos. Além disso, o técnico não pode visualizar dados, conduzir validações de sistema ou modificar métodos.

E-Sign: Designação utilizada para permitir que os usuários assinem métodos e resultados eletronicamente em vários níveis de aquisição e visualização de dados. Esse nível geralmente é usado apenas na versão 21 CFR Parte 11 do software MicroLab.

NOTA

Somente as funções Administrador e Desenvolvedor têm acesso aos recursos avançados.

Tela User Management

Add New User: Adiciona usuários ao sistema. Deve ser atribuído nome de usuário, senha e nível de acesso. O nome completo também é requerido.

Delete User: Exclui um perfil de usuário permanentemente do sistema MicroLab Mobile.

Reset Password: Permite que o administrador mude a senha do usuário atualmente selecionado.

Reset Security: Exclui todos os usuários personalizados e redefine os três usuários predefinidos (Service, Admin e User). Essa opção também redefinirá a segurança, caso ela tenha sido desativada com a opção Disable Security.

Disable Security: Remove todos os recursos de segurança. Quando a segurança é desabilitada, nenhuma senha é requerida e todos os usuários passam a ter privilégios administrativos. A segurança pode ser restaurada ao tocar no botão Reset Security e ao inserir, em seguida, as informações da conta Admin inicial.

Ícones comuns

Estes ícones aparecem por todo o software:

Home: Faz o software retornar à tela inicial principal.

Menu: Exibe opções de menu.

Next: Faz o software avançar para a próxima etapa no processo de coleta de dados.

Tela inicial

A tela inicial é a primeira tela exibida no próximo logon do MicroLab. Na tela inicial, é possível iniciar um método, medir uma amostra de referência, abrir a caixa de diálogo Method Selection, abrir a caixa de diálogo Previous Results ou abrir a caixa de diálogo Advanced Features. O módulo ou interface de amostragem deve ser alterado na tela inicial. Todos os procedimentos começam e terminam na tela inicial.

Status

No canto superior direito da tela, um pequeno círculo aparece. Esse círculo exibe uma cor que indica o status do instrumento conectado ao software MicroLab. O círculo ficará verde quando o sistema estiver em operação dentro dos parâmetros definidos em fábrica. Uma luz vermelha ou amarela indica um parâmetro fora de especificação. Quando uma condição de luz vermelha ou amarela não puder ser resolvida, entre em contato com a Agilent para obter assistência. Todos os parâmetros usados para determinar a prontidão do sistema estão listados em Advanced Features > Diagnostics. Os parâmetros que estiverem fora dos limites serão listados em vermelho na tela Diagnostics.

Logo acima da luz de prontidão, há um indicador de bateria. O indicador de bateria mostra o nível de carga restante nas baterias do instrumento. O nível de carga das baterias do PC portátil não é indicado no software MicroLab.

Iniciar

O botão Start inicia uma medição de amostra usando o método atualmente selecionado. O método atualmente selecionado é exibido no canto superior esquerdo da tela inicial.

Método

O botão Method abre a caixa de diálogo Method Selection. Usuários sem privilégios administrativos podem selecionar somente os métodos designados como Públicos pelo administrador. Consulte as instruções de seleção de método abaixo.

Método de referência

O botão Reference Method habilita a coleta de uma amostra de referência para um método de componente. Alguns métodos de componentes apresentam concentrações na forma de aumento ou diminuição percentual. Para esses cálculos, uma referência da amostra dentro das especificações é necessária para calcular esses valores iniciais. Além disso, o método de referência salva o espectro do material dentro da especificação (novo) para comparação visual posterior.

Log Off (desconectar)

O botão Log Off desconecta o usuário atual e faz o software MicroLab Mobile voltar para a tela de logon. Lá, o botão Exit pode ser tocado para fechar o software.

Bloquear

Disponível somente em ambientes 21 CFR Parte 11. Use-o para bloquear o software e controlar o acesso quando deixá-lo sem supervisão. Consulte a seção MicroLab 21 CFR Parte 11 na Página 57 para mais informações.

Menu

O menu contém:

- Previous Results (resultados anteriores)
- Advanced Features (recursos avançados)

Previous Results (resultados anteriores)

Permite a visualização de dados coletados anteriormente. Somente as funções Service, Admin e Developer têm acesso aos resultados anteriores.

Norma 21 CFR Parte 11

Com o arquivo Results aberto, clique no botão 21 CFR Parte 11 para exibir uma trilha de auditoria, com uma lista de ações realizadas durante a criação ou edição de um modelo.

Consulte a seção MicroLab 21 CFR Parte 11 na Página 57 para mais informações sobre esse recurso.

Advanced Features (recursos avançados)

A tela Advanced Features fornece acesso a Diagnósticos, Verificação do Sistema, Gerenciamento de Usuários e Gerenciamento de Biblioteca para as funções Administrador, Serviço e Desenvolvedor.

A verificação do sistema inclui os seguintes testes no instrumento: Desempenho (sinal/ruído), teste de estabilidade, verificação de calibração de frequência do laser e verificação de resolução espectral. Consulte o manual de operação apropriado do instrumento para obter mais informações sobre Diagnóstico e Verificação do Sistema.

Interface de amostra

A tela Advanced Features também permite que o usuário acesse a seleção da Interface de Amostragem dos sistemas FTIR 4100 ExoScan. Isso é importante para métodos que estejam vinculados diretamente à interface de amostragem, bem como para vincular especificações de desempenho ao dispositivo de amostragem. A interface de amostragem apropriada deve ser selecionada em ambos os casos, para que opere adequadamente.

Tela Method

Os métodos definem parâmetros de coleta do instrumento e análise de dados no software MicroLab. Os métodos podem ser definidos somente para coletar dados, para coletar e comparar os dados coletados com uma biblioteca predefinida ou coletar dados e realizar uma análise quantitativa nesses dados ou análise de pico. Os três tipos de métodos predefinidos são (1) coleta de dados, (2) pesquisas qualitativas (biblioteca) e (3) métodos componentes (análise quantitativa ou de pico) para os espectrômetros Agilent 4500t/5500t e Cary 630 FTIR. Para questões

e informações adicionais sobre especificações para métodos predefinidos, entre em contato com a Agilent.

O MicroLab Mobile permite a seleção de métodos predefinidos apenas. A edição de métodos deve ser conduzida no software MicroLab PC ou MicroLab Lite de outro computador. Para que sejam visualizados na caixa de diálogo Method, os métodos desenvolvidos com o PC e as versões Lite do software devem ser transferidos para o seguinte diretório do controlador portátil ou integrado: @\Program Files\MicroLab Mobile\Methods.

No ambiente 21 CFR Parte 11, a transferência de método ocorre durante a sincronização.

Lista Methods

Exibe uma lista de métodos criados para o software de aplicação MicroLab PC. Para mover a lista de métodos para cima e para baixo, simplesmente toque a caneta stylus na lista e arraste a lista pela tela.

NOTA

O administrador de sistema limita a acessibilidade de métodos. O administrador do sistema deve marcar as caixas de seleção no lado esquerdo da tela; isso habilita a operação de método para todos os usuários de nível técnico. Para usuários com a função Técnico, essa tela exibirá somente aqueles métodos que foram habilitados anteriormente pelo administrador do sistema.

Ativar

O botão Activate seleciona o método destacado e fecha a tela. O software retorna à tela inicial. Verifique se o método correto está ativado. Se o método incorreto aparecer, retorne à tela Methods e selecione um outro método. Para isso, toque no botão Select Methods, destaque o método desejado e toque em Activate.

Editar

A edição de método não está disponível no software MicroLab Mobile. Para editar um método, é necessário usar o software MicroLab Lite instalado em um outro computador. Assim que o método for estabelecido, ele poderá ser transferido para o PC portátil ou integrado para uso com o MicroLab Mobile.

NOTA

Para instrumentos com PDA, o software MicroLab Lite deve ser instalado em um computador com Windows Mobile Device Center para transferir facilmente métodos e dados. O Windows Mobile Device Center pode ser instalado a partir do disco de instalação do software MicroLab.

3

MicroLab PC

Tela inicial	19
Métodos	21
Transferência de modelo quantitativo MicroLab do MicroLab Expert para o MicroLab PC	39
Usar verificação de alinhamento pré-amostragem	40
Transferir métodos editados para o MicroLab Mobile	42
Verificação do sistema	44

Tela inicial

A tela inicial é a primeira tela exibida no próximo logon do MicroLab PC. Todos os procedimentos começam e terminam na tela inicial.

As seguintes opções podem ser selecionadas a partir da tela inicial:

- Iniciar.
- Métodos.
- Modelos de referência.
- Logoff (desconectar).
- Previous Results (resultados anteriores).
- Advanced Features (recursos avançados).

Status

Na parte superior esquerda da tela, o botão Status deverá ficar verde e READY será exibido. Se o campo estiver amarelo ou vermelho, clique no botão Diagnostics na opção Advanced Features para identificar o problema. Quando uma condição de luz vermelha ou amarela não puder ser resolvida, entre em contato com a Agilent para obter assistência.

NOTA

Para certas combinações de interface/instrumento espera-se que o status seja exibido como amarelo durante a coleta de dados (isto é especialmente verdadeiro para as interfaces de reflexão externa).

Iniciar

O botão Iniciar inicia uma medição de amostra usando o método ativado. O método ativado é mostrado no canto superior direito da tela inicial.

Métodos

O botão Methods abre a caixa de diálogo Method Selection. Usuários sem privilégios administrativos podem ativar somente os métodos designados como Públicos pelo administrador.

Consulte a [página Métodos](#) para mais informações sobre Métodos.

Métodos de referência

O botão Reference Template permite a criação de novos modelos de métodos de referência, a edição dos modelos de métodos de referência existentes e a ativação de um modelo de método de referência escolhido.

Desconectar & Sair

A tela Logoff permite que diferentes usuários se conectem ao sistema e se desconectem dele. O botão Exit fecha o software MicroLab PC.

Bloquear

Disponível somente em ambientes 21 CFR Parte 11. Use-o para bloquear o software e controlar o acesso quando deixá-lo sem supervisão. Consulte a seção MicroLab 21 CFR Parte 11 na página 57 para mais informações.

Previous Results (resultados anteriores)

Após ter realizado a análise, é possível acessar os resultados anteriores na tela inicial. Após clicar em Previous Results, uma tela aparecerá listando as amostras que foram executadas. As amostras serão identificadas com base nas convenções de nome escolhidas.

Advanced Features (recursos avançados)

A partir da tela de Recursos avançados, as seguintes opções podem ser selecionadas:

- Verificação do sistema.

MicroLab PC

- Diagnóstico.
- Endereços MAC.
- Gerenciamento de bibliotecas.
- Gerenciamento de usuários.
- Alterar senha.

Consulte a [página 34](#) para mais informações sobre Recursos avançados.

Métodos

Página principal

Lista Methods: Exibe uma lista de métodos criados para o software de aplicação MicroLab PC. Quaisquer métodos aqui presentes também aparecerão no MicroLab Lite.

Delete: Exclui o método atualmente selecionado; acessível somente por usuários com direitos administrativos. Não disponível em ambientes 21 CFR Parte 11.

Import: Disponível somente em ambientes 21 CFR Parte 11. Importa métodos CFR e não CFR. Os métodos CFR manterão a trilha de auditoria antiga, embora toda a sinalização seja removida. Assim que importados, esses métodos poderão ser usados no ambiente CFR. Os métodos não CFR importados serão somente para leitura.

New: Cria um novo método; acessível somente por usuários com direitos administrativos.

Print: Esta característica do sistema permite ao usuário imprimir uma cópia do instrumental do método selecionado e detalhes do método.

Edit: Abre o método atualmente selecionado para edição; acessível somente por usuários com direitos administrativos.

Activate: Seleciona o método atualmente selecionado como o método a ser usado. Para coletar dados usando um método particular, ele deverá ser ativado primeiro.

NOTA

Somente os métodos verificados na coluna da caixa de seleção Public poderão ser visualizados ou ativados por usuários que não são de nível administrador.

Criar um Novo Método/Editar um Método Existente

Página de informações

A página de Informações é usada para definir informações básicas relacionadas ao método escolhido. Esta página é o padrão de um método simples.

Method Name: Esse campo especifica o nome do método; o nome do método será exibido na lista de métodos. O nome do método não pode ser editado a partir da página de informações. Ela é definida no momento do primeiro **Save** de um novo método, ou ao escolher **Save As...** com um método existente que foi editado.

Developer: Esse campo especifica o usuário que desenvolveu o método.

Comment: Esse campo é disponibilizado para que o usuário insira quaisquer informações especiais relacionadas ao método.

NOTA

O método padrão que é fornecido com o software MicroLab é destinado apenas como um local de instalação. A Agilent não recomenda o uso deste método.

Type page

A página Tipo é comum a todos os tipos de métodos e é usada para especificar os parâmetros de verificação de coleta de dados anteriores.

Method Type: Três tipos de métodos estão disponíveis no software MicroLab PC:

- **Components:** Métodos de previsão quantitativa ou análise espectral. Um espectro infravermelho é coletado e depois é feita uma previsão quantitativa pré-definida a partir desses dados ou análise do tipo altura/área de pico. Vários componentes podem ser definidos, cada um com sua própria calibração quantitativa em um único método. Também tem funções para medir altura/área/centro de gravidade/ruído de pico.
- **Data Collect Only:** Coletar e exibir somente o espectro infravermelho. Diversos componentes podem ser definidos, cada um com sua própria calibração quantitativa.
- **Qualitative Search:** Coletar um espectro infravermelho e pesquisá-lo contra uma biblioteca espectral pré-definida ou várias bibliotecas. Os resultados deste método serão os melhores resultados para a biblioteca espectral, com base no algoritmo de busca escolhido.

Check for Clean Crystal Prior to Collecting Background: Essa opção habilita ou desabilita as verificações de sistema quanto à limpeza do cristal ATR ou da célula de amostra antes de coletar um background. Esta opção é recomendada apenas para as interfaces ATR.

- **Clean Scans:** Define o número de varreduras limpas realizadas.
- **Threshold:** Define o limite superior de absorção para a varredura limpa.

NOTA

O limiar de varredura limpa pode exigir ajustes ao longo do tempo com base nos requisitos experimentais.

Background: Existem duas opções para a coleta do background:

- **Collect new Background on every Sample:** Esta requer a coleta de um novo espectro de background para cada amostra. Esta é a opção recomendada para a melhor qualidade de dados, pois proporciona a melhor correção para o vapor de água, dióxido de carbono e outras variações atmosféricas.
- **Background Valid time limit:** Se esta opção for selecionada, o background é coletado em intervalos de tempo, e amostras poderão ser coletadas na sequência, sem medir um espectro de background entre amostras. O tempo limite pode ser ajustado em minutos, horas e dias.

NOTA

Os limites de tempo válidos podem ser estabelecidos com base nos requisitos de aplicação e nas mudanças esperadas nas condições experimentais. A coleta frequente e oportuna de espectros de fundo é vital para a qualidade dos dados.

Y-Axis Units: Esta função opcional especifica a escala do eixo Y: Absorbância, Transmitância ou Refletância.

Clamp max. Y-value Essa opção exibirá valores de absorbância com base no valor especificado como valor clamp max y-value. Essa opção é útil quando bandas que não são usadas analiticamente possam estar fora de escala. Se esse recurso for selecionado, as bandas fora de escala aparecerão com “topo plano” e não afetarão desfavoravelmente a escala exibida. Esta opção está disponível somente quando a Absorbância está selecionada como a escala do eixo Y (Y-Axis Units).

Minimum Y Threshold: Ajuste o limite mínimo no eixo Y. Esta opção só está disponível quando a Absorbância é selecionada como Unidades do eixo Y e é usado para avisar de sinal insuficiente. Quando ativado, se o sinal detectado estiver abaixo do valor especificado no início da coleta de dados, aparecerá um alerta para sugerir o reposicionamento da amostra antes de continuar a varredura. Esta função é realizada apenas na varredura espectral inicial.

NOTA

A fixação do eixo Y é tipicamente usada na interface de transmissão para limitar a maior absorção registrada para permitir uma melhor modelagem de picos em escala. Normalmente, é usado um valor de 2. O valor máximo padrão é 5 Abs equivalentes a 0,00001T (0,001%T)

Show Pre-Sample Alignment Check: Esta opção permite e inicia a verificação de alinhamento pré-amostragem. Consulte a Página 40 para mais informações sobre a verificação de alinhamento pré-amostragem.

Show Sampling Continuity Check: Esta opção permite ativar ou desativar a verificação de continuidade de amostragem. Esta verificação está geralmente ativada em dispositivos portáteis para garantir que a amostra seja mantida no foco da tecnologia de amostragem durante a medição.

NOTA

As verificações **Mostrar Alinhamento de Pré-Amostragem** e **Mostrar Continuidade de Amostragem** destinam-se apenas a interfaces/módulos de Reflexão Externa. Estas verificações não são aplicáveis às interfaces ATR.

Habilitar Vista Clássica: Esta opção ativa ou desativa a vista clássica para a janela de gráficos. Somente disponível quando o método definido for Apenas de Coleta de Dados.

Consulte a página 74 para obter mais informações sobre as opções da janela de gráficos Apenas Coleta de Dados.

Página de instrumento

A página de instrumentos é comum a todos os tipos de métodos e é onde são especificadas as configurações dos instrumentos usados para processar os dados coletados.

Spectral Range (cm⁻¹): Especifica os limites superiores e inferiores da faixa espectral em números de onda. Selecione **Full** para ativar a faixa padrão do detector para aquisição de dados. A faixa pode variar de acordo com a série de instrumentos e pode ser aumentada ou diminuída.

Background Scan: Especifica o número de medidas que serão realizadas na medição do background. Medidas adicionais produzirão uma relação sinal-ruído maior; contudo, o tempo de medição aumentará de acordo com o número de medidas.

Sample Scans: Especifica o número de medidas que serão realizadas na medição de amostras. Assim como com a medição do background, exames adicionais aumentam a relação sinal-ruído, mas também aumentam o tempo da análise. As medidas da amostra devem ser iguais ou menores do que o número de medidas do background. Normalmente, o background e a amostra são coletados com o mesmo número de medidas.

Resolution (cm^{-1}): Especifica a resolução espectral. Para amostras de fase condensada, a maioria das medições pode ser feita com uma resolução de 4 cm^{-1} .

NOTA

A seleção da resolução apropriada depende dos requisitos da aplicação. Uma resolução mais alta (menor número de onda, isto é, 2 cm^{-1}) resultará em uma taxa de varredura um pouco mais lenta, com um aumento na densidade de dados e número de pontos. Um espectro típico coletado a 4 cm^{-1} sem qualquer preenchimento zero resulta em um arquivo de cerca de 32 Kb.

Zero Fill Factor: Especifica Fator de Preenchimento Zero usado para a transformação de Fourier do interferograma em um espectro de energia.

Apodization: Especifica a função de apodização usada para a transformação de Fourier do interferograma em um espectro de energia: Nenhuma (Boxcar), triangular ou Happ-Genzel.

Phase Correct: O método padrão Mertz é aplicado para corrigir as diferenças de fase.

Sampling Technology: Seleciona a tecnologia de amostragem: Célula de transmitância, Reflectância, ATR, Célula a gás ou outra. Este é um campo opcional. O método pode não ser ativado se a tecnologia de amostragem selecionada não corresponder à interface real.

Set Method Gain: Esta opção é usada para salvar um valor de ganho no método para análise de rotina. Isto é normalmente usado para configurações específicas de instrumentos em combinação com uma interface específica, e quando for implementado um valor máximo de fundo apropriado.

Normalize Quantitative results to Pathlengths (μm): Esta opção é aplicável apenas à tecnologia de amostragem de células de transmissão e células de gás.

Sampling Subtype: Selecione o subtipo de amostragem de acordo com a tecnologia de amostragem escolhida.

- **Transmission Cell:** Tumbler, DialPath, ou Módulo de transmitância 630.
- **Reflectance:** Difusa, especular ou de ângulo rasante.
- **ATR:** 1-Bounce, 3-Bounce, 5-Bounce, 9-Bounce, ZnSe 5-Bounce, Ge 1-Bounce, Diamond 1-Bounce, ou ZnSe 1-Bounce.

Detector Type: Seleciona o tipo de detector do instrumento.

Store GPS Data: Esta funcionalidade se aplica somente ao FTIR 4300 Agilent portátil. Esta opção permite que os dados do GPS (Sistema de Posicionamento Global) sejam armazenados ao coletar espectros. Os dados do GPS mostrarão a longitude e latitude do local onde o espectro foi gravado.

Require GPS Data: Esta funcionalidade se aplica somente ao FTIR 4300 Agilent portátil. Essa opção ativa ou desativa os dados do GPS como informações obrigatórias sempre que espectros forem coletados. Caso o instrumento não suporte o fornecimento de dados GPS, esta opção deve ser desativada. Caso contrário, a coleta de dados será recusada. Não utilize esta opção quando estiver no interior ou em áreas sem cobertura de satélite.

Página Bibliotecas

A página Bibliotecas só está disponível quando o tipo de método de Busca qualitativa é selecionado. A primeira coluna da lista exibida descreve o nome da Biblioteca e a segunda coluna indica se a Biblioteca contém espectros de ATR. As bibliotecas podem ser adicionadas ou removidas desta página.

Para mais informações sobre Bibliotecas, consulte a seção Gerenciamento de Bibliotecas na página 34.

A Página Busca

A página de só está disponível quando o tipo de método de Busca qualitativa é selecionado. Esta página é usada para configurar como o método escolhido irá buscar através das bibliotecas selecionadas.

Search Algorithm: O menu suspenso do algoritmo de busca oferece as seguintes opções para manipular a função de busca:

- Euclidiano.
- Valor absoluto.
- Valor absoluto derivado.
- Quadrados mínimos.
- Quadrados mínimos derivados.
- Correlação.
- Correlação derivada.
- Similaridade.
- Similaridade de derivados.
- Correlação estendida.

Derivative algorithm gap: Este campo só está disponível quando um algoritmo de busca do tipo derivativo é selecionado. O campo é usado para selecionar o tamanho do intervalo sob o qual o derivado é aplicado (os intervalos entre os pontos usados para o cálculo). Um valor de '1' é equivalente à aplicação do derivativo padrão Norris Gap. O valor pode ser superior a 1 e dependerá da interface e das características espectrais para um efeito ótimo.

Minimum high quality: Este campo é usado para designar um valor mínimo entre 0-100 (%) para a qualidade dos acessos à biblioteca que serão exibidos. Qualquer resultado de valor de qualidade (índice x 100) que ficar abaixo do valor especificado será omitido nos resultados da busca.

Maximum Hits Displayed: Este campo é usado para limitar o tamanho da lista de resultados mínimos de hit da biblioteca de alta qualidade para a quantidade especificada. Por exemplo, ao escolher 12, serão exibidos os 12 melhores resultados do índice que ultrapassaram a qualidade mínima de ocorrências.

Quality Critical Threshold: Este campo estabelece o limite superior para o recurso de codificação por cores dentro dos resultados da pesquisa de qualidade. Se a opção **Quality Marginal Threshold** não tiver sido escolhida, qualquer resultado de busca abaixo do limiar crítico de qualidade será exibido em vermelho (valor deve estar entre 0 e 1, valores decimais aceitos). Este parâmetro está ligado ao valor do índice. Se não for definido um Limiar crítico de qualidade, não será aplicado um código de cores.

Quality Marginal Threshold: Este campo opcional estabelece o limite inferior para os resultados marginais da busca. Qualquer resultado que fique entre o limite de qualidade marginal e crítico será exibido em amarelo (o valor deve estar entre 0 e 1, valores decimais aceitos).

NOTA

A direção de qualidade limite e a classificação de cores são ajustadas automaticamente para se adequar ao algoritmo selecionado.

Display Metadata: Selecione esta caixa de seleção para exibir os metadados correspondentes à amostra escolhida. Isto inclui informações tais como a classificação das amostras, descrição e estado de risco. Este recurso não está disponível em ambientes 21 CFR Parte 11.

Auto Residual Search: A ativação desta caixa de seleção aplicará automaticamente uma função de busca residual aos espectros coletados.

- Quando "Top Hit" é selecionado, a função Auto Residual subtrairá a ocorrência inicial da biblioteca superior dos espectros, pesquisará novamente as bibliotecas escolhidas e exibirá a ocorrência residual superior resultante.

NOTA

Quando "Top Hit" é selecionado, somente a ocorrência residual resultante será exibido (a ocorrência superior real não será exibida).

- Quando "Espectro definido" é selecionado, a função Residual auto subtrairá os espectros definidos pelo usuário dos espectros coletados e então pesquisará a biblioteca escolhida e exibirá a ocorrência residual definida no topo.

NOTA

O arquivo Defined Spectrum deve ser um Arquivo de Resultados Agilent em formato *.a2r e escolhido a partir da pasta de resultados.

Excluir Regiões de Busca (cm⁻¹): Este campo opcional é usado para adicionar uma região de exclusão de busca aos espectros. Isto removerá dos espectros regiões de ondulação indesejadas, (como a das absorções intrínsecas de cristal) para permitir resultados mais limpos. Também pode ser usado para focalizar a busca, por exemplo, apenas para a região das impressões digitais.

Página Components (métodos de componentes)

A página Components lista os componentes definidos para esse método. Os componentes são calibrações quantitativas para constituintes de uma amostra. Diversos componentes podem ser definidos para cada método.

Adicionar: Este botão adiciona um novo componente de usuário ao método. Esse botão exibirá a caixa de diálogo Add Component (veja abaixo).

Remove: Esse botão remove o componente selecionado do método.

Edit: Esse botão permite a edição dos parâmetros usados na calibração do componente selecionado. Este botão exibirá a caixa de diálogo Add Component (Editar Componente) (ver abaixo).

Caixa de diálogo Add Component: A caixa de diálogo Add Component permite adicionar ou editar componentes. Esta caixa de diálogo fornece configurações para a calibração do componente, as configurações de exibição e os limites para esse componente. Os limites do componente habilitam exibições codificadas por cor dos resultados dos componentes.

Component Name: Especifica o nome do componente que será exibido tanto na lista de componentes quanto nos resultados. Por questões de clareza, o nome incluirá as unidades do resultado.

Calculation Type: Este campo especifica o tipo de cálculo a ser usado. Os tipos de cálculo incluem univariável (Altura de Banda, Altura de Banda com Linha de Base Simples, Altura de Banda com Linha de Base Dupla, Área de Banda, Área de Banda com Linha de Base Simples, Área de Banda com Linha de Base Dupla), cálculo de ruído (Ruído RMS), posição de banda (Posição de Banda (Centro de Gravidade)) e multivariável (Modelo Quant). O tipo de cálculo Modelo Quant também é usado com calibrações univariáveis e multivariáveis do MicroLab Quant.

NOTA

O ajuste linear de uma calibração univariável usando altura da banda, área de banda ou razão de banda deve ser conduzido em um software de terceiros (como o Microsoft Excel). O software MicroLab Quant pode ser usado para criar calibrações univariáveis completas sem o uso de software de terceiros.

NOTA

Calibrações multivariáveis são realizadas no software Thermo Galactic PLS/IQ Plus e exportadas para um formato de texto que pode ser lido pelo software MicroLab PC ou pelo Eigenvector Solo Plus Model Exporter no formato XML ou no MicroLab Expert (com o módulo Quant). Veja as instruções abaixo para obter detalhes sobre como exportar calibrações.

Peak Start, Peak Stop:

- Para cálculos univariáveis e posição de bandas, esses definem a banda a ser usada.
- Para um cálculo de altura da banda, o maior valor entre essa região será selecionado.
- Para uma área de banda, esses são os limites do cálculo de área.
- Para um centro de gravidade, esses são os limites entre os quais o centro de gravidade será calculado.
- Para uma multivariável (Quant), esse será o limite do intervalo de exibição.

Baseline 1 Start, Baseline 1 Stop: Esses pontos definem a área a partir da qual o primeiro ponto de uma linha de base será calculado. Para uma linha de base de ponto único, somente Baseline 1 será usado. A linha de base será tomada como o valor mínimo dentro desse intervalo.

Baseline 2 Start, Baseline 2 Stop: Esses pontos definem a área a partir da qual o segundo ponto de uma linha de base será calculado. A linha de base será tomada como o valor mínimo dentro desse intervalo.

Constituent: Esse recurso é aplicável apenas quando "Quant Model" é selecionado como o tipo de cálculo (Calculation Type) e se aplica somente aos modelos Quant do MicroLab Agilent Expert (*.a2q). Os constituintes usados no modelo multivariável aparecerão no menu suspenso.

NOTA

O uso de arquivos Agilent MicroLab Expert Quant Models (*.a2q) requer a instalação do MicroLab Expert com funcionalidade Quant no mesmo dispositivo.

Scaling: Essa seção define uma calibração linear a ser aplicada aos dados. Ela pode ser usada com quaisquer definições de banda (Altura da Banda, Área da Banda, etc.) ou para modificar o valor gerado por um método (Quant) multivariável. Normalmente, ela é utilizada para alterar o valor de uma escala apropriada.

- **Scale (x value):** A escala é inclinação de uma equação de calibração linear. Na equação para um ajuste linear, $y=mx+b$, a escala é "m".
- **Offset:** O Offset é o desvio do eixo Y para uma calibração linear. Na equação para um ajuste linear, $y=mx+b$, o desvio é "b".

- **Decimal Digits to Report:** Define o número de casas decimais que serão relatados na resposta.

Thresholds: Essa seção define limites que o software MicroLab PC usará para codificar por cor os resultados e os relatórios exibidos. Os valores que estiverem entre Marginal Superior e Crítico Superior, ou os limiares Marginal Inferior e Crítico Inferior, serão exibidos em amarelo. Os valores acima dos limiares Marginal Superior ou abaixo de Marginal Inferior serão exibidos em vermelho. Todos os outros valores serão exibidos em verde.

Calc Value As: Os valores podem ser calculados a partir das seguintes opções:

- Valor real.
- Porcentagem inferior.
- Porcentagem superior.

NOTA

As opções Porcentagem Superior e Porcentagem Inferior requerem um valor de referência Crítico Superior. O valor de referência é, com efeito, o valor de referência de 100%. O valor calculado será informado como um % do valor de referência.

Página Component Reporting

Component Reporting permite que o desenvolvedor do método determine quando um componente é mostrado tanto na tela Results quanto no relatório. Somente determinados componentes que foram selecionados na coluna Display serão exibidos na tela e no relatório.

Caixa de diálogo Edit Component Reporting Condition

Adicionalmente, o desenvolvedor do método pode optar por relatar um componente somente mediante certas condições. Por exemplo, o desenvolvedor pode especificar que um componente será relatado somente quando seu valor estiver dentro do intervalo para o qual foi calibrado. Isso permite que calibrações em diversos intervalos (alto, médio e baixo) estejam presentes em um método. Se especificado, o software relatará somente a concentração da calibração que estiver dentro do intervalo. Para métodos multivariáveis, quaisquer medições estatísticas de método (distância de Mahalanobis, teste F, etc.) podem ser usadas para determinar se um valor deve ser relatado.

Report As: Esta seção permite que o desenvolvedor escolha se o componente será relatado como valor calculado ou como cadeia de texto baseada nesse valor. Usado com a lógica booleana na configuração de condição, isso permite que resultados baseados em texto, como "fora de especificação" ou "bom", sejam exibidos, em vez de resultados numéricos.

Component/Diagnostic: Essa lista suspensa mostra todas as informações de diagnóstico que podem ser usadas para fazer uma escolha lógica de exibição.

Test State: Permite especificar o estado do diagnóstico. Ele é usado com "Value" abaixo.

Value: O valor do diagnóstico que é usado com o estado do teste para determinar se o componente será exibido.

Exemplo 1: Para um método univariável simples, dois componentes podem ser especificados para um único analito; um componente teria uma calibração válida em um intervalo baixo e o outro teria uma calibração válida em um intervalo alto. O desenvolvedor pode preferir que somente o intervalo apropriado seja relatado. Neste exemplo, o componente será denominado "área", e o intervalo alto será válido de 1000 a 5000 ppm. Por exemplo, Área será selecionado para o Componente/diagnóstico. Primeiramente, o Estado de Teste de ">=" será selecionado, juntamente com um valor de 1000. Assim que for adicionado, o qualificador "And" será selecionado. Em seguida, o Estado de Teste de ">=" será selecionado com um valor de 5000. Nesse exemplo, o componente de área agora será relatado se o valor estiver entre 1000 e 5000.

Exemplo 2: Para um método multivariável (PLS), podem ser especificados diversos componentes. Cada componente pode ter uma calibração multivariável diferente. Talvez deseje-se apenas o componente que possui uma definição de calibração que está mais intimamente relacionada à amostra desconhecida. Nesse caso, o desenvolvedor deve selecionar como componente/diagnóstico a MDistance (distância de Mahalanobis), o estado de teste como $\leq$ e o valor como 3. Seriam reportados valores com uma distância de Mahalanobis inferior a três, o que indica que a amostra está estatisticamente dentro do grupo de definição de calibração.

Página Custom Fields

Os campos personalizados são campos definidos pelo administrador que aparecem no início de um método escolhido. O usuário do método então completa o campo. Os campos podem ser uma data, um texto ou um número e só podem ser adicionados ou excluídos pelo administrador. Esses campos ficarão visíveis na tela Results e no relatório. Muitos campos opcionais podem ser anexados a um método, dependendo das exigências específicas do usuário.

Página Recommend

As recomendações serão exibidas na tela Results após a análise da amostra. As mensagens são um recurso exclusivo; elas permitem que o usuário personalize os resultados de acordo com seus parâmetros e necessidades específicos.

Página Reports

A página de relatórios é comum a todos os tipos de métodos e é usada para atribuir um Modelo de Relatório Disponível ao método atual, ou remover um Modelo de Relatório Seleccionado do método atual. Quando disponíveis, vários modelos de relatórios podem ser adicionados ou removidos simultaneamente.

Available Report Templates: São fornecidos modelos de relatórios para tipos específicos de métodos.

- Data Collect Only pode usar o modelo de relatório Spectrum
- Os métodos de componentes podem usar os modelos Espectro ou Relatório de Componentes.
- Métodos de busca qualitativa podem usar os modelos Relatório de Óleo, Espectro, Espectro Sobreposto, Espectro Empilhado, Espectro Ampliado Sobreposto e Espectro Ampliado Empilhado.

Também é possível criar seus próprios modelos de relatórios personalizados. Para mais informações sobre modelos de relatórios, consulte a [Seção 8 na página 80](#).

- **Results Folder:** Especifica o local dentro de uma das seguintes pastas, onde os resultados serão salvos.
- Para todos os sistemas, a começar pela Versão 5.3, todos os arquivos de chamadas interativas e definíveis pelo usuário são mantidos em C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab ou C:\Users\Public\Public Documents\Agilent\MicroLab

Se o campo for deixado em branco, os arquivos serão salvos diretamente na pasta Results (Resultados). C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Results.

Para 21 CFR parte 11, quando o campo é deixado em branco, a pasta de resultados padrão é VAIMDB_Public(000)\Public Results.

Uma pasta diferente pode ser informada para salvar os arquivos dentro do diretório Results. Se o método for transferido para um sistema com o MicroLab Mobile, a pasta será automaticamente atualizada para a pasta apropriada no dispositivo móvel. Também há uma opção para um recurso de relatório automático. Marque essa caixa para gerar automaticamente quaisquer relatórios associados ao método em questão, quando uma amostra é coletada através dele.

Adicionar/remover modelos de relatórios para/do método atual

Os relatórios listados na coluna "Modelos de Relatórios Disponíveis" não são ativados até que sejam adicionados ao método. Para adicionar um relatório ao método atual:

- 1 Destaque o relatório/relatórios desejados da coluna Modelos de Relatórios Disponíveis.

2 Clique em **Add (Adicionar)** ->.

Ao completar o método, qualquer relatório que tenha sido adicionado à coluna "Available Report Templates" (Modelos de Relatórios Disponíveis) estará disponível para a seleção do usuário. Se a opção **Auto-Report All Selected Reports** (Reportar automaticamente todos os relatórios selecionados) for selecionada, todos os relatórios listados na coluna Modelos de Relatórios Disponíveis serão automaticamente impressos.

Para remover um relatório do método atual:

- 1 Destaque o relatório/relatórios desejados na coluna "Modelos de Relatórios Selecionados".
- 2 Clique em **<- Remove (Remover)**.

Os relatórios removidos aparecerão agora de volta na coluna Modelos de Relatórios Disponíveis.

Results Folder: Especifica o caminho do arquivo onde os relatórios selecionados serão salvos.

Results Naming: O MicroLab possui um recurso de salvamento automático que cria números de identificação únicos, que são exclusivos para cada análise. Todos os arquivos são disponibilizados para todos os usuários autorizados e podem ser visualizados por meio do botão Previous Results. O administrador tem a opção de escolher um formato que melhor atende suas necessidades.

- **Sample ID + increment (Sample ID necessário):** O nome do resultado corresponderá com a identificação da amostra e um incremento de quatro dígitos, ou seja, Amostra_0000.
- **Date Time:** O nome dos resultados corresponderá com a data e hora da análise.
- **Sample ID + Date Time:** O nome dos resultados conterá a ID de amostra, a data e a hora da análise.

Auto-Export: O MicroLab possui uma função de exportação automática que permite que o usuário exporte automaticamente o arquivo de resultados no momento da aquisição de dados. A MicroLab pode gerar arquivos dos tipos *.csv, *.spc e *.asp para importação para uma variedade de programas de software de terceiros. *.spc é um arquivo de dados de espectro universal necessário para uso de dados no GRAMS ou no Eigenvector. Os formatos de arquivo *.asp são simplesmente uma saída ASCII dos dados Y com um X de cabeçalho definido.

NOTA

A ID da amostra é inserida pelo usuário durante a análise. Se o usuário falhar ao inserir a ID da amostra, o sistema criará automaticamente um arquivo com data e hora. O usuário deve sempre atualizar a ID da amostra ao executar múltiplas amostras. O MicroLab PC armazenará a ID da amostra inserida anteriormente.

Advanced Features (recursos avançados)

Verificação do sistema

A verificação do sistema inclui os seguintes testes no instrumento:

- Desempenho (Sinal ao Ruído).
- Teste de estabilidade.
- Verificação da calibração de frequência do laser.
- Verificação da resolução espectral.

Consulte o manual de operação do instrumento apropriado para obter mais informações sobre a Verificação do Sistema.

Diagnóstico

A página de diagnóstico exibe diagnósticos importantes e informações gerais sobre o instrumento, inclusive:

- Status do instrumento
 - Energia (Contagens).
 - Bateria (Potência CA ou Bateria %).
 - Fonte (Corrente/Voltagem).
 - Laser (Contagens).
- Temperaturas dos componentes (°C).
- Informações sobre a versão.

Esta página também permite:

- Reinicialização da validade de Limpeza e Background.
- Configuração do formato Data/Hora.

Endereços MAC

A página Endereços MAC exibe os endereços MAC atuais do sistema e permite que os endereços sejam copiados para a área de transferência para exportação.

Gerenciamento de bibliotecas

A página de gerenciamento da biblioteca exibe informações da biblioteca, como nomes e conteúdos armazenados na biblioteca. Esta página também permite a criação de novas bibliotecas, a eliminação das bibliotecas existentes e a edição das entradas atuais das bibliotecas.

NOTA

As entradas das bibliotecas não podem ser editadas ou excluídas das bibliotecas licenciadas.

Criar uma nova biblioteca

- 1 Selecione o botão **New Library (Nova Biblioteca)** no lado direito da janela da lista da biblioteca.

A janela "Create Library" (Criar biblioteca) aparecerá.

- 2 Digite o **Library Name** (Nome da biblioteca).
- 3 Digite um **Comment** (Comentário) opcional a ser anexado à Biblioteca, se necessário.
- 4 Escolha o tipo de **Library Spectra** (Espectro de biblioteca):
 - Correção da linha de base.
 - Espectro ATR.
- 5 Escolha o **Y Type** (Tipo Y):
 - Absorbância.
 - Refletância.
 - Transmitância
- 6 Escolha **Lib Bytes**. Isto designa o número de bytes usados para salvar cada espectro. Um valor de 2 é normalmente apropriado para bibliotecas feitas pelo usuário.

- 7 Escolha se quer ou não a opção **Auto detect from first library entry** (Auto-detectar a partir da primeira entrada da biblioteca). Quando ativa, esta função usa os primeiros espectros da biblioteca para determinar o primeiro X (cm^{-1}), o último X (cm^{-1}) e o número de pontos. Com esta função desativada, o usuário pode selecionar manualmente o intervalo para correspondência da biblioteca e o número de pontos.
- 8 Clique em **Create** (Criar).

NOTA

A Agilent não recomenda aplicar a correção ATR a dados de reflexão especular, dados de ângulo de pastagem ou dados de reflexão difusa.

Edição de uma biblioteca atual

Para adicionar uma entrada a uma biblioteca existente:

- 1 Selecione o arquivo da biblioteca existente (.lib) a partir dos recursos avançados e gerenciamento da biblioteca.
- 2 Clique em "Add to Library" (Adicionar à biblioteca).
- 3 Selecione o arquivo de entrada da biblioteca *.a2r apropriado.
- 4 Clique em "Open" (Abrir).

A caixa de diálogo "Importing Results Entry" (Importando entrada de resultados) aparecerá. Esta caixa permite que o nome e o número CAS opcional sejam aplicados à entrada.

- 5 Clique em "Ok".

NOTA

A edição das informações personalizadas para uma amostra em uma biblioteca edita automaticamente as informações para todas as entradas com esse número CAS na mesma biblioteca e em todas as outras bibliotecas.

Para remover uma entrada de uma biblioteca existente:

- 1 Selecione o arquivo (.lib) da biblioteca existente na lista.
- 2 Clique em "Delete From Lib" (Excluir da Bib).
- 3 Clique em "OK".

NOTA

As entradas excluídas da biblioteca são completamente removidas da biblioteca. O número de índice da biblioteca ficará indisponível.

NOTA

A Agilent recomenda adicionar apenas espectros do mesmo tipo de amostragem (por exemplo, ATR) em uma biblioteca.

Informações personalizadas

A janela de informações personalizadas exibe informações de identificação e dados relacionados com a entrada da biblioteca escolhida, quando disponíveis. Esta página também permite que o usuário acrescente informações de classe, notas e manuseio relacionadas a essa entrada da biblioteca.

Gerenciamento de usuários

A página de gerenciamento de usuários pode ser usada para editar nomes de usuário, funções e modificar a segurança do usuário.

Consulte a [Página 13](#) para obter mais informações sobre o gerenciamento de usuários.

Transferência de método multivariável do GRAMS PLS/IQ para o MicroLab PC

Exportar o arquivo *.cal do PLS/IQ para ASCII

Para exportar o arquivo *.cal do PLS/IQ para ASCII:

- 1 Gere um arquivo *.cal do PLS/IQ utilizando o módulo PLS/IQ. Para salvar a calibração no PLS/IQ, use o procedimento "Galactic GRAMS: Saving a Calibration from the Experiment" no arquivo de ajuda do GRAMS Help File. Para questões e informações adicionais sobre o arquivo de ajuda do GRAMS, entre em contato com a Agilent.
- 2 Na tela principal do GRAMS, clique em **Add-ons > PLS/IQ > Export Calibration**. Será exibida uma caixa de diálogo "Open".
- 3 Escolha o arquivo *.cal apropriado e clique em **Open**. Será exibida uma caixa de diálogo Export.
- 4 A primeira seção lista o arquivo de calibração selecionado. A segunda seção lista o tipo de arquivo exportado; o tipo de arquivo de saída deve ser **ASCII Text (*.txt)**.
- 5 Clique em **Next**. Será exibida uma caixa de diálogo "Save As".

MicroLab PC

- 6 Navegue até C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\models antes de salvar o arquivo.
- 7 Insira um nome apropriado e clique em **Open**. O arquivo de calibração será exportado. O software retornará para a caixa de diálogo Export.
- 8 Clique em **Cancel** para retornar ao GRAMS.

Gerar o arquivo de método

Para gerar o arquivo de método no MicroLab PC:

- 1 No MicroLab PC ou MicroLab Lite, clique no botão **Method**.
- 2 Na caixa de diálogo Method, clique no botão **New**.
- 3 Na página method **Type**, escolha **Components** na lista suspensa Method Type.
- 4 Clique na página **Components**.
- 5 Na página do componentes, clique no botão **Add**.
- 6 Na caixa de diálogo Add Component, especifique um nome para o componente.
O nome do componente é o texto que aparecerá próximo ao valor quando o método é executado pelo usuário final. O nome deve ser descritivo da propriedade que está sendo predita.
- 7 Para um método multivariável (PLS), escolha **Quant Model** como o tipo de cálculo (Calculation Type). A caixa de diálogo Open file será exibida.
- 8 Escolha o arquivo de texto de calibração adequado (exportado do Galactic GRAMS na Etapa 7 "Exportar o arquivo *.cal do PLS/IQ para ASCII") e clique em **Open**.
- 9 Outras opções disponíveis na caixa de diálogo Add Components (Adicionar Componentes) estão listadas abaixo:
As opções disponíveis na caixa de diálogo Add/Edit Component (Adicionar/Editar Componente) estão listadas abaixo:
 - a **Quant Start and Quant Stop**: Definem um intervalo de frequência que será exibido quando o componente for selecionado na tela Results. Se for deixado em branco, todo o espectro será exibido.
 - b **Scaling**: A seção de escala aplicará uma escala linear ao resultado gerado pelo modelo Quant.

- c Thresholds:** Esses valores definem as cores da exibição para o resultado do componente. Se o valor do componente estiver acima ou abaixo dos valores críticos, o resultado será exibido em vermelho. Se o valor do componente estiver entre os valores críticos e os marginais, o resultado será exibido em amarelo. Se ocorrer de outra forma, o resultado será exibido em verde.
 - d Calc Value As:** Altera a exibição entre um valor de componente real, uma % do valor crítico superior ou uma % do valor crítico inferior.
- 10** Assim que todos os valores estiverem definidos adequadamente, clique em **OK**.
- 11** Clique em **Save As**. Digite o nome do método e salve em uma localização apropriada. O caminho padrão do arquivo está localizado em:
- C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Methods.

NOTA

No 21 CFR Parte 11, você será solicitado a salvar o método em um banco de dados.

-
- 12** O método ficará disponível para uso com o MicroLab PC. Certifique-se de que o método esteja ativado para utilizá-lo.

Transferência de modelo quantitativo MicroLab do MicroLab Expert para o MicroLab PC

Para utilizar arquivos de modelos do MicroLab Expert no MicroLab PC:

NOTA

Para o ambiente 21 CFR Parte 11, o modelo precisa ser importado para o banco de dados usando o MicroLab Quant antes de incluir em um método. Consulte Importar modelos na página 39 - 51 para obter informações detalhadas.

-
- 1** No MicroLab PC ou MicroLab Lite, clique no botão **Method**.
 - 2** Na caixa de diálogo Method, clique no botão **New**.
 - 3** Na página method **Type**, escolha **Components** na lista suspensa Method Type.
 - 4** Clique na página **Components**.
 - 5** Na página do componente, clique no botão **Add**.
 - 6** Na caixa de diálogo Add Components, especifique um nome para o componente.

- 7 Escolha **Quant Model** como o tipo de cálculo (Calculation Type). A caixa de diálogo Open file será exibida.
- 8 Navegue até onde o arquivo de modelo está localizado. Altere o campo do tipo de arquivo para filtrar o tipo de arquivo. Os seguintes tipos de arquivos são aceitos:
 - Modelos Agilent (*.mqm)
 - Modelos Thermo (*.txt)
 - Modelos de Vetor de Eigen (*.xml)
 - Modelos Quant do MicroLab Agilent Expert (*.a2q)

NOTA

O uso dos arquivos dos modelos Quant do MicroLab Agilent Expert (*.a2q) requer um código de registro separado, fornecido como parte de um pacote de produtos de fluxo de trabalho, como o "Measurement Bundle" (G8188AA). Caso contrário, uma caixa de diálogo de erro será exibida.

-
- 9 Escolha o arquivo de modelo e clique em **Open**. O modelo ficará incluído no método.
 - 10 Digite as outras opções disponíveis na caixa de diálogo Add Component. Clique em **OK**.
 - 11 Clique em **Save As**. Insira o nome do método apropriado e salve-o em C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Methods
 - No 21 CFR Parte 11, você será solicitado a salvar o método em um banco de dados.
 - 12 O método ficará disponível para uso com o MicroLab PC. Certifique-se de que o método esteja ativado para utilizá-lo.

Usar verificação de alinhamento pré-amostragem

A Verificação de Alinhamento Pré-Amostragem produz uma indicação visual da força do sinal a partir de uma amostra medida em uma tela de visualização. Isso permite determinar se a amostra está no foco de interface do instrumento FTIR e plana em relação à amostra, ou se o instrumento está alinhado à amostra para um sinal máximo. Esse procedimento fornece detalhes da criação de um método que usa a verificação de alinhamento pré-amostragem. No método, uma medição que será realizada com a amostra será especificada. Normalmente, isso é uma área ou altura do pico que corresponde com a amostra de interesse.

Para verificar o alinhamento da amostra:

- 1 No MicroLab PC ou MicroLab Lite, clique no botão **Methods**.
- 2 Na caixa de diálogo Method, clique no botão **New**.
- 3 Na página method **Type**, escolha **Components** na lista suspensa Method Type.
- 4 Clique na página **Components**.
- 5 Na página do componente, clique no botão **Add**.
- 6 Na caixa de diálogo Add Components, especifique um nome para o componente.
- 7 Selecione um tipo de cálculo para o componente.
Normalmente, tanto Área de Banda com Linha de Base Dupla ou Altura de Banda com Linha de Base Dupla fornecerão a melhor indicação de alinhamento da amostra.
- 8 Defina a banda (área) que será medida.
 - Para áreas de pico, Peak Start e Peak Stop definirão as bordas do pico.
 - Para Baseline 1 e Baseline 2, a linha de base é estabelecida como o menor ponto entre os pontos inicial e final.
- 9 Defina um fator de escala de forma que os pontos medidos sejam maiores do que 1.
Para alturas de banda, um fator de escala de 1000 garante que a maioria das medições esteja na escala.
- 10 Clique em **OK**.
- 11 Na página **Type** do método, selecione **Show Pre-Sample Alignment Check**. Na lista suspensa, escolha o componente definido na Etapa 6.
- 12 Deve ser observado também que a **Sample Continuity Check (Verificação de Continuidade de Amostra)** pode ser usada para garantir que o sistema fique alinhado à amostra durante toda a medição.
- 13 Clique em **Save As** para salvar o método.
- 14 Para uso no PC portátil, o método deve ser transferido para a pasta MicroLab Mobile/Methods no dispositivo móvel.
- 15 No MicroLab Mobile, a Verificação de Alinhamento Pré-Amostragem será exibida como um gráfico de barras vermelho/amarelo/verde na página Sample Alignment. A amostra deve ser girada ou alinhada para alcançar o valor máximo no gráfico de barras.

Transferir métodos editados para o MicroLab Mobile

Após concluir modificações em um método no MicroLab PC ou MicroLab Lite, os arquivos devem ser transferidos para o PC integrado ou portátil para uso. Existem duas maneiras de copiar os arquivos; usando o Meu Computador ou transferindo-os automaticamente via MicroLab Lite.

Usar o MicroLab Lite Synchronize

Para transferir métodos para o MicroLab Mobile usando o MicroLab Lite Synchronize:

- 1 Conecte o PC integrado ou portátil ao computador que contém o MicroLab Lite.
 - No FTIR 4300 portátil, saia do software MicroLab Mobile no dispositivo para entrar no modo "Pass Through" e conecte-o ao computador usando a conexão USB. Para sair do MicroLab Mobile, selecione **Logoff** na tela inicial, clique em **Exit** e clique em **OK** quando a caixa de diálogo de confirmação de saída for exibida.
- 2 Abra o MicroLab Lite no computador.
- 3 Clique em **Advanced Features**.
- 4 Clique em **Synchronize**.
- 5 Se nenhuma conexão for listada, clique em **New**.
- 6 Na caixa de diálogo, selecione **Get Connected Device Name**; o número de série do PDA conectado ou do instrumento FTIR 4300 portátil será inserido na caixa de diálogo automaticamente.
- 7 Para configurações padrão, selecione quais opções serão sincronizadas. Relatórios (Reports), resultados (Results) e métodos (Methods) podem ser sincronizados. Além disso, os relatórios podem ser automaticamente impressos especificando-se a impressora desejada.
 - Para sistemas habilitados para 21 CFR Parte 11, clique em **Browse** e navegue até a pasta Public Mobile Methods ou Results.
 - Para carregar arquivos de método no MicroLab Mobile com 21 CFR Parte 11 habilitado, os arquivos terão de estar na pasta Public Mobile Methods. Todos os arquivos de método dessa pasta são carregados.
- 8 Assim que o dispositivo que será sincronizado for selecionado, clique em **OK**.
- 9 Para transferir arquivos, destaque o PC portátil desejado na lista e clique em **Synchronize** ou **Sync** e clique em **Yes**.

Copiar via Meu Computador

NOTA

Em ambientes 21 CFR Parte 11, métodos não CFR ficam visíveis no ambiente móvel ao copiar via "My Computer", mas não podem ser ativados.

Para transferir métodos para o MicroLab Mobile usando o Meu Computador:

- 1 Conecte o PC integrado ou portátil ao computador que contém o MicroLab PC.

NOTA

Este procedimento não funcionará no FTIR 4300 portátil. Use o recurso **Synchronize** conforme especificado na página 42.

- 2 No computador, abra **My Computer** e navegue até C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Methods
- 3 Selecione os métodos desejados e selecione **Editar > Copiar**.
- 4 Nas opções de Meu Computador, selecione a unidade **Dispositivo Móvel**.
- 5 Navegue até a pasta Program Files\MicroLab Mobile\Methods\.
- 6 Clique em **Editar > Colar**.
- 7 Retorne para a unidade C:\ no computador e navegue até C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Models
- 8 Copie todo o conteúdo da pasta Models.
- 9 Nas opções de Meu Computador, selecione a unidade **Dispositivo Móvel**.
- 10 Navegue até a pasta Program Files\MicroLab Mobile\Models e clique em **Edit > Paste**.
- 11 Clique em **Sim para Todos** se um aviso de gravação de substituição aparecer.

Como mover arquivos em um ambiente habilitado para 21 CFR Parte 11

Esse procedimento pode ser usado para arquivos de método ou de resultados.

Para mover arquivos de uma pasta para outra:

- 1 O usuário conectado deve ter privilégio para "Copiar/colar método/resultados" (cut/paste method/results).
- 2 No MicroLab Lite ou MicroLab PC, selecione os arquivos desejados, clique com o botão direito e selecione "Cut".
- 3 Navegue até a pasta apropriada e "Cole" (paste) os arquivos.

NOTA

Os arquivos não podem ser copiados para pastas diferentes.

Verificação do sistema

Para executar a Verificação do sistema:

- 1 Clique em **Advanced Features** na tela inicial.
- 2 Selecione **System Check**. Existem quatro testes que podem ser realizados, consulte o manual de operação do instrumento para obter mais informações sobre cada teste.
- 3 Selecione os testes a serem executados.
 - Os parâmetros Número de testes, Número do usuário ou Número de execuções podem ser ajustados, se necessário.
 - Vários testes podem ser selecionados para serem executados juntos.
- 4 Clique em **Next** para iniciar o teste.
- 5 Siga as instruções na tela. Clique em **Next** quando a etapa tiver sido concluída.
- 6 Repita a etapa acima até que os testes estejam completos.

4

MicroLab Quant

Tela inicial	45
(Logoff) Desconectar	46
Bloquear	46
Iniciar novo modelo	46
Importar modelos	51
Recursos da norma 21 CFR Parte 11	52

Tela inicial

Quando o MicroLab PC v 5.1 e superiores é instalado, o MicroLab Quant Module também é instalado. O módulo foi projetado para permitir que o usuário crie métodos e modelos que serão usados no módulo de métodos do MicroLab Component do MicroLab PC.

O MicroLab Quant usa as mesmas configurações de segurança e ferramentas de administração de usuários aplicadas no MicroLab PC. Para fazer login, o usuário insere o nome de usuário e a senha como se estivesse entrando no MicroLab PC. Em ambientes 21 CFR Parte 11, o grupo e o projeto também devem ser inseridos.

As seguintes opções estão disponíveis:

- Iniciar novo modelo
- Projeto/modelo anterior
- Avaliar modelo
- Importar modelos (disponível apenas com o 21 CFR Parte 11)

Os dados do novo projeto/modelo devem ser coletados antes do uso do MicroLab Quant. Isso deve ser feito no MicroLab PC. Todos os dados deverão ser coletados através dos mesmos parâmetros de coleta de dados.

(Logoff) Desconectar

A tela Logoff permite que diferentes usuários se conectem ao sistema e se desconectem dele. O botão Exit fecha o software MicroLab PC.

Bloquear

Disponível somente em ambientes 21 CFR Parte 11. Use-o para bloquear o software e controlar o acesso quando deixá-lo sem supervisão. Consulte a seção MicroLab 21 CFR Parte 11 na página 57 para mais informações.

Iniciar novo modelo

Para gerar um novo modelo

- 1 Selecione **Start New Model**. O software gerará um nome automaticamente para o novo projeto, contudo, o usuário também pode criar e inserir um nome.
- 2 O menu de seleção de dados aparece e permite que o usuário selecione a pasta onde os dados estão atualmente armazenados. Os dados também são agrupados de acordo com o método pelo qual são obtidos.
 - a Selecione os dados que precisarão ser usados na geração de modelo. Isso pode ser feito clicando nos dados. O usuário pode usar as teclas **CTRL** e **Shift** para destacar múltiplos arquivos, de forma similar à seleção de arquivos de um ambiente Windows.
 - b Assim que os arquivos forem selecionados, clique no botão **[Next>>]** na parte inferior da tela para prosseguir.
- 3 Para cada padrão, insira a concentração na coluna Concentration.

- 4 Selecione o tipo de algoritmo a ser aplicado aos dados no menu suspenso [Quant Algorithm] e depois clique em [Next>>]. A seleção do algoritmo consiste nas seguintes opções:
 - a **Lei de Beer simples:** Geralmente, caracterizada como uma equação linear de um único componente. O componente é definido por uma série de concentrações conhecidas e pela mudança em uma característica espectral específica exibida nas unidades Absorbance. Essas alterações podem ser alturas de banda, áreas ou razões. Uma equação linear é, então, determinada na forma de $y = mx + b$ da construção da Lei de Beer de $A = ebc$. É isso que é então utilizado para determinar concentrações desconhecidas em comparação com a equação de calibração conhecida.
 - b **Mínimos quadrados clássicos:** Utilizados quando múltiplos componentes estão presentes dentro de uma mistura. Esse tipo de análise também se baseia na Lei de Beer, em que múltiplas frequências são escolhidas para captar todas as mudanças que estão acontecendo em todos os componentes. Cada uma delas é utilizada em combinação para determinar a melhor correlação entre concentração prevista e concentração real no modelo de calibração.
 - 1 Frequências múltiplas são definidas e ilimitadas. Concentrações conhecidas de cada constituinte devem ser definidas.
 - 2 O CLS não é útil para misturas que têm efeitos de matriz em componentes que interagem um com o outro. Ele também pode ser suscetível a efeitos de linha de base.
 - 3 O CLS é mais eficiente na identificação de um componente em uma mistura.
 - c **Mínimos quadrados inversos (também conhecidos como Lei de Beer inversa ou regressão linear múltipla):** Utilizados em misturas de múltiplos componentes, onde estão presentes efeitos de matriz. Esse tipo de análise baseia-se na Lei de Beer. As frequências múltiplas são usadas para definir a calibração de $C = P \cdot A + e_c$, um inverso da Lei de Beer.
 - 1 Mais bem utilizado como modelo Multivariável, em que somente conhecimento do constituinte de interesse é necessário. Adequado para tipos complexos de análise.
 - 2 O número de frequências usadas na calibração não pode ser maior do que o número de padrões conhecidos usados na calibração. Essas frequências devem corresponder às mudanças do constituinte de interesse.
 - 3 O ILS geralmente produz a calibração mais precisa se um número suficiente de espectros de calibração estiver disponíveis.

- 5 Quando o algoritmo Quant for selecionado, a definição de banda será requerida. O software permite a seleção de alturas de pico, áreas e razões.
 - a **Definição de altura do pico:** Arraste e solte o ícone Peak Height nos espectros exibidos na janela de dados . As setas da exibição espectral permitem que o usuário mude interativamente a linha de base e a posição da banda.
 - 1 **Setas vermelhas** apontadas para cima definem o posicionamento da linha de base – pontos inicial e final.
 - 2 **Setas azuis** apontadas para baixo indicam a posição da banda.
 - b **Definição da área do pico:** Arraste e solte o ícone Peak Area nos espectros exibidos na janela de dados . As setas da exibição espectral permitem que o usuário mude interativamente a linha de base e a posição da banda.
 - 1 **Setas vermelhas** apontadas para cima definem o posicionamento da linha de base – pontos inicial e final.
 - 2 **Setas azuis** apontadas para baixo indicam o posicionamento da banda – pontos inicial e final.
 - c **Definição de razão de banda:** o software permite que uma razão de banda ou área seja usada para propósitos de calibração. Exige que um mínimo de duas bandas seja definido, tanto por área quanto por altura. Assim que as bandas de interesse forem definidas, clique no ícone Peak Ratio abaixo da janela de dados . A caixa de diálogo solicitará que o usuário defina o numerador e o denominador da equação de razão.
 - d **Scaling:** O usuário pode clicar e aplicar zoom nos dados espectrais exibidos interativamente. Para sair do zoom, clique com o botão direito na janela de exibição espectral e clique em [Full Scale]
 - e **Tabela de dados:** Os dados exibidos na tabela representam as definições de banda que o usuário adicionou através da janela de exibição espectral interativa. O usuário pode optar por alterar esses valores diretamente na tabela, caso valores específicos sejam necessários.
 - 1 **Opção Incluir no Modelo:** Permite que o usuário decida quais operações serão incluídas no modelo que estão desenvolvendo. Esse processo baseia-se em todo o conjunto de dados.
 - 2 **Delete:** Permite que o usuário exclua a definição de pico do modelo permanentemente.

- f Tabela de padrões:** Permite que o usuário selecione interativamente quais padrões específicos serão usados no algoritmo de calibração. Os dados espectrais individuais podem ser removidos do gráfico ou modelo desmarcando a caixa de seleção correspondente. Além disso, o espectro individual pode ser destacado na janela de exibição destacando-o na janela de padrões.
- g Janela Gráfico do Modelo:** O padrão da janela de gráfico do modelo é exibir o gráfico Previsto vs. Real. O usuário pode alternar entre os gráficos Banda Definida e Concentração de duas maneiras:

 - 1** Clique com o botão direito na janela do gráfico do modelo e selecione o gráfico desejado.
 - 2** Clique no botão **Select Model Plot** na parte inferior da tela de análise.
- h Avaliação de modelo:** Ao clicar no botão Model Evaluation, o software apresenta ao usuário duas funções. Essas funções geralmente são usadas para determinar valores atípicos e a robustez da calibração definida.

 - 1 Validação cruzada:** O software é executado através de calibração, que elimina cada padrão e determina os valores que devem ser retornados caso esse padrão seja executado como desconhecido.
 - 2 Definição independente:** Permite que o usuário adicione arquivos **[Add Files...]** de verificação de padrões que foram executados independentemente da calibração e prevê os valores dessas amostras. As concentrações de cada amostra são inseridas na tabela e, então, o botão **[Predict]** é clicado.

 - a** Total Standard Error, R-Squared for Actual V Predicted são exibidos na parte inferior da tela. O gráfico Actual V Predicted também é exibido na tela.
 - b** O usuário pode exportar (**Export**) os valores para um arquivo em formato CSV do local de sua preferência.
 - c** O usuário agora tem a opção de salvar **[Save]** o modelo e retornar à tela de análise de dados anterior **[Back]**.

- i **Finalizar modelo:** Se o usuário estiver satisfeito com o modelo de calibração, o botão **[Finalize Model]** é selecionado. Então, o usuário pode salvar o projeto (*.mpq), que inclui o padrão e o modelo. O usuário pode também optar nesse momento por salvar os dados em um método do MicroLab. O componente que o usuário acabou de definir será incluído no modelo associado, com todos os parâmetros de calibração.
 - 1 **Arquivos do modelo:** Se for necessário definir múltiplos componentes, isso será feito em modelos/projetos individuais. Cada componente é definido em um modelo ou arquivo *.mqm individual ao mesmo tempo em que o arquivo do projeto é salvo.
 - 2 **Salvar método:** Salva os arquivos em um arquivo com extensão *.a2m, com o componente de interesse. O método terá os mesmos parâmetros de coleta de dados dos arquivos de calibração que foram usados na criação do modelo. Se forem necessários múltiplos componentes em um arquivo de métodos, deverão ser adicionados ao método manualmente através do MicroLab Lite ou PC. Veja a seção sobre transferência de método multivariável em MicroLab PC. Os modelos são adicionados da mesma maneira que os modelos do GRAMS, contudo, eles são definidos como arquivos *.mqm, conforme é possível notar acima.
 - 3 **Print:** Selecione essa opção para gerar um PDF com informações sobre padrões e o modelo. O arquivo é salvo na pasta C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Results.
- 6 **Projeto/modelo anterior:** Permite que o usuário selecione um projeto iniciado anteriormente e edite parâmetros. Isso é feito de forma similar à seção Iniciar novo modelo acima: Contudo, uma determinada parte do trabalho já está feita. Geralmente, os padrões já estão adicionados e uma parte da definição de banda já foi adicionada.

O usuário pode agora seguir as mesmas etapas, para definir, avaliar e finalizar seus métodos.
- 7 **Evaluate Model** Isto permite que o usuário selecione um método para avaliar. A tela **Independent Set Evaluation** é exibida e permite que o usuário prossiga com o carregamento de padrões conhecidos e a previsão da concentração, conforme feito anteriormente na seção de avaliação do modelo, na configuração do novo modelo.

Importar modelos

Para importar arquivos de modelo usando o MicroLab Quant:

NOTA

Esta funcionalidade está disponível somente em ambientes 21 CFR Parte 11. O MicroLab Quant é o único aplicativo que tem a funcionalidade de importar um modelo para um banco de dados para utilização em um método usando o MicroLab PC.

Consulte a página 39 para transferência de modelo em um ambiente não 21 CFR Parte 11.

- 1 Faça login no MicroLab Quant.
- 2 Selecione **Import models**.
- 3 Navegue até onde o modelo está salvo e selecione o modelo de interesse. Filtre o tipo de modelo, conforme necessário.
Os seguintes tipos de arquivos são aceitos:
 - Modelos Agilent (*.mqm)
 - Modelos Thermo (*.txt)
 - Modelos de Vetor de Eigen (*.xml)
 - Modelos Quant do MicroLab Agilent Expert (*.a2q)

NOTA

O uso dos arquivos dos modelos Quant do MicroLab Agilent Expert (*.a2q) requer um código de registro separado, fornecido como parte de um pacote de produtos de fluxo de trabalho, como o "Measurement Bundle" (G8188AA). Caso contrário, uma caixa de diálogo de erro será exibida.

- 4 Clique em **Open**. A janela "Select database/folder" será exibida.
- 5 Selecione uma pasta do banco de dados para importar o arquivo de modelo e clique em **OK**.
- 6 Assim que o arquivo de modelo tiver sido importado com sucesso para o banco de dados, clique em **OK**.
- 7 Siga as etapas descritas na página 39 para incluir o modelo em um método usando o MicroLab PC.

Recursos da norma 21 CFR Parte 11

Consulte a seção MicroLab 21 CFR Parte 11 na página 57 para mais informações sobre esses recursos.

Norma 21 CFR Parte 11

Exibe uma lista de ações realizadas durante a criação ou edição de um modelo.

E-Sign

Clique em E-sign para aplicar uma assinatura eletrônica e adicionar comentários ao modelo.

5

MicroLab OQ

Qualificação operacional (OQ)	53
Executar a OQ	54
Relatório de OQ	55

O software MicroLab OQ fornece valores de diagnóstico e testes de validação de desempenho para garantir que o sistema esteja funcionando conforme o esperado. Consulte o manual de operação apropriado do instrumento para obter mais informações sobre os valores de diagnóstico e testes de validação de desempenho para cada instrumento.

Qualificação Operacional (OQ)

Verificação de diagnóstico do sistema operacional

A tela de diagnóstico exibe as seguintes informações sobre o instrumento:

- Status do instrumento: Energia, bateria, fonte, laser e ganho de corrente.
- Temperaturas de: Detector, CPU, Placa IR, Potência e Bloco
- Informações da versão

NOTA

O diagnóstico também pode ser visualizado no MicroLab PC e no MicroLab Mobile por meio da tela **Advanced Features**.

Os resultados são representados em cores.

- Verde: O resultado está dentro da faixa de valor ideal. O instrumento está funcionando corretamente.
- Amarelo: O resultado está dentro da faixa de valor limite. O instrumento está funcionando, mas com um nível de desempenho mais baixo.
- Vermelho: O resultado está dentro da faixa crítica. O instrumento não está funcionando corretamente.

Validação de Desempenho

Os seguintes testes estão disponíveis:

- Teste (de desempenho) de sinal/ruído.
- Teste de estabilidade.
- Verificação de calibração de frequência do laser (precisão e repetibilidade da frequência).
- Verificação da resolução espectral.

NOTA

Estes são os mesmos testes usados para a **Verificação do Sistema** no MicroLab PC e no MicroLab Mobile por meio da tela **Advanced Features**.

Executar a OQ

Para iniciar a qualificação operacional:

- 1 Clique em **Next** para iniciar o testes.
- 2 Certifique-se de que o instrumento correto esteja selecionado.
- 3 Selecione um acessório para usar no teste de OQ. Este módulo será definido como o acessório **Primary**.
A lista abaixo indica a ordem recomendada na qual os módulos devem ser selecionados. Um desses módulos é obrigatório para realizar os testes.
 - Módulo de transmissão
 - Módulo DialPath
 - Módulo TumbIR
 - Módulo ATR de diamante de reflexão única
 - Módulo ATR de germânio de reflexão única
 - Módulo ATR de seleneto de zinco de reflexão única
- 4 Clique em **Make Primary** para definir o acessório como principal. Isso permitirá que o instrumento realize testes com o acessório selecionado.
O acessório principal deve ser um acessório que possa executar todos os testes de validação de desempenho. Isso garante que o instrumento esteja funcionando corretamente.
- 5 Clique em **OK** para iniciar o processo.

- 6 A página de diagnóstico será exibida. Se houver FALHA em algum dos resultados do diagnóstico, você não poderá prosseguir com os testes de desempenho.
 - Se o campo Energy em Instrument Status for exibido como FAIL, clique em **Gain Adjust** e ajuste o valor do ganho de modo que o sinal esteja dentro da faixa ideal (verde). O indicador de status também será exibido em verde quando o sinal está dentro da faixa ideal.
 - Clique em **Set Instrument Default Gain** para salvar esse valor de ganho como padrão do instrumento.
 - Clique em **Back** para retornar à página de diagnóstico.
- 7 Clique em **Next**.
- 8 Selecione os testes de desempenho a serem executados. Clique em **Next**.
- 9 Siga as instruções na tela. Clique em **Next** quando estiver pronto.
- 10 Se necessário, repita a etapa acima com os acessórios adicionais até que a OQ seja concluída.

Relatório de OQ

Resumo dos resultados

Quando a qualificação operacional é concluída, a tela de resumo dos resultados é exibida, apresentando os resultados de cada teste.

Um relatório de OQ também é gerado em formato PDF, exibindo o seguinte:

Informações sobre o sistema, como o ID da estação de trabalho e a versão do software.

Informações sobre relatórios, tais como informações sobre o usuário e sobre nomes de arquivos de relatórios.

Informações sobre **acessórios**, tais como quaisquer acessórios conectados ao instrumento.

Os resultados do MicroLab OQ estão localizados no seguinte caminho de arquivo:
C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\IQOQ.

Esta página foi deixada em branco intencionalmente.

6

MicroLab com 21 CFR Parte 11

SCM

Error! Bookmark not defined.

SDA

Error! Bookmark not defined.

Componentes do software 21 CFR Parte 11 no MicroLab
defined.

Error! Bookmark not defined.

O componente 21 CFR Parte 11 no software MicroLab Pharma consiste em dois programas:

- Spectroscopy Configuration Manager (SCM)
- Spectroscopy Database Administration (SDA)

Após as medições, não é possível excluir os resultados.

Assim que o CFR for instalado, não é possível desativar sua funcionalidade. Se você desinstalar o software MicroLab e o SCM e reinstalar apenas o software MicroLab, as regras do CFR serão mantidas. A integridade do ambiente CFR é preservada.

Para obter instruções de instalação, consulte as "Instruções de Instalação do Software MicroLab para Ambientes 21 CFR Parte 11" fornecidas com o software.

NOTA

O software opcional do MicroLab Expert não pode ser usado em um ambiente de acordo com 21 CFR Parte 11. Para obter mais informações, consulte as instruções de instalação do software MicroLab Expert, as instruções de instalação do MicroLab Pharma e as notas de versão do software Agilent MicroLab Expert 1.1.0.1.

SCM

O Spectroscopy Configuration Manager (SCM) é uma interface de software entre a equipe de administração do sistema e o Servidor e o Servidor de Aquisição do software de espectroscopia da Agilent. O SCM fornece um meio para criar, configurar e manter dados relacionados à segurança do sistema, ao gerenciamento do usuário e aos caminhos dos dados.

MicroLab com 21 CFR Parte 11

Para fornecer a segurança exigida pela conformidade com a norma 21 CFR Parte 11, a Agilent usa o SCM para direitos de segurança e permissão. Essas funções de segurança oferecem:

- Controles de acesso e verificações de autoridade através do uso de códigos de identificação de usuários e senhas.
- Segurança com registro eletrônico através do uso de bancos de dados.
- Hora e data registradas nas trilhas de auditoria.

O uso de códigos de identificação de usuários e senhas permite o controle de qual fez login no sistema e quem pode realizar funções específicas no software de aplicação da Agilent. Também fornece o mecanismo que permite a assinatura eletrônica de registros eletrônicos. O uso de bancos de dados em conjunto com o SCM evita que usuários não autorizados alterem ou excluam arquivos. Os registros de evento do SCM aprimoram as trilhas de auditoria residentes no software de aplicação. O administrador do SCM deverá configurar os usuário requeridos. É importante que alguns requisitos simples sejam seguidos quando isso é feito para garantir que a conformidade com a norma 21 CFR Parte 11 seja mantida.

Para informações adicionais sobre como configurar o SCM, consulte a Ajuda do SCM. Para acessar a Ajuda do SCM, com o aplicativo SCM aberto, pressione F1 no teclado ou navegue até C:>Program Files (x86) > Varian > 21 CFR 11 > Configuration manager > Server > Configuration Manager Database Help.

SDA

O Spectroscopy Database Administrator (SDA) foi desenvolvido para que administradores do sistema configurem e mantenham bancos de dados utilizados pelo software de aplicação da Agilent para armazenar dados.

Você pode usar o SDA juntamente com o Spectroscopy Configuration Manager (SCM) da Agilent, o software de aplicação, e suas próprias práticas operacionais padrão (SOPs) para montar um ambiente em conformidade com a 21 CFR Parte 11 para controlar seus instrumentos Agilent.

O SDA permite que os dados coletados dos instrumentos da Agilent sejam armazenados localmente (no mesmo PC onde está o software de aplicação da Agilent) ou remotamente em uma combinação Cliente/Servidor.

A configuração deve ser realizada pelo administrador do sistema ou por uma pessoa com direitos de administração para executar o SDA.

Para informações adicionais sobre como configurar o SDA, consulte a Ajuda do SDA. Para acessar a Ajuda do SDA, com o aplicativo SDA aberto, pressione F1 no teclado ou clique em Start > All Programs > Agilent > Database Utilities > SDA Help.

Componentes do software 21 CFR Parte 11 no MicroLab

Com o software 21 CFR Parte 11 instalado, botões adicionais serão disponibilizados.

Bloquear

Essa caixa de diálogo permite que o usuário bloqueie o software MicroLab ao usar o pacote de software 21 CFR Parte 11. Esse recurso pode ser acessado na tela inicial.

Quando bloqueado, a caixa de diálogo Unlock MicroLab PC aparecerá e nenhuma ação poderá ser realizada até que um usuário válido faça login e desbloqueie o software. Usuários além daquele que "bloqueou" o MicroLab PC/Lite/Quant/OQ originalmente só podem desbloquear o software quando estiverem na página inicial. Somente o usuário que estava originalmente conectado ao software pode desbloquear o software em todas as páginas. Isso garante que os privilégios sejam aplicados corretamente, que informações de trilha de auditoria estejam corretas no MicroLab e no Configuration Manager e que o arquivo de resultados seja salvo corretamente.

User Identification — Digite sua identificação de usuário.

Group — Selecione seu grupo na lista suspensa.

Project — Selecione seu projeto na lista suspensa.

Password — Insira sua senha.

NOTA

No MicroLab Mobile 21 CFR Parte 11, deve-se usar apenas caracteres alfanuméricos. Não use caracteres especiais, como \$, @, e assim por diante.

OK — Clique em OK para fazer login e sair da caixa de diálogo. O software será desbloqueado.

Cancel — Clique em Cancel para sair da caixa de diálogo sem fazer login. O software permanecerá bloqueado.

E-sign

Clique em E-sign para aplicar uma assinatura eletrônica. Qualquer usuário pode "assinar" o método ou os resultados. Para realizar a Aprovação – 1 e a Aprovação – 2, o usuário deverá receber a permissão apropriada no Spectroscopy Configuration Manager. Você não precisa fazer login no software MicroLab para aprovar, contudo, quando a caixa de diálogo Signature aparecer, o usuário terá de inserir as credenciais para realizar a Aprovação – 1 e a Aprovação – 2. O usuário original que estava conectado antes da aprovação ser realizada permanecerá conectado. Se a conta do usuário conectado ao software MicroLab for desativada ou bloqueada, ao cancelar a caixa de diálogo de assinatura eletrônica, a caixa de diálogo de bloqueio será exibida. A conta do usuário original precisa ser desbloqueada pelo administrador do Configuration Manager antes que o software MicroLab possa ser desbloqueado.

User Identification — Esse campo exibe o nome do usuário atual. O operador/aprovador deve inserir a identificação de usuário nesse campo antes de aplicar a assinatura eletrônica.

Group — O grupo será preenchido automaticamente assim que o campo de identificação do usuário for preenchido. Se o usuário estiver vinculado a mais de um grupo, selecione o grupo apropriado.

Project — O projeto será preenchido automaticamente assim que o campo de identificação do usuário for preenchido. Se o usuário estiver vinculado a mais de um projeto, selecione o projeto apropriado.

Password — O operador/aprovador deverá inserir a senha nesse campo caso pretenda aplicar a assinatura eletrônica.

Comment — Nesse campo, insira as informações sobre a ação que está sendo assinada ou o significado da assinatura. É obrigatório inserir um comentário — caso seja deixado em branco, quando o botão "Sign", "Approval-1" ou "Approval-2" for clicado, será exibida uma mensagem informando que o campo é obrigatório.

Approval-1 — Clique nesse botão para aplicar uma assinatura eletrônica no nível da Aprovação-1. O usuário que executar o método não poderá também aprovar os dados, e uma mensagem com essa informação será exibida.

Approval-2 — Clique nesse botão para aplicar uma assinatura eletrônica no nível da Aprovação-2. O usuário que executar a aplicação e criar os dados não poderá também aprovar os dados, e uma mensagem com essa informação será exibida.

O método ou os resultados ficarão bloqueados assim que a Aprovação – 2 for realizada. Esse método ou os resultados poderão ser abertos e visualizados, mas nenhuma outra modificação poderá ser realizada. Um novo método poderá ser criado com esse método bloqueado.

MicroLab com 21 CFR Parte 11

O método MicroLab e os arquivos de resultado não podem ser desbloqueados, a menos que a aprovação 2 seja realizada. Um POP de empresa pode ser necessário a fim de garantir que nenhuma outra modificação seja feita no arquivo depois que o documento tenha sido assinado pelo operador e pelo aprovador 1. Qualquer modificação entre a realização da assinatura eletrônica é detalhada na trilha de auditoria, incluindo eventos de assinatura eletrônica.

Motivo para alteração

Esta caixa de diálogo será exibida assim que uma alteração for feita no método. O método é salvo imediatamente após a caixa de diálogo "Reason for change" ser concluída.

Essa caixa de diálogo permite que o usuário insira um motivo para quaisquer alterações feitas em um método.

As informações inseridas aqui serão exibidas no relatório da MicroLab, no registro de dados e no log de auditoria do SCM.

A parte inferior da caixa de diálogo mostra o log do método, que inclui as alterações feitas.

Norma 21 CFR Parte 11

Clique para acessar as guias Audit Trails, Collect Parameters e Analysis Parameters.

Trilha de auditoria

As trilhas de auditoria do método e dos resultados são exibidas, informando todas as ações registradas, dentre elas:

- Local de salvamento do método e dos resultados
- Método usado na reanálise
- Alterações de parâmetros do método
- Motivo para alteração
- Início da execução do método
- Parada da execução do método
- Falha inesperada do instrumento, parada da execução do método
- Método ou resultados autorizados
- Residual Aplicado

MicroLab com 21 CFR Parte 11

Para cada entrada acima, uma combinação das seguintes informações também é registrada:

- Servidor/banco de dados/nome do arquivo de SDAdministrator
- Data e hora local
- Data e hora GMT
- Nome da estação de trabalho
- Usuário: Grupo/projeto/ID de usuário
- Nome do usuário
- Descrição do usuário
- Número de série do instrumento
- Comentário validado
- Número da versão do software
- Número da versão do firmware

7

Medir amostras

Limpar a interface de amostragem	63
Coletar uma medição de background	64
Coletar a medição de amostra	64

O software MicroLab Mobile e MicroLab PC foram projetados para conduzir o usuário ao longo da medição de amostras. O software exibe imagens e instruções das ações que são requeridas pelo usuário para medir amostras. Seguir cuidadosamente as instruções na tela garante resultados de medição consistentes. Para qualquer medição de amostra, as seguintes etapas são realizadas:

- Limpeza da interface de amostragem.
- Coleta do background.
- Posicionar a amostra para medição.
- Coleta da medição da amostra.

Limpar a interface de amostragem

A primeira etapa ao realizar uma medição de amostra é garantir que a interface de montagem da amostra esteja sem quaisquer resíduos de amostras anteriores ou de uso geral e armazenamento. Para instruções específicas sobre a limpeza, consulte o manual de operação apropriado do instrumento, fornecido com o sistema.

CUIDADO

Não rompa o lacre do espectrômetro na tentativa de limpar superfícies interiores. A quebra do lacre inviabilizará a garantia.

Coletar uma medição de background

A Agilent recomenda que o sistema seja configurado para coletar um background antes de cada amostra.

Antes de iniciar uma análise, o software coletará um espectro de background automaticamente, assim que o método for configurado como recomendado. A medição do background (sem a presença de amostra) fornece um perfil de linha de base das condições de sistema atuais e permite considerar quaisquer anomalias que ocorram tanto no espectro de background quanto no da amostra.

NOTA

Antes de coletar um background, certifique-se de que a interface de amostragem está limpa. Para limpar a interface de amostragem, um solvente apropriado, como metanol, acetona ou álcool isopropílico, deve ser usado. Consulte o manual de operação do instrumento para obter mais informações detalhadas.

Para coletar uma medição do background:

- 1 Na tela inicial, verifique se o método apropriado está ativado, depois clique em **START** para inicializar a análise de amostra de background.
- 2 Clique em **Next**. Uma breve verificação da interface de amostragem (o cristal) ocorrerá. Após a conclusão bem-sucedida do teste, o sistema coletará um "background". O progresso do background é indicado por uma barra de status.

NOTA

Clique em HOME para voltar para a tela inicial principal, caso queira reiniciar sua análise.

Coletar a medição de amostra

Para medir uma amostra:

- 1 Para iniciar a medição da amostra, clique no botão **Start** na tela inicial.
- 2 Conforme o software instruir, limpe a interface de amostragem para realizar medições de ATR ou transmissão.
 - Para realizar uma medição de refletância no FTIR Agilent 4100 ExoScan, o padrão de reflexão deve ser colocado na interface de amostragem.

Medir amostras

NOTA

A superfície da amostragem deve ser limpa com um pano macio e um solvente apropriado, como metanol, etanol ou acetona.

- 3 Clique no botão **Next**. Clicar no botão Home fará com que a medição seja interrompida e que você retorne para a tela inicial.
A verificação de limpeza do cristal será realizada se tiver sido selecionada no método. A absorbância será verificada em uma referência armazenada. Se forem encontradas absorbâncias, o software solicitará a limpeza da interface de amostragem e o reinício.

NOTA

Se a verificação de limpeza do cristal continuar com falha, o exame de background armazenado pode estar corrompido. Se isso ocorrer, o background limpo pode ser redefinido clicando-se em Advanced Features > Diagnostics, depois em Reset Clean Check, na caixa de diálogo Diagnostics. Isso limpará o fundo armazenado.

- 4 Após a verificação de cristal (se especificado), o software coletará a amostra de background. As amostras de background são coletadas em todos os exames ou após um intervalo de tempo especificado, conforme especificado no método.
O software instruirá você para aplicar a amostra à interface de amostragem. A imagem exibida corresponderá com a configuração do sistema. Assim que a amostra estiver no local correto, clique em **Next**.
- 5 O software exibirá um gráfico mostrando a intensidade (absorvância) da medição de amostra. Essa tela é usada para assegurar que a amostra foi corretamente posicionada na interface de amostragem.
 - Para aplicações de óleo usando o FTIR Agilent 4500t, o valor deve ser maximizado.
 - Para aplicações FTIR Agilent 4100 ExoScan usando refletância, o valor deve estar entre 0,1 e 2 AU, as medições de ATR devem estar entre 0,05 e 1 AU.
- 6 Insira um nome de arquivo no campo Sample ID; esse será o nome de arquivo no qual os dados da amostra serão salvos. Digite mais informações sobre a amostra no campo Comment.
- 7 Clique no botão **Next** para iniciar a medição de amostra. O software adicionará em conjunto os exames da amostra, conforme especificado no método.
- 8 Durante a medição de amostra, a amostra precisará permanecer no foco da tecnologia de amostragem.
 - No FTIR Agilent 4500t, a cela de amostragem não deve ser ajustada durante a medição.

Medir amostras

- No FTIR Agilent 4100 ExoScan, o instrumento não deve ser movido da superfície da amostra durante a medição.

O software monitora o sinal de amostra durante a medição. Se o sinal cair para menos de um limiar predefinido, a coleta será interrompida. Assim que o foco da amostra é recuperado, o software iniciará imediatamente a coleta dos dados.

NOTA

A barra de progresso mostra o avanço da coleta dos dados. Quando a barra de progresso é completada, a solicitação mudará para Transferir dados. Quando isso ocorrer, a medição é concluída e a amostra pode ser removida do instrumento.

- 9 Quando a medição da amostra for concluída, o software exibirá os resultados do método na tela Results. O espectro da amostra e os resultados calculados do método serão salvos automaticamente. Os dados podem ser acessados a qualquer momento na tela Previous Results.

8

Visualizar resultados

MicroLab Mobile	67
MicroLab PC/MicroLab Lite	70
Criação de relatório no MicroLab	79

MicroLab Mobile

Tela Results

Para métodos de componente, a tela Results mostra os valores de componente calculados. Os valores de componente são solicitados em relação ao seus limites críticos; esses valores fora do intervalo crítico são listados primeiro e seguidos de valores fora do intervalo marginal. Os componentes dentro do intervalo aceitável são mostrados por último em verde.

- Os resultados em verde mostram que a amostra está dentro dos limites ajustáveis.
- Os resultados em amarelo mostram que a amostra está entre os limites marginais e críticos.
- Os resultados em vermelho mostram que a amostra está acima ou abaixo dos limites críticos.

Home: Esse ícone retorna à página inicial do software.

Next: Esse botão faz o software retornar à página Sample Collection para medição de amostras adicionais.

Manusear dados

O botão Menu permite selecionar Data Handling. Esse botão permite que usuário insira uma ID de amostra e comentários, caso não tenham sido inseridos anteriormente. O recurso de salvamento automático do sistema salvará o campo Comment e gerará um novo arquivo com base na ID da amostra, caso esta tenha sido inserida.

Visualizar resultados

NOTA

O recurso de salvamento automático sempre salvará o arquivo atual com uma ID de amostra e dados de data/hora. Isso impede que o usuário faça um salvamento sobre resultados de amostra anteriores.

Home: Faz o software retornar à tela inicial.

Next: Leva o software de volta para a tela de início de amostra para medir a próxima amostra.

Re-Analyze: Permite realizar os cálculos de um método diferente nos dados visualizados atualmente. Isso é útil quando não é possível coletar novamente os dados da amostra. Cada nova análise irá gerar um novo arquivo de dados.

NOTA

O recurso de reanálise deve ser usado somente com dados coletados na mesma resolução espectral que o método escolhido. Diferenças na resolução espectral podem afetar os resultados quantitativos.

Export: Permite exportar dados coletados para outros pacotes de software analítico. O arquivo exportado será salvo com o mesmo nome de arquivo da amostra, exceto se a extensão for *.csv, *.asp ou *.spc. Ele será salvo no diretório Results.

Peak Picking: Permite que o usuário defina bandas que serão marcadas no espectro sendo visualizado. Isso é feito clicando-se com o botão direito no espectro e escolhendo Peak Pick no menu. Para marcar bandas no espectro, desenhe um limiar clicando, arrastando e clicando novamente. Isso pode ser repetido várias vezes para definir diversas bandas no espectro. As bandas serão impressas em quaisquer relatórios gerados e serão mantidos no arquivo de dados. Após a conclusão, clique com o botão direito novamente e remova a seleção de Peak Pick do menu.

Os modelos de relatórios incorporam uma tabela de peak picking. Para os picos selecionados, os valores de pico aparecem na tabela na ordem em que foram selecionados.

Importar espectros para o GRAMS

Para importar dados para o formato SPC:

- 1 Abra o GRAMS/AI em seu computador e clique em **File > Import/Export**. Selecione o conversor de arquivo ASCII. Depois, clique no botão **Import**.
- 2 Navegue pelas unidades e diretórios para localizar o(s) arquivo(s) que deseja importar. Ao importar, lembre-se de que a maioria dos conversores de arquivo espera uma extensão de nome de arquivo de entrada particular. Por exemplo, o conversor de ASCII busca arquivos com a extensão de nome de arquivo *.ASP. (Se necessário, mude Arquivos do tipo para Todos os arquivos (*.*)).

Visualizar resultados

É possível selecionar vários arquivos pressionando a tecla CONTROL enquanto clica em cada nome de arquivo.

Clique em **Open**. A caixa de diálogo File Import exibirá o nome do arquivo que será importado. (Caso esteja importando mais de um arquivo, o nome do primeiro arquivo será exibido.)

- 3** Renomeie o arquivo, se desejado. Para gravar o arquivo recém-criado em um diretório diferente, coloque antes do nome do arquivo o caminho completo do diretório. Caso contrário, ele será salvo na mesma pasta em que está o arquivo ASP. (Você precisa ter acesso a leitura/gravação no diretório de saída.)
- 4** Selecione uma extensão de chave de teste na lista Output File Type. Deixe definido o padrão **Spectra (*.spc)**.
- 5** Selecione a opção Output Rename. Deixe como **Manual**.
- 6** Clique em **Auto-open** para abrir automaticamente o arquivo convertido no GRAMS/AI. (Auto-open não abrirá múltiplos arquivos. Essa abertura automática será aplicada ao último arquivo convertido.)
- 7** Na caixa de diálogo File Import, clique em **OK**.

À medida que o arquivo é convertido, o aplicativo GRAMS Convert lê o arquivo que será importado e grava um novo arquivo no disco. Assim que o processo de conversão é concluído, é possível carregar o arquivo no GRAMS/AI usando o comando File > Open Trace.

À medida que a conversão progride, podem ser exibidas mensagens ou erros. Se muitos arquivos forem convertidos, é possível voltar ao GRAMS/AI ou a qualquer outro programa do Windows, e a conversão continuará. Observe que o programa de conversão é um aplicativo separado denominado GRAMSC32.EXE, que pode ser iniciado independentemente do Windows e do GRAMS/AI. O comando File > Import/Export executa esse aplicativo com uma opção de linha de comando especial, que faz com que ele feche automaticamente após a conversão.

Report: Clicar no botão Data Handling permite salvar um relatório. Os relatórios são arquivos *.PDF, que detalham os resultados de componente para métodos de componente ou os resultados de pesquisa na biblioteca para métodos de Pesquisa Quantitativa. Os relatórios são salvos no diretório Resultados e podem ser sincronizados usando-se o MicroLab Lite.

Previous Results (resultados anteriores)

Previous Results do MicroLab Mobile permite visualizar dados assim que a coleta ocorre. Os resultados anteriores estão disponíveis no ícone Menu da tela inicial. Uma lista de amostras coletadas anteriormente é exibida na tela Previous Results. Para visualizar toda a lista, clique na lista e arraste para navegar.

Visualizar resultados

Home: Faz o software retornar à tela inicial.

View: Abre o arquivo de dados para visualização. Os dados serão apresentados de forma idêntica à da tela Results, mostrada na seção Reviewing Results, na página 67.

Report: No botão Menu, o botão Report gerará um relatório em PDF conforme especificado na seção de página Reports na página 31.

MicroLab PC/MicroLab Lite

O MicroLab PC/MicroLab Lite permite melhor análise de dados do que aquela disponível no MicroLab Mobile. Por causa do tamanho da tela, os espectros não são exibidos atualmente no software MicroLab Mobile. O MicroLab PC/MicroLab Lite permite visualizar os espectros e rever regiões espectrais que foram utilizados em cálculos de componentes. Assim que os dados são transferidos para o computador (consulte Transferir métodos editados para o MicroLab Mobile na página 42; a transferência de resultados é análoga à transferência de métodos), eles podem ser revisados por meio do recurso Previous Results do MicroLab PC ou MicroLab Lite. Na tela inicial do MicroLab PC, clique no botão **Previous Results** e uma tela aparecerá listando todos os nomes de arquivos de amostra.

Home: Faz o software retornar à tela inicial.

Import: Permite fazer adições à tela Results.

Report: Gera um relatório para a amostra se os modelos de relatório forem atribuídos na página Reports do método. Consulte a [página 79](#) para atribuir um modelo de relatório a um método.

View: Faz o software retornar à tela Sample Results. Os resultados de amostra podem ser visualizados a qualquer momento no software MicroLab.

Overlay: O botão Overlay aparece quando mais de um arquivo de espectro é selecionado. Ele permite que o usuário visualizar até cinco espectros de amostra em formato sobreposto ou empilhado para comparação. Os arquivos devem ter o mesmo tipo de abscissa para que sejam visualizados simultaneamente.

Export: Permite exportar dados coletados para outros pacotes de software analítico. O arquivo exportado será salvo com o mesmo nome de arquivo da amostra, exceto a extensão, que será *.asp ou *.spc. Ele será salvo no diretório Results.

Visualizar resultados

Diag Info: Exibe informações de diagnósticos do espectrômetro conectado ao software MicroLab.

NOTA

O software da seção de resultados anteriores opera da mesma forma que a seção de resultados opera. As telas são idênticas. Esses recursos permitem que os operadores visualizem os dados.

Tela Results

A tela Results que é exibida assim que a execução estiver concluída variará dependendo do tipo de método escolhido.

Tipo de método de componentes

Test2			
Name	Value	Low Threshold	High Threshold
Test	Outside Data Range	0	
Test2		0.15	0.32

Figure 1. Tela de resultados do método de componentes.

Os resultados de busca do método de componentes estão codificados por cores para maior clareza. Os resultados fora da faixa especificada estão destacados em vermelho e são movidos para o topo da lista.

- Os resultados em verde mostram que a amostra está dentro dos limites ajustáveis.
- Os resultados em amarelo mostram que a amostra está próxima dos limites aceitáveis.
- Os resultados em vermelho mostram que a amostra está fora dos limites aceitáveis.

A tabela Results exibe o nome, o valor, e os limiares baixo e alto da amostra.

Visualizar resultados

Tipo de método apenas de coleta de dados

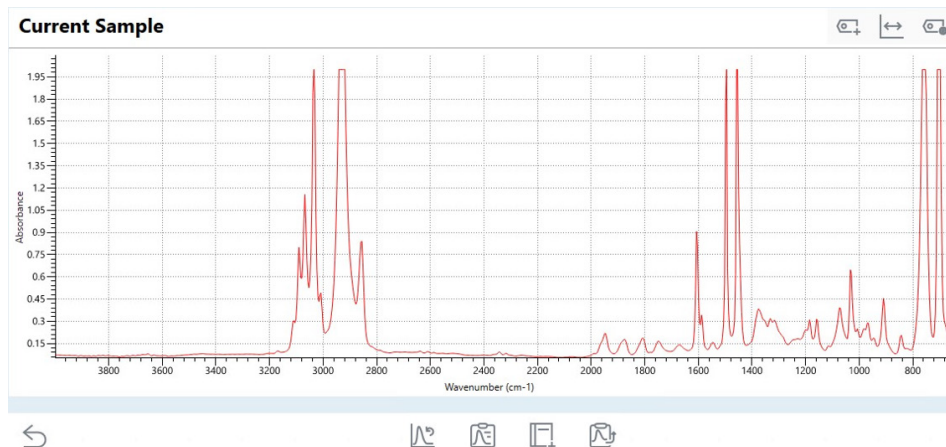


Figure 2. Tela de resultados do tipo de método apenas de coleta de dados.

A janela padrão do tipo de método apenas de coleta de dados mostra a interface de resultados do MicroLab (Figura 2). A barra de ferramentas acima da janela de resultados contém vários ícones que podem ser usados para manipular a exibição dos dados.

- Selecione o ícone  para voltar para a tela inicial.
- Selecione o ícone  para adicionar e excluir etiquetas de dados dos espectros de resultados.

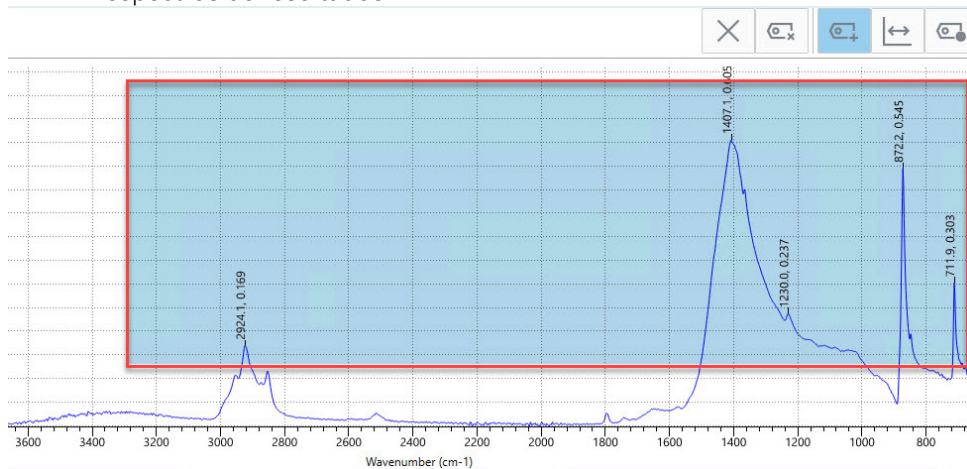


Figure 3. Funcionalidade de etiquetas de dados de peak picking.

Visualizar resultados

- **Peak Picking:** Por conveniência, as etiquetas de dados podem ser adicionadas simultaneamente

a picos múltiplos dos espectros selecionando o ícone **Data Labels**  e arrastando a seleção para incluir quaisquer picos relevantes. Isto também pode ser ativado através do atalho de teclado **Ctrl + F**.

- Selecione o ícone  para alterar a exibição dos espectros da exibição padrão para a exibição comprimida (Compressed View). Esta função pode ser útil quando precisar de maior clareza de uma determinada região dos espectros exibidos.

Na Exibição Comprimida:

- O valor **Position** define a posição de limite entre o número de onda comprimido e normal (eixo x).
- O valor **Factor** define o fator de compressão aplicado à região à esquerda da posição do número de onda (eixo x) escolhida.
- Selecione o ícone  para editar a visibilidade e o formato das etiquetas de dados aplicadas.

A barra de ferramentas abaixo da exibição de dados contém vários ícones que podem ser usados para processar os dados e navegar através do software.

- Selecione o ícone  para voltar a analisar os dados (disponível apenas para resultados anteriores).
- Selecione o ícone  para gerar um relatório.
- Selecione o ícone  para adicionar o resultado atual à biblioteca.
- Selecione o ícone  para assinar eletronicamente o relatório atual. (Apenas o modo em conformidade com 21 CFR parte 11).
- Selecione o ícone  para exportar o arquivo de resultados.
- Selecione o ícone  para iniciar o fluxo de trabalho para a próxima amostra (disponível apenas como parte de um fluxo de trabalho de medição).
- Selecione o ícone  para exibir o ID da amostra e quaisquer comentários anexados antes da coleta.

Visualizar resultados

Janela de gráficos da 'Exibição clássica' de Apenas de Coleta de Dados

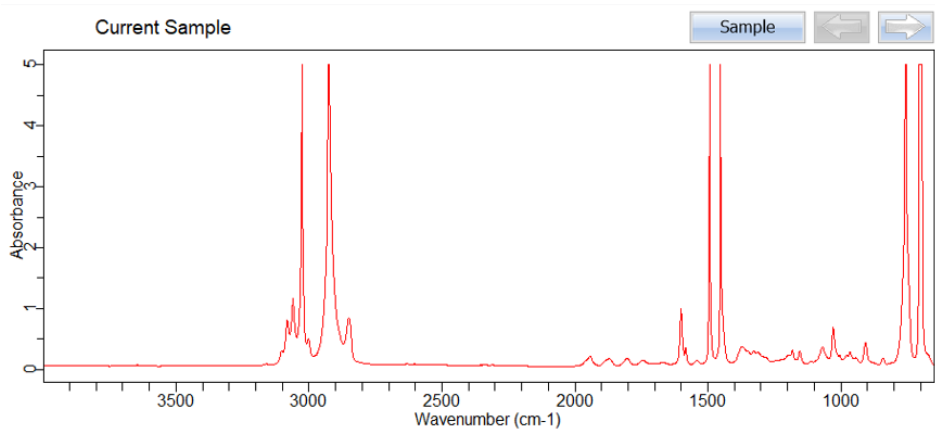


Figure 4. Tela de resultados do tipo de método de vista clássica apenas de coleta de dados.

A vista clássica da janela de gráficos de coleta de dados oferece um método alternativo de visualização de resultados quando o tipo de método "Apenas de Coleta de Dados" é selecionado. Para habilitar/desabilitar este recurso, selecione a caixa de seleção "Habilitar Vista Clássica" na janela de edição do método.

Tipo de método de busca qualitativa

Results:					
Warning	Rank	Quality	Library	CAS#	Name
	1	0.18933	TIC TAC (523)		Table Salt
	2	0.26196	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (280)		Natural-Rubber - Blair Run#5
	3	0.30146	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (139)		Gasket-SBR 10053333 Run#4 edge
	4	0.36079	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (278)		Natural-Rubber - Blair Run#3
	5	0.38287	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (279)		Natural-Rubber - Blair Run#4
	6	0.38513	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (138)		Gasket-SBR 10053333 Run#3 edge
	7	0.42246	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (258)		Natural-PureGum-Rubber - US Flex Run#2
	8	0.44293	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (347)		Neoprene U S Flexible Run#3
Rank 10					

Figure 5. Tela de resultados do método de busca qualitativa.

- Os resultados da busca qualitativa podem ser codificados por cores para maior clareza.
- Os resultados em verde indicam ocorrências da biblioteca que estão abaixo do limiar marginal de qualidade.
 - Os resultados em laranja indicam ocorrências da biblioteca que se situam entre os limiares marginal e crítico de qualidade.
 - Os resultados em vermelho indicam ocorrências da biblioteca que estão acima do limiar crítico de qualidade.

Visualizar resultados

Para obter mais informações sobre a configuração dos limiares de codificação por cores, consulte a seção Methods na [página 21](#).

Visualizar regiões espectrais

Um recurso exclusivo do software MicroLab que permite comparar amostras em regiões específicas. Basta clicar duas vezes nos parâmetros individuais. Os espectros de referência aparecerão juntamente com os espectros de amostra. Mova entre as categorias usando as setas para a esquerda e para a direita no canto superior direito. É possível decidir comparar espectros de amostra e referência em uma visualização sobreposta ou empilhada.

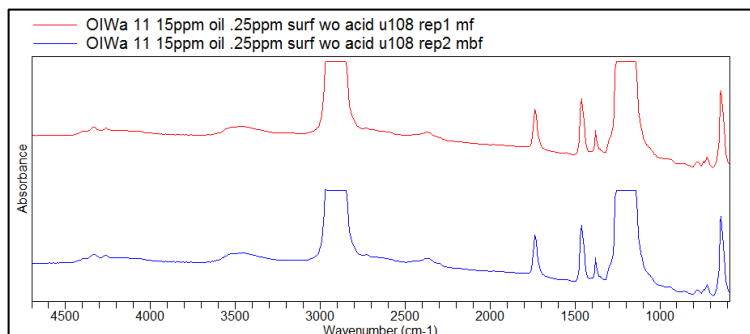
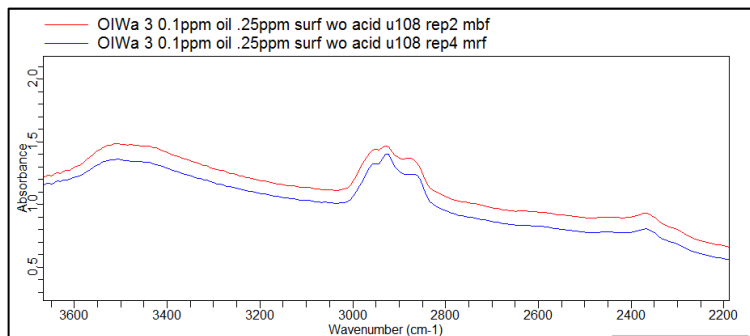


Figure 6. Exemplo de opção empilhada.



Visualizar resultados

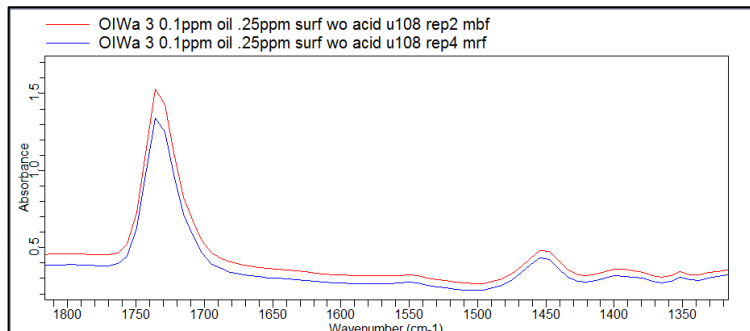


Figure 7. Exemplo de opção sobreposta

NOTA

Para alternar entre as categorias, clique com o botão direito e navegue pelas opções. A tela refletirá a visualização que você indicar.

Detalhes

Clique em **Details** para ver o espectro da amostra. O software MicroLab exibirá os espectros de amostra em relação aos espectros de referência.

Quando a busca qualitativa é selecionada, a tabela abaixo do espectro lista as ocorrências da biblioteca classificados por qualidade.

Além disso, são exibidas as seguintes guias:

- **TextFind:** Permite que uma entrada específica da biblioteca seja procurada através do nome ou do número CAS. Assim que é selecionado, os espectros de entradas da biblioteca escolhidos serão comparados com os espectros de amostra na guia Details. Esta entrada também aparecerá classificada no topo da lista de ocorrências de qualidade da biblioteca.
- **Residual:** Exibe a amostra analisada atualmente como um residual em comparação com uma ocorrência selecionada da biblioteca.

NOTA

É possível ampliar qualquer parte dos espectros. Usando o mouse ou o touch pad, clique no gráfico e destaque a parte desejada. A tela será automaticamente alterada para a parte ampliada.

Para retornar ao espectro completo, clique com o botão direito em um gráfico e selecione Undo Zoom.

Visualizar resultados

Parâmetros

Clique em **Params** para visualizar as seguintes abas:

- **Collect Parameters:** Exibe um resumo dos parâmetros do método.
- **Analysis Parameters:** Exibe um resumo da análise dos dados coletados.

Tratamento de dados

Clique em **Data Handling** para acessar os seguintes recursos.

Report: Gera um relatório para a amostra se os modelos de relatório forem atribuídos na página Reports do método. O relatório descreve em linhas gerais os parâmetros predefinidos e mostra os resultados em unidades relevantes em comparação com o óleo de referência ou o método da ASTM (Sociedade Americana de Testes e Materiais), o que for apropriado. Consulte a página 79 para atribuir um modelo de relatório a um método.

Add To a Library: Permite adicionar os espectros de amostra a uma biblioteca apropriada. Clique em "Browse" para acessar a biblioteca. Uma lista aparecerá mostrando as bibliotecas disponíveis.

Add To Library completará o processo. Adicionar novos espectros à biblioteca do usuário permite que o software determine se as amostras subsequentes são similares.

Export: Permite exportar dados coletados para outros pacotes de software analítico.

Re-Analyze: Permite realizar os cálculos de um método diferente nos dados visualizados atualmente. Isso é útil quando não é possível coletar novamente os dados da amostra.

NOTA

O recurso de reanálise deve ser usado somente com dados coletados na mesma resolução espectral que o método escolhido. Diferenças na resolução espectral podem afetar os resultados quantitativos.

E-Sign

Disponível somente em ambientes 21 CFR Parte 11. Clique em E-sign para aplicar uma assinatura eletrônica. Consulte a página 60 para obter mais informações.

Norma 21 CFR Parte 11

Exibe uma lista de ações realizadas durante a execução ou edição de um método ou de resultados. Consulte a página 61 para obter mais informações.

Importar espectros para o GRAMS

Para importar dados para o formato SPC:

- 1 Abra o GRAMS/AI em seu computador e clique em **File > Import/Export**.
Selecione o conversor de arquivo ASCII. Depois, clique no botão **Import**.
- 2 Navegue pelas unidades e diretórios para localizar o(s) arquivo(s) que deseja importar. Ao importar, lembre-se de que a maioria dos conversores de arquivo espera uma extensão de nome de arquivo de entrada particular. Por exemplo, o conversor de ASCII busca arquivos com a extensão *.ASP. (Se necessário, mude Arquivos do tipo para Todos os arquivos (*.*)).
- É possível selecionar vários arquivos pressionando a tecla CONTROL enquanto clica em cada nome de arquivo.
- Clique em **Open**. A caixa de diálogo File Import exibirá o nome do arquivo que será importado (caso esteja importando mais de um arquivo, o nome do primeiro arquivo será exibido).
- 3 Renomeie o arquivo, se desejado. Para gravar o arquivo recém-criado em um diretório diferente, coloque antes do nome do arquivo o caminho completo do diretório. Caso contrário, ele será salvo na mesma pasta em que está o arquivo ASP. (Você precisa ter acesso a leitura/gravação no diretório de saída.)
- 4 Selecione uma extensão de chave de teste na lista Output File Type. Deixe definido o padrão **Spectra (*.spc)**.
- 5 Selecione a opção Output Rename. Deixe em **Manual**.
- 6 Clique em **Auto-open** para abrir automaticamente o arquivo convertido no GRAMS/AI. (Auto-open não abrirá múltiplos arquivos. Essa abertura automática será aplicada ao último arquivo convertido.)
- 7 Na caixa de diálogo File Import, clique em **OK**.

À medida que o arquivo é convertido, o aplicativo GRAMS Convert lê o arquivo que será importado e grava um novo arquivo no disco. Assim que o processo de conversão é concluído, é possível carregar o arquivo no GRAMS/AI usando o comando File > Open Trace.

À medida que a conversão progride, podem ser exibidas mensagens ou erros. Se muitos arquivos forem convertidos, é possível voltar ao GRAMS/AI ou a qualquer outro programa do Windows, e a conversão continuará. Observe que o programa de conversão é, na verdade, um aplicativo separado denominado GRAMSC32.EXE, que pode ser iniciado independentemente do Windows e do GRAMS/AI. O comando File > Import/Export executa esse aplicativo com uma opção de linha de comando especial, que faz com que ele feche automaticamente após a conversão.

Visualizar resultados

Done: Retorna para uma tela que solicita limpeza da área de amostragem e do dispositivo de amostragem. Isso prepara o espectrômetro para a próxima amostra. "Done" permite executar múltiplas amostras sem a necessidade de retornar à tela inicial.

NOTA

Essa opção não permite alterar informações de unidade. Se estiver executando amostras de diferentes máquinas, é necessário retornar à tela inicial.

NOTA

Se desejar interromper a análise, clique no botão HOME.

Criação de relatório no MicroLab

Atribuir um modelo de relatório a um método

O MicroLab permite que o usuário escolha modelos de uma lista de modelos de relatórios e associe-os a métodos específicos. Cada um dos modelos de relatório são designados quando criados para determinado tipo de método ou função específica no software.

Para atribuir um modelo de relatório a um método:

- 1 Selecione **Methods** na tela **Home** e selecione o método no qual se deseja um modelo de relatório. Selecione **Edit**.
- 2 Na guia de métodos, selecione **Reports**.
- 3 Na lista **Available Report Templates**, selecione um ou mais modelos a serem associados ao método. Depois, clique no botão **Add**.
- 4 Se a geração automática de relatórios for desejada, marque a caixa de seleção intitulada **Auto-Report All Selected Reports**. Todos os relatórios associados serão gerados automaticamente no final da análise de dados.
- 5 Para remover um relatório não desejado, basta selecioná-lo e clicar no botão **Remove**.
- 6 Assim que todas as alterações forem feitas, clique no botão **Save** para salvar o método ou em **Save As** para salvar o método com um nome de método diferente.

Criar um novo modelo de relatório

Quando o MicroLab PC é instalado, um complemento para a plataforma Word do Microsoft Office também é instalado. O complemento permite que o usuário personalize ou crie modelos de relatório para serem usados na plataforma de software MicroLab.

NOTA

Esse recurso é suportado apenas em instalações de 32 bits do Microsoft Word 2010 ou superior.

O uso dessa função requer conhecimento do Microsoft Word, que pode não ser abordado neste manual.

Para criar um novo modelo de relatório:

- 1** Abra o Microsoft Word e crie um novo documento.
- 2** Assim que o documento for criado, navegue até o menu/guia View.
- 3** Um novo recurso terá sido adicionado ao menu View: MicroLab Reporting. Ele contém dois botões: Report Designer e Perform Merge.
- 4** Para iniciar a criação do documento. Selecione a função Report Designer. Os esquemas associados ao MicroLab aparecerão na forma de menu, à direita da tela.
- 5** Decida que tipo de relatório é necessário e selecione-o em Report Type. Os tipos de relatório são os seguintes:
 - a** Component Report: Exibido somente se o método tiver sido designado como método de componente no editor de método.
 - b** Qualitative Search: Esse relatório será exibido somente se o método tiver sido designado como método de pesquisa qualitativa no editor de método.
 - c** Data Collect Only: Esse modelo de relatório será exibido somente se o método tiver sido designado como método de coleta de dados no editor de método.
 - d** Method Report: Relatório de nível de sistema para imprimir parâmetros de método.
 - e** Log Report: Relatório de nível de sistema para imprimir o arquivo do log do sistema.
- 6** Dê um nome ao modelo de relatório no bloco MicroLab Reporting Parameters.

Visualizar resultados

- 7 Os campos de relatório consistem em campos de parâmetros associados ao software MicroLab. Os campos podem estar em diversas categorias para o usuário, de Resultados a Parâmetros do Método. O usuário levará algum tempo para se familiarizar com as diferentes categorias. É importante observar que cada tipo de método possui sua própria categoria de método e categoria de resultado. Por exemplo, um método de pesquisa qualitativa possui duas categorias que estão relacionadas a ele – Hit List (lista de resultados) e Method Library (biblioteca de método). Informações específicas para esse tipo de método e os arquivos resultantes podem ser encontrados aqui. É possível encontrar também informações gerais simples nas categorias Results ou Method.
- 8 Para adicionar campos no relatório, basta clicar e arrastar o campo desejado para a página do modelo de relatório.
 - a O campo adicionado imprimirá somente as informações solicitadas. Como isso é feito no Word, o usuário pode adicionar texto em qualquer ponto a fim de identificar campos ou material de identificação.
 - b Não é recomendável usar tabelas que não sejam aquelas predefinidas, pois é possível que ocorram erros no relatório.
- 9 As tabelas predefinidas dos relatórios de componentes e das listas de resultados de pesquisas foram configuradas para que o usuário apenas clique nelas e arraste-as para o modelo de relatório.
- 10 A qualquer momento, para visualizar como o relatório ficaria, selecione o botão Preview Rep localizado na parte inferior do menu MicroLab Reporting.
 - a Também é possível fazer isso através da função Perform Merge.
 - b É sempre melhor salvar o relatório e cruzar dados reais com o método, onde os relatórios são atribuídos, para determinar se o relatório está exibindo todos os valores necessários.
- 11 Assim que o relatório for editado adequadamente, o arquivo deverá ser salvo na pasta do modelo de relatório do MicroLab. Essa pasta, geralmente, fica em C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab \rptTemplates.
 - a Salve o arquivo no formato docx.
- 12 Existem diversos modelos de relatório que são fornecidos quando o software está instalado. Eles podem ser editados. Contudo, é altamente recomendado que o usuário salve os modelos de relatório editados com um nome de arquivo diferente usando a função "Save As" do Word, para que os modelos originais sejam deixados intactos.

[Visualizar resultados](#)

Esta página foi deixada em branco intencionalmente.

Atualização de firmware

Ocasionalmente, a Agilent lançará atualizações para o firmware (software contido no espectrômetro FTIR) para corrigir ou expandir os recursos que o sistema pode fornecer. As atualizações de firmware são fornecidas na forma de arquivos executáveis do Microsoft Windows. Esses arquivos podem ser fornecidos diretamente para o cliente ou podem ser disponibilizados como parte de uma atualização do aplicativo MicroLab PC Agilent.

Para o firmware FTIR 4300 Agilent portátil, as atualizações são fornecidas e instaladas como um executável separado dentro do software MicroLab Mobile. Consulte o manual de operação do instrumento apropriado fornecido com o sistema, ou entre em contato com a Agilent para obter mais informações.

Solução de problemas

Falha na inicialização

Se você receber esta mensagem de erro:

O instrumento falhou ao inicializar

O instrumento retornou um código de erro: -2.

O aplicativo será fechado; desligue e religue o instrumento e reinicie o aplicativo.

Ao abrir o software, verifique se o espectrômetro está ligado e conectado ao computador de controle via cabo USB ou Bluetooth (se aplicável). Verifique se o instrumento está ligado (LED verde exibido). Se controlar o FTIR 4300 via MicroLab PC, certifique-se de que o instrumento esteja no modo "Pass-Through". Se sincronizar o FTIR 4300, certifique-se de que o instrumento esteja conectado ao computador via USB, esteja em modo "Pass-Through" e o software MicroLab Lite esteja em uso.

Relatar falha na criação do modelo

Consulte a página 80 para obter mais informações sobre requisitos e etapas para criar ou personalizar um modelo de relatório.

Alterações no ganho não são salvas

Se o valor de ganho atualizado não for salvo e o indicador de status do instrumento passar de verde para amarelo ao ativar um método ou iniciar uma coleta de dados, verifique o seguinte:

- No software MicroLab PC/MicroLab Mobile, em **Methods** > Selecione o método > Clique **Edit** > Navegue até a página **Instrument**, certifique-se de que a caixa de seleção "Set Method Gain" não está marcada.
- Na página **Diagnostics** (no MicroLab OQ ou por meio de **Advanced Features** no MicroLab PC/MicroLab Mobile) > Clique em **Gain Adjust** > Ajuste o valor do ganho > Clique em **Set Instrument Default Gain** para salvar o ganho como padrão do instrumento.
Selecionar Set Method Gain apenas salva o ganho no método que está sendo usado.

Problemas de acesso ao banco de dados

Se você vir esta mensagem de erro ao tentar conectar-se ao servidor após uma instalação do SDA (no ambiente 21 CFR Parte 11):

Error: Server Connection Error

Nas instalações do cenário 1, reinicie o PC e abra o SDA novamente para conectar o servidor com êxito.

Nas instalações dos cenários 2 e 3, verifique se os computadores estão visíveis na rede, desative todos os firewalls e reinicie os computadores. Tente se conectar ao servidor SDA novamente.

Consulte as instruções de instalação do 21 CFR parte 11 para obter mais informações.

Verifique se o usuário está atribuído a um grupo e projeto que tem acesso ao banco de dados de verificação do sistema e ao banco de dados público se estiver executando o teste de verificação do sistema no MicroLab PC ou MicroLab OQ. Consulte o Guia do usuário do SCM para obter mais informações.

Appendix A: Tipo de arquivo do MicroLab

A tabela a seguir descreve os diferentes tipos de arquivos que o MicroLab usa e aceita.

Tabela 1 Tipo de arquivo do MicroLab

Tipo de arquivo	Extensão do arquivo	Comentários
Arquivos de biblioteca da Agilent	*.a2l *.a2x *.lib	Os três arquivos são gerados e armazenados juntos quando uma biblioteca é criada no MicroLab PC/Lite. Ao exportar uma biblioteca, os três arquivos devem estar juntos. • O arquivo *.a2l contém o conteúdo real da biblioteca; • O arquivo *.a2x é o detentor associado de resultados em branco; • O arquivo *.lib contém o título da biblioteca para identificação.
Arquivo de Método da Agilent	*.a2m	O arquivo de método é usado para armazenar um dos seguintes tipos de método: • Coleta de dados apenas ou • Pesquisa qualitativa (biblioteca) ou • Métodos do tipo componente.
Arquivo de resultados da Agilent	*.a2r	Esse é um formato de arquivo espectral e gera um dos três subtipos de arquivo de resultado possíveis, de acordo com o tipo de método selecionado: • Resultados espectrais • Resultados da biblioteca com espectros normalizados • Resultados do componente e espectros
Arquivo de configuração de segurança da Agilent	*.a2s	Este arquivo armazena as configurações de login do usuário e a senha. É um arquivo interno e não deve ser movido ou excluído.
Tipos de arquivo compatíveis com o MicroLab		
Arquivo espectral	*.asp	MicroLab PC/Lite pode visualizar e importar esse tipo de arquivo espectral e/ou exportar automaticamente esse tipo de arquivo.
Thermo Galactic/GRAMS	*.spc	MicroLab PC/Lite pode visualizar e importar esse tipo de arquivo espectral e/ou exportar automaticamente esse tipo de arquivo.
Modelo de texto GRAMS PLS1	*.txt	O formato de texto das instruções do modelo GRAMS é implantado em um método de componente. Este arquivo é gerado pelo software GRAMS IQ após a construção do modelo apropriado.
Modelos de Vetor de Eigen	*.xml	O MicroLab PC/Lite usa o formato de arquivo XML para gerar um resultado quantitativo dentro de um método de componente. Aplicável somente ao tipo de modelo multivariável PLS1.
Modelo MicroLab Quant	*.mqm	Gerado pelo MicroLab Quant e pode ser usado pelo MicroLab Quant/PC/Lite no método de componente para gerar um resultado numérico.
Projeto do MicroLab Quant	*.mqp	É usado para salvar o fluxo de trabalho do MicroLab Quant e é aplicável apenas ao MicroLab Quant.
Arquivo de modelo do MicroLab Agilent Expert Quant	*.a2q	Este arquivo é usado para o MicroLab PC e é gerado somente com o pacote de software MicroLab Expert v1.1. e posteriores

Apêndice

Esta página foi deixada em branco intencionalmente.

Neste manual

O manual descreve o seguinte:

- Introdução
- MicroLab Mobile
- MicroLab PC
- MicroLab Quant
- MicroLab OQ
- MicroLab com 21 CFR Parte 11
- Medir amostras
- Visualizar resultados
- Atualizações e solução de problemas

www.agilent.com

© Agilent Technologies, Inc. 2024

Edição 11, 10/2024



0020-410

